

先端的粒子法シミュレーションコードの開発

課題責任者

古市 幹人 海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門 数理科学・先端技術
研究開発センター

著者)

古市 幹人^{*1}, Jian Chen^{*1}, 西浦 泰介^{*1}

^{*1} 海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門 数理科学・先端技術研究開発センター

DEM (Discrete element method)やSPH (Smoothed hydro dynamics) といった粒子法は、幾何条件に対する制約が少ないことから、地球科学の解明や産業利用において需要の高いシミュレーション手法のひとつである。しかしながら効率的な並列化や、非線形レオロジーへ等モデル拡張等に技術的課題がある。そこで本課題ではこれらの技術的課題の解決に取り組み、DEPTH ((DEM based Parallel mulTi-physics simulator) コードの開発に反映させ、それを用いた付加体形成、地すべり等の防災研究、産業問題の解決に取り組んでいる。本年度は、DEMによる地盤粒子モデル開発およびSPHにおける半精度混合演算の活用においての技術開発成果があった。またDEPTHを活用したアプリケーションとして大規模地滑り計算、粒状体水中混合プロセスの最適化や産業展開としてシールド掘削試験機の解析において進捗があるため、本稿で紹介する。

キーワード：粒子法, DEM, SPH, 粒状体, 混相流計算, 地滑り, 付加体形成

1. 緒言

Discrete element method (DEM)は個々の粒子の運動を摩擦接触(図1)を考慮した運動方程式を解くことでLangrange的に追跡し全体の運動を表す粒子法の一つである。DEMは地球科学・物理学において摩擦要素の集団運動という普遍的なテーマに挑戦するツールであり、同時に粉体工学における数値解析手段の柱である。DEMの大規模計算により粒状体の集団運動の直接的なマルチスケールダイナミクスの再現が可能となり[1,2],またより科学的根拠に基づいた防災・地盤工学シミュレーションが実現できる可能性がある。しかしながら、DEMは他の粒子法よりも接触相互作用計算に伴うメモリ管理が複雑なため、特に分散メモリへの対応が難しく地球シミュレータなどの大規模計算での活用が限定的である。そこで、我々は独自の動的負荷分散技術[3]を実装した大規模並列計算向けソフトウェアDEPTH (DEM based Parallel mulTi-physics simulator)を開発した。本課題ではDEPTHに関わる要素技術開発とともに、地滑りや付加体形成、さらに粉体機器最適化といった問題にES4を用いて取り組んでいる。本稿では、粒子相互作用の拡張や演算の効率化といった技術開発、およびアプリケーションによる固体地球科学、粉体工学、土木工学での成果について報告を行う。

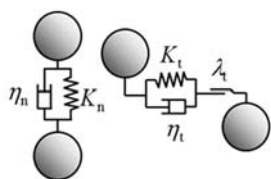


図1. 法線と接線方向の接触摩擦相互作用

2. 地盤粒子モデルと周期境界ブロック技術の開発

これまでの我々は、DEPTHを基礎的な粉粒体挙動解析に用いてきたが、モデル拡張により岩石や土の材料挙動を扱えるように改良した。従来の接触摩擦相互作用に加え、粒子が離れる際の粘着力を導入することで、地盤等の材料挙動の再現を可能にした。本モデルに搭載した法線方向および接線方向の粘着力パラメータをキャリブレーションすることで、要素試験、例えばコンクリートのスランブフロー試験(図2)や、地盤の3軸圧縮試験の材料挙動再現が可能である(図3(a))。

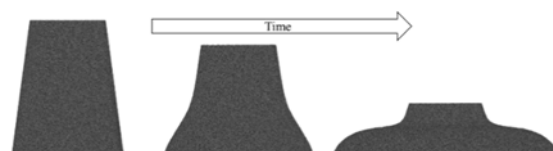


図2. コンクリートを模した数値スランブフロー実験

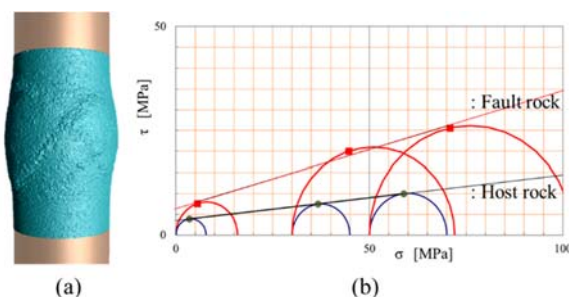


図3. (a)数値三軸圧縮試験と、再現された(b)母岩及び断層岩の破壊包絡線

図3(b)は神戸大学により房総半島において実際に採取され測定された深さ2-4kmにあった母岩と断層岩の3軸圧

縮試験を DEPTH により模擬した結果である。開発した地盤粒子モデルにより破壊包絡線が精度よく再現することが出来た (表 1)。本技術により現実的な岩石破壊性状を反映した付加体形成シミュレーションが可能になった。

