(Ｉ－27)　スペクトル変換を用いた前処理付き共役勾配法の均質化法への適用

中央大学大学院　学生会員　○石川　俊明
鹿島建設（株）　正会員　宇尾　朋之
中央大学理工学部　正会員　樫山　和男

1.　はじめに

アスファルト混合物やコンクリート材料のような複合材料の内部微視構造を考慮に入れた数値解析手法として，近年，有効性が示されている均質化法[1)2)]がある．均質化法では微視構造の幾何形状を厳密にモデル化することが重要となるが，この様なモデリングに伴い大規模計算となるため計算時間が大幅に増加するという実用上の問題がある．

本報告では，上記の問題点を改善するために微視構造の数値解法に用いられている共役勾配法に高速フーリエ変換や離散ウェーブレット変換のスペクトル変換を用いた前処理を施すことを提案する．そして本前処理手法の有効性について，反復回数，計算時間および計算機容量の点から検討を行った．

2.　共役勾配法と前処理因子行列の構成

2.1.　前処理付き共役勾配法の基本的性質

いま，解くべき連立一次方程式を次式とする．

$$Ax = b \tag{1}$$

Kが正定値行列であれば$K = V^TV$となる正則な行列Vが存在する．前処理付き共役勾配法では，このVを用いて式（1)を次式のように書き換える．

$$VAV^T\bar{x} = \bar{b} \tag{2}$$

ただし，$\bar{x}$，$\bar{b}$は次式のように与えられる．

$$\bar{x} = V^{-T}x, \quad \bar{b} = Vb \tag{3}$$

以上をふまえた前処理付き共役勾配法は図-1に示すアルゴリズムとなり，その収束性は前処理因子行列Kの選択に依存する[3)]．

Initial Setup
- (A) *Initial guess for* x_0
- (B) $r_0 = b - Ax_0$
- (C) $p_0 = \bar{r}_0 = Kr_0$

Iteration Procedure
- (D) $\alpha_k = \frac{(\bar{r}_k, r_k)}{(p_k, Ap_k)}$
- (E) $x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k$
- (F) $r_{k+1} = r_k - \alpha_k A_k p_k$
- (G) *Check for convergence*
- (H) $\bar{r}_{k+1} = Kr_{k+1}$
- (I) $\beta_k = \frac{(\bar{r}_{k+1}, r_k+1)}{(\bar{r}_k, r_k)}$
- (J) $p_{k+1} = \bar{r}_{k+1} + \beta_k p_k$

図-1　前処理付き共役勾配法のアルゴリズム

2.2.　方程式の近似剛性マトリックス

均質化法で定式化された微視構造に関する支配方程式は次の条件を満たすことになる．

$$\int_Y D_{ijkl}(y)\left(\delta_{km}\delta_{ln} - \frac{\partial \chi_k^{mn}(y)}{\partial y_l}\right)\frac{\partial \nu_i^{mn}(y)}{\partial y_j}dy = 0 \tag{4}$$

ここに，Y，y，はそれぞれ微視構造の基本周期領域およびその座標系，Dは微視構造の弾性テンソル，χは巨視的な領域の変形と微視構造の基本周期領域Yの変形を結びつける特性変位関数，δはクロネッカーのデルタ記号である．

いま，近似的な逆作用素Kを求めるために，弾性テンソルdを領域内で定数の$\bar{d}$として，式（4)を整理すると式（5)ような近似剛性行列Kが表れる．本数値解析では３次元問題を取り扱うが，簡単のため２次元問題の定式化を示す．

$$K = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial y_1^2}\bar{d}_{1111} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2}\bar{d}_{1212} & \frac{\partial^2}{\partial y_1 \partial y_2}\left\{\bar{d}_{1122} + \bar{d}_{1212}\right\} \\ \frac{\partial^2}{\partial y_1 \partial y_2}\left\{\bar{d}_{2211} + \bar{d}_{1212}\right\} & \frac{\partial^2}{\partial y_1^2}\bar{d}_{1212} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2}\bar{d}_{2222} \end{bmatrix} \tag{5}$$

