

アドバンス・シミュレーション 第6回 ・セミナー 2022

2022年11月11日(金) 開催

プログラム

1. アドバンスソフト株式会社のご紹介 主催者あいさつ 1
- 招待講演①
 2. 「動的破壊解析手法の開発と強化ガラスへの適用事例」 3
国立研究開発法人 海洋研究開発機構 研究員 廣部 紗也子 様
- 招待講演②
 3. 「粒子法シミュレーションの大規模高速化と産業応用化」 23
国立研究開発法人 海洋研究開発機構 グループリーダー代理 西浦 泰介 様
4. アドバンスソフトからの情報提供 55

講演概要

招待講演① 「動的破壊解析手法の開発と強化ガラスへの適用事例」

国立研究開発法人 海洋研究開発機構 研究員 廣部 紗也子 様

破壊現象は予測が非常に難しく、破壊現象を正確に再現できる数値解析手法の確立は、ものづくりなど様々な場面において重要な課題となっています。しかし、弾性波の発生を伴いながら高速で進展する動的破壊は、近年提案されている様々な破壊解析手法でも未だ完全に再現することができません。また、破壊現象は材料内の残留応力や材料の不均一性によって大きく結果が変わるため、残留応力場や不均一性をもつ材料の破壊解析はますます困難になります。本講演では、世界で初めて残留応力場内における動的破壊進展解析を実現した解析手法の概要と、強化ガラスの破壊への適用事例について紹介します。

招待講演② 「粒子法シミュレーションの大規模高速化と産業応用化」

国立研究開発法人 海洋研究開発機構 グループリーダー代理 西浦 泰介 様

SPH や DEM などの粒子法は大変形や破壊・分裂など不連続な現象を扱うことが容易であるため多くの分野で使用されているが、実測結果の再現や現象の解明を正確に行うためには計算の並列化による大規模高速化がしばしば求められる。しかし、粒子法の並列化は格子法と異なり、共有メモリ並列においてはメモリ書き込み競合の発生、分散メモリ並列においては計算ノード間の計算負荷の不均一化など特有の難しさが有る。そこで本セミナーでは、粒子法の並列計算アルゴリズムの研究開発について紹介するとともに、本手法を実装したシミュレーションソフト (DEPTH) の産業応用化事例について紹介する。



アドバンスソフト株式会社 セミナー事務局

〒101-0062 東京都千代田区神田駿河台四丁目 3 番地 新お茶の水ビルディング 17 階西

TEL: 03-6826-3971 FAX: 03-5283-6580

URL: <http://www.advancesoft.jp/> E-mail: office@advancesoft.jp

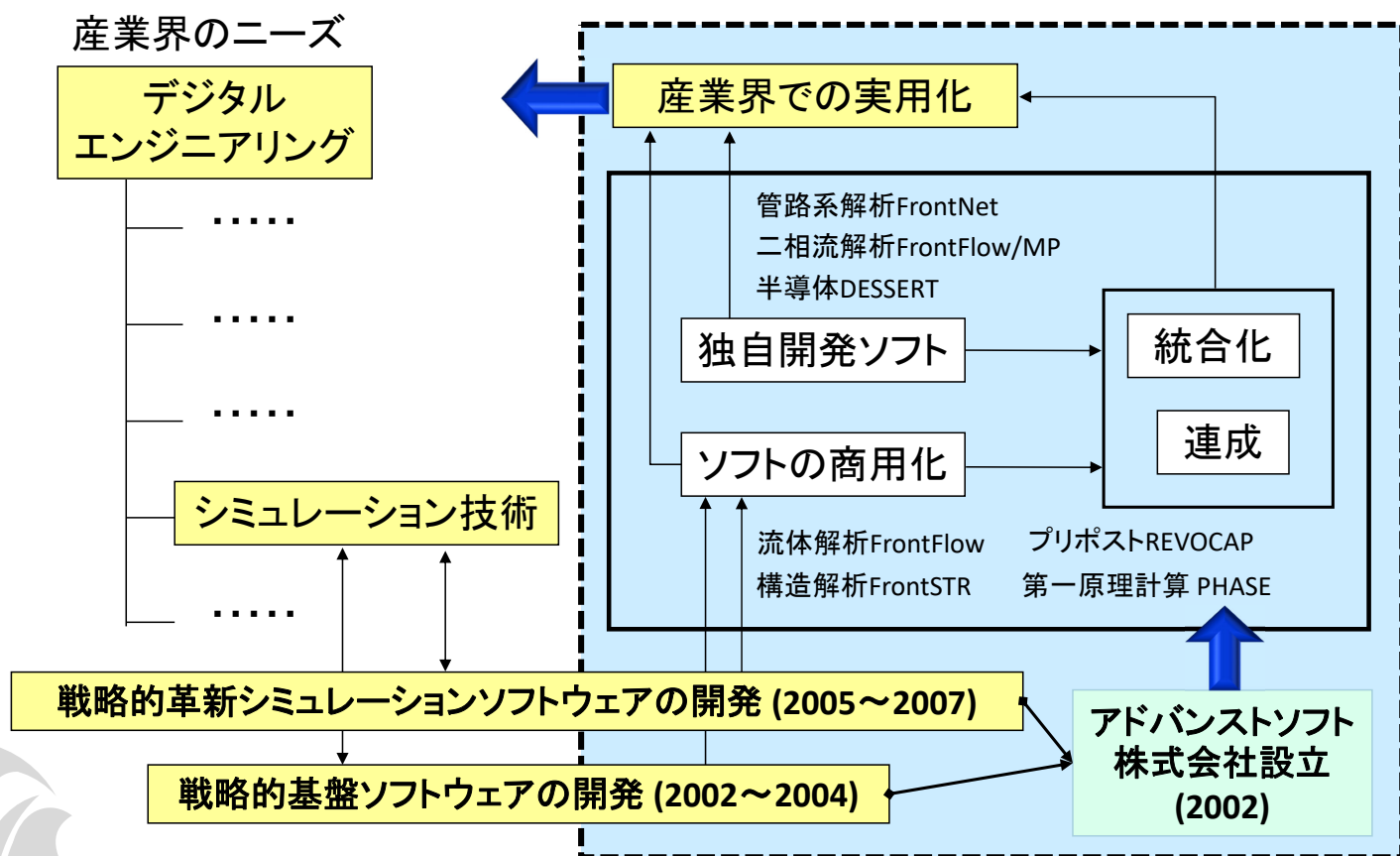
Copyright ©2022 AdvanceSoft Corporation. All rights reserved.

アドバンスソフト株式会社のご紹介

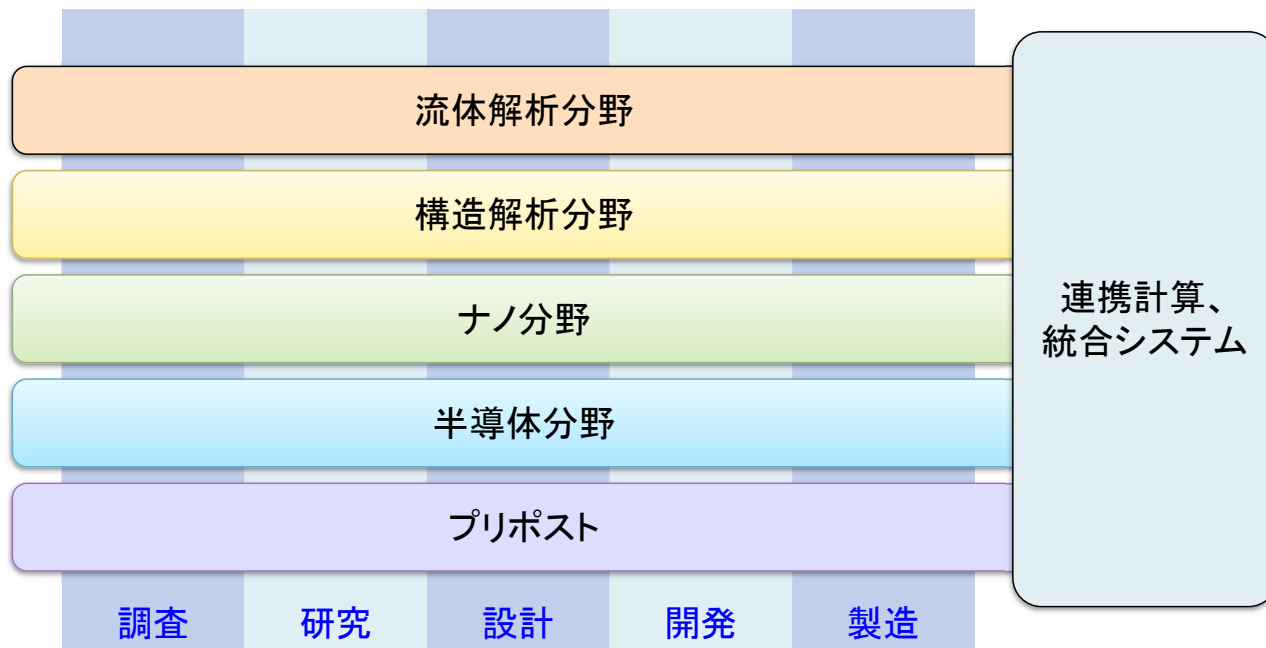
第6回 アドバンス・シミュレーション・セミナー
(JAMSTEC 特別セミナー①)

2022年11月11日 (金) 開催
アドバンスソフト株式会社

アドバンスソフトとは



事業分野



産業の主要な分野のあらゆるフェーズで直面する課題に対し、科学技術計算によるソリューションをご提供します。

ソフトウェアご紹介

<p>第一原理計算ソフトウェア Advance/PHASE</p> <p>密度汎関数理論に基づき、物質の性質を原子・分子レベルから解析する第一原理計算ソフトウェアです。</p> <p>ナノ材料 GUI 付属</p>	<p>ナノ材料解析統合 GUI Advance/NanoLabo</p> <p>材料解析ソフトウェア QuantumESPRESSO と LAMMPS に対応した統合 GUI です。</p> <p>ナノ材料 プリポスト</p>	<p>流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red</p> <p>非圧縮性から圧縮性流れまで、広範囲で複雑な流れに対応した汎用 3次元流体解析ソフトウェアです。</p> <p>流体</p>	<p>圧縮性流体解析ソルバー Advance/FOCUS-i</p> <p>非構造格子に対応した圧縮性流体解析ソルバーです。特に超音速や超音速の流れに適しており、高い並列化効率で計算出来ます。</p> <p>流体</p>
<p>大規模 3次元 TCAD システム Advance/TCAD</p> <p>超微細半導体デバイスからパワーデバイスまで、高度な機能と使いやすい GUI を備えた 3次元 TCAD システムです。</p> <p>半導体デバイス GUI 付属</p>	<p>ニューラルネットワーク分子動力学システム Advance/NeuralMD</p> <p>Neural Network Potential に基づいた分子動力学のソフトウェアです。第一原理計算の結果を教師データとして分子力場を作成します。</p> <p>ナノ材料 AI・機械学習</p>	<p>気液二相解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/MP</p> <p>沸騰と凝縮を伴う気液二相流の流動特性や伝熱特性を 3次元で解析するソフトウェアです。</p> <p>流体</p>	<p>管路系流体過渡解析ソフトウェア Advance/FrontNet</p> <p>配管や流体機器から成る管路系内流体に対する 1次元過渡解析の実用的なソフトウェアです。</p> <p>流体 GUI 付属</p>
<p>大規模電磁波解析ソフトウェア Advance/ParallelWave</p> <p>マクスウェル方程式を FDTD 法で 3次元的に解く電磁波解析ソフトウェアです。アンテナの電波解析から光の干渉や回折を考慮した光波解析まで幅広く適用できます。</p> <p>光波・電磁波</p>	<p>構造解析ソフトウェア Advance/FrontSTR</p> <p>固体の変形や熱伝導を、有限要素法を用いた 3次元で解析するソフトウェアです。</p> <p>構造</p>	<p>大気拡散影響予測システム Advance/Emerg</p> <p>大気拡散物質の挙動予測と影響評価のためのソフトウェアシステムです。</p> <p>流体 GUI 付属</p>	<p>深層学習用ツール Advance/iMacle</p> <p>機械学習のうち、ニューラルネットワークによる深層学習に特化、最小限度の機能に絞り込んだ比較的軽いツールです。</p> <p>AI・機械学習</p>
<p>汎用プリポストプロセッサ Advance/REVOCAP</p> <p>解析の一連の流れをスムーズに行う事を実現した汎用プリポストプロセッサです。</p> <p>プリポスト</p>	<p>音響解析ソフトウェア Advance/FrontNoise</p> <p>環境騒音、機器内の共振等における音場を有限要素法を用いた 3次元で解析するソフトウェアです。</p> <p>音響</p>	<p>自社による開発 (国プロ含む) 開発チームによる質の高いサポートサービス カスタマイズや機能追加も応相談 並列数無制限 (追加料金なし)</p>	

動的破壊解析手法の開発と 強化ガラスへの適用事例

廣部紗也子

国立研究開発法人 海洋研究開発機構
(JAMSTEC)

自己紹介

- 廣部 紗也子 (ひろべ さやこ)
- 所属：海洋研究開発機構 (JAMSTEC)
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
計算科学・工学グループ
研究員
- 専門：計算力学・固体力学・破壊力学
- 経歴：2018年 慶應義塾大学大学院理工学研究科後期博士課程修了 (博士 (工学))
2018年~2019年 日本学術振興会特別研究員 (PD)
2019年~2020年 慶應義塾大学大学院理工学研究科特任助教
2020年~ 海洋研究開発機構

内容

- 破壊解析手法について
 - 破壊解析の難しさ
 - 既存の破壊解析手法の紹介

- 粒子離散化有限要素法(PDS-FEM)の紹介

- 準静的破壊進展解析
 - 乾燥破壊現象における拡散現象と破壊現象の連成
 - 残留応力場内の準静的破壊進展解析

- 動的破壊進展解析
 - 解析力学に基づく定式化とsymplectic数値積分法
 - 強化ガラスの動的破壊
 - 残留応力場内の動的破壊進展解析

- まとめ

3

破壊解析手法について

4

破壊現象

■ 準静的破壊

- 場の静的つり合い状態を保ちながらゆっくりと進展する破壊
- 単純な条件下では解析的な議論によって予測できる場合もある
- 疲労破壊、乾燥ひび割れなど・・・

■ 動的破壊

- 弾性波を伴いながら高速に進展する破壊
- 亀裂進展速度、亀裂進展方向、亀裂の分岐等を解析的に予測することは困難
- 衝撃破壊、急激な熱膨張・収縮による破壊など・・・

✓ 破壊過程のカオス的な振る舞い

- 初期亀裂(欠陥)形状や材料の僅かな不均質性によって亀裂進展過程が大きく変化
- 同じ条件で実験を行っても全く同じ亀裂を再現するのは不可能

✓ 破壊によるランダムな不連続場の発生

- 数学的にも数値解析的にも扱いが非常に困難

5

破壊力学

■ 線形破壊力学

- 線形弾性体として近似できる材料の破壊を取り扱う

線形破壊力学で扱える破壊の数値解析手法

■ 弾塑性破壊力学（非線形破壊力学）

- 降伏下にある材料の破壊を取り扱う

■ 疲労き裂

- 繰り返し負荷による亀裂進展を取り扱う

■ クリープ

■ 腐食割れ

6

破壊解析手法

✓ 破壊によるランダムな不連続場の発生

- 数学的にも数値解析的にも扱いが非常に困難

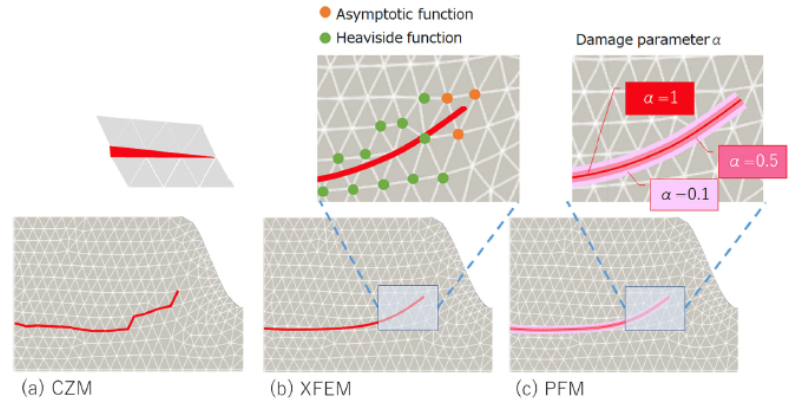


通常の有限要素法では不連続場を取り扱うことができない

■ FEMに基づく手法

- Cohesive Zone Model (CZM)
 - eXtended FEM (XFEM)
 - Phase Field Model (PFM)
- など

- 連続体の変形との等価性が保たれる
- 計算コストが高くなる
- 亀裂を表現するための関数パラメータに任意性がある



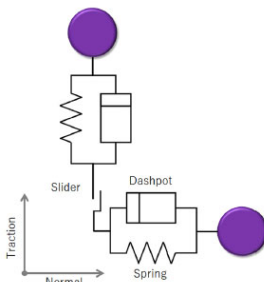
各手法における亀裂の表現

S. Urata, S. Hirobe, K. Oguni, and S. Li, J. Non-Cryst. Solids: X, 15, 100102 (2022)

破壊解析手法

■ 粒子的手法

- Discrete Element Method (DEM)
 - Peridynamics (PD)
- など



Bond-based PD

$$\rho(\mathbf{X})\ddot{\mathbf{u}}(\mathbf{X}, t) = \int \mathbf{f}(\mathbf{u}(\mathbf{X}', t) - \mathbf{u}(\mathbf{X}, t), (\mathbf{X}' - \mathbf{X}), t) d\mathbf{X}' + \mathbf{b}(\mathbf{X}, t)$$

- ρ : density of material point \mathbf{X}
- $\ddot{\mathbf{u}}$: acceleration of material point \mathbf{X}
- \mathbf{b} : arbitrary external force
- \mathbf{f} : force acting between \mathbf{X} and \mathbf{X}'

積分系の運動方程式を用いる

⇒ 不連続な場における微分をとる必要がない

DEMにおける粒子間相互作用の表現

S. Urata, S. Hirobe, K. Oguni, and S. Li, J. Non-Cryst. Solids: X, 15, 100102 (2022)

- 粒子の集合によって連続体を表現するため、粒子間の相互作用の喪失によって破壊を容易に表現できる
- 連続体の変形との等価性？

■ その他

- Element-Free Galerkin method (EFG)
 - Molecular Dynamics (MD)
- など

- 計算コストが高い

粒子離散化有限要素法 (PDS-FEM)の紹介

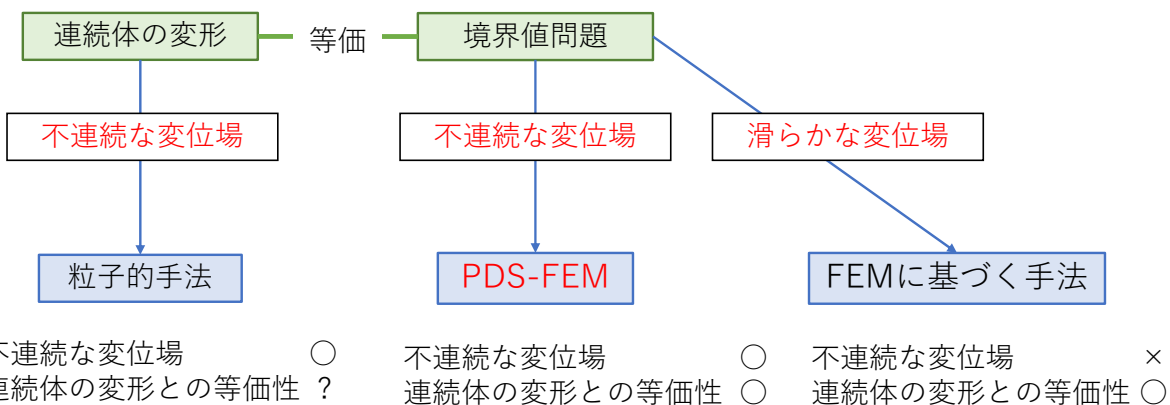
9

PDS-FEM

■ 粒子離散化有限要素法

Particle Discretization Scheme Finite Element Method (PDS-FEM)

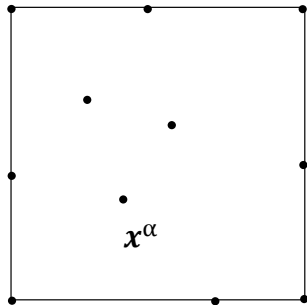
- 粒子的手法とFEMに基づく手法、両者の特徴を兼ね備えた手法



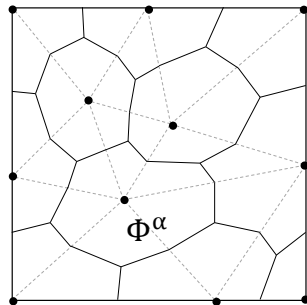
10

粒子離散化手法

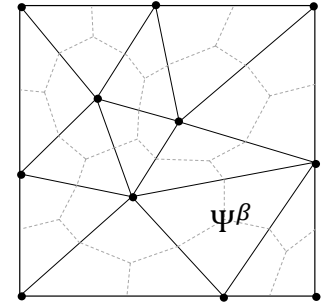
- 解析領域を双対な2種類の図形を用いて離散化する
⇒ Voronoi分割、Delaunay分割



節点群 $\{x^\alpha\}$



Voronoi分割 $\{\Phi^\alpha\}$



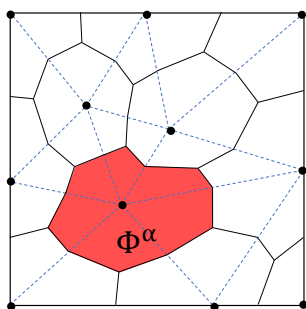
Delaunay分割 $\{\Psi^\beta\}$

固体連続体をVoronoi分割で定義される剛体粒子群として表現

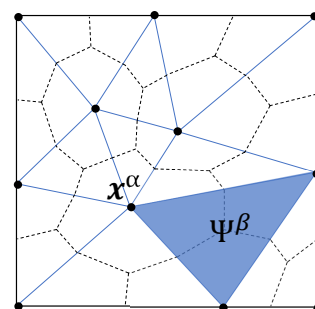
ひずみ場と応力場の平均化領域

通常のFEMの離散化図形と同じ

粒子離散化手法



Voronoi分割



Delaunay分割

- 不連続かつ互い重なり合わない補間関数

$$\phi^\alpha(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & (\mathbf{x} \in \Phi^\alpha) \\ 0 & (\mathbf{x} \notin \Phi^\alpha) \end{cases}$$

$$\psi^\beta(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1 & (\mathbf{x} \in \Psi^\beta) \\ 0 & (\mathbf{x} \notin \Psi^\beta) \end{cases}$$

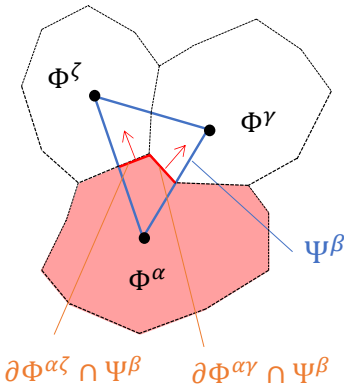
$$u_i(\mathbf{x}) = \sum_{\alpha=1}^N u_i^\alpha \phi^\alpha(\mathbf{x}) \quad (\text{変位場})$$

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{x}) = \sum_{\beta=1}^M \varepsilon_{ij}^\beta \psi^\beta(\mathbf{x}) \quad \sigma_{ij}(\mathbf{x}) = \sum_{\beta=1}^M \sigma_{ij}^\beta \psi^\beta(\mathbf{x}) \quad (\text{ひずみ、応力場})$$

N : Voronoi分割数

M : Delaunay分割数

変位-ひずみ関係



$$B_i^{\beta\alpha} = \frac{1}{\Psi^\beta} \int_{\Psi^\beta} \phi_i^\alpha(\mathbf{x}) \psi^\beta(\mathbf{x}) dS$$

$$= \frac{1}{\Psi^\beta} \int_{\partial\Psi^\beta} n_i^\alpha(\mathbf{x}) dl$$

$$= \frac{1}{\Psi^\beta} \left(\int_{\partial\Phi^{\alpha\gamma} \cap \Psi^\beta} n_i^{\alpha\gamma}(\mathbf{x}) dl + \int_{\partial\Phi^{\alpha\zeta} \cap \Psi^\beta} n_i^{\alpha\zeta}(\mathbf{x}) dl \right) \quad \text{線積分}$$

