

次期最適化研究用 FEM は何がいいですか？

野村 壮史*¹What FEM software do you recommend for
the next generation topology optimization research platform?Tsuyoshi Nomura*¹*¹ Toyota Central R&D Labs., Inc.
41-1 Yokomichi, Nagakute, Aichi, 480-1192, Japan

Abstract

A discussion is made on the next generation finite element method software platform for structural optimization research. Currently, many topology optimization researchers depend on a commercial finite element analysis package, COMSOL. COMSOL offers great capability and flexibility, so that, it has significant impact on the efficiency of the research. However, there also exists large number of research topics which COMSOL is not necessary the most adequate option to handle the problem, but, if a researcher heavily depended on COMSOL, it can be difficult to challenge such new research topics, because, they demand much more effort to have output compared with research topics which can be handled with COMSOL. In order to resolve this situation, we would like to discuss on the next generation research platform.

Key words : Finite Element Method, Optimum Design, Numerical Analysis, Computer Aided Design

1. 緒 言

構造最適化, 特に, トポロジー最適化⁽¹⁾の研究を行うためには, 種々のソフトウェアを揃える必要がある。トポロジー最適化に必要なソフトウェアコンポーネントとしては, 以下のものが挙げられる。

- 数値解析ソルバー (順解析, 随伴解析, 感度解析)
- 数値計画法ソルバー (非線形計画法, 時間発展方程式)
- プリポストプロセッサ (CAD, メッシュ, データ可視化)

これらの各コンポーネントに使われるソフトウェアは年代とともに移り変わってきた。例えば, 1990 年台以前は, 数値解析ソルバーは通常, 自作ソルバーを FORTRAN か C で記述した。そして, 数値計画法としては, 最適性規準法 (OC) か逐次線形計画法 (SLP⁽²⁾, 例えば SLATEC⁽³⁾の dsplp に基づいた実装など) が主だったものであり, ほかに, CONLIN⁽⁴⁾, MMA⁽⁵⁾あるいは, 種々のメタヒューリスティックな手法をそれぞれで実装していた。また, プリポストとしては, Patran, FEMAP など高価なものを用いるか, 簡単なメッシュに関しては自作し, データ可視化に関しては, 3D が必要であれば OpenGL など自作していた。2000 年台前半になると, 数値解析も, オープンソースベースのライブラリを活用したものを, VTK⁽⁶⁾ベースのポストプロセッサと組み合わせて Python⁽⁷⁾や C++から利用できるようになり, 数値計画法もオープンソースベースの GLPK⁽⁸⁾や COIN-OR⁽⁹⁾のソルバー群など現代的なソルバーが利用できるようになった。そして, 2000 年台後半以降になると, もともと MATLAB⁽¹⁰⁾のツールボックスであった FEMLAB が COMSOL⁽¹¹⁾へ進化し, 状況が一変した。COMSOL は, MATLAB のインターフェイスを介してマトリックスレベルまでアクセスできる FEM ソルバーとして, トポロジー最適化研究の恰好のプラットフォームとなり, 設

2015 年 9 月 14 日

*¹ 正員, (株) 豊田中央研究所 (〒 480-1192 愛知県長久手市横道 41 - 1)

計変数を FEM の自由度の一つとして管理する手法や、随伴感度解析手法などが実装されていった。そして、2005 年に Okkels⁽¹²⁾らにより COMSOL 上での一般的な随伴解析手法が示されると、この流れは決定的なものとなった。更に数年後、COMSOL のプラグインである Optimization Lab の例題として、トポロジー最適化が示され、COMSOL で解ける問題は、トポロジー最適化で解ける、という状況が出来上がった。

