

コンクリート材料のメソスケール解析のための高速な数値計算法

A Fast Numerical Procedure for Mesoscopic Simulation of Concrete Materials

山田貴博*・永井学志**

Takahiro YAMADA and Gakuji NAGAI

* 正会員 学博 東京理科大学助教授 工学部建築学科 (〒162-8601 東京都新宿区神楽坂 1-3)

** 博士 (工) 東京工業大学 建築物理研究センター (〒226-8503 横浜市緑区長津田 4259)

In this paper, a fast numerical procedure to analyze fundamental behaviors of concrete materials by the mesoscopic simulation is proposed. Two improvements make the proposed procedure fast. One of them is a numerical procedure based on the multiscale method in which the microscopic displacement can be calculated from the prescribed macroscopic stress directly. Another one is an effective parallel solver for the linear system derived from the image-based finite element method. The numerical properties and efficiency of the proposed procedure are also evaluated on a PC cluster.

Key Words: concrete, multiscale method, iterative solver, image-based FEM

1. 序

コンクリート材料は、建設分野において鉄と並んで主要な構造材料であり、その力学特性を詳細に把握し、コンクリート構造物の応力解析に応用することは工学上重要である。コンクリート材料は、比較的粒径の大きな砂利である粗骨材と砂をセメントによって固化させたモルタルからなる不均質な複合材料である。このようなコンクリートを複合材料として見た力学挙動については、幾何学的に複雑な微視構造における局所的な破壊に起因することから、未解明な点が多い。筆者らは、メソスケールにおける粗骨材とモルタルのモデル化を行い、その数値シミュレーションによってコンクリート材料における複雑な非線形挙動を、明らかにする事を目的として研究を進めている^{1),2),3)}。

筆者らの研究では、非常に複雑なコンクリートのメソスケールにおける微視構造の幾何学的モデル化については、菊池等によって提唱されているイメージベース有限要素法 (Image based CAE^{4),5)}) を適用している^{1),2),3)}。この手法では、メソスケールにおける粗骨材とモルタルに対して、実際のコンクリートから得られた画像データを用いて直交座標系に沿った細かい固定格子上でモデル化を行うことで、実際のコンクリートを再現した数値計算が可能となる。しかしながら、イメージベース有限要素法では、複雑な幾何学的形状を直交格子で表現するため、解くべき問題が非常に大規模となる。

一方、コンクリートのような複合材料の力学的モデル化の方法としては、均質化法^{6),7)}に代表されるマルチスケール法^{8),9)}が近年、発展してきており、筆者らの研究でも均質化法を用いている¹⁾。マルチスケール法は、構造物スケールの巨視的挙動と材料内部構造における

微視的挙動の連成を漸近解析などによって考慮する方法である。このような手法を用いて複合材料の微視構造における応力解析を行うことで、複合材料の巨視的な挙動、すなわち複合材料を均質材料と見なすための構成則を求めることが可能となってきた。特に、コンクリート材料にこのような手法を適用すれば、破壊の局所化が発生する以前の材料としての非線形性を、材料の不均質性に起因するメソスケール微視構造の破壊進行として説明できると考えられる。このような材料の基本特性を把握するための数値計算では、比較的単純な応力履歴を巨視的な応力として材料に与え、その条件における微視構造内の応力状態や破壊進行などを詳細に計算することが必要である。しかしながら、通常の均質化法では、巨視的変形状態と微視的変形状態を関係づける特性関数を求めることが必要であり、一つの巨視的な応力状態に対応する微視構造内の応力状態を決定するために微視構造について6つの基本モードに対応する計算が必要となる。したがって、単純な応力状態に対応する微視構造の変形状態を求める場合であっても、連立1次方程式の求解に反復型解法を用いた計算法では、非常に大きな計算コストを要することとなる。

以上のように、コンクリート材料のメソスケール構造における破壊進行をイメージベース有限要素法に基づく非線形解析として計算することは、大規模計算とならざるをえないため、その効率化が必須となる。そこで、本研究では、コンクリート材料の基本的特性を把握するため手法として、均質化法に基づき、巨視的な応力状態に対応する微視構造変位を効率的に求めるための手法を考える。このような計算手法として、離散化された剛性方程式レベルで巨視変数を消去することで微視構造変位のみを未知数とする連立1次方程式を

導き、反復型の解法でその求解を行う手法を提案する。また、この手法に基づくイメージベース有限要素法に対して、並列計算手法を適用することで、高速な数値解析手法を構成する。さらに本研究では、近年ローコストかつ高性能な科学技術計算環境として注目されていること PC クラスタにおいて、提案する計算手法の計算効率を検証する。

2. マルチスケール解析法

本研究では、均質化法を基本とするマルチスケール法を、材料特性評価のための力学的モデル化手法として採用する。このようなアプローチは、基本的に材料の微視構造に周期性を仮定しているが、本研究で扱うコンクリートのような微視構造に明確な周期性を有していない複合材料問題に対しても妥当な材料応答を与える手法であることが知られている⁸⁾。

