

重合メッシュ法における高解像度メッシュの 固有モードを用いた反復法前処理

Preconditioning for Iterative Method Using Eigen-modes from a High-resolution Mesh
in S-version Finite Element Analysis

森田 直樹¹⁾ 谷 聖斗²⁾ 三目 直登³⁾
Naoki Morita, Masato Tani, and Naoto Mitsume

¹⁾博(環境) 筑波大学システム情報系 助教 (〒305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1, E-mail: nmorita@kz.tsukuba.ac.jp)

²⁾筑波大学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)

³⁾博(工) 筑波大学システム情報系 助教 (〒305-8573 茨城県つくば市天王台 1-1-1)

The s-version finite element method (SFEM) is an approach in which a coarse global mesh covering the entire analysis domain is superimposed with a local mesh that finely resolves a region of interest. In this study, focusing on large-scale structural analysis using the SFEM, we propose a technique to reduce the computational time for solving systems of linear equations by employing eigen-modes obtained from the local mesh of the SFEM as a preconditioner in iterative methods. Specifically, we utilize deflation preconditioning based on eigen-modes, where the eigen-modes are extracted from the coefficient matrix corresponding to the local mesh in the SFEM. By obtaining the eigen-modes from the local mesh's coefficient matrix, the proposed approach can accommodate the movement and update of the local mesh. Furthermore, by introducing a domain decomposition technique to subdivide the eigenmode-extraction region of the local mesh, we aim to shorten the computation time required for eigenmode extraction. We evaluate the effectiveness of the proposed method, in terms of both iteration and computational time, through its application to a two-dimensional tensile problem in composite materials.

Key Words : Conjugate Gradient Method, Deflation, Preconditioning, Parallel Computation, S-version Finite Element Method

1. 緒言

重合メッシュ法は、解析対象の全体領域を荒く解像するグローバルメッシュに対し、関心領域を詳細に解像するローカルメッシュを重ね合わせて解析する手法である[1,2]。重合メッシュ法の利点として、両者のメッシュを独立に生成可能なことからメッシュ生成・メッシュ制御が容易であることが挙げられる。加えて、関心領域周辺のみを高いメッシュ解像度で表現できるため、解析メッシュ全体の節点数の増加も抑えられる。また、ローカルメッシュの境界はグローバルメッシュの要素境界と一致させる必要がない点も、解析対象の柔軟なモデル生成を可能にしている。

重合メッシュ法の適用例として、He らはローカルメッシュを亀裂前面近傍のみに生成し、亀裂進展とともにメッシュを移動させることで、動的亀裂進展を高精度に解析する手法を提案した[3,4]。亀裂進展解析のように、解析対象全体の形状や関心領域で生じる現象を詳細に解像する場合、グローバルメッシュ・ローカルメッシュ双方の空間解像度が大きくなることで、重合メッシュ法を用いてもなお、計算コストが増大する。このような大規模問題では、連立一次方程式の求解を行う線形ソルバが、解析に要する計算時間の多くを占める。

問題規模の増加に従って長大する計算時間に対し、計算時間の短縮という点で実用性を向上する方法として、並列計算が利用される。本研究では、並列計算性能が

得られやすい点で、連立一次方程式を解く線形ソルバとして反復法を選択する。線形ソルバのひとつである反復法は、ある手順に沿って近似解を反復的に更新し、真の解へ漸近させる手法である。この手法は高い並列計算性能の実現が期待できるものの、数値誤差の影響を受けやすく、問題によっては反復法が収束しない場合がある。そこで実用上、反復法の収束性・安定性を向上させるため、反復法前処理が利用される。

著者らはこれまで、反復法前処理に関する研究として、解くべき係数行列の低次固有モードを前処理として利用する、固有モード deflation (eigen-mode deflation) に着目し、検討を進めてきた。Deflation 前処理は、既知の線形独立な複数ベクトルを係数行列から縮約する手法[5,6]である。既知の複数ベクトルとして低次固有モードを利用する固有モード deflation では、反復法の収束性悪化の一因となる低次固有モード成分を縮約できるため、解くべき問題の条件数が低減され反復法の収束性向上が期待される。

一方、固有モード deflation は条件数削減効果が期待される反面、あらかじめ固有モードが得られている場合を除き、反復開始前に固有値解析を行い、縮約に必要な低次固有モードを取得する必要がある。低次固有モードを求める固有値解析には Lanczos 法などの手法が存在するが、いずれの手法でも低次固有モード取得の計算コストは無視できない。加えて、重合メッシュ法

