

先端的粒子法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

古市 幹人^{*1}, 陰山 聡^{*2}, 大野 暢亮^{*3}, 西浦 泰輔^{*1}

^{*1}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, ^{*2}神戸大学大学院, ^{*3}兵庫県立大学 シミュレーション学研究科

本課題では数値手法開発に明るい研究者が集まり、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・マグマの諸課題において、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、離散化要素法 (DEM) を基にした大規模粒子法計算コード DEPTH (DEM based Parallel mulTi-pHysics simulator) を用いた付加体岩石の力学実験の再現、地滑りシミュレーションの実施、及び粒子混合機器設計の最適化についての進捗を本稿で紹介する。

キーワード : DEM, 付加体, 地滑り, 3 軸試験, 粒子混合

1. 緒言

本課題では、粒子法の一つである離散化要素法 (DEM) を用いた大規模計算コード DEPTH (DEM based Parallel mulTi-pHysics simulator) を開発してきた。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、それに対する並列化の難易度も高いのが特徴である。我々は DEM の並列化問題の解決に取り組み、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た。砂箱実験は、付加体形成過程のスケールアナログモデルとしてよく知られており、地質学における研究対象となっている [2]。しかしながら、砂と岩石の挙動の違いが砂箱シミュレーション研究の課題であった。そこで、本年度に岩石破壊挙動を再現するために DEM モデルを拡張し、房総半島で採取された実付加体サンプルの 3 軸圧縮実験の数値再現実験を実施した。また、防災のアプリケーションとして DEM を用いた地滑りシミュレーションに取り組んだ。地滑り計算では、粒子分散が 3 次元的に大きく変化するため、既往の 2 次元領域分割を 3 次元に拡張する必要があった。また DEM の地盤工学への適応として、ブレード回転を用いた水中での色砂混合実験シミュレーションを実施し、最適なブレード角を予想することに成功した。

2. DEM による岩石 3 軸圧縮実験の再現

付加体形成時に、プレートとともに沈み込んだ軟弱な堆積物が、いかにして巨大地震を起こす能力を獲得するのか？我々は、この疑問を解決すべく、粒状体層の圧縮実

験シミュレーションに取り組んできた。しかしながら、近年の地質研究によって重要性が指摘されている断層運動に伴う剪断強度の大変化と、付加体形成における断層発達過程の関係をシミュレーションにより明らかにするには、マクロな断層のせん断強度を適切に再現するミクロな粒子間相互作用モデルが必要であるが、従来の接触摩擦に基づく DEM モデルではそれは困難である。そこで、に粘着力を加えた岩石相互作用モデルを開発した (図 1)。

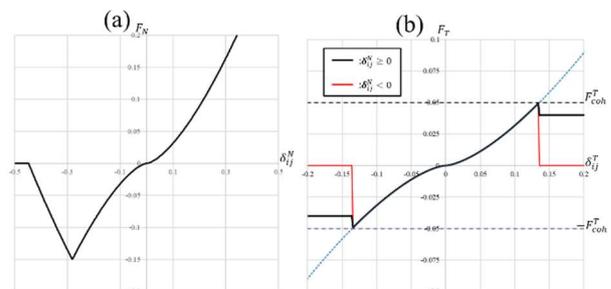


図 1 実装した相互作用モデル (a) 法線方向、(b) 接線方向

初期配置において接触している、もしくは一定距離以内にある粒子間のみ粘着力は設定され作用する。粘着力は粒子が離れようとする、または接線方向にズレようとしたときに引力として働く。ミクロな意味での破壊は、粘着力が切れることで起きる。その判定は、粒子間距離が法線方向に一定間隔離れるか、粒子の回転により粒子間の接線ズレが一定距離を超えるかにより行われる。一度切れた粘着力は元には戻らない。

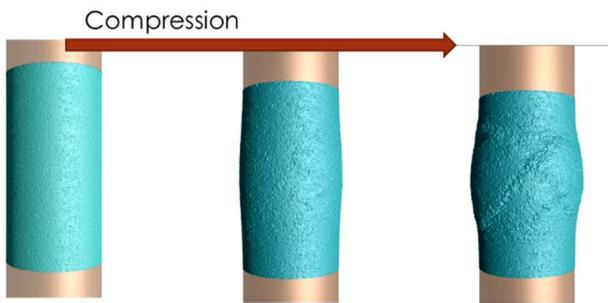


図2 DEPTHを用いた三軸圧縮試験の可視化

岩石挙動を定量的に再現するために、開発したDEMモデルを用いた三軸圧縮実験により、剪断強度（マクロ）を再現できるように摩擦を調整することを試みた（図2）。対象としたのは房総半島で採取した母岩と断層岩を用いて機構で実施した三軸実験である。粘着力においては、支配的な2種類の調整パラメータがあり、封圧 OMPa で粘着力と、内部摩擦角を再現するようにキャリブレーションを実施した。これにより、図3のような結果を得ることができた。

