

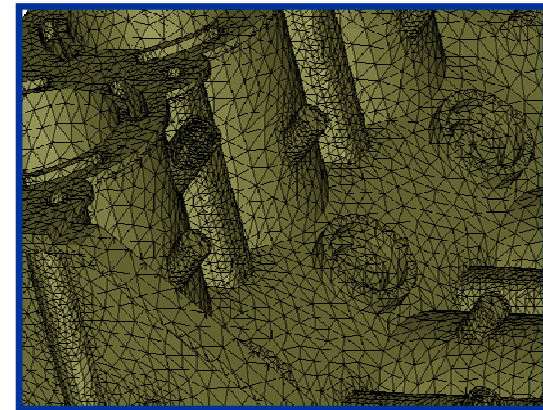
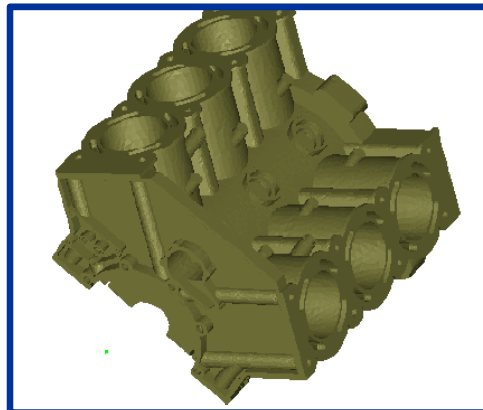
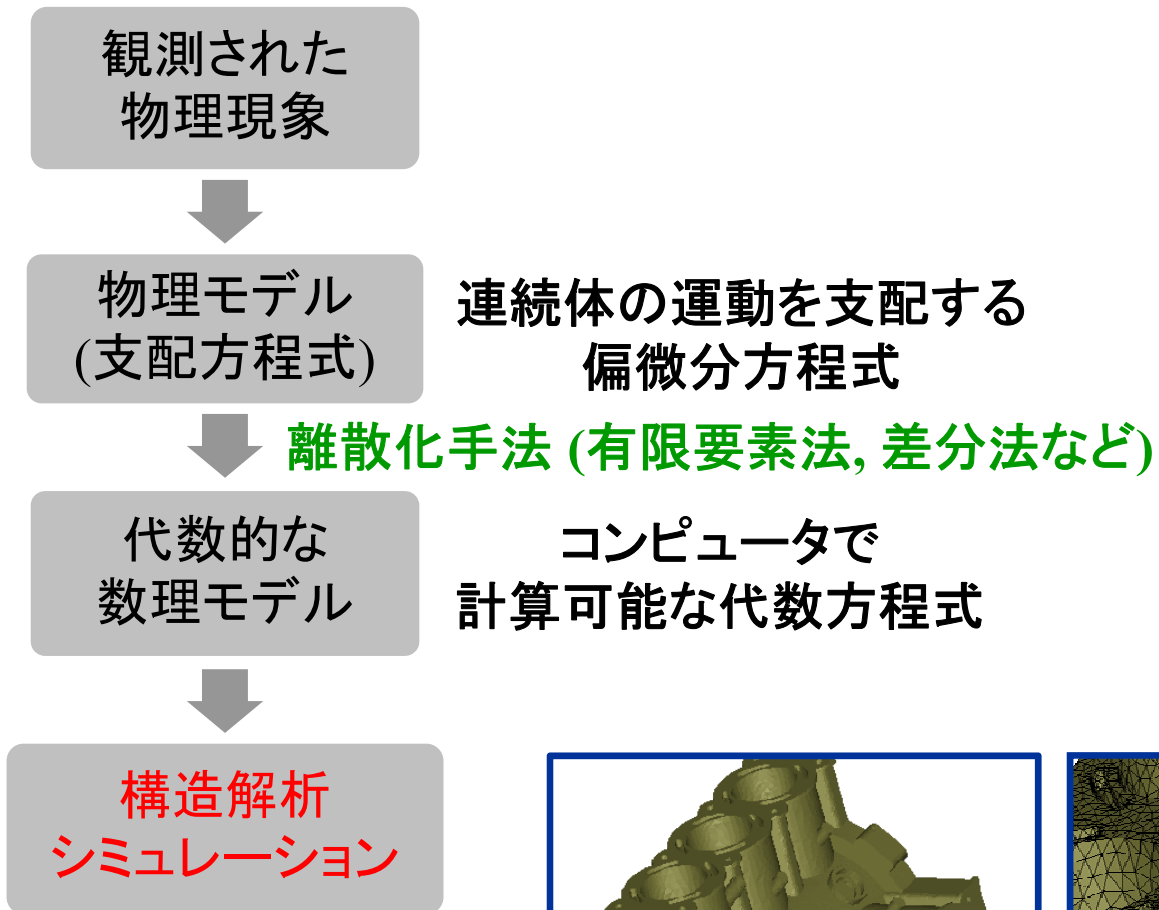
FrontISTRと利用可能なソフトウェア