2.1 均質化法^{6),7)}

構造物を表す領域 $\Omega \subset \mathbf{R}^3$ に対して、変位 u を未知関数とする弾性体の釣り合い方程式は、次式で表される。

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \{C_{ijkl}(x)E_{kl}[u(x)]\} + f_i(x) = 0 \quad \forall x \in \Omega \quad (1)$$

ここで、 $C_{ijkl}(x)$ は弾性テンソル、 f_i は物体力である。また、 $E_{ij}[u]$ は、変位からひずみテンソルを与える作用素であり、次式で表される。

$$E_{ij}[u] = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (2)$$

均質化法は、構造物スケールと材料の微視構造スケールという異なる二つのスケールの現象を考え、それらの連成を取扱うマルチスケール法である。均質化法では、構造物すなわち巨視スケールを表す座標系 x に加え、材料の内部構造を記述する微視構造スケールのための座標系 y を導入する。また、微視構造については、周期構造を仮定し、一つの周期構造を表す基本周期領域 Y を考える。

変位 u については、微視構造と巨視構造のスケールの比を表すパラメータ $\epsilon = x/y$ によって、次式のように漸近展開を行う。

$$u(x, y) = u^0(x, y) + \epsilon u^1(x, y) + \epsilon^2 u^2(x, y) + \dots \quad (3)$$

ここで、各 $u^i(x, y)$ は y について周期であるものと仮定する。また、弾性テンソルについては基本周期領域についてのみ変動するものと考え、次式のように y のみで表されるものとする。

$$C_{ijkl}(x) = C_{ijkl}(y) \quad (4)$$

このとき、(3) を釣り合い方程式(1)に代入し、 $\epsilon \rightarrow 0$ の特異摂動を考える。その結果、漸近展開の 0 次項 u^0

は、巨視スケールの座標のみで表され、 u^1 は微視構造における周期変動成分の主要項であることが分かる。また、釣り合い方程式は次のように分離される。

[微視構造に対する方程式]

$$\frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl}(y)\{E_{kl}[u^0(x)] + e_{kl}[u^1(x, y)]\}] = 0 \quad (5)$$

[巨視構造に対する方程式]

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [C_{ijkl}(y)\{E_{kl}[u^0(x)] + e_{kl}[u^1(x, y)]\}] + f_i(x) = 0 \quad (6)$$

ここで、 $e_{ij}[u]$ は、次式で表される微視構造を基準としたひずみテンソルである。

$$e_{ij}[u] = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial y_j} + \frac{\partial u_j}{\partial y_i} \right) \quad (7)$$

均質化法では、基本周期領域の関数として定義された特性関数 χ_{ij} を導入し、 u^1 に対して次式で表される変数分離を行う。

$$u^1(x, y) = \chi_{ij}(y)E_{ij}[u^0(x)] \quad (8)$$

このとき、微視構造における釣り合い方程式(5)は、各 χ_{ij} についての方程式として、次式のように書き換えられる。

$$\frac{\partial}{\partial y_j} [C_{ijkl}(y)\{\delta_{km}\delta_{ln} + e_{kl}[\chi_{mn}(y)]\}] = 0 \quad (9)$$

ここで、(9) は、3 次元問題における基本ひずみパターンに対応する 6 個の特性関数 χ_{ij} に対して独立に与えられたものである。

一方、基本周期領域における平均化を行うと巨視的な方程式は次のように書き換えられる。

$$\frac{\partial}{\partial x_j} [C_{ijkl}^H E_{kl}[u^0(x)]] = f_i(x) \quad (10)$$

ここで、次式で与えられる C_{ijkl}^H は微視構造の特性を反映した巨視的剛性である。

$$C_{ijkl}^H = \frac{1}{|Y|} \int_Y C_{ijmn}(y)\{\delta_{mk}\delta_{nl} + e_{mn}[\chi_{kl}(y)]\} dy \quad (11)$$

また、 $|Y|$ は Y の体積を表す。この巨視剛性を求めるためには、まず (m, n) についての 6 個の組み合わせを考えた(9) で与えられる微視構造に対する問題を解き、すべての特性関数 χ_{ij} が求めておかなければならない。

微視的構造の変形状態は、巨視構造の応力解析の結果として得られた巨視的ひずみ $E_{kl}[u^0(x)]$ を用い、式(8)から計算される。さらに、微視構造における応力は次式から求められる。

$$\sigma_{ij}(x, y) = C_{ijkl}(y)\{E_{kl}[u^0(x)] + e_{kl}[\chi_{mn}(y)E_{mn}[u^0(x)]]\} \quad (12)$$

このように通常の均質化法に基づく計算手法では、巨視的な剛性、巨視的ひずみを求めてから微視的な応力、ひずみを求めることとなる。このような手続きにしたがった従来の計算法^{6),7)}を、本論文では以後「均質化剛性法」と呼ぶ。

