

特異応力問題における大規模並列有限要素法の収束性評価[†]

櫛田 慶幸*・奥田 洋司*・矢川 元基*

ABSTRACT In this study, a parallel Finite Element Method was applied to large-scale singular stress problems and its applicability was investigated in the following three aspects; 1. The influence of stress singularity on the parallel performance. 2. The relationship between the scale of analysis and its accuracy. 3. The influence of domain decomposition pattern that it has on the convergence behavior of linear equation solvers. A dissimilar material, which has a V-notch at the end of its interface, was analyzed as an example of stress singular problem. Obtained results are: 1. The speed-up ratio obtained is 93% or higher at the smallest model, which has the smallest granularity. 2. The accuracy of the result was compared with the Bogy's theoretical accuracy, and it has been observed that the accuracy increases as the analysis scale becomes large. 3. In the case of no preconditioning or the diagonal preconditioning, the number of iteration needed to attain the convergence was not influenced by the domain decomposition patterns, while using the SSOR preconditioning, the convergence became faster when the singular area was contained in one sub-domain, since the condition number was decreased.

1. はじめに

近年、分散メモリ型あるいはSMPクラスタ型並列計算機の台頭により、領域分割法を用いた大規模有限要素解析がさまざまな分野で使われるようになり、より複雑な、より現実的な問題の解析が可能となってきた。そこでは連立一次方程式の解法(ソルバー)として、一般に大規模解析に有利な反復法が用いられる。ところが、実際の構造物には、多くの場合、異種材料接合界面が存在し、その接合界面には特異応力が発生するため、反復法ソルバーの収束性を悪化させる可能性がある。反復法ソルバーの収束性の悪化を克服し、高速に解を得るために通常前処理が施されるが、並列計算においては後で述べるように前処理の効果は領域分割の影響を受ける。しかしながら、これまで領域分割の仕方が大規模な有限要素解析に対しどのように影響するかについては、筆者らの知る限り知見が得られていない。また、これまでに開発されてきた様々な領域分割アルゴリズムにおいても、そうした収束性を考

慮した領域分割はなされていない^{1,2)}。加えて、異種材料接合材に関する3次元有限要素解析は、極めて単純な形状に対してしか行なわれておらず、大規模解析は行われていないのが現状である³⁾。

そこで、本研究では異種材料接合端にVノッチを持つ問題の解析を行い以下の三点に関して検討し、大規模並列有限要素法が応力特異性を含む問題に対し強力な解析手段となることを確認することを目的とする。

- ① 特異性が並列性能に与える影響
- ② 解析規模と精度との関係
- ③ 特異性領域の領域分割様式とソルバーの収束性との関係

特に、③に関しては局所化前処理の効果を定量的に評価するために、前処理後の係数行列の条件数を求める手法を開発する。

なお、本研究で用いた並列有限要素法プログラムは、科学技術振興調整費「高精度の固体地球変動予測のための並列ソフトウェア開発に関する研究(平成10年度～平成14年度)」の成果として公開されているGeoFEM⁴⁾をベースに開発した。

2. 前処理

有限要素法をはじめとする数値解析法の多くは、未知変数に関する連立一次方程式を解くことに帰着される。連立一次方程式の求解のために用いられる手法(ソ

Evaluation of Convergence Behavior of Large-Scale Parallel Finite Element Method in Singular Stress Problem. By Noriyuki Kushida, Hiroshi Okuda and Genki Yagawa (Dept. of Quantum Engineering and Systems Science, School of Engineering, University of Tokyo).

* 東京大学大学院工学系研究科システム量子工学専攻

† 2002年7月10日受付

ルバー)には直接法と、反復法があるが、ここでは大規模解析を行なうために反復法を用いることを前提とする。反復法を用いた場合、より高速に解を求めるために前処理と呼ばれる操作をおこなう。すなわち、解くべき連立一次方程式を、

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (1)$$

としたとき、ある $\mathbf{A}$ に似かよった前処理行列 $\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2$ の逆行列を作用させ、

$$\mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{A} \mathbf{M}_2^{-1} (\mathbf{M}_2 \mathbf{x}) = \mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{b} \quad (2)$$

とする。ここで、

$$\mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{A} \mathbf{M}_2^{-1} = \tilde{\mathbf{A}} \quad (3)$$

$$\mathbf{M}_1^{-1} \mathbf{b} = \tilde{\mathbf{b}} \quad (4)$$

$$\mathbf{M}_2 \mathbf{x} = \tilde{\mathbf{x}} \quad (5)$$

とすれば、式(1)は

$$\tilde{\mathbf{A}} \tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}} \quad (6)$$

