

平成 30 年 6 月 13 日現在

機関番号：82706

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2015～2017

課題番号：15K17754

研究課題名(和文) マグマだまりの3次元固液混相流シミュレーション

研究課題名(英文) 3D numerical simulation of fluid-particle system in a magma chamber

研究代表者

古市 幹人 (FURUICHI, Mikito)

国立研究開発法人海洋研究開発機構・数理科学・先端技術研究分野・主任研究員

研究者番号：50415981

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 2,700,000円

研究成果の概要(和文)：マグマだまりで繰り返される加熱・冷却による内部の熱・組成進化の解明において、問題となるのがマッシュと呼ばれる結晶に富む層の挙動である。本研究ではマッシュを粒子と高粘性流体とした3次元数値シミュレーションを実施した。その結果、下部から貫入する流体が、上部のメルトよりも密度が十分に大きい場合に、流体境界で結晶粒子がトラップされて結晶に富む層が動的に形成されて、それが一挙に崩落することが分かった。またシミュレーションを実験や天然と比較可能にするために、粒子計算の大規模並列化にも取り組み、新しい動的負荷分散技術を開発することに成功した。

研究成果の概要(英文)：Dynamics of magma chambers is important to control the eruption and chemical differentiation. Granular behavior is known to significantly influence the effective viscosity of magma flow and is therefore critical for understanding the thermal reactivation of magma body. To numerically investigate such biphasic dynamics, we performed the numerical simulation of Stokes flow coupled with discrete element method (DEM). We consider initially upper and lower fluid. The lower fluid is mafic and denser than upper fluid. We find the dynamical accumulation process of solid particles at the boundary between the two fluids due to their density contrast. The accumulated particles exhibit rapid mobilization. In addition, to perform the larger scale simulation toward the validation with experiment and nature, we developed parallel algorithm of DEM simulation. We successfully developed new dynamical load balancing method of particle simulation for high performance computing.

研究分野：計算地球科学

キーワード：Magma DEM Stokes flow HPC

### 1. 研究開始当初の背景

マグマだまりで繰り返される加熱・冷却による内部の熱・組成進化の解明において、問題となるのがマッシュと呼ばれる結晶に富む層の挙動である。マッシュはマグマの冷却時に晶出された高密度な結晶と、再加熱時に表れる低密度なメルトの混相状態である。マッシュは、固相と液相が相対的に分離して振る舞うのか、一体となって運動するかによって力学的性質を大きく変化させる。定性的に前者は結晶の干渉沈降やメルト浸透流による物質移動、後者では混合層全体の重力不安定性成長などをマグマだまりの再加熱過程において引き起こす(図1)。近年の岩石学的証拠に基づく理論モデル研究では、これら流動モードの遷移がマグマ貫入に伴うマグマの噴出や組成の不均質層形成の原因となる事を示唆している。

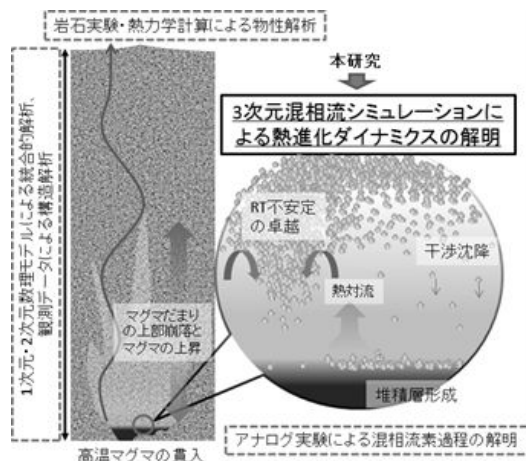


図1：研究の概念図

### 2. 研究の目的

理論モデルによる既往研究では、マッシュの非線形な流動性と3次元的な対流様式の重要性が指摘されているものの、定量的な議論は不十分であった。そこで、本研究では粒子・流体混合層の熱対流の3次元数値シミュレーションを実施して、特に、作業仮説として考えられているマグマだまり再加熱時の内部崩落過程における対流様式を定量的に解析した。

また、本研究では結晶を個別要素法(DEM)で扱っているが、並列化する事が難しいことから、3次元的な粒状体現象を表現するのに十分な粒子数を用いたシミュレーションを実施するのが困難であった。そこで、この問題を解決するための技術開発研究も実施した。

### 3. 研究の方法

メルトを高粘性流体と捉えて Stokes 流れにより近似し、結晶を DEM 粒子としたシミュレーションを実施した。汎用的な固液混相流シミュレーションと比較して、流体が高粘性で

