

— 報 告 —

高速個別要素法コードHiDEMの開発と科学と産業への応用

阪口 秀^{1a*}, 西浦 泰介^{1a}

海洋研究開発機構(JAMSTEC), 地球内部変動研究センター(IFREE), 地殻ダイナミクス研究グループで開発された高速個別要素法コードHiDEM(Hyper Intelligent Discrete Element Method)のアルゴリズムと高速プログラミングについての概要を説明する。また, HiDEMの科学と産業に対する貢献を幾つかの例を紹介しながら説明する。

キーワード: ソフトウェア, 数値シミュレーション, 個別要素法, 高速計算, 応用

2009年3月17日受領; 2009年7月31日受理

1 独立行政法人海洋研究開発機構・地球内部変動研究センター

現在の所属

a: 独立行政法人海洋研究開発機構・地球内部ダイナミクス領域

代表執筆者:

阪口 秀

独立行政法人海洋研究開発機構・地球内部ダイナミクス領域

〒236-0001 横浜市金沢区昭和町3173-25

045-778-5970

sakaguchih@jamstec.go.jp

著作権: 独立行政法人海洋研究開発機構

— Report —

Development of Hyper Intelligent Discrete Element Method (HiDEM) and its application for science and industry

Hide Sakaguchi^{1*} and Daisuke Nishiura¹

Hyper Intelligent Discrete Element Method (HiDEM), developed by the crustal dynamics research group, Institute for Research and Earth Evolution (IFREE), Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology (JAMSTEC) is introduced together with its algorithm and its high speed computational programming technique. In addition, the contribution of HiDEM for research and development in science and industry is mentioned introducing some examples.

Keywords : Software, Numerical Simulation, Discrete Element Method, High speed computation, Application

Received 17 March 2009 ; Accepted 31 July 2009

¹ Institute for Research on Earth Evolution, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

Corresponding author :

Hide Sakaguchi

Institute for Research on Earth Evolution, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

3173-25 Showa-machi, Kanazawa-ku, Yokohama 236-0001, Japan

+81-45-778-5970

sakaguchih@jamstec.go.jp

Copyright by Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

1. はじめに

デジタルコンピュータの発達と高速化に伴い、コンピュータを使った数値シミュレーションが科学と産業に果たす役割が非常に大きなものとなりつつある。一般的に、数値シミュレーションとは、ある現象に対してモデルを作り（通常、モデルの表現には微分方程式が用いられる）、そのモデルの中で現象を詳細に調べ、過去や未来の現象を数値的に予測することである。ここで、この手の数値シミュレーションにおけるコンピュータの役割は、解析解を得ることが困難な微分方程式（自然現象を表す微分方程式は殆どこれに属する）に対して、所定の初期条件と境界条件から数値的に解を与えることである。例えば、流れに対するモデル化はNavier-Stokes方程式で、その数値解法が有限差分法であり有限要素法で、初期条件と境界条件を色々変えながら数値解法によって得られる解の時間・空間発展を得ることが数値シミュレーションである。

実は、数値シミュレーションにはもう一つ重要な役割がある。それは、コンピュータ上で行う思考実験である。この思考実験と上述したモデルに基づく数値シミュレーションとの大きな違いは、前者には現象全体を理解し表現するためのモデルや微分方程式が存在しないことである。これが書けない理由は、因果関係そのものが良く分からないか、それを記述する数学が無いかのどちらかである。その場合、「Aが起こるとBが起こる。Bが起こるとCが起こる」と、思考の中で実験しながら、全体を支配している法則を探すのである。コンピュータがまだ無い時代には、このような作業は頭の中かせいぜい紙と鉛筆で行われた。ところが、「個々の現象は非常に簡単であっても、その現象を構成する因子の数や繰り返し回数が膨大になるとどうなるのか?」という問いに対する思考実験は、それに挑戦するために必要な忍耐力と紙と鉛筆を用意する以前に、その非現実性ゆえに普通は諦める。そして、別の方法に答えを探そうとする。例えば、熱力学的気体分子運動論はその典型だ。全ての分子運動を追跡しなくても、熱力学の法則はきちんと説明されている。

しかし、コンピュータの力を借りると、かつては肉体的にも精神的にもあまりにも非現実的だと思われた大規模思考実験が容易に実現できる。本論で報告する個別要素法(Discrete Element Method, 略して以下DEMと呼ぶ)は、まさに基礎方程式が確立されていない複雑な現象に対して、個々に大きさと形状を有して互いに相互作用のある多数の要素の運動をコンピュータ上で逐次追跡する大規模思考実験である。勿論、DEM各要素の物性と要素間の相互作用に現実の値を与えれば、