2017年4月28日

第35回FrontISTR研究会

＜FrontISTRの並列計算ハンズオン～精度検証から並列性能評価まで～＞

構造解析シミュレーション (1/7)



解析対象

構造解析シミュレーション (2/7) : 物理モデル

- 変形は微小変形を仮定
- 材料は線形弾性体で近似

(つり合い方程式)

$$\rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b}$$



$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \rho \mathbf{b} = 0$$

(線形弾性体の構成方程式)

$$\boldsymbol{\sigma} = \lambda (\text{tr } \boldsymbol{\varepsilon}) \mathbf{I} + 2\mu \boldsymbol{\varepsilon}$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} \left\{ \nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T \right\}$$

(境界条件)

$$\begin{cases} \mathbf{u} = \underline{\mathbf{u}} & \text{on } S_u \\ \mathbf{t} = \underline{\mathbf{t}} & \text{on } S_t \end{cases}$$

$$\nabla : \text{ナブラ [1/m]} \quad \nabla = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$$

$\boldsymbol{\sigma}$: 応力テンソル [Pa] 物体内部に働く
単位面積当たりの力

ρ : 密度 [kg/m³]

$\mathbf{b}$: 単位質量当たりの体積力 [m/s²]

$\boldsymbol{\varepsilon}$: 微小ひずみテンソル [-] 元の状態からの
変形の割合

$\mathbf{u}$: 変位 (未知量) [m] 元の状態から
どの程度変形したか

$\mathbf{I}$: 恒等テンソル [-]

λ, μ : Lamé 定数 [Pa]

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \quad \mu = \frac{E}{2(1+\nu)}$$

E : Young率 [Pa] どの程度硬いか

ν : Poisson比 [-]

$\mathbf{t}$: トラクションベクトル [Pa]

構造解析シミュレーション (3/7) : 物理モデル

(つり合い方程式)

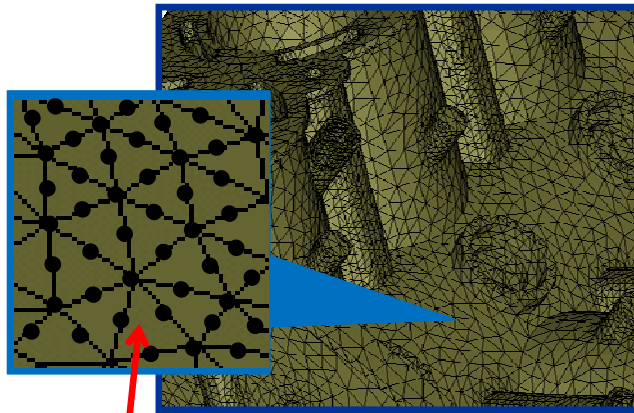
$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial z} + \rho b_x = 0 \\ \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zy}}{\partial z} + \rho b_y = 0 \\ \frac{\partial \sigma_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} + \rho b_z = 0 \end{cases}$$

(線形弾性体の構成方程式)

$$\begin{cases} \sigma_{xx} = \lambda (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + 2\mu \varepsilon_{xx} \\ \sigma_{yy} = \lambda (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + 2\mu \varepsilon_{yy} \\ \sigma_{zz} = \lambda (\varepsilon_{xx} + \varepsilon_{yy} + \varepsilon_{zz}) + 2\mu \varepsilon_{zz} \\ \sigma_{xy} = \sigma_{yx} = 2\mu \varepsilon_{xy} \\ \sigma_{yz} = \sigma_{zy} = 2\mu \varepsilon_{yz} \\ \sigma_{zx} = \sigma_{xz} = 2\mu \varepsilon_{zx} \end{cases}$$