2.2 巨視応力既定問題

複合材料の基本的な特性を把握するための計算を想定し、巨視的な応力が既定された状態での微視構造内の応力を求める問題を考える。この場合、均質化法における巨視的な方程式(11)は、与えた巨視的応力 $\hat{\sigma}_{ij}$ に対応する巨視的なひずみ $\hat{E}_{kl}$ を求める問題として次の線形方程式により表される。

$$C_{ijkl}^H \hat{E}_{kl} = \hat{\sigma}_{ij} \quad (13)$$

この場合、一旦巨視的な方程式に変換してから問題を解くため、1つの単純な巨視的応力状態に対応する微視的応力状態を決定する場合にも、特性関数から巨視的剛性を求めておく必要があり、前節のように6つの基本モードに対応する計算が必要となる。しかしながら、ここで考える問題では、あらかじめ巨視的応力状態が与えられていることから、どんな応力状態にも対応できる巨視的剛性を求める必要はない。また、巨視的剛性を求めるための特性関数の計算を省略できれば、計算効率が大幅に改善されるものと考えられる。そこで本研究では、与えられた巨視的応力に対応する微視的な応力、ひずみを直接求める問題を考える。本研究では、巨視的な応力が既定された微視構造の問題(5)(13)を Suquet らの定式化したマルチスケール手法⁹⁾に従い、巨視的ひずみ $\hat{E}_{ij}$ と微視的な変位の変動成分 u^1 を未知数として、次のように考える。

$$\frac{1}{|Y|} \int_Y C_{ijkl} \{ \hat{E}_{kl} + e_{kl}[u^1(y)] \} dy = \hat{\sigma}_{ij} \quad (14)$$

$$\frac{\partial}{\partial y_j} \left[C_{ijkl}(y) \{ \hat{E}_{kl} + e_{kl}[u^1(y)] \} \right] = 0 \quad (15)$$

この方程式を連立させて解き、 $\hat{E}_{ij}$ と u^1 を求める。このとき、微視構造における応力状態は(12)と同様に、次式で求められる。

$$\sigma_{ij}(y) = C_{ijkl}(y) \{ \hat{E}_{kl} + e_{kl}[u^1(y)] \} \quad (16)$$

2.3 有限要素近似

上述の問題について有限要素近似を行う。問題(15)において、 u^1 に対する許容変数 v を導入し、弱定式化を行うと次式となる。

$$\int_Y C_{ijkl}(y) e_{ij}[v(y)] \left[\hat{E}_{kl} + e_{kl}[u^1(y)] \right] dy = 0 \quad (17)$$

さらに、Galerkin 法に基づき、 u^1 と v の有限要素近似を行う。 u^1 に対する節点変位ベクトルを $\mathbf{u}$ とし、次式

で表される変位-ひずみ変換行列 $\mathbf{B}$ を導入する。

$$\{e_{ij}[u^1(y)]\} = \mathbf{B}\mathbf{u} \quad (18)$$

また、弾性テンソルに対応する行列と、巨視的ひずみ、応力に対応するベクトルをそれぞれ

$$\mathbf{D} = [C_{ijkl}(y)], \quad \mathbf{E} = \{\hat{E}_{ij}\}, \quad \mathbf{S} = \{\hat{\sigma}_{ij}\} \quad (19)$$

と表す。その結果、(14)(17)は次式のように行列表現される。

[微視構造に対する方程式]

$$\mathbf{K}\mathbf{u} + \bar{\mathbf{K}}\mathbf{E} = \mathbf{0} \quad (20)$$

[巨視構造に対する方程式]

$$\bar{\mathbf{K}}^t \mathbf{u} + \bar{\mathbf{K}}\mathbf{E} = \mathbf{S} \quad (21)$$

ここで、

$$\mathbf{K} = \frac{1}{|Y|} \int_Y \mathbf{B}^t \mathbf{D} \mathbf{B} dy \quad (22)$$

$$\bar{\mathbf{K}} = \frac{1}{|Y|} \int_Y \mathbf{B}^t \mathbf{D} dy \quad (23)$$

$$\bar{\bar{\mathbf{K}}} = \frac{1}{|Y|} \int_Y \mathbf{D} dy \quad (24)$$

である。(20)(21)をまとめると、次式のように表される。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \bar{\mathbf{K}} \\ \bar{\mathbf{K}}^t & \bar{\bar{\mathbf{K}}} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{E} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{S} \end{Bmatrix} \quad (25)$$

したがって、この連立一次方程式を解けば、巨視的応力を既定した状態における巨視的ひずみと微視構造の変動変位成分が決定できる⁹⁾。

2.4 静的縮約

連立一次方程式(25)は、 $\mathbf{u}$ と $\mathbf{E}$ を未知数として一度に解くことも可能であるが、ここでは、どちらかの変数を先に消去する静的縮約を行って解く方法に注目する。

まず、 $\mathbf{u}$ を先に消去することを考えると、次式が得られる。

$$\mathbf{u} = -\mathbf{K}^{-1} \bar{\mathbf{K}}\mathbf{E} \quad (26)$$

このとき、 $\mathbf{E}$ のみを未知数とする方程式は次式として得られる。

$$(\bar{\bar{\mathbf{K}}} - \bar{\mathbf{K}}^t \mathbf{K}^{-1} \bar{\mathbf{K}}) \mathbf{E} = \mathbf{S} \quad (27)$$