そして近年では、Optimization Lab は使わないにせよ、COMSOL 上で、FEM 解析のみならず、設計変数まで管理し、随伴解析、感度解析、設計変数更新までを COMSOL と MATLAB 内で完結させる研究スタイルが当たり前となり、COMSOL 依存度が非常に高くなった。しかし、COMSOL のバージョンアップによる高機能化に伴い、後方互換性問題、ブラックボックス化、モジュール細分化問題などが露呈してきた。これに対し、筆者は若干の危機感を感じ、次期研究プラットフォームの可能性の探求を始めた。

2. 現状の抱える問題

前述の通りトポロジー最適化の COMSOL 上での実装の技術が蓄積され、COMSOL で解ける問題は、最小労力でトポロジー最適化で解き直すことができる、という状況が出来上がっている。これは、トポロジー最適化研究が、実装に煩わされずに、定式化の優劣のみに集中できる、という素晴らしい状況を生み出している反面、COMSOL で解きにくい問題にチャレンジするときの心理的障壁を高くしていると言える。

それでは、COMSOL で解けない問題に対する取り組みはどうなっているかという点、LBM や、FDTD などの FEM 以外のソルバーを用いた取り組みはあるが散発的と言わざるを得ない。

逆に、COMSOL で扱いにくい、あるいは COMSOL だけでは完結できない問題としてはいかのようものが挙げられる。

- マルチスケール連成問題
- マルチディシプリナリ問題
- 超大規模問題
- メッシュレベル、ローレベル問題

いずれも、重要な問題であり、取り組みがいのあるテーマに思える。したがって、次期プラットフォームとしては、これらのテーマに着手しやすいようなものを考えたい。次章では、そのようなプラットフォーム構築に利用できそうなソフトウェアについて述べる。

3. 利用できそうなソフトウェア

3.1 数値解析ソルバー

数値解析ソルバーとしては、随伴解析、感度解析まで想定すると、非常に汎用性が高い、もしくは、ソースが開示されていて、改造可能であることが条件となる。

3.1.1 マルチフィジックスソルバー

COMSOL が隆盛を極める中、それと対抗するように様々な PDE ソルバー、マルチフィジックスソルバーも、時として大規模なプロジェクトを組み、活発に開発されてきた。それにより、近年では、様々なオープンソースの PDE ソルバー、マルチフィジックスソルバー、あるいは、マルチフィジックスソルバー用ライブラリーが利用可能である。代表的なものを列挙する。

- GetDP⁽¹³⁾
- FreeFEM++^{(14) (15)}
- FEniCS⁽¹⁶⁾
- GetFEM++⁽¹⁷⁾
- AMDiS⁽¹⁸⁾
- Deal.II⁽¹⁹⁾
- MOOSE Framework⁽²⁰⁾
- NGSolve⁽²¹⁾

このリストは大まかに抽象度の高い順になっており、上位 3 個は弱形式を何らかの記述言語により記述することにより自動的に離散化を行う。したがって、PDE をベースにした研究に適している。他方、リストの中段以降は、マトリクスをアセンブルするための関数群を提供し、ユーザーがコンパイルし、実行型を得る。この方式を取ると、ユーザーの求めるスケールのソルバーを構築することができ、HPC に適している。また、ソフトウェアによって利用可能な要素が異なり、これにより、適用可能な物理現象が制限される場合がある。たとえば、電磁場場解析には Nédélec

要素⁽²²⁾が必要だが、これをサポートするソフトウェアは非常に少ない。つまり、どんなソフトウェアにも得意不得意があり、すべてをカバーすることは難しい。また、FEM 以外のソルバーとの連携も重要である。したがって、ソルバー選択が自由なプラットフォーム構築が重要であると言える。

Table 1 マルチフィジックスソルバーの比較

	COMSOL	GetDP	FreeFEM++	FEniCS	GetFEM++	AMDiS	Deal.II	MOOSE	NGSolve
スクリプト型	○	○	○	○	○				
コンパイル型				○	○	○	○	○	○
要素自由度	◎		○	○	◎	○	△		
Nédélec 要素	◎			○	◎		△		◎
並列化	○			◎	○	◎	◎	◎	○