とできる。この新しい方程式(5)は条件数が低下したことにより、反復解法は式(1)よりも少ない反復回数で収束することが期待される。

ここでは反復法として、CG法(Conjugate Gradient Method; 共役勾配法)を用いている。CG法はKrylov部分空間を用いる解法の一つであり、系列の解法として、BiCGSTAB, GMRESなどがある。Krylov部分空間を用いる反復法は、連立一次方程式の係数行列である $\mathbf{A}$ の固有値が、ある値付近に集中しているほうが収束までの反復回数が少ない⁵⁾。よって、作用させる前処理行列は、作用後の係数行列である $\tilde{\mathbf{A}}$ の固有値が1付近に集中するようなものが採用される。

そのような、前処理行列を生成する方法として、対角スケーリング法、SSOR法、ILU(0)分解法、MGCG法などがある。しかし、CG法においては実際には前処理行列を生成し行列-行列積を実行することはなく、更新ベクトルとよばれる探索方向を決定するベクトルの修正を行なうことで実現される。実際の計算の過程を図1に示す。図中にある、 $\text{Solve } \mathbf{Mz}_i = \mathbf{r}_i$ は連立一次方程式 $\mathbf{Mz}_i = \mathbf{r}_i$ を $\mathbf{z}_i$ について解くことを意味する。探索方向を修正することは実際には連立一次方程式 $\mathbf{Mz}_i = \mathbf{r}_i$ を解くことに相当する。連立一次方程式 $\mathbf{Mz}_i = \mathbf{r}_i$ を解くことはそれ自体困難になりうるが、前処理行列 $\mathbf{M}$ として対角行列もしくは三角行列の積の形で表現されるものを選択することにより比較的容易に $\mathbf{z}_i$ を計算することができる。

ところで、領域分割法を用いた並列有限要素法に前

let $\mathbf{x}_0$ be the initial approximation

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}_0$$

do $i = 0, 1, 2, 3, \dots$

$$\text{solve } \mathbf{Mz}_i = \mathbf{r}_i$$

$$\rho_i = (\mathbf{r}_i, \mathbf{z}_i)$$

if $i = 0$

$$\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{z}_i$$

else

$$\beta_i = \rho_i / \rho_{i-1}$$

$$\mathbf{p}_{i+1} = \mathbf{z}_i + \beta_i \mathbf{p}_i$$

endif

$$\mathbf{q}_{i+1} = \mathbf{Ap}_{i+1}$$

$$\alpha_{i+1} = \rho_i / (\mathbf{p}_{i+1}, \mathbf{q}_{i+1})$$

$$\mathbf{x}_{i+1} = \mathbf{x}_i + \alpha_{i+1} \mathbf{p}_{i+1}$$

$$\mathbf{r}_{i+1} = \mathbf{r}_i - \alpha_{i+1} \mathbf{q}_{i+1}$$

if converge exit

enddo

図1 前処理付きCG法のフローチャート

処理を用いる場合、本来は前処理にも通信を必要とする。しかしながら、通信にかかる費用は非常に高く、前処理によって減じることの出来る分の費用を上回ってしまう。したがって、一般に領域分割による並列計算における前処理では通信のないように、他の部分領域の寄与を無視する。今回用いた対角スケーリング法、SSOR法の二種類の特徴について、領域分割により受ける影響をふくめ、次節以降で個別に説明する。

2.1 対角スケーリング前処理

前処理行列として、

$$\mathbf{M} = \text{diag } \mathbf{A} \quad (7)$$

とするものである。係数行列の対角成分と、探索ベクトルの積は他領域の情報を必要とせず行なえるため、前処理の効果は領域分割の仕方によらない。

2.2 SSOR前処理

連立一次方程式の係数行列が対称行列であり、

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{L} + \mathbf{L}^T \quad (8)$$

と、分解されるならば、SSOR前処理行列は以下のよう定義される。

$$\mathbf{M}(\omega) = \frac{1}{2-\omega} \left(\frac{1}{\omega} \mathbf{D} + \mathbf{L} \right) \left(\frac{1}{\omega} \mathbf{D} \right)^{-1} \left(\frac{1}{\omega} \mathbf{D} + \mathbf{L} \right)^T \quad (9)$$

ここで、 ω はある実数であり、 $\mathbf{D}$, $\mathbf{L}$ は各々 $\mathbf{A}$ の対角成分、下三角成分である。

ω の値によりソルバーの収束に要する反復回数は変化するが、最適な ω を決定することは一般に困難であ

り, 通常 $\omega = 1.0$ とする. SSOR 前処理行列は容易に三角行列の積の形で表現することが出来る. すなわち, $\omega = 1.0$ のとき, $\mathbf{A}$ の対角成分が正である場合に,

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_1 &= (\mathbf{D} + \mathbf{L}) (\mathbf{D})^{-\frac{1}{2}} \\ \mathbf{M}_2 &= (\mathbf{D})^{-\frac{1}{2}} (\mathbf{D} + \mathbf{L}^T) \end{aligned} \quad (10)$$

とすれば, $\mathbf{M} = \mathbf{M}_1 \mathbf{M}_2$ とできる.

