

ハイブリッドな粉粒体シミュレーション手法の開発

楽 詠瀨^{*,1,2} Breannan Smith^{*,2} Peter Yichen Chen^{*,2} Maytee Chantharayukhonthorn^{*,3}
Ken Kamrin^{†,3} Eitan Grinspun^{†,2}

概要: 本稿では、個別要素と連続体要素のいいとこどりをした、ハイブリッドな粉粒体のシミュレーション手法を提案する。個々の粒子をモデリングする個別要素によるアプローチは、モデルの一般性や得られる結果の詳細さにおいて連続体モデリングよりも優れているが、大スケール系における計算コストが高いという弱点がある。一方で、粒子集団を連続体としてモデリングするアプローチは、大きなスケールの現象を扱えるが、表現できる力学的特性や詳細さが限られるという弱点がある(例えば、細い開口部で詰まる現象を再現できない)。そこで、提案法では、個別要素と連続体要素を組み合わせた連成シミュレーション手法を提案する。提案法では、シミュレーション領域を、個別要素領域、連続体要素領域、およびそれらが重なり合う連成領域に分割し、連成領域では質量場を個別要素側と連続体要素側に分割し、速度が一致するように、ラグランジュの未定乗数による拘束を課す。また、充填率や距離ベースのオラクルを用いて連成領域を動的に決定し、均質化やエンリッチメントによって個別要素と連続体要素間の切り替えを行う。

Developing a Hybrid Method for Simulating Granular Media

YONGHAO YUE^{*,1,2} BRENNAN SMITH^{*,2} PETER YICHEN CHEN^{*,2}
MAYTEE CHANTHARAYUKHONTHORN^{*,3} KEN KAMRIN^{†,3} EITAN GRINSPUN^{†,2}

Abstract: We propose a hybrid method for simulating granular materials that exploits the strengths of discrete and continuum treatments. Discrete element approaches model each grain and the contacts between them individually, and are superior to the continuum counterpart, in terms of the model generality and the level of details of the results, but they typically have difficulties in handling large scale phenomena. In contrast, continuum element approaches model a collection of grains as a single continuum element, and are able to handle large scale phenomena, but are limited in the level of details of the results and in the mechanical properties they can reproduce (e.g., typical continuum treatment fails to capture the clogging of the medium around a small opening region). We propose a novel hybrid technique that combines both discrete and continuum elements. We split the simulation domain into discrete regions, continuum regions, and reconciliation zones where discrete and continuum elements coexist. In the reconciliation zone, we split the mass and make use of Lagrange multipliers to couple the discrete and continuum elements such that their velocities agree with each other. We determine the transition zones dynamically based on a distance based oracle, and make use of homogenization and enrichment operations to switch between discrete and continuum elements.

1. はじめに

¹ 東京大学 (The University of Tokyo)

² Columbia University

³ Massachusetts Institute of Technology

*: 共同第一著者 (著者らの貢献は等しい), †: 共同責任著者.
本稿は国際会議に採択された著者らの研究 [1] を研究会向けに紹介するものであり、一部内容が省略されている。画像はすべて文献 [1] からのリプリントに基づく。This manuscript is for introducing our work [1] to the Japanese graphics community.

粉粒体现象は、地質学・農工業・映像制作 [2] やロボティクス [3] 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、極氷床の氷底構造と温暖化における不安定性の推定など、しばしば重要な問題と関連している。産業界でも、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、

The images are reprinted from the article [1].

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、粉粒体流の予測を必要とする場面が多くあり、粉粒体は水に次いで産業界でもっとも普遍的に利用される材料である [4]。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。土砂崩れや雪崩・火砕流などの自然災害の表現や擬似体験から、砂丘の流れの表現、塩・胡椒を扱う食事シーンに至る様々な場面において、表面の高精細な表現を実現しつつ、効率的に粉粒体効果を再現するアルゴリズムが求められている。

粉粒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・ジャミング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。粒子スケールでは、連続体力学の仮定は成り立たず、粒子集団スケールでは、個々の粒子をモデル化すると計算時間が非現実的になりうる。

工学分野やグラフィクス分野のこれまでの研究では、主として個別の現象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、密な媒質の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にはペナルティカベースの方法 (例えば [5], [6], [7]) や接触力学ベースの方法 (例えば [8], [9], [10]) があり、粒子同士が密に充填される現象、細い開口部で詰まる現象、転がりや弾性衝突などの様々な粉粒体の挙動を正確に捉えることができ、連続体モデルの精度を評価するための基準にも用いられる [11] が、系の規模が大きい場合の計算時間が現実的でないという弱点がある。一方で、連続体力学に基づくアプローチ (例えば [12], [13], [14]) 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、こうした連続体モデリングはしばしば粉粒体の特定の相を扱うことに特化している。例えば一般的な連続体モデリングでは、密な充填下で流れにくくなる現象をモデル化でき安息角を表現できるが、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 (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詰まる現象) などを扱うことができない。

本研究では、個別要素のアプローチと連続体要素のアプローチとを組み合わせ、それらの長所を取り入れたユニバーサルなハイブリッドアルゴリズムを開発する。本稿ではその構成方法及び提案法によるシミュレーション結果を述べる。

個別要素のアプローチと連続体要素のアプローチを組み合わせるというアイデアはこれまでもあったが限定的であった。これまで、個別要素と連続体要素が同時に精度よい場合を調べたり [11], [15], [16], マルチスケールシミュレーションの分野で Arlequin 法に基づくアプローチを用