3.1.2 FEM 以外

フォトニクスを含む高周波電磁波解析の代表的手法の一つである時間領域有限差分法 (FDTD 法⁽²³⁾) についても、ソースコードレベルでアクセス可能で、ハイクオリティなソフトウェアが増えている。

- MEEP⁽²⁴⁾
- OpenEMS⁽²⁵⁾
- FDTD++⁽²⁶⁾
- GMES (Python)

また、流体解析に適した有限体積法 (FVM) では OpenFOAM が有名である。

3.2 CAS/自動微分 (AD)

COMSOL は自動微分など CAS 的 (数式処理システム) な機能を併せ持つ。したがってそのような機能も取り入れたい。利用可能なソフトウェアの例を示す。

- CAS
 - Maxima⁽²⁷⁾
 - FEniCS⁽¹⁶⁾
- CAS/AD 機能内蔵
 - GetDP⁽¹³⁾
 - FreeFEM++⁽¹⁵⁾
 - CAS/AD 機能提供
 - AlgoPy⁽²⁸⁾ (Python, AD)
 - SymPy⁽²⁹⁾ (Python, CAS)

3.3 数理計画法

数理計画法の選択の自由度を広げるには、COIN-OR⁽⁹⁾の利用が考えられる。COIN-OR は非常に多数のコンポーネントから成るが以下に主要なものを挙げる

- CLP⁽⁹⁾ (線形計画問題 SIMPLEX 法)
- CBC⁽³⁰⁾ (混合整数問題分岐限定法)
- IPOPT⁽³¹⁾ (非線形計画問題内点法)
- CSDP⁽³²⁾ (半正定値計画問題内点法)
- PuLP⁽³³⁾ (線形計画問題モデラー)

また、Python の最適化用モジュールである PyOpt⁽³⁴⁾は、ソルバーとして、SQP やその亜種をいくつか選択でき、さらに、MMA⁽⁵⁾、GCMMA のインターフェイスも持っている。

3.4 プリポスト

トポロジー最適化においてプリプロセッサはさほど重要ではなく、最適化手法の研究の段階では、多くの FEM ライブラリの内蔵メッシュャーで十分対応可能である。しかしながら、研究成果をより現実的で複雑な問題設定に適用するためには、高機能なプリプロセッサの活用が不可欠となる。また、近年 3D プリンタの普及のおかげでローエンドの 3D CAD が充実してきているので、それらの利用可能性を検討する価値はあると思われる。

- プリプロセッサ
 - OpenCASCADE⁽³⁵⁾
 - Gmsh⁽³⁶⁾ (GetDP のプリポスト)
 - NetGen⁽³⁷⁾ (NGSolve のメッシャー)
 - OpenSCAD⁽³⁸⁾ (記述型ソリッドモデラー)
 - Ayam⁽³⁹⁾ (CG系モデラー, NURBS, CSG, ポリゴンなどサポート)
- Blender⁽⁴⁰⁾ (ポリゴンベース)
- ポストプロセッサ
 - ParaView⁽⁴¹⁾ (VTK)
 - VisIt⁽⁴²⁾ (VTK)
 - OpenDX⁽⁴³⁾
 - Povray⁽⁴⁴⁾, Blender⁽⁴⁰⁾ など CG ソフト

4. 結 言

自由な発想に基づいた研究のため研究用ツールの選択肢を広げたいと考え、トポロジー最適化に利用可能なソフトウェアを調査した。オープンソースのマルチフィジックスライブラリも非常に進化したため、利用を検討する価値は十分あると考える。COMSOL の完成度と優位性の高さは揺ぎないが、一方、すべての要求を一つのソルバーでカバーすることは難しくもある。よって、ソルバーの選択に自由度のある研究用プラットフォームが重要だと考える。