ここで, $\mathbf{M} \mathbf{z}_i = \mathbf{r}_i$ を解くことを考える. 前処理行列 $\mathbf{M}$ はすでに三角分解されているので前進/後退代入を行なうことで $\mathbf{z}_i$ は求められる. しかし, 前進/後退代入の操作は本質的に逐次的な操作であり, 並列計算を行なう場合でも同時に演算を行なうことの出来るプロセッサは同時刻に一台となってしまう. このため, 通常は逐次計算を行い $\mathbf{M} \mathbf{z}_i = \mathbf{r}_i$ を完全に解くかわりに, 並列計算を行い $\mathbf{z}_i$ の近似値を得ることで前処理とする. この様子を模式的に表したものを図2に示す. このようにして, SSOR 前処理は領域分割によりその効果を低減される.

3. 条件数の評価

ある連立一次方程式の解き易さは, すなわち, 反復法ソルバーが収束に至るまでに必要とした反復回数である. しかし, 反復法ソルバーが収束に至るまでに必要な反復の回数は初期近似解に依存するため, より定量的な指標として係数行列の条件数を用いることが多い. 前章にて紹介した前処理も係数行列の条件数を低

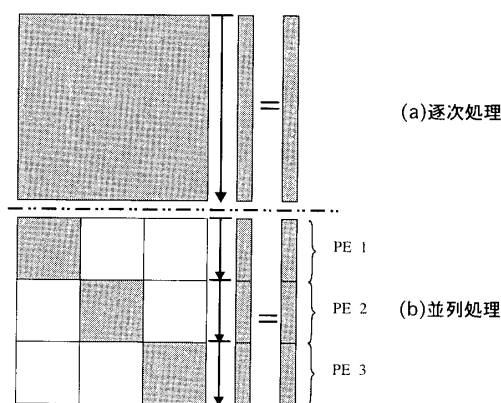


図2 逐次計算を行った場合と並列計算を行った場合のSSOR法の違い

図中で, 正方形の記号は係数行列を示す. また, 長方形はベクトルを示し, 向かって左側は解ベクトル, 右側は外力ベクトルを示す. 色のついた部分はプロセッサ内に情報を持ち演算を通信無しに完了できる部位を示す. (a)は逐次処理されるSSOR法の演算の流れを示す. 本来SSOR法は逐次処理される. それに対し(b)はSSOR法を並列処理した場合の演算の流れである. 同時刻に各PEが演算を行なうため本来得られる演算結果とは異なる.

下させることが期待される. ところで, 前処理を施した係数行列の条件数を求めるためには行列-行列積が必要になり, 大規模計算を行った場合困難になる. CG法がLanczos法と密接な関係にあることを利用し固有値を求める方法があることが知られているが⁶⁾, この方法は数値誤差による影響を受けやすく本研究で対象とする大規模な行列に対しては適さない. そのため本研究では, Hagerの方法⁶⁾に改良を加え条件数を求める方法を開発した.

3.1 Hagerの方法⁶⁾

行列 $\mathbf{A}$ の条件数 $\text{cond}(\mathbf{A})$ は一般的に次のように書かれる.

$$\text{cond}(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\| \|\mathbf{A}^{-1}\| \quad (11)$$

ここで, $\|\cdot\|$ は行列のノルムである. ノルムは定義の仕方によりいくつかの種類が存在するため, 条件数も1つの行列に対して複数存在し得る. 1乗ノルムと2乗ノルムと呼ばれるノルムの定義は各々次のようになる.

$$\|\mathbf{A}\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^n |a_{ij}| \quad (12)$$

$$\|\mathbf{A}\|_2 = (\mathbf{A}^T \mathbf{A} \text{ の最大固有値の平方根}) \quad (13)$$

行列 $\mathbf{A}$ が正定値対称であり, 式(12)により定義される2乗ノルムを用いて条件数を定義すれば, 条件数 $\text{cond}(\mathbf{A})$ は次のように書くことができる.

$$\text{cond}(\mathbf{A}) = \frac{\mathbf{A} \text{ の最大固有値}}{\mathbf{A} \text{ の最小固有値}} \quad (14)$$

