

# 計算地球物質科学の開拓

---

計算地球物質科学による  
地球内部物質の物性  
評価計算

鳥海光弘  
(ifree/FSGS,UT)

# 研究グループの構成

---

- Members;
- M. Toriumi, Y.Ito, T. Sakai, Matuttis Hans-Georg (IFREE, GSFSUT, TETU)
- S.Tsuneyuki, K.Akagi, J.Tsuchiya, Y.Yoshimoto, Y.Tateyama (DPUT)
- Y.Kawamura, H.Sakuma, T.Tsuchiya (TIT),
- M.Kameyama(ESC)

# Rheology of Mantle and Crust

---

- Flow law and friction law: diffusion creep and dislocation creep
- Water effects on rheology
- Anisotropy generation by solid flow
- Grain size reduction and growth by polycrystalline flow

# Targets

---

- 1, 地球深部を構成するペリクレーヌ、  
MgSiO<sub>3</sub>ペロブスカイトの転位構造、転位運動、自己拡散係数、粘性係数の下部マントルにおける変化、
- 2, 地球内部を構成する鉱物の不純物としての水の状態、および物性計算、
- 3, 化学反応、物質移動、流体移動、クラック形成などを含む剪断帯の力学挙動

# Methods

---

- 第一原理計算分子動力学法を空孔拡散および鉱物中の水に適用し、その状態変化を明らかにする。
- 2体力による分子動力学を駆使して自然系に近い転位密度の転位構造、転位運動を地球内部の高圧高温状態で明らかにする。
- 精密な拡散係数を決定することで下部マントルの粘性率を明らかにする。
- 鉱物の脱水・吸水反応を含み、水が移動する剪断帯の流体分布の変化と対応する構成則をミクロな粒子系の物理過程から計算実験をおこなう。

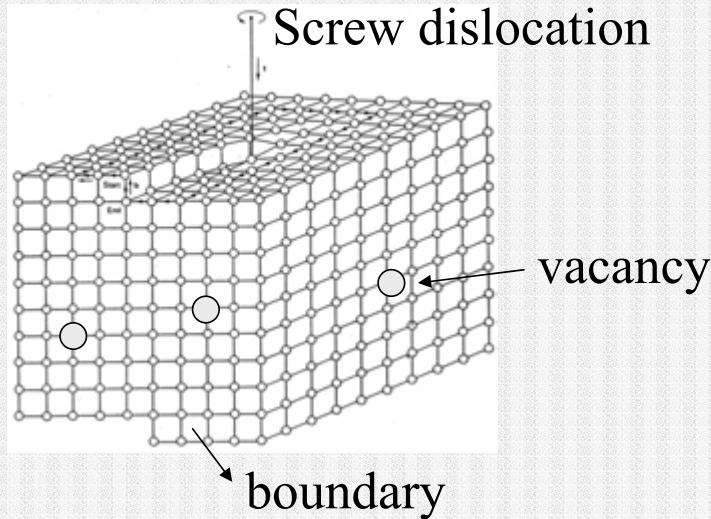
# 今年の第一4半期までの成果

---

- Full nodes simulation of diffusive creep
- Vacancy migration at 150GPa and 6000K
- Decrease of Newtonian viscosity above 50 GPa in the lower mantle