文 献

- (1) M. P. Bendsøe and N. Kikuchi: "Generating optimal topologies in structural design using a homogenization method", *Computer Methods In Applied Mechanics And Engineering*, **71**, pp. 197–224 (1988).
- (2) O. Zienkiewicz and J. Campbell: "Shape optimization and sequential linear programming", *Optimum structural design*, pp. 109–126 (1973).
- (3) W. Vandevender and K. Haskell: "The SLATEC mathematical subroutine library", *ACM SIGNUM Newsletter*, **17**, 3, pp. 16–21 (1982).
- (4) C. Fleury: "CONLIN: An efficient dual optimizer based on convex approximation concepts", *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **1**, 2, pp. 81–89 (1989).
- (5) K. Svanberg: "The method of moving asymptotes- A new method for structural optimization", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **24**, 2, pp. 359–373 (1987).
- (6) W. J. Schroeder, B. Lorensen and K. Martin: "The visualization toolkit", Kitware (2004).
- (7) G. Van Rossum and F. L. Drake: "Python language reference manual", Network Theory (2003).
- (8) A. Makhorin: "GLPK (GNU linear programming kit)" (2008).
- (9) R. Lougee-Heimer: "The Common Optimization INterface for Operations Research: Promoting open-source software in the operations research community", *IBM Journal of Research and Development*, **47**, 1, pp. 57–66 (2003).
- (10) "MATLAB: high-performance numeric computation and visualization software", MathWorks Inc. (1992).
- (11) "COMSOL multiphysics", COMSOL Group (2005).
- (12) L. Olesen, F. Okkels and H. Bruus: "A high-level programming-language implementation of topology optimization applied to steady-state Navier–Stokes flow", *Int. J. Numer. Meth. Engng*, **65**, 7, pp. 975–1001 (2006).
- (13) P. Dular and C. Geuzaine: "GetDP: a general environment for the treatment of discrete problems" (1997).
- (14) G. Allaire and O. Pantz: "Structural optimization with *freefem++*", *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **32**, 3, pp. 173–181 (2006).
- (15) F. Hecht: "New development in *freefem++*", *Journal of Numerical Mathematics*, **20**, 3-4, pp. 251–266 (2012).
- (16) A. Logg, K.-A. Mardal and G. Wells: "Automated solution of differential equations by the finite element method: The FEniCS book", Vol. 84, Springer Science & Business Media (2012).
- (17) Y. Renard and J. Pommier: "Getfem finite element library", See <http://home.gna.org/getfem/> (2010).
- (18) S. Vey and A. Voigt: "AMDiS: adaptive multidimensional simulations", *Computing and Visualization in Science*, **10**, 1, pp. 57–67 (2007).

