

令和 3 年 6 月 18 日現在

機関番号：32601  
研究種目：若手研究(A)  
研究期間：2017～2020  
課題番号：17H04682  
研究課題名（和文）ハイブリッドな粉粒体シミュレーション手法の開発

研究課題名（英文）Hybrid simulation for granular materials

研究代表者

楽 詠コウ (Yue, Yonghao)

青山学院大学・理工学部・准教授

研究者番号：30612923

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 15,000,000円

研究成果の概要（和文）：本研究では、個別要素法と連続体力学方式のいいとこ取りをしたアルゴリズムを開発し、巨視的・微視的スケールの双方の物理過程を考慮できる粉体のための連成シミュレーション手法を開発した。粉体粒子が有限の大きさであることに起因する（細かい開口部で詰まることや内部で有限の厚みを持つ剪断バンドの発生などの）サイズ効果が生じる領域や自由表面にのみ個別要素を用い、均質化可能な領域に連続体要素を用いることで、計算コストの軽減を図りつつ、連続体要素のみでは表現できない細い開口部での詰まりや、粒径に依存する剪断変形の局在化などの効果を扱えるようになった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本手法は、粉体流が動的にその外形やトポロジーを変える例に適用できる、世界初の個別要素法と連続体モデリングを連成したシミュレーション技法であり、微視的・巨視的スケールの双方の現象が扱える。粉体現象は、気象変動における巨大氷床の不安定性や、地滑りや火砕流における到達距離、地震における地質の粉砕変形などのように、温暖化や自然災害の重要問題と関連している。また、石炭などの固形燃料輸送・油田における破片除去・プロバント流などのエネルギー産業の問題、原料や食料などの貯蔵設備設計、柔軟なロボットハンドの開発、製造加工業、仮想現実などとも密接に関連する。本研究はこれらの広範囲な対象に応用できると考えられる。

研究成果の概要（英文）：We have developed hybrid simulation techniques for granular materials that can account for both macroscopic and microscopic physical processes, by coupling discrete element method and continuum modeling. Our methods use discrete elements only for free surfaces and regions where the so-called size effects (due to the grains having finite sizes) are significant, and use continuum elements for regions that are homogenizable. Using our methods, we can handle size effects that could not be handled using only continuum elements, e.g., grains can jam at a small orifice and may form shear bands with a finite thickness, while much reducing the computation cost.

研究分野：コンピュータグラフィックス

キーワード：粉体現象 個別要素 連続体要素 連成シミュレーション 均質化 エンリッチメント オラクル

### 1. 研究開始当初の背景

粉体现象は、地質学・農工業・映像産業や仮想現実に至るまで、広範な分野で見られる現象である。地質学では、地滑りの到達距離予測や、断層が複雑に分布する領域での地震災害予想など、しばしば重要な問題と関連している。農工業でも、穀物・錠剤・粉・建材の原料や石炭燃料などのように、粒状形態で存在する様々な物質があり、壁が座屈しない貯蔵設備の設計や騒音の低減、ノズルのつまり回避など、粉体流の予測を必要とする場面が多くある。映像産業や仮想現実分野では、究極的な現実感のため、視覚的に説得力のある自然現象のシミュレーションが重要である。こうした様々な場面において、表面の高精細な表現を実現しつつ、効率的に粉体効果を再現するアルゴリズムが求められている。

粉体は負荷条件に応じて、固体・流体・気体のような状態を取り得、剪断変形の局在化・詰まりといった特徴的な振る舞いが観測され、そのモデリングは挑戦的である。工学分野やグラフィクス分野のこれまでの研究では、主として個別の場合に焦点を当てたモデリングがなされてきた。例えば、衝突などの挙動には個々の(剛体)粒子を個別要素によって表現するアプローチが取られ、密な土壌変形には連続体力学のアプローチが取られてきた。個別要素に基づくアプローチでは、系の規模が大きい場合の計算時間が現実的ではなく、連続体力学に基づくアプローチでは粒子集団を連続体近似することで、各連続体要素で大規模な粒子集団を表現できる反面、粒子サイズが有限である効果(サイズ効果)に起因する現象、例えば、自由表面のように流れが高速で衝突が頻繁に起こる領域や、細い溝や開口部などで生じるジャミング、あるいは剪断バンドを扱うことができない。このように、従来の粉体现象のモデリングでは、基本的に、粗い解像度の解を求めるために連続体力学的方式をとるか、もしくは、小さい部分領域の問題を解くために離散的な粒子を用いるか、のいずれかであり、実行可能な数値解を得るには実質的に、巨視的もしくは微視的スケールのいずれかの物理過程や性質を省く必要があった。

