惑星内部研究における計算科学と計算機
– マントル対流シミュレーションのマニアックな技術論 –

亀山 真典 @ 愛媛大学地球深部ダイナミクス研究センター

2013 年 11 月 23 日

自己 (+自己製品) 紹介: 3 次元箱型モデルでの計算例

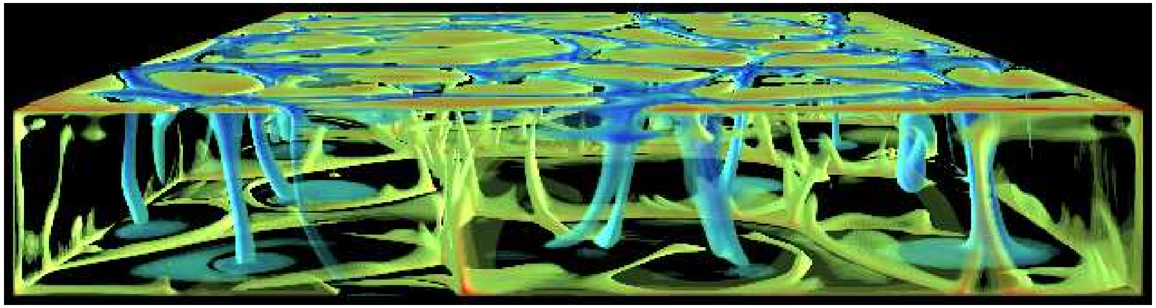
660km 相転移 + post-perovskite (PPv) 相転移を含めた計算

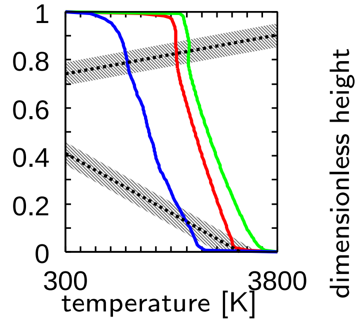
(Kameyama and Yuen, 2006)

(a) $\delta T \equiv T - \langle T \rangle$

(b) $\langle T \rangle$, T_{max}, T_{min}

case H02; $T_{\text{bot}} = 3800\text{K}$, $Rb^{(2)}/Ra_{\text{surf}} = 0.25$; $t = 1.12383057 \times 10^{-3}$





計算の諸元 (当時の**業界最速**・たぶん現在でも**最高解像度**かも?)

- **メッシュ分割** 512×512×128 (**一辺約** 22 km **に相当**)
- **約** 3.2 **秒**/**ステップ** (**初代** ES **の** 128CPU **使用時**)
- **粘性率の温度・深さ依存性** (+熱拡散率の温度依存性)
- **相転移はやや強めにしてある** (相転移の効果を強調したかったので)
  クラペイロン勾配 -4.3MPa/K、 密度ジャンプ 10% for 660km 相転移
  13MPa/K、 2% for PPv 相転移

(Kameyama et al., 2008)

