

FrontISTRの逐次計算 (1) : 例題計算

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～>

FrontISTRの逐次計算の方法 (1/2)

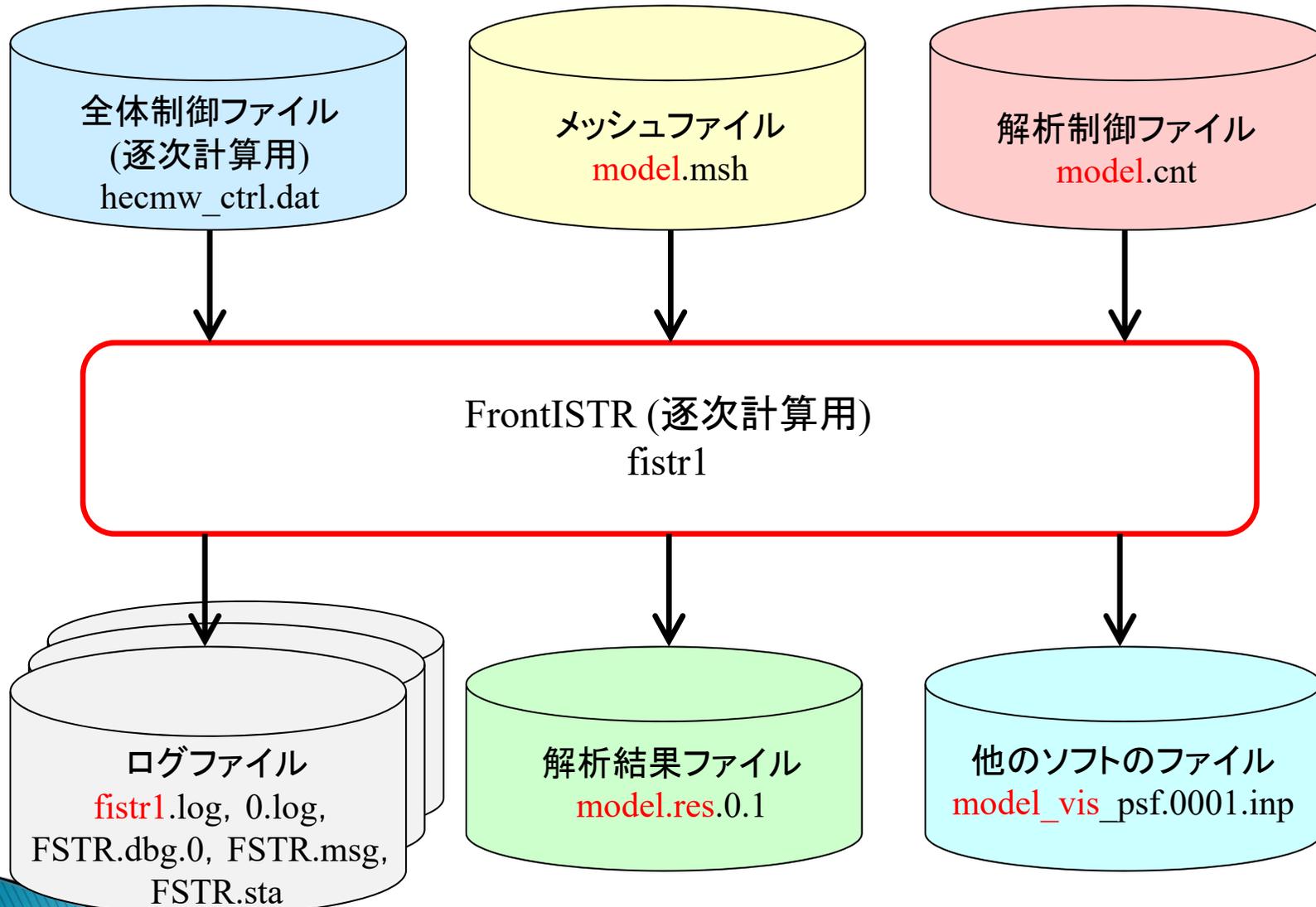
作業ディレクトリでシェルスクリプトgo_fistr1を実行してください.

```
cd  
cd data170428/FrontISTR/examples/1_beam/PE1  
sh go_fistr1.sh
```

go_fistr1.sh

```
#!/bin/sh  
cp ${HOME}/data170428/FrontISTR/bin/TC/3.7/serial/fistr1 .  
./fistr1 > fistr1.log  
rm fistr1
```

FrontISTRの逐次計算の方法 (2/2)



※ 赤字の名前は自由に変更可能

例題説明 (1/12) : 片持ち梁の曲げ変形問題 (1_beam)

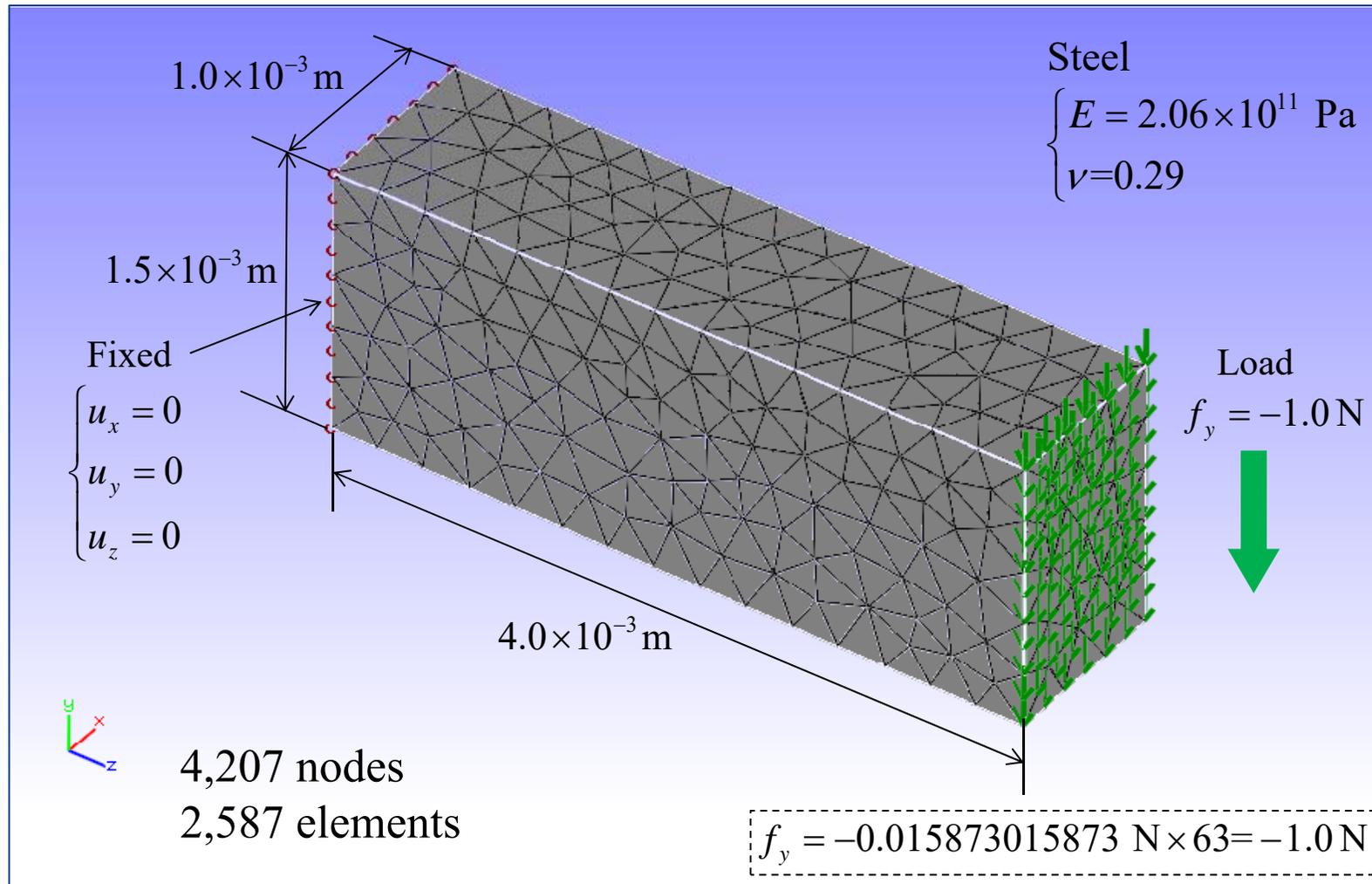


Fig. Analysis mesh of a beam (10-node tetrahedral elements)