前述のLanczos法を利用する方法は, 式(13)による定義を用いて条件数を与える. これに対し, Hagerの方法による条件数は1乗ノルムによるものである. 図3にHagerの方法のアルゴリズムを示す. Hagerの方法は

```

Let  $\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1/n \\ \vdots \\ 1/n \end{pmatrix}$   $n, \rho = 0$ 
do
  solve  $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ 
  if  $\|\mathbf{x}\|_1 \leq \rho$  exit
  else  $\rho = \|\mathbf{x}\|_1$ 
   $\mathbf{y}_i = \text{sgn}(\mathbf{x}_i) \ (i = 1, 2, \dots, n)$ 
  solve  $\mathbf{A}^T \mathbf{z} = \mathbf{y}$ 
   $i_{\max} = i \text{ which satisfies } \max_i |z_i|$ 
  if  $|z_{i_{\max}}| < \mathbf{z}^T \mathbf{b}$  exit
  else  $\mathbf{b}_i = \begin{cases} 1 & (i = i_{\max}) \\ 0 & (i \neq i_{\max}) \end{cases}$ 
enddo
 $\text{cond}(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|_1 \|\mathbf{A}^{-1}\|_1 = \|\mathbf{A}\|_1 \rho$ 

```

図3 Hagerの方法のアルゴリズム

実際には条件数を与えるのではなく、 $\|A^{-1}\|$ を与えるにすぎない。しかし、行列 A が陽に与えられる場合 $\|A\|$ を求めることが容易であることは明らかである。

3.2 前処理を施した行列の条件数評価

前節で述べた通り、Hagerの方法を用いることにより $\|A^{-1}\|$ を算出することが出来る。そこで、まず単一プロセッサ上で前処理行列を作用させた係数行列の条件数を求めることを考える。Hagerの方法のアルゴリズムの中において A を $M_1^{-1}AM_2^{-1}$ に単純に置き換えることにより $\|(M_1^{-1}AM_2^{-1})^{-1}\|$ を求めることが出来る。アルゴリズム中で連立一次方程式を解かなければならない箇所が存在するが、それにはCG法を用いる。ここで、図1に示されているCG法のアルゴリズムを見直せば、結局行列 A とベクトル p の積である Ap を $(M_1^{-1}AM_2^{-1})p$ と置き換えるだけでよいことがわかる。 M_1^{-1} , M_2^{-1} が三角行列で与えられることを考慮すれば、前進代入、行列-ベクトル積、後退代入の順に行なうことで実現できる。ただし、 $\text{solve } A^T z = y$ に関しては対称性を考慮し、 $\text{solve } Az = y$ として計算している。ところで、 $\|M_1^{-1}AM_2^{-1}\|$ は $M_1^{-1}AM_2^{-1}$ の成分が陽に与えられないため、容易に計算できない。そのため、Hagerのアルゴリズム中にある $\text{solve } Ax = b$ を $M_1^{-1}AM_2^{-1}x = b$, $\text{solve } A^T z = y$ を $M_2^{-T}A^TM_1^{-T}y = z$ と置き換えることにより $\|M_1^{-1}AM_2^{-1}\|$ を算出した。

3.3 領域分割により局所化された前処理行列を用いた場合の行列の条件数評価

3.2節で得られたアルゴリズムを用いることにより、領域分割法を用いて並列化された場合についても条件数を求めることが出来る。しかし、Hagerの方法の中で $(M_1^{-1}AM_2^{-1})p$ 連立一次方程式を解く際、CG法のアルゴリズムの中で計算する際、CG法の反復の中で、もとのアルゴリズムに加え、通信が一回増えるため計算時間が増える。また、前進代入、行列-ベクトル積、後退代入を行なうことによる数値誤差が多く混入してしまい、CG法の収束性が悪くなってしまう。それらを回避するために、以下のような変形を行った。たとえば、 $\text{solve } M_1^{-1}AM_2^{-1}x = b$ に関しては、

$$M_1^{-1}AM_2^{-1}x = b \quad (15)$$

を、

$$M_1(M_1^{-1}AM_2^{-1})M_2(M_2^{-1}x) = M_1b \quad (16)$$

のようにする。ここで、

$$M_2^{-1}x = y, Mb = \tilde{b} \quad (17)$$

とすれば、

$$Ay = \tilde{b} \quad (18)$$

となる。式(17)をCG法を用いて解いたのち、式(16)から x を求めることが可能である。同様な変形を、 $\text{solve } (M_1^{-1}AM_2^{-1})^T z = y$ に対しても行う。

4. 接合部における応力特異性

異なる材料を接合した界面の端部には、弾性力学を仮定すると応力が無限大となる応力特異性が発生する。D. B. Bogyは、半無限平板同士の異種材料接合界面に任意角度の切り欠きを持つ二次元モデルを仮定し、界面端近傍の応力 σ_{ij} は、接合端部を原点とした極座標表示をもちいて、

$$\sigma_{ij} \propto \frac{1}{r^\lambda} \quad (19)$$

となることを示した⁷⁾。ここで、 λ は応力特異性のオーダーであり、同じくBogyによって示された特性方程式を解くことにより求められる。この特性方程式はパラメータとして、ノッチの開き角、各材料のヤング率およびポアソン比を含んだ、 λ に関する非線形方程式であり、ニュートンラプソン法等を用いて容易に解を求めることができる。