3 次元箱型モデルと同じ高速解法を球殻モデルにも適用

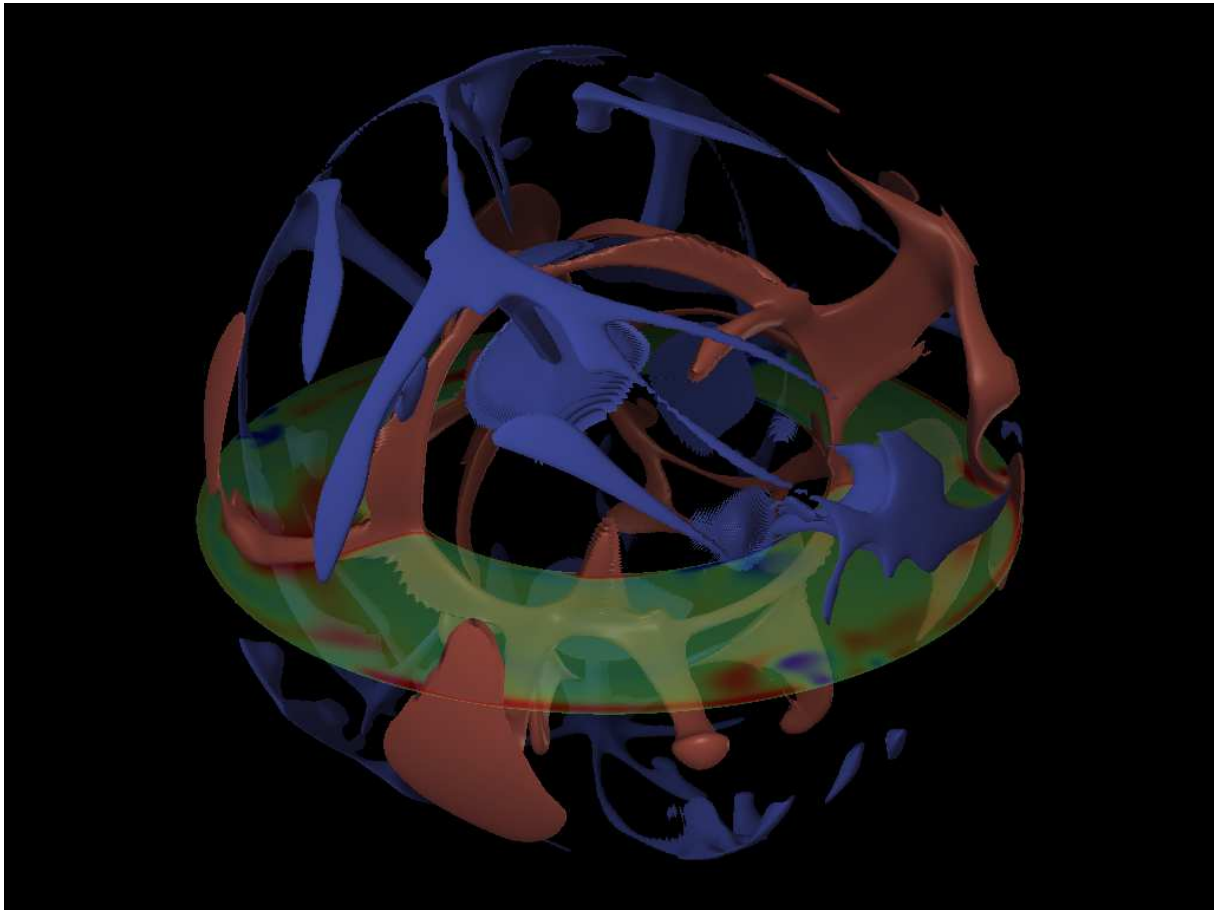


figure and movie by courtesy of Dr. Nobuaki Ohno (現 兵庫県立大)

亀山の製品を構成する技術的要素

以下の 3 つが重要・特徴的なもの

1. **多重格子法** (**マルチグリッド法**)
2. ACuTE **法** (Kameyama et al., 2005; Kameyama, 2005)
   流れ場を多重格子法で解く際に用いる「緩和計算」 (smoother) **の一種**
3. **インヤン格子** (Kageyama and Sato, 2004)
   球面 and/or **球殻領域の格子分割法の一種**

. . . .

今日はこのうち、マントル対流の大規模 3 次元シミュレーションの「キモ」である、 多重格子法 と ACuTE 法 の話をさせていただきます。

. . . **インヤン格子によるマントル対流シミュレーションプログラムの詳細については** Kameyama et al. (2008) **をご参照ください。**

ACuTE 法 (Kameyama et al., 2005): 基本原理

構成要素その 1: 擬似圧縮性法 (Chorin, 1967)

与えられた温度 T、粘性率 η の分布のもとで、高粘性・非圧縮性流体の定常流れ場を求める方程式

$$0 = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta(\nabla \otimes \boldsymbol{v} + \boldsymbol{v} \otimes \nabla)] + Ra\, T \boldsymbol{e}_z$$
$$0 = \nabla \cdot \boldsymbol{v}$$

を直接解く代わりに、擬似的な時間発展方程式

$$M \frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial \tau} = -\nabla p + \nabla \cdot [\eta (\nabla \otimes \boldsymbol{v} + \boldsymbol{v} \otimes \nabla)] + Ra\, T \boldsymbol{e}_z$$
$$-K \frac{\partial p}{\partial \tau} = \nabla \cdot \boldsymbol{v}$$

を定常になるまで時間積分してやる。
ただし、τ : **擬似時間**
M: **擬似密度**
K : **擬似圧縮率　は「本物」とは無関係な量。**

擬似圧縮性法とは?