	Slope of envelope: ϕ [Deg]		Cohesion: c [MPa]	
	Host rock	Fault rock	Host rock	Fault rock
DEM	6.26	14.93	3.50	6.12
Experiment	6.24	15.20	3.72	5.10

表 1. 実測値と地盤粒子モデル計算の比較

上記の地盤粒子モデル及び数値要素試験によって、粒子配置を含めてキャリブレーションされた供試体データが作成できる。しかし、それらを例えば地滑り問題等にそのまま適用することは困難である。なぜならば、3次元問題における初期粒子充填コストが大きいためである。粉粒体シミュレーションにおいて初期粒子配置は十分に無秩序な構造 (ランダム充填) を仮定する上で重要であるが、従来の 2次元の小規模並列計算ではなく ES4 や富岳を活用した 3次元の大規模並列計算を実施するには、ランダム充填を広領域に適応するためのコストが甚大となる。この問題を解決するために、PG box (Periodic boundary Granular Box) を考案した。PG box は全面周期境界条件を満たす直方体領域に粒子をランダム充填したものであり、接続することで任意領域のランダム充填を簡易に模擬できる。我々は、全面周期境界条件における粒子充填方法を提案し、PG box を作成することに成功した。

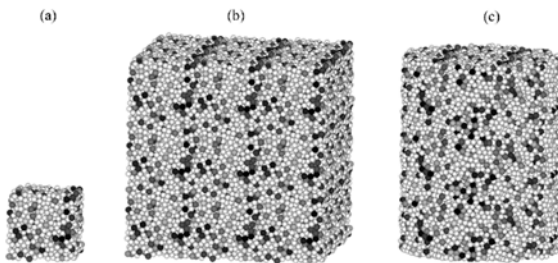


図 4. (a)PG box の(b)連結と(c)任意形状への加工

PG box を接続した粒子群は、単位サイズに特徴づけられる内部異方性を有する。つまり PG box を構成する粒子数 (コスト) と統計的均質性 (品質) の間にはトレードオフがある。そこで、粒子数の異なる PG box において、接続ベクトル (接触面の法線) の統計的性質を調査し、粒子数の増加に伴い統計的に均質な性質を持つことを確認できた。また同様の調査を数値 3 軸圧縮実験で行うことで、PG box を用いて作成した供試体が、ランダム充填された供試体と同様の破壊包絡線を漸近的に再現できることが確認できた (図 5)。これらの技術開発により、大規模 DEM 計算において低コストでランダム充填を模擬する初期粒子配置が実現する事ができた。

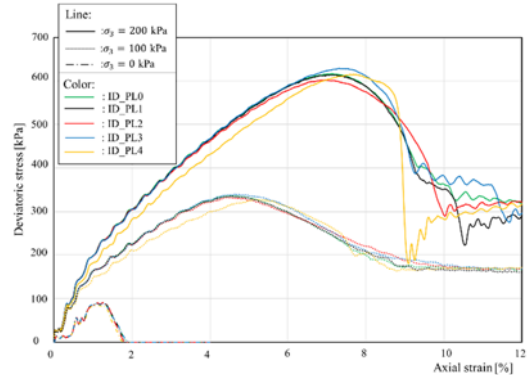


図 5. 異なる粒子数の PG box (ID_PL0 : 120 万粒子～ID_PL4 : 210 粒子) を用いた 3 軸圧縮試験結果。

3. 半精度混合演算を用いた SPH 解析技術

GPU をはじめとする近年の計算機において、半精度演算をはじめとする低精度演算性能が著しく向上している。そこで、流体の粒子シミュレーション (SPH) の半精度演算活用について研究開発した。半精度演算が科学計算において有用であるか否かは、半精度演算によりもたらされる計算コストの削減と解の精度劣化のトレードオフに依存する。その背景には、粒子数増加による精度向上と計算コストの増加の関係がある。そこで、対応関係を整理し解の精度 (E) とコスト (elapsed time : ΔT) が以下の関係

$$\Delta T^{[p1]}(E_0^{[p1]})^{(d+2)/\alpha} < \Delta T^{[p2]}(E_0^{[p2]})^{(d+2)/\alpha} \quad (1)$$