5. 有限要素解析

5.1 解析の諸条件

対象とする接合材の形状および境界条件を図4に、また、材料定数を表1に示す。

図4に示されるように、原点に近い側の面は各面の垂直方向変位を拘束し、 x 軸に垂直な面の、原点から遠い側に一様変位を与えた。与えた変位は 10^{-3} mm である。またVノッチの開き角は 20° である。材料定数は、ヤング率を図4の向かって右側(Material 1)で $220,000 \text{ kgf/mm}^2$ 、向かって左側(Material 2)で $22,000 \text{ kgf/mm}^2$ とし、ポアソン比は両者とも 0.3 と同一とした。要素分割は異なる自由度のものを3種類用意した。用いた要素は6面体8節点1次要素である。自

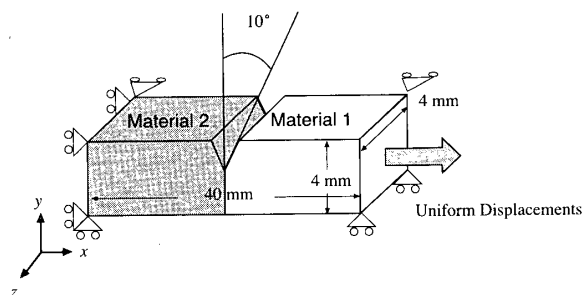


図4 解析モデルおよび、境界条件

表1 材料定数

	Young's Modulus (kgf/mm ²)	Poisson's Ratio
Material 1	220,000	0.3
Material 2	22,000	0.3

表2 各解析モデルの自由度数と領域分割数

		small	middle	large
モデル規模	自由度	96,000	1,022,787	4,264,701
	節点	34,255	340,929	1,421,567
	要素	30,000	320,000	1,642,000
分割領域数	Type I	3・5	3・5	7
	Type II	4	4	8

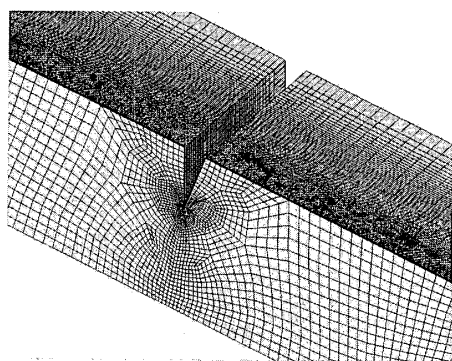


図5 要素数320,000 自由度数1,022,787である middle モデル要素分割の様子

自由度と分割した領域数をまとめたものを、表2に示す。また、要素数320,000、節点数340,929である middle モデル要素分割の様子を図5に示す。

図6は領域数毎に分割パターンを示したものである。示した領域分割の仕方では、分割数が奇数のものについては必ず特異性を持つ領域を一つの領域に収めるように、また偶数のものについては特異性を持つ領域を横切るように領域分割が行われていることがわかる。以下においては、奇数領域に分割した場合を Type I、偶数領域に分割した場合で全ての領域が特異領域を含む場合を Type II と呼ぶこととする。

連立一次方程式のソルバーにはCG法を採用し、各々のモデルについて、前処理なし、対角スケーリング、SSOR前処理をそれぞれ施したものをを用いて解析を行った。CG法の収束判定には剛性方程式の残差の自乗ノルム $\varepsilon = 10^{-7}$ を収束条件とした。