### 2. 研究の目的

本研究では、個別要素法と連続体力学方式のいいとこ取りをしたアルゴリズムを開発し、巨視的・微視的スケールの双方の物理過程を考慮できる手法を開発することを目的とした。サイズ効果が生じる領域や自由表面にのみ個別要素を用い、均質化可能な領域に連続体要素を用いることで、計算コストの軽減を図りつつ、連続体要素のみでは表現できない細い開口部での詰まりや、粒径に依存する剪断変形の局在化などの効果を扱えることを目指した。

### 3. 研究の方法

図1のように、解析領域をアダプティブに分割し、精度的に安全と思われる領域では連続体要素を用い、それ以外の部分では個別要素を用いて個々の粒子を明示的にモデリングする。二つの領域間には、個別要素と連続体要素が共存する“連成領域”があり、二種類の要素間の状態に整合性がとれるように制約を課すことで、個別要素と連続体要素の連成を図る。具体的には本研究の枠組みを構成する下記項目の要素技術を開発した。

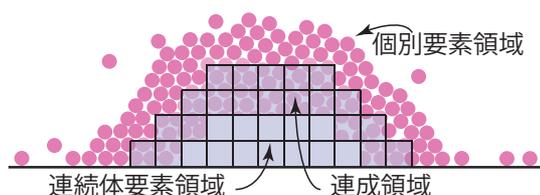


図1: 連成粉粒体シミュレーション法の概要.

#### 【項目1】個別要素と連続体要素の連成シミュレーションの枠組み

一つの力学系を、二つの(抽象的な)系の連成により記述する方法として、参照フレーム  $\mathbf{x} \in \Omega$  における質量密度を  $\rho(\mathbf{x})$  とし、この密度を時間と空間に依存する重み  $w(\mathbf{x}, t) \in [0, 1]$  によって  $\rho(\mathbf{x}) = w(\mathbf{x}, t)\rho(\mathbf{x}) + (1 - w(\mathbf{x}, t))\rho(\mathbf{x})$  と分割することを考える。二つの系の一般化座標系を  $(\mathbf{q}_1, \mathbf{v}_1)$  と  $(\mathbf{q}_2, \mathbf{v}_2)$  とし、初期状態で位置が一致  $(\mathbf{q}_1(\mathbf{x}, t_0) = \mathbf{q}_2(\mathbf{x}, t_0))$  すれば、速度制約  $\mathbf{c}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{v}_1(\mathbf{x}, t) - \mathbf{v}_2(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0}$  を課すことで、元の一つの系の力学的挙動を復元できる(本研究では、個別要素と連続体要素の系がこれら二つの系に対応し、 $0 < w < 1$  の領域が連成領域に対応する)。次に、ハミルトンの変分原理(散逸系にはラグランジュ・ダランベールの原理を用いる

が結果は同じ)を用いて、連成系の支配方程式を導出する。力学およびポテンシャルエネルギー  $(T, U)$  を

$$T = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho w \mathbf{v}_1^T \mathbf{v}_1 dV + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \rho(1-w) \mathbf{v}_2^T \mathbf{v}_2 dV, \quad U = \int_{\Omega} \rho w e[\mathbf{q}_1] dV + \int_{\Omega} \rho(1-w) e[\mathbf{q}_2] dV$$

とし、 $e$  をポテンシャルエネルギー密度とする。また、 $(\mathbf{x}, t)$  を省略する。さらに、二つの系の連成制約を扱うため、 $\boldsymbol{\lambda}(\mathbf{x}, t)$  をラグランジュの未定乗数場として  $C = \int_{\Omega} \boldsymbol{\lambda}^T (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) dV$  を導