あると、運動の時間スケールが DEM 粒子のそれに対して過大になる問題がある。そこで、この問題を Stokes-DEM 法を用いる事で緩和した。シミュレーションの設定は、直方体の領域に縦に層状にマッシュ層と、流体層を設定したことになる。境界条件として下部から加熱があることで、下部メルト領域に熱対流が駆動される。そのことで、上部に設置された低温で固いマッシュ層が暖められて、流動を始める。結晶粒子の密度はメルトよりも大きいいため、流動性を得る事で結晶は沈降し集積する。一方で、集積が進むと空隙率が小さくなることから再び流動性は失われる。本研究ではこのような結晶流動性と、2種類の異なる質量のメルトを想定することで現れる2重拡散対流現象に注目し調査した。

一方、粒子法の並列化問題については、これまで1次元であった領域分割法を2次元に拡張し、さらに粒子がシミュレーション実施中に移動することで、計算負荷が変化する問題を解決するための動的負荷分散アルゴリズムの開発に取り組んだ。

### 4. 研究成果

下部から貫入するメルトがマフィックであることを想定し、上部のマッシュ中メルトより高密度である場合について、計算を行った。密度の関係は結晶粒子 > 下部流体 > 上部流体とした。従来の研究では、下部流体と上部流体は同じ性状を仮定したため結晶粒子がない時には単純な熱対流が発生する。本件では下から温められた下部流体と上部流体の間で2重拡散対流となり、熱対流の成長が妨げられる。結晶粒子を含めた場合には、結晶粒子に沈降と集積によって、これらの対流の様子は大きく異なってくる。流体間の密度差が小さい時 ( $< \sim 100 \text{ kg/m}^3$ ) では結晶粒子が一挙に底面に沈降し、冷たい境界層を作る。この時、上層の粒子充填率が高い場合 ( $\sim 40\%$ ) には、マッシュ層は大規模に崩落する。このような再加熱による一挙崩落と噴出には関係があることが1次元理論モデルから示唆されている。底にたまったマッシュの流動性は空隙率が低いいため小さく、熱対流は一時的に抑制されるが、時間を経て下部が熱伝導で暖められると上部では熱対流が再び確認できる。一方で密度差が大きく異なる場合には ( $> \sim 300 \text{ kg/m}^3$ )、下部での熱対流が駆動される一方で、結晶粒子が上下流体の密度境界にトラップされる(図2(a))。これは下層での粒子の干渉沈降速度が上層より有意に小さいためである。そして、粒子が流体境界でトラップされることで、上部からの粒子沈降により動的に高充填な層が形成されることが分かった。下層への粒子の崩落は、初めは密度境界からのまばらで一様的な沈降であるが(図2(b))、高充填層が形成された後には、一挙にクラスタリングして崩落する(図2(c))。図2に示した例では、初期充填率が20%程度であるにもかかわらず、一挙崩

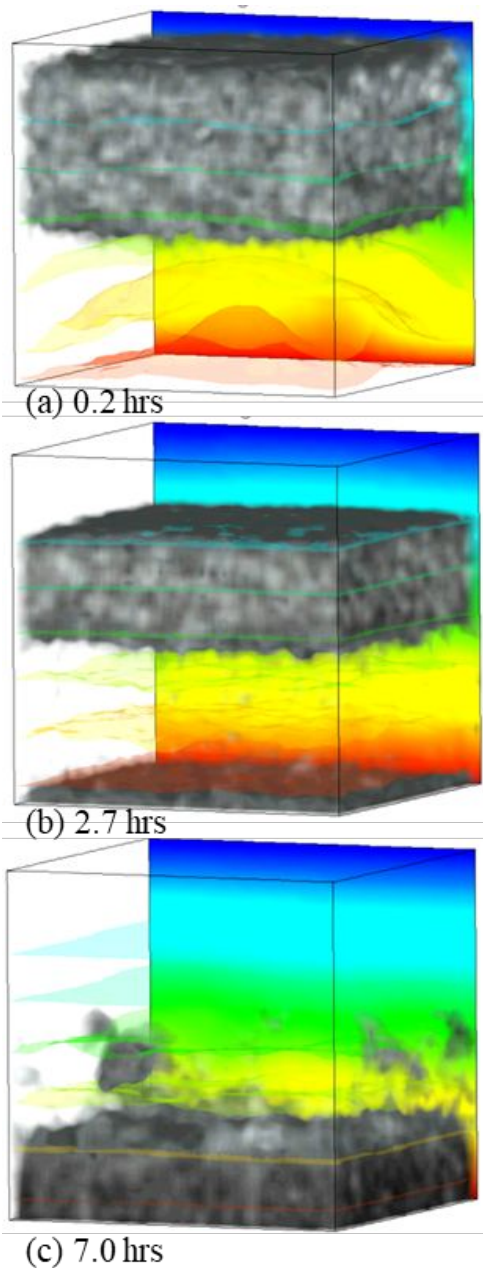


図 2 : 上下流体の密度差が大きい場合のシミュレーション結果。等値面と壁の色は温度を表す。密度は粒子が  $2600 \text{ kg/m}^3$ 、上部流体  $2000 \text{ kg/m}^3$ 、下部流体が  $2300 \text{ kg/m}^3$  とした。