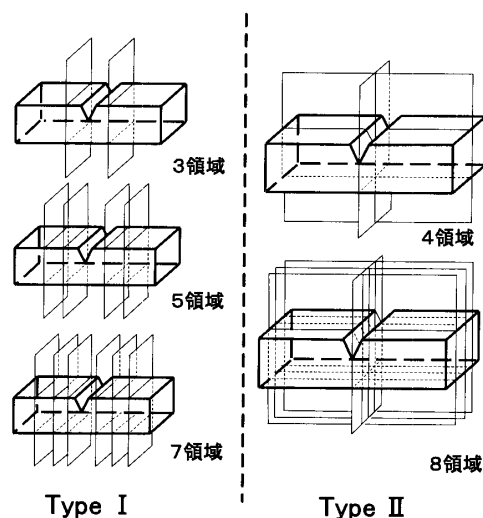


図6 領域分割パターン

Type I：特異領域を1領域に収めるように領域分割した場合
Type II：特異領域を複数領域に分割した場合

6. 解析結果

6.1 精度の検証

図7, 8に、各自由度における界面に垂直な方向の応力 σ_x をノッチ先端部からの距離に対してプロットしたものを示す。

図7ではヤング率 $E = 220,000 \text{ kgf/mm}^2$ である Material 1 側の接合面の応力を、図8ではヤング率 $E = 22,000 \text{ kgf/mm}^2$ である Material 2 側の接合面の応力を各々プロットした。ここで、 σ_x は界面にもっとも近い積分点での値を採用した。図7, 8とも対角スケーリング前処理を用いた解析結果である。small, middle モデルについては3領域に領域分割したものを、large モデルについては7領域に領域分割したものをプロットした。なお、これら前処理もしくは領域分割数を変化させた場合も、解析結果は一致していることを確認している。Bogyの特性方程式より導かれた応力特異性オーダー λ (Bogyの解)の傾きを持つ直線を同じく図7, 8に合わせて示している。本研究で行った解析条件から導かれるBogyの解は $\lambda = 0.47$ である。どの自由度、前処理の方法においてもBogyによる理論解のプロファイルと非常によく一致を示すことがわかる。ノッチ先端部に近いところで理論解からのずれが生じる理由は、Bogyによる理論解は二次元弾性論を仮定して求められるが、本解析は三次元解析であるためと考えられる。過去の計算例でも、同様に先端部での結果は直線に乗らない⁸⁾。また、ノッチ先端から距離が遠いところでBogyの理論解からのずれが生じるのは、理論解に含まれない高次項の

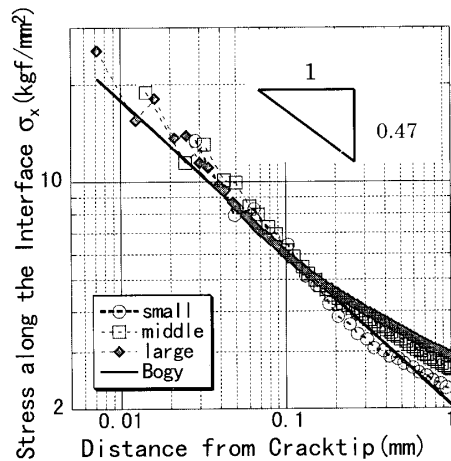


図7 界面に沿う方向への応力と界面端からの距離 (Material 1 側)

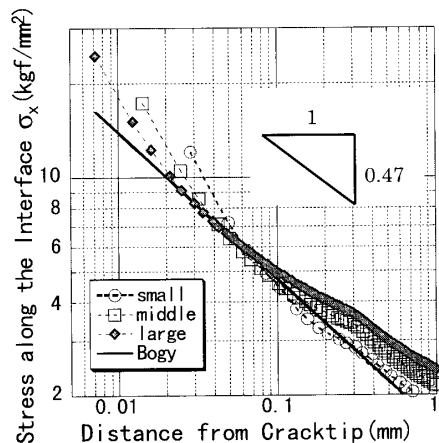


図8 界面に沿う方向への応力と界面端からの距離 (Material 2 側)

影響であると考えられる。

6.2 並列性能評価

分散メモリ型並列計算機を用いた時に計算速度を決定する重要な要素としてプロセッサ間通信のコストがあげられる。ここでは、以下に示すスピードアップ率を用い、GeoFEMの並列性能を評価した⁹⁾。

$$S_n = \frac{T_1}{T_n} \quad (20)$$

ここで、 T_1 , T_n , n はそれぞれ 1PE での経過時間, n PE での経過時間, PE 数である。用いたモデルは small モデル, 前処理は対角スケーリングである。詳細は次節で述べるが, 対角スケーリング前処理の効果は領域分割様式に影響を受けない。よって, 当然のことながら収束までに要する時間も PE 数に違いが無ければ同じである。通常, 有限要素解析では解析規模が大きくなる

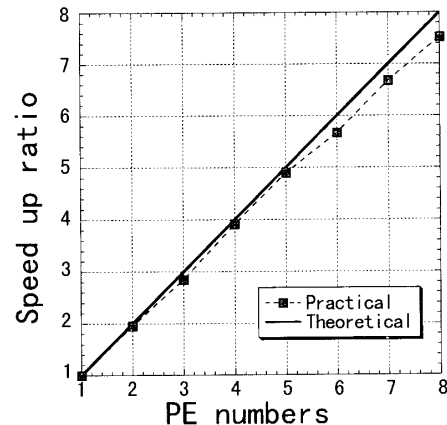


図9 small モデルのプロセッサ数とスピードアップ率の関係

に従って連立一次方程式の求解にかかる時間が支配的となる。よって, 今回はソルバーが必要とした時間をもって並列性能とした。図9に測定したスピードアップ率を示す。

図中に示した直線は通信による性能低下の無い理想的な状態を示したものである。今回の測定で 1PE あたりの計算速度が理想の場合と比較し最も下回った 8PE の場合であったが, それでも, 93% であり, 良好な並列性能を示しているといえる。一般に解析規模が大きくなるにつれ相対的に通信コストは下がりスピードアップ率は向上するため, middle, large モデルにおいてはさらに良好な性能を発揮することが期待される。