いま、 $-\mathbf{K}^{-1} \bar{\mathbf{K}}$ を求めることは、 $\mathbf{K}\mathbf{X} = -\bar{\mathbf{K}}$ を解くことであり、次式と表される。

$$\mathbf{K}\mathbf{X} + \bar{\mathbf{K}}\mathbf{I} = \frac{1}{|Y|} \int_Y \mathbf{B}^t \mathbf{D} (\mathbf{B}\mathbf{X} + \mathbf{I}) dy = \mathbf{0} \quad (28)$$

ここで、 $\mathbf{I}$ は単位行列である。(28) は、 $\mathbf{X} = [x_{ij}]$ とした特性関数を求める問題(9) に対応している。したがって、

$$\bar{\mathbf{K}} - \bar{\mathbf{K}}^t \mathbf{K}^{-1} \bar{\mathbf{K}} = \frac{1}{|\mathbf{Y}|} \int_{\mathbf{Y}} (\mathbf{D} - \mathbf{D}\mathbf{B}\mathbf{X}) d\mathbf{y} \quad (29)$$

は、均質化剛性法において巨視的な剛性を求める式(11)の離散化表現に他ならない。

一方、 $\mathbf{E}$ を先に消去することを考えると、次式が得られる。

$$\mathbf{E} = \bar{\mathbf{K}}^{-1} (-\bar{\mathbf{K}}^t \mathbf{u} + \mathbf{S}) \quad (30)$$

このとき、 $\mathbf{u}$ のみを未知数とする方程式は次式として得られる。

$$(\mathbf{K} - \bar{\mathbf{K}}\bar{\mathbf{K}}^{-1}\bar{\mathbf{K}}^t)\mathbf{u} = -\bar{\mathbf{K}}\bar{\mathbf{K}}^{-1}\mathbf{S} \quad (31)$$

これより、与えられた巨視的応力 $\hat{\sigma}_{ij}$ から直接微視的な変位の変動成分 u^1 を求めることが可能となる。また、微視構造における応力状態は、(30) により $\mathbf{u}$ から $\mathbf{E}$ を求めることにより、(16) によって求めることができる。本研究では、この手法を「直接応力制御法」と呼ぶ。

このような手続きにより得られた結果は、従来の均質化剛性法を用いて求めた解と一致することは明らかである。また、有限要素近似についても、特別な制限は生じない。したがって、次節で述べるイメージベース有限要素法において、解を改良するために提案されている混合型要素²⁾をこの直接応力制御法に適用することも可能である。

2.5 連立1次方程式の反復解法

与えられた巨視的応力から微視的な変位を直接求める方程式(31)で現れた行列 $\mathbf{K} - \bar{\mathbf{K}}\bar{\mathbf{K}}^{-1}\bar{\mathbf{K}}^t$ は、一般に密行列となる。したがって、(31)をLU分解のような直接法で解くことは、大規模な問題では困難である。そこで、方程式(31)を解くために、反復型の連立1次方程式の解法を導入することを考える。有限要素法による大規模問題に対する反復型解法では、全体行列を組み立てることなく、要素毎にベクトルと行列の積を計算する Element by Element (EBE) 法が少ない記憶容量で並列処理が可能であることから広く用いられている。本研究でも、EBE法を用いた並列処理を採用することとし、このような計算技法を前提に計算アルゴリズムを検討を行う。

クリロフ空間法に基づく反復型の解法¹²⁾では、係数行列とベクトルの積を繰り返し計算することにより、未知ベクトルの近似値が求められる。ここで、行列とベクトルの積 $(\mathbf{K} - \bar{\mathbf{K}}\bar{\mathbf{K}}^{-1}\bar{\mathbf{K}}^t)\mathbf{u}$ の計算では、 $\mathbf{K}\mathbf{u}$ と $\bar{\mathbf{K}}\bar{\mathbf{K}}^{-1}\bar{\mathbf{K}}^t\mathbf{u}$ の計算を別々に行えばよい。

$\mathbf{K}\mathbf{u}$ の計算は、通常の有限要素法に反復型の解法を適用した場合と同じであり、通常用いられている EBE 法や並列計算の手法が、そのまま適用可能である。

一方、 $\bar{\mathbf{K}}\bar{\mathbf{K}}^{-1}\bar{\mathbf{K}}^t\mathbf{u}$ については、

$$\begin{aligned} \mathbf{w}_1 = \bar{\mathbf{K}}^t \mathbf{u} &\longrightarrow \mathbf{w}_2 = \bar{\mathbf{K}}^{-1} \mathbf{w}_1 \\ &\longrightarrow \mathbf{w}_3 = \bar{\mathbf{K}} \mathbf{w}_2 = \bar{\mathbf{K}}\bar{\mathbf{K}}^{-1}\bar{\mathbf{K}}^t \mathbf{u} \end{aligned}$$