引張変形問題の計算 → 変位分布 (応力分布)

例題説明 (2/12) : 片持ち梁の曲げ変形問題 (1_beam)

FrontISTR/examples/1_beam/

PE1/	...	逐次計算用ディレクトリ
hecmw_ctrl.dat	...	全体制御ファイル (逐次計算用)
beam.msh	...	メッシュファイル (10節点四面体2次要素)
beam.cnt	...	解析制御ファイル
go_fistr1.sh	...	シェルスクリプト (fistr1用)

例題説明 (3/12) : 円孔板の引張問題 (2_perforatedplate)

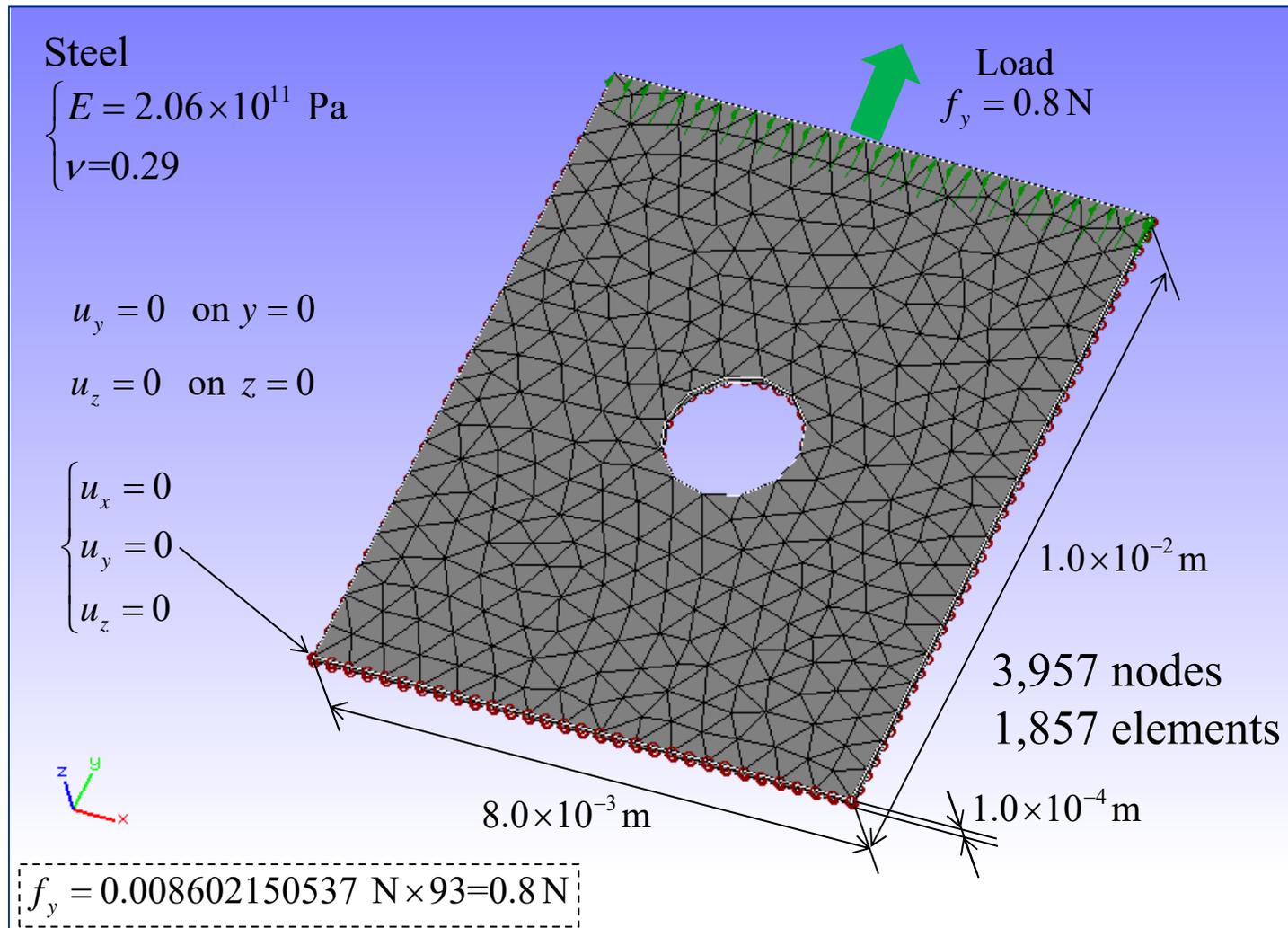


Fig. Analysis mesh of a perforated plate (10-node tetrahedral elements)

引張変形問題の計算 → 変位分布 (応力分布)

例題説明 (4/12) : 円孔板の引張問題 (2_perforatedplate)

FrontISTR/examples/2_perforatableplate/

PE1/	...	逐次計算用ディレクトリ
hecmw_ctrl.dat	...	全体制御ファイル (逐次計算用)
perforatedplate.msh	...	メッシュファイル (10節点四面体2次要素)
perforatedplate.cnt	...	解析制御ファイル
go_fistr1.sh	...	シェルスクリプト (fistr1用)

例題説明 (5/12) :コネクティングロッドの引張変形問題 (3_conrod)