また，式（5)の非対角項は，y_1方向成分とy_2方向成分の連成項であるが，前処理因子としては支配的な項ではないと考えて，これを無視して考える．

$$K = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial y_1^2}\bar{d}_{1111} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2}\bar{d}_{1212} & 0 \\ 0 & \frac{\partial^2}{\partial y_1^2}\bar{d}_{1212} + \frac{\partial^2}{\partial y_2^2}\bar{d}_{2222} \end{bmatrix} \tag{6}$$

したがって，各方向成分は独立に前処理ができる．有限要素分割の格子は直交格子であることと，均質化法の微視構造に関する周期領域条件が課せられることから，式（4)をスペクトル法で離散化することを考える．それにより求められた前処理因子行列が式（7)である．

$$K = \begin{bmatrix} W^{-1} & 0 \\ 0 & W^{-1} \end{bmatrix} D' \begin{bmatrix} W & 0 \\ 0 & W \end{bmatrix} \tag{7}$$

ここに，Wは二次元スペクトル変換行列，W^{-1}はその逆変換であり，D'はスペクトル空間における方程式の微分作用素に対応する行列である．スペクトル変換としては，高速フーリエ変換と離散ウェーブレット変換を考える．

2.3.　スペクトル変換について

スペクトル空間上での１階微分作用素をrとするとD'は式（8)の様に表される．

$$D'_{ij} = \begin{bmatrix} r(i)^2\bar{d}_{1111} + r(j)^2\bar{d}_{1212} & 0 \\ 0 & r(i)^2\bar{d}_{1212} + r(j)^2\bar{d}_{2222} \end{bmatrix} \tag{8}$$

KeyWords: 共役勾配法，高速フーリエ変換，離散ウェーブレット変換，均質化法，

〒112-8551　東京都文京区春日 1-13-27，
Tel:03(3817)1815，Fax:03(3817)1803

高速フーリエ変換 (FFT)[4]

FFT の場合，$r(i)^2$は，$N \times N$の前処理因子に対して，式 (9)で表される．

$$\mathrm{r(i)}^2 = \begin{bmatrix} 0 & & & & & & \\ & -1^2 & & & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & -(N/2)^2 & & & \\ & & & & -(N/2+1)^2 & & \\ & & & & & -(N/2)^2 & \\ & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & -1^2 \end{bmatrix} \quad (9)$$

離散ウェーブレット変換 (DWT)

DWT の場合，$r(i)$ は$n \times n$の単位マトリクスを$I_{n\times n}$として式 (10)で表される．

$$\mathrm{r(i)} = \begin{bmatrix} 2^{-n}I_{1\times1} & & & & \\ & 2^{-n}I_{1\times1} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 2^{-i}I_{2^{n-i}\times2^{n-i}} & \\ & & & & \ddots \\ & & & & & 2^{-1}I_{2^{n-1}\times2^{n-1}} \end{bmatrix} \quad (10)$$

Daubechies のウェーブレットのフィルタ係数はすでに算出されており[5]，ここでは $M = 4$ を選んだ．

3. 前処理付き共役勾配法の解析パフォーマンスの検討

数値解析例として，巨視的な領域の変形と微視構造の基本周期領域の変形を結びつける特性変位関数χ (代表してχ_{11}) を算出し，そのときの反復回数，計算時間，必要計算機容量を，SCG，PCG(FFT) また，PCG(DWT) でそれぞれ算出し比較した．また，本論文においては，収束判定係数を$\varepsilon = 1.0 \times 10^{-6}$にした．