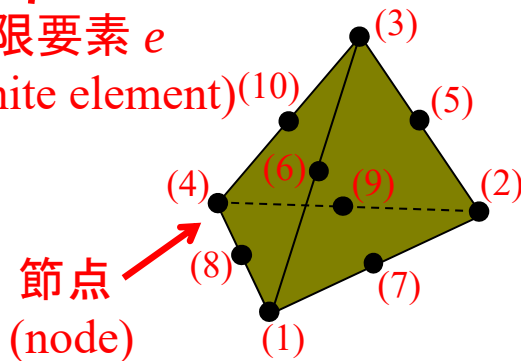
$$\begin{cases} \varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x} \\ \varepsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y} \\ \varepsilon_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z} \\ \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right) \\ \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zy} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_z}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial z} \right) \\ \varepsilon_{zx} = \varepsilon_{xz} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} \right) \end{cases}$$

構造解析シミュレーション (4/7) : 数理モデル



解析メッシュ

有限要素 e
(finite element)



n : 要素内の節点数
 V^e : 要素の体積

N : 全節点数
 M : 全要素数

有限要素法 (Finite Element Method) による離散化

$$\underbrace{\mathbf{K}}_{3N \times 3N} \underbrace{\mathbf{u}}_{3N \times 1} = \underbrace{\mathbf{f}}_{3N \times 1}$$

連立一次方程式

全体剛性
マトリックス

$$\underbrace{\mathbf{K}}_{3N \times 3N} = \underbrace{\mathbf{A}}_{M} \sum_{e=1}^M \underbrace{\mathbf{K}^e}_{3n \times 3n},$$

要素剛性
マトリックス

$$\underbrace{\mathbf{K}^e}_{3n \times 3n} = \int_{V^e} \underbrace{\mathbf{B}^T}_{3n \times 6} \underbrace{\mathbf{D}}_{6 \times 6} \underbrace{\mathbf{B}}_{6 \times 3n} dV$$

アセンブリ記号 (要素マトリックス成分を全体マトリックス成分へ足し込む)

変位ベクトル (未知量)

$$\underbrace{\mathbf{u}}_{3N \times 1} = (u_x^1 \ u_y^1 \ u_z^1 \ u_x^2 \ u_y^2 \ u_z^2 \ \cdots \ u_x^I \ u_y^I \ u_z^I \ \cdots \ u_x^N \ u_y^N \ u_z^N)^T$$

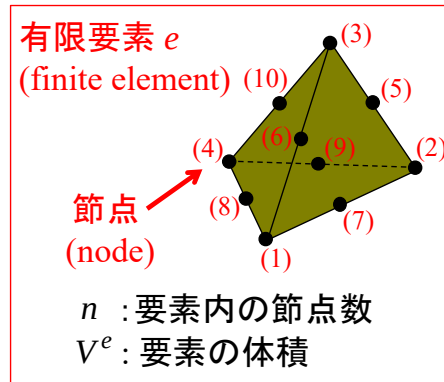
全体外力
ベクトル

$$\underbrace{\mathbf{f}}_{3N \times 1} = \underbrace{\mathbf{A}}_M \sum_{e=1}^M \underbrace{\mathbf{f}^e}_{3n \times 1},$$

要素外力
ベクトル

$$\underbrace{\mathbf{f}^e}_{3n \times 1} = \oint_{\partial V^e} \underbrace{\mathbf{N}^T}_{3n \times 3} \begin{pmatrix} t_x \\ t_y \\ t_z \end{pmatrix} dS + \int_{V^e} \underbrace{\mathbf{N}^T}_{3n \times 3} \rho \begin{pmatrix} b_x \\ b_y \\ b_z \end{pmatrix} dV$$

構造解析シミュレーション (5/7): 数理モデル



アイソパラメトリック要素

補間関数

$$u(\xi) = \sum_{I \in \Omega} N^I(\xi) u^I$$

変位

写像関数

$$x(\xi) = \sum_{I \in \Omega} N^I(\xi) x^I$$

物理空間
座標

計算空間
座標

※ 様々な種類の有限要素があります (要素の幾何形状や補間の次数が異なります).