思考実験のみならず実際の実験の代わりに数値シミュレーションを行うことも可能である。ただし、いずれにしても、DEM上で要素を動かすには、ニュートンの運動方程式の数値積分に頼らなければならず、非常に短い時間刻みでの時間発展を強いられる。従って、計算手法は容易でも許容時間内に計算を終わらせるための高速計算には、高度なプログラミングテクニックが要求される。

以下に、上記目的のために海洋研究開発機構(JAMSTEC)、地球内部変動研究センター(IFREE)、地殻ダイナミクス研究グループで開発された高速個別要素法コードHiDEM(Hyper Intelligent Discrete Element Method)の概要とHiDEMの科学と産業への応用例について紹介する。

2. 高速個別要素法コードHiDEM

2.1. 個別要素法の概要と特徴

DEMは、Peter Cundall(1971)によって最初に編み出され命名された数値解析手法である。以後、これまでに数多くのDEMに関する論文が発表され、改良が積み重ねられてきたが、基本的にはCundall and Hart(1992)の次の定義を満たす手法をDEMと呼ぶ。

The name “discrete element” applies to a computer program only if it:

- 1) allows finite displacements and rotations of discrete bodies, including complete detachment; and
- 2) recognizes new contacts automatically as the calculation progress.

ここで重要なことは、弾性体理論における微小変形などの制約条件がないことと、各要素が個々に自由な運動が許されることである。故に、DEMでは他の数値解析手法では扱いが困難な1) 大変形、2) 不連続運動、3) 回転運動が容易に表現できる。しかし、その代償として要素間の位置関係や向きが逐一変化するために、これを計算上で追跡しなければならない。

DEMを計算するためのコードは、製作者ごとに詳細が異なるが、DEM計算の基本アルゴリズムは、どのコードでもFig. 1のように非常に単純である。しかし、アルゴリズムは単純でもFig. 1の最初、分岐判定の「接触判定」と接触判定結果に依存する処理系1), 2)の「接触力計算」と「総和計算」は各ステップによって個数も、空間的分布も計算順序も異なるため、実際の計算は全く単純ではない。そのため、コンピュータによる大規模高速計算の常套手段である「並列計算」には全く不向きな手法であり、とくにベクトル計算には向いていない。DEMと基本的な考え方が類似しているMD(Molecular

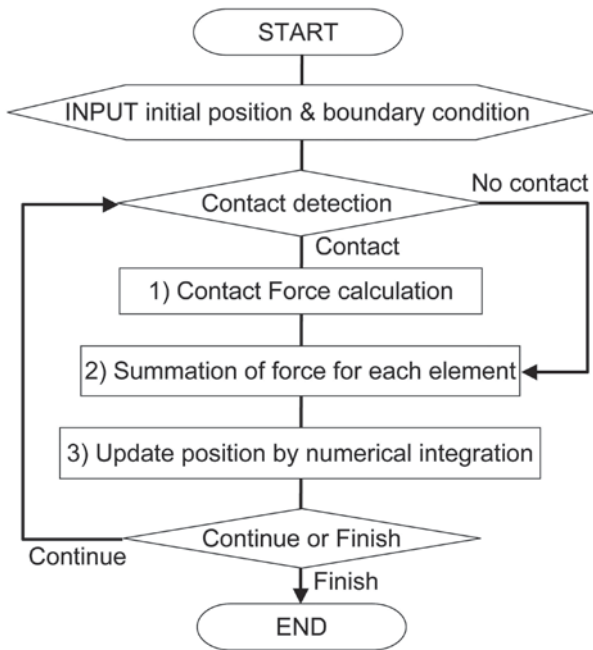


Fig. 1. Algorithm for standard DEM program

Dynamics)は、接触力計算ではなく、要素（粒子）間の距離の関数であるポテンシャルから相互作用力を計算するため、その組み合わせは空間的に広範囲に固定されている点で、並列化による大規模高速化は比較的楽に実現できる。

2.2 DEMによる大規模高速計算のための鍵

前節で触れたように、DEMは通常の並列計算には向いていない。すると、DEMで大規模高速計算を行うためには、プログラミングにおける1) 省メモリー化、2) 接触判定の効率化の2点が重要な鍵を握る。本報告で紹介する海洋研究開発機構地球内部変動研究センターで開発されたDEMコード「HiDEM」は、数あるDEMコードの中で、特にこの2点に対して独自のアルゴリズムを有し（特許出願中）、比較的小規模のワークステーションやパソコンでも3次元で100万要素の計算が可能となっている。以下にHiDEMの特徴を説明する。

