

先端的固体地球シミュレーションコードの開発

課題責任者

古市 幹人 海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門 数理科学・先端技術研究開発センター

著者

陰山 聡*¹, 大野 暢亮*², 横井 研介*³, 西浦 泰介*⁴

*¹神戸大学大学院 システム情報学研究科, *²兵庫県立大学 シミュレーション学研究科, *³Cardiff 大学 工学部, *⁴海洋研究開発機構 付加価値情報創生部門 数理科学・先端技術研究開発センター

本課題では数値手法を開発する研究者が集まり、独自のアプリケーション並びに数値手法開発により、付加体形成やマントル・ダイナモ・地盤工学等の諸課題において、既存のアプローチでは扱いが困難な時空間解像度や物性に起因する数値的悪条件といった問題の解決に取り組んでいる。本年度は、粒子法の一つである離散化要素法 (DEM) を用いた実スケール数値砂箱実験の実施と、色砂を用いたコードの検証に進捗があったため、本稿で紹介する。

キーワード: DEM, 付加体, 粒子法, 地盤工学

1. 緒言

本課題において、固体地球科学に関する大規模シミュレーションのコード開発を行っている。近年はこれまでの格子法流体のコードに加えて、粒子法の大規模計算に取り組んでいる。我々の特徴は、粉体挙動を扱う離散化要素法 (DEM) を対象にしていることにある。DEM は非線形で複雑な粉体粒の運動が直接解析できることから、固体地球科学、粉体物理学はもとより、防災、地盤工学等において幅広く用いられている。しかしながら既往の取り組みは計算コストの制約から、かなり粗視化した計算であり、精度・確度の低い議論になりがちなのが課題である。そこで、DEM の大規模計算がこの問題解決の糸口となる。しかしながら、DEM は他の粒子法と異なり、接線方向の接触相互作用を持つため、粒子数ではなく粒子間接触により計算コストが律速され、それにたいする並列化の難易度も高い。そこで近年、我々は DEM の並列化問題の解決に取り組む、MPI 領域分割の変更に伴う計算コストの再分配を非線形問題としてとらえた、反復法型のロードバランサーを開発[1]するなどして、世界最大レベルの粒子数、24 億粒子を用いた数値砂箱実験の実施に成功し、断層形成の様子の成因について自発的に形成される応力アーチが関係する可能性を指摘した[2]。本年度は、粒子法負荷分散の手法改良と、圧子を伴う数値砂箱実験の実施により海山を伴う付加体形成について新しい知見を見出し、また地盤工学への適応として、色砂を使った混合実験のデジタルツインの作成において大きな成果があった。本稿ではこれらについて説明する。

2. 粒子法動的負荷分散手法の改良

リアリスティックな地形を伴う大規模津波遡上計算や地すべり計算においては、粒子分布が複雑な形状を取ることがある。しかしながら、これまでのスライスグリッ

ド型のフレキシブルな直行領域分割を用いた領域分割法では、複雑な形状の縁周辺において、分割領域のアスペクト比が過大に大きくなり計算効率の低下や使用するメモリの偏在化を招く問題があった。そこでこの問題を緩和するために、これまで列毎に同数だけ領域分割していたアルゴリズム (図 1(a)) を改良し、列毎に異なる領域分割数を許すように変更した (図 1(b))。これにより、粒子局在化に伴う領域分割のアスペクト比を下げることで

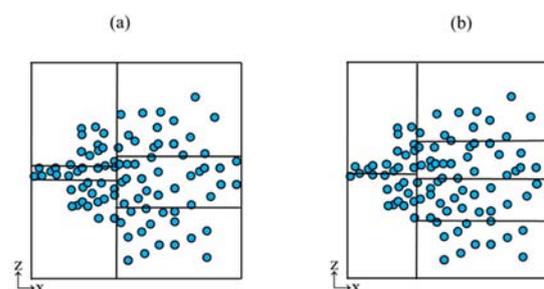


図 1: (a) 各列に 3 領域分割した例と (b) 本年度新しく実装した列毎に異なる分割数 (左が 2 分割、右が 4 分割) の例。

きた。

この改良に伴い、コードの大幅な書き換えが必要であったため、その Verification を行った。図 2 において、シングル MPI プロセスと 10MPI プロセスでの DEM 計算結果比較を示す。検証の結果、シングルプロセスの計算結果 (図 2 (a)) を、10 プロセスを用いた計算結果 (図 2 (b)) が再現できている事を確認した。本テストは非常に精度の高い検証問題であり、粒子間相互作用の粒子への足しこみ計算順序を変更するだけで丸め誤差の蓄積により

