

界面捕捉法に基づく 並列データ駆動型マルチスケール解析システム

Parallel Data-Driven Multiscale Analysis System
based on Interface-Capturing Technique

今口稜介¹⁾ 細川恭太¹⁾ 森田直樹²⁾ 三目直登²⁾

Ryosuke Imaguchi, Kyota Hosokawa, Naoki Morita, Naoto Mitsume

¹⁾筑波大学大学院システム情報工学研究群 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1)

²⁾筑波大学システム情報系 (〒 305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1)

This study develops large-scale parallel structural analysis system to create a surrogate model faster in the data-driven approach of FE^2 -type multiscale analysis, which is a typical numerical analysis method for composite materials. In the data-driven approach of FE^2 -type multiscale analysis, the computation cost for multiscale analysis is reduced by replacing micro scale analysis with surrogate models. However, the computation cost for creating surrogate models is high, and composite materials with different microstructures difficult to be treat. The proposed method creates surrogate models that can be used for microstructures with various material configurations by introducing the level set method and capturing the material boundary surface as a spatial distribution. The proposed method implements a parallel analysis framework for the distributed-memory parallel environment, and the parallelization efficiency of the system was quantitatively measured. The results confirmed that the proposed system reduce the computation cost for creating surrogate models.

Key Words : *Surrogate modelling, Level set function, distributed memory parallel computing, Material arrangement, interface capturing*

1. 序論

炭素繊維強化プラスチック (CFRP: carbon fiber reinforced plastics) は巨視的 (マクロ) にみれば周期的な微視的 (ミクロ) 構造を有しており、微視的 (ミクロ) にみれば非均質性が顕著な材料である。このような材料の定量的な強度評価を行う代表的な手法として、一体型マルチスケール解析手法 (FE^2)[1][2] が知られている。

この手法は、均質化法を用いることで、炭素繊維の詳細構造が解像されるミクロスケールの現象を、部材全体の構造を表すマクロスケールへと平均化し計算する。一方、マクロ構造モデルが有する全計算点分のミクロ構造解析を実施しなければならないため、計算コストが非常に高く実用的でない。

先行研究 [3] では、データ駆動型関数モデルによりミクロ構造解析のプロセスを代替する手法 (DDFE²: data-driven FE^2) が提案され、マルチスケール解析の計算時間を大幅に削減した。一方で、この手法では特定の材料分布を持つミクロモデルの解析結果に基づいて関数モデルを構築するため、繊維の配向や含有率など内部構造の異なる材料を解析する場合には関数モデルの再構築が必要である。

我々の研究チームでは、level set 法を用いた境界面捕捉型有限要素法に基づいて CFRP ミクロ構造の解析を行い、ミクロ構造の物質配置情報をパラメータの 1 つとする関数モデルを作成することにより、任意の内部構造を持つ部材も自動的に解析可能なデータ駆動型マルチスケール解析手法 (ICDDFE²: interface-capturing

data-driven FE^2)[6] を開発した。既存研究 [6] では、一方向強化 CFRP 断面を対象とし、2 次元線形弾性体とみなして解析しており、実問題への適用に向けては 3 次元への展開が必要である。

本研究では、3 次元への展開に向けた検討として、2 物質からなる 3 次元線形弾性体を対象に、境界面捕捉型有限要素法に基づいた構造解析手法の開発を行う。

また、関数モデル作成の計算コスト削減のため、領域分割法によりメッシュを分割した上で、分散メモリ型並列環境で効率的に動作する解析システムを開発する。

2. 境界面捕捉型有限要素法

本手法では、物質境界面を捉える界面捕捉法のうち、level set 法を採用した。本章では、level set 法を用いた境界面捕捉型有限要素法の構造解析への適用について述べる。

(1) Level set 法

Level set 法は界面捕捉法の 1 つであり、level set 関数と呼ばれる界面からの距離の関数を用いて境界面の位置を定義する。したがって、level set 関数 ϕ は物体の任意の位置における座標 x を変数にもつ。Level set 関数 $\phi(x)$ は、図-1 に示すように、境界面上で 0、境界面から物質 A の方向に対して正、物質 B の方向に対して負の値で定義される。