有限要素法 (Finite Element Method)
による離散化 (続き)

$$\mathbf{B} = \left(\mathbf{B}^{(1)} \mathbf{B}^{(2)} \dots \mathbf{B}^{(\alpha)} \dots \mathbf{B}^{(n)} \right),$$

$$\mathbf{B}^{(\alpha)} =$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial N^{(\alpha)}}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^{(\alpha)}}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N^{(\alpha)}}{\partial z} \\ \frac{\partial N^{(\alpha)}}{\partial y} & \frac{\partial N^{(\alpha)}}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^{(\alpha)}}{\partial z} & \frac{\partial N^{(\alpha)}}{\partial y} \\ \frac{\partial N^{(\alpha)}}{\partial z} & 0 & \frac{\partial N^{(\alpha)}}{\partial x} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ \lambda & \lambda & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mu & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \mu \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{N} = \left(\mathbf{N}^{(1)} \mathbf{N}^{(2)} \dots \mathbf{N}^{(\alpha)} \dots \mathbf{N}^{(n)} \right),$$

$$\mathbf{N}^{(\alpha)} = \begin{pmatrix} N^{(\alpha)} & 0 & 0 \\ 0 & N^{(\alpha)} & 0 \\ 0 & 0 & N^{(\alpha)} \end{pmatrix}$$

構造解析シミュレーション (6/7)

構造解析 シミュレーション

解析メッシュの生成



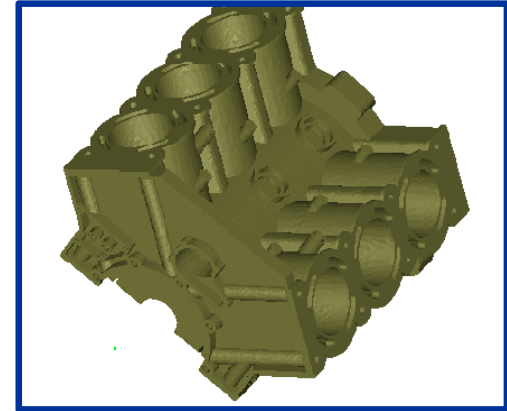
境界条件 (初期条件) の付与



有限要素法プログラムの実行



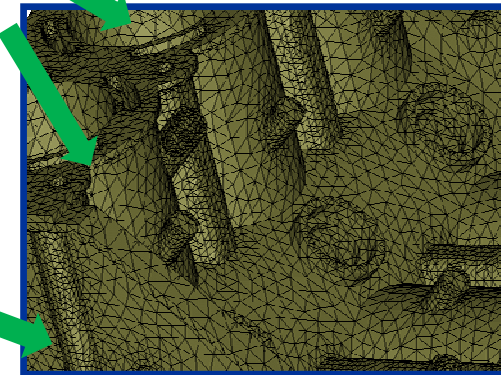
解析結果の可視化



解析対象

内面に
圧力を
付与

底面を
固定



構造解析シミュレーション (7/7)

形状の作成

構造解析
シミュレーション

解析メッシュの生成

境界条件 (初期条件) の付与
外力の付与

並列有限要素法プログラムの
実行

解析結果の可視化

今回のハンズオンでは、
並列有限要素法プログラムの実行と
解析結果の可視化に焦点を当てます。

FrontISTR



REVOCAP_PrePost



FrontISTRとは (1/4)

並列有限要素法ソフト「FrontISTR (フロントアイスター)」とは

- 1998年に開始された文部科学省科学技術振興調整費総合研究「高精度の地球変動予測のための並列ソフトウェア開発に関する研究」から始まり、
2013年3月に終了した文部科学省次世代IT基盤構築のための研究開発「イノベーション基盤シミュレーションソフトウェアの研究開発」まで、各プロジェクトにおける研究の一部として、
開発および改良に継続的に取り組まれてきたオープンソースソフトウェア



1998-2002



2002-2004



2005-2007



2008-2012



FrontISTRとは (2/4)

並列有限要素法ソフト「FrontISTR (フロントアイスター)」とは

- 2013年4月からユーザ会「FrontISTR研究会」を中心として、開発および改良が継続中
※「FrontISTR研究会」
FrontISTR (REVOCAP_PrePostを含む) の利用促進・産業応用・機能改良、ソフトウェア資産や解析データの維持管理などを目的とするユーザ会
- 2014年度より文部科学省「フラッグシップ2020プロジェクト」のポスト「京」重点課題⑧
「近未来型ものづくりを先導する革新的設計・製造プロセスの開発」
(課題代表: 加藤千幸先生) にサブ課題Eとして参画