(図2 (c)) のように結果が大きく異なる分布となる。つ

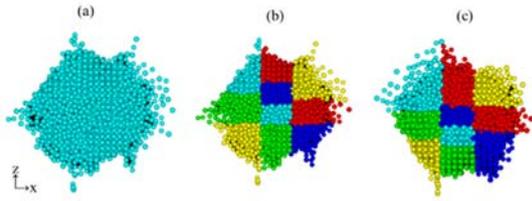


図 2: 初期状態は円柱形に配置した粒子群からの崩壊を (a) 1MPI プロセス計算 (b) 10MPI プロセス (左から 3・4・3 ランク列毎に分割) で計算した結果。 (c) はスレッド並列で粒子計算の足しこみ順序を変えた場合。

まり足しこみ順序の整合性を含めて、我々の実装は DEM を正しく並列化できていることを示している。図 3 は新しい領域分割法を用いた並列計算のスケールアップである。計算には地球シミュレータ (ES) と Intel Xeon Phi 7210 (Phi: 64 cores) を使用した。図において異なる粒子数の問題が同じ直線にのことは、弱スケールアップ、異なるコア数において直線に乗ることは強スケールアップを示している。ES においては、強スケールアップが 1 コア計算から 1000 コア計算まで確認することが出来た。これらの結果から、開発したコードが円筒型の充填問題のような実用的な問題においても、よい並列化・スケールアップ性能を示すことが分かった。そして、新しい領域分割法により ES を 256 ノード用いた場合におおよそ 4.1% の性能改善がみられた。

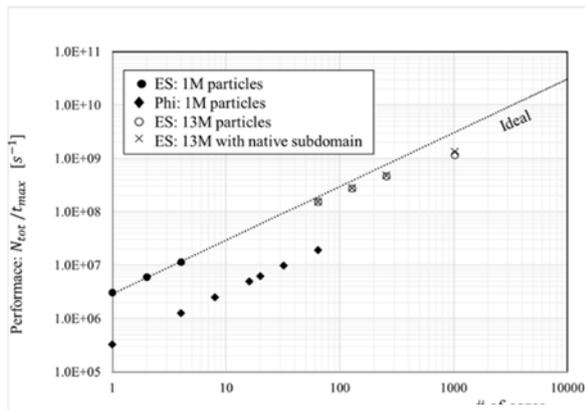


図 3: 円筒に充填した DEM 粒子計算のスケールアップ

3. 圧子をともなう数値砂箱実験

海山を伴うプレートの沈み込みがどのような地形効果と応力場を発達させるのかは、巨大地震の成因や内部構造の理解において重要な問題である。現状においてそれらは定性的な理解によるものがほとんどであり、観測に基づく定量的な議論は難しい。そこで、砂箱実験が付加体

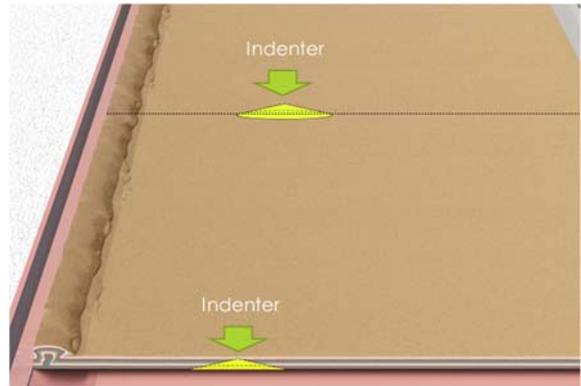


図 4: 圧子を伴うシミュレーションの初期設定

形成のスケールアナログモデルとして、長年にわたって地球科学や物質探査において研究されてきた。しかしながら粉粒体の 3 次元的な内部可視化が出来ない事が課題である。そこで DEM による数値シミュレーションによるデジタルツインを用いた研究を実施している。

本年度は、前年度までのコード開発に加えて、本年度は海山の沈み込みを模擬する圧子と周期境界条件を導入しリアルスケールの数値砂箱実験を実施した。実験設定は砂層の短縮実験となり、短縮と垂直な方向について周期境界条件を課し、その他の壁面については摩擦を伴う平面となっている。圧子は底面に粒子を固定することで設定する (図 4)。