を満たせば、半精度演算等の低精度演算 ($p1$) が倍精度演算 ($p2$) 等に対して有効である事を導き出した。ここで d は次元数であり、 $-\alpha$ は得られる精度の次数である。そこで、実機である ES4—GPU などを用いて、標準的な弱圧縮 SPH 計算において、様々なベンチマーク問題を解き半精度の有効性を実測した。また、SPH の定式化において Scaling と Shifting と導入し、低精度由来の丸め誤差に対してロバスタな SPH の multi-walk 実装方法を提案した。図 6 は Couette 流における本手法の効果を示しており、演算精度の影響が Scaling と Shifting により小さくなっていることが分かる。

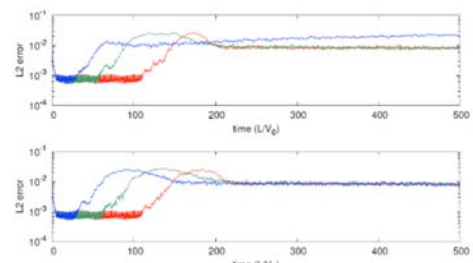


図 6. Couette 流のエラー比較 : Scaling and shifting ありが上図なしが下図。青、緑、赤線は順に半精度、単精度、倍精度。

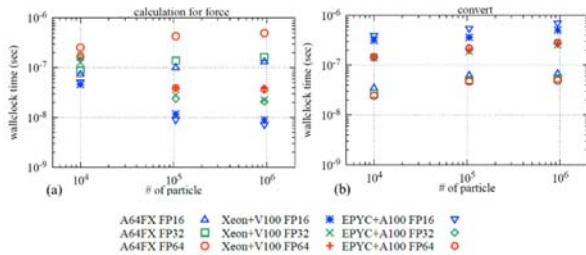


図 7. カーネル計算部分と精度変換を伴うメモリコピーに費やした経過時間比較。

図 7 では実行時間への影響を比較した。ES4-GPU に搭載された A100 ではカーネル積分に必要な計算時間が半精度により劇的に圧縮された一方で、得られた解を倍精度に戻すコストが相当かかることが明らかになった。これは ES4 の CPU である EPYC において半精度演算が公式にサポートされておらず最適化が出来なかったためである。一方で A64FX (富岳) においては半精度演算が公式にサポートされているため、このような問題がない一方で、演算性能においては GPU と比較して低いものとなっている。結果、富岳では半精度において (1) を満たすことが分かった。本研究によりアーキテクチャの違いによる混合精度演算スキームの理解が進んだ。

4. 地滑りシミュレーション

地すべりや雪崩は古から数値解析の研究対象であり、様々な手段で、実用的なすべり挙動予測が実施されてきた。しかしながら課題として、既往研究は主に 2 次元であり、3 次元挙動についての議論は多分に定性的である。そこで、DEPTH を用いた直接 3 次元解析に取り組んだ。対象は 2016 年 4 月に発生した阿蘇大橋付近の地滑りである。地盤モデルとして、2 章にある PG box を用いて九州大学の地質調査で得られた黒ぼく土の力学特性 (c , ϕ) = (23.0, 35.0) に対してキャリブレーションを行った。粒子は、高精度版 3D 地形データ (50 cm 解像度) とボーリング調査の結果をもとに地盤特性を変えて図 8 のように配置した。