入する。ラグランジュアン  $L = T - U + C$  から作用汎関数  $\int_t L dt$  を構成し変分法を用いると、制約  $\mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2$  と共に、以下のオイラー・ラグランジュ方程式を得る：

$$\underbrace{\int_{\Omega} w \rho \mathbf{a}_1 dV = - \int_{\Omega} w \rho \frac{\partial e}{\partial \mathbf{q}_1} dV - \int_{\Omega} \boldsymbol{\lambda} dV}_{\text{制約なしの運動方程式}} \quad \underbrace{\int_{\Omega} \boldsymbol{\lambda} dV}_{\text{拘束力}}, \quad \underbrace{\int_{\Omega} (1-w) \rho \mathbf{a}_2 dV = - \int_{\Omega} (1-w) \rho \frac{\partial e}{\partial \mathbf{q}_2} dV + \int_{\Omega} \boldsymbol{\lambda} dV}_{\text{制約なしの運動方程式}} \quad \underbrace{\int_{\Omega} \boldsymbol{\lambda} dV}_{\text{拘束力}}$$

上記の方程式の特徴として、まず、拘束力は逆向きで大きさが同じであるため、二つの系の方程式を足し合わせると、元々の一つの系の運動方程式を得る。これらの方程式における重み  $w$  もしくは  $(1-w)$  は、もう一方の系の影響度に対応しており、重み  $0$  の場合はスレーブとして振る舞う。また、拘束力を除いた部分は、それぞれの系における制約なしの運動方程式に対応する。オペレータ分割の考え方を用いると、まず、各々の系の支配方程式によって独立に速度や位置を予測し、次に拘束力によって速度と位置を補正する、という計算アプローチを得る。こうして抽象的に導出された枠組みに対し、一つの系の(制約なし)運動方程式を、摩擦力を含む個別要素法の支配方程式に置き換え、もう一方を Drucker-Prager 降伏条件を組み込んだ弾塑性体モデルを記述する連続体力学の支配方程式に置き換える。この場合、速度制約は、個別要素の速度が連続体要素から補間された同一位置の速度と一致するという制約として導入し、

$$\text{連続体要素: } \frac{d}{dt} (w_p M_p (\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_p^*)) = - \sum_{k \in \Omega_R} \boldsymbol{\Gamma}_{pk} \boldsymbol{\lambda}_k, \quad \text{個別要素: } \frac{d}{dt} ((1-w_k) M_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_k^*)) = \boldsymbol{\lambda}_k$$

$$\text{制約: } \forall k \in \Omega_R: \sum_p \boldsymbol{\Gamma}_{pk} \mathbf{v}_p = \mathbf{v}_k$$

という連成のための速度補正方程式を得る。ここで、上付き添字  $*$  は制約なしの運動方程式からの予測を表し、 $\boldsymbol{\Gamma}$  は、連続体要素の基底関数を用いて補間を行う際の重みである。

なお、個別要素の系の定式化には、剛体要素同士に重なりがない、あるいは貫通がない、とする非貫通制約がある。この非貫通制約を実現する方法として、ハードな制約を導入する方法と、ソフトな制約 (バネとダッシュポットを組み合わせたペナルティ法) を用いる方法とが考えられるが、前者は連成系での連成制約においてドリフトを生ずるため、後者のペナルティ法を用いた。連続体力学の数値計算には、物質点法 (MPM) を用いた。また、連成制約を上記のように各個別要素において要請すると、速度補正時に連立方程式を解く必要があり、計算コストが高いため、代わりに連成のための補助的な一様格子を用い、一様格子の各ノードで速度一致の制約を課した。こうすることで、連立方程式を解く必要がなくなる。重み関数としては、連成領域で  $w = 0.5$  とする関数を用いた。これらの点については、本研究の代表成果の一つである Yue et al. 2018 に詳細な記述がある。

## 【項目 2】個別要素の情報から連続体要素の情報を推定する均質化

連続体要素の情報として、質量、速度、応力(もしくは内部の変形状態)を得る必要がある。これらのうち、質量と速度は、連続体要素内に含まれる個別要素の質量の総和、及び速度の平均を用いる。応力については、Christoffersen の式 (Christoffersen et al. 1981) を用いる。応力を求めたのち、連続体モデルの構成則に従って、内部変形状態を求める (Yue et al. 2018)。