このような条件において、圧縮実験を行ったものが図 5 となる。まず、バックストップに押し込まれた砂層は、断層を形成してポップアップとなり、付加体のような形状を作りだす、そこに圧子が潜り込むことで付加体側に

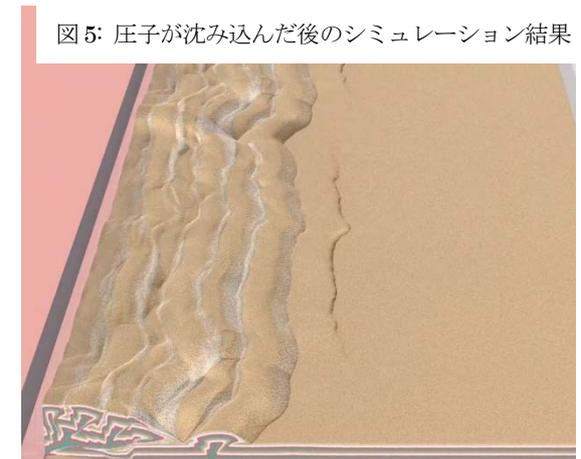


図 5: 圧子が沈み込んだ後のシミュレーション結果

凹状の地形が形成される。これらは、実際の地形とも合致している。

圧子が沈み込んだ状態を解析すると圧子 (図 6 (a) 白矢印) の直上に変形を逃れる山状領域が形成され、その上端からデコルマ (図 6 (a) 赤矢印) が形成されていることが分かった。同様の状態は過去の室内砂箱実験でも確認されている。さらにこれらの内部構造が、圧子の高さほとんど依存しないことがシミュレーション結果から分かつ

た (図6 (b, c))。

これらは、圧子の沈み込みが限界安定傾斜角(クリティカルテーパー理論)によっておおよそ記述されることを意味している。つまり、圧子の沈み込みは、底面摩擦が周囲よりも高い限界安定傾斜角を作り出すことが本質である。圧子が付加体深部に入り込むまで傾斜を安定させることが出来るため、結果として凹型の地形が形成される。これにより非変形領域は圧子の高さの影響はほとんどないことを説明できる。

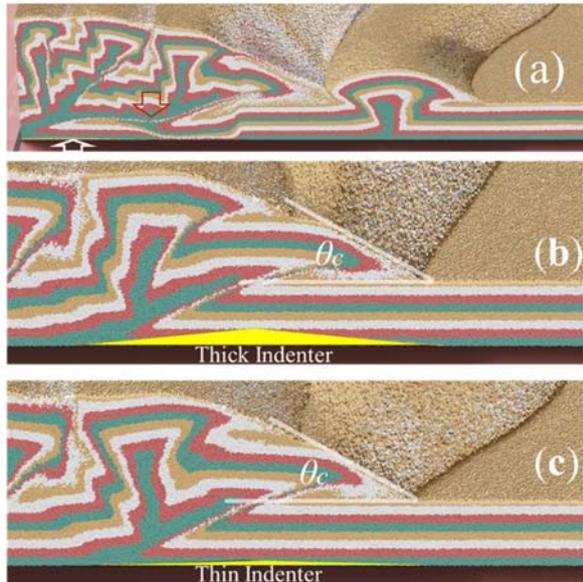


図6: 圧子直上の深さ方向の断面図 (a) 沈み込み後
(b) 高い圧子による変形 (c) 低い圧子による変形

また図6 (a)において圧子の背後に低い応力負荷において沈み込む領域は低速領域となるため、サブダクションチャネルとの解釈が可能である。このことは、プレート摩擦の水平方向の不均質性が、サブダクションチャネルのサイズに大きく寄与することを示している。

4. 色砂実験のデジタルツイン開発

粉粒体の混合は、地盤工学、化学工学のみならず薬品製造など、様々な分野で活用されている。しかしながら、その内部で起こる、複雑なプロセスについては直接観測が困難であることから詳細を把握することは難しく、混合機器の設計等では経験則に基づく最適化検討が主に行われている。そこで、本件で開発したDEMによって、混合プロセスのデジタルツインを開発した[3]。これは、粒状体の内部ダイナミクスの解析および、地盤工学を念頭に置いた混合機器の最適化設計に貢献できるツールとなる。