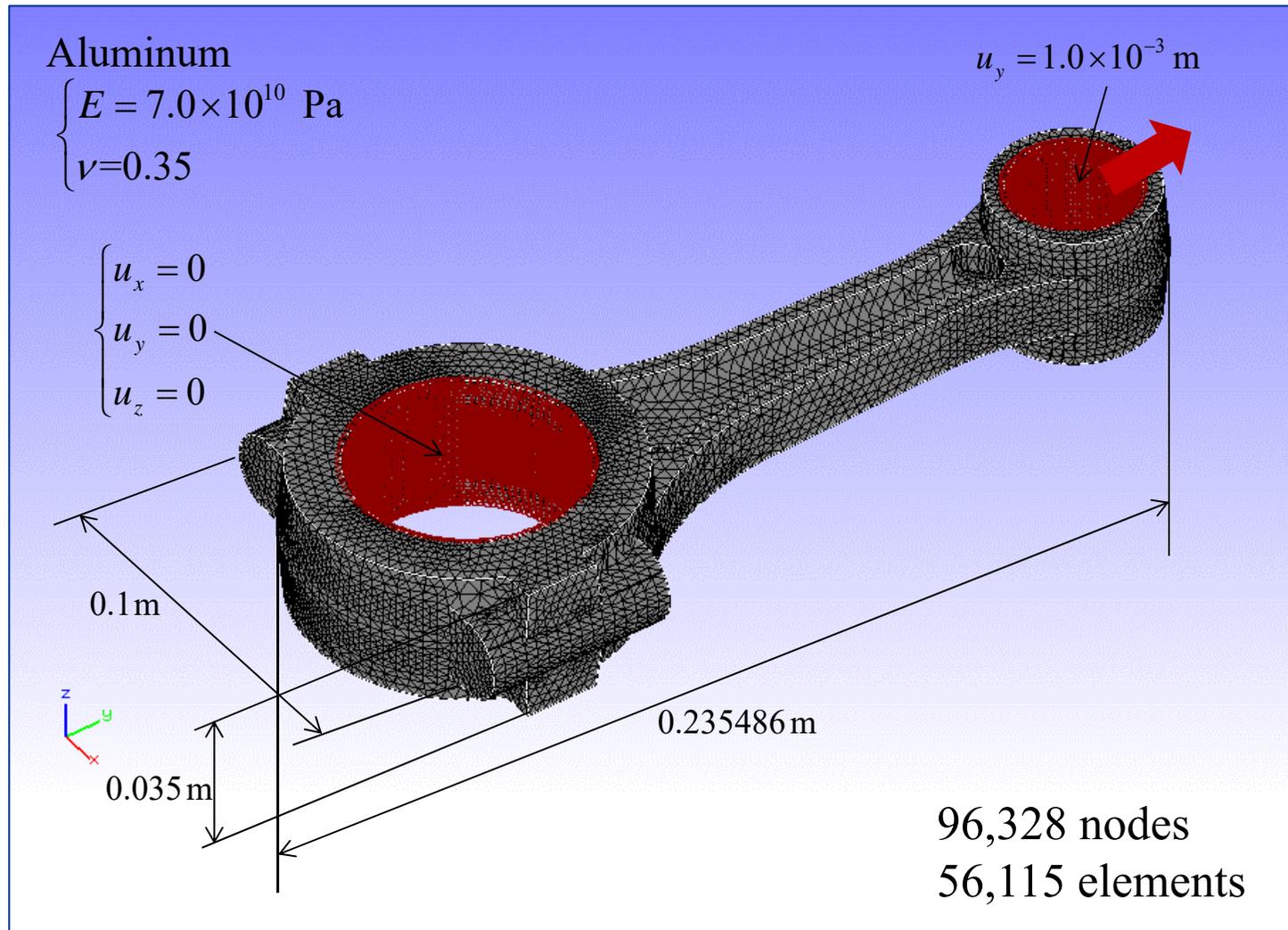


Fig. Analysis mesh of a connecting rod (10-node tetrahedral elements)

引張変形問題の計算 → 変位分布 (応力分布)

例題説明 (6/12) :コネクティングロッドの引張変形問題 (3_conrod)

FrontISTR/examples//3_conrod/

PE1/	...	逐次計算用ディレクトリ
hecmw_ctrl.dat	...	全体制御ファイル (逐次計算用)
conrod.msh	...	メッシュファイル (10節点四面体2次要素)
conrod.cnt	...	解析制御ファイル
go_fistr1.sh	...	シェルスクリプト (fistr1用)

例題説明 (7/12) : 内圧が作用する脳動脈瘤の変形問題 (4_aneurysm)

微小変形理論

線形弾性体

$$\begin{cases} E = 1,000,000 \text{ Pa} \\ \nu = 0.49 \end{cases}$$

内壁全体に圧力

$$\underline{t} = -\underline{p} \underline{n} \quad \text{on } S_i$$

\underline{n} : 領域外向き方向の
単位法線ベクトル [-]

$$\underline{p} = 1230.0 \text{ Pa}$$

$$\begin{cases} \underline{u}_x = 0.0 \\ \underline{u}_y = 0.0 \\ \underline{u}_z = 0.0 \end{cases}$$

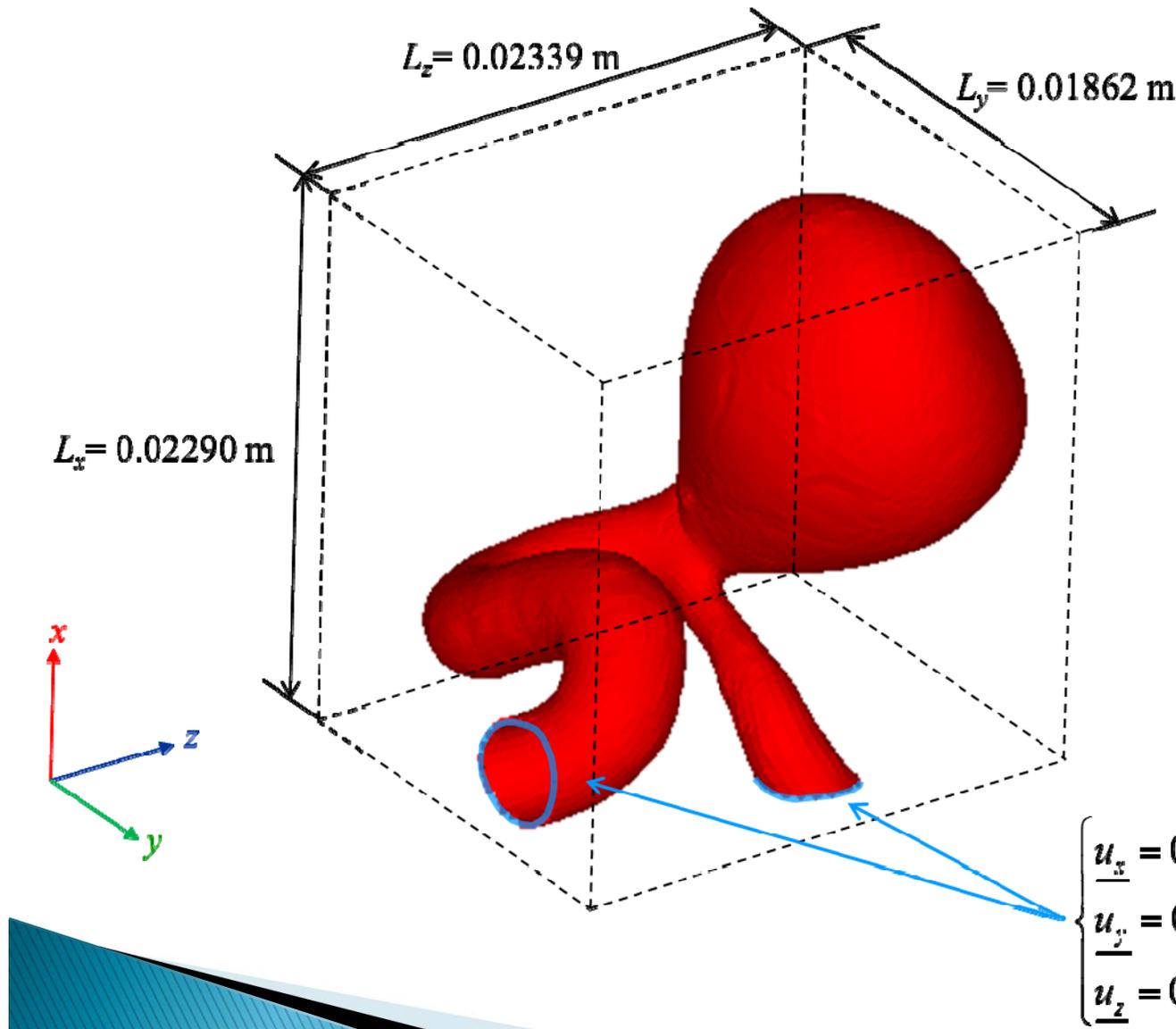
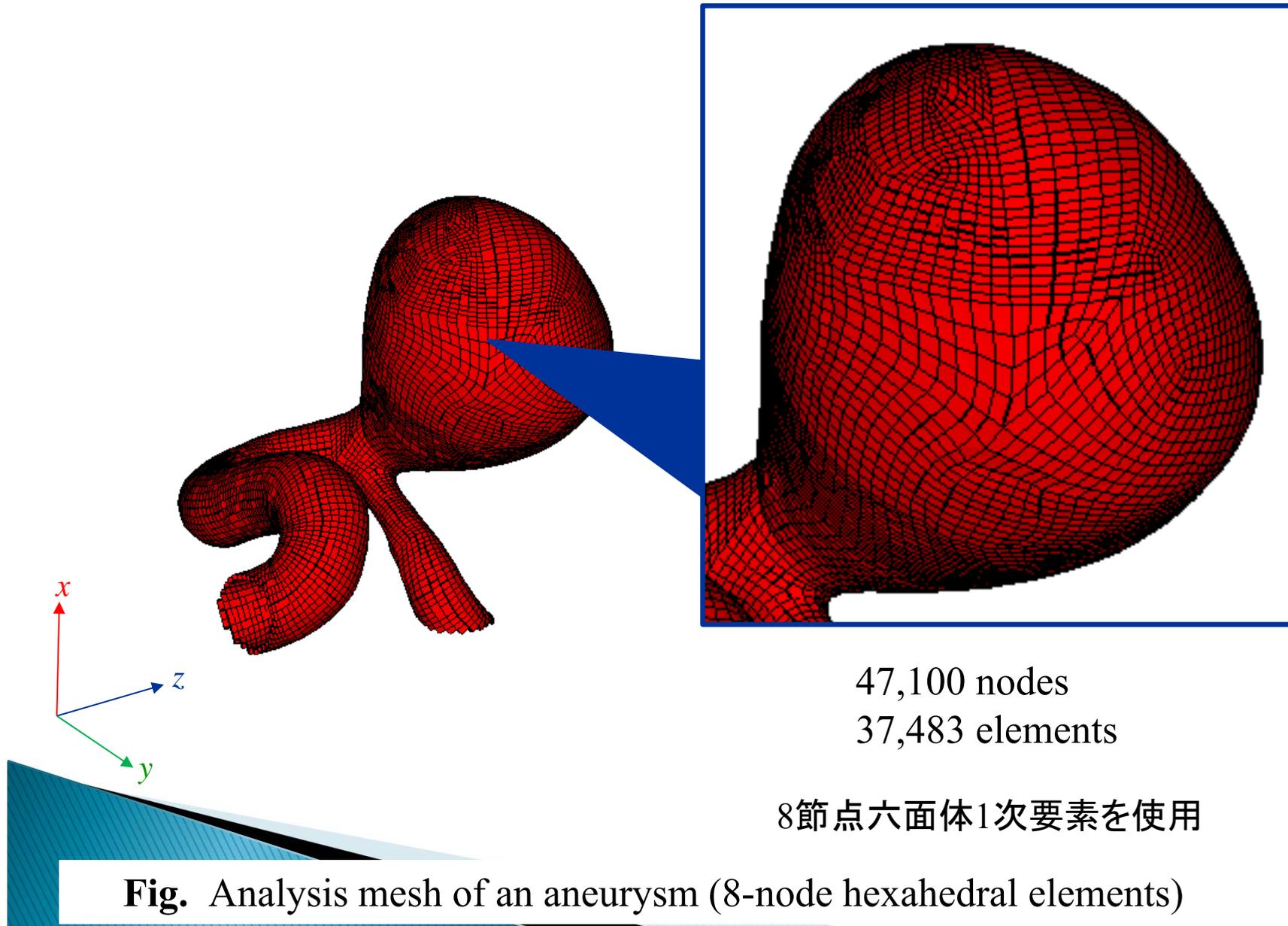