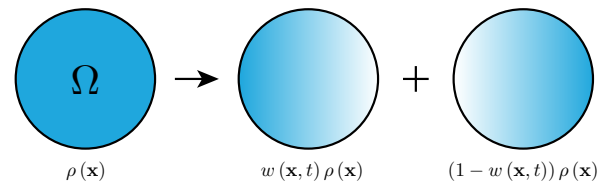


図 1 1 の分割 (partition of unity) を満たすように、密度場 $\rho(\mathbf{x})$ を分割する。

いて事前に定めた静的な連成領域で個別要素と連続体要素を組み合わせる方法 [17] があった。提案法はこれらのアイデアに基づいた上で、連成領域が動的に変化する場合にも対応しており、大きな剪断変形やトポロジー変化を伴う流れに適用できる。また、連続体モデリングでは正確に扱えない表面や境界面などの領域を、個別要素を用いて扱うことを対象としている。

2. 提案法

提案法では、解析領域を動的に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。ハイブリッド手法のコアとなる要素技術は、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、2) (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、3) 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オペレータと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オペレータからなり、以下に述べる。

2.1 個別要素と連続体要素の連成シミュレーション

提案法では、本来単一の系として記述される連続体の運動を、まず便宜上二つの系の連成として記述することを考え、次に、一方の系を個別要素により表現し、もう一方を連続体要素で表現することを考える。

2.1.1 ラグランジュ未定乗数を利用した連成系の構成

まず一つの力学系を、二つの (抽象的な) 系の連成により記述する方法を述べる。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 (図 1)。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 $c(\mathbf{x}, t) = \mathbf{v}_1(\mathbf{x}, t) - \mathbf{v}_2(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0}$ 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 (図 2)。次に、ハミルトンの変

分原理を用いて、連成系の支配方程式を導出する。運動エネルギー T およびポテンシャルエネルギー U を

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

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

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) は混乱を招かない限り省略する。さらに、二つの系の連成制約を扱うため、 $\lambda(\mathbf{x}, t)$ をラグランジュの未定乗数場として

$$C = \int_{\Omega} \lambda^T (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) dV \quad (3)$$

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:

$$\underbrace{\int_{\Omega} w \rho \mathbf{a}_1 dV}_{\text{制約なしの運動方程式}} = - \underbrace{\int_{\Omega} w \rho \frac{\partial e}{\partial \mathbf{q}_1} dV}_{\text{拘束力}} - \int_{\Omega} \lambda dV, \quad (4)$$

$$\underbrace{\int_{\Omega} (1-w) \rho \mathbf{a}_2 dV}_{\text{制約なしの運動方程式}} = - \underbrace{\int_{\Omega} (1-w) \rho \frac{\partial e}{\partial \mathbf{q}_2} dV}_{\text{拘束力}} + \int_{\Omega} \lambda dV. \quad (5)$$

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。

上記の導出は概念的なものだが、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接触力学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。Drucker-Prager 降伏条件を組み込んだ弾塑性体モデルによって、安息角をなして静止する粉粒体などの挙動を再現できる [14] が、摩擦力を含む接触力学との互換性は完全には解明されていない。本研究は、Drucker-Prager 降伏条件に基づく連続体モデリングと摩擦力を含む接触力学との互換性が十分にあるという仮説 (ansatz) をおいて進めたが、この点は今後検証を要する。なお、本研究の予備的実装では連続的な重みを用いる代わりに、離散化の扱いが容易である、連成領域で $w = 1/2$ とした定数の重みを用いた。

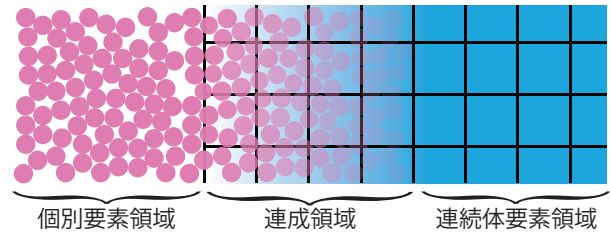


図 2 連成の重み (w) に基づいた領域分割 ($0 < w < 1$ の領域が連成領域).

2.1.2 連成系の離散化

提案法では、摩擦力を含む接触力学を個別要素法により解く。具体的には、ペナルティカベースの定式化 [18], すなわち、垂直抗力と摩擦力の双方にバネとダンパーを配置するモデル化を用いた。このモデルはサイズ効果を含む様々な粉粒体現象を再現でき、様々な研究者により実験的に検証されており、実物の粉粒体に対する比較検証も十分になされている。特に、均質な領域では、連続体モデリングとの一致性が確かめられている [11].

また、提案法では、連続体の運動方程式の離散化に物質点法 (material point method, MPM) [19] を用いる。弾塑性体モデルには文献 [20] の超弾性エネルギーを用い、塑性モデルには歪速度非依存なモデルの一つである完全塑性モデル (降伏応力を超える弾性変形は全て直ちに塑性変形になるモデル) を用いた。降伏条件には、Drucker-Prager 降伏条件を用いた。Drucker-Prager 降伏条件は、圧力依存の降伏条件であり、物体が圧縮されている時、圧力の増加に応じて降伏応力が高くなるというモデルである。これは、粒子同士が密に充填されている状態で周りから力が加わると、ジャミングして流れにくくなるという現象をモデル化しており、安息角をなして静止する粉粒体を表現できる。