Level set 法では、図-2 のように、level set 関数 $\phi(x)$ から次式に示す近似 Heaviside 関数 $H_D(\phi)$ を用いて界面

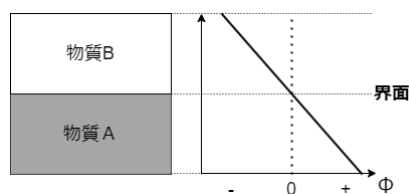


図-1 Level set 関数

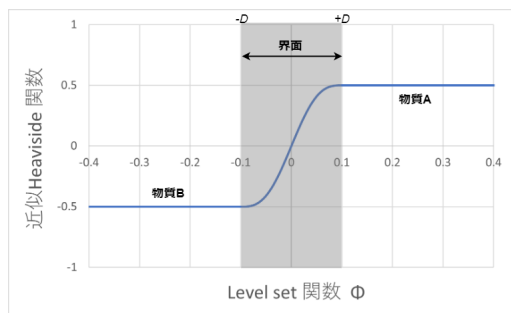


図-2 近似 Heaviside 関数

付近の平滑化を行う。式中、 D は平滑化を行う界面の幅であり、本手法では格子幅の1倍の値を用いた。

$$H_D(\phi) = 0.5 \max\{-1.0, \min[1.0, \frac{\phi}{D} + \frac{1}{\pi} \sin(\frac{\pi\phi}{D})]\} \quad (1)$$

なお、level set 関数 ϕ は、領域内の任意の位置における値であるため、最終的に近似 Heaviside 関数 H_D も領域内の任意の位置における値として計算される。

この近似 Heaviside 関数の値 H_D より、物体の任意の位置における物性値 $P(x)$ は次式で計算される。

$$P(x) = 0.5(P_A + P_B) + H_D(P_A - P_B) \quad (2)$$

ここで、 P_A を物質Aの物性値、 P_B を物質Bの物性値とした。

(2) 構造解析への適用

以下では、level set 法を構造解析へ適用する方法について述べる。ここでは簡単のため、対象は3次元線形弾性体とし、定常な問題を扱う。

CFRPの周期的なマイクロ構造として、図-3のような各辺の長さが1である立方体の樹脂領域の中に、底面の半径が a である円柱状の炭素繊維が介在しているモデルを考える。以降は、この半径のことを炭素繊維の半径、円柱底面の中心を結んだ線を円柱の軸と呼ぶ。

有限要素法は領域を有限個の要素に分割して数値解析を行う手法であり、各計算点における物理量を用いて計算を行う。図-3のような複数の物質からなる物体を対象とする場合、物性値の分布は一樣ではないため、level set 法を用いて連続かつ非一樣な分布として計算を行う。

このモデル内の任意の位置 x における level set 関数の値 $\phi(x)$ は次式で計算される。

$$\phi(x) = (|x - x_c| - a) \cdot (-1) \quad (3)$$

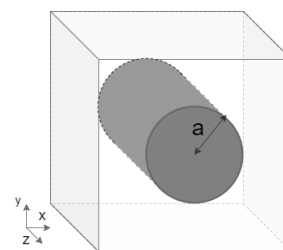


図-3 解析モデル

上式中、 x_c を位置 x に最も近い円柱軸上の点の座標、 a を炭素繊維の半径とした。また、境界内部（繊維領域）を正とするため、 -1 を乗じている。ここで、炭素繊維の半径 a を設計変数とすることで、炭素繊維の含有率が任意であるモデリングを可能にする。

式(3)で計算される level set 関数場 $\phi(x)$ から、式(1)により近似 Heaviside 関数場に変換し、式(2)で物性値場を計算することで、要素内のヤング率 E とポアソン比 ν の分布を計算する。

以上の操作の流れとモデリング結果を図-4に示す。図-4では、例としてヤング率の分布の可視化結果を示しており、炭素繊維のヤング率を20.6 [GPa]、樹脂のヤング率を3.43 [GPa]とした。

この物性値をもとに、以降は通常の構造解析と同様の流れで解析を行う。

3. 提案手法の検証

本研究で開発した境界面捕捉型有限要素法に基づいた境界面捕捉型3次元構造解析ソルバーの検証のため、円形介在物を持つモデルの無限遠等方引張荷重による変位場の理論解[10]と数値解を比較する。