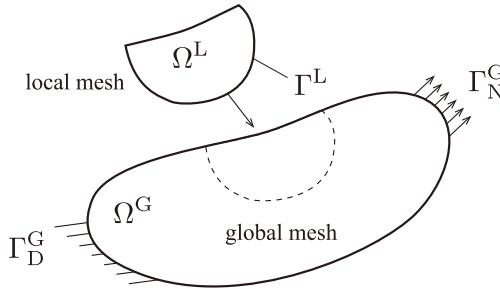


図-1 重合メッシュ解析の模式図

への適用、特に亀裂進展解析への展開など発展的な数値シミュレーションへの適用を考慮すると、ローカルメッシュの移動・更新を考慮した、固有ベクトルの取得方法の提案が重要となる。

そこで本研究では、連立一次方程式求解の計算時間削減を目的として、重合メッシュ法特有のメッシュ構造に基づく反復法前処理を提案する。具体的には、固有モードを用いる deflation 前処理に着目し、重合メッシュ法のローカルメッシュに対応する係数行列から取得した固有モードを利用して前処理を施す。提案手法は、固有モードをローカルメッシュに対応する係数行列のみから取得することでローカルメッシュ情報の変化に対応する。さらに領域分割法を援用し、ローカルメッシュの固有モード取得領域を細分化することで固有モード取得時間に関わる計算時間の短縮を目指す。

提案手法は、複合材料の二次元引張問題を対象に、反復回数および計算時間の観点から、その有効性を評価する。また領域分割法を援用する際には、事前に最適な固有モード取得領域の個数を定めることが実用上重要となる。その指針として、ローカルメッシュ領域の細分化後の領域（以後、ローカルメッシュグループ）を固有モードが張られたひとつの要素として考えれば、最適な細分化パラメータは、グローバルメッシュとのサイズ比で推察できるとの仮説をおき、数値実験に基づく考察を行う。なお本研究の範囲では、基礎的検討との位置づけから、逐次計算を対象として、領域分割法は固有モード取得領域を決定するために用いる。

2. 重合メッシュ法

本研究では、重合メッシュ法による構造解析を対象とする [1,2]。図 1 に、解析モデルの模式図を示す。解析領域は、解析対象の全体領域 Ω^G を荒く解像するグローバルメッシュと、関心領域 Ω^L を詳細に解像するローカルメッシュの重ね合わせで定義する。ここで、境界 Γ_D^G は全体領域のうち Dirichlet 境界条件が定義される境界、境界 Γ_N^G は全体領域のうち Neumann 境界条件が定義される境界、境界 Γ^L は関心領域（ローカルメッシュ）の境界である。

領域 Ω^L では、式(1)のように、変位 \mathbf{u} をグローバルメッシュにおける変位 \mathbf{u}^G とローカルメッシュにおける変位 \mathbf{u}^L の和で表す。

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^G + \mathbf{u}^L \quad (1)$$

さらに、ローカルメッシュの境界 Γ^L において、変位

の連続性を保証するため、式(2)の条件を付与する。

$$\mathbf{u}^L = \mathbf{0} \text{ on } \Gamma^L \quad (2)$$

この条件のもと、通常の有限要素法と同様に離散化すると、解くべき連立一次方程式(3)が得られる。本研究の範囲では、材料構成則を線形弾性体とし、幾何学的非線形を考慮しないこととした。ここで、 \mathbf{K} は剛性行列、 \mathbf{f} は外力ベクトルであり、上付き添字 G はグローバルメッシュに関する変数、上付き添字 L はローカルメッシュに関する変数、上付き添字 GL, LG はグローバルメッシュとローカルメッシュの連成項に関する変数であることを示す。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K}^G & \mathbf{K}^{GL} \\ \mathbf{K}^{LG} & \mathbf{K}^L \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u}^G \\ \mathbf{u}^L \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{f}^G \\ \mathbf{f}^L \end{Bmatrix} \quad (3)$$