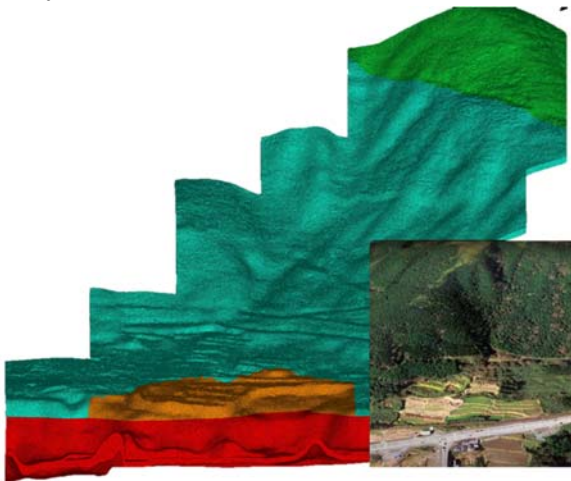


図 8. 阿蘇大橋イベントのシミュレーション初期条件。色はボーリング調査を反映した異なる地盤層を示す。

ES4-CPU を用いた計算では粒径 20 cm 程度の約 1000 万粒子の DEM 計算を行った。阿蘇大橋地すべりシミュレーションにおいて重要なテーマはドライな条件で 700m を超える長距離土砂輸送の再現である。既往研究での非現実的パラメータ (e.g. 摩擦係数 $\mu < 0.01$) を用いなければ、そのような長距離輸送は再現出来ない。そこで我々輪は $\mu = 0.3$ を使用した計算を実施したところ、富岳を用いた解析結果を含めて、土砂輸送の到達距離において、モデル粒径依存性があることを明らかにした。一方で、シミュレーション結果は到達距離の粒径依存性を考慮に入れても、山体上部の崩壊だけでは、阿蘇大橋付近まで土砂を輸送することは困難であることを示唆していた。実際に下部における崩壊を考慮した計算においては、図 9 のように下部に存在し本地滑りによって崩落した阿蘇大橋へと土砂供給が可能になっている。この考察は別途行われたボーリング調査等と整合的なものとなった。

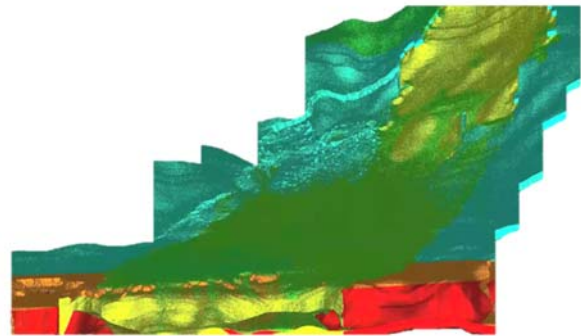


図 9. 下部崩落シナリオを含めたシミュレーション結果。

5. 水中での粒状体混合シミュレーション

粒状体の混合プロセスの最適化は古くからの工学的テーマであり、近年は海底資源開発等の需要から海洋土木の観点から注目を集めている。そこで我々は、DEPTH を用いて、海中機器の性能予測のためのアプリケーションとして水中粒状体混合シミュレーションを実施した [4, 5]。従来の DEM モデル (図 1) に加え、Lubrication モデルを加えることで、ブレード回転によって水中で混合される粒状体の挙動が再現できる。本アプリケーションでは、色砂

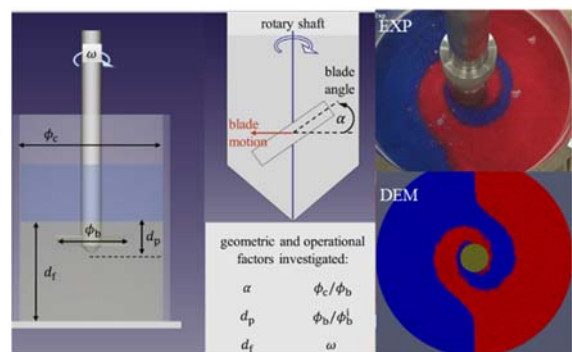


図 10. 水中色砂混合実験の設定とシミュレーションと実験結果の可視化比較

Properties	Values
Maximal diameter of sand grain	0.85 mm
Mass-median diameter D_{50} of sand grain	0.5487 mm
Density of sand grain ρ_s	2700 kg/m ³
Minimal and maximal dry bulk density	(1332, 1651) kg/m ³

表 2. 水中色砂混合試験の設定

を用いた実実験との直接比較によりキャリブレーションを実施した(図 10)。表 2 に示した実際の粒径を用いた直接計算には 900 万以上の粒子が必要であり、従来のコードでは困難であったが、DEPTH を用いることにより可能となった。そして、図*のように忠実に実験で観測された混合の様子が再現できた。表面模様だけでなくトルクや底面にかかる圧力においても整合的な結果が得られており、これらから本アプリケーションが室内実験を忠実に再現していると考えられる。次に開発したアプリケーションを用いて、混合効率に対する支配的な影響因子について調査を行った。混合効率はいかの無次元数 μ_{eff} で定義した。