- α番目のVoronoi粒子の剛体変位が、β番目のDelaunay三角形内のひずみに及ぼす影響

■ 変位-ひずみ関係式

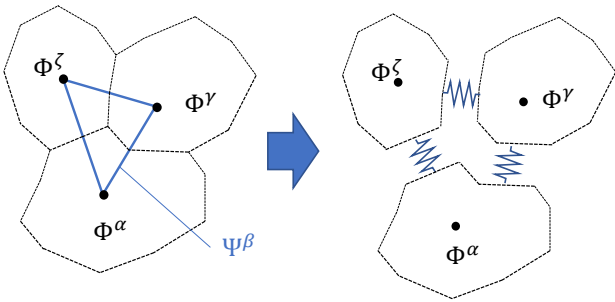
$$\{\varepsilon^\beta\} = \begin{bmatrix} B_0^{\beta\alpha} & 0 & B_0^{\beta\gamma} & 0 & B_0^{\beta\zeta} & 0 \\ 0 & B_1^{\beta\alpha} & 0 & B_1^{\beta\gamma} & 0 & B_1^{\beta\zeta} \\ B_1^{\beta\alpha} & B_0^{\beta\alpha} & B_1^{\beta\gamma} & B_0^{\beta\gamma} & B_1^{\beta\zeta} & B_0^{\beta\zeta} \end{bmatrix} \{u\}$$

変位-ひずみマトリクス(Bマトリクス)は通常FEM(線形一次要素)のBマトリクスと一致

13

剛性マトリクスと破壊の表現

■ 剛性マトリクス



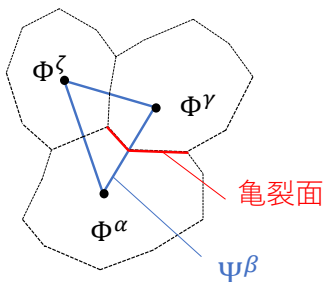
$$K_{ik}^{\alpha\gamma} = \sum_{\beta=1}^M B_j^{\beta\alpha} c_{ijkl}^\beta B_l^{\beta\gamma} \Psi^\beta$$

c_{ijkl}^β : 弾性テンソル
 Ψ^β : Delaunay三角形の面積

- 剛性マトリクスはVoronoi粒子間を繋ぐバネとみなせる
- 剛性マトリクスも通常FEM(線形一次要素)と完全一致

通常FEM(線形一次要素)と同じ精度で連続体の変形を解析できる

■ 破壊の表現



- 亀裂面はVoronoi粒子間境界で定義される
- 2つのVoronoi粒子間の相互作用の喪失とみなす
- 対応するBマトリクス中の線積分をゼロにする

$$B_i^{\beta\alpha} = \frac{1}{\Psi^\beta} \left(\int_{\partial\Phi^{\alpha\gamma} \cap \Psi^\beta} n_i^{\alpha\gamma}(\mathbf{x}) dl + \int_{\partial\Phi^{\alpha\zeta} \cap \Psi^\beta} n_i^{\alpha\zeta}(\mathbf{x}) dl \right)$$

ゼロ

14

PDS-FEMのメリット

- 固体連続体の変形との等価性
- メッシュや補間関数を変えずに破壊を表現できる
- 破壊前後のひずみエネルギーを定量的に評価できる
- 質量マトリクスが完全に対角化される

$$\sum_{\alpha=1}^N \sum_{\gamma=1}^N \frac{1}{2} K_{ij}^{\alpha\gamma} q_i^\alpha q_j^\gamma \quad \text{破壊前後で変化する}$$



- ✓ 他の物理現象との連成が容易
 - 温度変化、乾燥、塑性変形による破壊
- ✓ 解析力学に基づく安定的かつ高速な時間発展解法
 - 弾性波伝播、衝突解析、動的破壊
- ✓ 残留応力場内における破壊進展解析を実現
 - 準静的破壊進展解析：(例) 乾燥破壊
 - 動的破壊進展解析：(例) 強化ガラスの破壊

15

準静的破壊進展解析

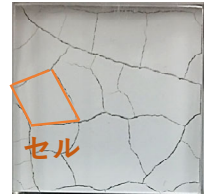
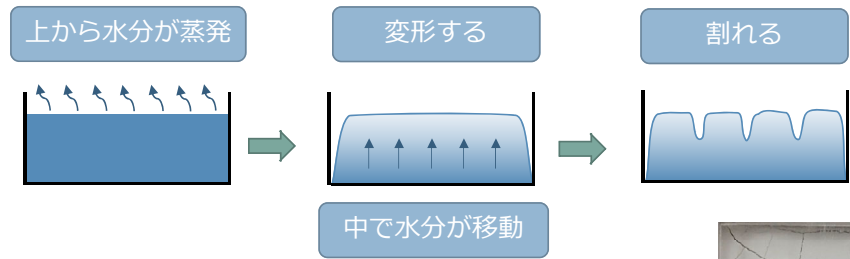
16

準静的破壊進展解析

■ 乾燥破壊現象

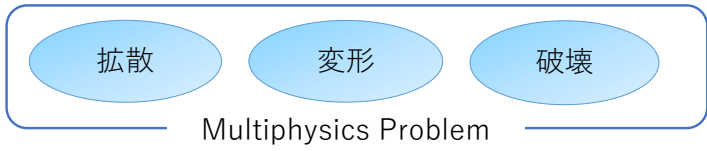


干潟の乾燥亀裂



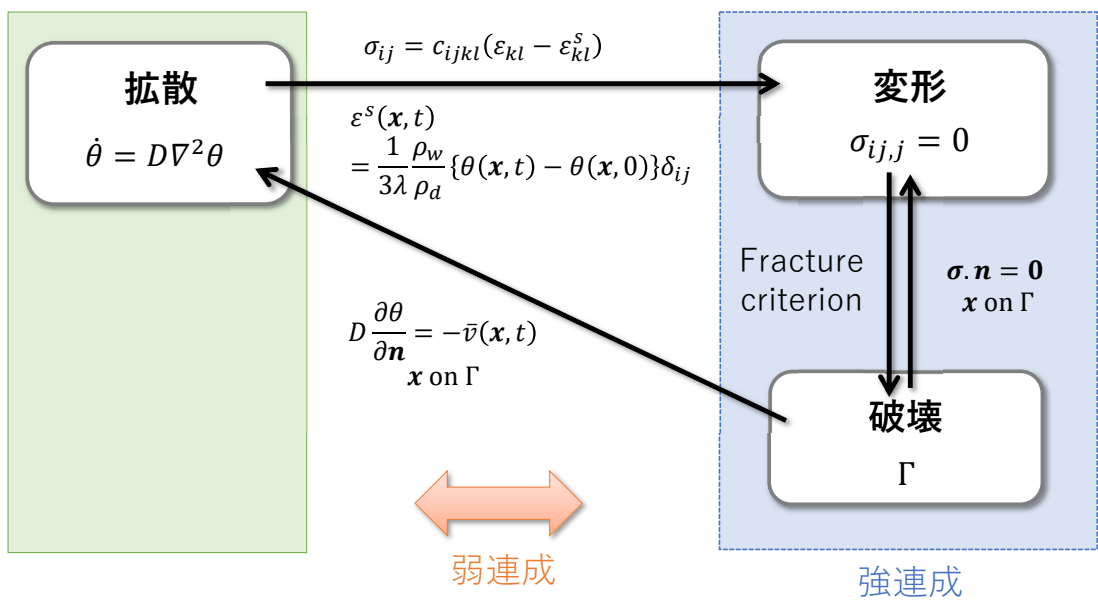
- 網目状構造をもつ亀裂群が特徴的な長さスケールをもった多角形状のセルを形成
- 乾燥に伴う材料の不均一な体積収縮によって残留応力が発生し、亀裂が形成

乾燥による残留応力場の形成と準静的亀裂進展が同時に進行する問題



拡散・変形・破壊の連成モデル

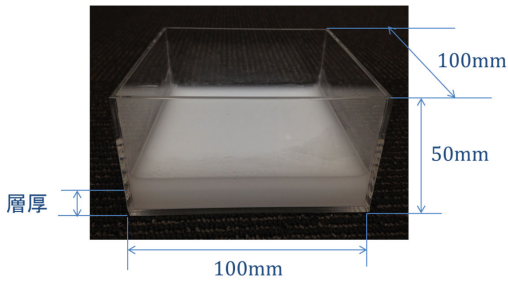
乾燥破壊現象の数理モデル



- 拡散と破壊という時定数が異なる現象を連成させるため、強連成と弱連成を使い分け
- 同じ有限要素モデルで、これらの連成解析をシームレスに行うことができる

解析結果

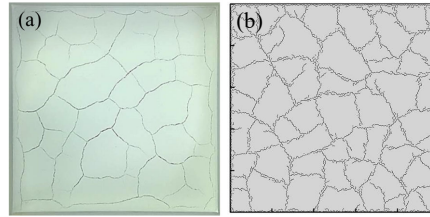
■ 試験体



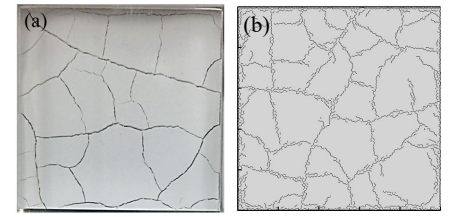
- 炭酸カルシウム懸濁液
- 層厚：5mm, 10mm, 20mm, 30mm
- 室温20°C, 相対湿度50%の室内で乾燥

■ 試験体と解析モデル上面での亀裂パターン

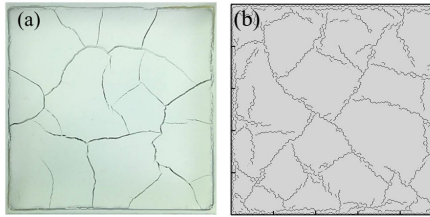
層厚5mm



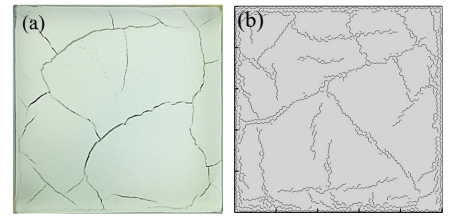
層厚10mm



層厚20mm



層厚30mm



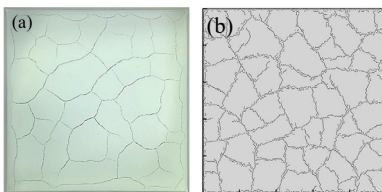
(a)実験結果、(b)数値解析結果

19

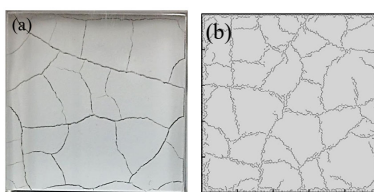
解析結果

■ セル面積の比較

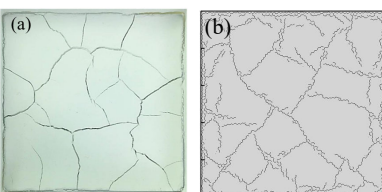
層厚5mm



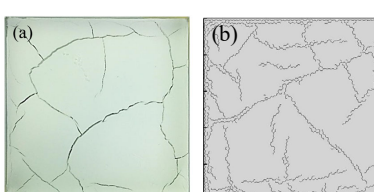
層厚10mm



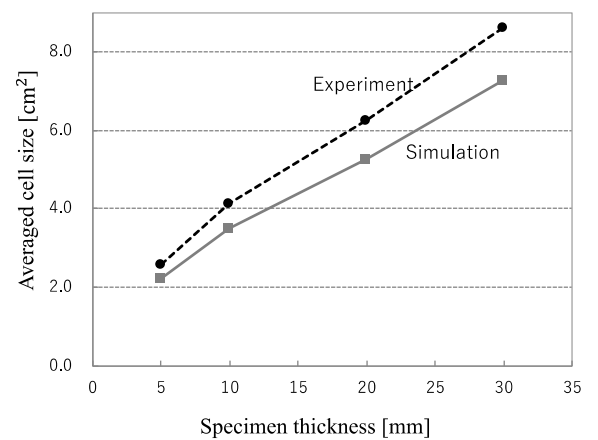
層厚20mm



層厚30mm



(a)実験結果、(b)数値解析結果

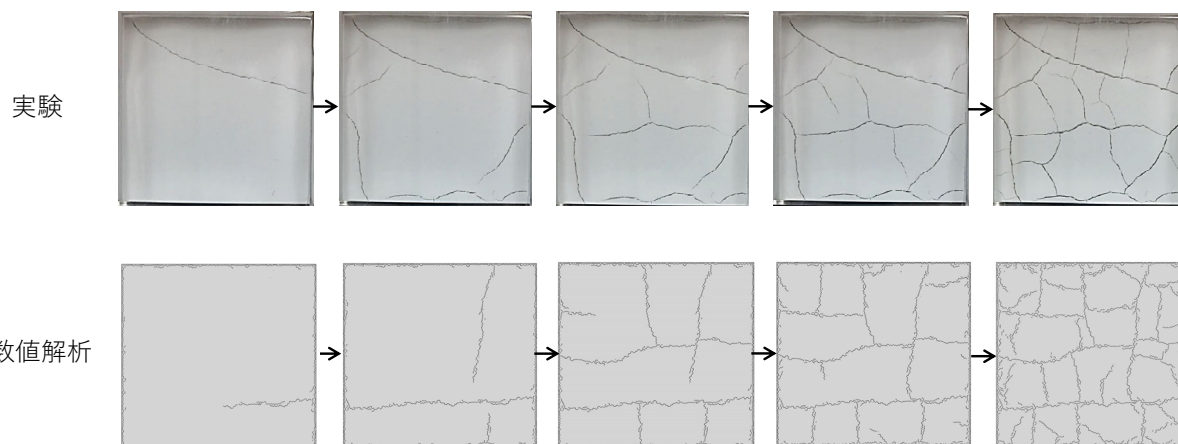


- 層厚の増加にしたがって、セルのサイズが大きくなる

20

解析結果

■ 上面での亀裂進展の様子（層厚10mm）

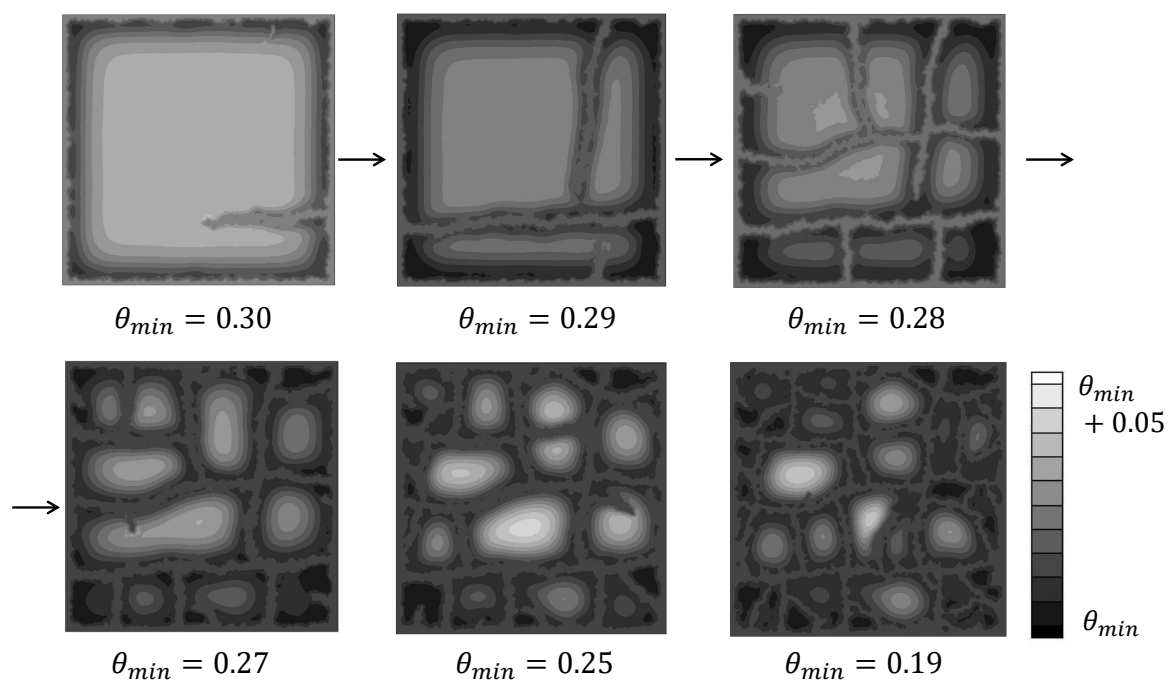


- セルが階層的に分割されていく

21

解析結果

■ 上面での水分量分布の変化（層厚10mm）



22

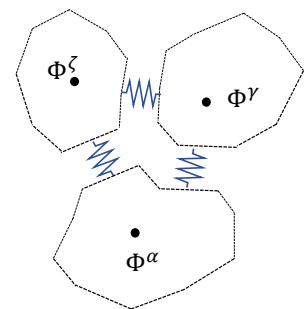
動的破壊進展解析

動的破壊進展解析

■ Hamiltonianの定義

- PDS-FEMは固体連続体をVoronoi粒子群の集合によって表す
⇒解析力学的にHamiltonianを定義することが可能

$$H = \underbrace{T(p_i^\alpha)}_{\text{kinetic energy}} + \underbrace{V(q_i^\alpha)}_{\text{potential energy}} = \sum_{\alpha=1}^N \frac{1}{2m^\alpha} p_i^\alpha p_i^\alpha + \sum_{\alpha=1}^N \sum_{\gamma=1}^N \frac{1}{2} K_{ij}^{\alpha\gamma} q_i^\alpha q_j^\gamma - \sum_{\alpha=1}^N f_i^\alpha q_i^\alpha$$



q_i^α : 一般化座標
 p_i^α : 一般化運動量
 m^α : Voronoi粒子の質量

■ 正準方程式

- 固体連続体 (Voronoi粒子群) の時間発展

$$\dot{q}_i^\alpha = \frac{\partial H}{\partial p_i^\alpha} = \frac{p_i^\alpha}{m^\alpha} = \dot{u}_i^{\alpha}$$

$$\dot{p}_i^\alpha = -\frac{\partial H}{\partial q_i^\alpha} = -\sum_{\gamma=1}^N K_{ij}^{\alpha\gamma} q_j^\gamma + f_i^\alpha = -\sum_{\gamma=1}^N K_{ij}^{\alpha\gamma} u_j^{\gamma} + f_i^\alpha$$

$q_i^\alpha = u_i^{\alpha}$
 $\dot{q}_i^\alpha = \dot{u}_i^{\alpha}$
 $p_i^\alpha = m^\alpha \dot{q}_i^\alpha = m^\alpha \dot{u}_i^{\alpha}$

時間積分（陽解法）

■ シンプレクティック数値積分を適用できる

- 正準力学系の運動方程式に特化した常微分方程式の数値解法
- エネルギーの単調な増加または減少を生じない
- 陽解法で長時間安定して固体連続体の動的挙動（弾性波伝播、変形）を解析できる

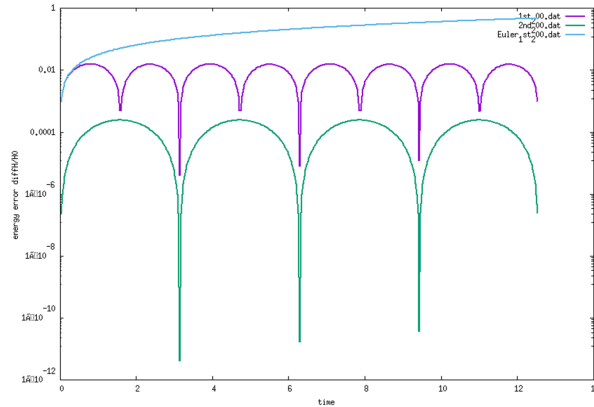
1次Euler法

$$\begin{cases} \mathbf{u}_t = \mathbf{u}_{t-1} + \Delta t \mathbf{v}_{t-1} \\ \mathbf{v}_t = \mathbf{v}_{t-1} + \Delta t \mathbf{K} \mathbf{u}_{t-1} / \mathbf{M} \end{cases}$$

1次Symplectic法

$$\begin{cases} \mathbf{u}_t = \mathbf{u}_{t-1} + \Delta t \mathbf{v}_{t-1} \\ \mathbf{v}_t = \mathbf{v}_{t-1} + \Delta t \mathbf{K} \mathbf{u}_t / \mathbf{M} \end{cases}$$

計算コストは同じ



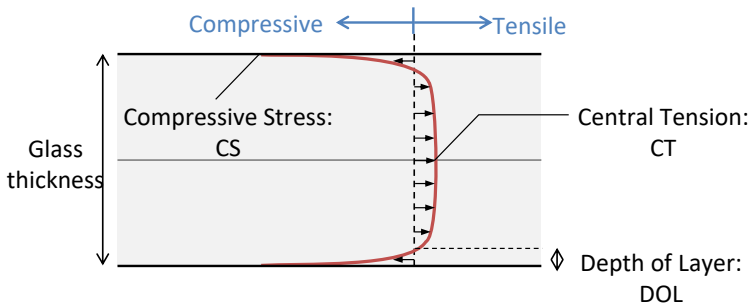
1自由度振動系のエネルギー誤差

動的破壊解析

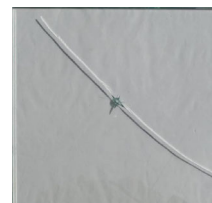
■ 強化ガラス

- 板表面に圧縮、板内部が引張になるような残留応力を付与したガラス
- 板表面の残留応力によって、表面の欠けや亀裂の進展が阻害され、みかけの強度が向上

■ 残留応力プロファイル



- 亀裂が引張領域に達すると・・・



未強化ガラス



強化ガラス

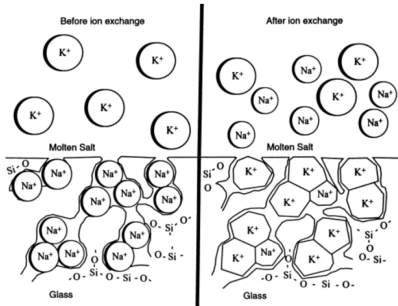
瞬間的に粉々に破壊される

✓ 既存の破壊解析手法では解析できない

- 残留応力場の解放と再分配の定量的な評価
- 弾性波が亀裂進展に与える影響

強化ガラスの破壊実験

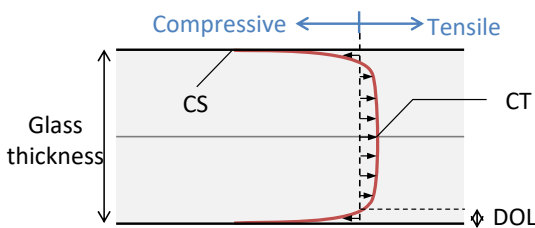
■ 化学強化ガラス



- ガラスを100% KNO₃ 溶融塩に浸し、ガラス中のNa⁺ を K⁺ に置換する
- K⁺ のサイズは Na⁺ より大きいため、置換された領域では圧縮応力が発生する

Varshneya A.K., *Int. J. Appl. Glass Sci.* 1 (2): 131-142 (2010)

■ 異なる残留応力プロファイルをもつ3種類の化学強化ガラスを使用



case	強化塩	温度	強化時間	CS (MPa)	DOL (um)	CT (MPa)
case I	KNO ₃ salt	450°C	2 hours	836	39	52
case II	KNO ₃ salt	450°C	4 hours	806	55	75
case III	KNO ₃ salt	450°C	9 hours	752	80	112