材料定数は表-1 に示すとおりである．また微視構造の有限要素分割を，表-2 に示す．使用した計算機は，IBM RS/6000 SP である．

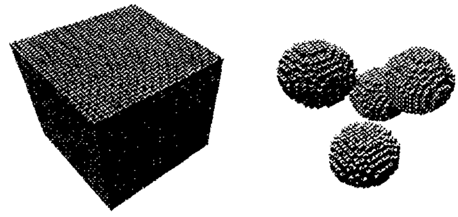
表-1 材料定数

	弾性係数 $[N/mm^2]$	ポアソン比
母材	12,800	0.31
骨材	39,200	0.33

表-2 微視構造の有限要素分割

2^N	節点数	要素数
$N=2$	$4 \times 4 \times 4 = 64$	27
$N=3$	$8 \times 8 \times 8 = 512$	343
$N=4$	$16 \times 16 \times 16 = 4096$	3375
$N=5$	$32 \times 32 \times 32 = 32768$	29791
$N=6$	$64 \times 64 \times 64 = 262144$	250047

3 種類の前処理を用いた共役勾配法により解析したときの反復回数の比較を図-3 に，計算時間の比較を図-4 に，また，実行ファイルサイズの比較を表-3 に示す．SCG を用いたとき，軸方向節点数に比例して反復回数が増加するのに対し，PCG を用いると大規模問題になるにつれ反復回数が低減収束し，またそれに伴い計算時間も大幅に短縮される．また，PCG の導入による実行ファイルサイズの増加量は，本解析モデルの規模であれば SCG 法と比べて 10 %以下に抑えることができた．



（要素数：29791）　　　　（骨材のみ）

図-2 微視構造モデル一例

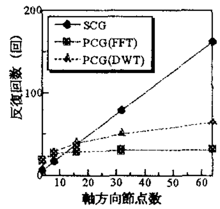


図-3 反復回数の比較

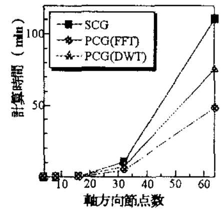


図-4 計算時間の比較

表-3 実行ファイルサイズ (MB) の比較

	SCG	PCG(FFT)	PCG(DWT)
$N=2$	0.15	0.18	0.18
$N=3$	0.36	0.41	0.42
$N=4$	2.09	2.31	2.35
$N=5$	16.02	17.62	18.01
$N=6$	129.18	140.78	141.97

4. おわりに

本論文では，均質化法に基づく数値解析の連立一次方程式の求解に用いる共役勾配法の前処理として，高速フーリエ変換と離散ウェーブレット変換を用いることを提案し，次に示す結論を得た．

1. 均質化法に基づく数値解析の求解に，FFT と DWT を用いた前処理付き共役勾配法を使用することにより，大幅に反復回数を低減でき，計算時間の短縮が実現できる．
2. 前処理因子行列の作成に伴う実行ファイルサイズの増加量は，全体の実行ファイルサイズと比較すれば，10 %以下でありさほど大きなものでない．

今後，この前処理付き共役勾配法を弾塑性・粘弾性構成則に基づいた均質化法の数値解析に適用する予定である．

参考文献

1) 七田裕, 山田貴博, 和田章: 3 次元モデルを適用した均質化法によるコンクリート材料構成則に関する基礎的考察, 構造工学における数値解析法シンポジウム論文集第 19 巻,p225-230,1995
2) 宇尾朋之, 樫山和男, 寺田賢二郎: ラプラス変換を用いた均質化理論に基づくアスファルト混合物の粘弾性解析, 土木学会応用力学論文集,Vol.1,p195-202,1998
3) 野寺隆志:大規模数値計算の最先端-クリロフ部分空間法と行列の前処理,bit 別冊インターネット時代の数学,p165-177,1997
4) 千葉利晃, 清水伸行:パソコンによるランダム信号処理, 共立出版,1994
5) 田中伸厚, 不完全離散ウェーブレット変換のポアソン方程式解法への応用と並列処理, 日本応用数理学会論文誌,Vol.7,No.4,p373-388,1997