本件では、デジタルツインとしての性能を検証するために、色砂を使った室内実験データと、DEMシミュレーションの直接比較試験を行った。実験設定は、シリンダー容

器に入った黒と緑に色づけされた $D_{50} = 0.55 \text{ mm}$ の砂層に、2枚羽ブレードを沈めたものになる。ブレードが回転することで、周囲の砂が混合される。図7に、室内実験と数値シミュレーションの結果を示す。数値シミュレーションでは、最大粒径 r_{max} が実験値とほとんど同じ径 $r_{max} = 0.5 \text{ mm}$, $D_{50} = 0.92 \text{ mm}$ (1.2M 粒子) のものと、その倍である $r_{max} = 1.0 \text{ mm}$, $D_{50} = 1.84 \text{ mm}$ (11M 粒子) の場合について計算を行った。様々なキャリブレーションを試みたが、回転摩擦項の影響が最も大きく、これを適切に設定することで、室内実験の様相を両モデルにおいて再現することが可能となった。つまり、定量的な議論においては、粒子サイズを大きくすることである程度は現象を粗視化し計算コストを下げたモデル計算が有効であることを示している。

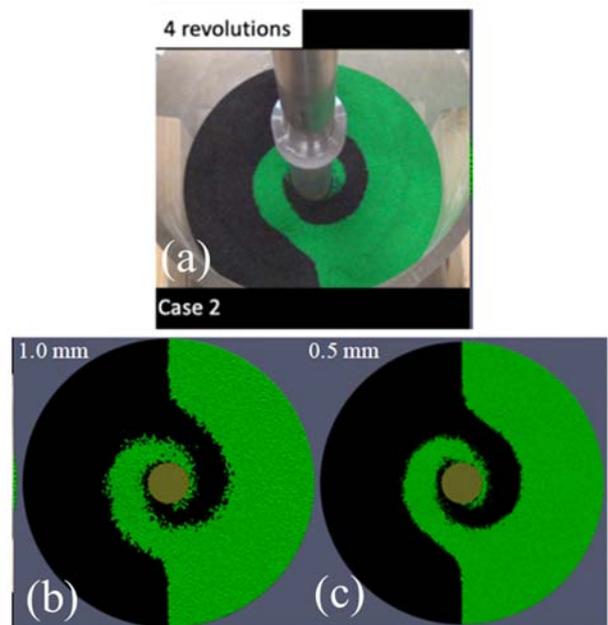


図7: ブレードが4回転したときの、(a)室内実験結果、(b) $r_{max} = 1.0 \text{ mm}$ 、(c) $r_{max} = 0.5 \text{ mm}$ でのDEM計算結

一方で、トルクによる比較を図8において示す。トルクの方は、粒子サイズが小さくなるにつれて実験値に収束する。同様の振る舞いは、異なる砂層の厚さなどが異なる実験設定においても確認された。これらのことから、定量的な議論を含むデジタルツインの作成には、計算に用いる粒子サイズつまり粒子数が重要な役割を担うことが分かった。