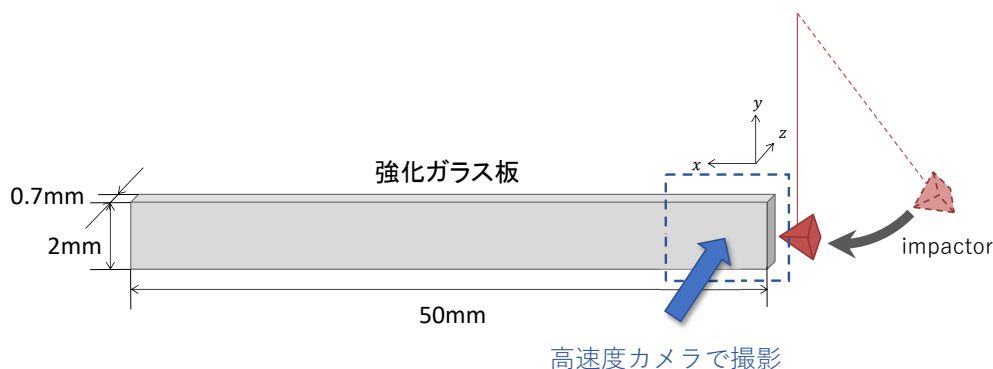
27

強化ガラスの破壊実験

■ 強化ガラス板の残留応力分布

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = const., \sigma_{xy} = 0, \sigma_{zz} = 0$$

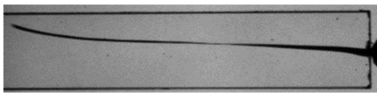
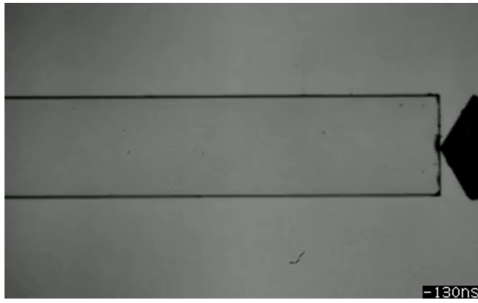
■ 強化ガラスの破壊実験の実験系



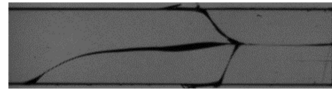
28

強化ガラスの破壊実験

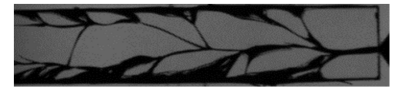
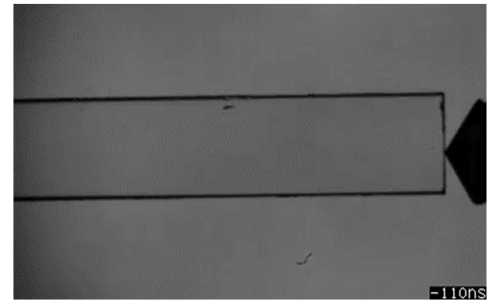
case I
CT=52MPa



case II
CT=75MPa



case III
CT=112MPa



- 残留応力分布によって亀裂パターンが大きく変化する
- CTが増加するに従って、亀裂パターンはより複雑になる

29

強化ガラスの破壊解析

■ 残留応力分布の作成

- イオン濃度分布に対応した非弾性ひずみを用いて静的解析を行い、残留応力分布を計算する

➤ K⁺ の濃度分布

$$c_z = c_0 + (c_{eq} - c_0) \left\{ \operatorname{erfc} \frac{z}{2\sqrt{Dt}} - \exp \left(\frac{M}{D} z + \frac{M^2}{D} t \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{z}{2\sqrt{Mt}} + \frac{M}{D} \sqrt{Dt} \right) \right\}$$

Hatano M et al. *Key Eng. Mater.* 702, 32 (2016)

c_z : concentration of K⁺
 c_{eq} : equilibrium concentration of K⁺
 D : diffusion coefficient
 M : mass transfer coefficient
 t : ion exchange duration
 z : distance from outer surface

➤ 非弾性ひずみ

$$\epsilon_{ij}^p = A(c_z - c_0) \delta_{ij}$$

A : linear network dilation coefficient
 δ_{ij} : Kronecker delta

➤ 残留応力分布の計算

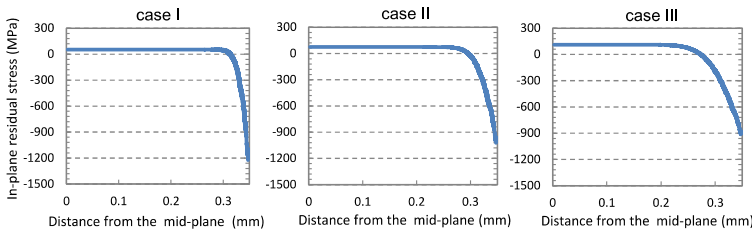
$$\sum_{\gamma=1}^N K_{ik}^{\alpha\gamma} u_k^{\gamma} = \sum_{\beta=1}^M B_j^{\beta\alpha} c_{ijkl}^{\beta} \epsilon_{kl}^{p\beta} \Psi^{\beta}$$

$$\sigma_{ij}^{\beta} = c_{ijkl}^{\beta} (\epsilon_{kl}^{t\beta} - \epsilon_{kl}^{p\beta})$$

30

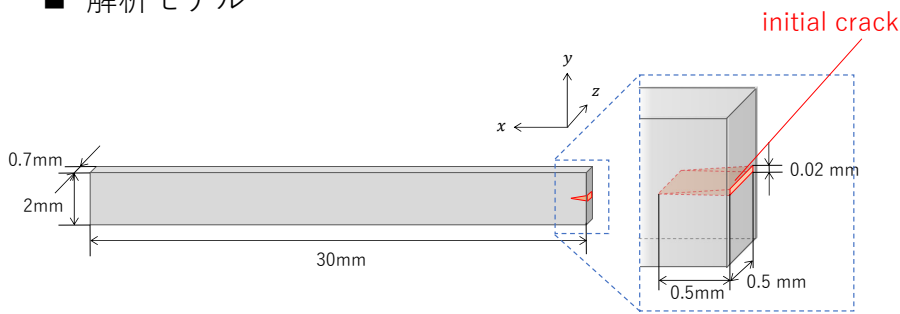
強化ガラスの破壊解析

■ 残留応力分布



case	Experiment			Numerical Analysis		
	CS (MPa)	DOL (um)	CT (MPa)	CS (MPa)	DOL (um)	CT (MPa)
case I	836	39	52	1220	40.0	52.8
case II	806	55	75	1020	55.0	74.0
case III	752	80	112	909.0	82	112

■ 解析モデル



非構造メッシュによる有限要素モデル

- 節点数: 96,049,195
- 要素数: 609,287,176
- 平均節点間距離: 9.36 μm

Mass density ρ	2500	kg/m^3
Young's modulus E	74.0	GPa
Poisson's ratio ν	0.22	
Surface energy Γ	4.0625	J/m^2
Time increment Δt	0.5	ns

31

解析結果

亀裂進展(xy平面に投影)

case I
CT=52MPa



case II
CT=75MPa



case III
CT=112MPa



板厚中心における最大主応力



0 100 (MPa)



0 150 (MPa)

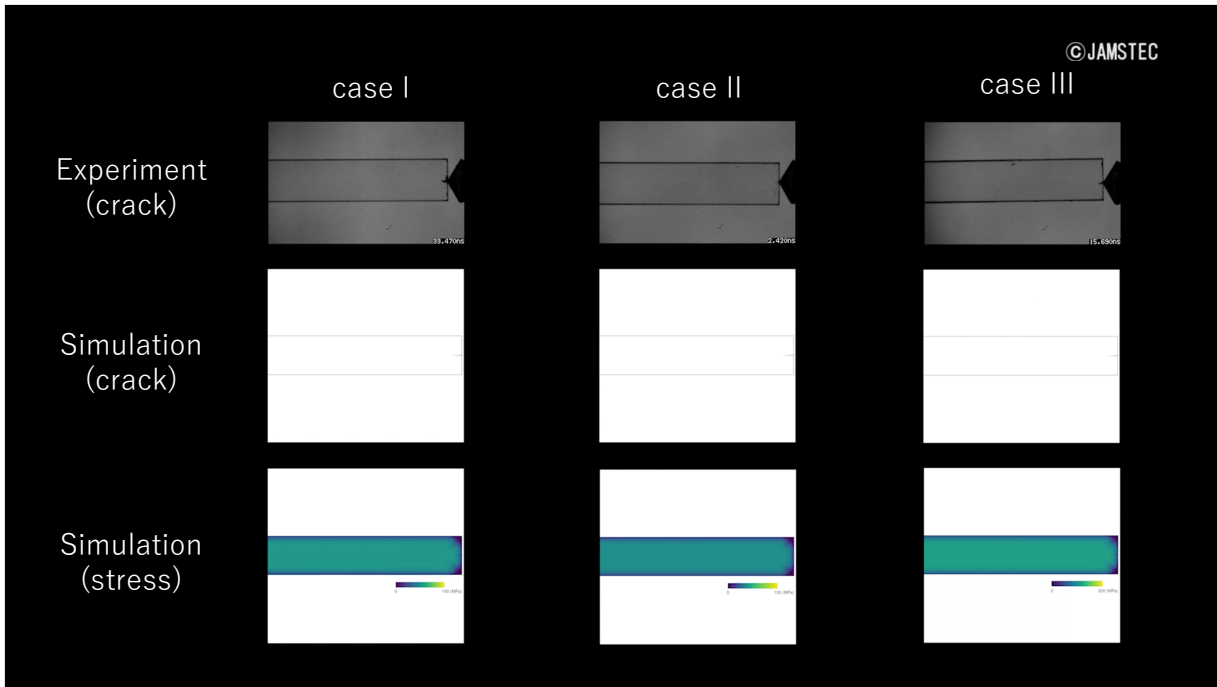


0 200 (MPa)

- 破壊後も全ての領域で、力が働き続ける

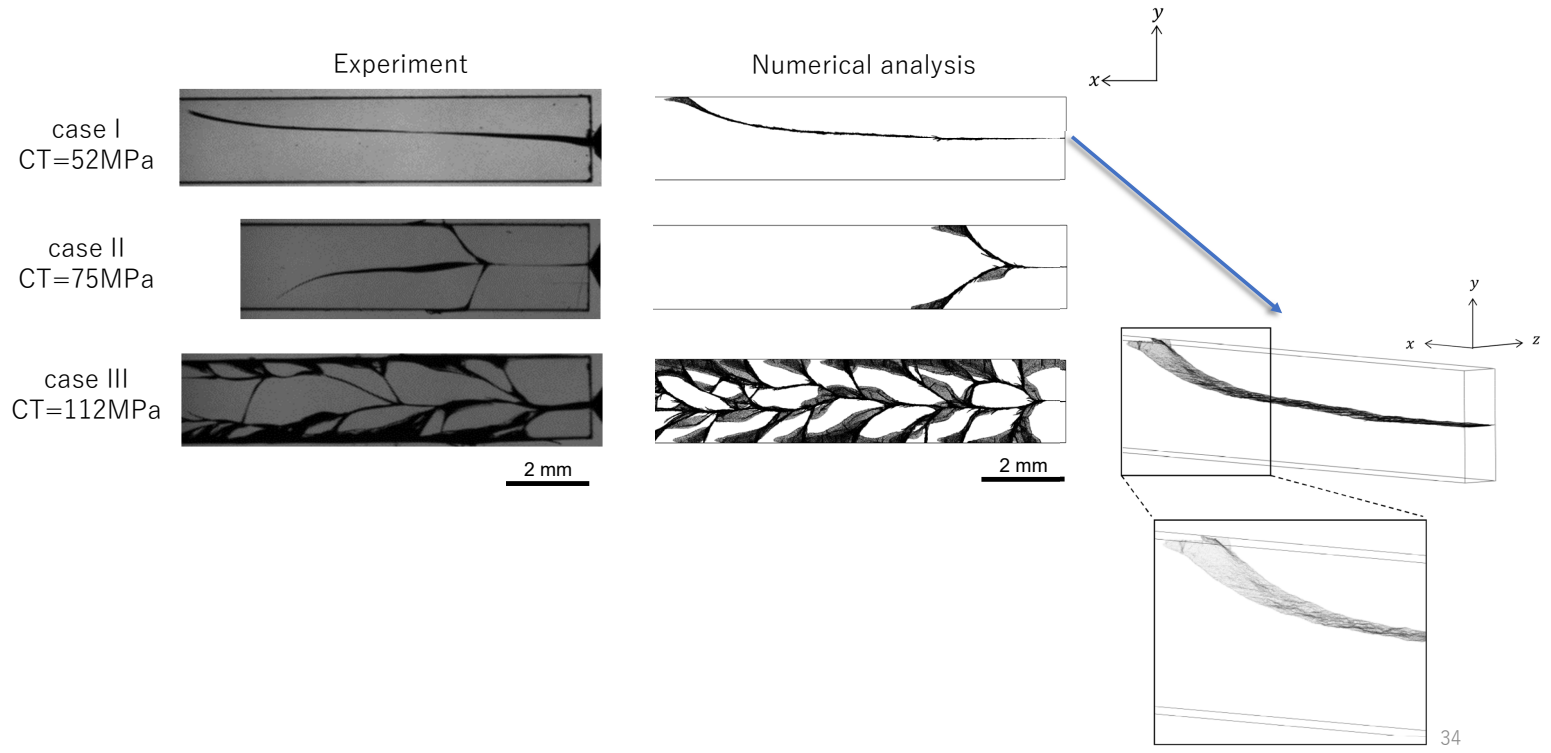
32

実験と解析の比較

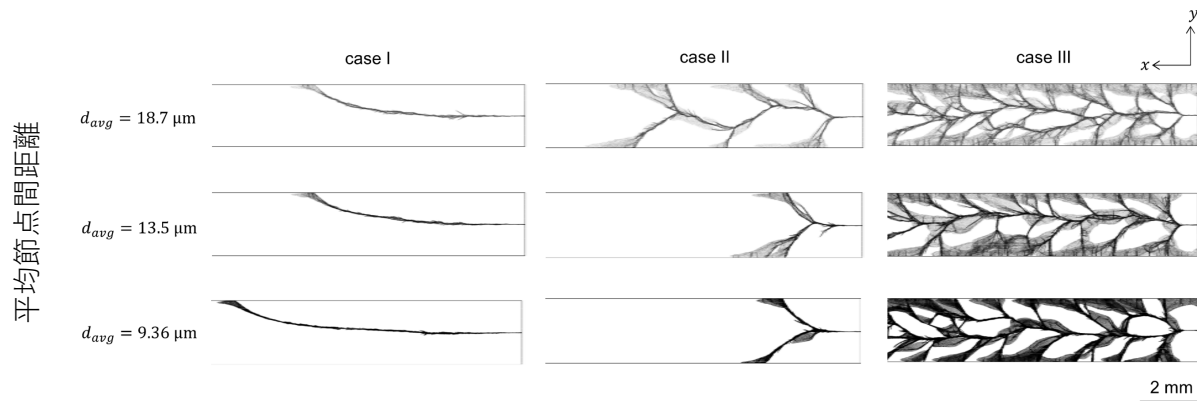


33

実験と解析の比較

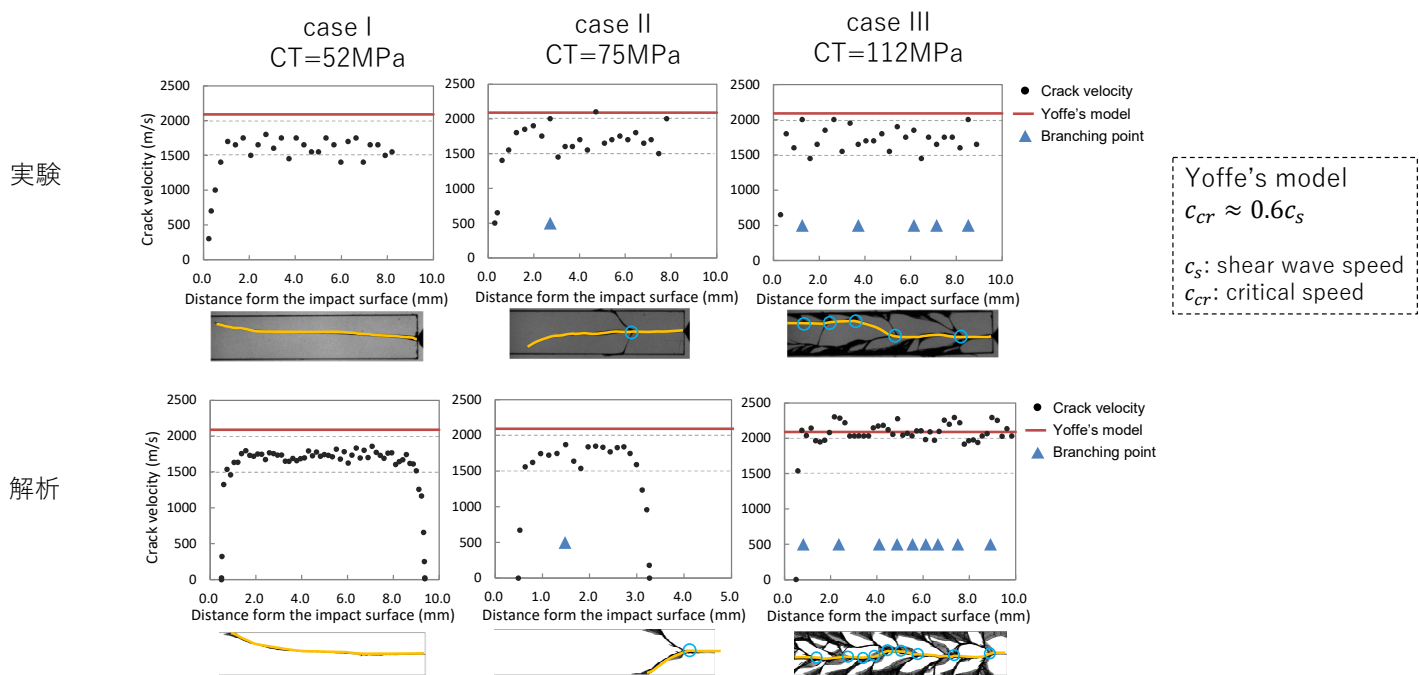


解析結果のメッシュサイズ依存性



35

実験と解析の亀裂進展速度



- 亀裂の分岐が生じる臨界速度は約2000m/s

36

まとめ

- 既存の破壊解析手法とPDS-FEM（粒子離散化有限要素法）の概要を紹介した。
- PDS-FEMは粒子的手法とFEMに基づく手法、両者の特徴を兼ね備えた手法である。離散化に2つの双対な図形と不連続な形状関数を用いることで、破壊の取り扱いを容易にする。また、連続体の変形との等価性も保たれる。
- PDS-FEMを用いた解析事例として、乾燥収縮による準静的亀裂進展と強化ガラスの動的破壊を紹介した。
- 今後は弾塑性解析との連成を進め、塑性変形を伴う破壊現象を取り扱えるようにする。



粒子法シミュレーションの 大規模高速化と産業応用化

西浦 泰介

(国研) 海洋研究開発機構
数理科学・先端技術研究開発センター

アドバンス・シミュレーション・セミナー 2022

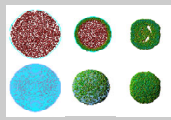
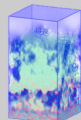
2022/11/11
14:00-16:30

2

自己紹介

西浦 泰介 (ニシウラ ダイスケ)
JAMSTEC 数理科学・先端技術研究開発センター
役職：主任研究員 グループリーダー代理
専門：粉体工学，計算科学

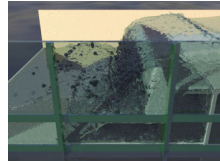
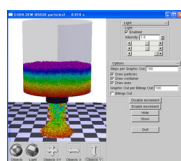
地球シミュレータ



液体と固体粒子の混相流シミュレーション

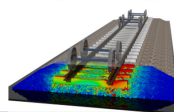
- ◆ 干渉沈降
- ◆ 懸濁液の乾燥収縮
- ◆ 凝集粒子の分散

GPU

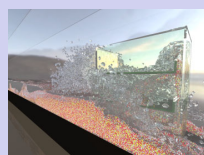
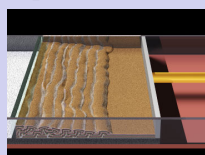


GPUで個別要素法 (DEM) ソフト開発

- ◆ SPHによる流体計算との連成
- ◆ QDEMによる鉄道軌道解析



「京」コンピュータ



大規模並列化プログラムの実用化

- ◆ 実スケール砂箱シミュレーション
- ◆ SPH-DEMによる津波堆積物の輸送
- ◆ 地盤の遠心载荷シミュレーション
- ◆ 液状化解析

1979

福島県に生まれる

1999

同志社大学入学
物質化学工学科

2003

同志社大学
大学院進学

2008

同志社大学卒業
博士(工学)取得

JAMSTEC入社
ポスドク研究員

2011

JAMSTEC
研究員

2018

JAMSTEC
主任研究員

現在

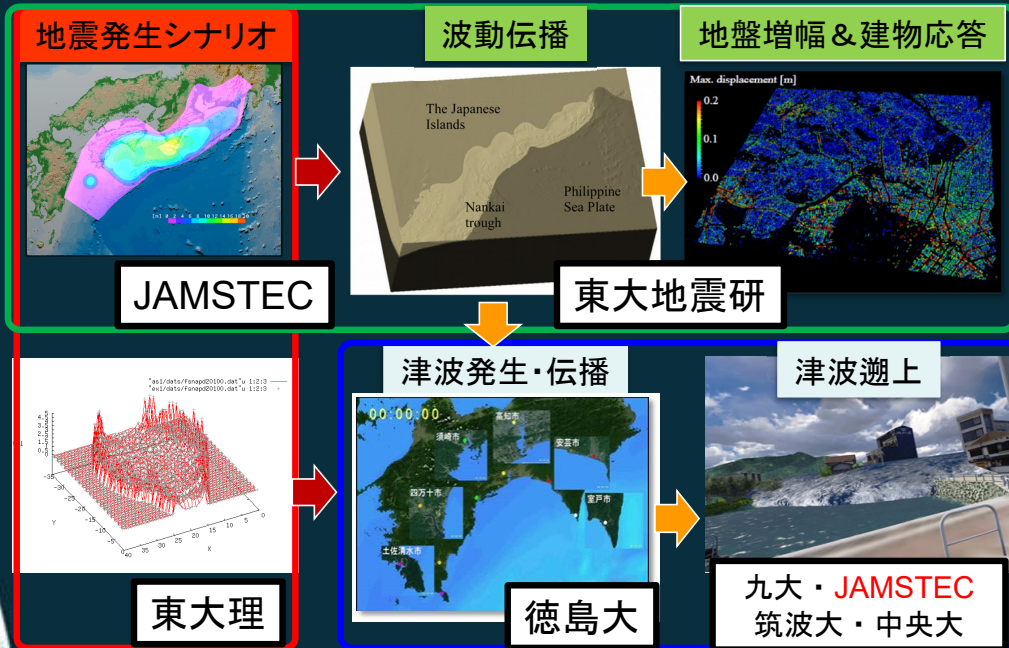
JAMSTEC
グループリーダー
代理

富岳

2022/11/11
14:00-16:30

3

複合災害予測シミュレーションの高度化



交通流・避難行動・社会科学

2022/11/11
14:00-16:30

4

土－水－構造物の連成災害

2011年 東日本大震災



2015年 東日本豪雨災害



2017年 九州北部豪雨災害



2018年 西日本豪雨災害



2019年 東日本台風災害



2020年 熊本豪雨災害

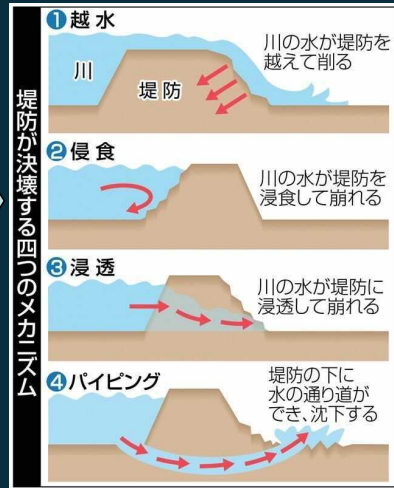
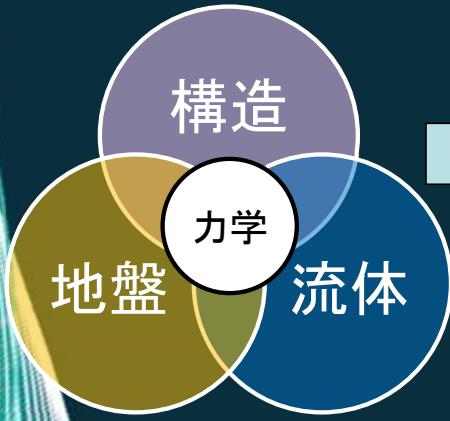