$$\mu_{eff} = T / \{M_{eff} * g * (r_b + r_s) * 0.5\} \quad (2)$$

ここで、 T は回転トルクであり、 M_{eff} はブレード回転によって駆動される粒子の総運動量から見積った有効質量、 g, r_b, r_s は重力定数およびブレード及びシャフト半径である。影響因子としてブレード角、掘削深度、充填深度、容器サイズ、モデルスケール、回転速度について調査を行った。多くの因子が混合効率に対して線形的な振る舞いであることが分かった。しかしながら、ブレード角においては、図 11 に示すように(2)で定義した混合効率が非線形性を示している。このことは、混合効率の最適化においてブレード角の役割が有意に大きいことを示している[5]。上記の結果、DEPTH による検討によって、海洋土木の実機設計に有効な検討材料を与えることができた[6]。

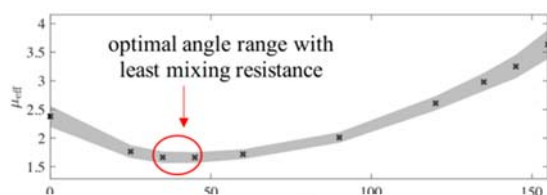


図 11. DEM 計算による混合効率依存性

6. SPH によるシールド掘削試験機の解析

トンネル掘削工事の方法として、シールド工法がある。シールド工法では、シールド掘削機を使用し、削られた土砂はパイプや電動車などを使用して地上に運ばれる。この時、掘削した土砂の排出を円滑に進めるために添加剤を混ぜることで土砂のレオロジーを制御する。そのため、掘削過程で時々刻々変化する土砂と添加剤の混合物に対するレオロジー特性を明らかにすることが重要である。そこで、SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法を用いて、シールド試験機における土砂のレオロジー解析手

法を開発した(図 12)。本手法では非ニュートンレオロジーモデルを実装し、土砂と添加剤の混合物の流動挙動を解析することが可能である。そのため、カッターにより土砂を攪拌しながら、回転するフラッパーによって土砂のレオロジーをモニタリングすることが可能となった。

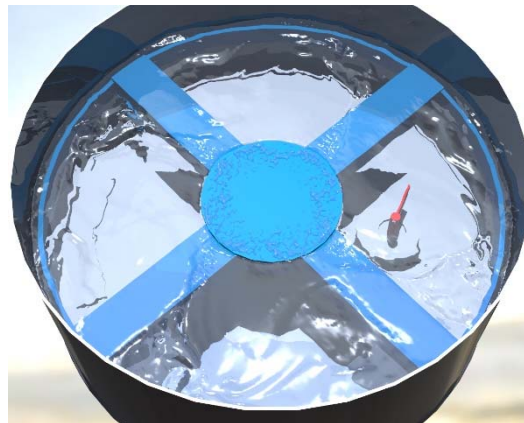


図 12. シールド試験機のシミュレーション結果

7. SPH-DEM による土砂の流動解析

土木の施工現場では、地盤の掘削や液状化など、砂と水が混ざった土砂の流動予測が必要となる場合が多くある。そこで、DEPTH において水の流れに対する SPH と土粒子の運動に対する DEM の連成シミュレーション手法を開発した。図 13 は、砂と水の連成流れに対する解析例である。下中央に排出口を設けると、最初のうちは水と混ざった砂が排出されるが、徐々に砂粒子は粒子間の摩擦により支え合うことで排出が抑制され、アーチ状のトンネルが形成された。その後、粒子間摩擦では耐えられなくなり、トンネルが崩壊することが確認された。今後、土木現場において土砂の流動解析に活用されることが期待される。