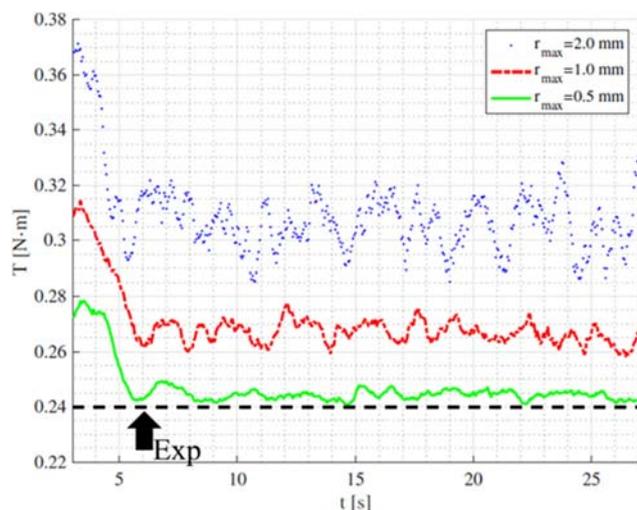


図 8: 異なる粒径を用いた DEM 計算においての、プレート軸にかかるトルクのと、室内実験から求められた定常状態でのトルクのと

謝辞

本研究は、JSPS 科研費 JP18K03815 と JP19H02008 の助成を受けて実施されたものです。

文献

- [1] Furuichi, M. & Nishiura, D. Iterative load-balancing method with multigrid level relaxation for particle simulation with short-range interactions. *Comput. Phys. Commun.* 219, 135-148 (2017).
- [2] M. Furuichi, D. Nishiura, O. Kuwano, A. Bauville, T. Hori, H. Sakaguchi, 'Arcuate stress state in accretionary prisms from real-scale numerical sandbox experiments' *Scientific Reports* (2018), 8, 8685, DOI:10.1038/s41598-018-26534-x
- [3] Chen, J.; Furuichi, M.; Nishiura, D. Discrete Element Simulation and Validation of a Mixing Process of Granular Materials. *Materials* (2020), 13, 1208.

Development of Advanced Simulation Tools for Solid Earth Sciences

Project Representative

Mikito Furuichi Center for Mathematical Science and Advanced Technology,
Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

Authors

Akira Kageyama *¹, Nobuaki Ohno *², Kensuke Yokoi *³, Daisuke Nishiura*³

*¹ Kobe University *² University of Hyogo, *³Cardiff University, *⁴ Center for Mathematical Science and Advanced Technology, Research Institute for Value-Added-Information Generation, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

We simulate a sandbox experiment with realistic particle sizes by parallel implementation of the Discrete Element Method (DEM) for a large parallel computer system. We investigated the stress state with a seamount (indenter) entering the accretionary prisms. The role of indenter was significant as a frictional heterogeneity to control the tomography (taper angle), material transport and stress chain distribution. We also developed the digital twin of mixing process of granular material for geotechnical engineering purpose.

Keywords : DEM, accretionary prism, parallel computing, digital twin, mixing granular system

1.Introduction

In this project, we are developing numerical tools of large-scale solid earth simulations. Recently, in addition to the conventional Eulerian method, we have been working on the large-scale particle method, especially Discrete Element Method (DEM) that deals with powder behavior. We developed an iterative load balancer to change the MPI domains to optimize the workload of each subdomain as a nonlinear problem [1]. We succeeded to implement this technique to our DEM code and performed a numerical sandbox experiment using 2.4 billion particles that was the world record in the number of DEM particles. In that simulation study, despite the nearly uniform initial conditions, macro-scale undulations of faults, which are similar to those observed in the trenches of an accretionary prism, appear. We reveal that these undulations are caused by the formation of stress arches [2]. In this fiscal year, we performed new experiment with indenter to investigate the accretionary prism formation with seamount. In addition, to utilize our technologies in the geotechnical engineering, we developed the digital twin of mixing granular system.

2. The real-scale numerical sandbox experiments to investigate the accretionary prism formation with seamount

The sandbox experiment is known as a scaled physical analog model of accretionary prisms. Thus, understanding the processes inside the sand layer is the interesting challenge of the geology. However, measuring stress states in laboratory sandbox experiments is still practically infeasible. Here we performed real-scale numerical sandbox experiments using the Discrete Element Method (DEM). We investigated the processes associated with a seamount (indenter) entering the accretionary

prisms.

Numerical experiments of horizontal shortening of a layer with a indenter were performed. Indenter was modeled by the particles locked to move with bottom wall under the periodic side boundary condition.

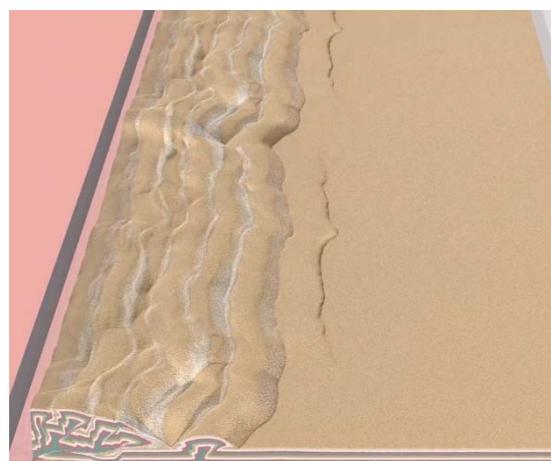


Figure 1: Result of numerical sandbox simulation with indenter.

Fig.1 shows the result when the indenter touch to the backstop wall. The surface convex appears at the place of indenter. This structure is consistent with the earlier sandbox experiment and nature observations. The more detail analysis showed that the role of indenter was significant as a frictional heterogeneity to control the tomography (taper angle), material transport. On the other hand, the contribution from the height of indenter was not significant. As subduction progresses, decollement is formed from the front of indenter. Amount of sediment covering the

indenter was transported inward without deformation. This mechanism potentially constructs the thick low-velocity zone into the plate boundary, the subduction channel.

