博士論文（要約）

大規模有限要素法接触解析への
反復法線形ソルバーの適用に関する研究

後藤 和哉

構造解析において対象となる問題の多くは，複数の部品から構成されるアセンブリ構造である．計算機性能の進歩に伴い，年々，より大規模な構造物の解析が可能となっているが，これに伴い，全体としての挙動を正しく予測するために，大規模なアセンブリ構造解析への需要が高まっている．アセンブリ構造のモデル化を行う際には，一般に，CADは部品ごとに管理されているため，CADのレベルで部品を結合して，巨大な一体モデルを作成し，得られた複雑な形状に対して有限要素メッシュを生成する，あるいは，個々の部品に対して有限要素メッシュを生成し，メッシュのレベルで部品を結合する必要がある．巨大なCADモデルの扱いや，極端に複雑な形状に対するメッシュ生成が必要となる可能性が高い前者のアプローチは非現実的であるため，必然的に後者のアプローチをとることとなり，このためにメッシュの結合をモデル化する多点拘束(MPC) が不可欠となる．MPCは，メッシュの結合以外にも，周期境界条件や斜め境界条件などの用途があるが，扱う問題としては，制約条件つき最小化問題となる．この問題の求解は線形ソルバーによる求解が行われる部分であり，大規模な問題においては解析時間の多くを占めることになるため，効率的なアルゴリズムの採用が重要となる．

アセンブリ構造解析と並んで大規模解析のニーズが高い分野が接触解析である．これまでは単なる部品同士の完全な結合としてモデル化していたものや，可動部分を一つの機構として単純化してモデル化していた問題に対しても，摩擦や滑りを考慮した詳細な解析を行うことにより，実際に起きている現象をより深く理解し，新しいものづくりのための知見を得ることを目的とした接触解析の活用が注目されている．接触問題は，接触が発生する領域が事前にわからないため，反復的に実際の接触領域を探しながら解析を進めることになる．このため，幾何学的な接触領域の探索，与えられた接触拘束条件のもとでの釣り合い状態の計算，物理的に合理的な接触状態を探す反復計算，といった計算が必要となる．また，摩擦を考慮する場合では，適切な摩擦のモデルを使うことが重要となる．大規模の接触問題においては，これら全ての計算を効率良く行うことが重要であるが，特に，接触拘束条件のもとでの釣り合い状態の計算は，MPC問題と同様に，制約条件付き最小化問題を扱うため，線形ソルバーによる求解が行われる部分であり，計算時間の多くを占めることとなる．したがって，ここでも効率的なアルゴリズムの採用が必須である．

構造解析では，扱う問題によって線形ソルバーで扱う行列の性質が異なり、また，同じ行列を繰り返し解くのか，毎回異なる行列を解くのか，といった求解のパターンも異なるため，最適な線形ソルバーも変わってくる．線形ソルバーには大きく分けて直接法と反復法がある．直接法は，ロバスト性に優れるが，問題規模の増大に伴う計算量とメモリ使用量の増大は大きく，数千万から数億自由度規模の大規模問題への適用は困難で

ある．一方，反復法は，問題規模の増大に伴う計算量とメモリ使用量の増加は比較的緩やかであり，並列計算への適合性も高いため，大規模解析には不可欠となる．なお，反復法の前処理や非対称行列向けの反復解法については，問題に応じて適切な手法を選択することが重要であり，また，新たな手法が次々と提案されつつある分野である．このため，線形ソルバーを前処理も含めてブラックボックスとして扱い，手法を容易に切り替えられるソフトウェア設計が望ましい．線形ソルバーをブラックボックス化しておけば，最新の解法や前処理を実装した外部のライブラリを利用することも容易であり，それによるメリットは大きい．

なお，反復法には直接法のようなロバスト性はなく，行列が悪条件となる場合，収束解が得られないことがある．このため，反復法が必須となる大規模解析においては，行列が悪条件とならない定式化を採用することが重要となる．