## 【項目 3】連続体要素の情報から個別要素の情報を推定するエンリッチメント

エンリッチメントでは、連続体要素の領域に個別要素を生成することが課題である。具体的にはポアソンディスクサンプリングを活用する方法 (Yue et al. 2015) で個別要素を重なりがないように追加し、連続体要素から推定した速度場をサンプリングすることで個別要素の速度を決

定する．質量は事前に設定した個別要素の密度情報を利用して決定する．この方法 (Yue et al. 2018) では、個別要素間の接触数については考慮していないため、個別要素を生成した直後には一時的に個別要素同士に隙間が生じ、接触力を伝達できないため応力が低下するが、この現象は短時間で解消する．この一次的な応力低下を軽減する方法として、個別要素を新たに配置する領域だけ、周囲の連続体要素の変形状態に応じて個別要素の運動(配置)をシミュレーションして定める“応力トレーニング”の方法も開発した (Chen et al. 2021)．

#### 【項目 4】(流れとともに移動しうる)連成領域の場所を定めるオラクル

粉体は流れに応じて、全体としての形状が大きく変化する．個別要素・連続体要素・連成領域の配置を、この変化に応じて動的に決定することが重要である．領域の配置を動的に決定するオラクルとして以下の二種類を開発した．まず、コンピュータグラフィックスを主たる対象として、表面からの距離に基づく方法 (Yue et al. 2018) を開発した．この方法では、一様格子によって粉体領域 (図 2 (A)) の充填率を求め、充填率が閾値以上の十分に密な部分をまず抽出する (B)．次に符号付き距離によって十分に密な部分を表現し (C)，その表面から一定距離だけ内部に進んだ領域を連成領域の中心とみなし (D)，そこから一定の厚み以内にある領域を連成領域とする (E)．連成領域のさらに内側が連続体領域であり、連成領域の外側が個別要素領域である．連続体領域内に存在する個別要素は削除され (F)，連成領域と連続体領域には連続体要素が配置される (G)．このオラクルを用いると、物体との接触が起こる領域や、外から視認できる領域に個別要素を用い、それ以外の部分の計算を連続体要素により省力化できる．もう一つのオラクルは、断層などのように、内部における剪断変形の局在化に対処するためのもので、歪速度のラプラシアンを正規化した指標 (Chen et al. 2021) によって剪断変形の局在化領域を検出する．連続体要素のみを用いて剪断変形の局在化をシミュレーションする場合、一般には生じる剪断バンドの厚みが要素の解像度に依存する問題が起こるが、連成シミュレーションでは剪断バンドは個別要素によって扱われ、このような問題は生じない．

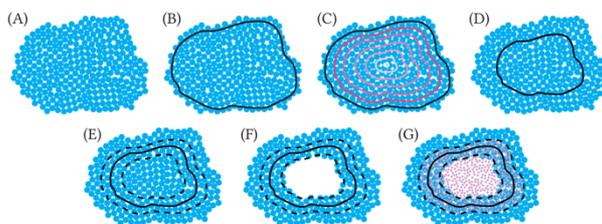
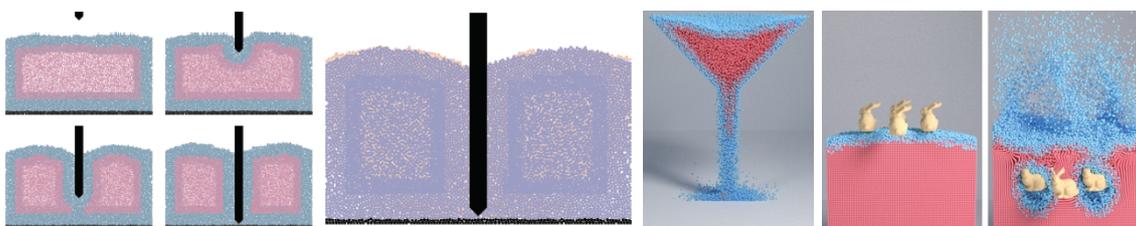


図 2 : オラクルの概要.

