

FDPS を用いた大規模自重崩壊モデルの計算速度に関する研究

平田 紗椰

神戸大学大学院 工学研究科 修士課程学生

1. はじめに

斜面崩壊発生後に迅速に救出作業の意思決定を支援する目的で数値シミュレーションを行うためには、計算精度、計算規模、計算速度が必要である。

本研究では、野中(2020)の**SPH 法**を用いた土塊の自重崩壊シミュレーションに対し、大規模計算に備えて粒子間距離を小さくし粒子数を増やして大規模計算した結果の計算速度を検証する。大規模計算を行うためにスーパーコンピュータ Oakforest-PACS を用いた。

2. SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) 法を用いた弾塑性解析

(1) 土の支配方程式

連続体力学に基づく固体の各支配方程式と**SPH 法**で使用する離散式を記載する。上付き文字 I, J はそれぞれ中心粒子 I 、周辺粒子 J の物理量であることを表している。

質量保存則は、

$$\frac{D\rho}{Dt} = -\rho \frac{\partial v_i}{\partial x_i} \quad (1)$$

である。ここで ρ は密度、 v_i は速度ベクトルの i 方向成分である。

式(1)を離散化すると、密度の変化率は

$$\frac{D\rho}{Dt} = \sum_{J=1}^N m^J (v_i^J - v_i^I) \frac{\partial W^{IJ}}{\partial x_j^I} \quad (2)$$

で求められる。 m は質量、 W はカーネル関数である。

運動量保存則から導かれる運動方程式は、

$$\frac{Dv_i}{Dt} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} + g_i \quad (3)$$

となる。 σ_{ij} は応力テンソル、 g_i は外力ベクトルでここでは重力を表す。

式(3)を離散化すると、

$$a_i^I = \frac{\partial v_i^I}{\partial t} = \sum_{J=1}^N m^J \left(\frac{\sigma_{ij}^I}{(\rho^I)^2} + \frac{\sigma_{ij}^J}{(\rho^J)^2} \right) \frac{\partial W^{IJ}}{\partial x_j^I} + g_i \quad (4)$$

となる。ここで、 a_i^I は加速度ベクトルである。

運動方程式の応力項にさらに人工粘性項と人工応力項を加える。人工粘性項は**SPH 法**で問題となっている数値振動を抑えるためである。

(2) 弾塑性構成式

土が外力を受けて変形するときの応力－ひずみ関係について、本研究では弾塑性モデルを適用

する。降伏閾数を F とすると、降伏が起こったときの条件式は $F = 0$ となり塑性変形を、 $F < 0$ のときは弾性変形を起こすと考える。全ひずみは弾性ひずみと塑性ひずみに分解することができ、

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^E + \varepsilon_{ij}^P \quad (5)$$

がなりたつ。式(5)を増分で考えると、全ひずみ速度テンソル $\dot{\varepsilon}_{ij}$ は弾性ひずみ速度テンソル $\dot{\varepsilon}_{ij}^E$ と塑性ひずみ速度テンソル $\dot{\varepsilon}_{ij}^P$ の和となるので、変形すると、

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^E = \dot{\varepsilon}_{ij} - \dot{\varepsilon}_{ij}^P \quad (6)$$

となる。弾性域では、塑性ひずみ速度 $\dot{\varepsilon}_{ij}^P = 0$ であるため、全ひずみ速度がそのまま弾性ひずみ速度になる。

応力速度テンソル $\dot{\sigma}_{ij}$ は四階のテンソルである弾性マトリックス D_{ijkl}^E を用いると、一般化したフックの法則より、

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{ij} &= D_{ijkl}^E \dot{\varepsilon}_{kl}^E \\ &= \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)} \dot{\varepsilon}_{kk} \delta_{ij} + \frac{E}{1+\nu} \dot{\varepsilon}_{ij} \\ &= \left(K - \frac{2}{3} G \right) \dot{\varepsilon}_{kk} \delta_{ij} + 2G \dot{\varepsilon}_{ij} \\ &= 2G \dot{\varepsilon}_{ij} + K \dot{\varepsilon}_{kk} \delta_{ij} \end{aligned} \quad (7)$$