と分解して、計算すればよい。いま、(23) より、 $\bar{\mathbf{K}}^t$ は微視的な変位場から求めた応力を平均化する行列を意味し、その大きさは(微視変位の節点自由度) $\times 6$ となる。したがって、この行列を記憶しておくことは、大規模計算においても困難ではない。また、(24) より、 $\bar{\mathbf{K}}$ は基本周期領域における剛性の単純平均を意味する 6×6 の行列である。したがって、 $\bar{\mathbf{K}}^{-1}$ の計算および記憶も容易なものとなっている。さらに、これらの計算は後に述べる領域分割型の並列処理で実行可能である。

以上より、直接応力制御法は反復型の連立1次方程式の解法を導入することで、通常の有限要素解析と同程度の計算コストで数値計算が可能であり、EBE法や並列処理なども適用できる。

3. イメージベース有限要素法

3.1 コンクリート材料の幾何学的モデル化

コンクリート材料における粗骨材-モルタル構造は、原材料が自然物であるため、非常に複雑な3次元構造を有する。したがって、微視構造の幾何学的なモデル化が非常に困難であることから、簡略化モデルを仮定し、その有限要素分割を行った疑似モデルを用いる例が多かった¹⁰⁾。しかしながら、このような方法では、微視構造の幾何学的特徴が失われ、その解析結果は妥当なものとはならない¹⁾。そこで、解析対象を直交座標系に沿った細かい固定格子上で標本化したデジタル画像として扱い、デジタル画像の画素を有限要素とみなすイメージベース有限要素法^{4),5)}を適用すれば、図-1に示すように、構造の複雑さに関係なく正確かつ一律に解析モデルを作成することが可能となる¹⁾。筆者らは、コンクリート材料について、コンクリート塊の断面を順次研磨してその画像を取り込んでいくことにより3次元画像を得ている¹⁾。解析モデルは、この画像を画像処理手法¹⁾により数値計算上の不都合を取り除くことで、図-2の様に得られる。本研究では、この画像の画素(ボクセル)を、それぞれ3重1次8節点要素に対応させることにより有限要素近似を行う。

このようなイメージベース有限要素法を用いた場合、コンクリート材料のメソスケール構造を直交メッシュで表現するためには、少なくとも 64^3 程度の分割を行ったモデルを使う必要があると考えられる¹⁾。このとき、解くべき連立一次方程式の未知数は数十万から数百万に達し、非線形問題ではこのような方程式を数千回解く必要が生じる。したがって、このような手法を実際に用いるためには、効率的な連立一次方程式の解法が必要となる。

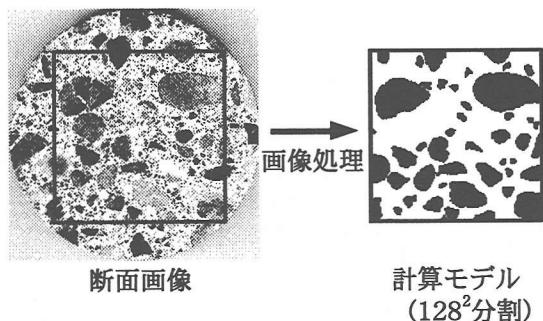


図-1 イメージベース有限要素法

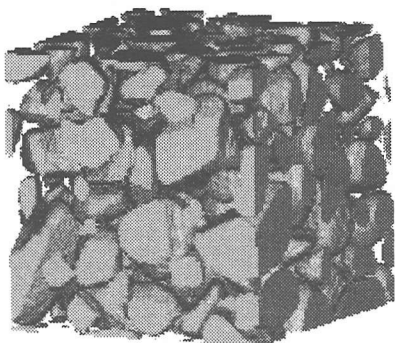


図-2 コンクリートの3次元画像

3.2 前処理付き共役勾配法

2.5で述べたように、直接応力制御法で現れる連立一次方程式の特徴から、求解法として反復型の解法を用いることとなる。本研究における反復型解法としては、弾性体の問題で現れるような正定値対称行列に対して最適とされている共役勾配法を考える。

共役勾配法では、適切な近似逆行列を前処理作用素として導入することにより収束の速さを改善することができる¹²⁾が、EBE法を用いた場合には、不完全コレスキー分解のような組み立てられた行列を操作する汎用的な前処理手法を適用することは困難である。一方、イメージベース有限要素解析では、要素分割は一樣な直交メッシュであるものとして決まっていることから、必ずしも任意の要素分割に対応できる汎用的な前処理を考える必要はない。そこで、一樣な直交メッシュであることを利用し、EBE法に適合したものとして、筆者らの提案したスペクトル法に基づく近似逆行列を前処理に用いる手法^{1), 11)}を採用する。特に本研究では、弾性体の問題はポアソン方程式と同じ楕円型の境界値問題となっていることから、ラプラス作用素の逆作用素をスペクトル法により構成し、前処理因子として用いることとする。

スペクトル法に基づく前処理では、共役勾配法で現れる残差力ベクトルを位置の関数となるベクトル場と考え、その x_i 方向成分を R_i と表すものとする。このとき、次のステップで近似ベクトルの探索に用いる方