#### 4. 研究成果

本研究の代表成果 (Yue et al. 2018, Chen et al. 2021) を紹介する．図 3 (A1) に示すように、針によって粉体領域が二つに分かれてトポロジーが変化する場合でも、距離ベースのオラクル (Yue et al. 2018) を使うことによって、物体との接触面や自由表面に個別要素が自動的に動的に配置される．個別要素のみを用いた結果との比較 (A2) では、外形がほぼ一致することが確認できた．また、柱崩壊(column collapse)流を用いた実験では、初期状態の縦横比を変えた場合に得られる到達距離の変化が、実物に対する実験結果 (Lube+ 2005) の傾向 (縦横比が小さいうちは、到達距離は縦横比に従って線形に変化し、縦横比が大きい領域では、到達距離は指数則に従うこと) と一致することがわかった．図 3 (B) には、サイロ流のシミュレーションの様子、また、(C) にはバニードリルのシミュレーションの様子を示す．



(A1) 針入度計の例. (A2) 個別要素法との比較. (B) サイロ流. (C) バニードリル.

図 3 : Yue et al. 2018 の結果の抜粋. (A1), (B), (C) において、青(緑)色粒子は個別要素を表し、赤色粒子は連続体要素(物質点法の粒子)を表す. (A2) では、連成シミュレーションの個別要素と連続体要素を紫色で表しており、個別要素法のみによるシミュレーションでの個別要素を黄色で表している.

歪速度のラプラスシアンを利用して剪断変形の局在化に対応したシミュレーション (Chen et al. 2021) の結果を図 4, 5, 6 に示す.

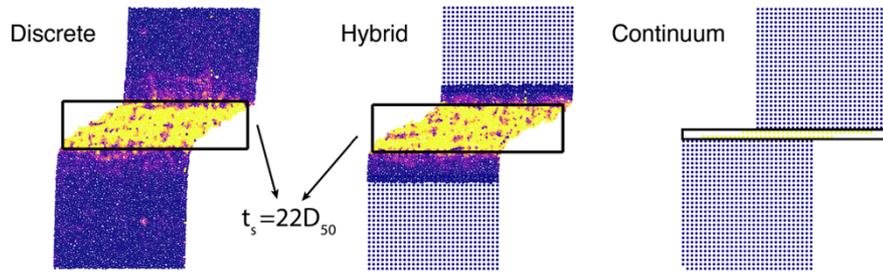


図 4 : シンプルシアー条件下でのシミュレーション. 左から順に個別要素法, 連成手法, 連続体モデリングの結果. 色は剪断歪の度合いを表す.

それぞれ, シンプルシアー (左右を周期境界にし, 床を固定, 天井を真横にスライド), 三軸剪断試験 (側面から一定の圧力を印加しつつ, 床を固定, 天井を横に動かしつつ床に近づける), プレート押し込み試験 (四角いプレートを粉体に押し付ける) のシミュレーション結果を表す. 連続体要素のみのシミュレーション

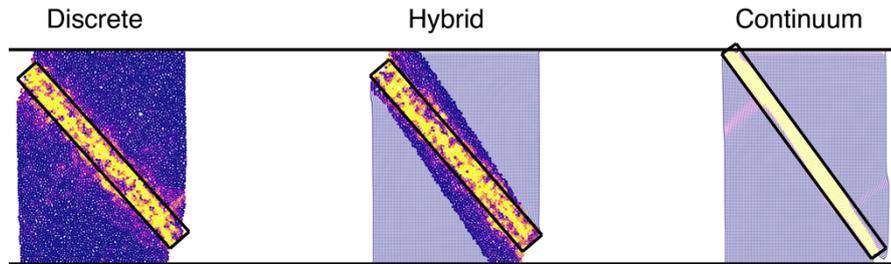


図 5 : 三軸剪断試験のシミュレーション.

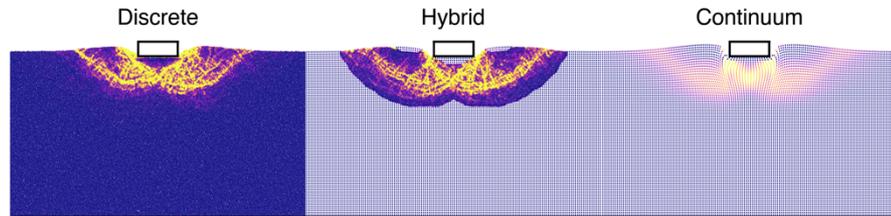


図 6 : プレート押し込み試験のシミュレーション.