MPM は粒子と格子の双方を用いるシミュレーション法であり、弱形式で記述された連続体の支配方程式を、粒子と格子とでそれぞれ基底関数を用いて離散化することで構成される。提案法では、粒子側の基底関数に粒子を中心とするボックス関数 (0 次 B-Spline) を用い、格子側の基底関数にハット関数 (1 次 B-Spline) を利用する Generalized Interpolation Material Point Method (GIMP) [21], [22] を用いた。GIMP は、粒子側の基底関数にデルタ関数を用いる通常の MPM [19] よりも、格子と粒子間の情報の受け渡しを行う shape function が滑らかであり、粒子がセル境界を跨ぐように運動しても微分が連続であるという特徴があり、より安定性に優れている。

以上のように個別要素と連続体それぞれのモデル化及び離散化を導入すると、連成のための速度制約は次のように書き下すことができる。まず、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すると、

$$\begin{cases} \text{連続体要素:} & \frac{d}{dt}(w_p M_p (\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_p^*)) = -\sum_{k \in \Omega_R} \Gamma_{pk} \boldsymbol{\lambda}_k, \\ \text{個別要素:} & \frac{d}{dt}((1 - w_k) M_k (\mathbf{v}_k - \mathbf{v}_k^*)) = \boldsymbol{\lambda}_k, \\ \text{制約:} & \forall k \in \Omega_R : \sum_p \Gamma_{pk} \mathbf{v}_p = \mathbf{v}_k \end{cases} \quad (6)$$

という連成のための速度補正方程式を得る。ここで、 Γ は、MPM の粒子 p の情報を用いて個別要素 k の位置での情報を補間するための重みであり、MPM の shape function に基づいて計算できる。 M_p 、 M_k はそれぞれ粒子 p と個別要素 k の質量、 \mathbf{v}_p^* と \mathbf{v}_k^* は、制約なしの運動方程式からの予測した速度を表し、 \mathbf{v}_p と \mathbf{v}_k は補正後の速度を表す。 Ω_R は連成領域である。

2.1.3 格子点ベースの連成

速度補正方程式 (6) は連立方程式であり、数値的に解くためのコストが高い。そこで、提案法では下記に示すように、格子点ベースでの連成を考え、連立方程式を解かずに速度補正を行う。MPM の shape function を利用すると、粒子の運動量/質量から格子点での運動量/質量を推定できる。この方法を利用して、まず各個別要素の運動量から格子点での運動量 $M_d \mathbf{v}_d^*$ を推定し、また連続体要素の格子点での運動量 $M_c \mathbf{v}_c^*$ を得る。ここで、 M_d と M_c はそれぞれ、shape function を用いて推定した格子点における個別要素と連続体要素の質量である。これにより、格子点での速度補正方程式を以下のように得ることができる：

$$\begin{cases} W_c M_c \mathbf{v}_c + \boldsymbol{\lambda} = W_c M_c \mathbf{v}_c^*, \\ W_d M_d \mathbf{v}_d - \boldsymbol{\lambda} = W_d M_d \mathbf{v}_d^*, \\ \mathbf{v}_c = \mathbf{v}_d. \end{cases} \quad (7)$$

補正方程式 (7) の解は数値的に連立方程式を解くことなく、下記のように解析的に得られる：

$$\mathbf{v}_c = \mathbf{v}_d = (W_c M_c + W_d M_d)^{-1} (W_c M_c \mathbf{v}_c^* + W_d M_d \mathbf{v}_d^*). \quad (8)$$

式 (8) は、一次元における二つの粒子間の非弾性衝突の式に相当する。この方法による速度補正は各格子点で独立に速度補正を考えるため、簡単に並列化できる。格子ベースでの速度補正を行ったのち、通常の MPM の方法と同じように、個別要素と MPM の粒子の双方に、速度をマップする。提案法では、常に式 (8) による格子点ベースの速度補正を用い、式 (6) は解かない。

2.2 連成領域決定のためのオラクル

粉粒体の流動に応じて、個別要素領域、連成領域、連続体要素領域も動的に変化する。そこでこれらの領域を自動的に決定するオラクルが必要である。提案法では、バルクの表面付近での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様子や、細い溝や開口部などで詰まる

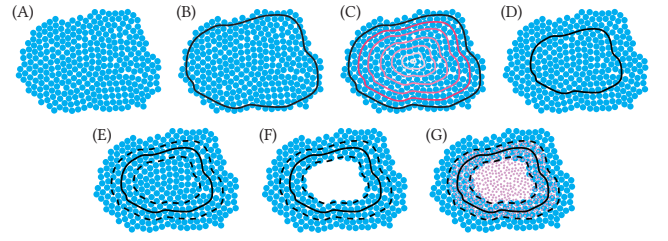


図 3 領域の決定方法。詳細は本文参照。

現象) を扱いたいので、表面付近に個別要素を配置したい。また、バルク内部の、粉粒体同士が密に詰まっていて、流れが一樣と思われる領域には連続体要素を用いたい。こうした考え方に基いて領域を決定するために、提案法では充填率と表面からの距離に基づくオラクルを用いる。