2.2.1. リンクリスト構造を利用した接触候補リストとその使いまわし

DEMは、各要素に物性と物理量の属性が与えられるため、思考実験や数値実験に用いる要素数が多くなれば必要とするメモリーが大きくなることは自明である。これを一時的にメモリーから記憶媒体に退避するなどして小さくすることは不可能ではないが、全てのステップで全要素に対して繰り返して使われる変数であるため、

この方法は非実用的である。

実はDEMが各要素の属性以外に大きなメモリーを必要とする箇所として、接触判定計算を行う接触候補ペアを事前に絞り込むための空間分割セルデータが挙げられる。これは、セルの数にもよるが、1つのセルに含まれる要素数がケースバイケースであることによる。ところが、DEMでは、1ステップの時間更新で、ある要素間での接触の有無は微妙に変化しても、接触候補ペア自体が大幅に変化することはない。したがって、毎ステップ接触候補ペアを絞り込む操作の必要はなく、空間分割セルデータを常時メモリーに確保する必要もないのである。また、要素の位置関係がある程度変化した時点で接触候補ペアを組み直す際には、全ての接触候補ペアが劇的に変化するわけではなく、全体のペアの中である限られたペアが消滅し、新しいペアが発生し、残りのペアは継続する。

HiDEMは、この事実に基づき、接触候補ペアを作るときのみ仮想的に空間分割セルを作り、接触候補ペアが出来上がると、ただちにセルの情報を破棄することでメモリーの大幅な節約を図っている。また、Fig. 2のように、接触候補ペアのデータはカードイメージのリンクリスト構造とすることで、消滅させるペアのカードだけを抜き出し、新たに発生したペアのカードを付け加えることができる。この作業を配列データ構造で行えば、一度、同じサイズの仮の配列データに全てをコピーし、必要なペアを逐次先頭からコピー代入し、最後に仮の配列データを全部消去させるという手続きが必要となる。カードイメージのリンクリストでこの作業を行うと、接触候補ペアの発生消滅に伴うカードだけの抜き差しで済むため、省メモリー化と高速化が可能となる。また、書き換えられない大半の接触候補リストのカードはそのまま使いまわされる仕組みとなっている。

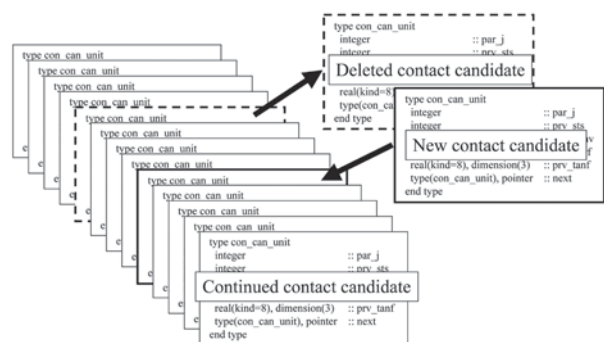


Fig. 2. Card imaged link list for contact candidate pair

2.2.2. 内部分割による直列計算

2.2.1で説明したように、接触候補ペアを作る際に必要な空間分割セルに割り当てられるメモリーは非常に大きく、解析対象領域そのものが大きい場合や扱う要素数が膨大になると、一時的に確保して使用後に消去するとは言うもののメモリー上に空間分割セルの情報を確保できない状況が生じる、これが全要素の属性デー