また、 \mathbf{K}^G 、 \mathbf{K}^L 、 \mathbf{K}^{GL} 、 \mathbf{K}^{LG} はそれぞれ、式(4)、式(5)、式(6)、式(7)から得られる。ここで、 \mathbf{D} は応力-ひずみ関係行列、 \mathbf{B} はひずみ-変位関係行列、 t は転置記号である。

$$\mathbf{K}^G = \int_{\Omega^G} \mathbf{B}^G \mathbf{D} \mathbf{B}^G d\Omega^G \quad (4)$$

$$\mathbf{K}^L = \int_{\Omega^L} \mathbf{B}^L \mathbf{D} \mathbf{B}^L d\Omega^L \quad (5)$$

$$\mathbf{K}^{GL} = \int_{\Omega^L} \mathbf{B}^G \mathbf{D} \mathbf{B}^L d\Omega^L \quad (6)$$

$$\mathbf{K}^{LG} = \int_{\Omega^L} \mathbf{B}^L \mathbf{D} \mathbf{B}^G d\Omega^L = \mathbf{K}^{GL} \quad (7)$$

3. Deflation 前処理

反復法前処理は、連立一次方程式で解く際に、反復法の収束性向上を目的として、あらかじめ式変形を施す操作である。前処理は、式(8)に示す連立一次方程式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ の両辺に対し、式(9)で示す前処理行列 \mathbf{M} の逆行列を左から乗じる。ここで、 \mathbf{A} は大きさ $n \times n$ の正定値対称行列、 \mathbf{x} は大きさ n の解ベクトル、 \mathbf{b} は大きさ n の右辺ベクトルである。

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (8)$$

$$\mathbf{M}^{-1} \mathbf{Ax} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{b} \quad (9)$$

前処理付き反復法の計算時間は、前処理行列 \mathbf{M} の生成時間と式(9)の求解時間の合計で定まる。

Deflation 前処理とは、事前に取得した既知の基底の組（deflation 基底）を用いて、連立一次方程式求解の反復計算から入力基底の情報を除外することで、収束性の向上が期待される手法である [5]。Deflation 基底は、互いに線形独立であれば任意のベクトルおよび本数を入力可能であり、条件数の削減効果は deflation 基底に依存し変化する。連立一次方程式 $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ の係数行列 \mathbf{A} に対して、入力する n_{def} 本 ($n_{\text{def}} \ll n$) の deflation 基底ベクトル \mathbf{w}_1 から $\mathbf{w}_{n_{\text{def}}}$ を式(10)のように並べて $n \times n_{\text{def}}$ の行列 \mathbf{W} を構成する。

$$\mathbf{W} = [\mathbf{w}_1 \quad \dots \quad \mathbf{w}_{n_{\text{def}}}] \quad (10)$$

ここで大きさ n_{def} かつ 0 でないベクトル y を使用し、解 x を次のように表す。

$$x = Wy + (x - Wy) \quad (11)$$

A 直交の定義より、式 (12) が得られる。ここで (a, b) はベクトル a, b の内積を示す。続けて式 (12) を展開することで式 (13) を得る。ここで W^t は W の転置を表す。

$$(W, Ax - AWy) = \mathbf{0} \quad (12)$$

$$W^t Ax = W^t AWy \quad (13)$$

式 (13) を整理し、左から W を乗じて式 (14) を得る。

$$\begin{aligned} Wy &= W(W^t AW)^{-1} W^t Ax \\ &= W(W^t AW)^{-1} W^t b \end{aligned} \quad (14)$$

ここで、式 (15)、式 (16) のような $n \times n$ の行列 Q, P をそれぞれ定義する。 I は単位行列である。

$$Q = W(W^t AW)^{-1} W^t \quad (15)$$

$$P = I - Q \quad (16)$$

式 (15)、式 (16) を用いて、 Wy 、 $x - Wy$ は、それぞれ式 (17)、式 (18) のように表される。

$$Wy = W(W^t AW)^{-1} W^t b = Qb \quad (17)$$

$$x - Wy = (I - W(W^t AW)^{-1} W^t A)x = PAx \quad (18)$$

以上より、式 (11) で示された解ベクトル x は式 (19) のように書き換えられる。

$$x = Qb + PAx \quad (19)$$

ここで式 (19) 右辺第 1 項は、既知の行列 Qb から求まる。次に式 (19) 右辺第 2 項は、式 (20) を解くことで得られる。

$$PAx = Pb \quad (20)$$

式 (20) より、deflation の過程で乗じられた P は、前処理行列 M_{def}^{-1} とみなすことができ、式 (21) で表される。

$$M_{\text{def}}^{-1} = P = I - W(W^t AW)^{-1} W^t \quad (21)$$

上記の関係に基づき前処理つき共役勾配法を構成する。Deflation 前処理を適用した共役勾配法は deflated 共役勾配法と呼ばれる場合がある。なお、deflated 共役勾配法には標準的な前処理 \bar{M} を併用可能である [7]。前処理付き deflated 共役勾配法のアルゴリズムを Algorithm 1 に示す。ここで、 ε は収束判定閾値である。