と求められる。偏差ひずみ速度は $\dot{\epsilon}_{ij} = \dot{\varepsilon}_{ij} - \frac{1}{3} \dot{\varepsilon}_{kk} \delta_{ij}$ である。

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i=j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases} \quad (8)$$

の性質を持つ。また、 ν はボアソン比、 E はヤング率を表し、これら 2 つの定数と剛性率 G 、体積弾性率 K の間には

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad \text{and} \quad K = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad (9)$$

という関係がある。 $\dot{\varepsilon}_{kk}$ は総和規約を適用する。

塑性域では、応力は変化しないので $F = 0$ となる。式(6)を式(7)に代入すると、

$$\begin{aligned} \dot{\sigma}_{ij} &= D_{ijkl}^E \dot{\varepsilon}_{kl}^E \\ &= D_{ijkl}^E (\dot{\varepsilon}_{kl} - \dot{\varepsilon}_{kl}^P) \end{aligned} \quad (10)$$

となる。ここで、塑性ひずみ速度テンソル $\dot{\varepsilon}_{ij}^P$ は

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^P = \lambda \frac{\partial g_p}{\partial \sigma_{ij}} \quad (11)$$

で求められる。 λ は塑性乗数 λ の変化率で非負のスカラー、 g_p は塑性ポテンシャル関数である。

(3) Drucker-Prager モデル

降伏基準 f の定義については様々なモデルが提案されている。本研究では Bui *et al.* (2008)を参考して、Drucker-Prager モデルを用いている。

Drucker-Prager モデルでは応力速度テンソル $\dot{\sigma}_{ij}$ を

$$\dot{\sigma}_{ij} = 2G\dot{e}_{ij} + K\dot{\varepsilon}_{kk}\delta_{ij} - \dot{\lambda} \left(9K \sin \psi \delta_{ij} + \frac{G}{\sqrt{J_2}} s_{ij} \right) \quad (12)$$

で求めている。式中の塑性乗数の変化率 $\dot{\lambda}$ はスカラーで、

$$\dot{\lambda} = \frac{3\alpha_\phi K \dot{\varepsilon}_{kk} + \frac{G}{\sqrt{J_2}} s_{ij} \dot{e}_{ij}}{27\alpha_\phi K \sin \psi + G} \quad (13)$$

である。

降伏関数 F は

$$F(I_1, J_2) = \sqrt{J_2} + \alpha_\phi I_1 - k_c \quad (14)$$

で表される。ここで、 I_1 と J_2 は応力の不变量というスカラー量で、それぞれコーチー応力テンソルの一次の不变量、偏差応力テンソルの2次の不变量といい、

$$I_1 = \sigma_{kk} = \sigma_{xx} + \sigma_{yy} + \sigma_{zz} \quad \text{and} \quad J_2 = \frac{1}{2} s_{ij} s_{ij} \quad (15)$$

で示される。 s_{ij} は偏差応力で、応力テンソルから平均応力テンソルを引いた、

$$s_{ij} = \sigma_{ij} - \frac{1}{dim} \sigma_{kk} \delta_{ij} \quad (16)$$

で求められる。 dim は次元数である。式(14)における α_ϕ と k_c は材料定数である粘着力と内部摩擦角から求められる定数で、3次元では、

$$\alpha_\phi = \frac{2 \sin \phi}{\sqrt{3}(3 - \sin \phi)} \quad \text{and} \quad k_c = \frac{6c \cos \phi}{\sqrt{3}(3 - \sin \phi)} \quad (17)$$