提案法のオラクルは、まず個別要素 (図 3(A)) の充填率を、一樣な背景格子を用いて各格子点で推定する。このとき、連続体要素は仮設から粉粒体が密に充填しているので、各連続体要素についてその該当領域内の推定充填率を最密充填率により上書きする。次に、ユーザ設定の充填率の閾値 Φ_ρ (提案法では 0.2 を用いる) をゼロレベルセット (図 3(B)) とする符号付き距離場 $\Phi_d(\mathbf{x})$ (図 3(C)) を求め、ゼロレベルセットから内側に距離 ϕ_0 (ユーザ設定、MPM のセル幅の 2.5 倍) だけ進んだ等値面を連成領域の中心面とする (図 3(D))。この中心面から、距離 r_h (ユーザ設定、MPM のセル幅の半分) 以内の領域 ($\phi_0 - r_h \leq \Phi_d(\mathbf{x}) \leq \phi_0 + r_h$) を連成領域とし (図 3(E))、そのさらに内側 ($\Phi_d(\mathbf{x}) > \phi_0 - r_h$) を連続体要素領域として個別要素を除去して (図 3(F))、連成領域と連続体要素領域に連続体要素をおく (図 3(G))。また、連成領域の外側の領域 ($\Phi_d(\mathbf{x}) < \phi_0 + r_h$) を個別要素領域として連続体要素を除去する。なお、同じ位置について見たとき、領域の更新前後で、個別要素領域と連続体要素領域間で直接領域の遷移が起こることを避けるため、そのように判定された領域については、替わりに連成領域と判定することにした。

なお、提案法のオラクルでは、応力分布を考慮していないので、狭い領域に剪断変形が局在化する shear localization と呼ばれる現象がバルクの内部で起こっても連続体要素を用いる。こうした領域を精度よく表現するには個別要素を用いた方がよいので、将来的には領域の決定には応力分布も考慮したい。

2.3 レイヤー型のオラクル

上記の戦略では、自由表面や全ての境界面で個別要素を用いるが、最上層だけに個別要素を用いる戦略も有用である。もし、壁や床の境界面で連続体要素による境界条件が物理的に妥当で、かつそれらの領域が外から見えない場合、そうした領域で連続体要素を用いるとさらなる計算速度の向上につながる。このレイヤー型のオラクルを 3 節のパニードリル、タイヤの例に適用した。

2.4 均質化とエンリッチメント

前節のオラクルを用いると領域の更新前後で、起こりうる領域間の遷移は、連成領域だった場所が個別要素領域もしくは連続体要素領域に遷移するか、個別要素領域もしくは連続体要素領域だった場所が連成領域に遷移するか、の四種類の可能性に限られる。連成領域が他の領域に遷移するときの処理は単純で、個別要素領域に遷移する場合は、その領域内のMPMの物質点を削除し、連続体要素領域に遷移する場合は、その領域内の個別要素を削除する。他の領域が連成領域に遷移する場合には、個別要素もしくは連続体要素の追加が必要となる。

個別要素領域が連成領域に遷移する場合には、対象領域にMPMの物質点を追加する。この点の追加の処理には、文献[20]のavoid-a-voidの方法を用いた。また、これらの追加された物質点に対して、質量と体積、速度と歪みという物理量を定める必要がある。質量と体積は、あらかじめ密に充填された個別要素の平均密度を求めておき、物質点が追加された領域の体積と物質点の個数に応じて定める。速度と歪みは個別要素の物理量を均質化して求める。具体的には、MPMのshape functionを用いて、個別要素の速度から、背景格子の格子点での速度を推定し、物質点の位置で補間された速度をその物質点の速度とする。歪みについては、まずChristoffersenの式[23]を用いて、個別要素間の接触力(抗力と摩擦力)から格子点での応力を求める。次に、歪みから応力を求める超弾性の構成則を、応力を入力として歪みについて解くことで歪みを求める。こうして得られた歪みを補間することで、各物質点の歪みを得る。

連続体要素が連成領域に遷移する場合には、対象領域に個別要素を追加する。この処理は均質化とは逆の処理で、我々はエンリッチメントと呼んでいる。個別要素の追加の処理にもavoid-a-void[20]を用いた。個別要素の速度は、追加された位置を中心として、個別要素の平均半径の6倍の距離以内にあるMPMの物質点と個別要素の速度を指数関数的に減衰する重みを利用して重み付き平均を求めることで得る。

3. 結果

提案法を様々なモデル問題に適用して、その有効性を検証する。なお、連成領域での連成の重みは全て $w = 1/2$ とした。また、ほとんどの例で、MPMのセル幅と粉粒体の平均直径の比率は2:1とした。

3.1 粉粒体の柱崩壊

図4に、個別要素のみを用いたシミュレーションと提案法によるシミュレーションによる二次元柱崩壊の結果を示す。両者の形状はかなり一致しており、静止状態の安息角だけでなく、バルクから飛び去って離れ、先端で転がる

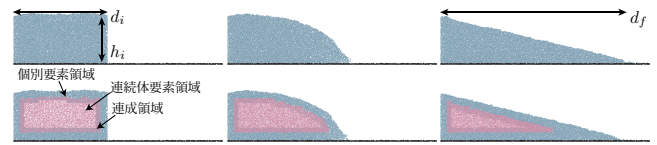


図4 二次元柱崩壊のシミュレーション(上: 個別要素のみ, 下: 提案法).