落が起こりうることを示している。つまり、臨界充填率に近いマッシュが形成されるには、再活性化時のマグマだまり天井の結晶体積率だけではなく、貫入するメルトの性状も重要であることが示唆される。また、粒子間の密度差が大きいほど、トラップされる時間も長いので、2重拡散対流であることに加えて、熱進化の時間スケールが動的なプロセスによって長くなることを示唆している。これらの知見は、マグマだまりの再活性化プロセスにおいてまだ十分に考慮されておらず、マグマだまりの進化プロセスの理解につながる成果であると考えられる。

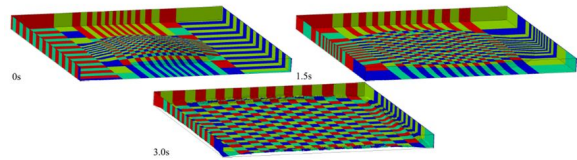


図 3: 484MPI プロセスを用いた計算例。異なるカラーの領域は異なる MPI プロセスにより計算されており、時間発展、つまり粒子分布に伴い変化する。

また、本計算を実験や天然での検証を可能とするスケールに拡張するために、粒子計算の大規模並列化に取り組んだ。具体的には動的負荷分散を伴う 2次元空間領域分割をベースにした MPI による並列化を実施した。

領域分割の幾何形状には、improved Orthogonal Recursive Bisection 等でも用いられる長方形型の領域分割法を採用した(図 3)。既往の DEM コードで、2次元の MPI 領域分割を実装している例は少ない。なぜならば、MD や SPH 等の粒子法と異なり、DEM では法線力のみでなく摩擦を考慮した接線力計算の並列化が必要だからである。特に、MPI 通信によって、粒子間接触ペアの情報の引き継ぐ部分の実装は、難易度の高いコーディングとなる。本件では、それに成功し MPI 並列を行う事で DEM の解が丸め誤差レベルまで変わらないことを確認することに成功した(図 4)。動的負荷分散の基本的なアイデアは、各

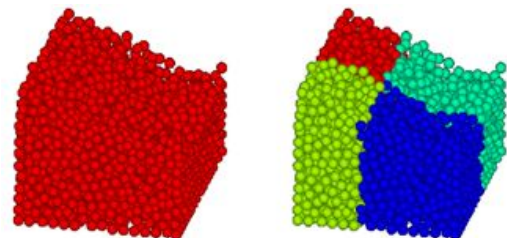


図 4 : 単体(左)と 4 MPI プロセス(右)を用いた DEM 計算の直接比較。色は各 MPI プロセスが計算した領域を示す。両計算結果は丸め誤差まで一致する。

MPI プロセスに割り当てられる空間領域分割を、各々の計算負荷に応じて、動的に変更する事にある。我々の開発した負荷分散アルゴリズムの重要な特徴の一つが、計算負荷の測定に各 MPI プロセスで実測した経過時間を用いることである。既往研究では単純に粒子数を計算負荷の指標とする例が多いが、経過時間を用いることで、粒子間で異なる計算コストや計算ノード毎に異なる演算性能に対し

$$\Omega_N = \Omega_{G_{L_{top}}} : \left| \begin{array}{cccccccc} t_1^n = (t_1^n)_{L_{top}} & t_2^n & t_3^n & t_4^n & \dots & L_x \\ \leftarrow \frac{dx}{\rightarrow} & x_1^n & x_2^n & x_3^n & x_4^n & \dots & L_x \end{array} \right|$$

図 5 : 1次元領域分割の模式図

て負荷分散が可能となる。また、MPI 領域分割の変更には擬ニュートン法ソルバーに基づいた、負荷分散を反復的に解消する新しいアルゴリズムを考案した。新しく開発した擬ニュートン法ソルバーによるアルゴリズムを説明する。単純化のため、図5のように一次元領域分割問題を考える。全  $N$  個のプロセスで計算される空間  $\Omega_N$  を  $\{x_i; i = 1, 2, 3, \dots, N-1\}$  でサブドメインに分割した場合に  $i$  番目のプロセスで費やされた計算負荷を  $T_i^n$  とする。時間ステップ  $n$  における計算負荷の残差は以下のように定義できる。