を用いる。また、非関連流れ則を用いるので、塑性ポテンシャル g は、

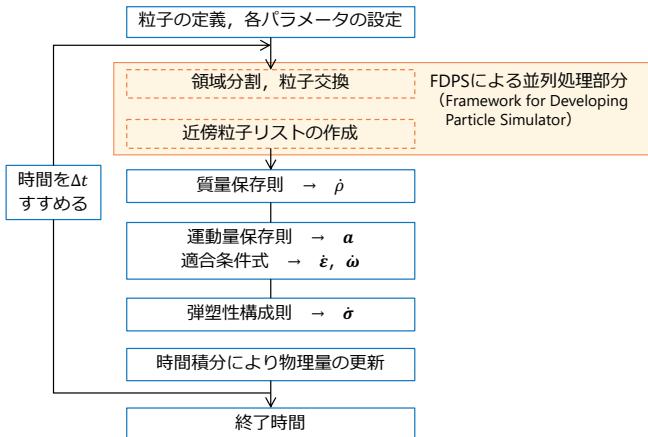
$$g = \sqrt{J_2} + 3I_1 \sin \psi \quad (18)$$

で表し、 ψ はダイレタンシー角で、本研究では $\psi = 0$ である。非関連流れ則において、ダイレタンシー角が 0° の条件は材料が塑性非圧縮であることを表す。

(4) 数値計算の流れ

数値計算を実施するために、全粒子の初期配置や各パラメータの設定を行う。次に、並列計算を行う際に各プロセスが計算を担当する領域を決めて必要な粒子情報を通信分配する領域分割、影響半径内にある粒子を探索し相互作用計算を行う粒子のリストを作成する近傍粒子リストの作成は、いずれも **FDPS** が自動で並列処理を行う。**FDPS** については牧野(2017), 野村ら(2020), 行方ら(2020)などを参考にされたい。第1図にシミュレーションのフローチャートを示す。

FDPS に導入する物理過程では、影響半径内の粒子間で質量保存則より密度の変化率、運動方程式より加速度ベクトル、適合条件式よりひずみ速度テンソルの計算の順に相互作用計算を行う。さらに、得られたひずみ速度テンソルを用いて弾塑性構成式から応力速度テンソルを求める。各時間ステップの最後に、求めた各物理量の増分に対して時間積分を行うことで、密度、速度ベクトル、位置ベクトル、ひずみテンソル、応力テンソルの更新を行う。これらを時間ステップが終了条件に達するまで繰り返し計算を行う。



第1図： 数値計算のフロー

3. 土の自重崩壊シミュレーションのスケーリング検証

プロセス数に対する粒子数を一定にし、粒子数の増加と計算時間の関係を検証した。

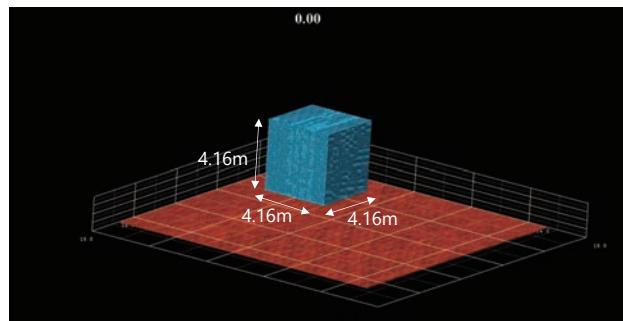
シミュレーションパラメータに第1表の値を用いて、プロセスあたりの粒子数を一定にし、粒子数の増加と計算時間の関係を検証した。32 プロセス、327,232 粒子から 2,048 プロセス、11,984,896 粒子のシミュレーション結果を第2表に示し、その初期状態を第2図に、1秒後の状態を第3図に示す。第2図と第3図で、青色で示されている粒子は移動できる土粒子、茶色で示されている粒子は移動できない壁粒子である。