2022/11/11
14:00-16:30

5

混相流計算と大規模計算の必要性

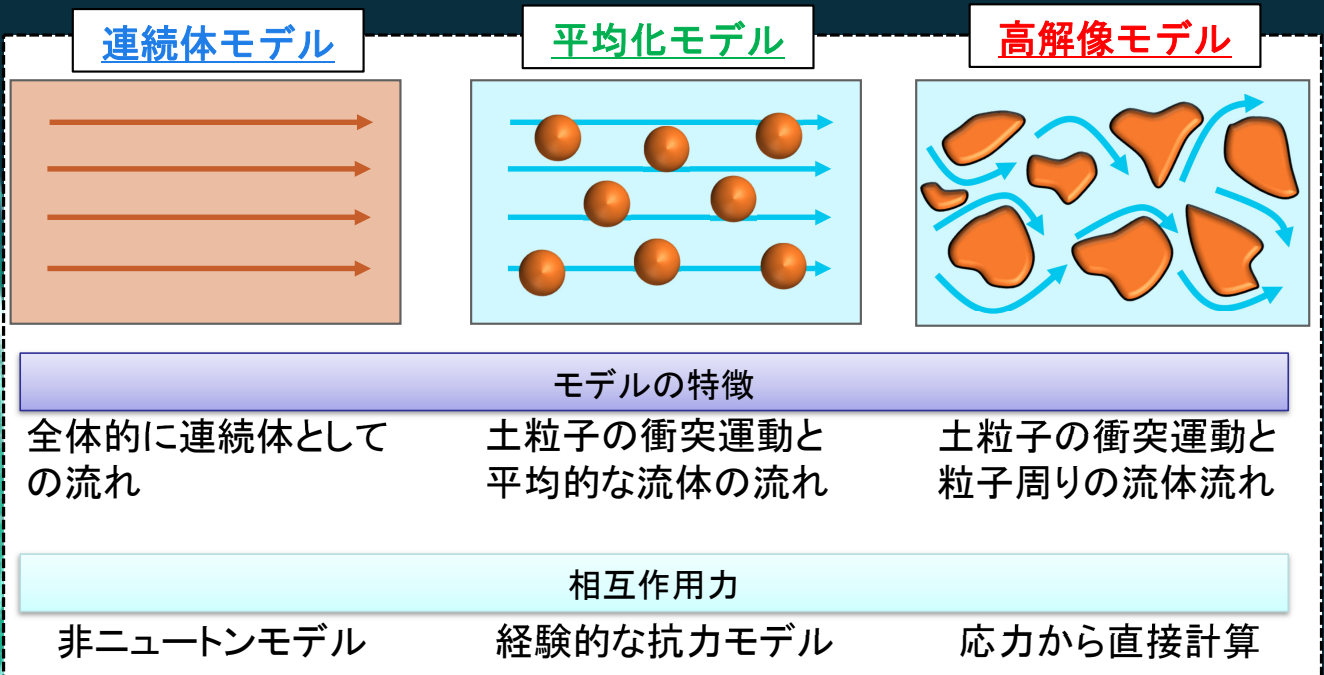
水流による地盤と堤防の破壊



2022/11/11
14:00-16:30

6

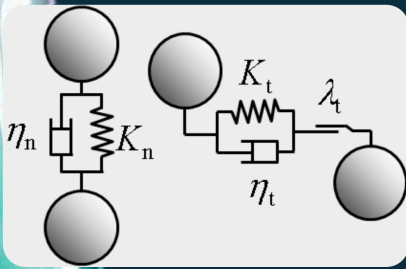
土と水の連成解析モデル



2022/11/11
14:00-16:30

7

DEM (Discrete element method)



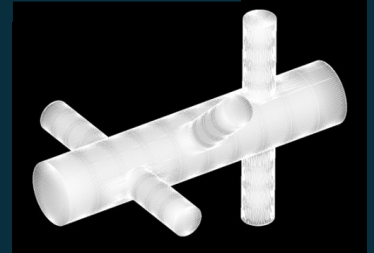
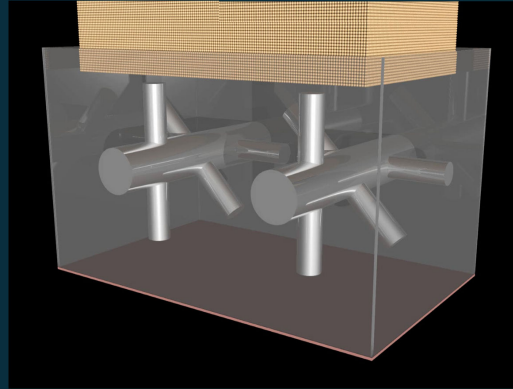
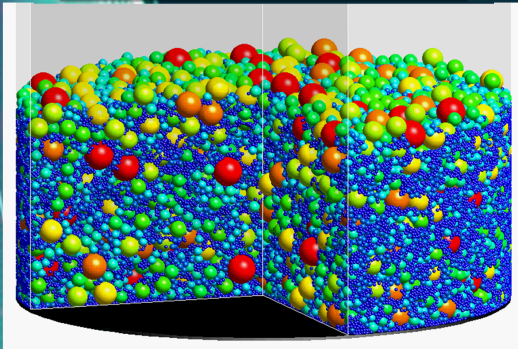
- 線形バネ or 非線形バネ
- クーロン摩擦
- 転がり摩擦

$$F_{c_n} = \eta_n v_n + K_n x_n$$

$$F_{c_t} = \min[\eta_t v_t + K_t x_t, \lambda_t |F_{c_n}| v_t / |v_t|]$$

Complex boundary geometry

Particle size distribution



Boundary condition from CAD data

2022/11/11
14:00-16:30

8

SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics)

□ 固体粒子を含むSPHの基礎方程式

➤ 連続の式

$$\frac{d\rho_a}{dt} = \sum_b m_b (\vec{v}_a - \vec{v}_b) \cdot \vec{\nabla} W_{ab}$$

➤ Navier-Stokes 式

$$\frac{d\vec{v}_a}{dt} = \vec{g} - \sum_b m_b \left(\frac{p_a}{\rho_a^2} + \frac{p_b}{\rho_b^2} \right) \vec{\nabla} W_{ab} + \sum_b m_b \left(\frac{2\mu_f (\vec{r}_a - \vec{r}_b) \cdot \vec{\nabla} W_{ab}}{\rho_a \rho_b} \right) (\vec{v}_a - \vec{v}_b)$$

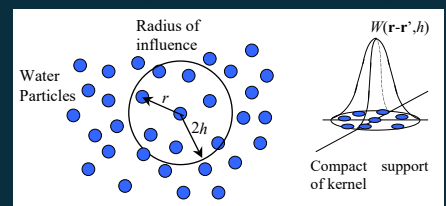
➤ 状態方程式 (Tait 式 : 擬似圧縮性を仮定)

$$p_a = B \left[\left(\frac{\rho_a}{\rho_f} \right)^7 - 1 \right] \quad B = \frac{c_a^2 \rho_f}{7} \quad c_a \approx 10 v_a^{\max}$$

□ Kernel 関数

➤ 5th Wendland function

$$W(r, h) = \frac{21}{16\pi h^3} \left(1 - \frac{q}{2} \right)^4 (2q + 1) \quad 0 \leq q \leq 2 \quad q = \frac{r}{h}, \quad r = |\vec{r}_a - \vec{r}_b|$$



SPH-DEM連成解析（平均化モデル）

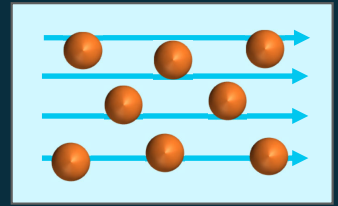
□SPHの基礎方程式

➢連続の式

$$\frac{d\rho_a}{dt} = \sum_b m_b (\vec{v}_a - \vec{v}_b) \cdot \vec{\nabla} W_{ab}$$

f_{fs} : SPH-DEM相互作用項

ε : 空隙率



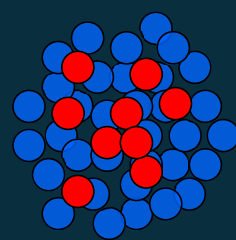
➢Navier-Stokes 式

$$\frac{d\vec{v}_a}{dt} = \vec{g} - \varepsilon \sum_b m_b \left(\frac{p_a}{\rho_a^2} + \frac{p_b}{\rho_b^2} \right) \vec{\nabla}_a W_{ab} + \varepsilon \sum_b m_b \left(\frac{2\mu_f (\vec{r}_a - \vec{r}_b) \cdot \vec{\nabla}_a W_{ab}}{\rho_a \rho_b} \right) (\vec{v}_a - \vec{v}_b) + \vec{f}_{fs}$$

➢状態方程式（Tait 式：擬似圧縮性を仮定）

$$p_a = B \left[\left(\frac{\rho_a}{\varepsilon \rho_f} \right)^7 - 1 \right] \quad B = \frac{c_a^2 \rho_f}{7} \quad c_a \approx 10 v_a^{\max}$$

➢状態方程式に空隙率が考慮されているので、空隙率の変化に応じてTait方程式により間隙圧が変化する。



● DEM
● SPH

□SPH-DEM（流体が浸透する粒子群）相互作用（平均化モデル）

➢SPH粒子周りの局所的なDEM粒子濃度とDEM-SPH粒子間の相対速度から、粒子-流体間の相互作用力を求める

$$\vec{f}_{fs} = -\frac{1}{n \rho_{sph}} \sum_{dem}^n \beta (\vec{v}_{sph} - \vec{v}_{dem})$$

DEMとSPH間の相対速度

β : 空隙率を考慮した半経験的な流体抵抗係数

$$\vec{f}_{sf} = -\frac{1}{1-\varepsilon} \vec{f}_{fs}$$

$$\beta = \begin{cases} \frac{(1-\varepsilon)}{2r_{dem}\varepsilon} \left[150 \frac{(1-\varepsilon)\mu}{2r_{dem}} + 1.75 \rho_{sph} \varepsilon |\vec{v}_{dem} - \vec{v}_{sph}| \right] & (\varepsilon \leq 0.8) \\ \frac{3}{8} \frac{\rho_{sph} |\vec{v}_{dem} - \vec{v}_{sph}| (1-\varepsilon)}{r_{dem}} C_D \varepsilon^{-1.7} & (\varepsilon > 0.8) \end{cases}$$

□DEMの運動方程式

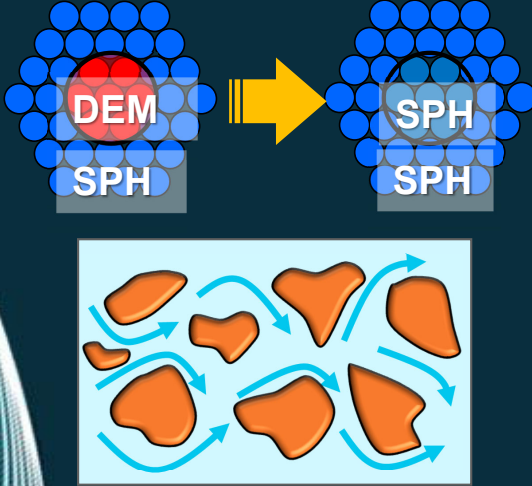
$$m_{dem} \frac{\partial \vec{v}_{dem}}{\partial t} = m_{dem} \vec{g} + \sum \vec{F}_{ss} + \frac{\rho_{sph} V_{dem}}{n} \sum_{sph}^n (\vec{f}_{sf} + \vec{f}_{ff})$$

DEM間相互作用項

SPH-DEM相互作用項

11 □SPH-DEM（流体が浸透しない固体）相互作用（高解像モデル）

➤DEM粒子をSPH粒子として（具体的にはDEM粒子のところにSPH粒子も配置している）粘性応力項と圧力項 (f_{ff}) を計算し、DEM粒子にそれらの力 (F_{sf}) を与える。DEM粒子のところに配置したSPH粒子はDEMの座標と速度に強制する。



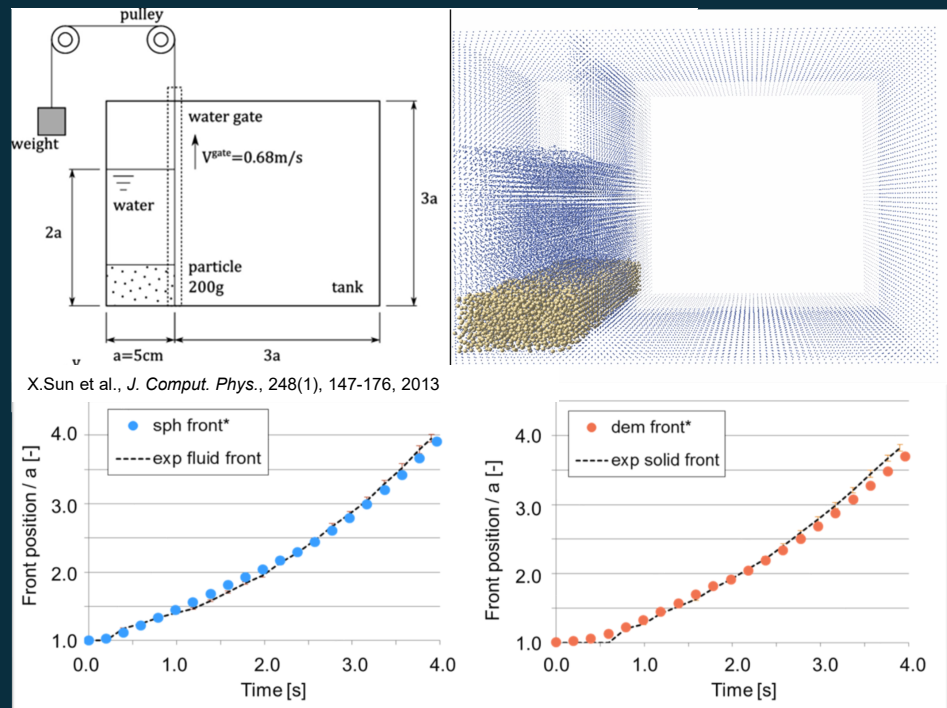
● 連結粒子モデルの重心に対する運動方程式

$$m_g \frac{d\vec{v}_g}{dt} = m_g \vec{g} + \sum \vec{F}_{ss} + \sum \vec{F}_{sf}$$

$$I_g \frac{d\vec{\omega}_g}{dt} = \sum \vec{F}_{ss} + \vec{r}_{gs} \times \vec{F}_{sf}$$

$$\vec{F}_{sf} = \rho_{sph} V_{dem} \vec{f}_{ff}$$

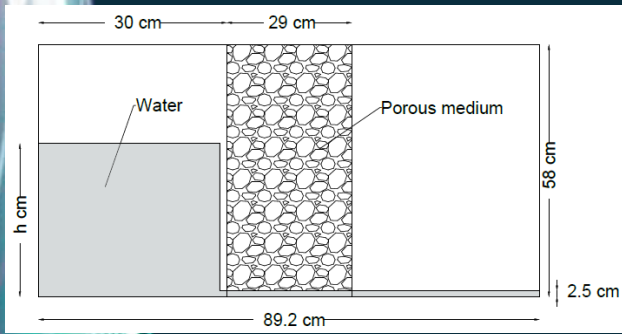
12 平均化モデルの精度検証



2022/11/11
14:00-16:30

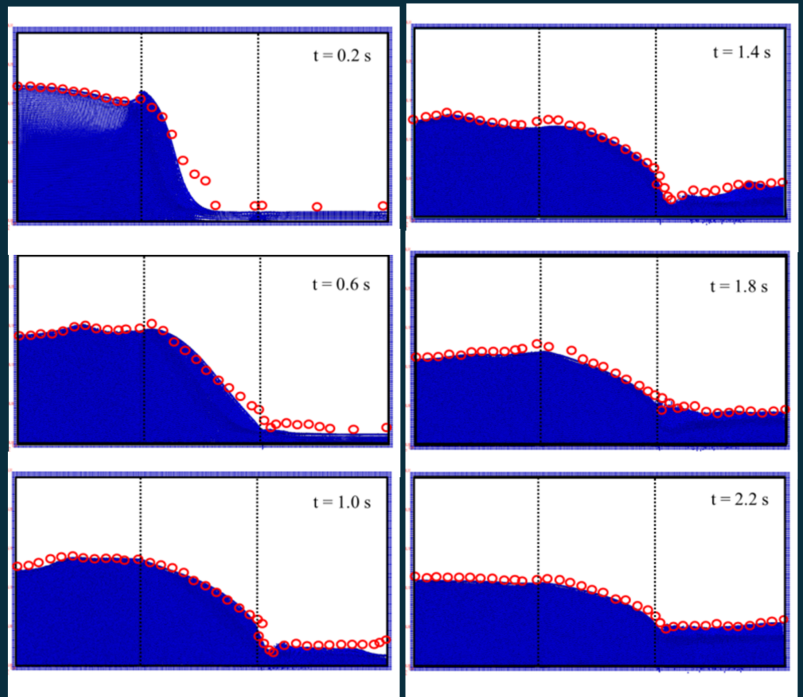
13

浸透流の検証



P. Liu et al. *J. Waterway, Port, Coastal, and Ocean Eng.*, 125(6), 322-333, 1999

● SPH粒子
○ 実験の液面

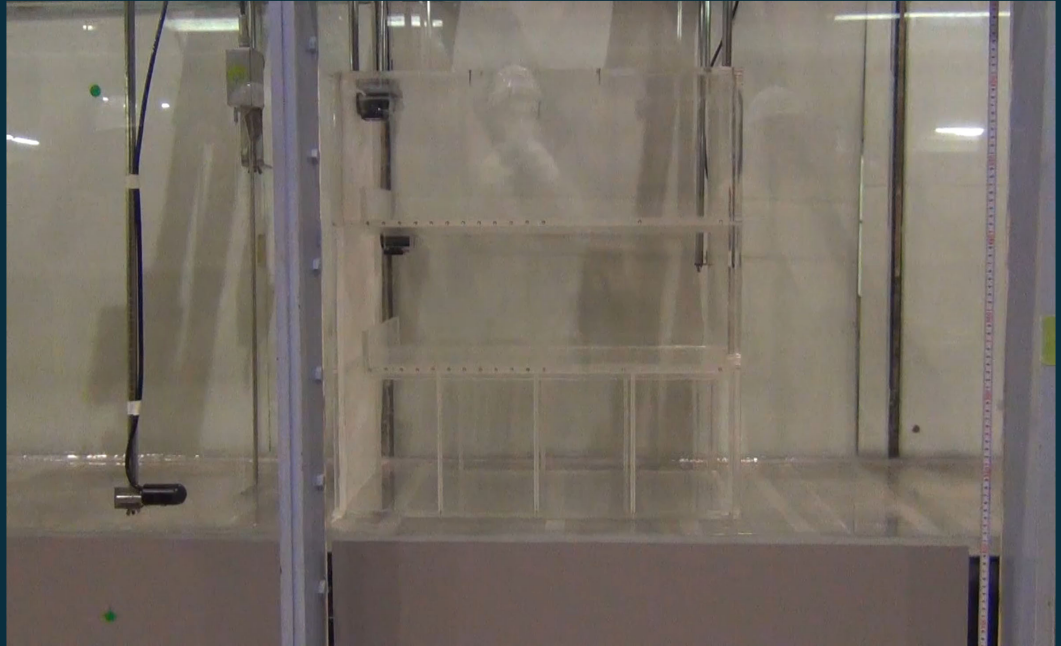


2022/11/11
14:00-16:30

14

SPH-DEMの応用例

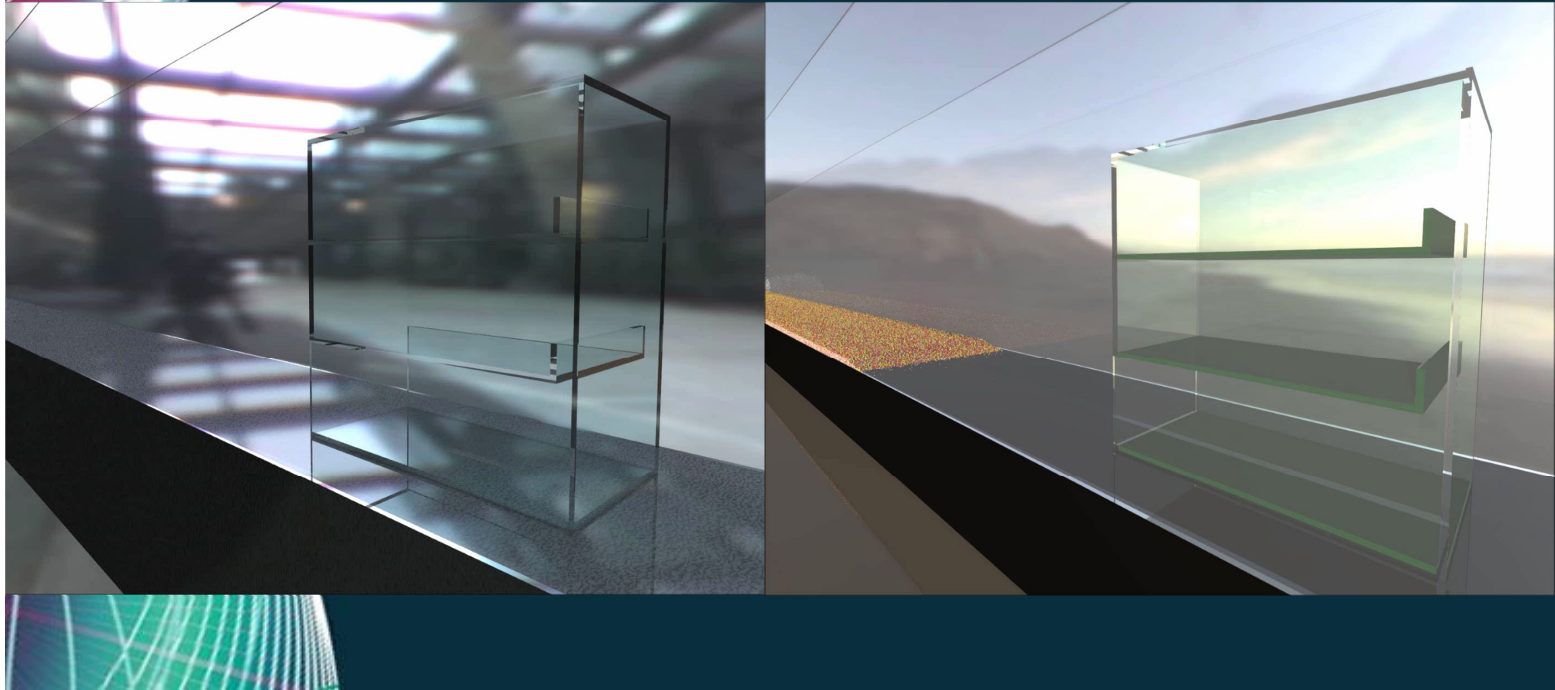
PENTA-OCEAN CONSTRUCTION CO.,LTD



2022/11/11
14:00-16:30

15

建築構造物と津波と土砂



2022/11/11
14:00-16:30

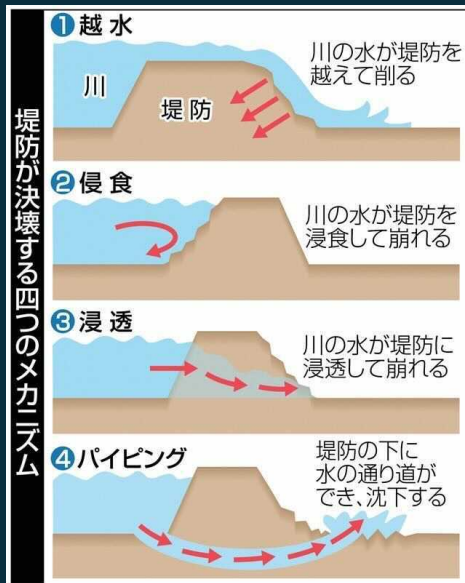
16

水位差による地盤の破壊

2020/7/4 熊本県人吉市球磨川の堤防決壊

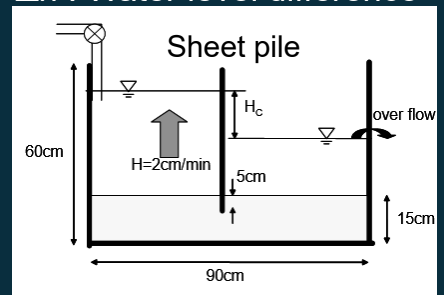


©朝日新聞



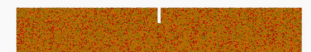
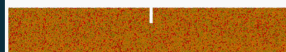
©西日本新聞