Fig. Analysis model of an aneurysm

例題説明 (8/12) : 内圧が作用する脳動脈瘤の変形問題 (4_aneurysm)



例題説明 (9/12) : 内圧が作用する脳動脈瘤の変形問題 (4_aneurysm)

FrontISTR/examples//4_aneurysm/

PE1/

hecmw_ctrl.dat
aneurysm.msh
aneurysm.cnt

go_fistr1.sh

... 逐次計算用ディレクトリ

... 全体制御ファイル (逐次計算用)

... メッシュファイル (8節点六面体1次要素)

... 解析制御ファイル

... シェルスクリプト (fistr1用)

例題説明 (10/12) : コネクティングロッドの熱変形問題 (3_conrod_ts)

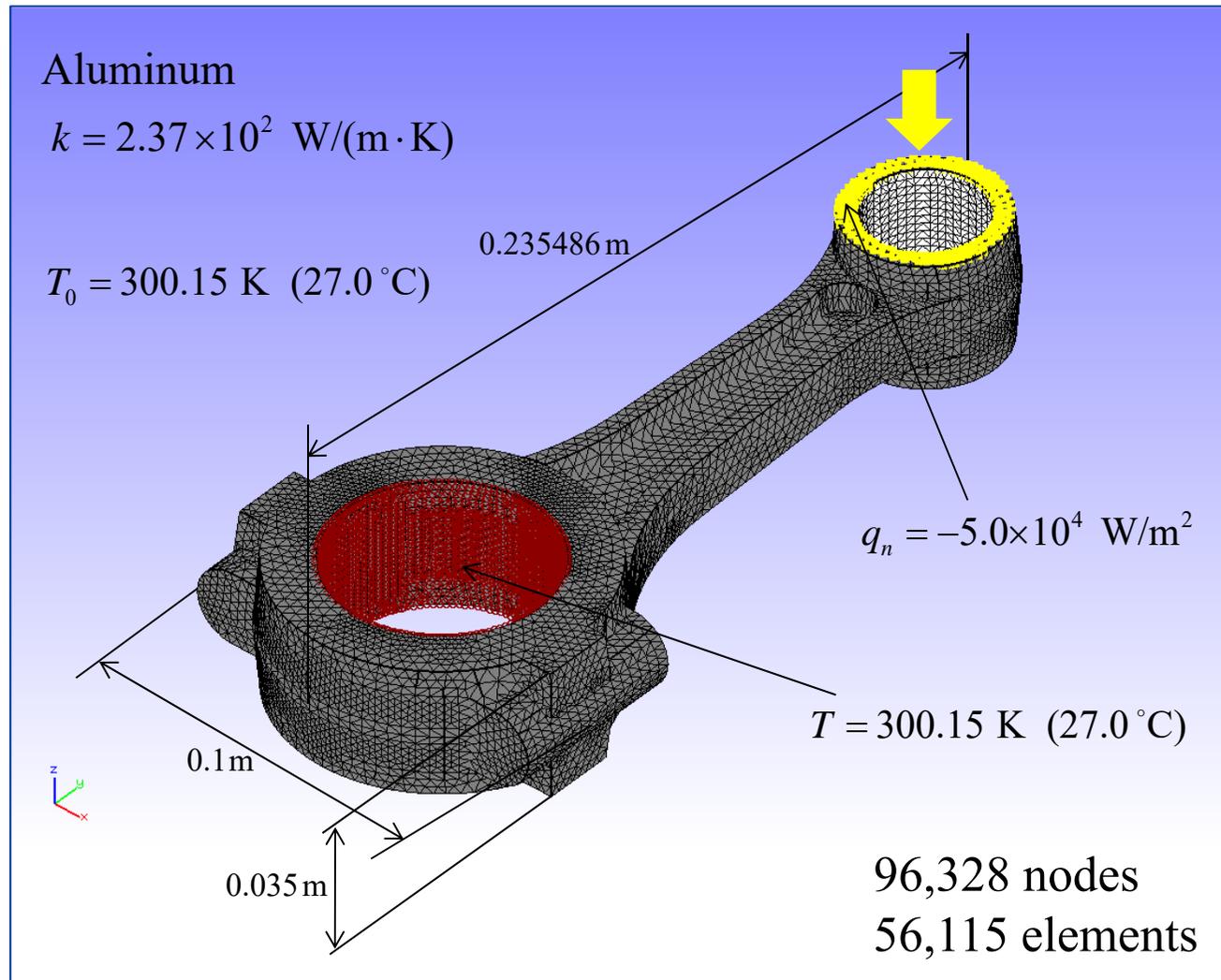


Fig. Analysis model of a connecting rod (10-node tetrahedral elements)

熱伝導問題の計算 → 温度分布

例題説明 (11/12) : コネクティングロッドの熱変形問題 (3_conrod_ts)