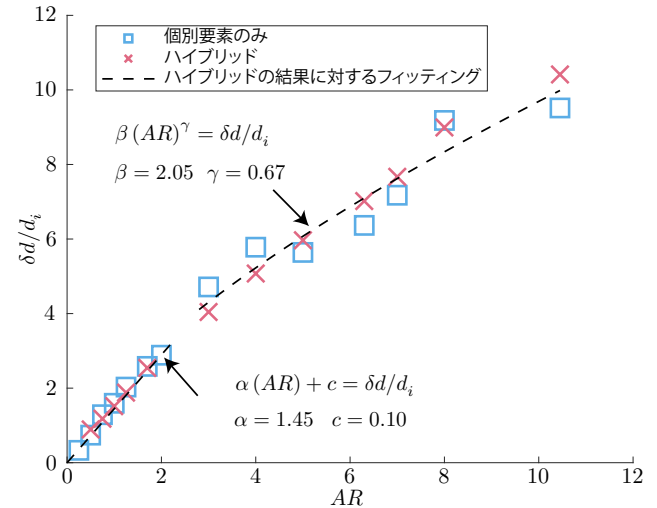


図5 二次元柱崩壊における正規化到達距離 $\delta d/d_i = (d_f - d_i)/d_i$ と縦横比 $AR = h_i/d_i$ とのプロット。

粒子などの、個別要素のみのシミュレーションで得られた様々な現象が再現できていることがわかる。これらの現象は連続体モデリングだけで再現するのは難しい。

この一致性能をより詳細に評価するため、粉粒体に関する実験を通じて知られている到達距離に関するパワー則との比較を行った。到達距離 δd は $\delta d = d_f - d_i$ で定義され、図4の単方向の柱崩壊の場合、 d_f は左の壁からバルクにつながった最右端粒子の重心までの距離であり、 d_i は(崩壊前の)初期状態での柱の幅である。柱の高さを h_i とすると、 $AR = h_i/d_i$ により初期状態の柱の縦横比を定義できる。パワー則とは、到達距離を縦横比の関数とした時に観測される経験則のことであり、実験的に[24],[25]また数値計算的に[14],[26],[27],[28]確かめられている。

図5に示す通り、個別要素のみを用いた場合にはパワー則に従うことが観測され、また提案法を用いた場合にも似たプロファイルを得られた。具体的には、Lube[25]の実験では、縦横比が小さい $AR < 1.8$ とき、到達距離 δd を幅 d_i で割って正規化した到達距離 $\delta d/d_i$ と縦横比との間に線形な関係 ($\delta d/d_i = \alpha(AR)$) があり、 $\alpha = 1.2$ を得ている。提案法の結果は $\alpha = 1.45$ でよい一致を得ている。また、縦横比が大きい $AR > 2.8$ とき、正規化到達距離と縦横比との間にパワー則 $\delta d/d_i = \beta(AR)^\gamma$ が観測され、Lubeの実験では $\beta = 1.9$ と $\gamma = 0.67$ を得ている。提案法による結果は、 $\beta = 2.05$ と $\gamma = 0.67$ であり、この場合も実験結果との良い一致が得られた。

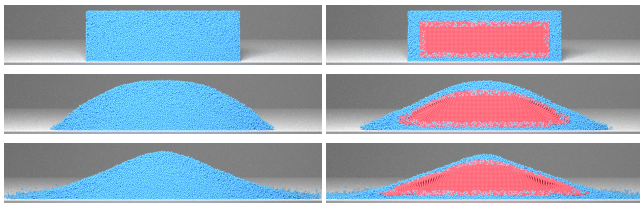


図 6 三次元柱崩壊のシミュレーション (左: 個別要素のみ, 右: 提案法).

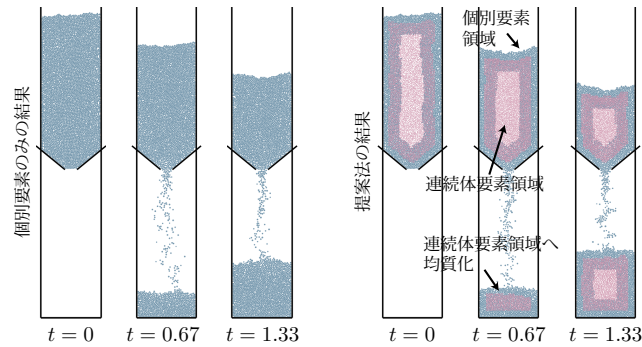


図 7 二次元サイロ流のシミュレーション (左: 個別要素のみ, 右: 提案法).

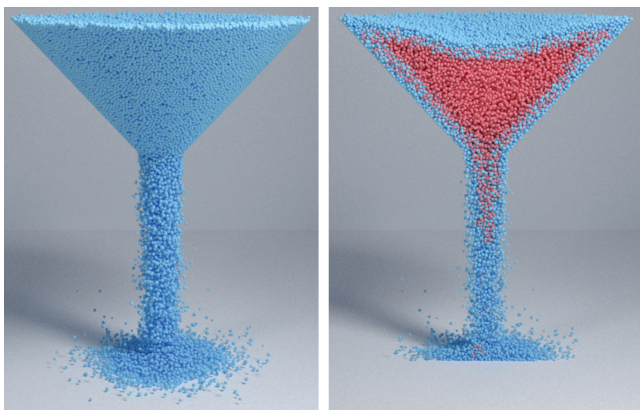


図 8 提案法による三次元サイロ流のシミュレーション (左: サイロ流全体, 右: 断面図).

また, 図 6 に三次元の柱崩壊のシミュレーション結果を示す. この例でも個別要素のみによる結果と良い一致が得られており, 先端で粒子が転がる様子が再現できている.

3.2 サイロ流

図 7 に, 個別要素法と提案法によるサイロ流のシミュレーション結果を比較する. 提案法を用いると, 粉粒体のバルク内部は連続体要素で表現され, 粉粒体がサイロの上部から下部に向かって流出する開口部の領域では, 個別要素で粒子が表現され, 下部で堆積するとその内部は再び連続体で表現される. 個別要素のみの結果と比べると, 提案法の結果は若干流速が速い. その原因は, エンリッチメントで個別要素の粒子をサンプリングする際に, 現状の方法では接触数を制御できないことによると考えられる. 接触数の制御は今後の研究として面白い方向である.