アセンブリ構造解析や接触解析で扱う制約条件付き最小化問題では，制約条件処理の手法によって行列の性質が大きく異なる．制約条件付き最小化問題の代表的な解法としては，Lagrange乗数法，Penalty法，自由度消去法がある．Lagrange乗数法では，制約条件を厳密に満足する解が得られるが，行列は非正定値となり，また，制約条件の数だけ行列を大きくする必要がある．Penalty法では，制約条件を近似的に満足する解が得られ，その精度は用いるPenalty数に依存する．Penalty数を大きくすると精度は良くなるが，行列の条件数が悪化する．しかし，行列のサイズは変わらず，実装がシンプルであるため，線形ソルバーに直接法を用いる場合には有効な手法である．自由度消去法は，制約条件を厳密に満足する解が得られ，行列も正定値となるが，自由度の消去によって疎行列の非ゼロのパターンが変わるため，並列計算時には通信パターンも変わることとなる．線形ソルバーに反復法を適用可能な解法としては，Augmented Lagrange法，Conjugate Projected Gradient (CPG)法がある．Augmented Lagrange法は，いわばLagrange乗数法とPenalty法を組み合わせた手法と言え，小さいPenalty数を用いて制約条件をほぼ厳密に満たす解が得られる手法である．しかし，外側反復を用いて線形ソルバーによる求解を複数回行う必要があり，計算量は多くなる．CPG法は，CG法に制約条件処理を組み込んだ手法であり，行列の条件数は悪化せず，制約条件を厳密に満たす解が得られる．しかし，線形ソルバーと一体となっている手法であり，線形ソルバーがブラックボックス化できない．この他，MPC問題や接触問題に領域分割による並列反復法を適用した研究があるが，いずれの手法も，反復法の各反復の中で制約条件を処理するなど，反復解法と制約条件処理とが一体となっており，線形ソルバーがブラックボックス化できない．

そこで，本研究では，アセンブリ構造解析と接触解析において共通して扱われる問題

である制約条件付き最小化問題に注目し，オーバーラップ型領域分割にもとづく並列反復法の適用による大規模解析を想定して，悪条件行列の回避，および，線形ソルバーのブラックボックス化を可能とする手法を，MPC問題と接触問題のそれぞれについて提案した．また，提案手法を並列有限要素法構造解析ソフトウェアFrontISTRに実装し，数値例題の解析により有効性を評価した．

MPC問題に対しては，行列の条件数の観点から，自由度消去法に着目した．自由度消去法の実装上の課題である「並列計算時の通信パターンの変化」に対応するため，オーバーラップ型DDMの特徴を利用し，局所的なオーバーラップ領域の修正を行う方法を提案した．提案手法を検証例題に適用した結果，以下の結論を得た：(i)自由度消去法による行列は，解析モデル全体に対して大きめの接合面を持つモデルや，接合面が複数あるモデルに対しても解析モデル全体を一体のメッシュによってモデル化した場合と同等の行列となることが確認された，(ii)ペナルティ法と異なり，自由度消去法では，接合面のメッシュが一致している(点対点のMPC)か，一致していない(点対面のMPC)かによる影響が小さいことが確認された．(iii)並列数を増やすことにより，MPCによる接合面がある領域とない領域が発生し，自由度消去のための行列三重積計算の負荷バランスが崩れるが，OpenMPによるスレッド並列を導入することにより，MPIのプロセス数を削減することで，数十億自由度の大規模問題への適用の目処が立ったと考えられる．

接触問題に対しては，一旦，Lagrange乗数法による定式化を行い，Lagrange乗数法で現れる対角に0を含む不定値行列に関する方程式を得た後，変位自由度をスレーブ自由度とその他の自由度に分離することにより，MPCの時と類似の手順で自由度消去を行い，正定値行列に関する方程式に変換する手法を提案した．接触問題に対しては，今回は，制約条件付き最小化問題を扱う部分に焦点をあてるため，並列化に関しては最小限の対応とし，提案手法の有効性を調査することとした．具体的には，接触する可能性のある面の組を入力データとして与えることとし，領域分割においては，入力された各接触面ペアがそれぞれ単一の領域に含まれるような分割を実施することとした．提案手法を検証例題に適用した結果，以下の結論を得た：(a) 静解析においては，対角に0がある行列をそのままILU(1)またはILU(2)前処理つきGPBiCG法によって求解した場合よりも，提案手法を適用した場合の方が高速に求解可能であることが確認された，(b) 動解析においては，対角に0がある行列をそのままILU(1)またはILU(2)前処理つきGPBiCG法によって求解した場合と比較して有意な高速化は確認されなかったが，対角に0を含まないことにより軽量な前処理が適用可能となったことで，結果として高速に求解できるケースがあることがわかった，(c) 今回扱ったのは比較的小さい規模の例題であったが，その中でも比較的規模が大きい例題では計算時間は直接法と同等もしくはより高速となっ

た．このことから，さらに大きな問題に対しては直接法と比較して大幅に有利となる可能性が高い．

MPC 問題，および，接触問題において提案したいずれの手法においても，線形ソルバーはブラックボックスとしての利用が可能である．MPC や接触は，静解析，動解析，線形，非線形，様々な問題で扱われるため，それぞれの問題に適した反復解法および前処理を利用できることが望ましい．この点において，提案手法は既存の手法にない利点を持っており，幅広い問題に対して最も効率的な解法を利用可能とする手法と言える．