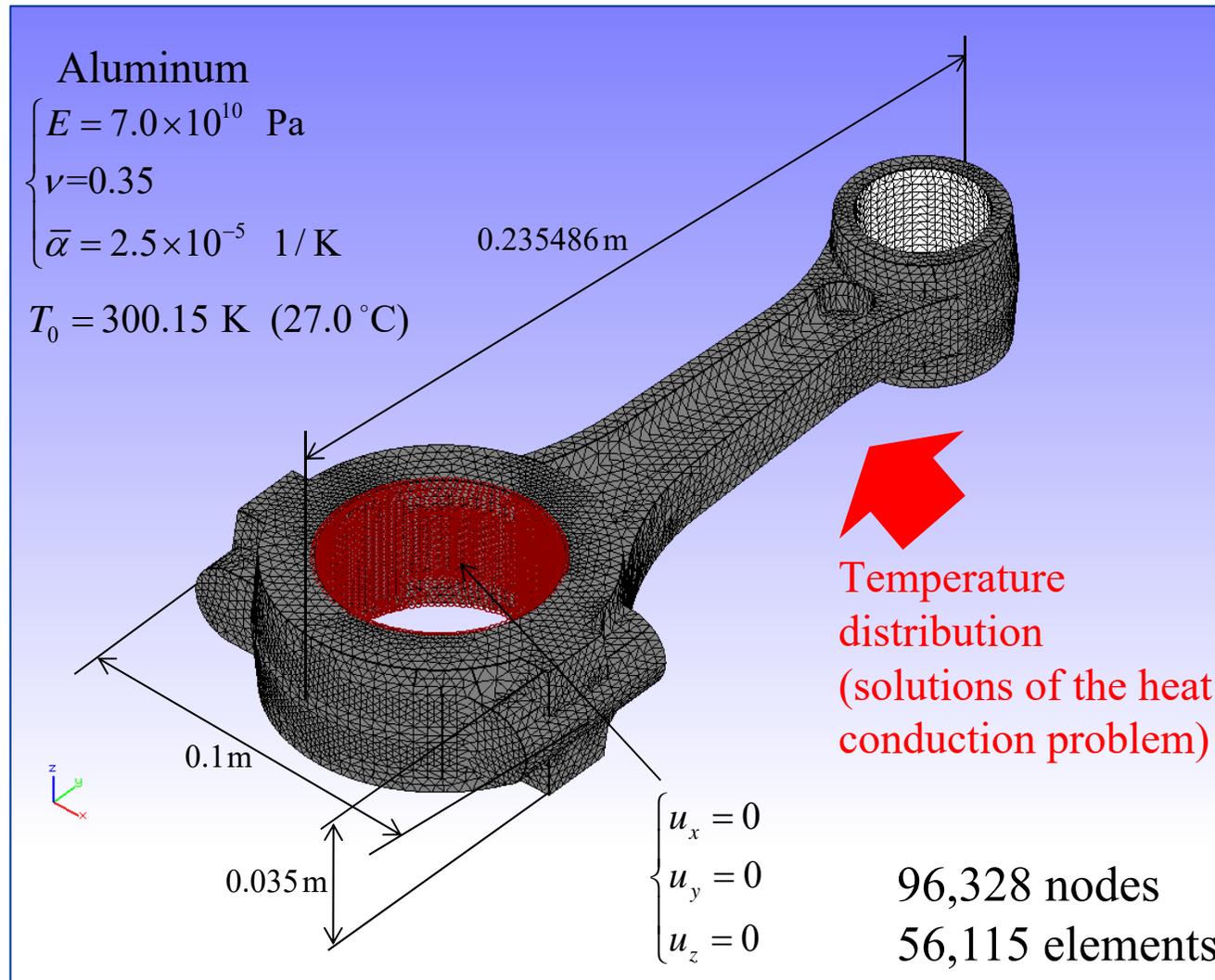


Fig. Analysis model of a connecting rod (10-node tetrahedral elements)

温度分布 → 熱変形問題の計算 → 変位分布 (応力分布)

例題説明 (12/12) : コネクティングロッドの熱変形問題 (3_conrod_ts)

examples/3_conrod_ts/

(熱伝導問題の計算用のディレクトリ)

PE1_t/

... 逐次計算用ディレクトリ

hecmw_ctrl.dat

... 全体制御ファイル (逐次計算用)

conrod_t.msh

... メッシュファイル (10節点四面体2次要素)

conrod_t.cnt

... 解析制御ファイル

go_fistr1.sh

... シェルスクリプト (fistr1用)

(熱変形問題の計算用のディレクトリ)

PE1_s/

... 逐次計算用ディレクトリ

hecmw_ctrl.dat

... 全体制御ファイル (逐次計算用)

conrod_s.cnt

... 解析制御ファイル

go_fistr1.sh

... シェルスクリプト (fistr1用)

※ PE1_tを計算した後でPE1_sを計算

熱変形問題の物理モデル (1/5)

- 変形は微小変形を仮定
- 材料は線形弾性体で近似
- 温度の分布が存在 (温度変化により膨張・収縮)

(定常熱伝導方程式)

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{q}$$



$$-\nabla \cdot \mathbf{q} = 0$$

(Fourierの法則)

$$\mathbf{q} = -k \nabla T$$

∇ : ナブラ [1/m]

$$\nabla = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$$

\mathbf{q} : 熱流束 [W/m²] 単位時間に
単位面積を横切る熱量
(物体外向きが正)

ρ : 密度 [kg/m³]

c_p : 定圧比熱 [J/(kg·K)]

k : 熱伝導率 [W/(m·K)]

T : 温度 [K] 未知量

熱変形問題の物理モデル (2/5)

(つり合い方程式)

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



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

(線形弾性体の構成方程式)

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

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

$$\boldsymbol{\varepsilon}_T = \bar{\alpha} (T - T_0) \mathbf{I}$$

(境界条件)

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

∇ : ナブラ [1/m]

$$\nabla = \mathbf{e}_x \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{e}_y \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{e}_z \frac{\partial}{\partial z}$$

$\boldsymbol{\sigma}$: 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 [m]

\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 [-]

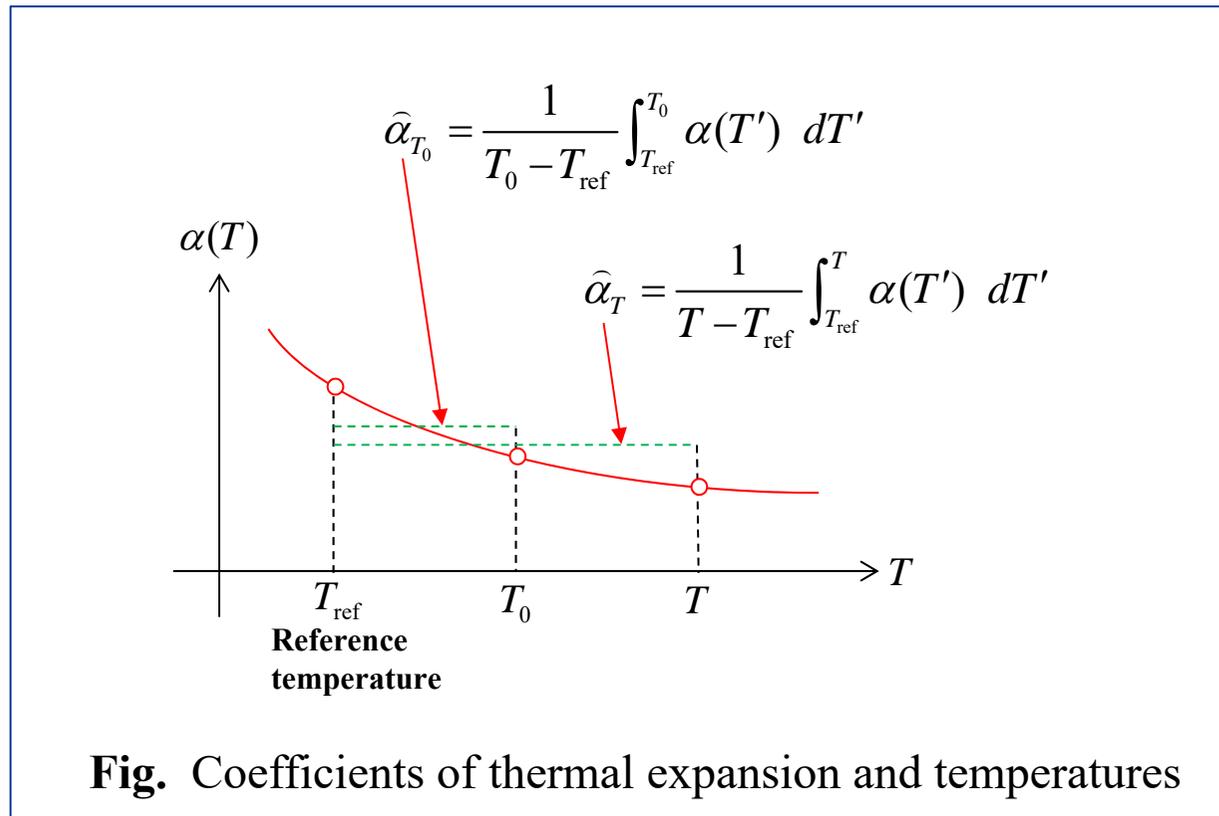
$\boldsymbol{\varepsilon}_T$: 熱ひずみ [-] 温度変化による元の状態からの
膨張の割合