本章で行った解析は、すべて対角スケーリングを使ってCG法により線形方程式の解を求めた。

a) 解析条件

本検証では、解析モデルとして図-3のようなモデルを考えた。炭素繊維と樹脂の材料定数は表-1の通りである。また、炭素繊維の半径 $a = 0.3$ とした。

表-1 解析モデルの材料定数

炭素繊維	ヤング率 E_f	=	20.6	[GPa]
	ポアソン比 ν_f	=	0.33	
樹脂	ヤング率 E_r	=	3.43	[GPa]
	ポアソン比 ν_r	=	0.38	

理論解[10]は、次式で表される。

$$u_r(r) = \begin{cases} [(1 - \frac{b^2}{a^2})\alpha + \frac{b^2}{a^2}]r, & 0 < r < a \\ (r - \frac{b^2}{r})\alpha + \frac{b^2}{r}, & a < r < b \end{cases} \quad (4)$$

$$\alpha = \frac{(\lambda_1 + \mu_1 + \mu_2)b^2}{(\lambda_2 + \mu_2)a^2 + (\lambda_1 + \mu_1)(b^2 - a^2) + \mu_2b^2} \quad (5)$$

ここで、 r は領域内任意の位置における中心からの距

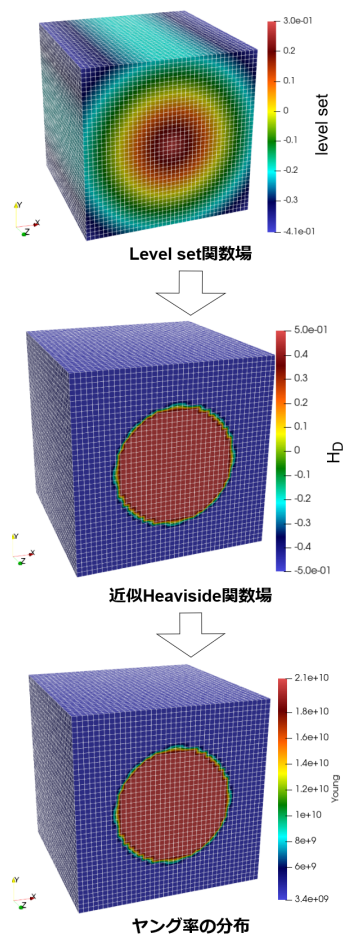


図-4 レベルセット法によるモデリング結果

離、 b は樹脂領域の半径、 λ_1, μ_1 は炭素繊維のラメ定数、 λ_2, μ_2 は樹脂のラメ定数である。

以上の理論解は、2次元の円形介在物を持つモデルを対象としており、本検証では z 方向の変位を0とすることで、3次元問題に適用した。したがって、数値解は図-3のようなモデルのすべての面に z 方向の変位を0とするDirichlet条件を与え、繊維と平行な四面に式(4)で計算される x, y 方向の変位をDirichlet条件として付与して計算した。

b) 解析結果

図-5, 6に式(4)で計算される変位の理論解を可視化した結果と、解析で得られた変位の分布を示す。ここで、図-6は、六面体1次要素を用いて各軸方向40分割し、総節点数68921個($N = 68921$)で行った結果である。

図-5と図-6を比較すると、数値解は理論解と定性的によく一致している。

また、定量的な評価のため、理論解と数値解の相対誤差を用いて検証を行った。相対誤差は次のように定義する。

$$\text{error} = \frac{\sqrt{\int_{\Omega} |u^{\text{theo}} - u^{\text{numerical}}|^2 d\Omega}}{\sqrt{\int_{\Omega} |u^{\text{theo}}|^2 d\Omega}} \quad (6)$$