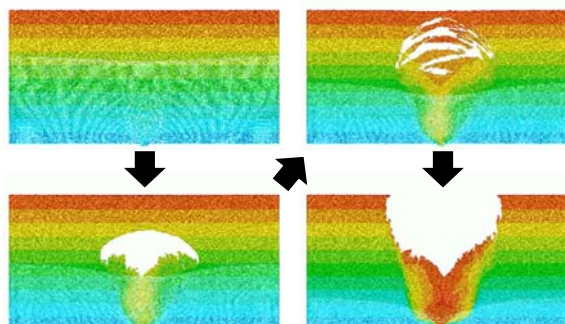


図 13. 土と水の連成流れに対する解析例

謝辞

本研究は JSPS 科研費 (JP18K03815, JP19KK0110, JP21K04265) の助成を受けたものです。

文献

- [1] M. Furuichi, et. al., Arcuate stress state in accretionary prisms from real-scale numerical sandbox experiments, *Sci. Rep.* 8, 8685 (2018).
- [2] Nishiura D, Furuichi M, Sagakuchi H., Real-scale DEM simulations on the fault evolution process observed in sandbox experiments, *Adv. Powder. Technol.*, Volume 32, Issue 11, (2021), Pages 4432-4441
- [3] M. Furuichi and D. Nishiura, Iterative load-balancing method with multigrid level relaxation for particle simulation with short-range interactions., *Comput. Phys. Commun.* 219, 135 (2017)
- [4] J. Chen, M. Furuichi and D. Nishiura, Discrete Element Simulation and Validation of a Mixing Process of Granular Materials, *Materials.*, 13(5) 1208 (2020)
- [5] J. Chen, D. Nishiura and M. Furuichi, DEM study of the influences of the geometric and operational factors on the mechanical responses of an underwater mixing process, *Powder. Technol.*, 392 251-263 (2021)
- [6] J. Chen, A. Kitamura, E. Barbieri, D. Nishiura, M. Furuichi., Analyzing effects of microscopic material parameters on macroscopic mechanical responses in underwater mixing using discrete element method, *Powder. Technol.*, 401 117304-117304, (2022)

Development of Advanced Particle Simulation Code

Project Representative

Mikito Furuichi Center for Mathematical Science and Advanced Technology, Research Institute for Value-Added-Information Generation, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

Authors

Mikito Furuichi *¹, Jian Chen *¹, Daisuke Nishiura *¹

*¹Center for Mathematical Science and Advanced Technology, Research Institute for Value-Added-Information Generation, JJapan Agency for Marine-Earth Science and Technology

Particle simulation methods such as DEM (Discrete element method) and SPH (Smoothed hydrodynamics) are useful for geoscience and industrial applications due to the flexibility of geometrical conditions. However, the efficient parallelization for HPC and model extension to nonlinear rheology are technically difficult. In this project, we develop the code DEPTH (DEM based Parallel mulTi-pHysics simulator) which solves solid earth science, disaster prevention, and industrial problems. In this fiscal year, we extend the DEM model to involve a geochemical particle module and the use of half-precision mixing operations to accelerate SPH computation. In addition, the progress of applications for large-scale landslide simulation, optimization of mixing processes of granular materials in water, and analysis of shield tunneling machines as industrial applications of DEPTH, are presented.

Keywords : Particle simulation, DEM, SPH, granular material, multi-phase, landslide, accretionary prism formation

1. Introduction

Discrete element method (DEM) solves individual particle motions with contact frictions (Fig. 1). Large-scale DEM calculations can reproduce the direct multiscale dynamics of collective motion of granular materials [1,2] and contribute to the development of truly physics-based disaster prevention and geotechnical applications. However, the basic algorithms of DEM are more complicated than other particle methods, especially in memory management for contact interaction calculations. It is therefore difficult to support the distributed memory parallelization to use such as Earth Simulator. Therefore, we have developed the software DEPTH (DEM based Parallel mulTi-pHysics simulator) for large-scale parallel computing utilizing our original dynamic load balancing technique [3]. Here we report on the technological developments of DEPTH, such as the extension of particle interaction and the improvement of computational efficiency, as well as the results of the applications in solid earth science, powder engineering, and civil engineering.

2. Geotechnical particle module and periodic boundary granular box

To deal with the material behavior of rocks and soils with DEPTH, we introduced a new geotechnical module. In addition to the conventional contact friction interaction, we extended the DEM model to handle adhesion forces. By calibrating the normal and tangential adhesion parameters in the model, it is possible to reproduce the material behaviors in such as slump flow tests of concrete and triaxial compression tests of soil (Fig 1(a)).

Fig. 1(b) shows the results of numerical triaxial compression tests of host rock and fault rock collected and measured by Kobe University in the Boso Peninsula at depths of 2-4 km. The

observed envelopes were well reproduced by the DEPTH. This technique enables the simulation of accretionary prism formation that reflects realistic rock fracture properties.