# Introduction of vacancy, dislocation, and boundary

---



Basic cell  
+  
Periodic boundary

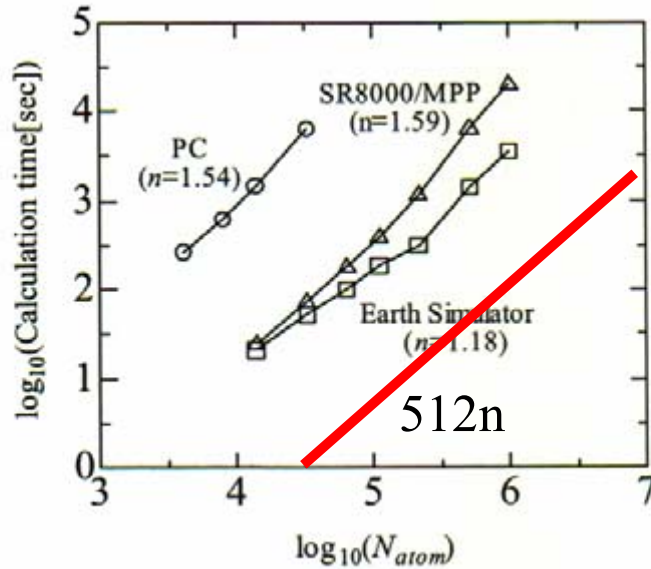


Schottky defect  
formation  
migration

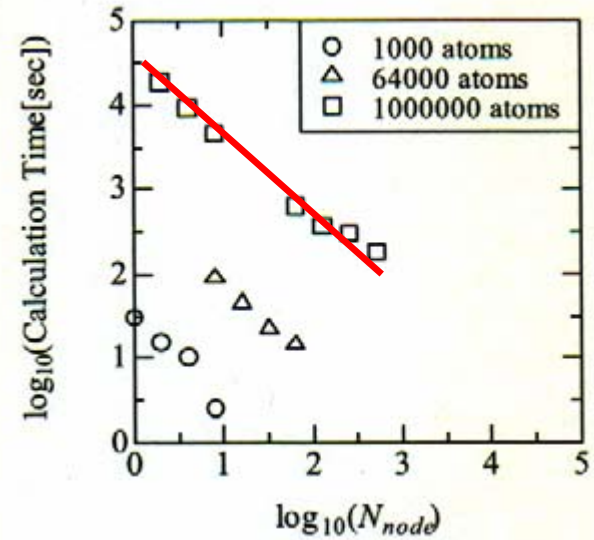
# Comparisons of ES and other supermachines

By Ito, 2003

8 nodes



100 steps



# Lattice diffusion of MgO

	$E_m^*$ (kJ/mol)	$E_f^*$ (kJ/mol)	$E^*$ (kJ/mol)
This Study	202-215	384	586-599
Ita and Cohen (1997)	190	237	427
Sempolinsky and Kingery (1980)	220	-	-
Ando et al. (1983)	-	-	536
Yang and Flynn (1994)	243	-	667

# Results 1 Drastic error reduction and negative activation volume

Relaxation time dramatically decreases error!  
Rapid diffusion at higher pressure !