長所

- 非圧縮の速度場が必ず得られる (owing to 粘性による散逸)

$$\frac{\partial^2}{\partial \tau^2}\left(\nabla \cdot \boldsymbol{v}\right) = \underbrace{\frac{1}{KM}\nabla^2\left(\nabla \cdot \boldsymbol{v}\right)}_{\text{擬似音波の伝播}} + \underbrace{\frac{2\eta}{M}\frac{\partial}{\partial \tau}\left[\nabla^2\left(\nabla \cdot \boldsymbol{v}\right)\right]}_{\text{粘性による散逸 (拡散)}} + \cdots$$

- 原始変数 (速度場 v と圧力場 p) をそのまま使って解く
  (次元・形状によらず同じアルゴリズムで OK)
- プログラムの構造が非常に直感的で簡単
  (時間発展方程式の数値積分をするだけ)

短所

- そのまま使うと非常に遅い
  特に誤差の**長波長成分の収束が遅い** (拡散方程式の宿命)
  $\Rightarrow$ 多重格子法との併用が不可欠

ACuTE 法 (Kameyama et al., 2005): 粘性変化対策

対策: 「局所時間刻み法」 の援用

- **粘性率 η に応じて「密度」M と「圧縮率」K の大きさを「場所ごと」に変える**
  - ✏ 実効的な時間刻み $\Delta\tau/M$、$\Delta\tau/K$ を空間変化させることに対応

- **粘性率の空間変化の影響をなるべく打ち消すように、M と K を空間変化させたい**

$$\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}(\nabla\cdot\boldsymbol{v}) = \underbrace{\frac{1}{KM}\nabla^2(\nabla\cdot\boldsymbol{v})}_{\text{擬似音波の伝播}} + \underbrace{\frac{2\eta}{M}\frac{\partial}{\partial\tau}\left[\nabla^2(\nabla\cdot\boldsymbol{v})\right]}_{\text{粘性による散逸 (拡散)}} + \cdots$$

  - ✏ 実効的な拡散係数を一様にしたい $\Rightarrow M \propto \eta$
  - ✏ 擬似的な「音速」を一様にしたい $\Rightarrow K \propto \eta^{-1}$

(スムーズな変化に対しては) **この方法は非常に効果的**

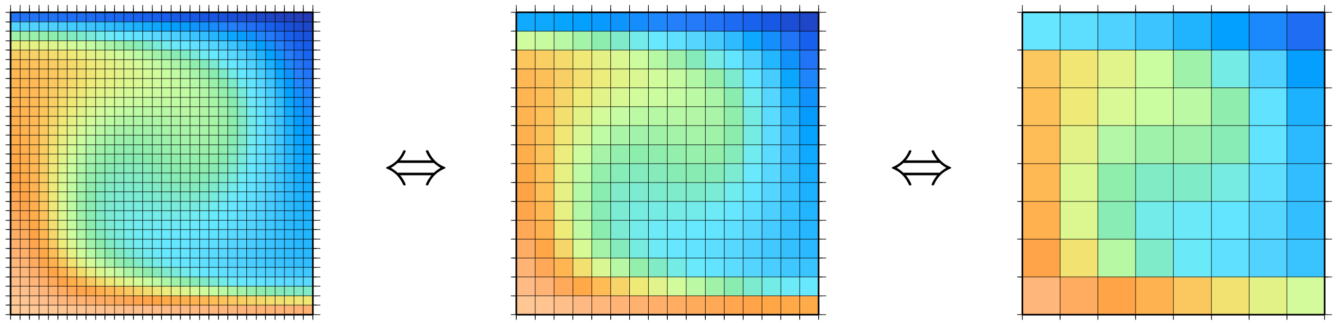
ACuTE 法 (Kameyama et al., 2005): 大規模計算対策

- ❑ 多重格子法の「緩和計算」として**陽的な擬似時間積分**
  - ✏ ベクトル化・並列化はごく自然にできる
  - ✏ どうせ多重格子法で加速するのだし、緩和計算そのものの収束の遅さには目をつぶることにしています
- ❑ 全 PE 間で領域分割法+MPI による並列化 (flat MPI)
  - ✏ 粗い格子 (i.e., 計算量小) では粒度が小さくなるので、SMP 並列化は効果的でなさそうなので試してないです
- ❑ **ループの一重化**によりベクトル長を大きくする
  - ✏ 特に粗い格子レベルの計算では超重要
- ❑ **集団通信** (i.e., 収束判定の内積計算とか) **の頻度を減らす**
  - ✏ どうせ収束は遅いのだし、頻繁に判定するのも残念
  - ✏ 各格子レベルでの反復回数を多くとっておく

多重格子法 (マルチグリッド法) とは

(Brandt, 1977; **以降多数の文献あり**)

- **楕円型偏微分方程式を数値的に解く最高速の解法**
  - ✏ **大規模な問題で威力を発揮する**
    計算量 $O(N)$: **他の手法では** $O(N \log N)$ **や** $O(N^2)$ **など**
- **解像度の異なる格子での計算をうまく組み合わせることにより、細かい格子系での解を高速に求める**