Δh : Water level difference



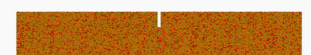
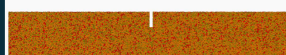
$\Delta h = 10\text{cm}$

$\Delta h = 25\text{cm}$



$\Delta h = 15\text{cm}$

$\Delta h = 30\text{cm}$

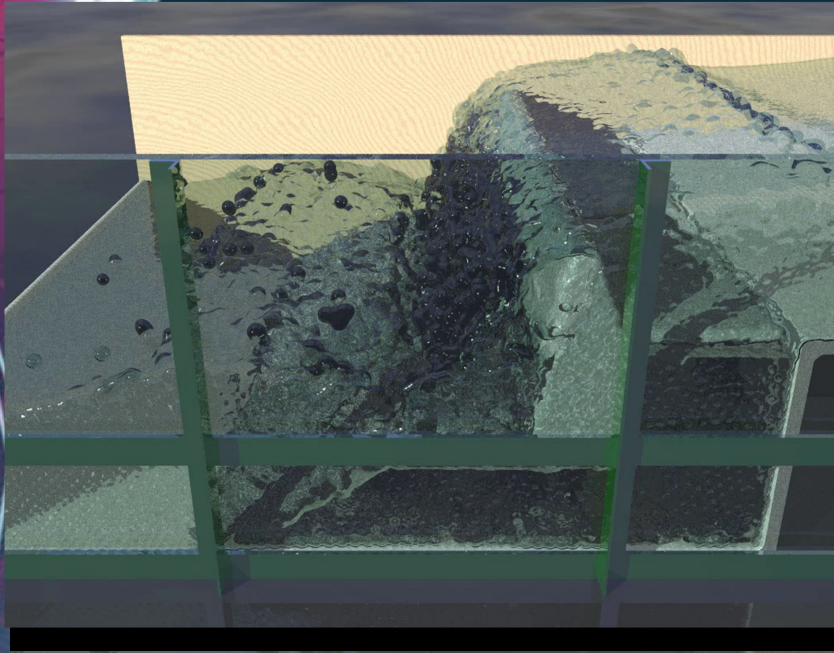
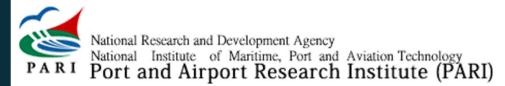


2022/11/11
14:00-16:30

17

防潮堤と津波（平均化＋高解像モデル）

SPH-DEM モデル



GPU 1枚を使用して
計算時間は12時間



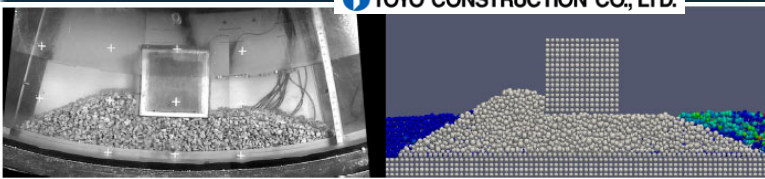
有川太郎氏提供 @ 港湾空港技術研究所

2022/11/11
14:00-16:30

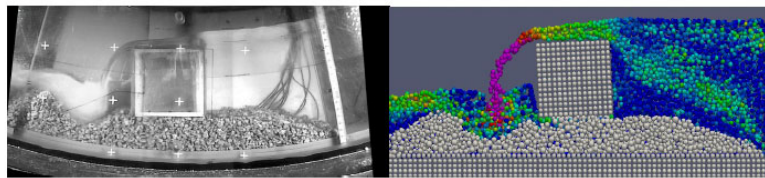
18

防潮堤の遠心载荷実験

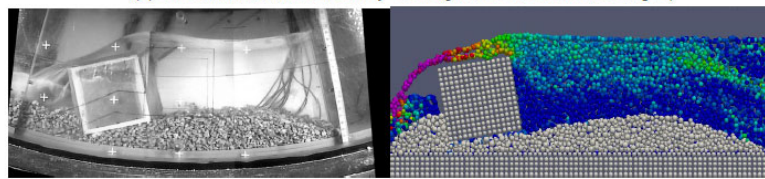
TEPSCO Tokyo Electric Power Services Co., Ltd.
TOYO CONSTRUCTION CO., LTD.



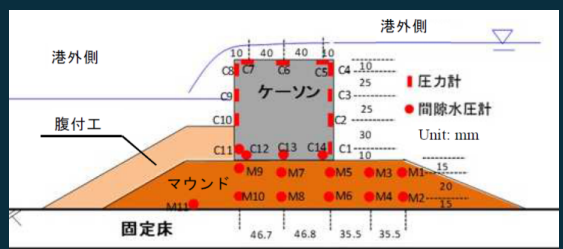
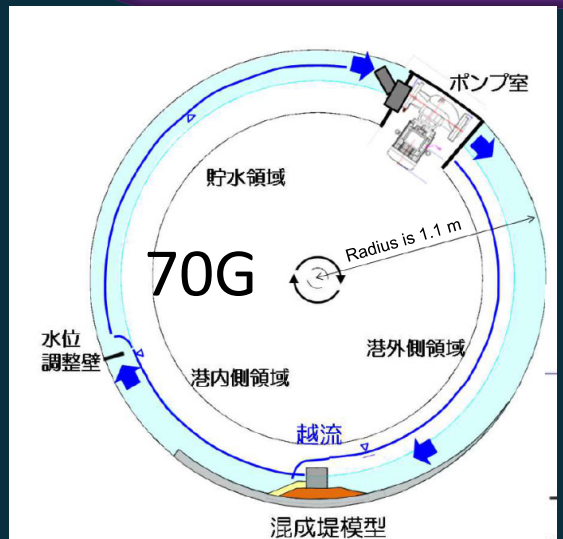
(a) before the tsunami



(b) embankment washed out by scour (just before caisson collapse)

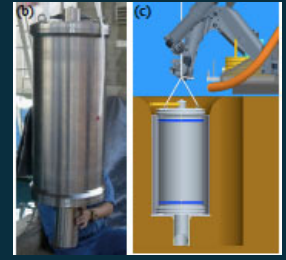


(c) caisson collapse

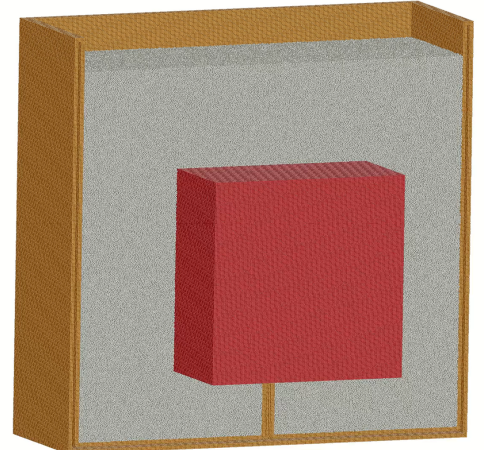


T. Iwamoto, et al., *Soil Dynamics and Earthquake Engineering* (2019)

地震による地盤の液状化



海底地震計と液状化



間隙水圧分布

有効応力分布

(a) 加振前

(a) 加振前

(b) 加振中

(b) 加振中

(c) 加振後

(c) 加振後

連続体モデル（非ニュートンSPHモデル）



SPH simulations of three-dimensional non-Newtonian free surface flows



Xiaoyang Xu^a, Jie Ouyang^{a,*}, Binxin Yang^b, Zhijun Liu^a

^aDepartment of Applied Mathematics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710129, China
^bDepartment of Applied Mathematics, Taiyuan University of Science and Technology, Taiyuan 030024, China

$$\left(\frac{dv^\alpha}{dt}\right)_i = \sum_j m_j \left(\frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2} \right) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta} + F^\alpha.$$

Introducing the velocity gradient

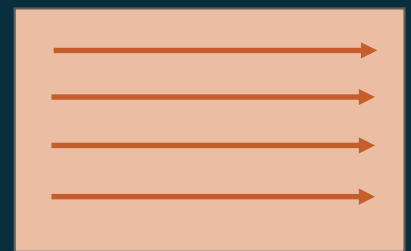
$$k_i^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial v^\alpha}{\partial x^\beta}\right)_i = \sum_j \frac{m_j}{\rho_j} (v_j^\alpha - v_i^\alpha) \frac{\partial W_{ij}}{\partial x_i^\beta},$$

the discretized form of constitutive equation for the Cross model can be expressed as

$$\sigma_i^{\alpha\beta} = -p\delta^{\alpha\beta} + \mu(\dot{\gamma})(k_i^{\alpha\beta} + k_i^{\beta\alpha}),$$

where the local shear rate $\dot{\gamma}$ in 3D is given by

$$\dot{\gamma} = [2(k_i^{xx})^2 + 2(k_i^{yy})^2 + 2(k_i^{zz})^2 + (k_i^{xy} + k_i^{yx})^2 + (k_i^{yz} + k_i^{zy})^2 + (k_i^{xz} + k_i^{zx})^2]^{1/2}.$$



ローカルな剪断速度 $\dot{\gamma}$ は歪み速度テンソル S の第二不変量 I_2 と非圧縮条件下から求められる。

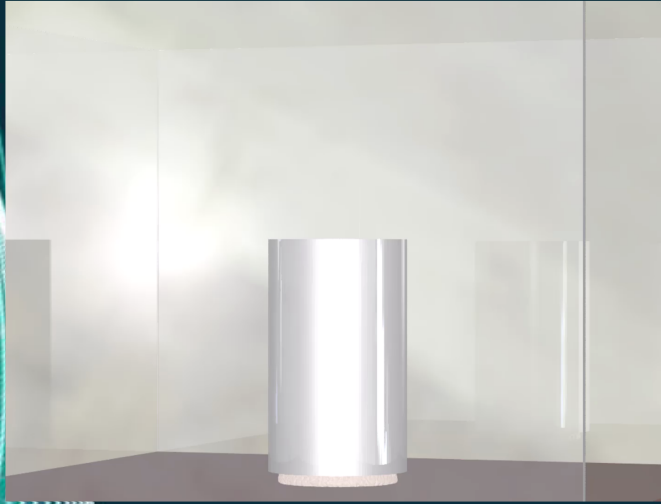
$$\dot{\gamma} = \sqrt{2S:S} = \sqrt{4I_2}$$

$$S = \frac{1}{2} (k_i^{\alpha\beta} + k_i^{\beta\alpha})$$

$$S^{xx} + S^{yy} + S^{zz} = 0$$

(擬)連続体モデル (粘着DEMモデル)

- 粘着力: $F_{coh} = a \left[1/(1 + D^\alpha) - 1/(1 + D^\beta) \right]$
- 速度減衰力: $F_{vis} = b(v_j - v_i)$



DEM-CFD (高解像 + 局所平均化モデル)

◆ 流体方程式

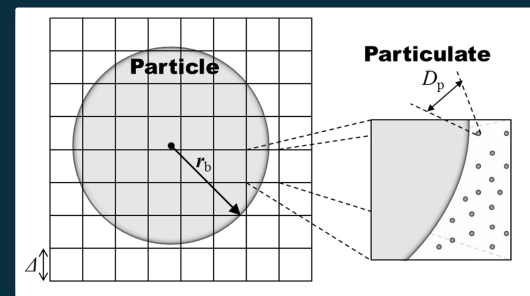
$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon u_j}{\partial x_j} = 0$$

$$\frac{\partial \varepsilon u_i}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon u_i u_j}{\partial x_j} = \frac{\varepsilon}{\rho_f} \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + f_{bi} + f_{pi}$$

◆ 粒子の運動方程式

$$M \frac{\partial v_i}{\partial t} = T_i + F_i$$

$$J \frac{\partial \omega_i}{\partial t} = R_i + W_i$$



Computational geometry

◆ 境界埋め込み型直接数値計算法 (Kajishima et.al)

$$F_i = - \int_{V_b} f_{bi} dV \quad W_i = - \int_{V_b} (r_b \times f_b)_i dV$$

$$f_{bi} = \alpha (U_i - u'_i) / \Delta t$$

◆ 局所平均化法 (Tsuji et.al)

$$F_i = \frac{\pi D_p^3}{6} \left[\frac{\beta (u_i - v_i)}{1 - \varepsilon} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \right]$$

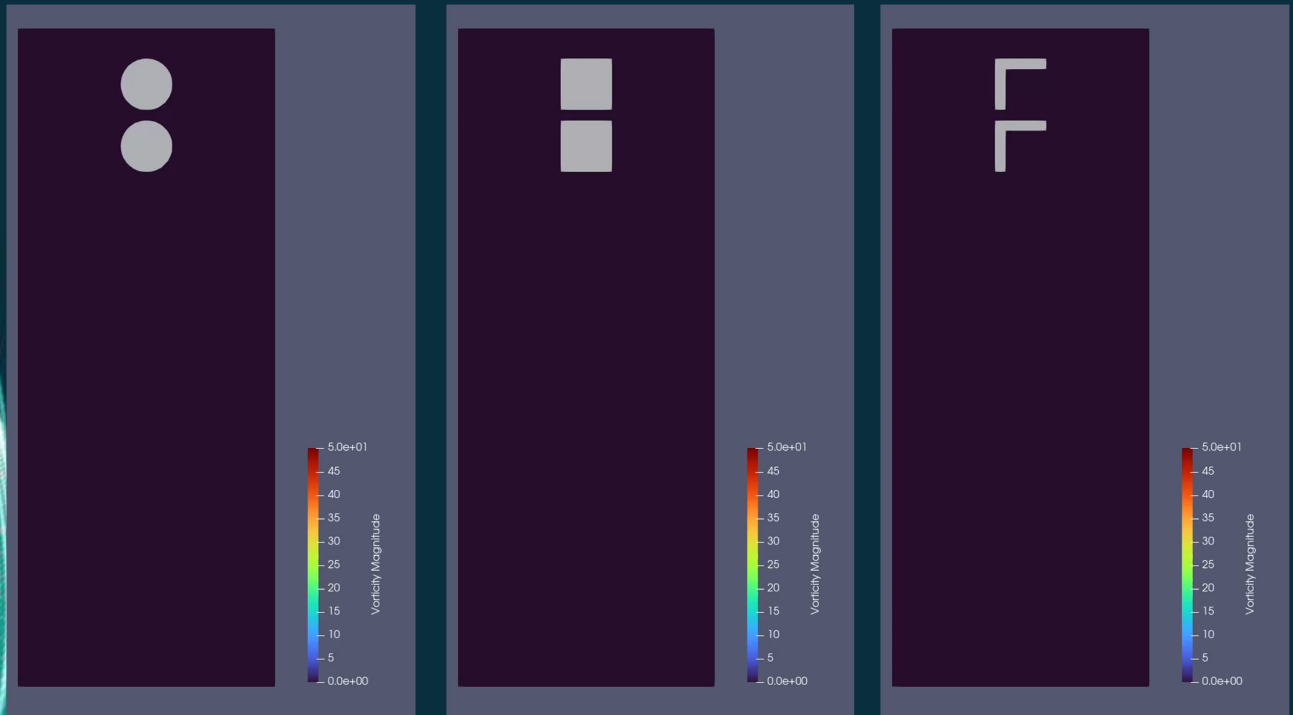
$$f_{pi} = \beta (\bar{v}_i - u_i) / \rho_f$$

T. Kajishima, et al., Turbulence Structure of Particle-Laden Flow in a Vertical Plane Channel Due to Vortex Shedding, *JSM International Journal Ser. B*, 44(4), 526-535 (2001)

2022/11/11
14:00-16:30

23

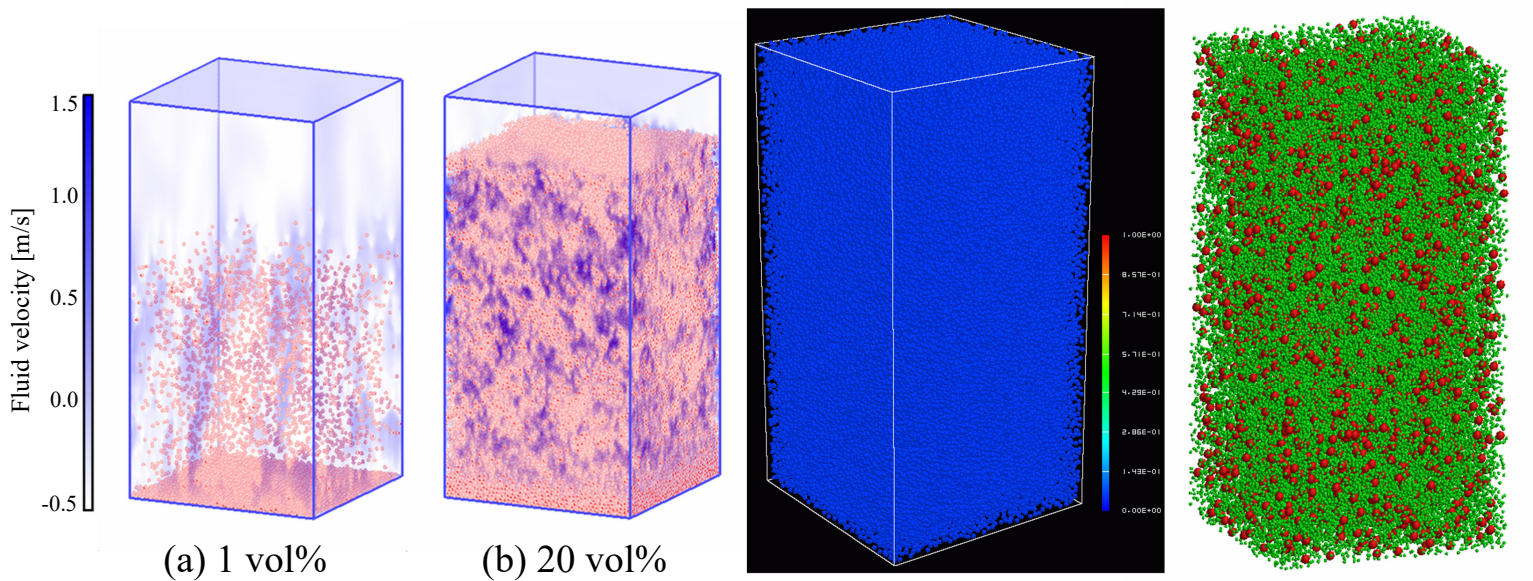
構造物の液中落下



2022/11/11
14:00-16:30

24

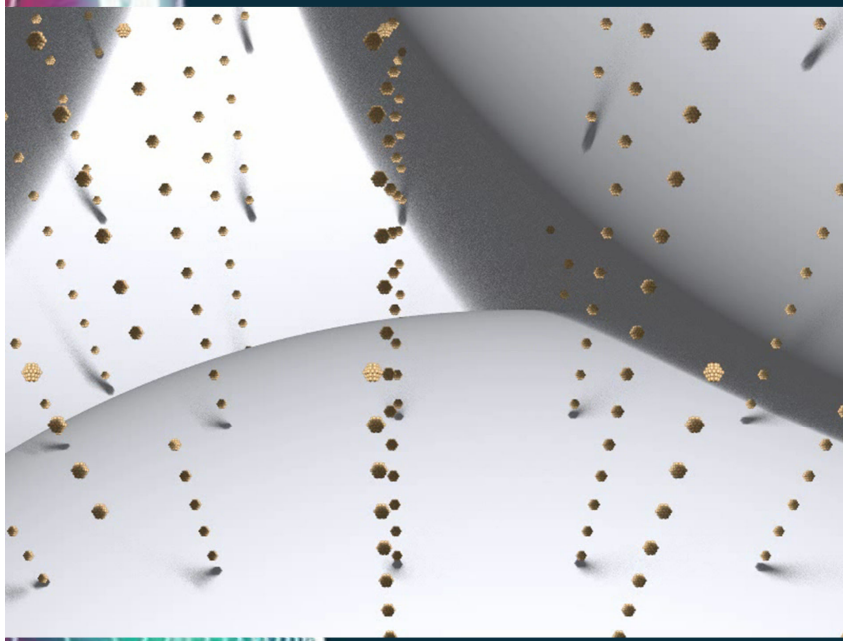
多粒子群の沈降シミュレーション



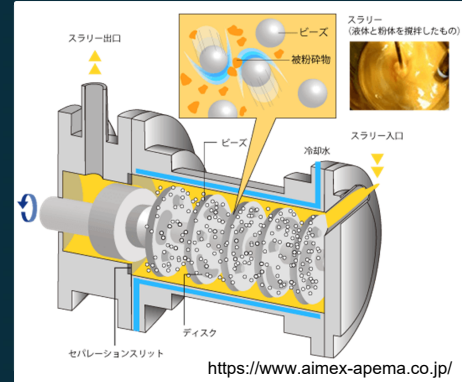
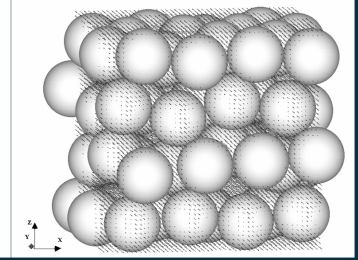
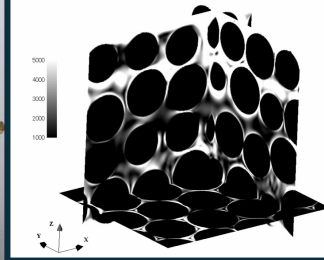
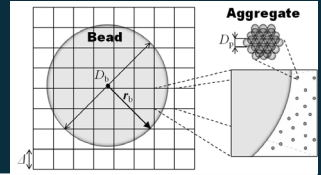
D. Nishiura, et al., Hybrid Simulation of Hindered Settling Behavior of Particles Using Discrete Element Method and Direct Numerical Simulation, *KAGAKU KOGAKU RONBUNSHU*, **32**(4), 331-340 (2006)

2022/11/11
14:00-16:30
25

せん断シミュレーションの例



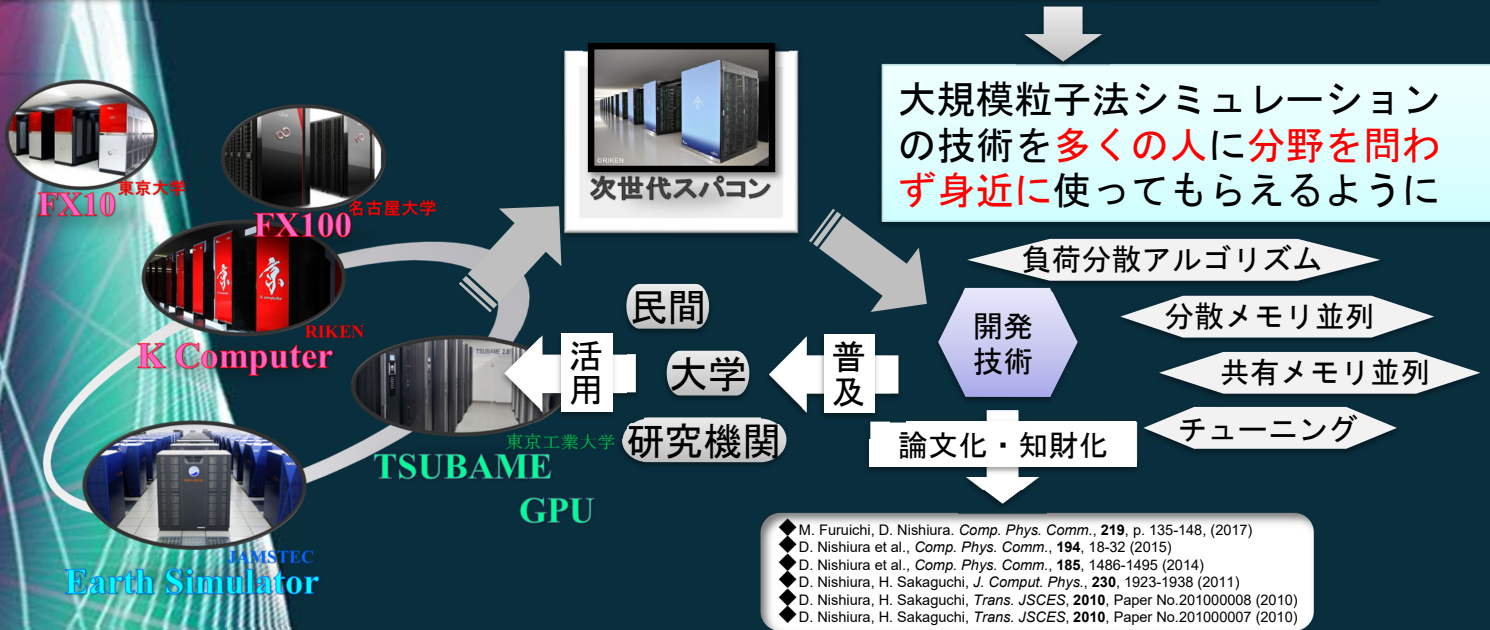
D. Nishiura, et al., Wet dispersion mechanism of fine aggregates in multiphase flow with solid beads under simple shear, *AIChE J.*, **60**(12), 4076-4085 (2014)