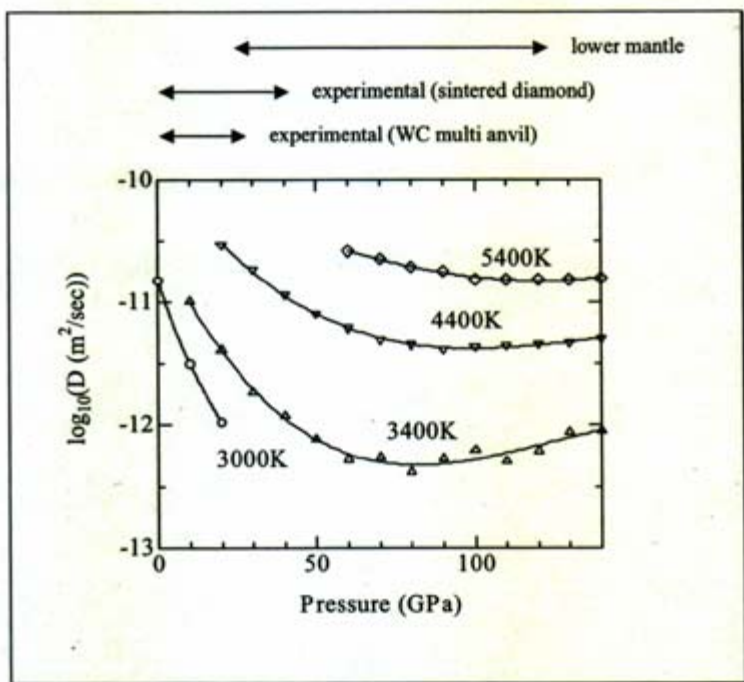
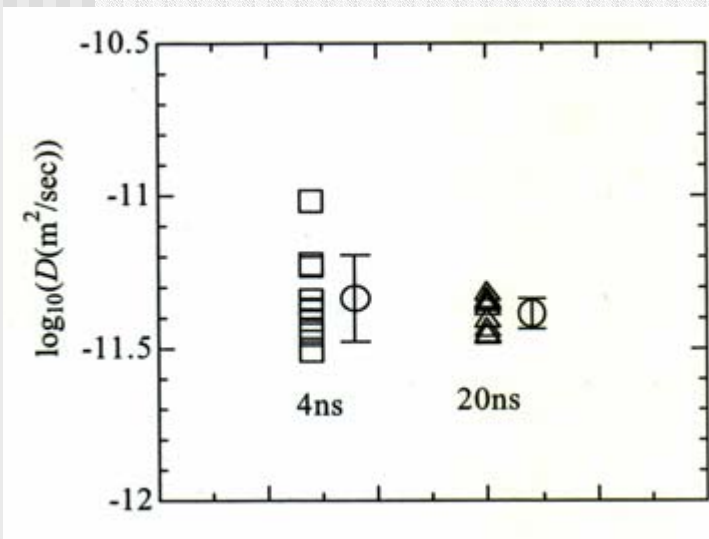
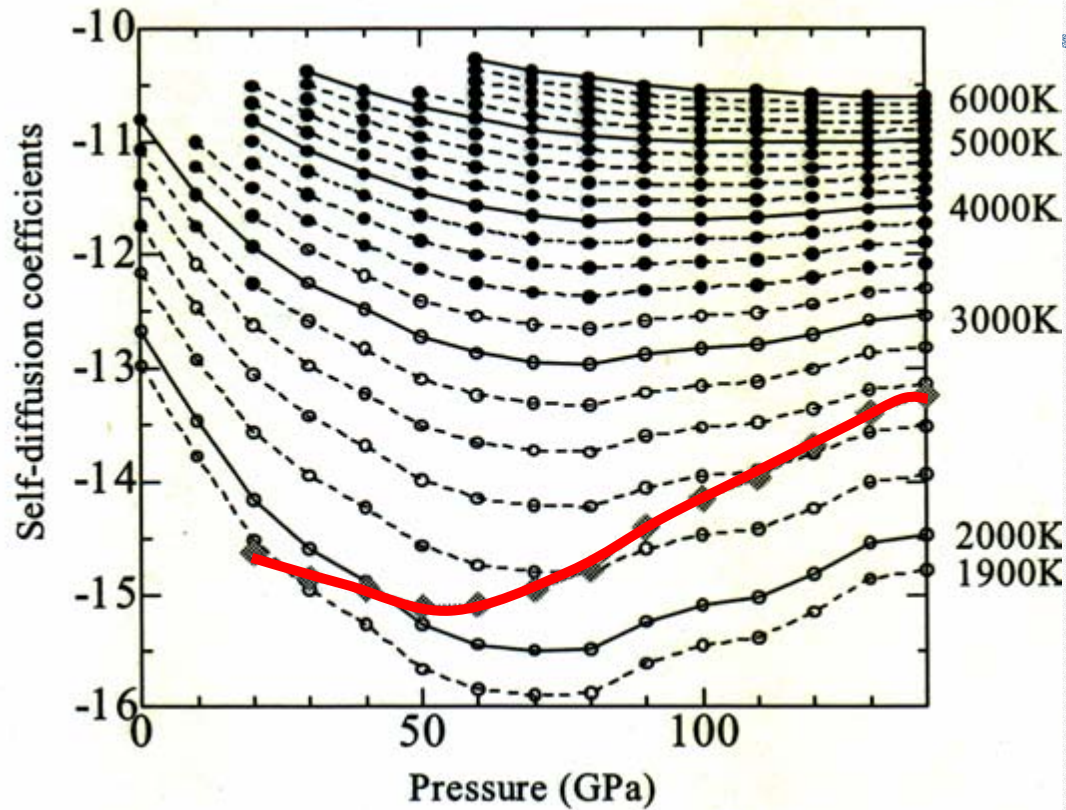