ここで、 $u^{\text{numerical}}$ は解析によって得られた変位場である。

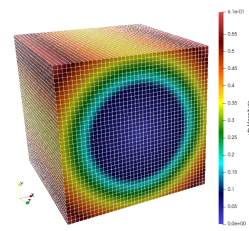


図-5 変位の理論解

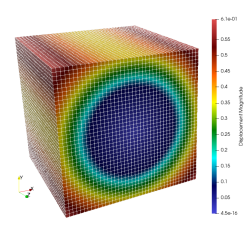
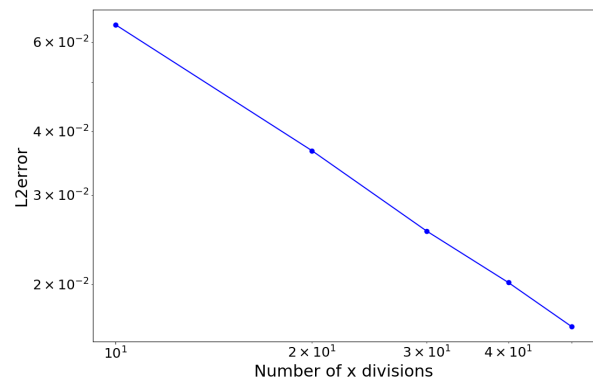


図-6 変位の数値解

図-7 無限遠等方引張問題における x 方向分割数と変位場の相対誤差の関係

以下図-7に x 方向の分割数と式(6)で計算される相対誤差の大きさの関係を示す。検証では、一方向あたりの分割数が10, 20, 30, 40, 50の5パターンで解析を行った。図-7より、分割を細かくすることで0.8の傾きで理論解に収束する様子が確認できた。本検証で最大の分割数である50分割(125000要素)では誤差が約1.7%であり、良好な精度であるといえる。

4. 並列化

(1) 並列化とは

並列化とは、計算機において特定の処理をいくつかの独立した処理に分割し、複数のプロセッサで同時に処理を行うことで、処理速度の高速化を図ることである。

並列化は、処理の仕方によって、capability computingとcapacity computingの2つに大別される。capability computingは、逐次処理では非現実的な計算時間を要する大規模な単一問題を、並列化によって処理することをいい、capacity computingは、逐次処理可能な問題を大量のケースで行う場合に、ケースごとに分割して並列処理することをいう。

また、並列計算機はメモリ構成により、共有メモリ型と分散メモリ型に分類される。共有メモリ型の並列計算機は、図-8に示すような複数のプロセッサが一つのメモリを共有するシステムであり、各プロセッサ間のデータ交換は、それぞれが共有メモリ上のデータにアクセスすることで行われる。分散メモリ型の並列計算機は、図-9に示すような各プロセッサが独自のメモリをもつシステムであり、各プロセッサ間のデータ交換は、ネットワークを通じて行われる。共有メモリ型

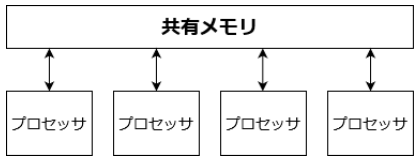


図-8 共有メモリ型

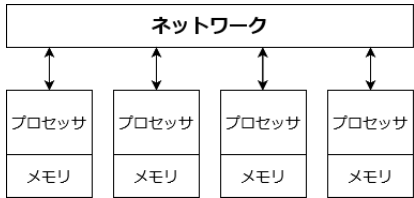


図-9 分散メモリ型

では、扱うデータ量に応じた容量の共有メモリが必要であるため、大規模並列計算には向かない。したがって、本研究では大規模並列計算のために、分散メモリ型並列環境で動作するシステムを開発した。

本論文で行った検証では、使用可能な並列計算環境が共有メモリ型のみであったため、共有メモリ型並列計算環境で capability computing を行った。

(2) 並列性能評価指標

並列化では、逐次計算時間が T であるプログラムを p 並列して、計算時間を T/p にするのが理想的である。しかしながら、実際には分散メモリ型並列計算環境におけるデータ通信時間や並列化が不可能な部分の存在により、上記のような高速化は難しい。

並列処理の性能がどれだけ理想に近いかを評価する指標の1つに、台数効果がある。 p 台のプロセッサを用いた並列処理の時間を T_p 、逐次計算時間を T_1 とすると、台数効果 S_p は次式で定義される。

$$S_p = \frac{T_1}{T_p}$$

(7)

式(7)で、 p 並列で $S_p = p$ のとき T_1/p が成り立ち、理想的な速度向上と呼ぶ。

並列性能を評価するその他の指標として、次式で定義される並列化効率がある。

$$E_p = \frac{S_p}{p} \times 100$$

(8)