4. 提案手法：高解像度メッシュの領域分割に基づく deflation 前処理

既知の複数ベクトルとして低次固有モードを利用する固有モード deflation では、反復法の収束性悪化の一因となる低次固有モード成分を縮約できるため、解くべき問題の条件数が低減され反復法の収束性向上が期待される。一方、あらかじめ固有モードが得られている場合を除き、反復開始前に固有値解析を行い、縮約に

Algorithm 1 Deflated Preconditioned Conjugate Gradient Method

```

1: function DEFLATED_PCG( $A, b, x, W, \bar{M}$ )
2:    $r_0 \leftarrow b - Ax_0$ 
3:    $z_0 \leftarrow \bar{M}^{-1} r_0$ 
4:    $p_0 \leftarrow z_0$ 
5:   for ( $i = 1, 2, 3, \dots$ ) do
6:      $w_{i-1} \leftarrow PAp_{i-1}$ 
7:      $\alpha_i \leftarrow (r_{i-1}^t z_{i-1}) / (p_{i-1}^t w_{i-1})$ 
8:      $x_i \leftarrow x_{i-1} + \alpha_i p_{i-1}$ 
9:      $r_i \leftarrow r_{i-1} - \alpha_i w_{i-1}$ 
10:    if ( $\|r_i\| / \|r_0\| < \varepsilon$ ) then
11:      exit
12:    end if
13:     $z_i \leftarrow \bar{M}^{-1} r_i$ 
14:     $\beta_i \leftarrow (r_i^t z_i) / (r_{i-1}^t z_{i-1})$ 
15:     $p_i \leftarrow z_i + \beta_i p_{i-1}$ 
16:   end for
17:   return  $x_i = Qb + P^t x_i$ 
18: end function

```

必要な低次固有モードを取得する必要がある。低次固有モードを求める固有値解析には Lanczos 法などの手法が存在するが、いずれの手法でも低次固有モード取得の計算コストは無視できない。加えて、重合メッシュ法への適用、特に亀裂進展解析への展開など発展的な数値シミュレーションへの適用を考慮すると、ローカルメッシュの移動・更新を考慮した、固有ベクトルの取得方法の提案が重要となる。

そこで本研究では、連立一次方程式求解の計算時間削減を目的として、重合メッシュ法特有のメッシュ構造に基づく反復法前処理を提案する。具体的には、固有モードを用いる deflation 前処理に着目し、重合メッシュ法のローカルメッシュに対応する係数行列から取得した固有モードを利用して前処理を施す。提案手法は、固有モードをローカルメッシュに対応する係数行列のみから取得することでローカルメッシュ情報の変化に対応する。さらに領域分割法を援用し、ローカルメッシュの固有モード取得領域を細分化することで固有モード取得時間に関わる計算時間の短縮を目指す。

ローカルメッシュ領域に領域分割法を援用して計算時間を短縮する場合、事前に固有モード取得領域の最適な分割数を定めることができが実用上重要となる。そこで適切な固有モード取得領域を定めるパラメータとして、ローカルメッシュ領域の細分化後の領域（ローカルメッシュグループと呼ぶ）を固有モードが張られたひとつの要素として考え、最適な細分化パラメータは、グローバルメッシュとのサイズ比で推察できるとの仮説をおり、数値実験に基づく考察を行う。ローカルメッシュグループとグローバルメッシュの代表長さ比 l_c は式 (22) で表される。

$$l_c = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{n_L} S_i^L / n_L}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{n_G} S_i^G / n_G}} \quad (22)$$

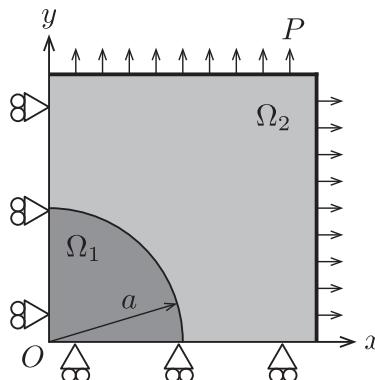


図-2 複合材料の引張問題（1/4 モデル）の模式図。半径 a の強化材が母材中央に位置している。

表-1 数値実験に使用するメッシュの節点数と要素数

	Num. of nodes		Num. of elements	
	Global	Local	Global	Local
Mesh 1	289	4,681	256	4,563
Mesh 2	441	7,351	400	7,203