2022/11/11
14:00-16:30
26

計算科学による粒子法の高度化

次世代機を含め、あらゆる計算機を有効活用できるように、コードを開発



- ◆ M. Furuichi, D. Nishiura, *Comp. Phys. Comm.*, **219**, p. 135-148, (2017)
- ◆ D. Nishiura et al., *Comp. Phys. Comm.*, **194**, 18-32 (2015)
- ◆ D. Nishiura et al., *Comp. Phys. Comm.*, **185**, 1486-1495 (2014)
- ◆ D. Nishiura, H. Sakaguchi, *J. Comput. Phys.*, **230**, 1923-1938 (2011)
- ◆ D. Nishiura, H. Sakaguchi, *Trans. JSCES*, **2010**, Paper No.201000008 (2010)
- ◆ D. Nishiura, H. Sakaguchi, *Trans. JSCES*, **2010**, Paper No.201000007 (2010)

大規模粒子法計算に向けた課題と対策

SPH, DEM等の近接粒子相互作用による粒子法では、粒子が動き回り計算コストの空間的不均質性が時間的に変化する。それゆえ空間領域分割による分散メモリ環境での効率的なノード間並列は最高ランクの技術的難易度の課題

スパコンを用いた大規模粒子法計算を実現するための動的負荷分散アルゴリズムを開発



粒子法コード並列化の概要

プロセッサ
レベル

SIMD化・ベクトル化促進
(富士通・NECの協力)

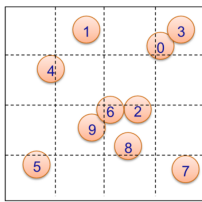
共有メモリ並
列・最適化

我々の既往研究で最高速な粒子間計算アルゴリズムの採用
(D. Nishiura, M. Furuichi, H. Sakaguchi, *Comp.Phys.Comm.*, 2015)

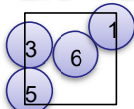
分散メモリ並
列・最適化

スライスグリッド領域分割と擬ニュートン法を用いた動的負荷分散
(M. Furuichi and D. Nishiura, *Comp.Phys.Comm.*, 2017)

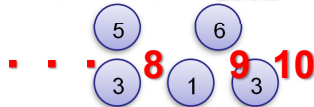
粒子法に対する共有メモリ型並列化の難しさ



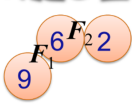
1. セルに粒子を格納



2. ペアリストの作成



3. 力の足し合わせ計算



$$F[2] = -F_2$$

$$F[6] = F_1 + F_2$$

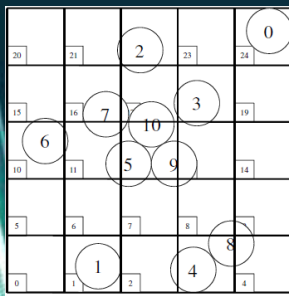
$$F[9] = -F_1$$

- 共有メモリ書き込み競合
 - セルに粒子番号を格納する
 - セル内の粒子数と粒子番号を記憶
 - 近傍のセルを探索して相互作用相手粒子を見つける
 - 粒子に働く力を足し合わせる
 - 作用反作用の法則を用いる
 - 相互作用ペア間の力を計算してペア粒子に力を渡す
- 相互作用相手の粒子数が不均一
 - ロードバランスが悪い
- メモリのランダムアクセス
 - メモリアクセス速度が低下
 - キャッシュが効かない

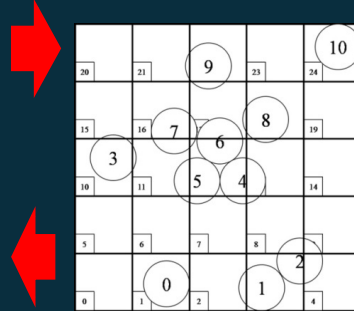
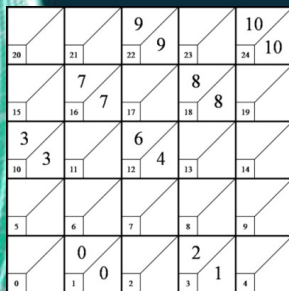
解決方法

D. Nishiura and H. Sakaguchi, *J. Comput. Phys.*, 230, 1923-1938, (2011)

1. セルへの粒子番号登録

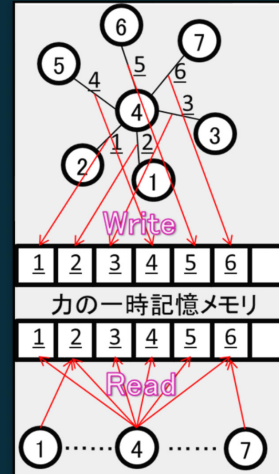


粒子番号をソート

粒子番号の最小値
と最大値を登録

2. 相互作用力の足し合わせ

- ① Atomic_add関数
- ② 作用反作用の法則を使わない
- ③ 参照表を使う

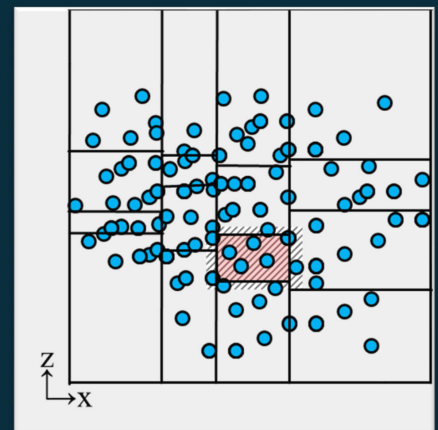


分散メモリ型並列：①領域分割方法

- 2次元改良型スライスグリッド法による動的負荷分散を採用

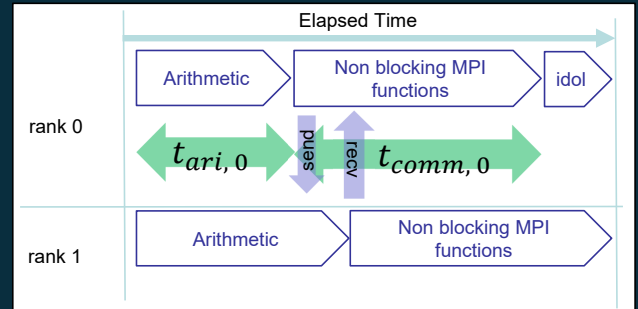
- (i) 各列の計算コストが一様になるように計算領域を垂直に分割
- (ii) 各列を水平方向に分割し、計算コストが一様な空間要素を作成
- (iii) 各要素にMPIプロセスを割り当てる

- ✓ 特徴1：他の空間充填曲線、グラフ、曲線、階層、3次元分割などの領域分割法と比べて、実装が比較的単純であり、格子の更新に必要な計算コストが少ない。
- ✓ 特徴2：スライスグリッドは、長方形のジオメトリの制約が性能劣化を引き起こす場合がある。しかし粒子分布がそれほど離散的でなく2次元的な広がりを持つ場合には、性能劣化は限定的。



分散メモリ型並列：②計算負荷の評価

- 動的負荷分散は各MPIプロセスの計算コストを均質にするための前処理
- 既往研究では“粒子数＝計算負荷”の例が多数。しかし“粒子数＝計算負荷”では、粒子毎に異なる計算コストや境界条件処理、またヘテロな計算機環境に負荷分散を適応できないといった問題がある。
- 各MPIプロセスで費やされた“**計算経過時間＝計算負荷**”とする。
- 経過時間 $t = t_{ari} + t_{comm}$ は演算に用いられた時間 t_{ari} と MPI通信に用いられた時間 t_{comm} を測定して求める。

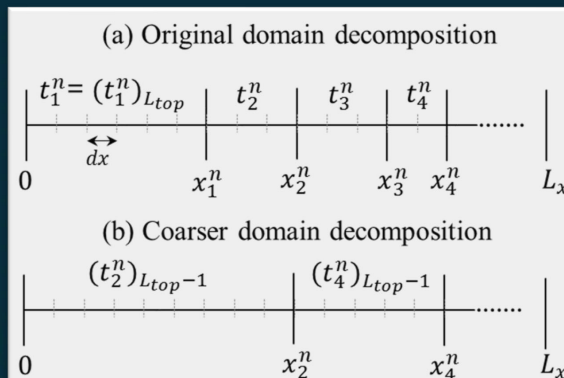


分散メモリ型並列：③負荷バランサー

- 残差（評価）関数 f を領域境界 x_I^n で定義し

$$f^n(x_I^n) = t_I^n - t_{I-1}^n,$$
 負荷分散問題をノルム $\|f^n(x_I^n)\|$ を最小化する非線形問題として考える。
- 擬ニュートン法とマルチグリッド法により境界位置を移動

$$x_I^{n+1} = x_I^n + \delta x_I,$$

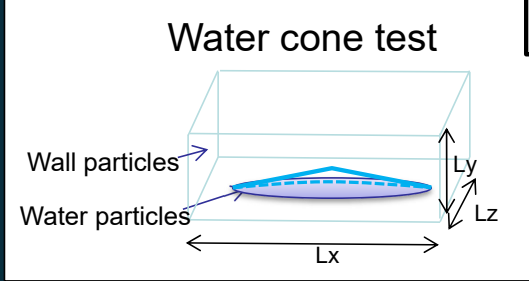


演算時間基準の負荷バランサー

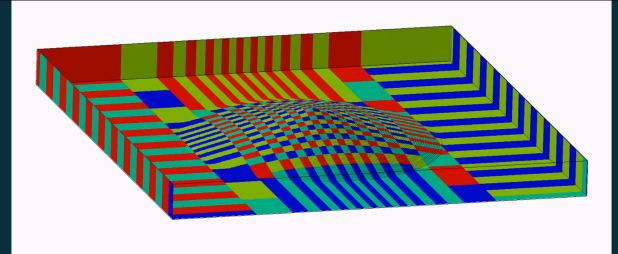
- Line 1: $n = 0$: given $x_I^0, \hat{f}, \delta x_I = 0$
- Line 2: Solve SPH kernels and observe t_{ari} and t_{comm} .
- Line 3: Compute residual $f^n(x_I^n)$
- Line 4: if $\delta x_I \neq 0$ then update $(\hat{f})_{II}$
- Line 5: Solve linearized problem $\hat{f} \delta x = -\alpha f^n$
- Line 6: Update $x_I^{n+1} = x_I^n + \delta x_I$
- Line 7: If $\|\delta x_I\| = 0$ then change α with line search.
- Line 8: $n = n + 1$: goto Line 2

SPHにおける性能検証問題

粒子の空間分布と種類によって計算負荷不均質性が現れる水塊問題 (Water cone test) をサンプル問題とし、並列化性能を測定



計算例：異なる色は各MPIプロセスの担当領域

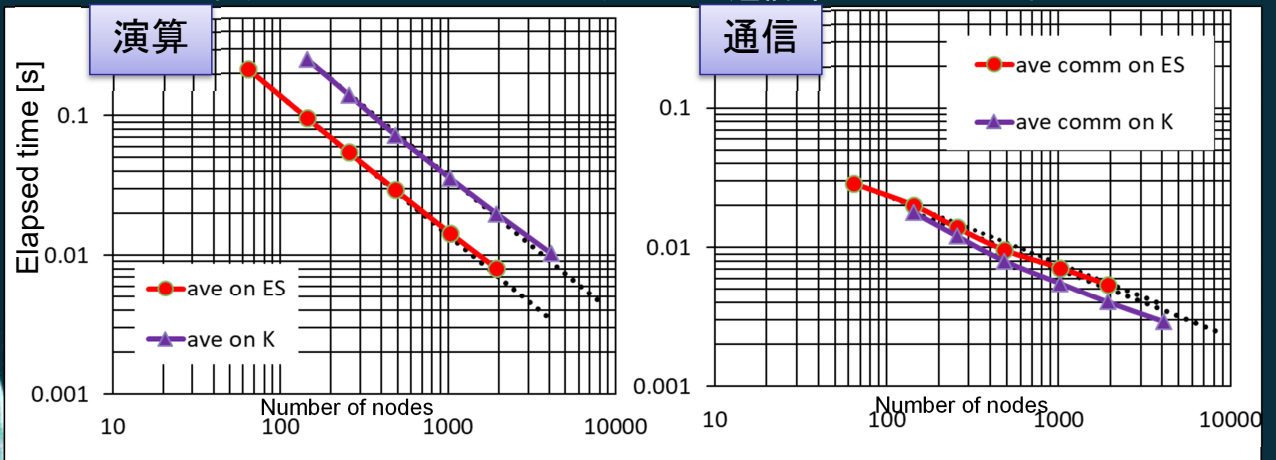


- 水粒子の分布形状＝計算負荷の偏り
- 水粒子と壁粒子で異なる計算負荷＝計算負荷の偏り

動的負荷分散アルゴリズムの効果を検証

通信コストが並列性能を低下させる

計算コスト＝経過時間を演算部分と通信部分に分離して解析



- ◆ 計算効率がノード間通信によって律速
- ◆ ノード数を増やすためには通信コストの問題を解決する必要がある

M. Furuichi and D. Nishiura, *Comp. Phys. Comm.*, 219, 135-148, (2017)

通信と演算のオーバーラップ手順

- **1stLoop**
 - 境界セル領域の粒子のみ、粒子情報を更新する
- **2ndLoop**
 - OpenMPのThread#0が境界セル領域の粒子情報をMPI通信する
 - 他のThreadは境界セル領域以外の粒子情報を更新する
 - OpenMPのスケジューリングはDynamicにし、ループの分割サイズを適切に設定する
 - Thread#0はMPI通信が終わると、粒子情報の更新作業に回る

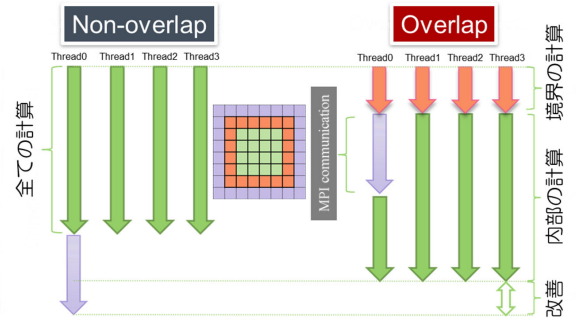
ペア粒子間の相互作用力の計算



力の足し合わせ計算と粒子情報の更新

通信と計算のオーバーラップを適用

- 1st loop:** 境界領域の粒子情報更新
- 2nd loop:** 残りの粒子情報更新と通信

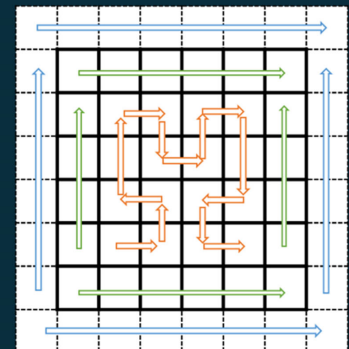
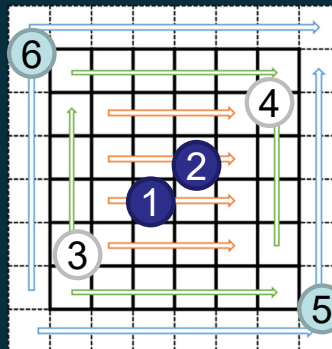
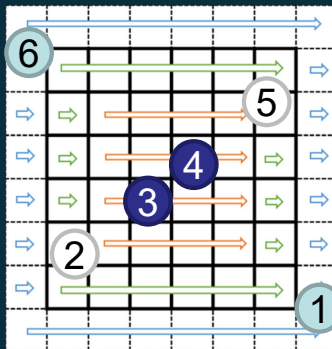


粒子の番号付け

従来手法 (Type 1)

本手法 (Type 2)

本手法 (Type 3)



通信と演算のオーバーラップのためのループ構造

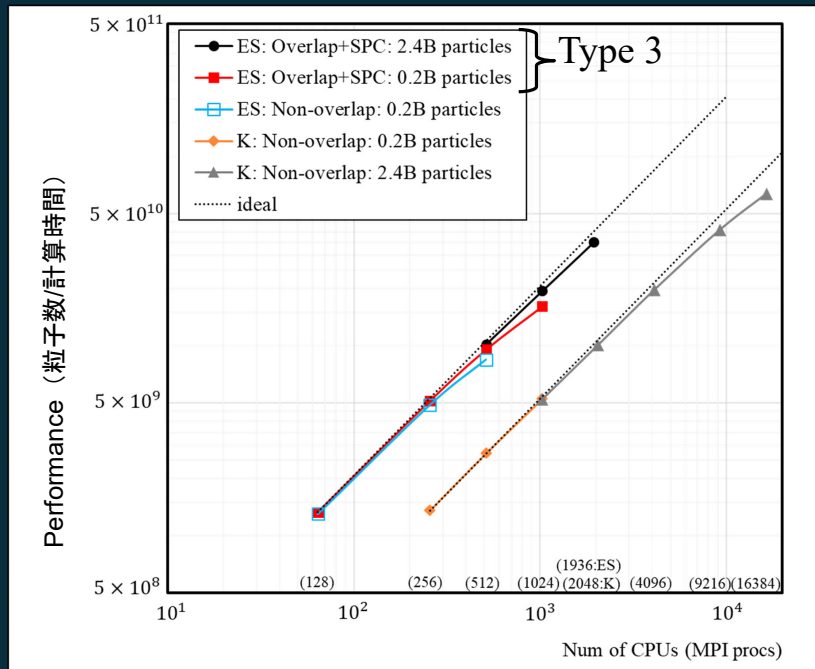


Type 1



Type 2, 3

並列パフォーマンス測定結果

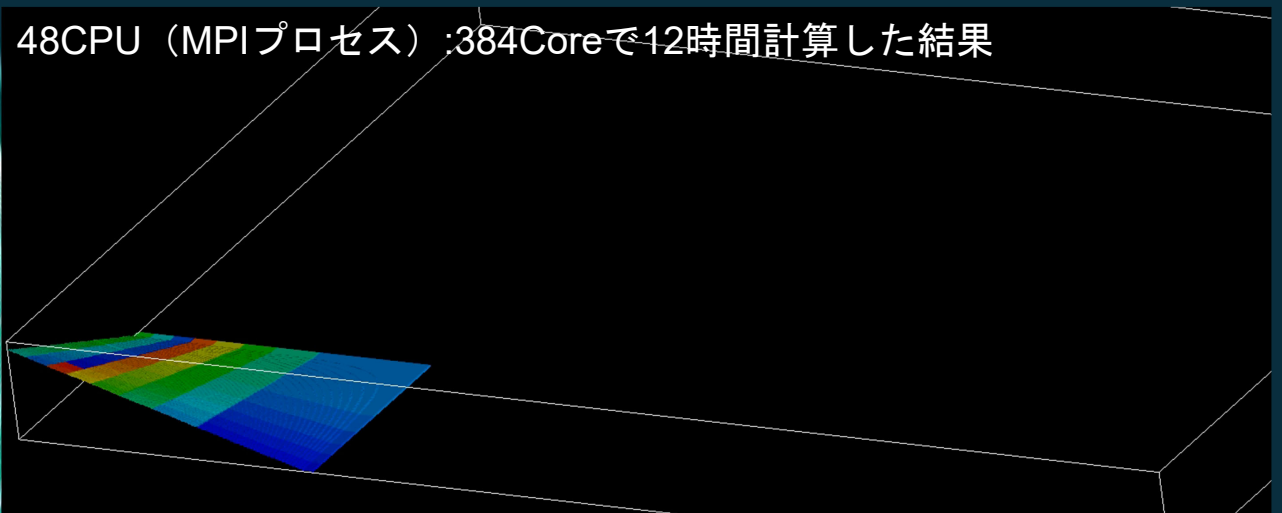


M. Furuichi et. al., SC17, Poster

計算領域の効率化

- 動的負荷分散による津波計算例
- 計算が進むにつれ必要な地形データを読み込む
- 粒子数は水部分で約2000万粒子
- 粒子の色は担当するMPIプロセス

48CPU (MPIプロセス) :384Coreで12時間計算した結果

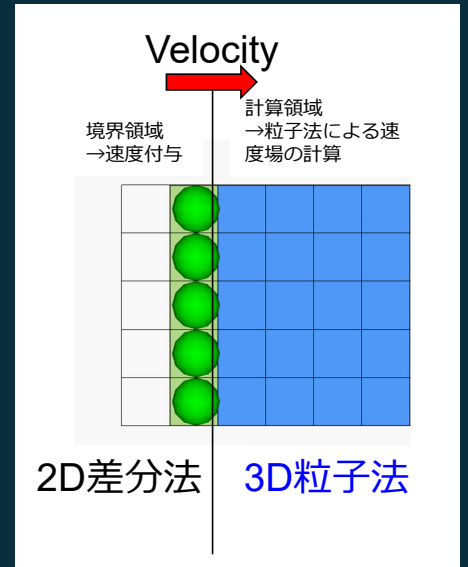
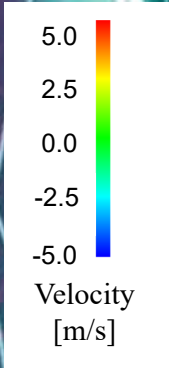