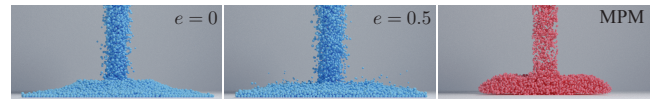


図 9 三次元サイロ流. 左から順に, 提案法で反発係数 0 を用いた場合, 提案法で反発係数 0.5 を用いた場合, MPM による結果.

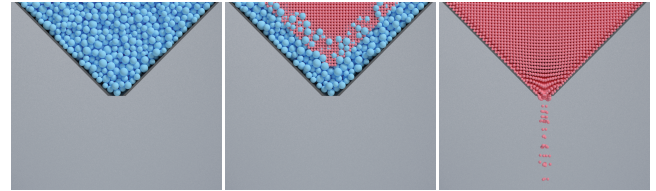


図 10 開口部の小さいサイロ. 左: 個別要素のみを用いた場合, 中央: 提案法の結果, 右: MPM を用いた場合. MPM では, 開口部で詰まる現象を再現できていない.

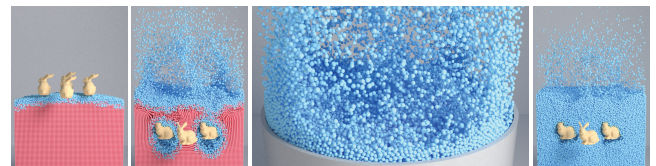


図 11 バニードリルの例. 左から順に, 提案法でのシミュレーションの初期状態, 提案法でのシミュレーションの様子, その拡大図, 個別要素のみを用いた場合.

次に, 図 8 に提案法による三次元の場合の結果を示す. MPM のみを用いた場合には, 表面上で粒子同士が衝突する様子を正確に表現できず, 本質的には被弾性衝突で反発係数が 0 に相当する結果を生成する. これに対して, 提案法では表面部分に個別要素を用いることで任意の反発係数を設定することができ, 図 9 に示すように, 異なる衝突の様子を表現できる. また, 図 10 に示すように, 開口部が小さい場合に粉粒体のサイズ効果の影響が現れ, 開口部で詰まる現象が起こるが, 開口部で個別要素を利用する提案法は, 個別要素のみを用いた場合と同じようにこの現象を再現できる. 一方, 一般的な連続体モデリングだけではこの現象を再現できず, 非局所的なモデリング [16] が必要となる.

3.3 バニードリル

図 11 の例では, 四つのバニを回転させながら, 粉粒体 (全要素を個別要素で表現した場合に 360,000 の要素数に相当) に投入したり取り出したりしている. 初期状態では, 最上層のみが個別要素で表現されているが, シミュレーションが進みバニが粉粒体の山の内部に入ると, 提案法は自動的にバニの周囲を個別要素で表現し, バニと個別要素との間の衝突を正確にモデリングすることができる. 提案法は個別要素のみの場合よりも必要な個別要素数が 88% 少なく, 6.82 倍の高速化を実現した一方で, 個別要素のみの場合と似たような結果を生成できた.

3.4 タイヤ

図 12 の例は、砂利道を走るオフロードタイヤを模擬したものである。これらのタイヤには軸周りに定数の角速度が与えられており、位置については制約を与えておらずシミュレーションの結果決まる。提案法により、より高速に回転するタイヤではより大きなスプラッシュが生じ、タイヤの密度が大きい場合には沈み込みやすいといった様子が再現されている。この例を個別要素のみでシミュレーションする場合には 822,956 の要素が必要であるが、提案法ではタイヤと接触する領域と表面の薄い層にのみ個別要素を用いており、3.43 倍の高速化が実現されている。

3.5 高速化比について

提案法によるハイブリッドなアプローチがもたらす高速化性能について検討する。ここでは計算精度は考慮していない。詳細は割愛するが、各々の個別要素や連続体要素に必要な計算コスト、各領域の体積などをもとに、計算量のモデルを作ることができる。一ステップあたりの提案法の計算コストと個別要素のみによる計算コストとの比率、すなわち高速化比 R_A (R_A が小さいほど高速化比は高い) を考えると、 R_A は MPM の背景格子の解像度 N (一辺あたりのセル数) と全領域を個別要素で表現した場合の実効個別要素数 A との関数で書ける。 R_A を最小化することで、もっとも高速化比を大きくできる N と A との関係がわかり、実効個別要素数 A に応じて MPM の解像度 N を決定する方法がわかる。解析の結果、三次元シミュレーションの場合には $N \propto A^{1/4}$ とし、二次元の場合には $N \propto A^{1/3}$ とすると、 $A \rightarrow \infty$ で $R_A \rightarrow 0$ となり、 A が大きいほど、より大きな高速化比が得られる。