向ベクトルもベクトル場と考え Z_i とする。前処理としてラプラス作用素の逆作用素を用いることから、 Z_i と R_i は次式の定係数のポアソン方程式を満たすものとする。

$$\Delta Z_i = R_i \quad (32)$$

ここで、

$$\Delta = \frac{\partial}{\partial x_1^2} + \frac{\partial}{\partial x_2^2} + \frac{\partial}{\partial x_3^2}$$

はラプラス作用素である。イメージベース有限要素法で現われる一樣な直交メッシュ上の節点値は、空間的に等間隔のサンプリング点となっていることから、多次元の高速フーリエ変換 (FFT) を用いてモード分解することが可能である。そこで、方程式(32)の求解を高速フーリエ変換によって変換された波数空間で求め、逆変換で物理空間に戻したものをサンプリング点すなわち節点におけるベクトルの値とする。この前処理は、フーリエモードによって残差ベクトルのスケールリングを行っていることに他ならない。

4. 並列計算法

本研究では、並列処理手法として、解析領域を分割し代数方程式レベルで並列化を行う方法を採用する。領域分割の方法としては、立方体領域となる材料の構造を考えるためのイメージベース有限要素法の解析領域について、図-3のように一方向のみ並列化のための分割を行う。このとき、分割された領域は正方形板状となることから、このような分割方法はスラブ分割と呼ばれている。分割された各領域は、独立した計算ノードに割り当てられる。

要素剛性行列についての計算と共役勾配法におけるEBE法に基づく行列とベクトルの積の計算については、分割された領域毎に行われ、分割された領域間境界についてのみ、隣接する領域を担当する計算ノード間で通信によってデータが交換される。また、マルチスケール解析においては、すべての境界に対して微視構造変位は周期境界条件が課せられることから、各計算ノードの処理および通信はすべて同じものとなる。したがって、これらの計算においては、計算、通信とも競合することなく並列化が可能となる。

一方、3.2で述べたスペクトル法に基づく共役勾配法の前処理では、3次元のFFTを行う必要がある。3次元FFTは、基本的に同一直線上のサンプリング点について行われる1次元FFTを3方向について繰り返すことにより計算できる。領域をスラブ分割した場合は、分割されたスラブの面内方向についての2方向のFFTは領域ごとに並列計算可能であるが、残る1方向については、図-4のように一旦分割方向を変えた形で再配分し、再配分された領域ごとに1次元FFTを実行す

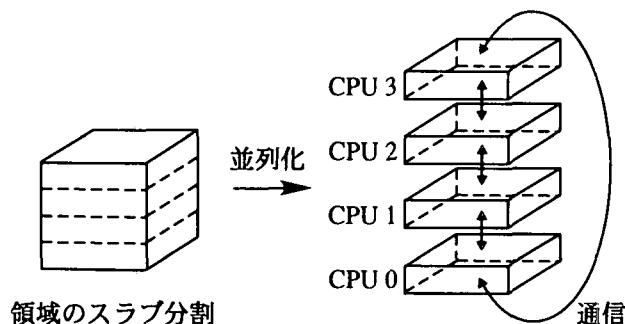


図-3 領域のスラブ分割と並列化

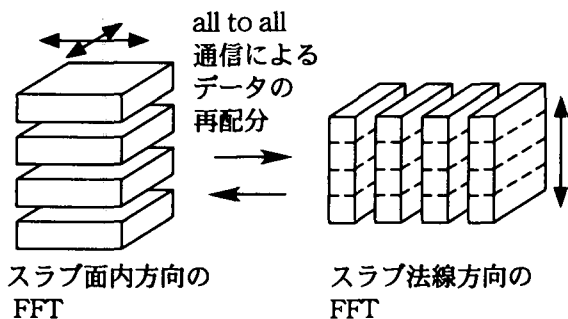


図-4 3次元FFTの並列化

ることが必要となる。特にデータの再配分においては、すべての計算ノードがそれぞれ他のすべての計算ノードへデータを送る all to all 通信が発生することに注意しなければならない。

5. 数値実験

解析例としては、コンクリートの3次元画像¹⁾である図-2に示す128³モデルと、その8分の1を取り出した64³モデルを用いる。材料定数は普通コンクリートに対応する表-1の物性値を用いる。

表-1 材料定数

	ヤング率	ポアソン比
粗骨材	5.4×10^5	0.15
モルタル	2.4×10^5	0.19

計算環境としては、近年ローコストかつ高性能な並列計算システムとして注目されている Beowulf 型¹³⁾のPCクラスタを用いる。本研究で用いているPCクラスタの仕様は表-2の通りであり、汎用的な部品のみによって構成されたシステムである。

並列処理は、MPI (Message-Passing Interface) による SPMD (Single-Program Multiple-Data) モデルによって記述する。本研究で用いたシステムは、1つの計算ノードに2つのCPUが共有メモリ型システムとして結合されたものであるが、プログラミングにおいては、それぞれのCPUを独立した計算ノードと見なし、16個の計算ノードを有する分散メモリ型システムとして