第1表： シミュレーションパラメータ

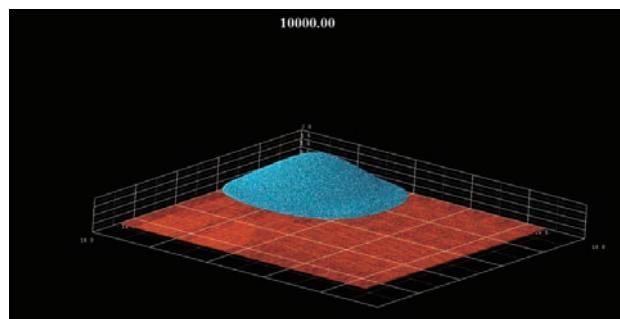
初期粒子間距離 Δd [m]	0.04
時間刻み Δt [s]	1.0×10^{-4}
ステップ数	10,000
密度 ρ [kgm ⁻³]	1850.0
ヤング率 E [kPa]	1800.0
ボアソン比 ν	0.3
粘着力 c [kPa]	0
内部摩擦角 ϕ [°]	25.0
ダイレタンシー角 ψ [°]	0.0

第2表： 粒子数と計算時間

プロセス数	32	256	2,048
土粒子数	140,608	1,124,864	8,998,912
土粒子数/プロセス数	4,394	4,394	4,394
壁粒子数	186,624	746,496	2,985,984
全粒子数	327,232	1,871,360	11,984,896
土粒子数/全粒子数	0.43	0.60	0.75
計算時間(sec)	6,689	9,806	29,742



第2図： 初期状態



第3図： 10,000 ステップ後の変形状態

本問題は Weak scaling であるため、計算時間が増加しないことが理想である。1 ノード 32 プロセスと比較して、8 ノード 256 プロセスでの計算時間は 1.6 倍、64 ノード 2,048 プロセスでの計算時間は 4.5 倍になった。計算時間が増加した要因としては、プロセスあたりの土粒子数同じにして計算したので、プロセス数が増えるにつれ全粒子に対する土粒子の割合が増加している。そのため、移動している土粒子で領域間の粒子交換や近傍粒子リストの作成の計算時間が長くなつたと考えた。

4.まとめ

解像度を上げるために粒子間距離を小さくした大規模シミュレーションをスーパーコンピュータ Oakforest-PACS によって実行した。64 ノード 2048 プロセスまでの並列計算を行い、Weak Scaling を計測したところプロセス数を 8 倍に増加したときに計算時間が 1.6 倍、プロセス数を

64 倍に増加したときに計算時間 4.5 倍となった。Scaling の際に動く粒子数をそろえて scaling ことにより、動かない粒子の割合が減ったことが計算時間の増加の原因と考えた。

謝辞：本研究を実施するための計算機資源として東京大学情報基盤センター、2020 年度若手・女性利用(女性研究者)枠を活用しました。また、JSPS 科研費 21H01436 の助成を受けました。ここに記して謝意を表します。

参 考 文 献

- Bui, Ha H., Fukagawa, R., Sako, K. and Ohno, S., "Lagrangian meshfree particles method (SPH) for large deformation and failure flows of geomaterial using elastic-plastic soil constitutive model", *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics*, Vol. 32, pp. 1537-1570, 2008
- 行方大輔, 坂本亮, 中村孝史, 木村耕行, 似鳥啓吾, 野村昂太郎, 坪内美幸, 牧野淳一郎『粒子法シミュレーションコード開発のためのフレームワーク(FDPS)の開発』, 情報処理学会研究報告, Vol.2018-HPC-167, No. 22, 2018
- 野中沙樹『SPH シミュレーションによる斜面崩壊の定量的評価に関する研究』, 63p., 神戸大学大学院工学研究科修士論文, 2020
- 野村昂太郎, 沼田龍介, 八柳祐一, 行方大輔, 岩澤全規, 牧野淳一郎『超並列粒子法シミュレーションプログラム自動生成ツールの紹介』, *Journal of Plasma Fusion Research*, Vol. 96, No. 2, pp. 57-63, 2020
- 牧野淳一郎『連載「FDPS 入門(1)」』, 分子シミュレーション研究会会誌 “アンサンブル”, Vol. 19, No. 2, 2017