FrontISTR Forum
Since 2013

2013-

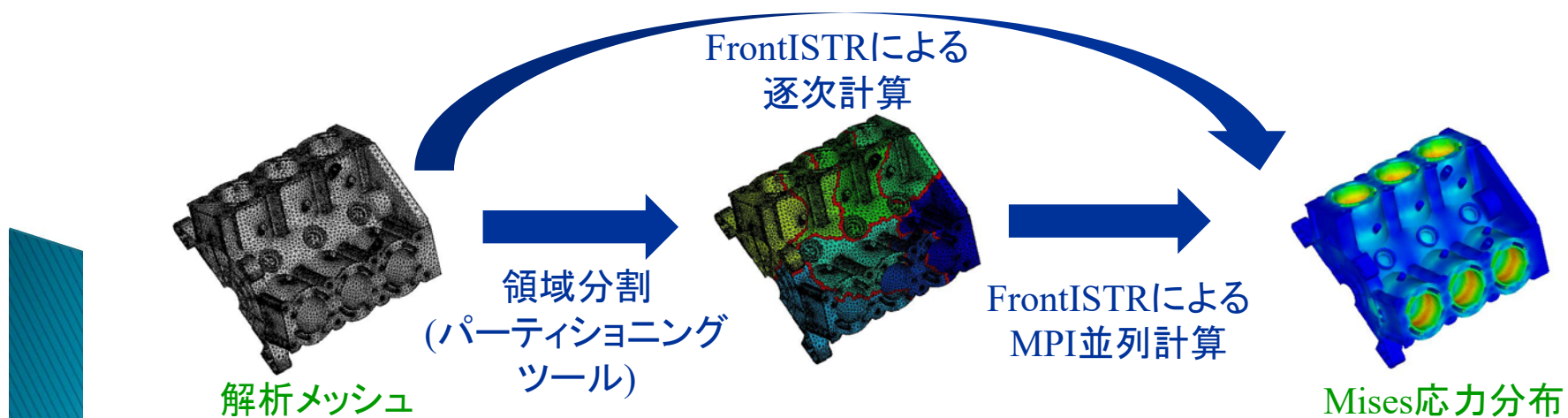
FLAGSHIP 2020 PROJECT
重点課⑧サブ課題E

2014-2019 (予定)

FrontISTRとは (3/4)

並列有限要素法ソフト「FrontISTR」の特徴

- 様々な解析機能
線形／非線形静解析，線形／非線形動解析，
固有値解析，周波数応答解析，定常／非定常熱伝導解析
- 並列性能に優れた線形ソルバー (反復法ソルバーと直接法ソルバー)
 - MPI並列計算: メッシュ領域分割によって，プロセス並列計算が可能
 - OpenMP並列計算: ノード内でスレッド並列計算が可能
- プログラム内で剛性マトリックスをBCSR (Block Compressed Sparse Row) 形式で格納
- WindowsやLinuxのPCクラスタはもとより，「京」，地球シミュレータ，Oakleaf-FXなどのスパコンにも対応



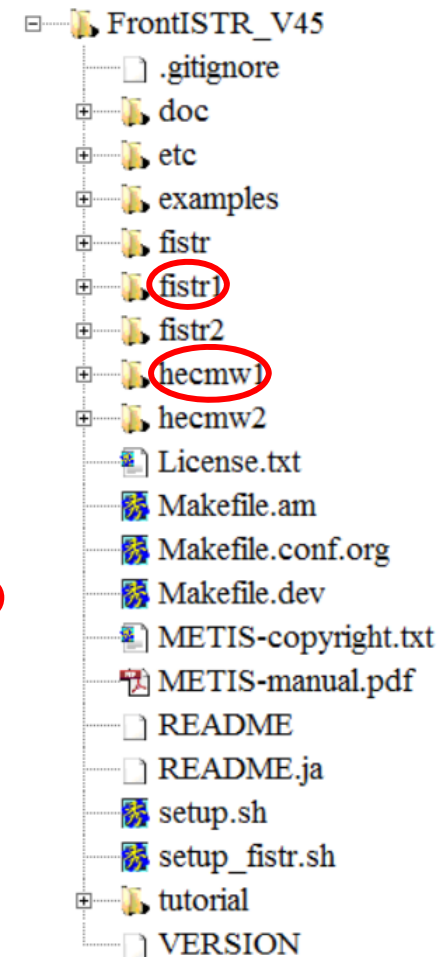
FrontISTRとは (4/4)

FrontISTRのプログラムFrontISTR_V45.tar.gzは、
FrontISTR研究会のホームページ
(<http://www.multi.k.u-tokyo.ac.jp/FrontISTR/>) からダウンロードできます。