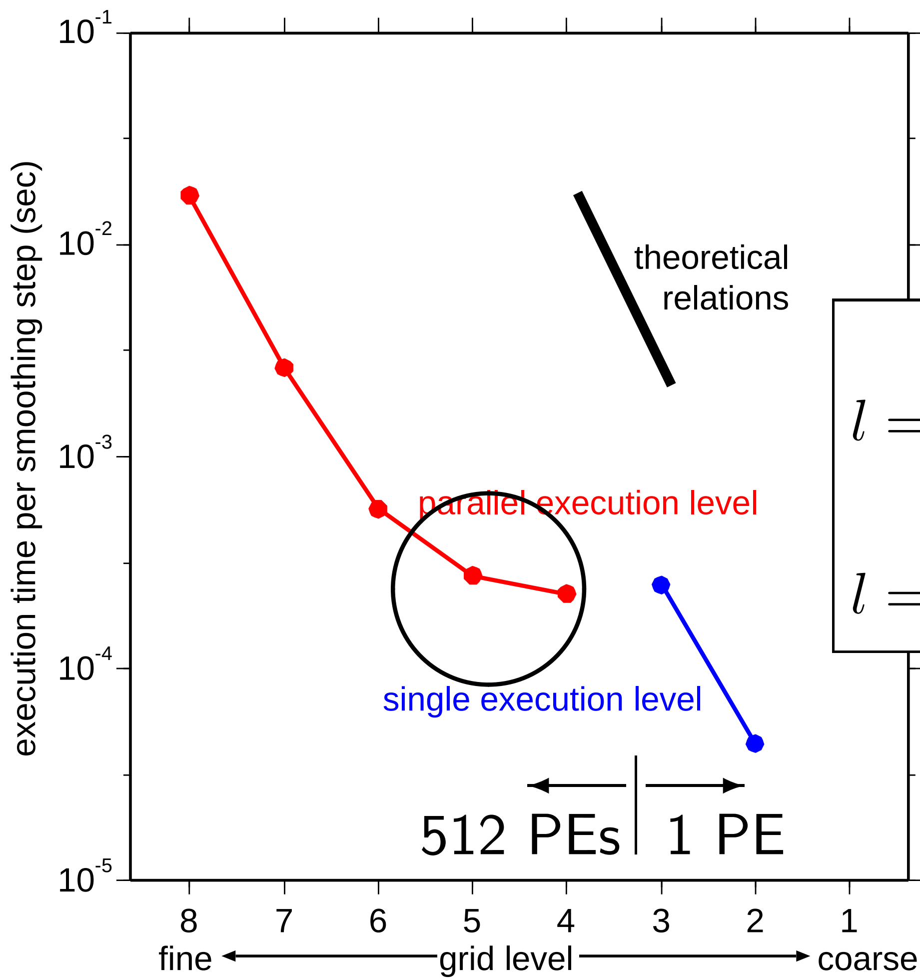
  - ✏ **各格子レベルでの誤差分布を「スムーズ」にならす**
  - ✏ **異なる格子レベルでの解を適切に「つなぐ」**
- **マントル対流問題以外にも広く適用可能 (事例多数)**

多重格子法 (マルチグリッド法) とは

計算量でいえば**理論的に最高速**なのは間違いないけれど、計算速度の **対ピーク性能比** でいえばかなり落ちる。

- **楕円型偏微分方程式**であることの宿命
  - ✏ 力学的な定常状態を求めるためには、計算領域全体での「つじつま合わせ」(=**通信**) が不可避
- **多重格子法**を用いるが故の宿命
  解像度の**粗い格子では微々たる計算量で十分正確な解が求まる**はずだから「計算量が $O(N)$ で OK」なのだが、粗すぎる格子系での計算に要する実際のコストは??
  - ✏ そもそも領域分割ができない!!
  - ✏ 不十分な大きさのループ長しかとれない!!
  - ✏ **頻繁に発生する通信のコスト**が無視できなくなる!!