本論文では、以上の台数効果 S_p と並列化効率 E_p を用いて並列化性能を評価する。

(3) 並列化結果

a) 並列計算環境

並列計算は表-2 に示す環境で行った。

また、以下の検証で用いた各パラメータは、以下表-3 の通りである。

表-2 並列計算環境	
CPU	Intel Core i7-11700 @ 2.50GHz
Memory	32 GB

表-3 解析における各パラメータの値	
パラメータ	設定値
炭素繊維ヤング率	20.6[GPa]
炭素繊維ポアソン比	0.33
樹脂ヤング率	3.43[GPa]
樹脂ポアソン比	0.38
使用した要素	六面体 1 次要素
並列数	1,2,4,6,8
収束閾値	1.0×10^{-8}
総自由度	84600,198400,385000

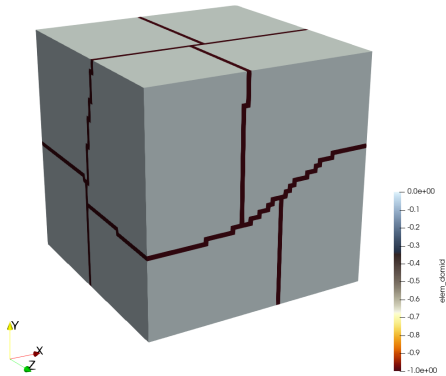


図-10 解析領域を 8 領域に領域分割した例

b) 解の不変性の検証

3 章と同様の解析モデル及び理論解、境界条件設定で並列計算を行い、並列化による解への影響を確認する。

並列計算を行う際には、領域分割法によって解析領域を複数の小領域に分割を行う。図-10 に、各辺の長さが 1 である立方体領域を領域分割法によって 8 領域に分割した様子を示す。図-10 における黒い領域は overlapping 領域と呼ばれ、隣り合う領域の情報を含む。したがって、プロセッサ間での通信で得た情報をもとに領域の情報が完成される。

並列数を変化させたときの式(6)で計算される相対誤差の大きさの変動は、以下図-11 の通りである。図-11 より、並列数を変化させたとき、各自由度数における相対誤差の値は変化していないことが確認できる。したがって、並列化による誤差は生じていないといえる。

c) 並列性能評価

図-12, 13 に、3 パターンの自由度における、並列数と台数効果 S_p 、並列化効率 E_p の関係を示す。並列計算

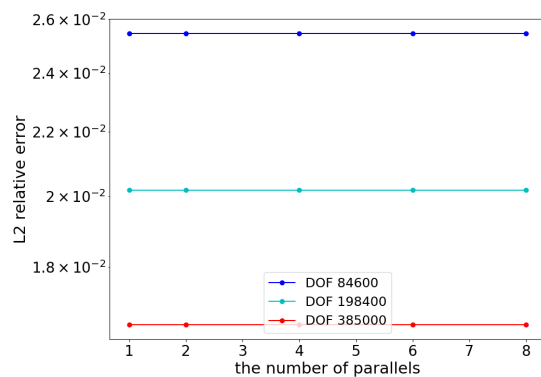
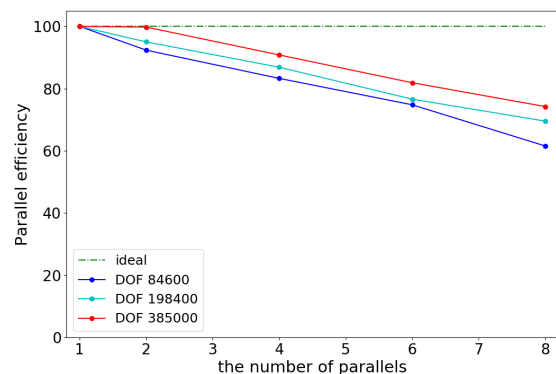
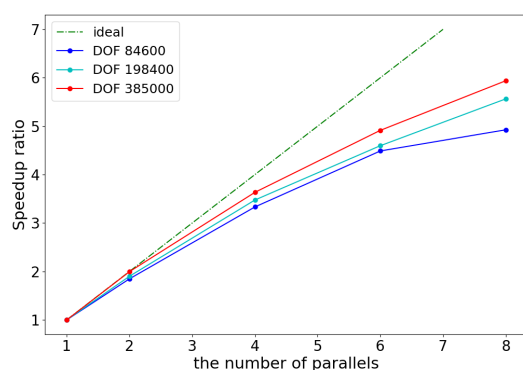