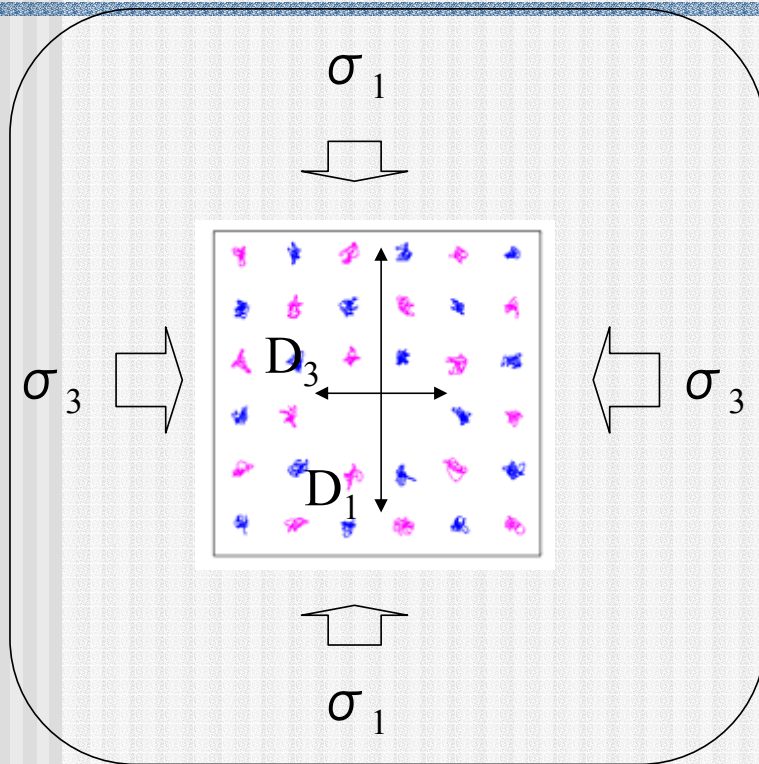
Figure 5.6 Examples of pressure dependence of self-diffusion coefficients. All data is fitted by third order polynomial.

## Result 2. Viscosity profile of lower mantle (Ito 2002)



2003年度後半期

# 1, 拡散クリープの直接シミュレーション



異方的な応力場を  
シミュレーションで加え、粒内  
拡散の異方性( $D_1/D_3$ )を検出

直接的なシミュレーション



- 粒内拡散の変形メカニズムの  
微視的な理解
- 経験式に頼らない、構成方程式の  
シミュレーションからの推定

By Ito

# 現状

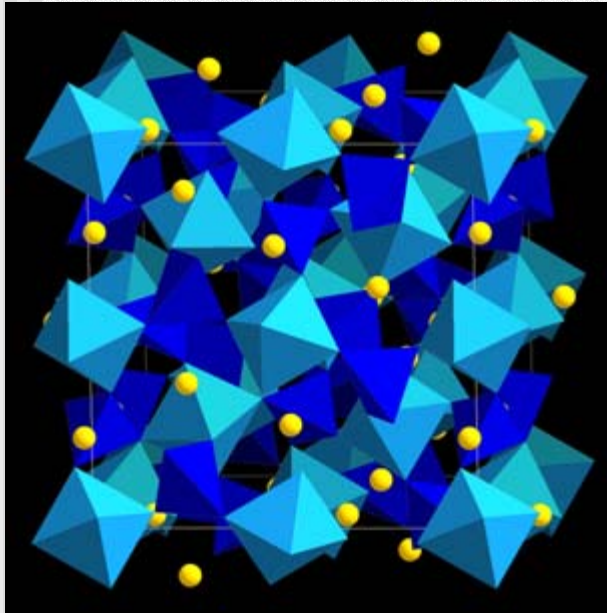
- 原子数、64000～ $10^6$
- 高い封圧を加えないと計算が安定しない  
(50GPa以上)
- 差応力が大きすぎると系が崩壊する  
(限度： $|\sigma_1 - \sigma_3| < 5\text{GPa}$ )
- 拡散係数に精度が必要なため、ステップ数を多くとる必要があり( $10^7$ step)、時間がかかる