3. Development of digital twin of mixing color sand experiment

The mixing processes of granular materials have gained wide interest among various fields of science and engineering. We conducted digital twin of mixing granular system using the discrete element method (DEM) in comparison with experimental works on mixing color sand. This technology contributes to the understandings of invisible granular dynamics in the experimental apparatus and facilitate the future designs and optimization of similar mixing systems for example in geotechnical engineering.

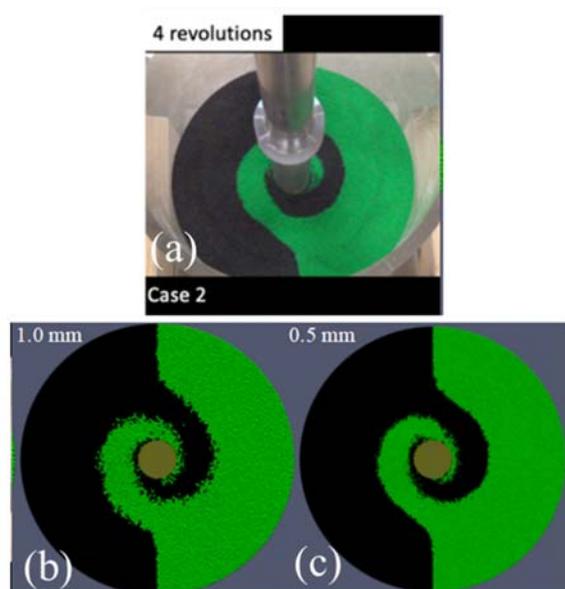


Figure 2: Comparison of surface mixing patterns after the four revolutions of mixing blade (a) real experiment, DEM simulations with (b) $r_{max} = 1.0$ mm and (c) $r_{max} = 0.5$ mm

To demonstrate the quality of digital twin, we carefully calibrate initial packing densities and compare the surface mixing patterns. The surface patterns from the simulation with different size of particles were qualitatively consistent with the patterns observed in the experiment as shown in Fig. 2. On the other hand, in quantitative point of view, we also compare the steady-state torques on the mixer head in Fig. 3. The effect of particle size on the simulation results has been clarified. With the particle size approaching the actual particle size, consistent torques and mixing patterns indicate the capability of the DEM code for studying the particular mixing process.

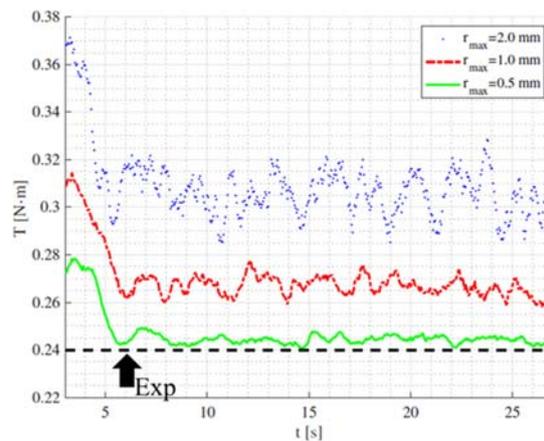


Figure 3: Comparison of torques on the mixer head measured during the DEM simulations with different particle sizes. The state-state value in the experiments represented by dashed lines.

Acknowledgement

This study was supported by Grant-in-Aid for Scientific Research (JP18K03815 and JP19H02008) from the Japan Society for the Promotion of Science (JSPS).

References

- [1] Furuichi, M. & Nishiura, D. Iterative load-balancing method with multigrid level relaxation for particle simulation with short-range interactions. *Comput. Phys. Commun.* 219, 135-148 (2017).
- [2] M. Furuichi, D. Nishiura, O. Kuwano, A. Bauville, T. Hori, H. Sakaguchi, 'Arcuate stress state in accretionary prisms from real-scale numerical sandbox experiments' *Scientific Reports* (2018), 8, 8685, DOI:10.1038/s41598-018-26534-x
- [3] Chen, J.; Furuichi, M.; Nishiura, D. Discrete Element Simulation and Validation of a Mixing Process of Granular Materials. *Materials* (2020), 13, 1208.