$\bar{\alpha}$: 線膨張係数の平均値 [1/K] 次のページ
で説明

T : 温度 [K] 既知量

T_0 : 変形前の温度 [K]

熱変形問題の物理モデル (3/5)



$$\begin{aligned}
 \bar{\alpha} (T - T_0) &= \int_{T_0}^T \alpha(T') dT' \\
 &= \int_{T_{\text{ref}}}^T \alpha(T') dT' - \int_{T_{\text{ref}}}^{T_0} \alpha(T') dT' \\
 &= \hat{\alpha}_T (T - T_{\text{ref}}) - \hat{\alpha}_{T_0} (T_0 - T_{\text{ref}})
 \end{aligned}$$

熱変形問題の物理モデル (4/5)

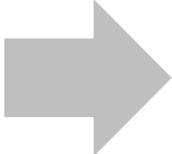
(定常熱伝導方程式)

$$-\left(\frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} + \frac{\partial q_z}{\partial z}\right) = 0$$

(Fourierの法則)

$$\begin{cases} q_x = -k \frac{\partial T}{\partial x} \\ q_y = -k \frac{\partial T}{\partial y} \\ q_z = -k \frac{\partial T}{\partial z} \end{cases}$$

(定常熱伝導方程式)


$$\frac{\partial}{\partial x} \left(k \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k \frac{\partial T}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k \frac{\partial T}{\partial z} \right) = 0$$

Laplace方程式

熱変形問題の物理モデル (5/5)

(つり合い方程式)

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

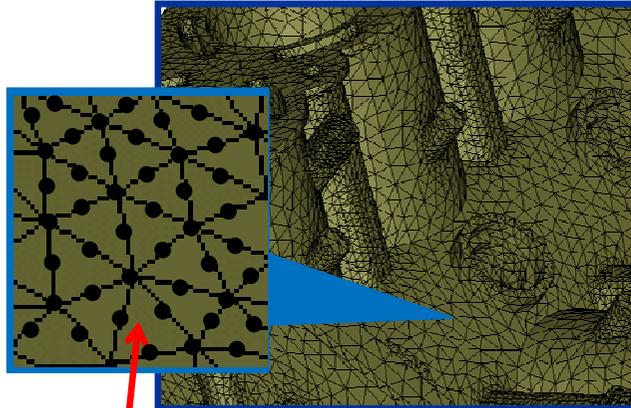
(線形弾性体の構成方程式)

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

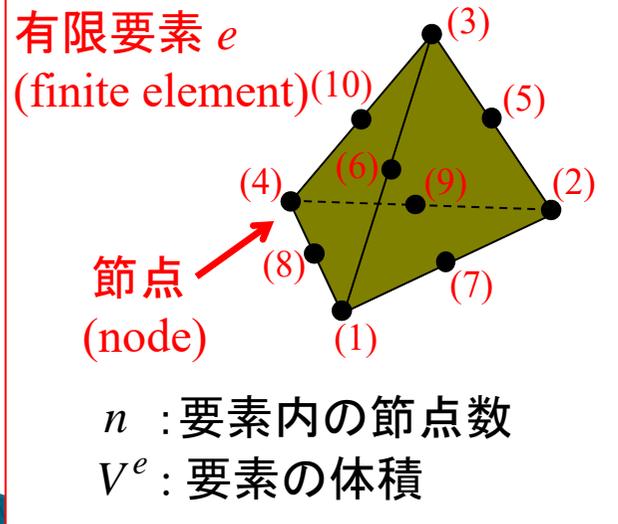
$$\begin{cases} \varepsilon_{xx} = \frac{\partial u_x}{\partial x} \\ \varepsilon_{yy} = \frac{\partial u_y}{\partial y} \\ \varepsilon_{zz} = \frac{\partial u_z}{\partial z} \\ \varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_y}{\partial x} + \frac{\partial u_x}{\partial y} \right)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

$$\begin{cases} \varepsilon_{Txx} = \bar{\alpha} (T - T_0) \\ \varepsilon_{Tyy} = \bar{\alpha} (T - T_0) \\ \varepsilon_{Tzz} = \bar{\alpha} (T - T_0) \\ \varepsilon_{Txy} = \varepsilon_{Tyx} = 0 \\ \varepsilon_{Tyz} = \varepsilon_{Tzy} = 0 \\ \varepsilon_{Tzx} = \varepsilon_{Txz} = 0 \end{cases}$$

熱変形問題の有限要素モデル (1/4)



解析メッシュ



N : 全節点数
 M : 全要素数

有限要素法 (Finite Element Method)

による離散化

$$\underbrace{\mathbf{K}_T}_{N \times N} \underbrace{\mathbf{T}}_{N \times 1} = \underbrace{\mathbf{h}}_{N \times 1}$$

連立一次方程式

全体拡散
マトリックス

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

要素拡散
マトリックス

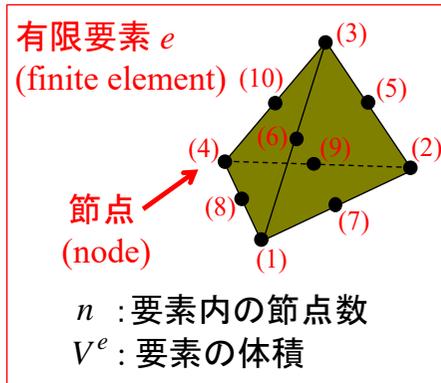
$$\underbrace{\mathbf{K}_T^e}_{n \times n} = \int_{V^e} \underbrace{\mathbf{G}^T}_{n \times 3} \underbrace{\mathbf{D}_T}_{3 \times 3} \underbrace{\mathbf{G}}_{3 \times n} dV$$

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)

温度ベクトル (未知量)

$$\underbrace{\mathbf{T}}_{N \times 1} = \left(T^1 \ T^2 \ \dots \ T^I \ \dots \ T^N \right)^T$$

熱変形問題の有限要素モデル (2/4)



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

全体熱流量
ベクトル

$$\underline{\mathbf{h}}_{N \times 1} = \mathbf{A} \sum_{e=1}^M \underline{\mathbf{h}}_{n \times 1}^e,$$

要素熱流量
ベクトル

$$\underline{\mathbf{h}}_{n \times 1}^e = - \oint_{\partial V^e} \underbrace{\left(N^{(1)} \ N^{(2)} \ \dots \ N^{(\alpha)} \ \dots \ N^{(n)} \right)^T}_{n \times 1} q_n \, dS$$

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

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

物理空間
座標

計算空間
座標

$$q_n = \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix}^T \begin{pmatrix} q_x \\ q_y \\ q_z \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{D}_T = \begin{pmatrix} k & 0 & 0 \\ 0 & k & 0 \\ 0 & 0 & k \end{pmatrix}$$