表-2 PCクラスタの仕様

計算ノード (×8)	CPU: Intel Pentium II 450MHz	
	×2	
ノード間 通信装置	メモリ: 256MB	HDD: 3.2GB
	100base-TX PCI NIC 100base-TX スイッチングハブ (24ポート)	
ソフトウェア	OS:	Redhat Linux 6.0 (kernel 2.2.12)
	コンパイラ:	gcc 2.7.2 Absoft Pro Fortran 6.0
	ライブラリ:	MPICH 1.2.0

MPIのみで通信を行うものとした。

また本研究では、プログラムの実行開始から終了までの経過時間を計算時間とし、計算効率の評価を行った。ただし、計算時間測定時においては、数値計算以外の処理のオーバーヘッドを減少させるため、結果の出力を抑制した。

5.1 反復解法の特性

表-3に均質化剛性法と本研究で提案する直接応力制御法による手法による共役勾配法の反復回数と計算時間を示す。ここで、128³モデルに対しては、各計算ノードにつき1つのCPUを用いた8CPUによる並列計算とした。反復回数は、どちらも50回程度で同様であり、筆者らが開発した前処理付き共役勾配法^{1),11)}によって求解を行う上では、方程式の係数行列の性質はほぼ同等となっていることが分かる。また、直接応力制御法では、一つの方程式の求解に要する計算量は多くなっているが、直接巨視的応力から微視的変位が計算できることから、全体としての計算時間は、均質化剛性法を用いた場合より5倍程度高速となっている。さらに、均質化剛性法による結果と直接応力制御法の結果が完全に一致することも確認された。

表-2の材料定数について、モルタルのヤング率のみを変えた場合の直接応力制御法の反復回数を表-3に示す。この表から、粗骨材に対してモルタルのヤング率が小さくなると反復回数が増えることがわかる。これは、材料定数の比によって複合材料の剛性マトリックスの条件数が変化すること¹⁴⁾に起因するものであると考えられる。したがって、材料定数が比較的近い材料によって構成されるコンクリートの場合は、本手法は非常に効率的であるが、他の複合材料に適用するには注意が必要であると言える。また、非線形解析において局所的な破壊が進行した状態では、材料定数の比が開くのと同様な状況が生まれるため、計算効率が低下する可能性が高いが、表-3から数千回の反復を行

えば、連立一次方程式の求解は可能であると考えられる。このときの未知数の数が約 80 万であることを考慮すると、このような反復回数は比較的少ないものとも言える。

計算例の一つとして、64³ モデルのコンクリートモデルに巨視的な一軸圧縮応力を作用させた場合についての本手法で計算した最大主応力の分布を図-5に示す。この図から、コンクリート材料の幾何学的に複雑なメソスケール構造における応力状態が、本手法により計算できていることが確認できる。

以上のように、本手法はメソスケール構造における局所的な破壊を考慮したコンクリート材料の数値シミュレーションのための手法としては十分効率的であるものとする。

表-3 手法と反復回数

計算モデル	計算手法	反復回数	計算時間
64 ³	均質化剛性法	49,49,48 50,49,50	1765 秒 (1 CPU)
	直接応力制御法	49	343 秒 (1 CPU)
128 ³	均質化剛性法	48,48,48 49,49,49	2348 秒 (8 CPU)
	直接応力制御法	49	472 秒 (8 CPU)

表-4 材料定数と反復回数

モルタルのヤング係数	反復回数
2.4×10^5	49
2.4×10^4	163
2.4×10^3	505
2.4×10^2	1438

5.2 並列化効率

提案する計算手法について、図-5にPC クラスタによる並列化効率を計算時間によって示す。これより、直接応力制御法は均質化剛性法に基づく手法と同程度の良い並列化効率を示すことが分かる。4で述べたように、スペクトル分解に基づく前処理付共役勾配法を用いた並列計算では、領域全体の節点値に対して all to all 通信を必要とする多次元の高速フーリエ変換が行われる。本研究で用いた PC クラスタは、計算ノード間の通信速度が比較的低速なものであることから、モデルの大きさに比べ領域分割数が多くなる 64³ モデルを 1 ノードにつき 1 CPU を用い 8 CPU で計算した場合、このような通信の結果、並列化効率の低下している。また、1つの計算ノードが有する2つのプロセッサを同時に用いた場合は、all to all 通信時において同一計算

ノード内の2つのCPUが競合して通信を行うこととなり、その結果としてノード間通信が飽和し、効率が大幅に低下することとなっている。これらの all to all 通信による計算効率の低下は、ノード間通信ハードウェアの高速化やノンブロッキング通信による通信遅延の隠ぺい¹⁵⁾により緩和されるものと考えられる。

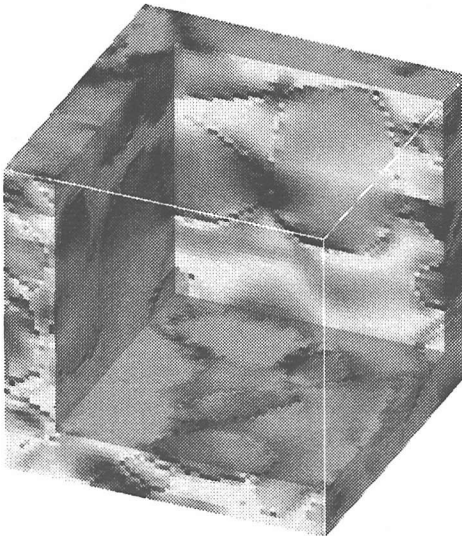


図-5 数値計算例
(64³ モデル、一軸圧縮、最大主応力分布)