ファイル
FrontISTR_V45.tar.gz

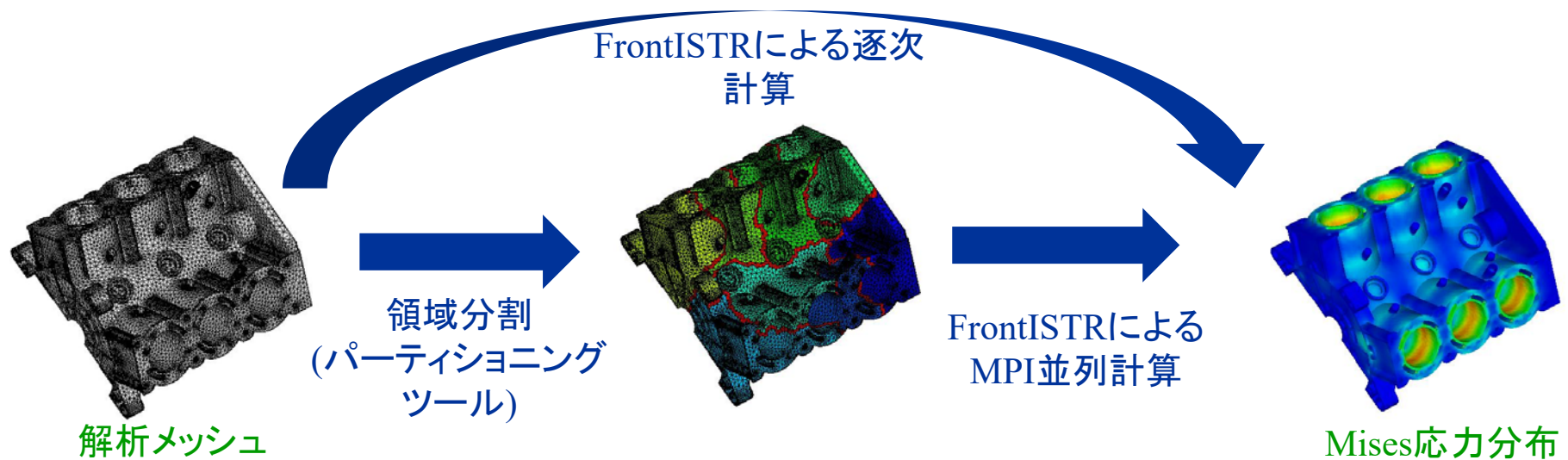


ディレクトリ
FrontISTR_V45



ディレクトリfistr1とディレクトリhecmw1の中の
ファイルがソースプログラムです。

FrontISTRと一緒に利用できるソフトウェア



- パーティショニングツール, マージングツールなど `--with-tools`
- METIS (逐次計算用グラフ分割ツール) `--with-metis`
- ParMETIS (並列計算用グラフ分割ツール) `--with-parmetis`
- MUMPS (直接法ソルバー) `--with-mumps`
- TrilinosのML (反復法ソルバーの前処理) `--with-ml`
- REVOCAP_Refiner (メッシュリファインメント) `--with-refiner`
-

※ ParMETISはFrontISTRで使用されませんが, MUMPSやTrilinosで使用できます.
使用する場合, インストールの時にライブラリのリンクが必要です.

FrontISTRのインストール方法 (1/2)

ディレクトリFrontISTRの中にFrontISTRをインストールしてみます.

```
cd  
cd data170428/FrontISTR
```

ディレクトリFrontISTR_V45内のMakefile.conf.orgを編集し,
ファイル名をMakefile.confに変更します.

編集済みのMakefile.confを用意しましたので,
data170428/FrontISTR/conf/IC/3.7をご覧ください.

```
cd sh/IC/3.7/serial  
chmod +x install.sh  
sh install.sh  
cd sh/IC/3.7/mpi  
chmod +x install.sh  
sh install.sh
```

※ インストール手順の詳細は, install.shをご確認ください.
METIS, MUMPS, Trilinos, REVOCAP_Refinerはこちらで
インストール済です. ディレクトリdata170428/toolsの中をご覧ください.

FrontISTRのインストール方法 (2/2)

実行形式のファイルの置き場所

- 逐次計算用

/home/guests/**ゲストアカウント名**/data170428/FrontISTR/bin/IC/3.7/serial

- **fistr1**

・・・ FrontISTR実行形式ファイル

- MPI並列計算用

/home/guests/**ゲストアカウント名**/data170428/FrontISTR/bin/IC/3.7/mpi

- **hecmw_part1**

・・・ パーティショニングツール実行形式ファイル

- **fistr1**

・・・ FrontISTR実行形式ファイル

- **rmerge**

・・・ 解析結果統合ツール実行形式ファイル

※ 計算を実行するとき、自分の作業ディレクトリへfistr1やhecmw_part1をコピーします。