$$f_i^n = T_{i+1}^n - T_i^n \quad (1)$$

一般的にサブドメイン内の粒子の空間分布は一樣でなく、計算負荷に通信コストも含まれるため、式(1)は  $x_i$  に対して非線形な関数と見做せる。このように定式化する事で、動的負荷分散問題は式(1)で表される残差ベクトルのノルム  $\|f\|$  をサブドメインの境界  $x_i$  を変更する事で最小化させる非線形方程式問題として捉えることが出来る。 $\|f\| = 0$  であった場合は完全な負荷分散が達成されることを意味する。 $x_i$  の変更はニュートン法になら以下のように行う。

$$\delta x_i = -\hat{J}^{-1} f_i^n \quad (2)$$

ここで  $\delta x_i = x_i^{n+1} - x_i^n$  であり  $\beta$  は重み定数である。 $\hat{J}$  は簡略化された Jacobian であり、

$$\hat{J}_{ii} = \frac{f_i^n - f_i^{n-1}}{x_i^n - x_i^{n-1}} \quad (3)$$

である。これにより  $x_i^{n+1} = x_i^n + \delta x_i$  として領域分割を変更することが出来る。実際の計算で  $x_i$  の最小単位がセルサイズ  $dx$  で与えられるため、それ以下の変位量は切り捨てる。また実装を簡略化するため  $|x_i| < dx$  とした。以上のアルゴリズムにより、計算実行中にセル単位で計算負荷バランスを反復的に調整す

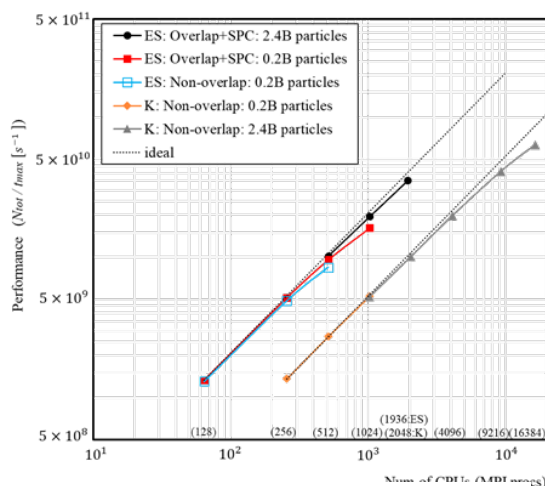


図 6：砂箱 DEM 計算で測定された強・弱スケールング

ることが可能になる。

さらに、MPI 通信タスクと演算タスクを overlap させる事にも取り組んだ。袖領域通信に関係する粒子とその他の粒子をメモリ上で分けることで、計算の効率化を図ると共に、袖部通信の最適化とキャッシュヒット率の向上を期待して、空間充填曲線（ヒルベルト曲線）を用いた粒子の並び替え実装も実施した。

このようにして動的負荷分散を実装した DEM アプリケーションを用いて、地球シミュレータと京コンピュータ上で測定した並列化効率を図6に示す。砂箱の短縮実験において、24億粒子を用いた DEM シミュレーションにおいて、強弱スケールングが 1000 ノードを超える大規模計算において示すことが出来た。また overlap による性能改善も確認できる。10億を超える粒子数は、DEM シミュレーションとしては世界最大レベルである。本件で開発したアルゴリズムを Stokes-DEM に実装することで、実環境に近い結晶サイズと規模でのマグマだまりの再活性化シミュレーションの実現が期待される成果となった。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計 2 件)

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. 査読有

M. Furuichi, D. Nishiura, "Iterative load-balancing method with multigrid level relaxation for particle simulation with short-range interactions" Computer Physics Communications, Vol 219, 135-148, (2017), 査読有

〔学会発表〕(計 15 件)

Mikito Furuichi, Daisuke Nishiura "Development of Parallel Particle Simulation Code and Challenges with Huge Granular System", 18th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, 2018/03/08 (招待講演)

古市 幹人, "大規模な応力鎖解析による断層形成メカニズムの解明" シミュレーションを支える基盤研究, 2017/11/29 (招待講演)

M. Furuichi, D. Nishiura, M. Asai, T. Hori "The first real-scale DEM simulation of a sandbox experiment

using 2.4 billion particles” SC17  
research poster, 2017/11/13, 査読有り

古市幹人, “Challenges of Large scale  
particle simulation Method: toward  
real scale numerical sand box  
experiment”, The 8th International  
Workshop of Many-core Solutions in  
Computing Problems in Science,  
Engineering and Big Data, 2017/08/24  
(招待講演)

古市幹人, 西浦泰介, ‘混相流に対する  
粒子法シミュレーション - 津波からマ  
グマまで - ’ 日本地球惑星科学連合 2015  
年大会, 2015/05/25 (招待講演)

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

古市 幹人 (FURUICHI, Mikito)  
国立研究開発法人海洋研究開発機構・数理  
科学・先端技術研究分野・主任研究員  
研究者番号: 50415981