2022/11/11
14:00-16:30

39

SPHによる津波遡上解析

九州大学 浅井光輝先生提供資料

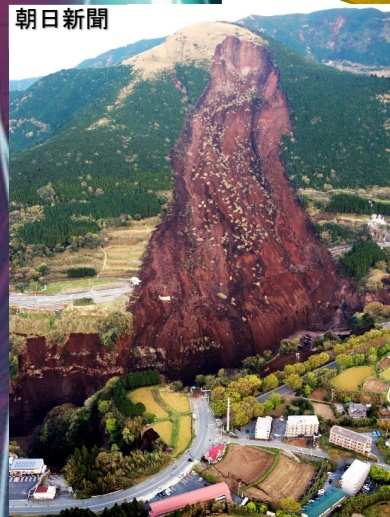


2022/11/11
14:00-16:30

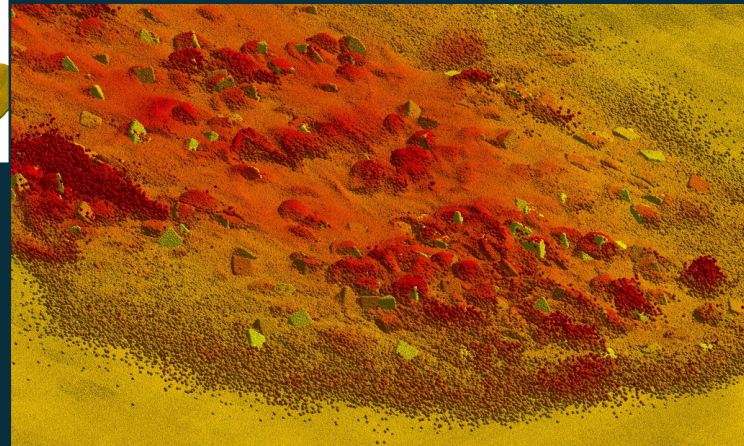
40

DEMによる土砂崩れ解析

朝日新聞



100億粒子



2022/11/11
14:00-16:30

41

大規模粒子法で不可能が可能になる！？

- 砂場スケールのDEMを使って、地球規模の現象を説明する



砂場でのお遊び



- 大規模計算機
- 大規模DEM
- 大規模応力鎖解析

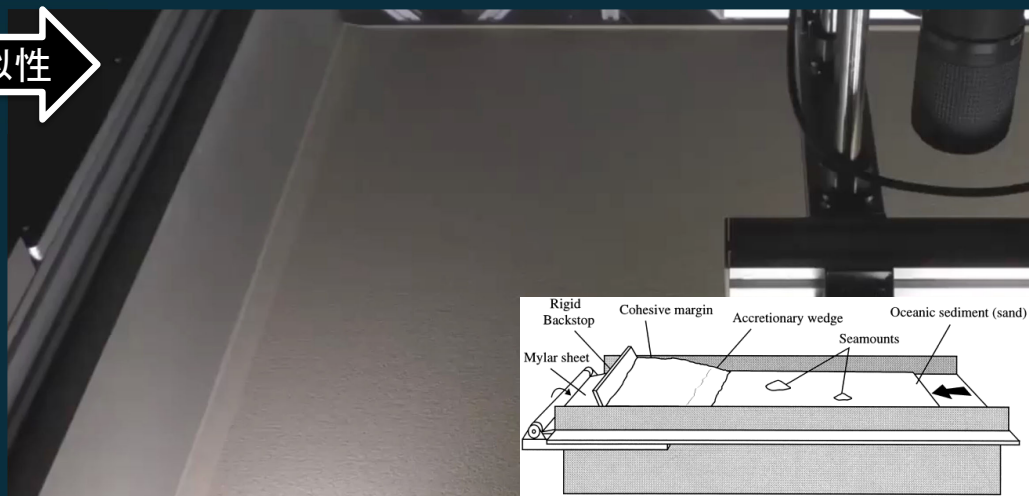


地震予測につながるかも？

2022/11/11
14:00-16:30

42

砂箱実験による断層形成過程の観察

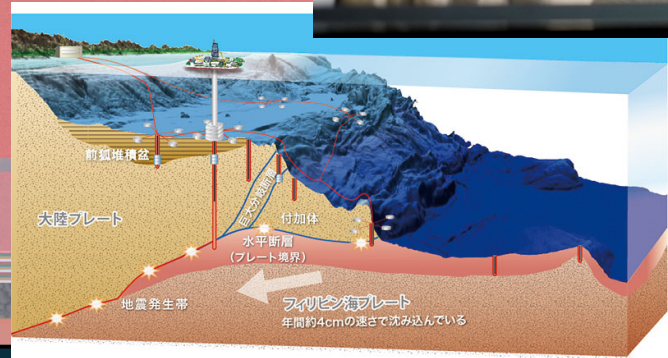
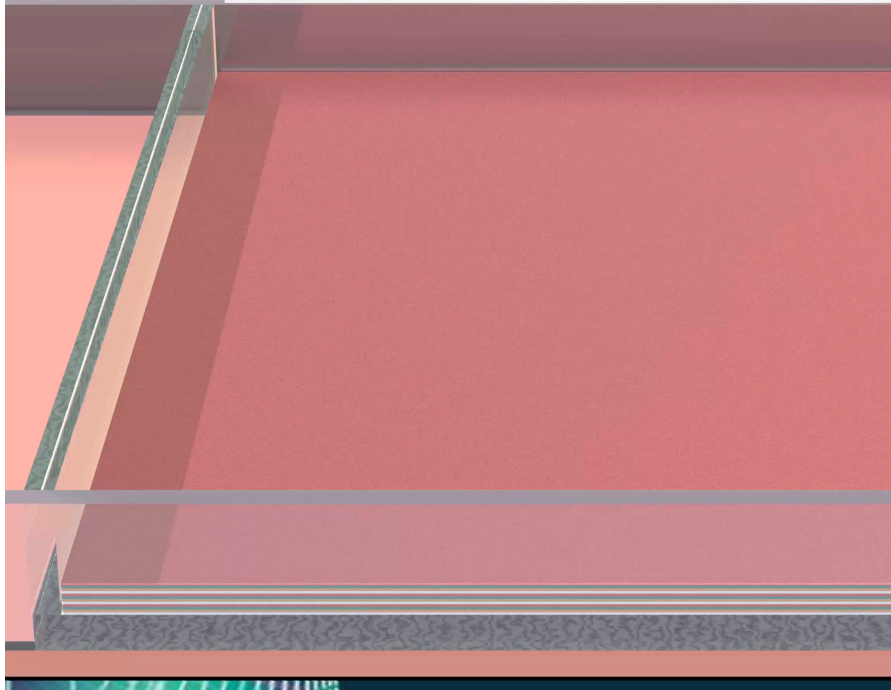


- 室内実験では内部の応力状態や断層形状など、詳細な3次元データの取得は困難

2022/11/11
14:00-16:30

43

DEMによる断層シミュレーション

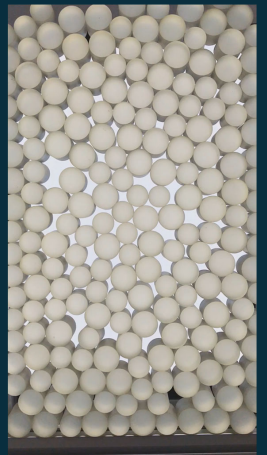


2022/11/11
14:00-16:30

44

応力鎖解析

- 粒子間力が強い粒子が鎖状につながる様が応力鎖。
- 強い応力鎖が材料挙動をほぼ支配。
- 室内実験では応力鎖解析はほぼ2次元、3次元は難しい。
- 数値計算では直接3次元解析が可能。



Peter et.al. Phys. Rev. E 2005

1st step: 最大主応力ベクトルを各粒子毎に計算

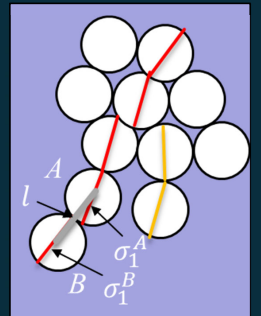
$$\sigma_{ij} = \frac{1}{V} \sum_{c=1}^{n_c} f_i^c r_j^c$$

2nd step: 以下の基準を満たすものを応力鎖の候補とする

$$|\sigma_1| \geq \text{average} \text{ and } \cos\left(\frac{\pi}{4}\right) < \frac{|l\sigma_1^A|}{|l|\sigma_1^A|} \leq 1 \text{ and } \cos\left(\frac{\pi}{4}\right) < \frac{|l\sigma_1^B|}{|l|\sigma_1^B|} \leq 1$$

where $l = X_A - X_B$.

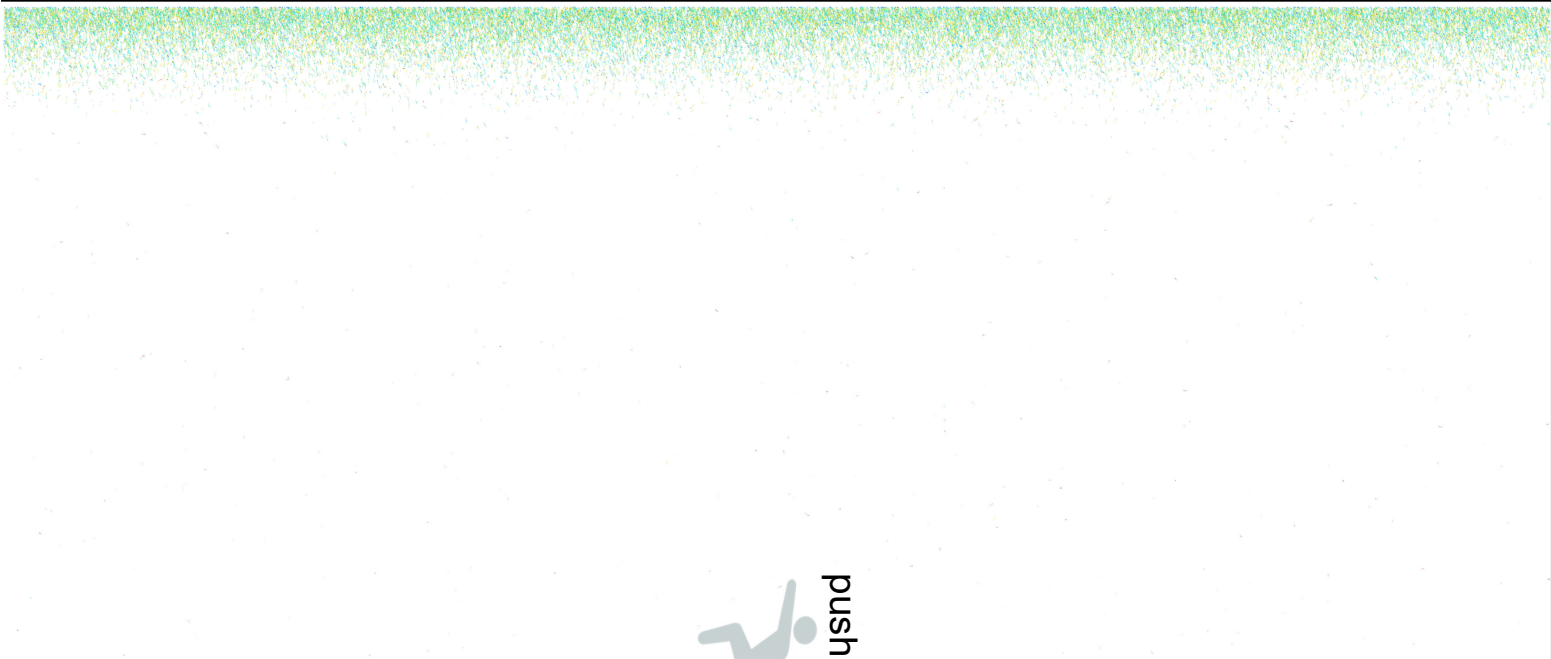
3rd step: 鎖の長さを数え上げ一定数以上のものを応力鎖とする。(我々の場合4粒子)



2022/11/11
14:00-16:30

45

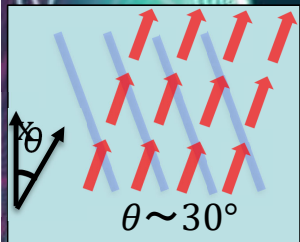
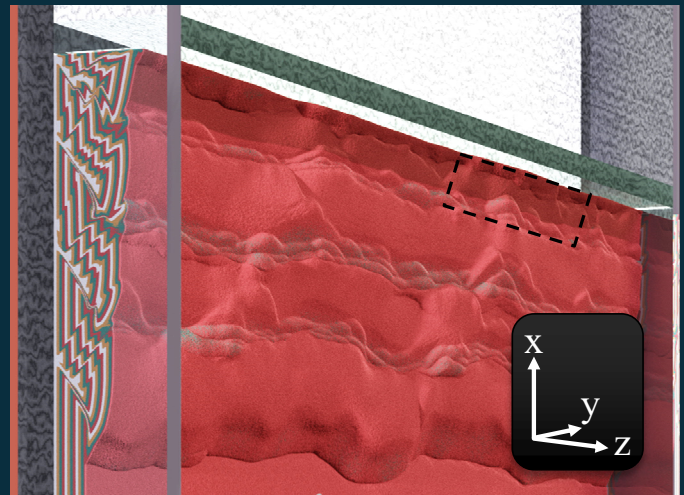
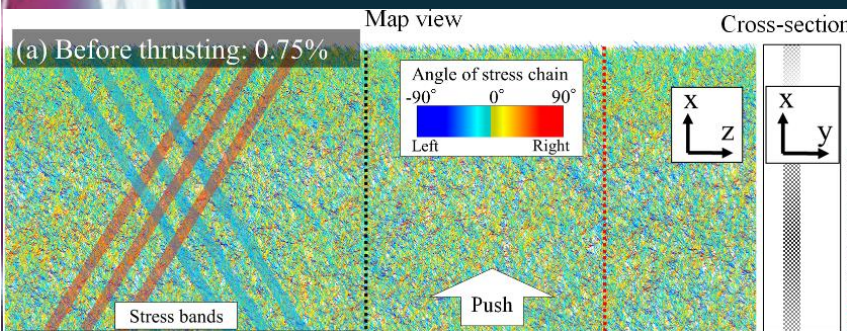
応力鎖の可視化（色は応力鎖の方向）



2022/11/11
14:00-16:30

46

応力鎖の発達過程：断層形成前



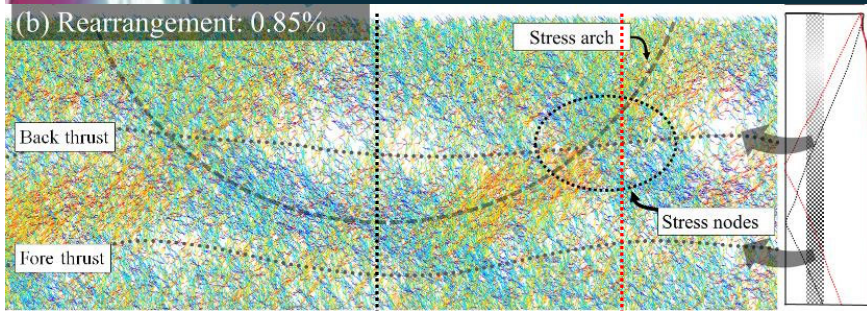
- 応力鎖がX軸に対して 30° 位の角度で連なる
 - 内部摩擦角から推定可能



2022/11/11
14:00-16:30

47

応力鎖の発達過程：断層形成開始



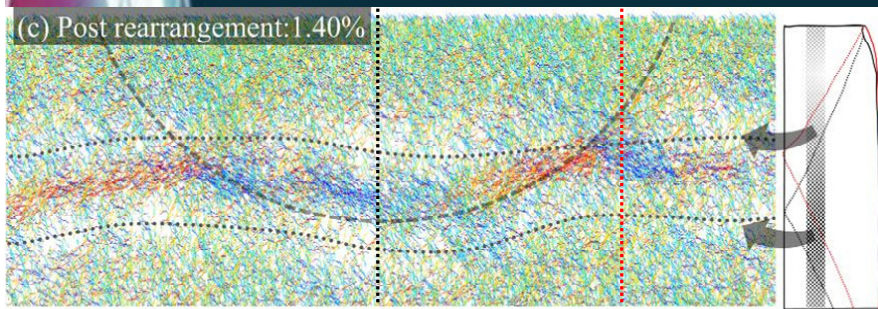
- ◆ 応力鎖の角度が急変したり、消えたり、集まったりして、応力鎖の再構築が行われる
- ◆ 断層の形成により蓄積した応力が瞬時に解放され、主応力軸が変わるためと思われる

- 断層面上の応力鎖は切断され消える
- 応力鎖が束になり、交差した固定点ができる
- 固定点を起点に、応力鎖のアーチ構造が形成される

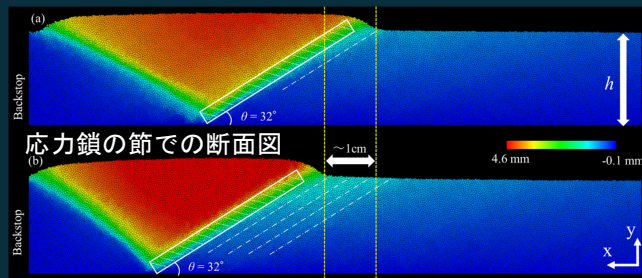
2022/11/11
14:00-16:30

48

応力鎖の発達過程：断層形成終了



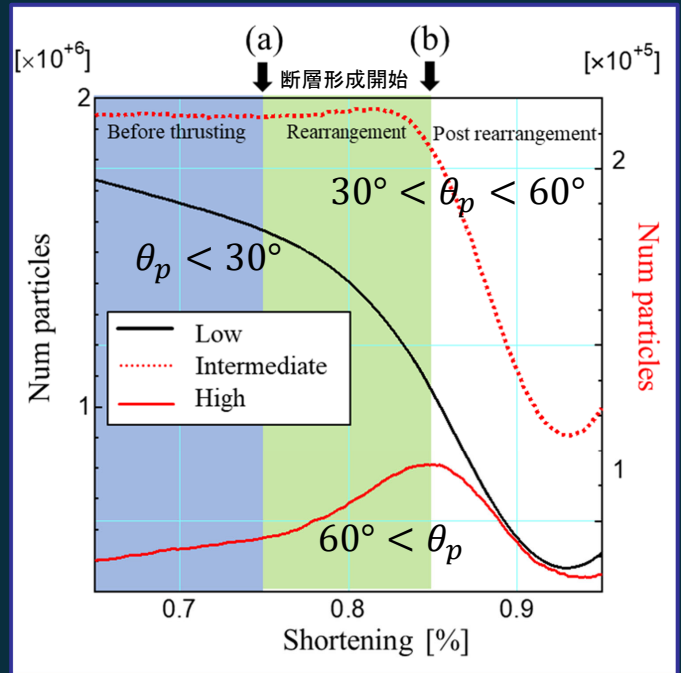
アーチのピークでの断面図



- 応力鎖アーチは壊れず構造が維持される
- 応力鎖アーチが付加体の波形状を決めている

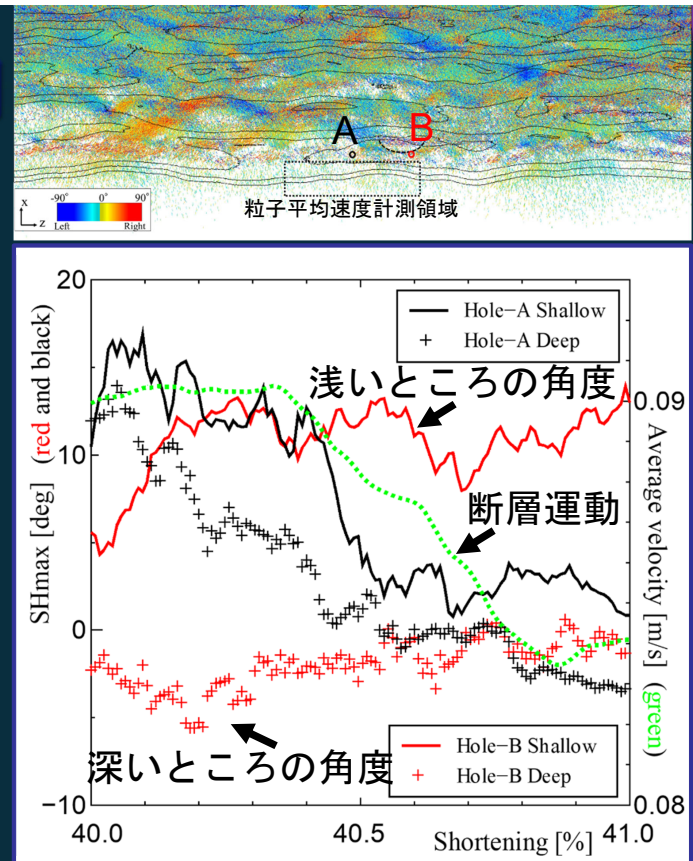
断層ができる時に応力鎖は不連続に変化する

- 断層ができる時に、**応力鎖の向きが急変する**
 - この様な不連続挙動を連続体モデルで捉えることは難しい
- ということは、最大主応力ベクトルの向きを長期計測すれば、断層滑り（地震）を予測できるかも



仮想数値掘削抗内計測

- SHmax : 最大水平主応力ベクトル
- Hole-A :
 - 断層運動と応力ベクトルに相関が有る
- Hole-B
 - アーチ付近での計測では、断層運動が捕えられない



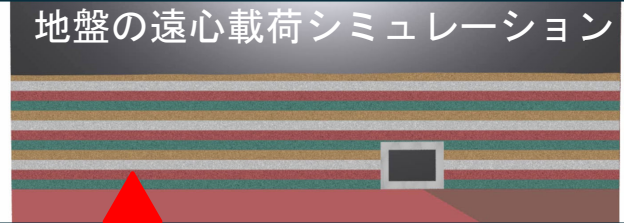
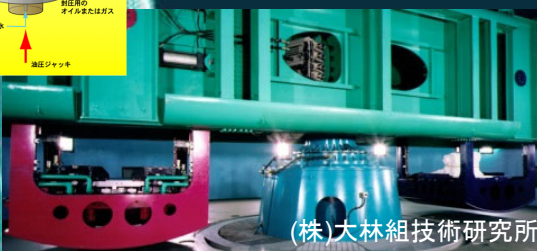
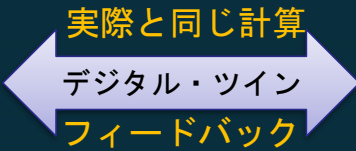
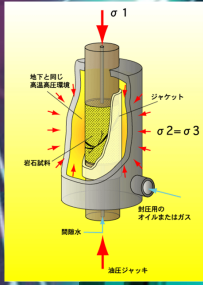
2022/11/11
14:00-16:30

51

大規模粒子法シミュレーションの産業応用化

デジタル・ツイン

- 実機と同じ条件・規模でシミュレーションが可能になれば、実験コストや開発コストを削減できる
- 実験で生じる不確実性を検証できる



実際と同じ手順でシミュレーション

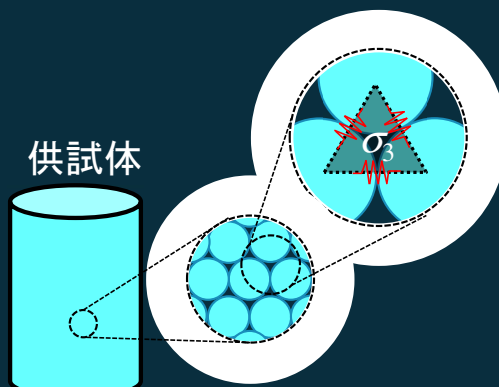
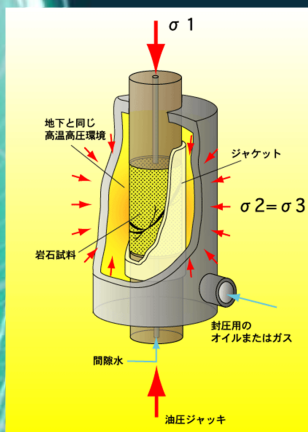
2022/11/11
14:00-16:30

52

三軸圧縮試験

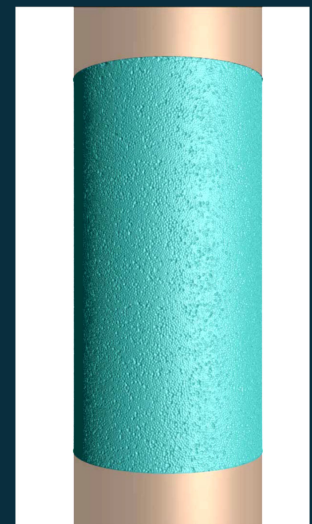
供試体に封圧を掛けるためにメンブレンモデルを開発

- メンブレンはDEM粒子をバネで連結してモデル化する。
- 連結粒子で作られる三角形要素に封圧を掛け、各粒子に封圧による力を加える。



メンブレンモデル

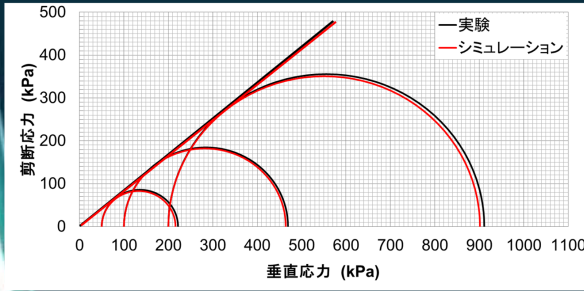
Sakaguchi, H., *Journal of the Faculty of Environmental Science and Technology* (2004)