ここで、 n_L はローカルメッシュグループの個数、 n_G はグローバルメッシュの個数、 S_i^L は i 番目のローカルメッシュグループの面積、 S_i^G は i 番目のグローバルメッシュの面積である。

5. 計算性能評価

複合材料を模擬した円形充填モデルの二次元引張問題を例題として、提案手法の前処理性能を評価する。解析対象は図 2 に示す円形充填問題の 1/4 モデルである。繊維領域 Ω_1 の半径 a は $\sqrt{3}$ mm、樹脂領域 Ω_2 の辺長は 6 mm、無限遠での外力 $P = 1.0$ MPa である。複合材料の例として CFRP を選定し、物性値は繊維領域 Ω_1 においてヤング率 $E = 235$ MPa、ポアソン比 $\nu = 0.26$ 、樹脂領域 Ω_2 においてヤング率 $E = 2.67$ MPa、ポアソン比 $\nu = 0.41$ である。Deflated 共役勾配法の前処理には固有モード deflation に加え対角スケーリングを併用する。収束判定閾値は 1.0×10^{-8} 、Lanczos 法の収束判定閾値は 1.0×10^{-8} である。節点数の異なる計算モデルを 2 つ用意し、問題規模に対する提案手法の有効性を評価する。計算モデルの節点数と要素数を表 1 に示す。

また、Mesh 2 モデルのローカルメッシュにおける固有モード取得領域の分割例を図 3 に示す。ローカルメッシュの固有モード取得領域の細分化には、グラフ分割ライブラリ METIS [8] を用いた。一部にアスペクト比の大きなローカルメッシュグループが確認されたものの、定性的には、ローカルメッシュグループそれぞれの形状は、アスペクト比が小さい形となっていることが確認された。

Mesh 1 モデル、Mesh 2 モデルを用いた計算結果より、既存手法（標準的な共役勾配法、CG 法）と提案手法の代表長さ比と反復回数・計算時間の関係を図 4、図 5 にそれぞれ示す。横軸は代表長さ比 l_c 、右縦軸は計算時間、左縦軸は反復回数である。ここでは、前処理に用

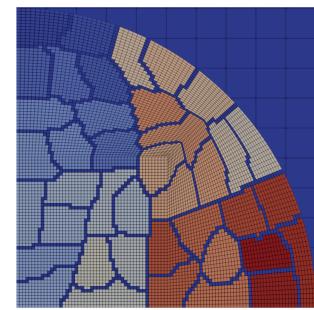


図-3 ローカルメッシュで表現された強化材近傍における、固有モードを取得する領域分割例。

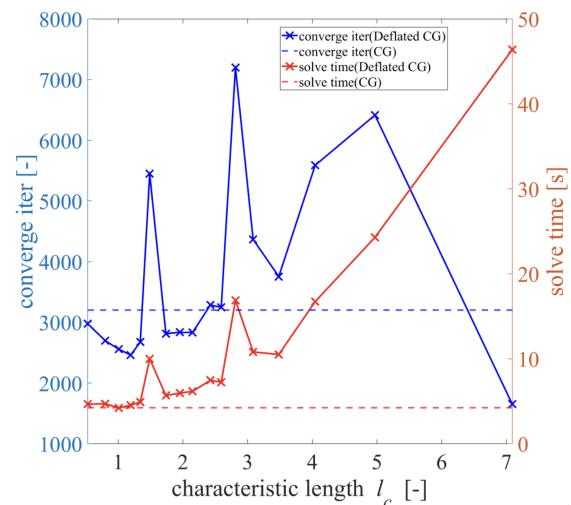


図-4 提案手法における代表長さと計算時間・合計計算時間の関係（メッシュ 1、合計基底数 120）

いる基底本数をメッシュ全体で一定とし、ローカルメッシュ分割数より、ローカルメッシュグループに割り当てる基底の本数を定める。すなわち総基底本数 = ローカルメッシュグループごとの基底本数 × 領域分割数となる。本報告では、総基底本数を 120 とした。計算時間については、測定をそれぞれ 3 回行い、合計計算時間が最小のものを使用した。

mesh1 モデルでは反復回数について約 23% の削減となった一方で、計算時間については約 1% の削減と、大きな効果は確認できなかった。反復回数・計算時間共に、削減率が最大となるのは mesh2 モデルであった。モデル 2 において、標準的な共役勾配法に比べ、計算時間は最大 33.6%、反復回数は最大 45.8% 削減し、提案手法の有効性を確認した。