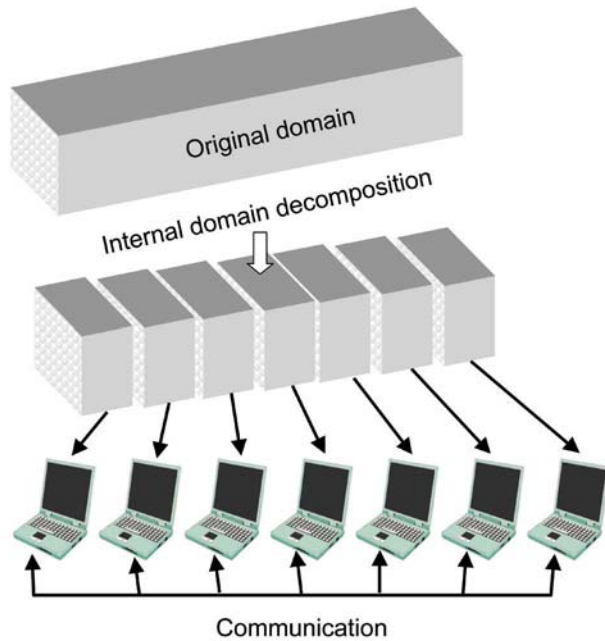


Fig. 3. Schematic diagram of parallel processing

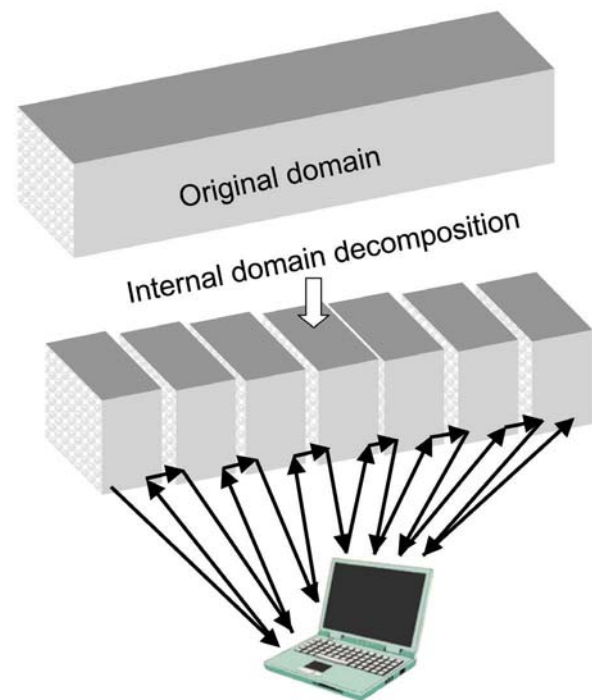


Fig. 4. Schematic diagram of serial processing

タはメモリー上に確保できているのに計算はできなくなるというDEMの限界の1つである。

ところがHiDEMは、この問題に対して、「内部分割による直列計算」という手法を導入することで、要素の属性データサイズより物理メモリーサイズが僅かに大きければどんなシミュレーションでも実行可能としたのである。この考えは、解析領域を内部分割するところまでは並列計算と同じ手順を踏むが、複数のハードウェアのメモリーにデータを分散させて並列的に演算を進める並列計算(Fig. 3参照)と全く逆で、1つのハードウェアのメモリー量に対応させて内部分割されたサブ領域の演算を順に進める直列計算である(Fig. 4)。

少し古いデータであるが1CPUのWindowsデスクトップパソコン(32ビット倍精度演算, クロックスピード3.06GHz, この計算に割り当てられる最大メモリー1.4GB程度)での計算速度を次の指標で与え、用いる要素数による比較を行った結果をFig. 5に示す。100万要素を用いる計算では、内部分割を行わなければ事実上メモリー不足となるが、直列計算でそれほど劇的に計算速度が落ちていないことが示されている。

指標 (Cundall number) =

$$\text{要素数}(n) \times \text{計算ステップ数}(m) / \text{要した時間}(t) \quad (1)$$

勿論、この直列計算は、領域ごとにメモリー上のデータを入れ替え、領域の境界間でデータをやり取りするため、計算速度という点では並列計算に圧倒的に劣ることは否めない。しかしこのHiDEMの直列計算機能を使うことで、並列計算機が整っていない環境でも、ある程度大規模なシミュレーションが可能となるだけで

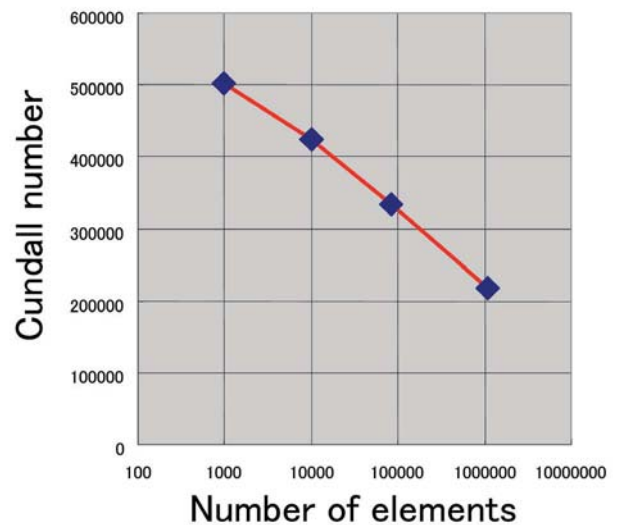


Fig. 5. Computational efficiency depending on the number of elements

なく、単体計算機のメモリーに余裕を残して計算することも可能である。さらに、直列計算における領域分割と領域境界間のデータの受け渡しプロセスは、そのまま並列計算にも流用できるので、並列化に伴う煩わしいプログラム変更も殆どなく並列計算が行える。