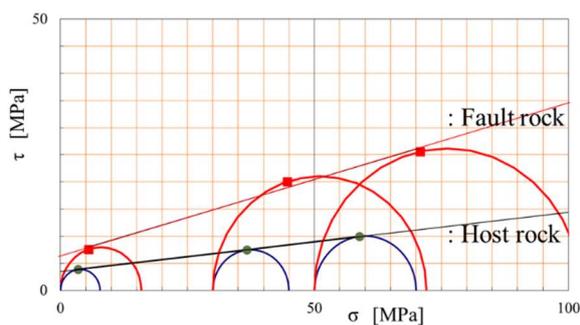


図3 母岩と断層岩の強度比較

DEMモデルが変形岩石化作用によるせん断強度増加を経た断層岩挙動を再現できており、かつ異なる封圧における結果が直線に乗っていることからマクロな特性として (c, ϕ) を求めることが可能となる。結果、表1のように実験値をほぼ再現するDEMモデルを求めることができた。

	Slope of envelope: ϕ [Deg]		Cohesion: c [MPa]	
	Host rock	Fault rock	Host rock	Fault rock
DEM	6.26	14.93	3.50	6.12
Exp	6.24	15.20	3.72	5.10

表1 実験値とシミュレーションの比較。

これらの研究開発により、次年度以降、現実的な岩石パラメータを用いた付加体形成実験が可能になった。

3. 地滑りシミュレーション

地滑り災害の精緻な再現を目指して、DEPTHを用いた2016年におきた阿蘇大橋地区の地滑り災害の再現実験に取り組んでいる。このような実問題においては、粒子分布が3次元空間において大きく変化するため、砂箱実験で用いていたような2次元領域負荷分散では並列化効率を上げることが難しい。そこで、本年度に3次元領域分割とその動的変更、並びに計算対象外領域のメモリ使用の抑制技術の実装を行った。

図4ではスランプフローの数値実験において実装した動的負荷分散がどのように3次元的に変化するかを示している。この問題では計算開始時には粒子が重力方向に分布しているため、重力方向への領域分割が妥当である。しかし、時間を経ると水平方向への拡散が卓越するため、重力方向へと領域分割すると、アスペクト比が大きく歪な領域分割となってしまう並列化効率が大きく下がる。この問題を改善するため、粒子分布によって動的に各次元に展開する領域分割の数を変更できるようにアルゴリズム変更を実施した。その結果、図4に示すように、動的に重力方向の分割数が削減され、粒子が広がった後には重力方向の分割が解消され、2次元領域分割に変更していることが分かる。このような技術開発により、地滑り問題のような粒子分布が動的に大変化する場合においても、大規模並列計算が可能となった。

また、地滑り問題においては10億以上の粒子を用いた計算となるため、初期配置における領域分割と、粒子配置を前処理計算として行う必要がある。そこで、本年度は前処理計算コードを開発し、阿蘇大橋地区における標高データをもとに作成した粒子群の初期領域分割の最適化と、地形に対して法線上に重力を課した自由落下による粒子充填計算を実施した。また作業配列の共有化などにより、メモリ使用量を当初の60%程度まで圧縮することに成功した。

これらにより図5に示すように阿蘇大橋地区の地滑り計算が可能になった。ES3では10億粒子まで用いた前処理計算を実施し、それをES4や富岳において活用できるようにした。

計算結果からは、大局的な振る舞いとして、地滑り後の標高図がおおよそ再現されていること。また地滑りの到達距離が摩擦則に大きく依存し、滑った地層内に混在する大きな岩石が地滑りのフロント部に集まる様子などが再現された。今後は、2章に記載した3軸圧縮実験を基に現場で採取した地盤データを反映しする。これにより現実