- (19) W. Bangerth, R. Hartmann and G. Kanschat: “deal.ii — a general-purpose object-oriented finite element library”, *ACM Transactions on Mathematical Software*, **33**, 4, p. 24 (2007). Article 24, 27 pages.
- (20) D. Gaston, C. Newman, G. Hansen and D. Lebrun-Grandie: “MOOSE: A parallel computational framework for coupled systems of nonlinear equations”, *Nuclear Engineering and Design*, **239**, 10, pp. 1768–1778 (2009).
- (21) J. Schöberl and S. Zaglmayr: “High order nédélec elements with local complete sequence properties”, *COMPEL-The international journal for computation and mathematics in electrical and electronic engineering*, **24**, 2, pp. 374–384 (2005).
- (22) J. C. Nédélec: “Mixed finite-elements in \mathbb{R}^3 ”, *Numerische Mathematik*, **35**, 3, pp. 315–341 (1980).
- (23) K. Yee: “Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media”, *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, **14**, 3, pp. 302–307 (1966).
- (24) A. F. Oskooi, D. Roundy, M. Ibanescu, P. Bermel, J. Joannopoulos and S. G. Johnson: “MEEP: A flexible free-software package for electromagnetic simulations by the FDTD method”, *Computer Physics Communications*, **181**, 3, pp. 687–702 (2010).
- (25) T. Liebig, A. Rennings, S. Held and D. Erni: “openEMS – a free and open source equivalent-circuit (EC) FDTD simulation platform supporting cylindrical coordinates suitable for the analysis of traveling wave MRI applications”, *International Journal of Numerical Modelling: Electronic Networks, Devices and Fields*, **26**, 6, pp. 680–696 (2013).
- (26) J. M. McMahon: “FDTD++”, See <http://www.fdtddx.com/> (2015).
- (27) P. N. de Souza, R. J. Fateman, J. Moses and C. Yapp: “The maxima book”, See <http://maxima.sourceforge.net/docs/maximabook/maximabook-19-Sept-2004.pdf> (2004).
- (28) S. F. Walter and L. Lehmann: “Algorithmic differentiation in Python with AlgoPy”, *Journal of Computational Science*, **4**, 5, pp. 334–344 (2013).
- (29) D. Joyner, O. Čertík, A. Meurer and B. E. Granger: “Open source computer algebra systems: SymPy”, *ACM Communications in Computer Algebra*, **45**, 3/4, pp. 225–234 (2012).
- (30) J. Forrest and R. Lougee-Heimer: “CBC user guide”, *INFORMS Tutorials in Operations Research*, pp. 257–277 (2005).
- (31) A. Wächter and L. T. Biegler: “On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming”, *Mathematical programming*, **106**, 1, pp. 25–57 (2006).
- (32) B. Borchers: “CSDP, a C library for semidefinite programming”, *Optimization methods and Software*, **11**, 1-4, pp. 613–623 (1999).
- (33) S. Mitchell, Michael, I. Dunning: “PuLP: a linear programming toolkit for python”, Sep-2011 (2011).
- (34) R. E. Perez, P. W. Jansen and J. R. Martins: “pyOpt: a Python-based object-oriented framework for nonlinear constrained optimization”, *Structural and Multidisciplinary Optimization*, **45**, 1, pp. 101–118 (2012).
- (35) Open CASCADE S.A.S.: “Open CASCADE technology, 3D modeling and numerical simulation” (2012).
- (36) C. Geuzaine and J.-F. Remacle: “Gmsh: A 3-D finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, **79**, 11, pp. 1309–1331 (2009).
- (37) J. Schöberl: “NETGEN an advancing front 2D/3D-mesh generator based on abstract rules”, *Computing and visualization in science*, **1**, 1, pp. 41–52 (1997).
- (38) M. Kintel and C. Wolf: “Openscad, the programmers solid 3d cad modeller”, See <http://www.openscad.org/> (2011).
- (39) R. Schultz, et al.: “Ayam 1.22”, See <http://ayam.sourceforge.net/docs/ayam.html> (2015).
- (40) Blender Foundation: “Blender 2.75a”, See <http://www.blender.org/> (2015).
- (41) A. Henderson, J. Ahrens, C. Law, et al.: “The ParaView Guide”, Kitware Clifton Park, NY (2004).
- (42) H. Childs, E. Brugger, B. Whitlock, J. Meredith, S. Ahern, D. Pugmire, K. Biagas, M. Miller, C. Harrison, G. H. Weber, H. Krishnan, T. Fogal, A. Sanderson, C. Garth, E. W. Bethel, D. Camp, O. Rübel, M. Durant, J. M. Favre and P. Navrátil: “VisIt: An End-User Tool For Visualizing and Analyzing Very Large Data”, *High Performance Visualization—Enabling Extreme-Scale Scientific Insight*, CRC Press, pp. 357–372 (2012).
- (43) D. Thompson, J. Braun and R. Ford: “OpenDX: Paths to Visualization”, *Visualization and Imagery Solutions, Incorporated* (2004).
- (44) “Persistence of Vision Raytracer (version 3.6)”, See <http://www.povray.org/download/> (2004). Persistence of Vision Pty. Ltd.