また全ての例において、 $l_c = 1$ 付近にて反復回数・計算時間が最小値をとることが確認できた。そのため固有モードを取得する領域の細分化数を定める指針として、代表長さ比が固有モードを取得する領域の細分化数を定める指針として利用できる可能性がある。

6. 結言

本研究では、重合メッシュ法を用いた構造解析を対象に、連立一次方程式求解の計算時間削減を目的として、重合メッシュ法のローカルメッシュから取得した

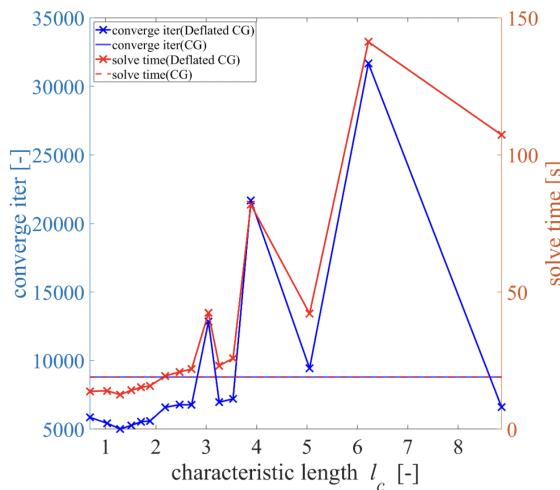


図-5 提案手法における代表長さと計算時間・合計計算時間の関係（メッシュ2、合計基底数120）

固有モードを反復法前処理に利用する手法を提案した。具体的には、解空間の基底群から構成される既知の基底を用いて前処理を施す deflation 前処理に着目し、前処理に用いる基底として、係数行列の低次側固有モードを用いた。固有値の取得に関わる計算時間は、領域分割法を援用して固有モードを取得する領域を細分化することで削減した。

提案手法の評価にあたり、複合材料の二次元引張問題を数値例として、反復回数と計算時間の観点から評価した。評価の結果、モデル2において、標準的な共役勾配法に比べ、計算時間は最大33.6%、反復回数は最大45.8%削減し、提案手法の有効性を確認した。

また、固有モードを取得する領域の細分化数を定める指針として、ローカルメッシュ領域の細分化後の領域（ローカルメッシュグループ）を固有モードが張られたひとつの要素として考え、グローバルメッシュとの代表長さ比をパラメータとして利用する点について、数値実験により検討した。検討の結果、代表長さ比が1付近にて前処理性能が最大となることが示されたため、代表長さ比が固有モードを取得する領域の細分化数を定める指針として利用できる可能性がある。

謝辞： 本研究は、JSPS 科研費 23K16891、JSPS 科研費 23K24857、JST 創発的研究支援事業 JPMJFR215S の助成および学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（課題番号:jh240017）の支援を受けたものです。ここに謝意を表す。

参考文献

- [1] Fish, J.: The s-version of the finite element method, *Comput. & Struct.* No. 43, Vol. 3, pp. 539–547, 1992.
- [2] Fish, J. and Markolefas, S.: Adaptive s-method for linear elastostatics, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, No. 104, Vol. 3, pp. 363–396, 1993.
- [3] He, T., Kishi, K., Morita, N., Mitsume, N., Yamagimoto, F., Kim, Y. J., Shibanuma, K.: Strategy for simulating high-speed crack propagation in 3D-plate structures based on S-version FEM, *Int. J. Mech. Sci.*, Vol. 274, p.109261, 2024.
- [4] Kishi, K., Takeoka, Y., Fukui, T., Matumoto, T., Suzuki, K. and Shibanuma, K.: Dynamic crack propagation analysis based on the s-version of the finite element method, *Comput. Methods in Applied Mech. and Eng.*, 2020 (accepted).
- [5] Nicolaides, R. A., Deflation of conjugate gradients with applications to boundary value problems, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 24-2, 1987, pp. 355–365.
- [6] Tang, J. M., MacLachlan, S. P., Nabben, R., and Vuik, C., A comparison of two-level preconditioners based on multigrid and deflation, *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 31-4, 2010, pp. 1715–1739.
- [7] Saad, Y., Yeung, M., Erhel, J., and Guyomarc'h, F., A deflated version of the conjugate gradient algorithm, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 21-5, 2000, pp. 1909–1926.
- [8] Karypis, G. and Kumar, V., Metis: A software package for partitioning unstructured graphs, partitioning meshes, and computing fill-reducing orderings of sparse matrices, *Computer Science & Engineering (CS&E) Technical Reports*, 97-061, 1997.