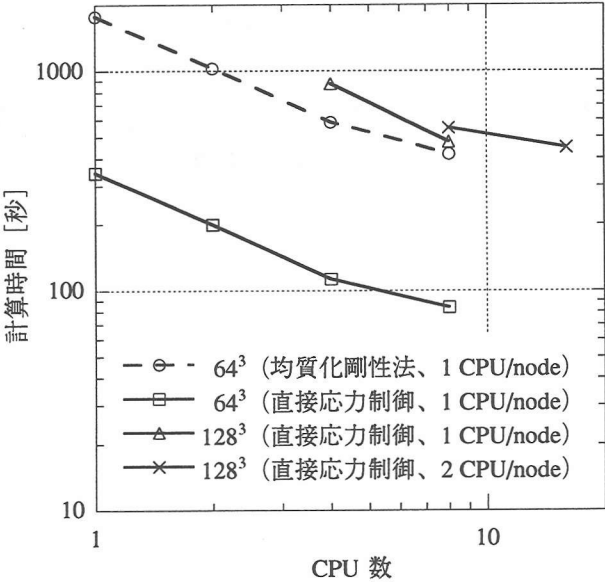


図-6 並列化効率

6. 結び

本研究では、コンクリート材料の基本的特性把握を目的として、均質化法に基づくイメージベース有限要素法を用いたメソスケール解析のための数値計算手法の効率化について議論した。このような問題のための効率的な数値計算手法として、与えられた巨視応力に対する微視構造変位を、巨視変数を消去して導かれた

代数方程式を反復型求解法により解く直接応力制御法を提案した。本手法に、スペクトル法に基づくFFTを用いた前処理付き共役勾配法とElement by Element法に基づく並列計算法を適用して構築された数値解法は、PC クラスタにおいて優れた並列計算効率を示す高速な数値計算手法であることが確認された。今後は、微視構造における局所的な破壊を考慮した非線形解析に本手法を適用していく予定である。

参考文献

- 1) 永井学志, 山田貴博, 和田章: 3次元実画像データに基づくコンクリート材料の有限要素解析手法, 日本建築学会構造系論文集, 509, 77-82, 1998.
- 2) 永井学志, 山田貴博, 和田章: 階層型デジタル画像に基づく粗骨材-モルタル界面を考慮したコンクリート材料の非線形有限要素解析手法, 日本建築学会構造系論文集, 528, 91-98, 2000.
- 3) 永井学志, 山田貴博, 和田章: コンクリート材料の圧縮破壊解析のための三次元イメージベース有限要素解析手法, 計算工学講演会論文集, 5, 767-770, 2000.
- 4) S.J. Holister and N. Kikuchi, Homogenization theory and digital imaging: a basis for studying the mechanics and design principles of one tissue, *Biotech. Bioeng.*, 43, 586-596, 1994.
- 5) 関口美奈子, 菊地昇: "イメージベーストCAEの基本的な考え方," 計算工学講演会論文集, 4, 183-186, 1999.
- 6) G. Duvaut: Homogenization et matériaux composites, in: P.G. Ciarlet and M. Rousseau, eds., Trends and Applications of Pure Mathematics to Mechanics, Lecture Notes in Physics, No. 195, Springer, Berlin, 1984.
- 7) J. M. Guedes and N. Kikuchi, "Preprocessing and postprocessing for materials based on the homogenization method with adaptive finite element methods", *Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg.*, 83, 143-198, 1990.
- 8) 寺田賢二郎, 堀宗朗, 京谷孝史: 非均質材料のためのマルチスケール解析モデリングについて, 応用力学論文集, 1, 177-184, 1998.
- 9) J.C. Michel, H. Moulinec and P. Suquet, "Effective properties of composite materials with periodic microstructure: a computational approach," *Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg.*, 172, 109-143, 1999.
- 10) 七田裕, 山田貴博, 和田章: 均質化法による微視構造を考慮したコンクリート材料の非線形解析, 計算工学講演会論文集, 1, 505-508, 1996.
- 11) G. Nagai, T. Yamada and A. Wada, "Accurate modeling and fast solver for the stress analysis of concrete materials based on digital image processing technique", *Int. J. Comp. Civil Struc. Eng.*, 1, 2000 (in press).
- 12) 藤野清次, 張紹良: 反復法の数理, 朝倉書店, 1996.
- 13) <http://beowulf.gsfc.nasa.gov/>
- 14) N. S. Bakhvalov, A. V. Knyazev, and R. R. Parashkevov: An efficient iterative method for solving Lamé equations for nearly incompressible media and Stokes equations with highly discontinuous coefficients, technical report UCD-CCM 120, University of Colorado at Denver, 1997.
- 15) P. S. Pacheco: Parallel programming with MPI, Morgan Kaufmann, 1997.

(2000年4月21日受付)