$\underbrace{\hspace{1cm}}_{3 \times 3}$

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

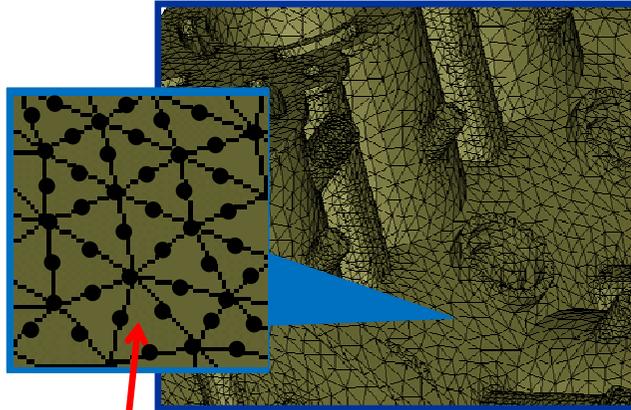
$\underbrace{\hspace{1cm}}_{3 \times n}$

$$\mathbf{G}^{(\alpha)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial N^{(\alpha)}}{\partial x} \\ \frac{\partial N^{(\alpha)}}{\partial y} \\ \frac{\partial N^{(\alpha)}}{\partial z} \end{pmatrix}$$

$\underbrace{\hspace{1cm}}_{3 \times 1}$

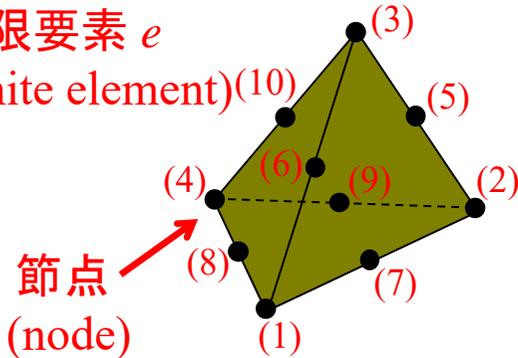
※ 様々な種類の有限要素があります (要素の幾何形状や補間の次数が異なります).

熱変形問題の有限要素モデル (3/4)



解析メッシュ

有限要素 e
(finite element)(10)



節点
(node)

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

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

連立一次方程式

全体剛性
マトリクス

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

要素剛性
マトリクス

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

アセンブリ記号 (要素マトリクス成分を全体マトリクス成分へ足し込む)

変位ベクトル (未知量)

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

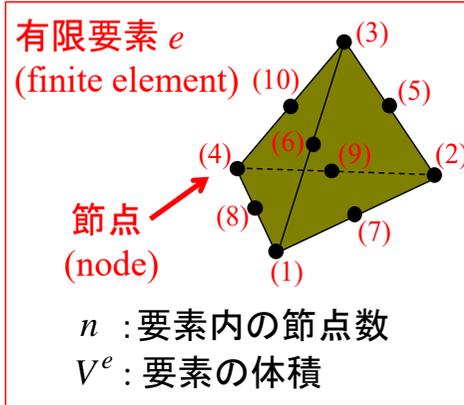
全体外力
ベクトル

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

要素外力
ベクトル

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

熱変形問題の有限要素モデル (4/4)



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)

$$\underline{\mathbf{f}}_T = \mathbf{A} \underline{\mathbf{f}}_T^e, \quad \underline{\mathbf{f}}_T^e = \int_{V^e} \underline{\mathbf{B}}^T \mathbf{D} \begin{pmatrix} \bar{\alpha}(T-T_0) \\ \bar{\alpha}(T-T_0) \\ \bar{\alpha}(T-T_0) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} dV$$

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

$$\underline{\mathbf{N}} = \left(\mathbf{N}^{(1)} \mathbf{N}^{(2)} \dots \mathbf{N}^{(n)} \right), \quad \mathbf{N}^{(n)} = \begin{pmatrix} N^{(n)} & 0 & 0 \\ 0 & N^{(n)} & 0 \\ 0 & 0 & N^{(n)} \end{pmatrix}$$

$$\underline{\mathbf{B}} = \left(\mathbf{B}^{(1)} \mathbf{B}^{(2)} \dots \mathbf{B}^{(n)} \right), \quad \mathbf{B}^{(n)} = \begin{pmatrix} \frac{\partial N^{(n)}}{\partial x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^{(n)}}{\partial y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N^{(n)}}{\partial z} \\ \frac{\partial N^{(n)}}{\partial y} & \frac{\partial N^{(n)}}{\partial x} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^{(n)}}{\partial z} & \frac{\partial N^{(n)}}{\partial y} \\ \frac{\partial N^{(n)}}{\partial z} & 0 & \frac{\partial N^{(n)}}{\partial x} \end{pmatrix}$$

REVOCAP_PrePostによる計算結果の確認 (1/4)

「REVOCAP_PrePost-1.7.01」をインストールすると、
デスクトップ上に起動アイコンが生成されます。

四面体メッシュ生成, 境界条件設定, FrontISTRによる逐次計算,
計算結果の可視化が可能です。



起動アイコン



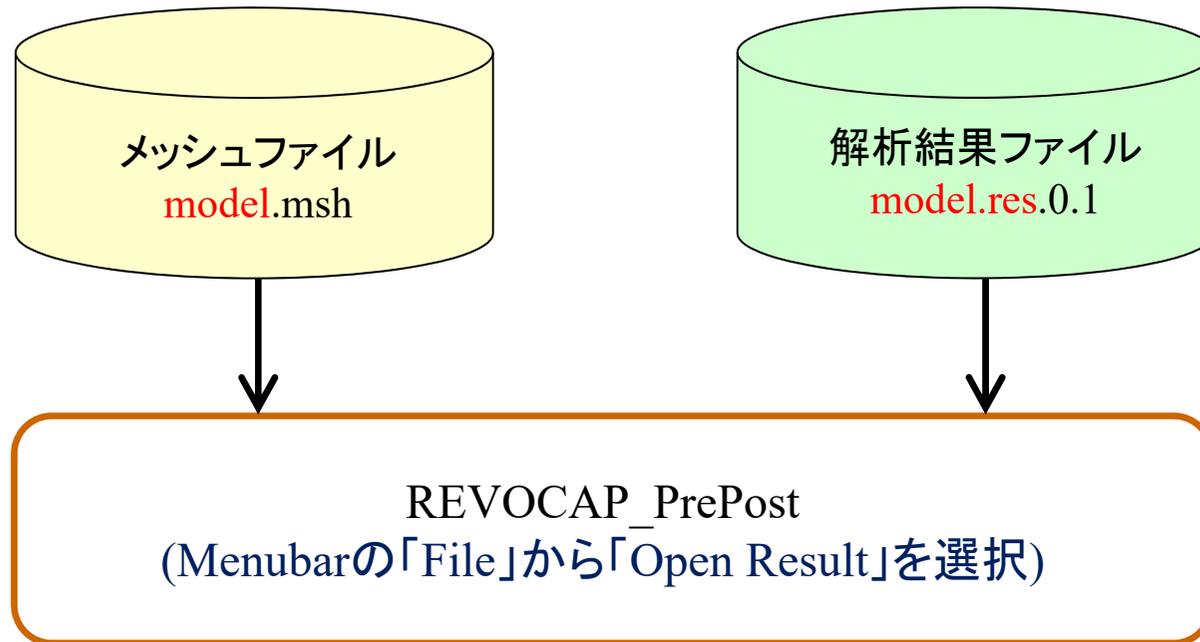
ダブル
クリック



プリポスト処理ウィンドウ

REVOCAP_PrePostによる計算結果の確認 (2/4)