各格子レベルでの緩和計算 1 回あたりに要した計算時間



格子レベル l と解像度

$l = 8$ (**最密**) $1024\times1024\times256$

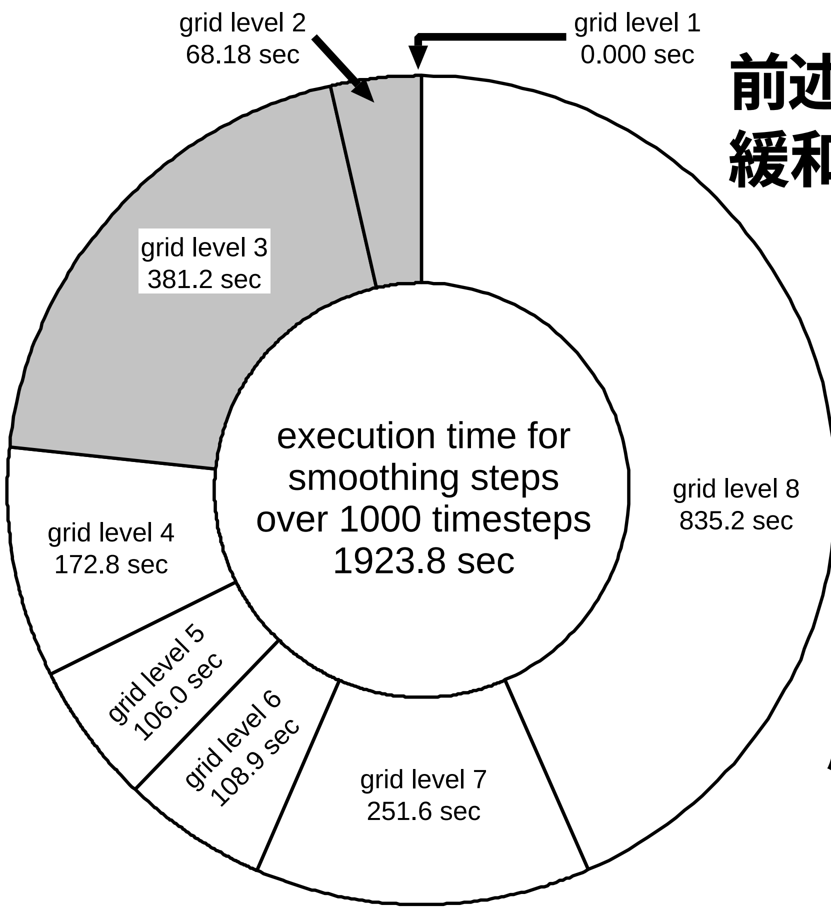
$\vdots \qquad \vdots$

$l = 1$ (**最粗**) $8\times \quad 8\times \quad 2$

解像度が十分でない格子レベルでの並列計算は、パフォーマンスの劣化が深刻 (largely due to **通信コスト**)

(初代) 地球シミュレータでの亀山の経験をば

初代 ES 当時は、通信によるパフォーマンスの劣化を (何とかある程度は) 隠蔽できた。



前述の場合で、各格子レベルでの緩和計算に要した計算時間の比

白: 512PEs**による並列計算**
灰: 1PE**のみによる計算**

粗い格子では「並列化しない」ことにより、通信の負荷が激減し、結果として並列化効率を (そこそこ) 維持できた

(初代) 地球シミュレータでの亀山の経験をば

初代 ES 当時は、通信によるパフォーマンスの劣化を (何とかある程度は) 隠蔽できた。

. . . とはいえ

- **これにはやはり、初代 ES の高い通信性能の恩恵が大きかった。(B/F=4 だったか?)**
  いまどきの計算機では、なかなかこうはいかない。

「格子の解像度に応じて並列化のパターンを細かく調整」とかすれば、(まぁまぁ) 性能が出せるとは思うけれど、

- **計算科学のプロでもない限り、なかなか手が出せない (=シロウトはそこまでやりたくない)**
- **ソフトウェアの工夫で対処しても、有効性が疑わしい (=結局はハードの仕様で上限が決まってしまう?)**

少しは「前向き」なことを言って終わりたいのですが...

- マントル対流とは、「岩石が固体状態のままゆっくりと流れる」という、非常に特殊な流れである。
- かくも特殊なマントルの流れを数値シミュレーションする際には、悪条件な大規模連立一次方程式を高速かつ高精度で解く 手法が不可欠な要素である。
- マントルの流れ場を記述する大規模連立一次方程式を解くには、ACuTE 法+多重格子法 (マルチグリッド法) が我々の最も有力と考える方法である。
- 多重格子法には 計算量が $O(N)$ で抑えられるという長所がある一方で、本質的にベクトル計算・並列計算に不向き であるという (やや深刻な) 短所がある。
- マントル対流シミュレーション研究の高度化には、PE の演算性能に加えて 低レイテンシ・高速な PE 間通信 の可能なハードウェアが望まれる。 皆さんもそうでしょ?