2022/11/11
14:00-16:30

53

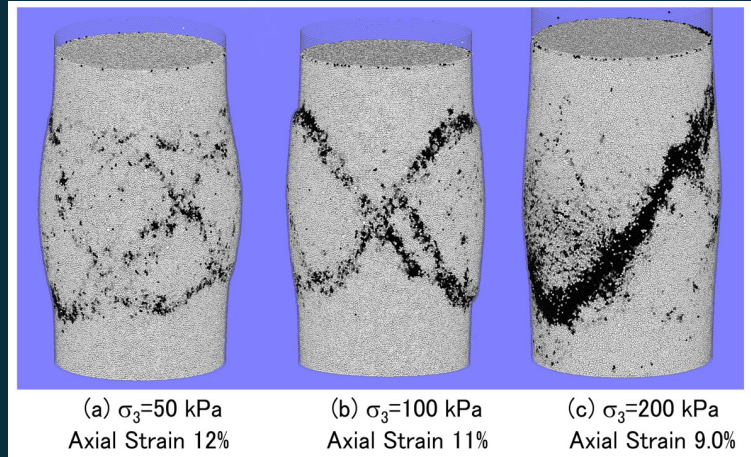
乾燥砂のせん断強度とDEMパラメータ



DEMの摩擦パラメータ
 摩擦係数: 0.5
 転がり摩擦係数: 0.01



遠心模型シミュレーションに適用



- 粒子の色は粒子の回転速度を表している。
- 黒い所ほど粒子が早く回転しており、破壊滑りが起きていることを表している。

2022/11/11
14:00-16:30

54

遠心模型シミュレーション

シミュレーション条件

ケース1

ケース2

ケース3

ここではケース1と3を比較する

MPIプロセス数

「京」の
768ノード

計算時間

24 時間

粒子数

5千万粒子

実時間

1.5 s

重力加速度

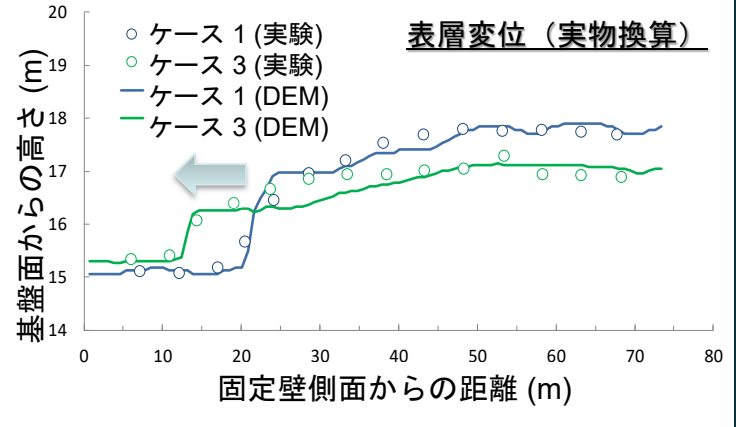
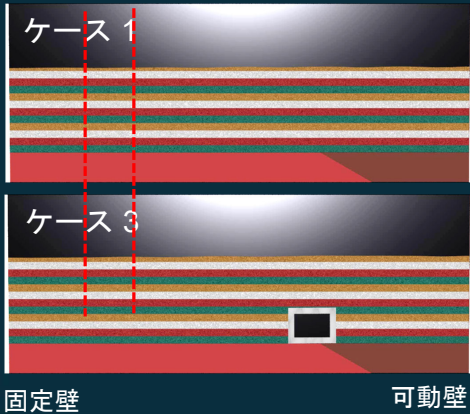
50 G

断層変位速度

0.03 m/s

地盤の変形挙動

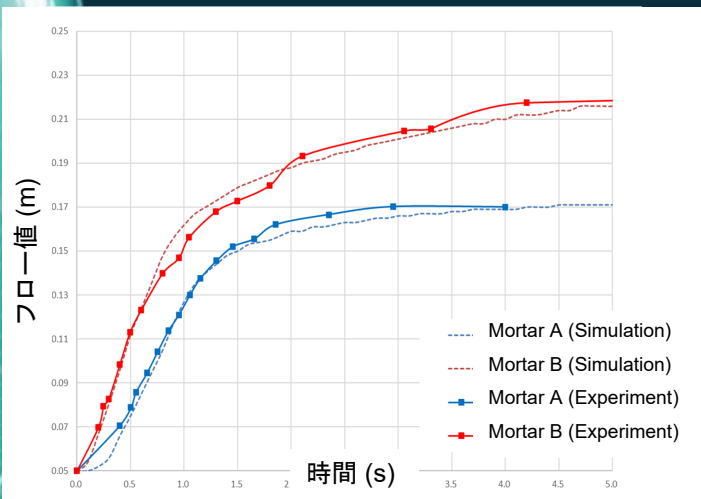
地盤変形



- ◆ 断層の角度は、可動壁の動く方向とほぼ一致している。
- ◆ 地中構造物が固定壁と可動壁を跨いで（断層直上に）設置されている場合、断層位置が固定壁側に平行移動する。これは、地中構造物の左下端から断層面が新しく発達することが原因している。

モルタルのスランプフロー試験

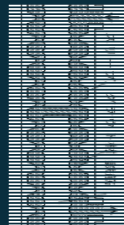
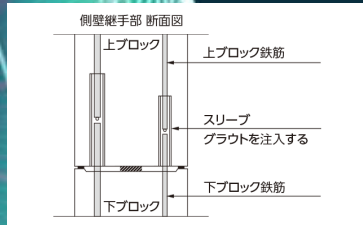
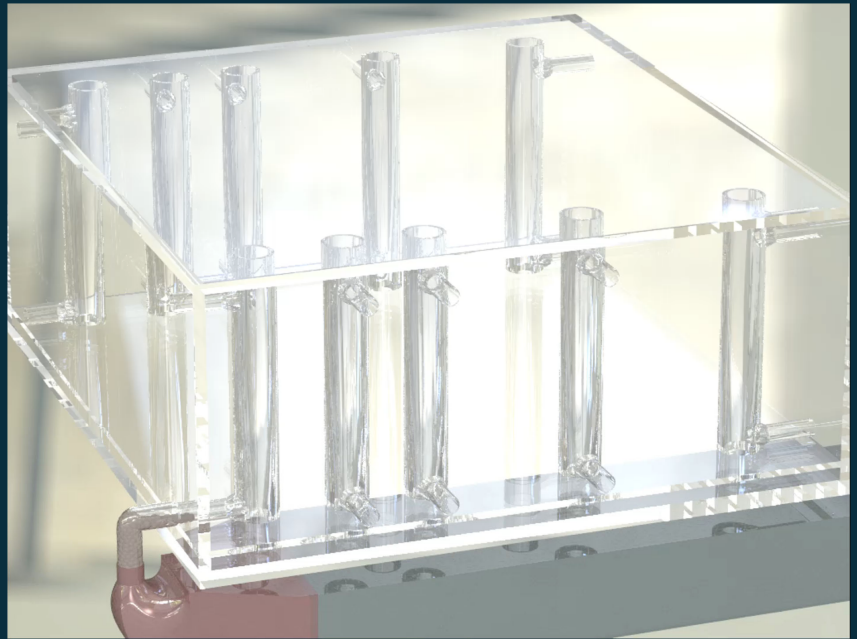
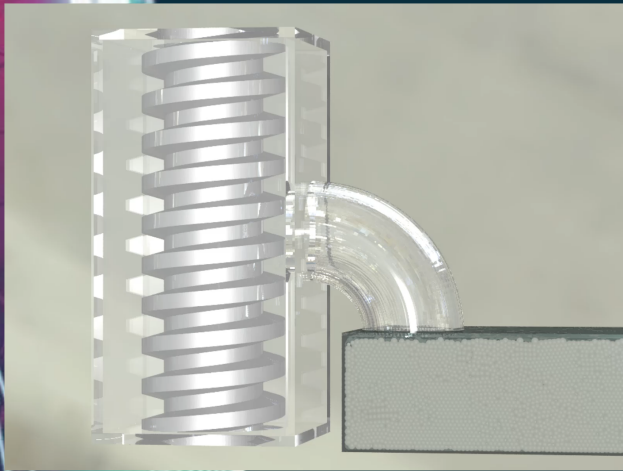
- 粘着DEMモデルを使用
- フロー値を再現するようにDEMパラメータを調整



2022/11/11
14:00-16:30

57

構造物へのモルタルの注入解析

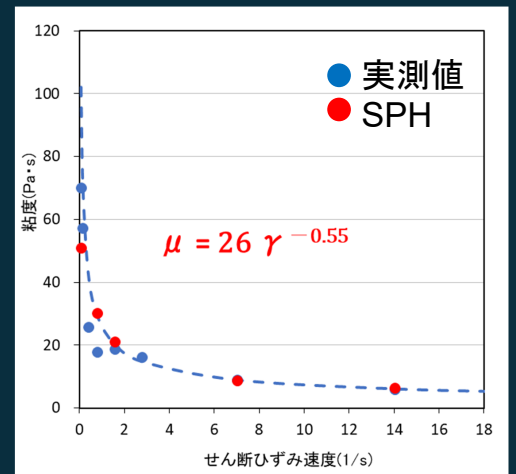


2022/11/11
14:00-16:30

58

SPHによる土砂の粘性流動解析

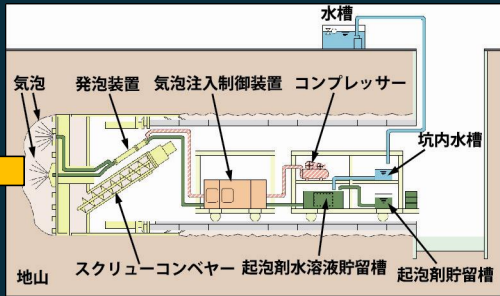
- 非ニュートン粘性モデルによる連続体解析
- 実測のレオロジー特性をシミュレーション条件に適用
- 実際の粘度計による解析値は実測値と一致



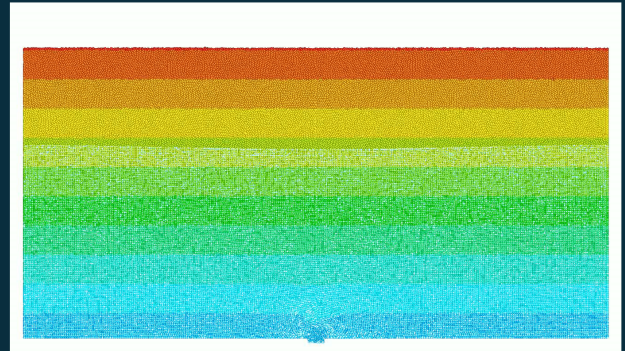
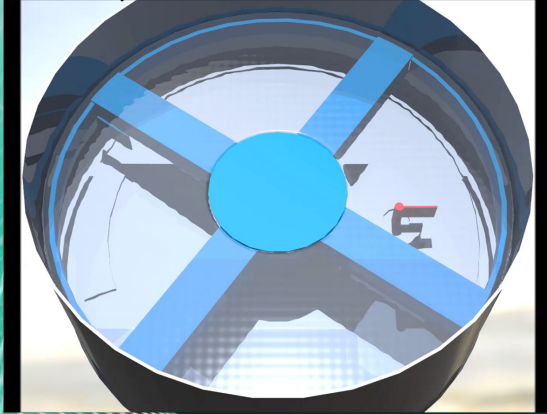
2022/11/11
14:00-16:30

59

地盤の流動解析



©大林組



2022/11/11
14:00-16:30

60

大規模粒子法ソフトウェア『DEPTH』

超並列計算機対応の粒子法シミュレーションソフト DEPTH-1.0

粒子法 (DEM・SPH)

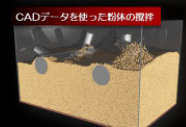
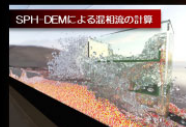
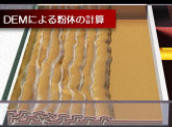
- ◆ 粒子間の相互作用力を考慮して多粒子群の運動を計算する
- ◆ 粉体工学・土木工学・化学工学・物理学などの分野で研究・実務用アプリケーションとして利用される

超並列計算

- ◆ 多数のCPUを使用することで大規模高速計算を実現する
- ◆ 実用的な粒子シミュレーションを可能にする

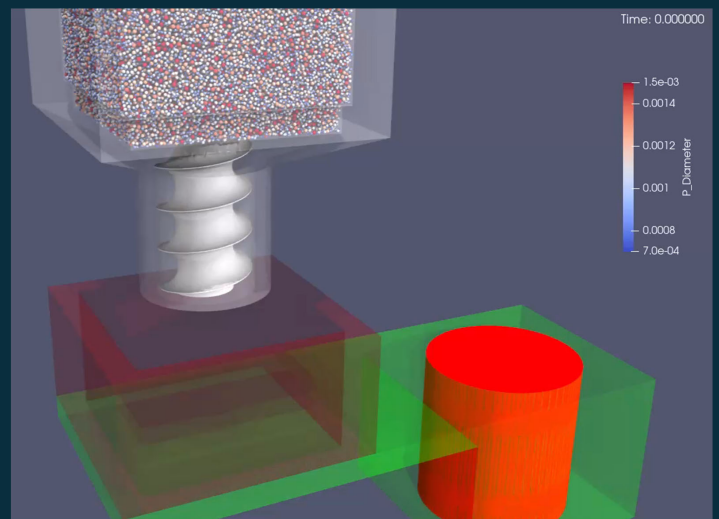
DEPTHの特徴

- ◆ 動的負荷分散手法によるハイブリッド並列を実装した粒子法の超並列高速演算ソフトウェア
- ◆ CADデータから複雑な形状の境界条件を指定できる
- ◆ 液体 (SPH) と粒状体 (DEM) の混相流計算が可能
- ◆ MicroAVSとParaViewによる可視化に対応



ソフトウェアのお問い合わせ窓口

〒100-8555 東京都千代田区千代田 1-10-10 数理科学・先端技術研究開発センター 開発部 古市・西浦
Tel: 045-778-5854 Fax: 045-778-5490
E-mail: m-furukic@jamstec.go.jp



—お問い合わせ先—

- JAMSTEC
<https://www.jamstec.go.jp/mat/j/members/daisuke/>
- アドバンスソフト株式会社
https://www.advancesoft.jp/product/advance_depth/

まとめ

- **粒子法シミュレーションソフトウェアの開発**
 - 数百億粒子が扱える世界最大規模のプログラム
 - 粒状体－流体－構造物の連成解析
 - 地震津波災害や豪雨災害など防災科学への応用
 - 土木や粉体プロセスなどの工学的応用
- **さらなる高度化・産業応用化に向けて**
 - 3次元動的領域分割
 - V&Vによる精度保証
 - 地盤工学会 <http://geotech.civil.yamaguchi-u.ac.jp/tc105/>
 - 計算工学会 <https://www.jsces.org/activity/research/saigai/>
 - デジタルツインの実現

アドバンスソフト からの情報提供

1. セミナー 今後の予定
2. 当社最新情報
3. シミュレーションサービスについて

1. アドバンスシミュレーション・セミナー 今後の予定

No.	開催日	講師の先生方	テーマ
第7回	11月25日(金)	東京大学大学院 工学系研究科 マテリアル工学専攻 教授 渡邊 聡 様	ナノ・AI
第8回	12月9日(金)	東北大学 流体科学研究所 航空機計算科学センター 教授 大林 茂 様	流体・データ同化
第9回	12月23日(金)	国立研究開発法人 海洋研究開発機構 付加価値情報創成部門 主任研究員 土井 威志 様 グループリーダー 松岡 大祐 様 主任研究員 宮腰 剛広 様	JAMSTECの 最先端地球科学

1.製品紹介セミナー 今後の予定

開催日	タイトル	講演概要
11月17日(木)	アドバンスソフトの半導体デバイス、電磁波解析のご紹介セミナー ～DX、グリーンイノベーションを加速する数値解析シミュレーションのご紹介～	半導体デバイス 3次元 TCAD システム【Advance/TCAD】電磁波解析ソフトウェア【Advance/ParallelWave】を中心に、半導体デバイス解析、電磁波解析、関連の数値解析シミュレーションサービスについてご紹介いたします。
11月30日(水)	OpenModelica 活用セミナー	オープンソースソフトウェアのモデリングツール「OpenModelica」を活用した、モデルベース開発(MBD)の導入について解説し、多様なモデルライブラリの活用や、OpenModelica と品質工学的手法による実用的なロバスト設計の事例の紹介など、1DCAE の実践に焦点を当てたセミナーを開催いたします。
12月 未定	FrontFlow/red セミナー (仮)	流体解析ソフトウェア Advance/FrontFlow/red の紹介セミナー

アドバンスソフト からの情報提供

1. セミナー 今後の予定
2. 当社最新情報
3. シミュレーションサービスについて

2. 当社最新情報

Advance/DEPTH のご案内

Advance/DEPTH は 国立研究開発法人 海洋研究開発機構 (JAMSTEC) により開発された超並列計算機対応の粒子法シミュレーションソフト DEPTH を大規模粒子法計算の活用促進を目的として製品化したシミュレーションソフトです。
粒子間の相互作用力を考慮して多粒子群の運動を効率良くシミュレーションすることができます。

【特徴】

- ◇ 離散要素法による粒子シミュレーションソフト
- ◇ 粉体工学、機械工学、建築工学、土木工学などの分野で実用的な粉体現象の解析が可能
- ◇ 最新の動的負荷分散手法により高効率で高速な多粒子群の計算を実現
- ◇ CAD データから複雑な境界条件 (CAD 要素) を自動で設定
- ◇ ParaView と MicroAVS による可視化に対応

【適用事例】

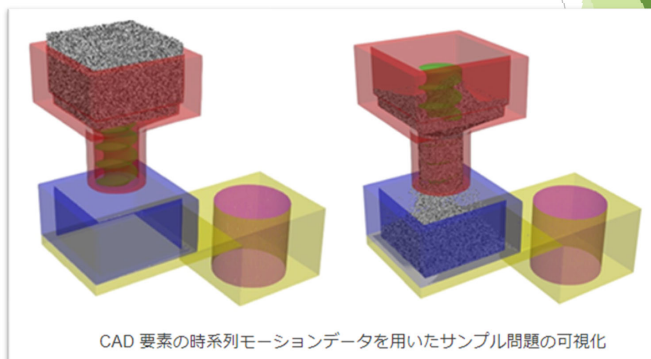
- ◇ 充填・攪拌・分級・粉碎・混合などのプロセス解析
- ◇ プロセス解析を通じた機器の最適化
- ◇ デジタルツインによる開発コストの削減

1ヶ月無償のトライアル版もございます。

— お問い合わせ先 —

□ アドバンスソフト株式会社

https://www.advancesoft.jp/product/advance_depth/



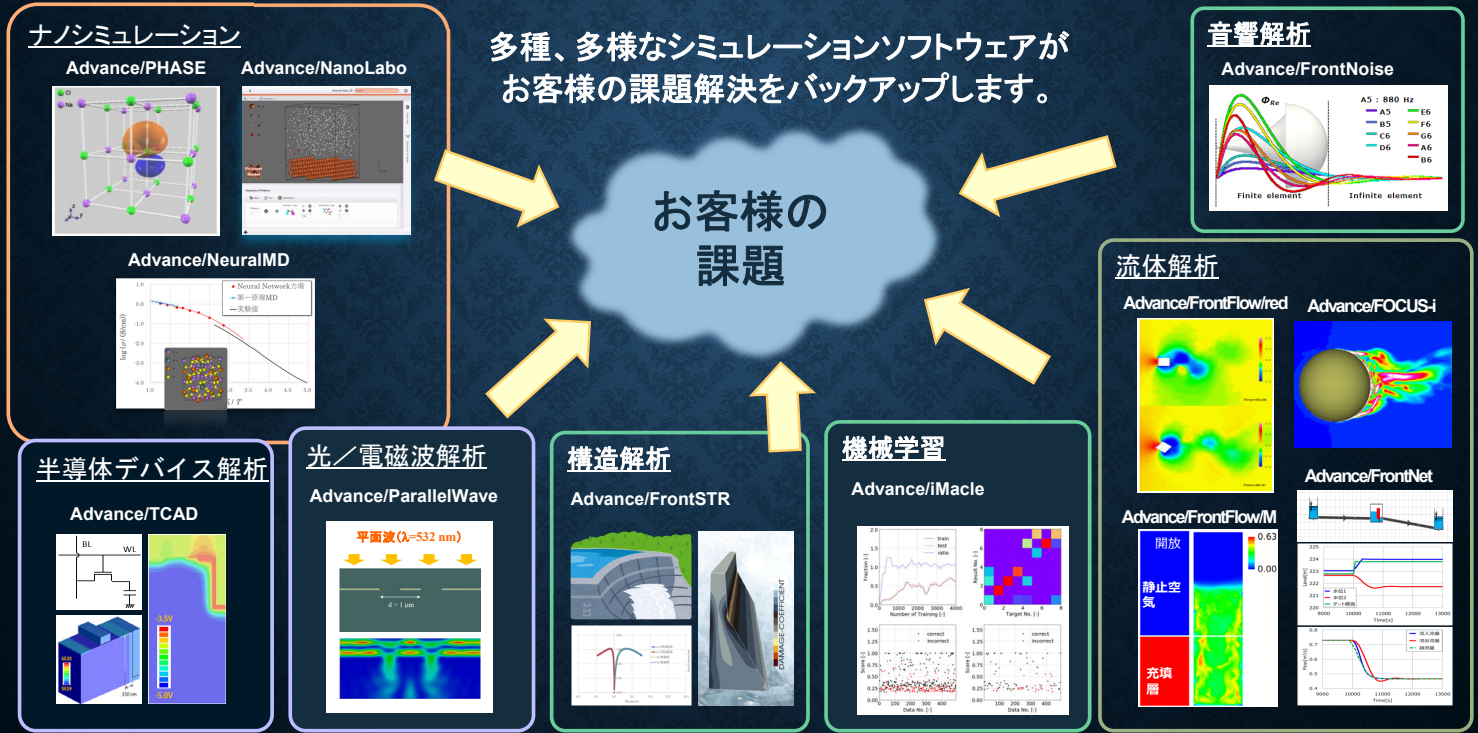
アドバンスソフト からの情報提供

1. セミナー 今後の予定

2. 当社最新情報

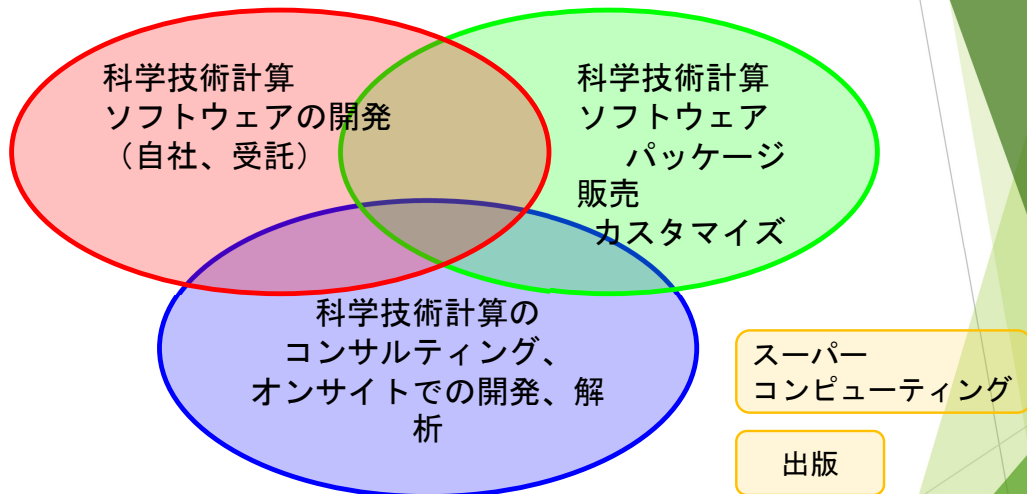
3. シミュレーションサービスについて

アドバンスソフトが開発・販売するソフトウェア



事業内容

アドバンスソフトがご提供するサービス



科学技術計算ソフトウェアの開発を基礎とした、科学技術計算に関する様々なソリューションをご提供します。

パッケージソフトウェアの解析事例

解析事例Webページをリニューアルしました。

アドバンスソフト 事例集

検索

<http://case.advancesoft.jp>

- ソフトウェア名からだけでなく、産業分野別、解析分野別の検索が可能となりました。
- 最新の事例を掲載しました。今後も逐次最新事例を紹介していきます。

産業分野別	解析分野別
自動車・運輸	流体
材料・化学	爆発・燃焼
産業機械	構造
航空宇宙	振動音響
エレクトロニクス	ナノ・バイオ
建設土木	プリポスト
原子力	半導体デバイス
エネルギー	光・電磁波
環境・防災	

facebook、YouTubeでも関連記事を掲載中

<http://www.facebook.com/advancesoft.jp>



<http://www.youtube.com/user/advancesoft>



人材募集について

- アドバンスソフト株式会社では、シミュレーションに興味のある技術者の方を、広く求めています。
 - 修士 / 博士やポスドクの方
 - 既卒 / 新卒(2022秋・2023春・2023秋・2024春) / 中途採用
- ご興味のある方は、ぜひ当社までお問合せください。
 - <http://www.advancesoft.jp/aboutus/recruit/>
 - TEL: 03-6826-3970
 - E-mail: recruit@advancesoft.jp

～閉会～

本日はお忙しい中、弊社オンラインセミナーへご参加頂き、誠にありがとうございました。





警告

このレポートに収録されている文章および内容については、ご自身のために役立つ用途に限定して無料配布しています。このレポートを、販売、オークション、その他の目的で利用するには、著作権者の許諾が必要になります。このレポートに含まれている内容を、その一部でも著作権者の許諾なしに、複製、改変、配布を行うことおよびインターネット上で提供する等により、一般へ送ることは法律によって固く禁止されています。