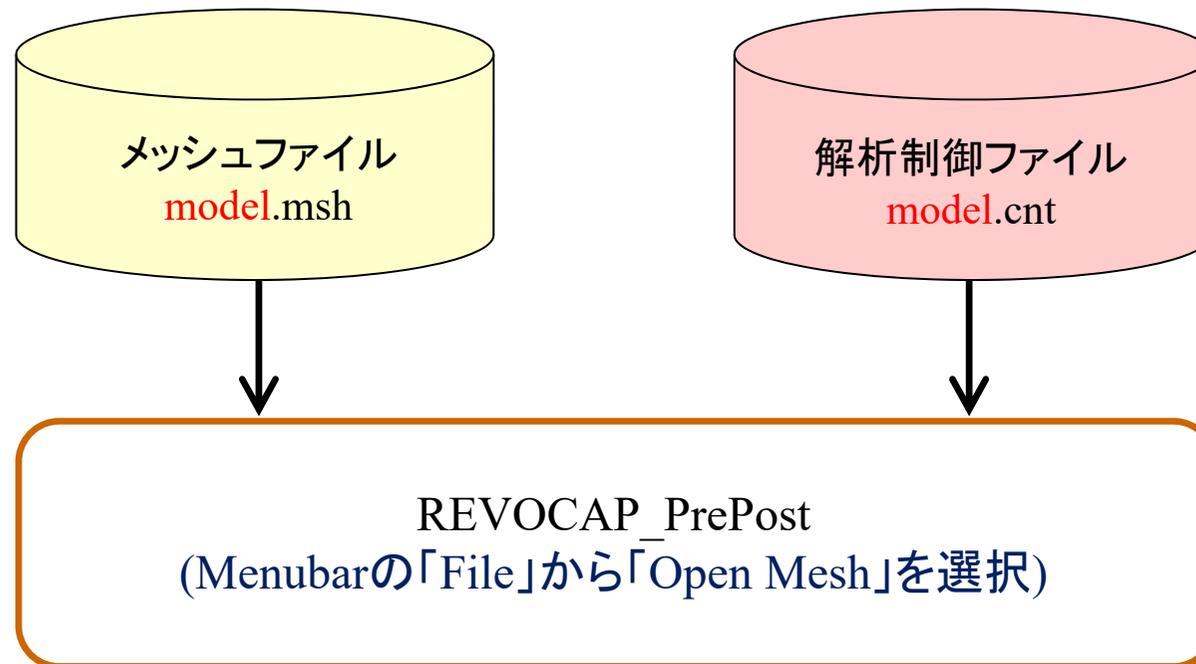
REVOCAP_PrePostによる可視化 (計算結果の確認)



- ※ 赤字の名前は自由に変更可能
- ※ メッシュファイルと解析制御ファイルの代わりに、UCDフォーマットファイル (拡張子.inp) を読み込むことも可能

REVOCAP_PrePostによる計算結果の確認 (3/4)

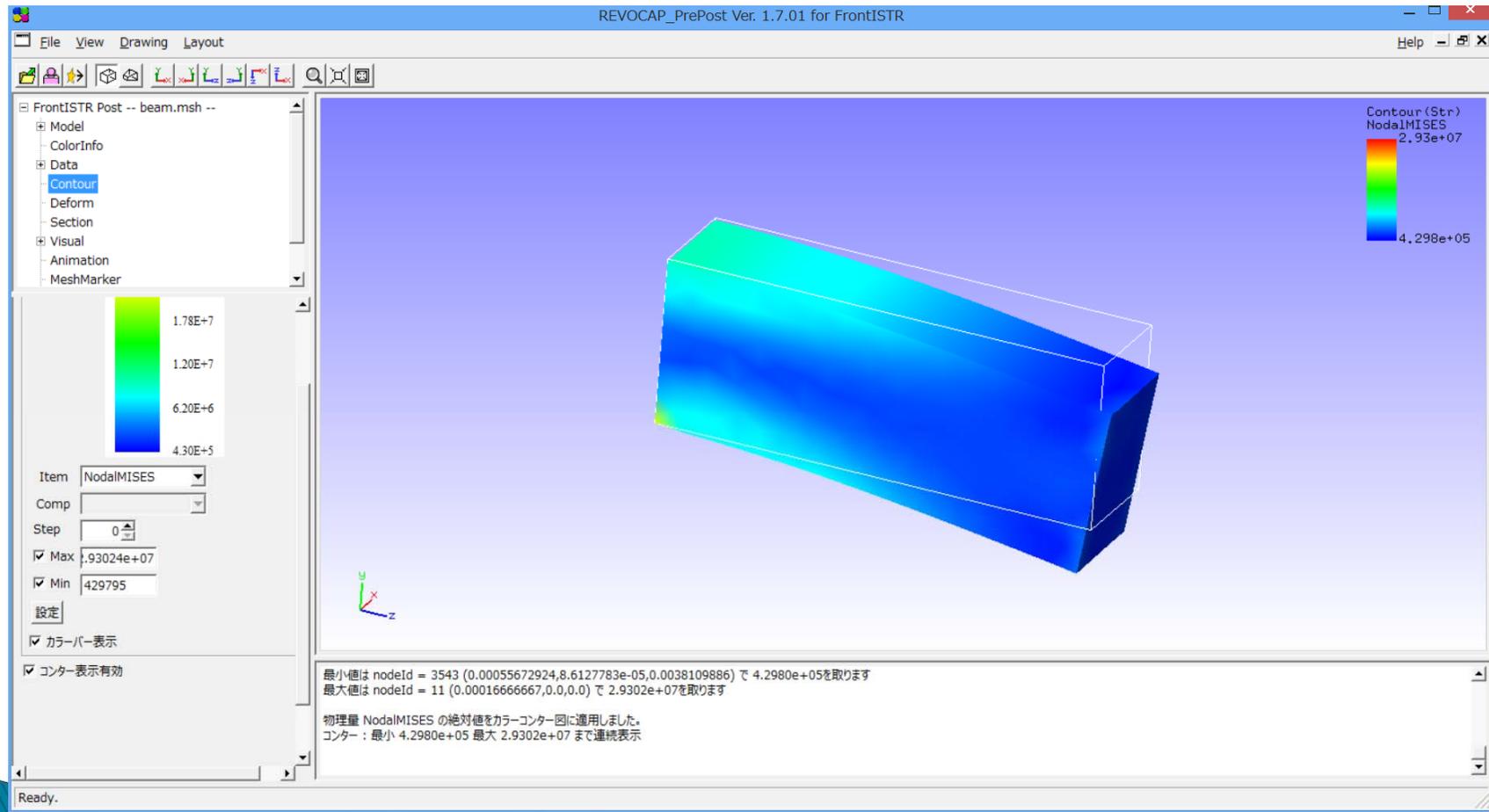
REVOCAP_PrePostによる可視化 (境界条件の確認)



※ 赤字の名前は自由に変更可能

REVOCAP_PrePostによる計算結果の確認 (4/4)

REVOCAP_PrePostを用いて、計算結果を可視化してみます。



FrontISTRのログの確認

FrontISTRの線形ソルバーのログを見てみます。

線形ソルバーの情報
(3×3ブロック
対角スケールング
前処理付きCG法を
使用)

```
1 Step control not defined! Using default step=1↓
2 fstr_setup: OK↓
3 ### 3x3 B-scale-CG 1↓
4 1 1.479415E+00↓
5 2 1.739362E+00↓
6 3 1.684741E+00↓
7 4 1.738891E+00↓
8 5 1.784541E+00↓
9 6 1.910337E+00↓
10 7 1.941279E+00↓
11 8 2.008611E+00↓
12 9 2.013628E+00↓
13 10 2.136744E+00↓
```

反復数

```
753 750 1.061542E-08↓
754 751 9.741274E-09↓
755 ### Relative residual = 9.74137E-09↓
756 ↓
757 ### summary of linear solver↓
758 751 iterations 9.741373E-09↓
759 set-up time : 1.999855E-03↓
760 solver time : 1.132000E+00↓
761 solver/comm time : 4.000187E-03↓
762 solver/matvec : 9.960003E-01↓
763 solver/precond : 2.700019E-02↓
764 solver/1 iter : 1.507324E-03↓
765 work ratio (%) : 9.964663E+01↓
766 ↓
767 ↓
768 =====↓
769 TOTAL TIME (sec) : 1.45↓
770 pre (sec) : 0.08↓
771 solve (sec) : 1.37↓
772 =====↓
773 FrontISTR Completed !!↓
```

残差

線形ソルバー
の計算時間