2.2.3. OpenGLによる可視化とステアリング機能

HiDEMは、プログラミング言語Fortran90/95で書かれていて、フォートランコンパイラーとf90GLのライブラリ（f90GLのサイトからフリーでダウンロード可）さえあれば、プラットフォームに関係なくコンパイル・実行が可能である。実行時には、コマンドラインベースの他、OpenGLによるGUIから行うことが可能で計算中にリアルタイム可視化することもできる。この機能は、シミュレーションモデルを開発するに当たり、途中経過を調べるために非常に便利である。

さらにHiDEMでは、Fig. 1におけるDEMの時間更新ループそのものが実はOpenGLのイベント待ちループで回っている。そのため、GUIから実行する場合、実行中に可視化に関するパラメータを変化させることができるだけでなく、DEM計算そのもののパラメータを変えること（これをステアリング機能と呼ぶ）も可能である。このステアリング機能を使うと、計算中の途中経過を見ながら境界条件を人間の手で自由に変化させることができる。Fig. 6は、抽選会のくじ引きをHiDEMを用いてシミュレーションしたスナップショットであるが（結果は残念ながら白球の「ハズレ」である）、ステアリング機能を使うことで、六角形の箱を任意の速

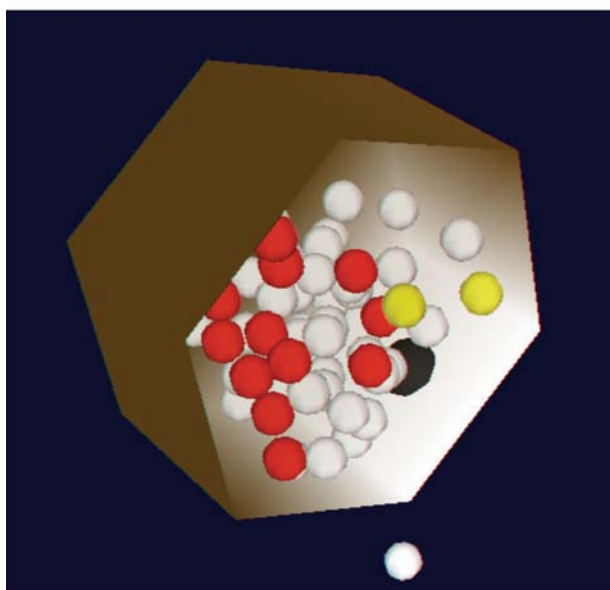


Fig. 6. A snapshot of the lottery simulation using HiDEM

度で回し任意の場所で停止させるなど、非常にリアルなシミュレーションを数値計算によって行うことができる。

3. HiDEMの応用

HiDEMがJAMSTECで開発されて約4年が経過するが、HiDEMは、これまでにJAMSTECの研究以外に4つの大学、2つの公的研究機関、6社の民間会社によって、科学研究、産業利用などに応用されている。今後、JAMSTEC内で生物研究への応用なども含め、DEMを使うシミュレーションの需要は高まるばかりである。その趨勢に伴い、我々の研究グループでは、単体のパソコンやワークステーションで非常に廉価に高並列計算が可能となるGPUを使ったDEMプログラムの開発を既に完了し、これまでのCPUを用いた計算の60倍程度的高速化に成功し、今年度既にリリースしている。以下に、数あるHiDEMを用いた思考実験、数値実験のシミュレーションから幾つかを紹介する。

3.1. 科学研究への応用

3.1.1. せん断力を受ける粒子性物質中の力の伝達

岩石が粉碎されてできる断層のガウジレイヤーのように細かな粒子が多数集まった物質が強く圧縮されている状況では、力が非常に不均質に伝達される（ある粒子は非常に大きな力を受け持ち、ある粒子には殆ど力が加わらない）ことが古くから知られている(Oda *et al.*, 1980)。この傾向はとくに差応力下で顕著に現れる。Fig. 7(a)は、光弾性材料を用いた直接せん断実験中に見られる力の伝達経路（色が濃い場所ほど大きな力を受けている）で、Fig. 7(b)のようにDEMによるシミュレーションでもこの傾向を見ることができる。

Yoshioka and Sakaguchi (2005)は、このせん断を受ける粒子性物質中にできる自発的な不均質構造と弾性波の減衰特性に関する実験とDEMシミュレーションによる詳細な検討を行い、ガウジレイヤーの破壊の予知につながる貴重な知見を得ている。