図-11 並列数と相対誤差の関係

図-13 並列数と並列化効率 E_p の関係図-12 並列数と台数効果 S_p の関係

は、3章と同様の解析モデル及び理論解、境界条件設定で行い、各パラメータは表-3 に示す値を用いた。

図-12 より、どのケースでも並列化により計算が高速化していることが確認できる。自由度 385000 の場合を並列数 8 で解析した場合は、逐次計算の約 5 倍の計算速度で解析できている。一方で、図-12, 13 より、自由度が小さく、並列数が大きくなるほど台数効果と並列化効率が低下していることが確認できる。これは、共有メモリ型並列環境で計算を行っているため、並列数の増加に伴って増えるデータの通信量に対して共有メモリの通信速度が追い付いていないことが原因だと考えられる。

5. 結論

本研究では、境界面捕捉型有限要素法に基づき、CFRP ミクロ構造のような 2 物資からなる 3 次元線形弾性体の自動的な解析を可能にする、並列構造解析プログラムの開発及び検証を行った。

まず、level set 法を用いた界面捕捉型 3 次元構造解析ソルバーを開発した。提案手法の妥当性検証のため、無限遠等方引張問題を解き、理論解との相対誤差の比較を行った。その結果、およそ 0.8 の傾きで理論解に収束していることが確認でき、提案手法の妥当性が検証さ

れた。

次に、分散メモリ型並列環境で動作可能なシステムを開発し、並列数による解の不変性を確認した。本論文では、分散メモリ型並列環境が使用できなかったため、共有メモリ型並列計算環境で解析を実行した。さらに、台数効果と並列化効率により並列計算の効果を測定し、本検証において最大の並列数 8 の場合で、総自由度 38500 のとき並列化効率は約 75%、台数効果は約 5 倍であり、計算の高速化が確認された。

謝辞: 本研究は、JST 創発的研究支援事業 JPMJFR215S および JSPS 科研費 22H03601 の支援を受けたものである。ここに記して謝意を表する。

参考文献

- [1] F. Feyel. Multiscale FE2 elastoviscoplastic analysis of composite structures. Computational Materials Science. Vol. 16, No. 1-4, pp. 344-354, 1999
- [2] F. Feyel, J. L. Chaboche. FE2 multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre SiC/Ti composite materials. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. Vol. 183, No. 3-4, pp. 309-330, 2000
- [3] 波多野僚, 松原成志朗, 森口周二, 寺田賢二郎. 超弾性複合材料に対するデータ駆動型ミクロ・マクロ連成マルチスケール解析. 日本計算工学会論文集, No. 20190015, 2019
- [4] C.W Hirt, B.D Nichols. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. Journal of Computational physics. Vol. 39(1), pp. 201-225, 1981
- [5] M. Sussman, P. Smereka, S. Osher. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. Journal of Computational physics. Vol. 114(1), pp. 146-159, 1994
- [6] 細川恭太, 森田直樹, 三目直登. Level set 法を用いたデータ駆動型マルチスケール解析. 日本機械学会第 35 回計算力学講演会, 鹿児島・オンライン, 2022 年 11 月.
- [7] 邵長城. 基本からわかる有限要素法. 森北, 2008

- [8] 寺田賢二郎, 平山紀夫, 山本晃司. 数値材料試験 有限要素法によるマルチスケール解析. 丸善, 2020
- [9] 日本計算工学会. 第3版 有限要素法による流れのシミュレーション. 丸善, 2017
- [10] N. Sukumar, D. L. Chopp, N. Moës, and T. Belytschko. Modeling holes and inclusions by levelsets in the extended finite-element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 190(46-47), pp. 6183-6200, 2001
- [11] 片桐孝洋. スパコンプログラミング入門 並列処理とMPIの学習. 東京大学出版会, 2013