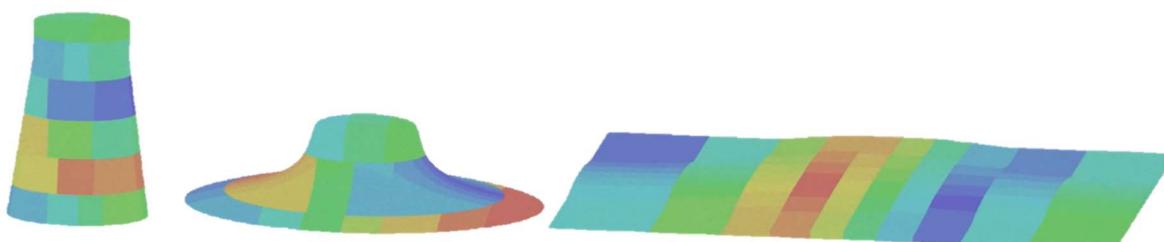


図4 3次元動的領域負荷分散の例 異なる色は各MPIプロセスが担当する領域を示す。

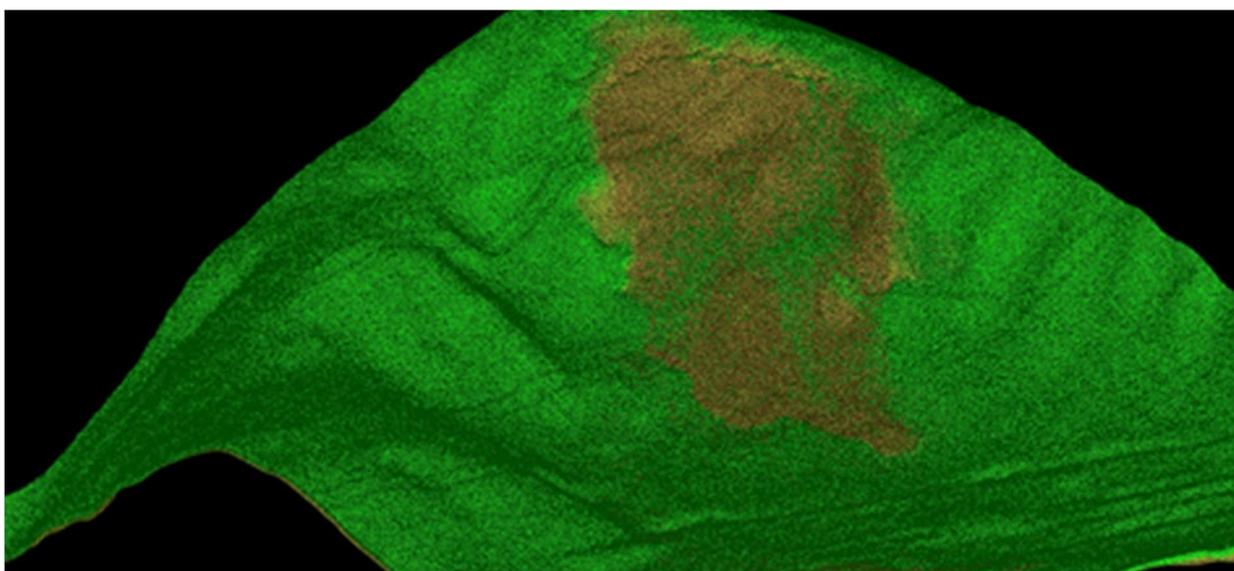


図5 1000万粒子を用いた阿蘇大橋地区のDEMシミュレーション

的なパラメータを用いた粒子モデルによる地滑りの再現実験が可能となる。

4. 水中色砂実験解析

粒状体の混合は、地盤工学、化学工学粉粒体の混合は、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、DEPTHによって、混合プロセスのデジタルツインを開発している[3]。本年度は水中に沈められた色砂実験攪拌実験について、実際の実験とキャリブレーションを行ったモデルを用いて、その混合プロセス効率化に資する影響因子を調査した。

本シミュレーションでは水中での準静的挙動を扱うために、従来の接触摩擦モデルに加えて粒子間力にlubricationモデルを新たにDEPTH実装した。これにより図6に示すように、大局的な振り舞いにおいて室内実験を良く再現できる事が分かった。