6.3 領域分割の影響

small モデル, middle モデル, large モデルの各々の場合について, 前処理を施さなかった場合, 対角スケーリングもしくは SSOR 前処理を施した場合に CG 法の収束までに必要とした反復回数をまとめたものを, 表 3～5 に示す。また, このときに必要とした計算時間を表 6～8 に示す。

表 3～5 をみると, いずれの解析規模においても, 前述のとおり, 前処理無し, および対角スケーリング前処理を用いた場合は領域分割の仕方に依らず収束までに要する反復回数に変化しないことがわかる。

次に, SSOR 前処理について述べる。表 3～5 に示されるように, SSOR 前処理の効果は領域分割様式による影響を受ける。各モデルについて見てみると, small モデルの時, Type I である分割数 3 の収束に必要であった反復回数が 207 回であるのに対し, Type II である分割数 4 の場合は 246 回。同様に, middle モデルの場合, 分割数 3 の場合 492 回であるのに対し, 分割数 4 が 545

表3 small モデルの反復回数：前処理と領域分割による反復数の変化

Partition Number	3 (Type I)	4 (Type II)	5 (Type I)
Diag	667	666	666
SSOR	207	246	221
No Preconditioning	4,186	4,190	4,185

表4 middle モデルの反復回数：前処理と領域分割による反復数の変化

Partition Number	3 (Type I)	4 (Type II)	5 (Type I)
Diag	1,643	1,647	1,642
SSOR	492	545	504
No Preconditioning	9,988	9,986	9,982

表5 large モデルの反復回数：前処理と領域分割による反復数の変化

Partition Number	7 (Type I)	8 (Type II)
Diag	2,293	2,285
SSOR	901	1,008
No Preconditioning	14,205	14,207

回。large モデルの場合、分割数7のとき、901回に対して、分割数8のとき1008回と、いずれの場合もType IIはType Iよりも収束までに多くの反復回数が必要である。表6～8に示したように、モデルサイズ、前処理が同じであれば、全ての場合において、使用するプロセッサが増えるにつれて計算時間は短くなる。これは、領域分割様式により収束性の悪化するSSOR前処理についても同様であり、smallモデルのとき、Type Iである3領域のとき44.0秒に対し、Type II 4領域のとき35.0秒、middleモデルのとき、3領域の時561.0秒に対し、4領域のとき428.0秒、largeモデルのとき、Type Iである7領域のとき1471.0秒に対し、8領域のとき1467.0秒となっている。

このような収束性の変化をより定量的に評価するために、3つのモデル全てにおいて、各前処理、各領域分割様式について前処理行列を作用させた後の係数行列の条件数を前述の方法を用いて算出した。モデル毎にまとめたものを表9～11に示す。

表9～11をみると、いずれの解析規模においても反復回数と同様に、前処理無し、および対角スケール前処理を用いた場合は領域分割の仕方に依らず条件数が変化しないことがわかる。SSOR前処理の効果は

表6 small モデルの計算時間(秒)：前処理と領域分割による計算時間の変化

Partition Number	3 (Type I)	4 (Type II)	5 (Type I)
Diag	35.0	25.0	24.0
SSOR	44.0	35.0	30.0
No Preconditioning	191.0	139.0	123.0

表7 middle モデルの計算時間(秒)：前処理と領域分割による計算時間の変化

Partition Number	3 (Type I)	4 (Type II)	5 (Type I)
Diag	863.0	578.0	530.0
SSOR	561.0	428.0	360.0
No Preconditioning	5113.0	3490.0	3125.0

表8 large モデルの計算時間(秒)：前処理と領域分割による計算時間の変化

Partition Number	7 (Type I)	8 (Type II)
Diag	2348.0	1996.0
SSOR	1471.0	1467.0
No Preconditioning	14316.0	12179.0

領域分割様式による影響を受け、条件数に変化がある。モデル毎について見てみると、smallモデルの時、Type Iである分割数3のとき条件数が 7.49×10^4 であるのに対し、Type IIである分割数4の場合は 9.03×10^4 。同様に、middleモデルの場合、分割数3の場合 4.24×10^5 であるのに対し、分割数4が 5.38×10^5 。largeモデルの場合、分割数7のとき、 1.12×10^6 に対して、分割数8のとき 1.25×10^6 と、いずれの場合もType IIはType Iよりも条件数が大きくなっており、確かに前処理の効果が低くなっていることが分かる。