3.1.2. 重力を受ける球殻状堆積層に湧き出しと吸い込みの境界条件を与えた思考実験

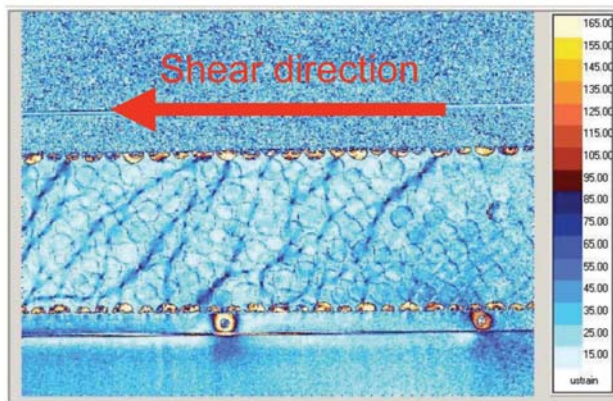
地球の表面を覆う地殻は地球内部と表層の温度差が原因となるマンツルの熱対流に乗って移動しているが、21世紀においてこのプレートテクトニクス理論を疑う人は稀有である。しかし、流体力学的見地からプレートテクトニクスを考えたとき、マンツルの熱対流による湧き出しと吸い込みはいずれもプルーム状の柱構造をとるはずで、太平洋に見られるリッジ構造や地球各

地の沈み込み帯に見られる非対称な面構造になることは想像しにくい。とくに、沈み込み帯の形態は流体力学を全く無視した尋常じゃない構造であるが、プレートテクトニクス理論は「なぜ、あんな対象性の全くない面的な沈み込み方をするのか?その終焉はどうなるのか?」という疑問には一切答えてくれない。こんな基本的な疑問を持たずに沈み込み運動を論じることは、泥棒という概念を一切持たずに自分の持ち金がしばしば消えてしまう現象を、ただ不思議がっているのと同じ程度にお人よしである。

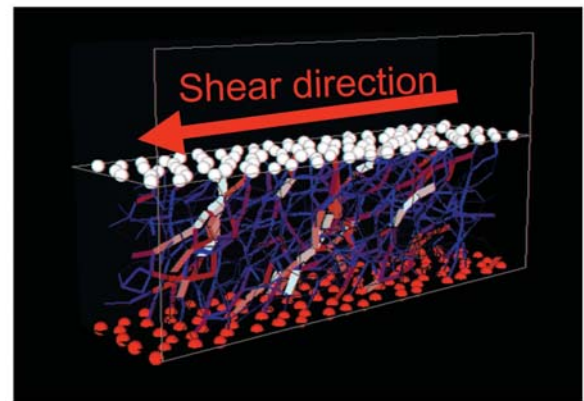
そこで、DEMシミュレーションを用いると、せん断強度を持つ物質（地殻を流体ではなく固体と暗黙に仮定する）が球殻状に球殻中心に向かう重力によって堆積している場に、リッジを模擬した線状の湧き出しと吸い込みの境界条件を与えるだけで自発的にプレート

運動や非対称の沈み込みが形成されるかどうかの思考実験を行うことが簡単にできる。

Fig. 8(a)は、初期設定で、ある厚みを持った球殻をDEM要素で形成し（その内側は剛体球核を仮定する）、この仮想地球の極と赤道上に1組の線状湧き出し(内部から表面に向かう強制速度)と吸い込み（表面から内部に向かう）を設定する (Fig. 8(b)). Fig. 8(c)は、長時間の時間発展を経たスナップショットである。計算開始直後は、湧き出し近辺でローカルな渦運動が発生し、吸い込みは最初線対称に起こる。しかし、Fig. (c)に見られるように、初期設定(Fig. (a))で赤道だったライン（赤線で示されている）が分裂しグローバルな回転運動が発生し安定する。つまり、1組の湧き出しと吸い込みだけでも、非対称な吸い込み運動が励起されることがこのDEMによる思考実験で確認された。