一辺のセル数である N と体積に比例する量である A との最適な関係 (三次元で $1/4$ 乗、二次元で $1/3$ 乗) を考えたときに、最適な N は、体積 (二次元では面積) と辺の長さの関係 ($1/3$ 乗、二次元では $1/2$ 乗) よりも遅い速度で A と関係づけられている。仮に、個別要素の層を最も薄い状態 (セル一つ分) にしたまま、個別要素と連続体要素の双方を同じ倍率で細分割した場合、個別要素の数は表面積に比例して N^2 (二次元では N) に応じてスケールし、連続体要素の数は体積に比例して N^3 (二次元では N^2) に応じてスケールするため、連続体要素の計算時間が支配的となってしまうので、高速化比は頭打ちになる。しかし、 $N \propto A^{1/4}$ と設定 (2D では $N \propto A^{1/3}$) することで、これらの領域の細分割の比率を変えて両方の要素の計算コストのバランスを保った場合には、高速化比は頭打ちにはならず、実効個別要素数 A が大きいほど提案法が有効となりうる。

4. まとめと今後の課題

本稿では、粉粒体の連続体モデルと個別要素モデルを組

み合わせたハイブリッドなシミュレーション法を提案した。提案法を実現するために、密度場分割とラグランジュの未定乗数を用いた連続体要素と個別要素の連成手法、自動でかつ動的にシミュレーション領域を連続体要素領域・連成領域・個別要素領域に分割するオラクル、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、連続体要素の情報から個別要素の情報を推定するエンリッチメントを要素技術として開発した。また、大きな塑性変形やトポロジー変化を伴う様々なシミュレーション例を通じて、提案法の有効性を示した。

提案法は陽的解法を用いているが、計算効率向上のために今後は陰的解法についても検討していきたい。また、GIMP を利用する現在の連続体モデリングでは、個別要素の角運動量を制約する方法がないため、連成領域で孤立した個別要素が大きな角運動量を持って回り続ける。こうした要素は外からは見えないので、グラフィクスとしては問題ないと思われるが、非物理的である。APIC [29] などの角運動量を扱う MPM 手法を将来的に試してみたい。

提案法では連成の重み関数として不連続な関数を用いているが、将来的には空間的に連続な関数を試みたい。また、avoid-a-void に基づいた個別要素を追加する方法では要素間の接触数を制御できず、低めの接触数となる。このため、密な領域では要素が十分な数の要素と接触せず、本来よりも圧力が低くなる問題が起きうる。将来的にはこの問題を改善していきたい。

最後に、提案法のオラクルはジオメトリベースであり、応力などの力学的指標を考慮していない。剪断変形の局在化が起こる内部領域での精度を向上したい場合には、内部にも個別要素を用いたいが、そのための応力ベースのオラクルについても検討していきたい。

謝辞

本研究を進める上で助力いただいた、Henrique Teles Maia 氏、Gabriel Cirio 氏、Sachith Dunatunga 氏、Chenfanfu Jiang 氏、Andre Pradhana 氏、Yun Fei 氏に感謝いたします。また、本研究は、JSPS 科研費 若手研究 (A) (17H04682)、NSF (Grants CBET-17-06689, IIS-11-17257, IIS-12-17904, IIS-13-19483, IIS-14-09286, CMMI-11-29917, CMMI-13-31499)、Adobe、及び Autodesk の助成によるものです。

参考文献

- [1] Yue, Y., Smith, B., Chen, P. Y., Chantharayukhonthorn, M., Kamrin, K. and Grinspun, E.: Hybrid Grains: Adaptive Coupling of Discrete and Continuum Simulations of Granular Media, *ACM Trans. Graph.*, Vol. 37, No. 6, pp. 283:1–283:19 (2018).
- [2] Ammann, C., Bloom, D., Cohen, J. M., Courte, J., Flores, L., Hasegawa, S., Kalaitzidis, N., Tornberg, T., Tre-

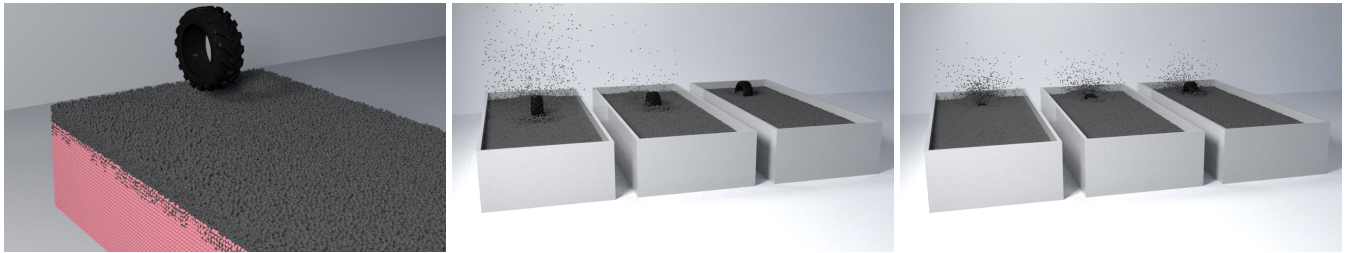


図 12 タイヤの例. 左: 提案法でのシミュレーションの初期状態. 中央: 角速度を左から順に 1000 rad/s, 100 rad/s, 10 rad/s とした場合. 右: タイヤの質量を左から順に 5 \times , 2 \times , 1 \times とした場合.