Our new particle models produce calibrated specimen data, including particle configurations. However, it is difficult to apply these techniques directly to, for example, landslide problems, because the initial cost to set up particles are large in 3D simulation. Although the initial random particle configuration is important to assume a sufficiently disordered structure, the cost of adapting random packing to a wide area is too large to perform a 3D large-scale simulation utilizing ES4. We thus proposed a periodic boundary granular box (PG box), which is an assembly of particles in quasistatic states within a virtual box, where the periodic boundary conditions are satisfied across all the box faces. This feature allows a seamless connection of PG boxes through their faces to form larger packings of complicated geometries at a reasonable cost even for large-scale simulations.

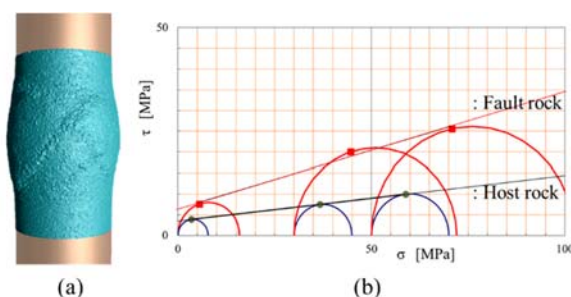


Figure 1: (a)Triaxial test (b)Simulated failure envelopes of host rock and fault rock.

3. An efficient implementation of low-order precision SPH

One of the recent key issues with HPC including GPU is improved computer performances in low-order precision simulations, such as half-precision. Therefore, we examined the efficient use of half-precision arithmetic for particle simulation of fluids (SPH). We propose a scaling-and shifting method to maintain the simulation accuracy at nearly the same level as float/double precision.

Fig. 2 compares the breakdown of the execution time. The computation time required for kernel integration was drastically reduced by using the half-precision with the A100 of ES4-GPU, the cost of converting the solution obtained in half-precision to double precision was substantial. This is because half-precision arithmetic was not officially supported in EPYC, the CPU of ES4, and thus could not be optimized. We could derive conditions including the architecture dependencies in which half-precision is effective on the SPH.

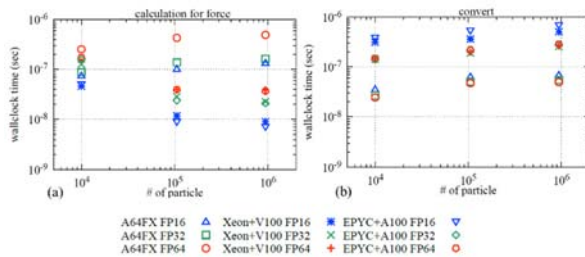


Figure 2: Comparison result of wall clock time with different precision schemes

4. Landslide simulation

One of the targets of DEM simulation is the landslide problem. Simulating detailed processes of three-dimensional behavior is challenging because requires fine-grained large-scale simulation. Therefore, we performed the simulation of Aso Ohashi landslide event that occurred in 2016 by using DEPTH. As a geotechnical model, we used the PG box from Sec. 2 that was calibrated for data of black ash soil obtained by Kyushu University. Particles were placed as shown in Figure 8 with different geotechnical properties based on the high-resolution version of the 3D topographic data (50 cm resolution) and the results of the borehole survey.

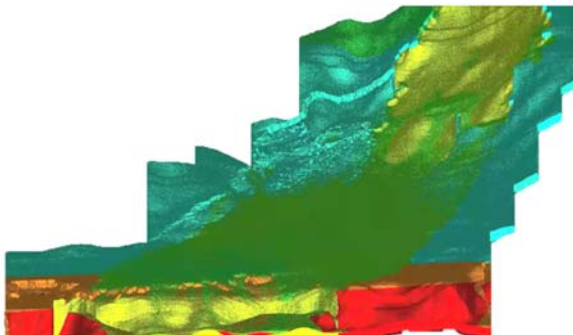


Figure 3: Result of landslide simulation with lower landslide scenario.

The landslide simulation using ES4-CPU was performed with approximately 10 million particles with a grain size of ~ 20 cm. An important question in the Aso event is why long-distance sediment transport over 700 m has occurred under dry conditions. Our experiments show that the scenario with a combination of two landslides, which are started from the top of the sliding area and the lower part, can reproduce long distant sediment transport, as shown in Fig. 3. This scenario is consistent with the borehole investigations that were conducted separately.

5. Underwater mixing process

Mixing granular materials plays versatile roles in various engineering fields. Especially in recent years, it has attracted much attention from marine engineering due to the demand for subsea resource development. Therefore, we have conducted underwater granular mixing simulations using DEPTH as an application for predicting the performance of subsea equipment [4,5,6]. Underwater granular mixing processes are modeled by the Lubrication force. Further, a non-dimensional parameter is introduced to evaluate the mixing resistance.