では, 解像度によって剪断バンドの厚みや向きなどが変化してしまうが, 連成シミュレーションでは, 個別要素法と同等の結果を得ることができる.

また, 個別要素法に対する高速化比に関する理論解析 (Yue et al. 2018, Chen et al. 2021) によると, 本手法は系の要素数が多いほどその性能を発揮し, 高速化比を要素数の関数とみた場合, 高速化比には上限がないことがわかっている.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件/うち国際共著 2件/うちオープンアクセス 2件）

1. 著者名 Yonghao Yue, Breannan Smith, Peter Yichen Chen, Maytee Chantharayukhonthorn, Ken Kamrin, Eitan Grinspun	4. 巻 37(6)
2. 論文標題 Hybrid grains: adaptive coupling of discrete and continuum simulations of granular media	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 ACM Transactions on Graphics	6. 最初と最後の頁 283:1-19
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1145/3272127.3275095	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

1. 著者名 Peter Yichen Chen, Maytee Chantharayukhonthorn, Yonghao Yue, Eitan Grinspun, Ken Kamrin	4. 巻 153
2. 論文標題 Hybrid discrete-continuum modeling of shear localization in granular media	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Mechanics and Physics of Solids	6. 最初と最後の頁 104404
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.jmps.2021.104404	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 該当する

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 0件/うち国際学会 1件）

1. 発表者名 Peter Yichen Chen, Maytee Chantharayukhonthorn, Yonghao Yue, Ken Kamrin, Eitan Grinspun
2. 発表標題 Simulating Shear Localization Using a Hybrid Discrete-Continuum Approach
3. 学会等名 Engineering Mechanics Institute Conference 2019
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Peter Yichen Chen, Maytee Chantharayukhonthorn, Yonghao Yue, Ken Kamrin, Eitan Grinspun
2. 発表標題 Simulating Granular Shear Localization Using a Hybrid Discrete-Continuum Approach
3. 学会等名 The 10th New England Workshop on the Mechanics of Materials and Structures
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 楽詠コウ, Breannan Smith, Peter Yichen Chen, Maytee Chantharayukhonthorn, Ken Kamrin, Eitan Grinspun
2. 発表標題 ハイブリッドな粉粒体シミュレーション手法
3. 学会等名 日本物理学会 2018年秋季大会 領域11
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 楽詠コウ, Breannan Smith, Peter Yichen Chen, Maytee Chantharayukhonthorn, Ken Kamrin, Eitan Grinspun
2. 発表標題 ハイブリッドな粉粒体シミュレーション手法の開発
3. 学会等名 情報処理学会 コンピュータグラフィックスとビジュアル情報学研究会 第172回研究発表会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Maytee Chantharayukhonthorn, Breannan Smith, Yonghao Yue, Peter Yichen Chen, Ken Kamrin, Eitan Grinspun
2. 発表標題 A Hybrid Material Point and Discrete Element Method for Granular Media Modeling
3. 学会等名 American Physical Society March Meeting 2018 (B57.00007) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Peter Yichen Chen, Breannan Smith, Yonghao Yue, Eitan Grinspun, Maytee Chantharayukhonthorn, Ken Kamrin
2. 発表標題 Simulating Funnel Discharge of Granular Materials Using a Hybrid MPM-DEM Approach
3. 学会等名 New Mech 2017 at MIT
4. 発表年 2017年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

Hybrid Grains  
<http://www.cg.it.aoyama.ac.jp/yonghao/siga18/abstsigma18.html>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	Grinspun Eitan (Grinspun Eitan)	トロント大学・Professor	
研究協力者	Kamrin Ken (Kamrin Ken)	MIT・Associate Professor	
研究協力者	Chen Peter Yichen (Chen Peter Yichen)	コロンビア大学	
研究協力者	Chantharayukhonthorn Maytee (Chantharayukhonthorn Maytee)	MIT	
研究協力者	Smith Breannan (Smith Breannan)	コロンビア大学	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
カナダ	トロント大学			
米国	コロンビア大学	MIT		