- week, L., Winter, B. and Yang, C.: The Birth of Sandman, *ACM SIGGRAPH 2007 Sketches* (2007).
- [3] Brown, E., Rodenberg, N., Amend, J., Mozeika, A., Steltz, E., Zakin, M. R., Lipson, H. and Jaeger, H. M.: Universal robotic gripper based on the jamming of granular material, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, Vol. 107, No. 44, pp. 18809–18814 (2010).
- [4] Richard, P., Nicodemi, M., Delannay, R., Ribière, P. and Bideau, D.: Slow relaxation and compaction of granular systems, *Nature Materials.*, Vol. 4, pp. 121–128 (2005).
- [5] Luciani, A., Habibi, A. and Manzotti, E.: A multi-scale physical model of granular materials, *Graphics interface'95*, pp. 136–146 (1995).
- [6] Miller, G. and Pearce, A.: Globular dynamics: A connected particle system for animating viscous fluids, *Computers & Graphics*, Vol. 13, No. 3, pp. 305–309 (1989).
- [7] Bell, N., Yu, Y. and Mucha, P. J.: Particle-based simulation of granular materials, *Proceedings of the 2005 ACM SIGGRAPH/Eurographics symposium on Computer animation*, ACM, pp. 77–86 (2005).
- [8] Stewart, D. E.: Rigid-body dynamics with friction and impact, *SIAM review*, Vol. 42, No. 1, pp. 3–39 (2000).
- [9] Kaufman, D. M., Sueda, S., James, D. L. and Pai, D. K.: Staggered Projections for Frictional Contact in Multi-body Systems, *ACM Trans. Graph.*, Vol. 27, No. 5, pp. 164:1–164:11 (2008).
- [10] Smith, B., Kaufman, D. M., Vouga, E., Tamstorf, R. and Grinspun, E.: Reflections on Simultaneous Impact, *ACM Trans. Graph.*, Vol. 31, No. 4, pp. 106:1–106:12 (2012).
- [11] Rycroft, C. H., Kamrin, K. and Bazant, M. Z.: Assessing continuum postulates in simulations of granular flow, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 57, No. 5, pp. 828–839 (2009).
- [12] Daviet, G. and Bertails-Descoubes, F.: A Semi-implicit Material Point Method for the Continuum Simulation of Granular Materials, *ACM Trans. Graph.*, Vol. 35, No. 4, pp. 102:1–102:13 (2016).
- [13] Klár, G., Gast, T., Pradhana, A., Fu, C., Schroeder, C., Jiang, C. and Teran, J.: Drucker-prager Elastoplasticity for Sand Animation, *ACM Trans. Graph.*, Vol. 35, No. 4, pp. 103:1–103:12 (2016).
- [14] Dunatunga, S. and Kamrin, K.: Continuum modelling and simulation of granular flows through their many phases, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 779, pp. 483–513 (2015).
- [15] Kamrin, K.: Nonlinear elasto-plastic model for dense granular flow, *International Journal of Plasticity*, Vol. 26, No. 2, pp. 167–188 (2010).
- [16] Kamrin, K. and Koval, G.: Effect of Particle Surface Friction on Nonlocal Constitutive Behavior of Flowing Granular Media, *Computational Particle Mechanics*, Vol. 1, No. 2, pp. 169–176 (2014).
- [17] Wellmann, C. and Wriggers, P.: A two-scale model of granular materials, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 205–208, No. Supplement C, pp. 46–58 (2012).
- [18] Cundall, P. A. and Strack, O. D. L.: A discrete numerical model for granular assemblies, *Géotechnique*, Vol. 29, No. 1, pp. 47–65 (1979).
- [19] Sulsky, D., Chen, Z. and Schreyer, H. L.: A particle method for history-dependent materials, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Vol. 118, No. 1, pp. 179–196 (1994).
- [20] Yue, Y., Smith, B., Batty, C., Zheng, C. and Grinspun, E.: Continuum Foam: A Material Point Method for Shear-Dependent Flows, *ACM Trans. Graph.*, Vol. 34, No. 5, pp. 160:1–160:20 (2015).
- [21] Bardenhagen, S. G. and Kober, E. M.: The generalized interpolation material point method, *Computer Modeling in Engineering and Sciences*, Vol. 5, No. 6, pp. 477–496 (2004).
- [22] Gao, M., Tampubolon, A. P., Jiang, C. and Sifakis, E.: An adaptive generalized interpolation material point method for simulating elastoplastic materials, *ACM Trans. Graph.*, Vol. 36, No. 6, pp. 223:1–223:12 (2017).
- [23] Christoffersen, J., Mehrabadi, M. M. and Nemat-Nasser, S.: A micromechanical description of granular material behavior, *Journal of applied mechanics*, Vol. 48, No. 2, pp. 339–344 (1981).
- [24] Balmforth, N. J. and Kerswell, R. R.: Granular collapse in two dimensions, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 538, pp. 399–428 (2005).
- [25] Lube, G., Huppert, H. E., Sparks, R. S. J. and Freundt, A.: Collapses of two-dimensional granular columns, *Phys. Rev. E*, Vol. 72, pp. 041301:1–041301:10 (2005).
- [26] Lagrée, P.-Y., Staron, L. and Popinet, S.: The granular column collapse as a continuum: Validity of a two-dimensional Navier-Stokes model with a $\mu(I)$ -rheology, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 686, pp. 378–408 (2011).
- [27] Mast, C. M., Arduino, P., Mackenzie-Helmwein, P. and Miller, G. R.: Simulating granular column collapse using the Material Point Method, *Acta Geotechnica*, Vol. 10, No. 1, pp. 101–116 (2015).
- [28] Staron, L. and Hinch, J. E.: Study of the collapse of granular columns using two-dimensional discrete-grain simulation, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 545, pp. 1–27 (2005).
- [29] Jiang, C., Schroeder, C., Selle, A., Teran, J. and Stomakhin, A.: The affine particle-in-cell method, *ACM Trans. Graph.*, Vol. 34, No. 4, pp. 51:1–51:10 (2015).