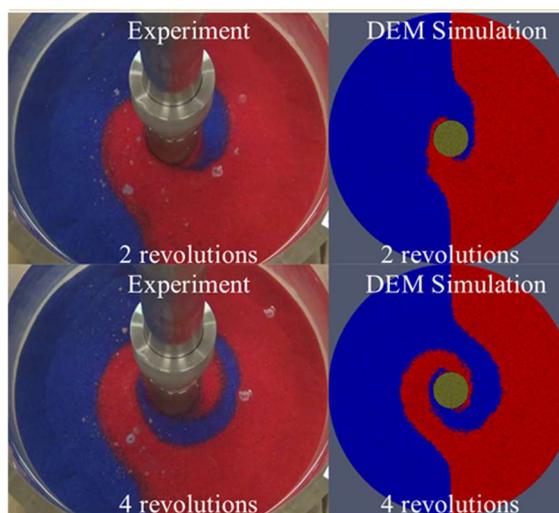


図6 シミュレーションと実験の比較

さらに本シミュレーションを系統的に調べたところ、回転時のトルクの大きさは、混合質量、充填深度、容器とブレードの形状比に対してはさほど変化しないが、ブレード

下角に強く依存することが分かった。また角度とトルク抵抗値の関係は非線形であり 35° ~ 45° の範囲で最小値を取ることが分かった。つまりブレード角の最適範囲を割り出すことに成功した。また回転速度が高い場合、トルクの増加と有効混合質量の減少により、抵抗が増加することも再現された[4]。

これらの知見は、混合器形状、回転速度の最適化や、実機におけるモーター出力の推定を、スケールダウンした数値実験や実験室により可能にすることに貢献するものである。

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.
- [4] Chen, J.; Furuichi, M.; Nishiura, D. DEM study of the influences of the geometric and operational factors on the mechanical responses of an underwater mixing process. *Powder Technology* 392 (2021) 251–263.

Development of Advanced Simulation Tools for Solid Earth Sciences

Project Representative

Mikito Furuichi Center for Mathematical Science and Advanced Technology,
Research Institute for Value-Added-Information Generation, Japan Agency for Marine-Earth
Science and Technology

Authors

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

*¹ Center for Mathematical Science and Advanced Technology, Research Institute for Value-Added-Information Generation, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

*² Kobe University *³ University of Hyogo

We develop the large-scale particle simulation code DEPTH (DEM based Parallel mulTi pHysics simulator) to tackle the various problems of the solid earth sciences with the Earth Simulator. The bonding force model and the three-dimensional dynamic domain decomposition algorithm are newly implemented to perform the simulation of the triaxial test of the rocks of accretionary prism formation and land-slide simulation. In addition, underwater mixing of geotechnical media is investigated for the improvement of geotechnical mixing tools.

Keywords : DEM, Accretionary prism, triaxial experiment, land slide, mixing granular material

1. Introduction

In this project, we are developing numerical tools of large-scale solid earth simulations. Especially we have been developing of the DEPTH (DEM based Parallel mulTi pHysics simulator) based on the Discrete Element Method (DEM). Recently, we developed an iterative load balancer to change the MPI domains to optimize the workload and performed a numerical sandbox experiment using 2.4 billion particles that was the world record in the number of DEM particles [1, 2]. The sandbox experiment is known as a scaled analog model of an accretionary prism formation. However, one of the limitations was the difference of the rheology between the sand and rock. To overcome this difficulty, we improve the DEM model to reproduce the failure behavior of the rock. We also performed the landslide simulation for disaster prevention. To deal with the large change of the particle distribution in 3D, we implement the 3D domain decomposition of the MPI domains for the dynamic load balancing. In addition, we also investigate an underwater mixing process as a novel application for offshore mining of the geotechnical engineering.

2. A DEM model of triaxial compression test of fault and host rocks

The mechanism of the soft sediments that are subducted with the plate during accretion to generate large earthquakes is not well known but is an important geological problem. We have been addressing this problem through large-scale numerical simulations of granular media. However, to clarify the role of the shear strength associated with fault movement, the particle interaction model that adequately reproduces the macroscopic

fault shear strength is need. Therefore, we have developed a rock interaction model that adds bonding force to the conventional contact friction DEM model.

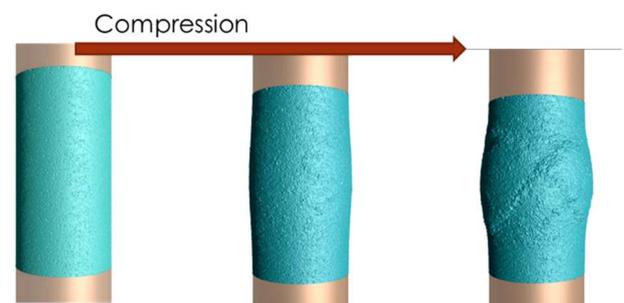


Figure1: Visualization of numerical triaxial test using DEPTH

The numerical triaxial compression experiments are performed to calibrate the rock behaviors: the macroscopic shear strength through micro particle interaction model (Fig. 1). The experimental data was obtained using host rock and fault rock sampled from the Boso Peninsula. With the calibrated parameters, the failure envelopes are obtained as shown in Fig. 2. The DEM model reproduces the increase of shear strength at different pressures on the almost straight lines. The numerically obtained (c , ϕ) as a macroscopic property are consistent with the experiment values as is shown in Table 1.