7. 結 論

特異応力問題に対し、大規模並列有限要素法が強力な解析手段であることを確認するために以下の3点について検討を行った。

- ① 特異性が並列性能に与える影響
- ② 解析規模と精度との関係
- ③ 特異性領域の領域分割様式とソルバーの収束性との関係

各々について、個別にまとめる。

- ① 最も自由度の少なく、最も並列性能が低くなるモデルについても、93%以上のスピードアップ率を

表9 smallモデルの条件数：前処理と領域分割による条件数の変化

Partition Number	3 (Type I)	4 (Type II)	5 (Type I)
Diag	1.02×10^5	1.02×10^5	1.02×10^5
SSOR	7.49×10^4	9.03×10^4	8.10×10^4
No Preconditioning	4.21×10^6	4.21×10^6	4.21×10^6

表10 middleモデルの条件数：前処理と領域分割による条件数の変化

Partition Number	3 (Type I)	4 (Type II)	5 (Type I)
Diag	7.67×10^5	7.67×10^5	7.67×10^5
SSOR	4.24×10^5	5.38×10^5	4.14×10^5
No Preconditioning	6.65×10^6	6.65×10^6	6.65×10^6

表11 largeモデルの条件数：前処理と領域分割による条件数の変化

Partition Number	7 (Type I)	8 (Type II)
Diag	3.23×10^6	3.23×10^6
SSOR	1.12×10^6	1.25×10^6
No Preconditioning	4.42×10^7	4.42×10^7

示し、特異応力問題においても本研究で使用した並列有限要素法プログラムは十分な並列性能をもつといえる。

- ② どの自由度においても、応力の特異性が強くでる界面近傍と、接合端から離れ特異応力の影響が支配的でなくなる点を除き、*Bogy*による理論解のプロファイルと良い一致を示した。自由度を大きくとることにより解の精度を向上させることができたことを確認した。
- ③ 前処理を行わない場合と対角スケーリング前処理を行った場合は、予測された通り、領域分割の仕方が収束性にはなんら影響を及ぼさず、SSOR前処理は応力特異領域を一つの部分領域にまとめることにより、収束性を向上させることができた。ま

た、局所化された前処理行列を用いて前処理を行った後の係数行列の条件数の評価法を開発し、その手法を用いて算出した条件数を比較することによって収束性が向上したことを定量的に評価した。大規模並列解析においては適切な前処理とそれに合わせた領域分割を行なう必要がある。

以上により、大規模並列有限要素法が特異応力問題に対しても収束性を維持する手段を獲得できた。また、それを活用することにより、非常に強力な解析手段であることが確認できた。

謝 辞

本研究の遂行にあたっては、(財)高度情報科学技術研究機構GeoFEMプロジェクトチームのメンバー各位より有益なアドバイスを頂いた。ここに深甚なる謝意を表します。

参 考 文 献

- 1) C. Walshaw, M. Cross and G. Everett: Parallel Dynamic Graph Partitioning for Adaptive Unstructured Meshes, *Journal of Parallel and Distributed Computing*, **47**, 102/108 (1997)
- 2) G. Karypis and V. Kumar: Multilevel Algorithms for Multi Constraint Graph Partitioning, Minneapolis MN 55455 Technical Report #98-019 (1998)
- 3) 古口日出男, 村本隆, 井原郁夫: 角部を有する三次元接合体の応力特異性, *日本機械学会論文集 A 編*, **64**-618, 480/488 (1998)
- 4) 奥田洋司: GeoFEM: 並列有限要素法固体地球シミュレータ-Tiger から Snake-, シミュレーション, **20**-3, 210/218 (2001)
- 5) R. Barrett, M. Berry, T. F. Chan, J. Demmel, J. Donato, J. Dongarra, V. Eijkhout, R. Pozo, C. Romine, and van der H. Horst: 'Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods, SIAM' (1994)
- 6) W. W. Hager: Condition Estimates, *SIAM J. Stat. Comp.* **5**, 311/316 (1984)
- 7) D. B. Bogy: Two Edge Bonded Elastic Wedges of Different Materials and Wedge Angles under Surface, *Transactions J. Appl. Mech.*, **38**, 377/386 (1971)
- 8) 奥田洋司: 界面の力学-接着・接合構造の力学的評価-, リアライズ社, 最新技術講座 資料集 (1992)
- 9) 柄谷和輝, 中村 壽, 奥田洋司, 矢川元基: 並列有限要素法コード GeoFEM の性能評価, *日本計算工学会論文集*, **2**, Paper No.20000022, 171/177 (2000)