The simulation is first calibrated by a laboratory mixing experiment involving colored sand immersed in water (Fig. 4). The direct simulation with realistic particle size required over 9 million particles was performed by using DEPTH. A parametric study is then conducted to evaluate the geometric and operational factors involved in the mixing process, including the blade angle, penetration depth, filling depth, container-blade aspect ratio, model scale, and rotation speed. It was found that a blade angle range was a critical control parameter in terms of minimal mixing resistance. These findings can contribute to economic design for numerical and laboratory experiments with scaled-down models.

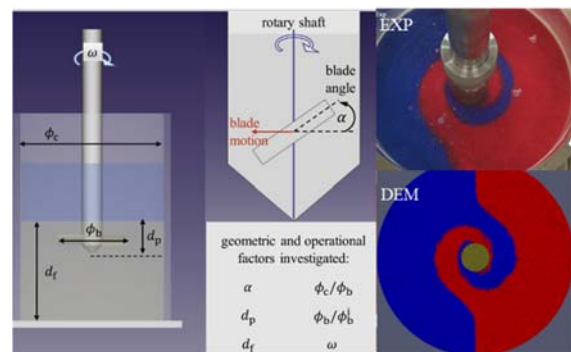


Figure 4: Underwater mixing experiment and comparison between real experiment and calibrated simulation result.

6. Multiphase SPH-DEM simulation for civil engineering

Prediction of dynamical motion of the sand-water mixed state is important for evaluating the risk of ground excavation and liquefaction. To tackle such problems, a coupled simulation method of SPH for water flow and DEM for soil particle motion was developed. Fig. 5 shows an example of the coupled flow

simulation of sand and water. When an outlet was placed at the bottom center, sand mixed with water was discharged at first, but gradually the sand particles supported each other by inter-particle friction, which suppressed the discharge and formed an arch-shaped tunnel. Subsequently, it was confirmed that the inter-particle friction could no longer hold out, and the tunnel collapsed. This method will be used for practical civil engineering applications in the future.

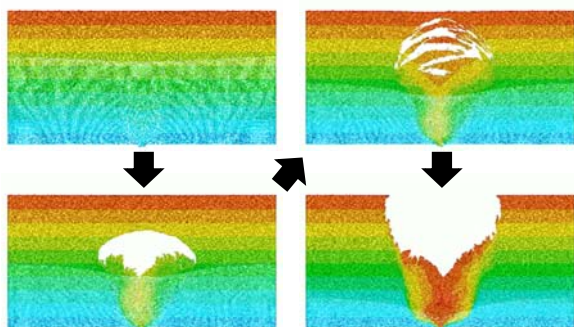


Figure 5: Results of soil-water coupled simulation.

Acknowledgement

This study was supported by a Grant-in-Aid for Scientific Research (JP18K03815, JP19KK0110, JP21K04265) from the Japan Society for the Promotion of Science.

References

- [1] M. Furuichi, et. al., Arcuate stress state in accretionary prisms from real-scale numerical sandbox experiments, *Sci. Rep.* 8, 8685 (2018).
- [2] Nishiura D, Furuichi M, Sagakuchi H., Real-scale DEM simulations on the fault evolution process observed in sandbox experiments, *Adv. Powder. Technol.*, Volume 32, Issue 11, (2021), Pages 4432-4441
- [3] M. Furuichi and D. Nishiura, Iterative load-balancing method with multigrid level relaxation for particle simulation with short-range interactions., *Comput. Phys. Commun.* 219, 135 (2017)
- [4] J. Chen, M. Furuichi and D. Nishiura, Discrete Element Simulation and Validation of a Mixing Process of Granular Materials, *Materials.*, 13(5) 1208 (2020)
- [5] J. Chen, D. Nishiura and M. Furuichi, DEM study of the influences of the geometric and operational factors on the mechanical responses of an underwater mixing process, *Powder. Technol.*, 392 251-263 (2021)
- [6] J. Chen, A. Kitamura, E. Barbieri, D. Nishiura, M. Furuichi., Analyzing effects of microscopic material parameters on macroscopic mechanical responses in underwater mixing using discrete element method, *Powder. Technol.*, 401 117304-117304, (2022)