These model developments enable us to conduct accretionary complex formation experiments with realistic rock parameters in the next FY.

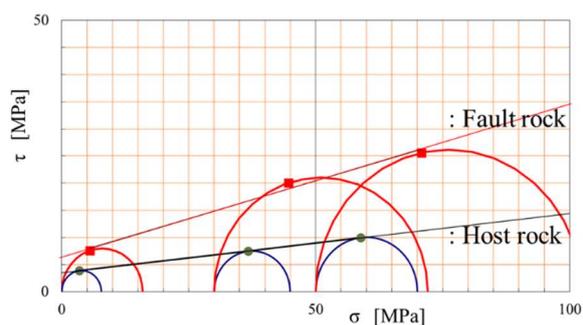


Figure 2: Simulated failure envelopes

Table1

	Slope of envelope: ϕ [Deg]		Cohesion: c [MPa]	
	Host rock	Fault rock	Host rock	Fault rock
DEM	6.26	14.93	3.50	6.12
Exp	6.24	15.20	3.72	5.10

3. Land slide simulation

The simulation of landslide event occurred in the Aso Ohashi area in 2016 was performed by using the DEPTH. Since the particle distribution varies largely in 3D, we improve the dynamic load balancer of DEPTH with 3D domain decomposition as shown in Fig 3.



Figure 3: 3D MPI domain decomposition

In addition, since the landslide problem involves more than one billion particles, it is necessary to perform the initial domain partitioning and particle placement as a preprocessing calculation. In this FY, we performed a pre-processing calculation for optimized the initial partitioning of the particle population based on the elevation data of the Aso Ohashi area.

The primitive result shown by Fig.4, successfully reproduces the characteristic features of the observed elevation map data after the landslide event.

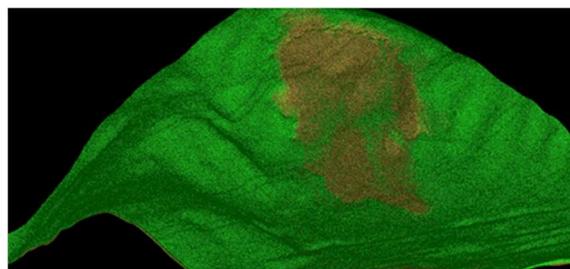


Figure 4: Land slide simulation

4. DEM study of an underwater mixing process

Mixing granular materials underwater plays versatile roles especially for the offshore mining [3]. We apply the discrete element method (DEM), which was augmented by a lubrication model, to evaluate the mechanical responses of the mixing process under water [4].

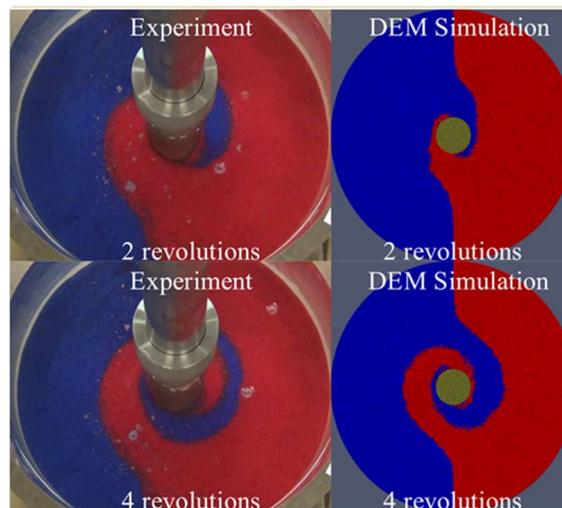


Figure 5: Comparison between the experiment and simulation with DEPTH

An augmented DEM simulation was successfully calibrated for a laboratory experiment on the mixing of colored sand under water (Fig. 5). Among the potential control factors of the mixing system, the blade angle is found to significantly affects the torque nonlinearly. The resistance shows a minimum within $35^{\circ}\sim 45^{\circ}$, which corresponds to an optimal range for the blade angles. Our parametric studies based on realistic DEM simulations contributes to facilitate the designs of the mixing systems for offshore mining.

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.
- [4] Chen, J.; Furuichi, M.; Nishiura, D. DEM study of the influences of the geometric and operational factors on the mechanical responses of an underwater mixing process. *Powder Technology* 392 (2021) 251–263.