# 目標

- 実験で知られている粒内拡散のニュートン性( $\eta \propto |\sigma_1 - \sigma_3|$ )の検証
- シミュレーションから、粒内拡散の構成方程式を与える

## 2, 地球シミュレータでの大規模シミュレーションに向けた第一原理分子動力学法の2階層並列化とテスト計算

吉本芳英(東大物性研), 常行真司(東大院理)



Pyrope ( $\text{Mg}_3\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$ )

### 本年度の成果

造岩鉱物やその融体の大規模シミュレーションに向け,

- バンド(1電子軌道)インデックス(ノード内)
- 平面波基底関数のインデックス(ノード間)

の2階層でプログラムの並列化を行い, Pyrope (Garnet)のシミュレーションを行って並列化性能を検証した。

# Pyrope (160原子) の電子状態計算 (地球シミュレータによる並列化テスト)

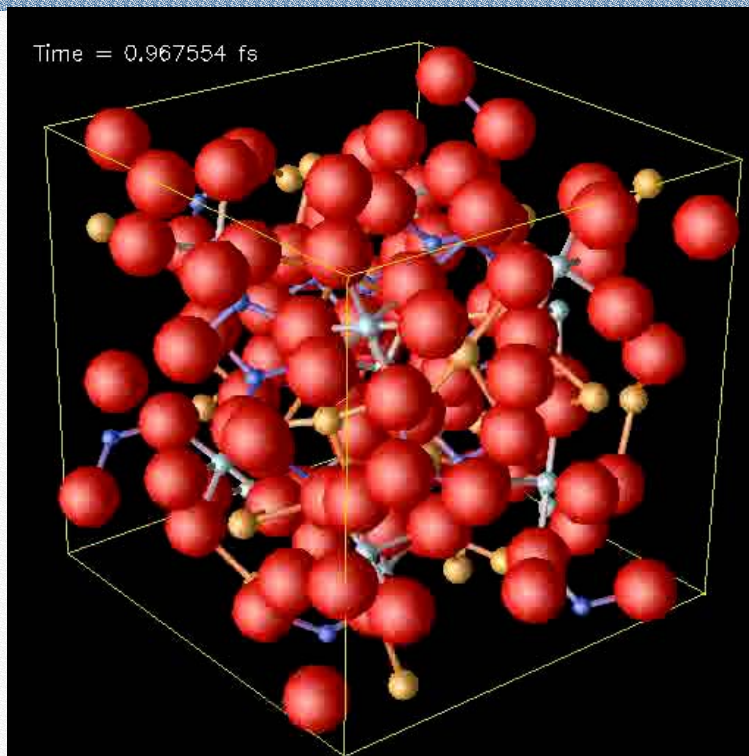
	Total (初期化を含む)		電子状態計算		力の計算	
	時間(秒)	加速率	時間(秒)	加速率	時間(秒)	加速率
1	1552.21	1.00	1494.60	1.00	20.89	1.00
2	831.58	1.87	779.02	1.92	10.84	1.93
4	472.50	3.29	420.79	3.55	5.90	3.54
8	292.74	5.30	241.52	6.19	3.41	6.13
10	259.96	5.97	207.60	7.20	2.92	7.15

全体の加速率99%、107ノード使用時の1ノードあたりの性能は30GFLOPS以上

参考: 日立SR8000 1ノード(ピーク性能12GFLOPS)での計算時間

10948.63      0.14      10818.74      0.14      324.38      0.06

# Pyrope (160原子) の第一原理MD計算 (地球シミュレータによる動作テスト)



Pyropeの単位胞一個 (160原子)

温度: 2000K

時間刻み: 1 MD step  $\sim$  1 fs

使用したリソース

= 10ノード\*33時間

(0.9ps相当)

Mg: brown

Al: light blue

Si: deep blue

O: red