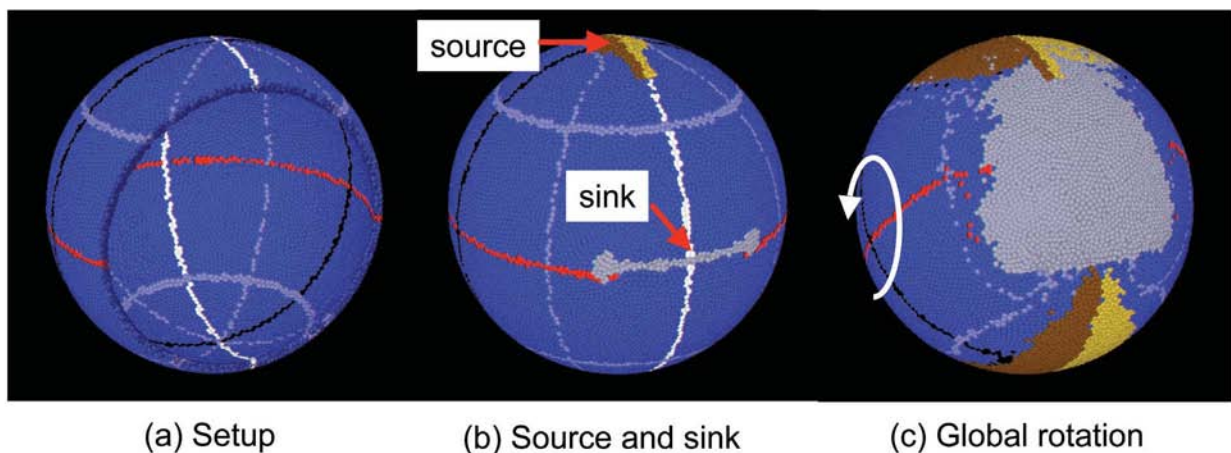


(a) experiment



(b) simulation

Fig. 7. Forces passing through granular media under shearing
(a) Laboratory experiment using photo elastic material (b) DEM simulation



(a) Setup

(b) Source and sink

(c) Global rotation

Fig. 8. Global flow and asymmetric subduction
(a) Initial setup (b) Boundary condition (c) Final configuration

3.2 産業利用への応用

DEMによるシミュレーションは、これまでに学術研究以外にも非常に多くの分野で利用されている。ここでは詳細は述べられないが、興味深いところでは、歩道橋による将棋倒し事故に関する裁判の参考資料として用いられたことさえある。HiDEMも、これまでにIFREEにおける地球科学研究以外の目的でも広く産業利用されている。その主要なもの、土木関係、印刷工業関係、ゴム工業関係などで、主として設計や研究開発に利用されている。ここで重要なことはHiDEMによる数値シミュレーションが産業利用されることで、産業における設計に必要な実験などにかかる経費や時間を減らせる他、新素材開発の新しいアイデアが思考実験から導かれることも期待できる。さらに、HiDEMの開発自体がソフトウェア産業にも大きく貢献できていることも忘れてはならない。

容易には実験できないDEMシミュレーションの産業利用例の典型として、鉱山開発やダム建設などの大規模土木事業の発破が挙げられる。Fig. 9は、実際のダイナマイトの圧力の時間変化関係と岩石の物性を入力としたシミュレーション例である。このシミュレシ

ョンによって粉碎効率や粉碎物の飛散距離など環境への影響が検討される。

4. むすび

DEMが科学や産業に重要な役割を果たし、その目的に答えるためにスパコンなどを使わずに高速計算を行うために作られたHiDEMが、多種多様な分野で応用されていることについて述べてきた。最後に、DEMがIFREEの中で果たせる役割について述べる。

残念なことに、地球科学分野と固体地球科学の一部では、1. はじめに述べた「モデル」と「思考実験」が混同されているように見受けられる。地下深く起こる直接観察不可能な現象に対して、地表で観測される地震波や構造探査によるデータや物質の年代測定データを元に地球内部のダイナミクスを考えることはロマンさえ感じられる探究活動である。しかし、あれやこれやと想像力を逞しく作られた数枚のポンチ絵だけから時間発展則を語ることが、果たして「モデルを作った」と言えようか？ これはむしろ思考実験に近い作業で、さらに穿った考え方をすると、「想像力はあっても未施行の思考実験」ではなかろうか？

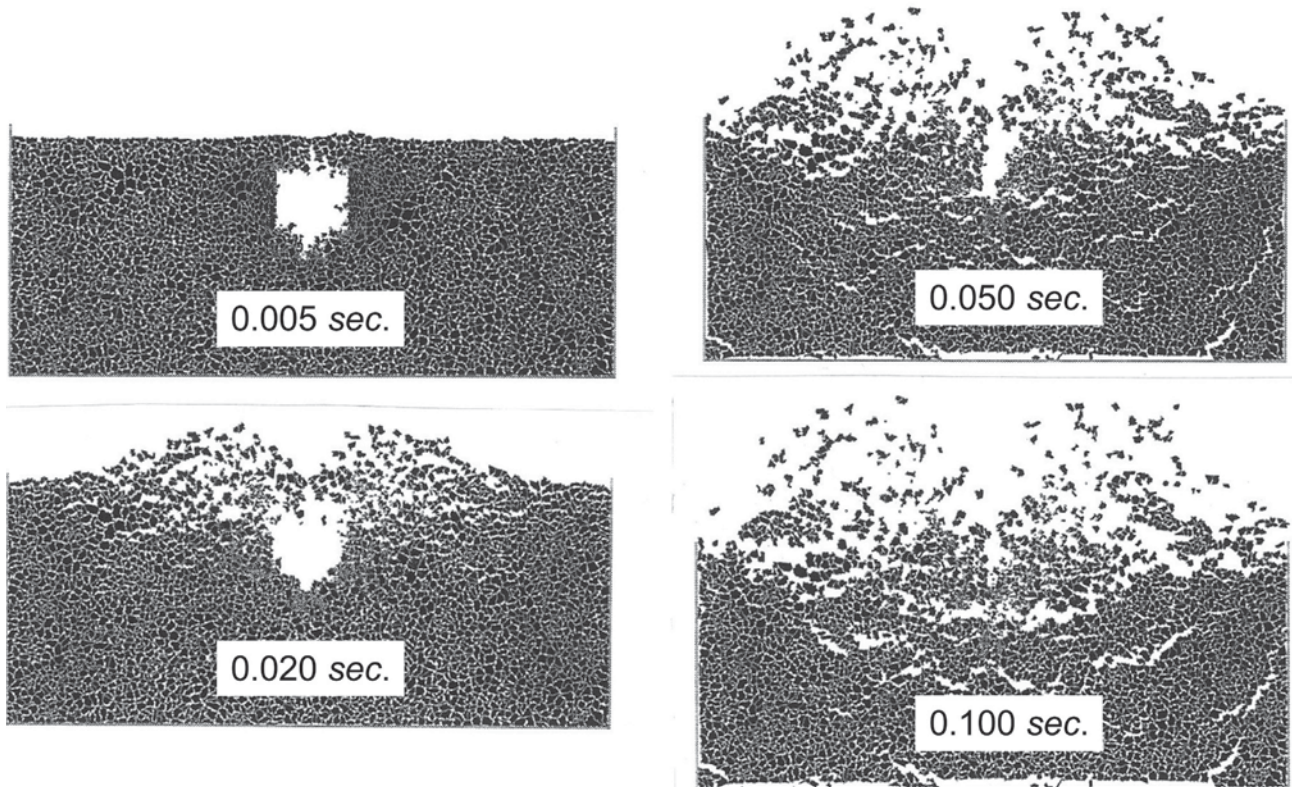


Fig. 9. Rock blasting simulation detonated by dynamite

確かに、3次元の地下空間で何種類もの物質が多様な温度圧力環境下で化学反応を伴いながら変形・流動する現象に対する共通理解はまだまだ得られていないし、それを表現する決定打的な支配方程式など存在しない。だから、地表のデータという非常に限られた情報だけからでも、思考実験によってその理解を深めることは非常に重要である。しかし、影響因子も膨大に多く、しかも長時間の時間発展に対する思考実験は、そもそも容易ではなく、これを手作業で行うこと自体に問題がある。コンピュータは忍耐強くどんな繰り返し計算に対しても文句を言わずにやってくれる。だから、IFREEで対象となるような固体地球科学における思考実験こそコンピュータに頼るべきである。

DEMは、形状と質量という属性の与えられた多数の要素どうしの相互作用に基づく位置の時間発展の思考実験であることを述べたが、集合体としての強度が自発的に変化するなど、その力学的アウトプットは非常に複雑である。これは、堆積岩のローカルな性質とグローバルな振る舞いに該当している。この事実は、例えば、沈み込み帯における付加体の形成と大地震の発生などを考えるためには非常に有効であることを示唆している。詳しくは、Sakaguchi & Hori, Hori & Sakaguchi (2010)などを参照されたい。そのほか、熱やその他の属性を

各要素に考えることで、DEMが固体地球科学分野における思考実験として活躍できる場は幾らでも存在する。今後、さらなる応用が広がることを期待して、本論を閉じることにする。

引用文献

- Cundall, P.A. (1971), A computer model for simulating progressive large scale movement of blocky rock systems, *Proc. Symp. Intl. Soc. Rock Mech*, Nancy, France, 1, 132-150.
- Cundall, P.A. and R. Hart (1992), Numerical Modeling of Discontinua, *J. Engr. Comp.*, 9, 101-113.
- Oda, M. H. Kazama, and J. Konishi (1988), Effects of induced anisotropy on the development of shear bands in granular materials, *Mechanics of Materials* 28, 103-111.
- Sakaguchi, H. and T. Hori, Hori, T. and H. Sakaguchi (2009), *in preparation*.
- Yoshioka, N. and H. Sakaguchi (2005), An experimental trial to detect nucleation processes by transmission wave across a simulated faults with a gouge layer, *Advances in Geosciences*, Vol.1: Solid Earth, 105-116.