

先端的固体地球シミュレーションコードの開発



課題代表者:

古市 幹人 (海洋研究開発機構 数理科学・先端技術研究分野)

課題メンバー:

宮腰 剛広 (海洋研究開発機構 地球深部ダイナミクス研究分野)、西浦 泰介、中川 貴司、BAUVILLE ARTHUR、重松 大輝 (海洋研究開発機構 数理科学・先端技術研究分野)、陰山 聡 (神戸大学)、亀山 真典 (愛媛大学)、大野 暢亮 (兵庫県立大学)、横井 研介 (カーディフ大学)、他学生

*This research was made possible by Grant-in-Aid for Young Scientist (24740310) by Japan Society for the Promotion of Science (JSPS) and post K project. Calculation here were performed using Earth simulator 3 of Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology and K computer at the RIKEN Advanced Institute for Computational Science

プロジェクト背景

数値手法開発

・粒子法動的負荷分散技術

・Maker In Cell における移流陰解法

[Furuichi and May, CPC, 2015]

・Stokes-DEM法

[Furuichi and Nishiura, G-cubed, 2014]

・Yin-Yang およびYin-Yang-Zhong格子

[Hayashi and Kageyama, JCP, 2016]

・大規模シミュレーションの可視化

・SCDDソルバ

・粘弾性流移流手法

・AcUTE法

...

既存の手法では困難な地球内部課題に対するコード開発とESでの実践

独自の研究課題

(スーパーアースの) マントル対流シミュレーション

[Miyagoshi et. al., ApJL, 2014]

[Miyagoshi et. al., JGR-Planets, 2015]

コア形成シミュレーション

[Furuichi and Nakagawa, 2016, (under revision)]

超高解像度地球ダイナモシミュレーション

マグマだまりの熱進化シミュレーション

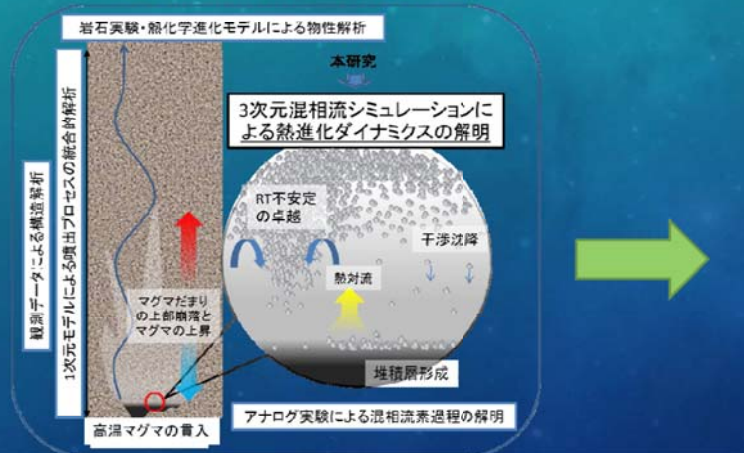
堆積層形成シミュレーション

...

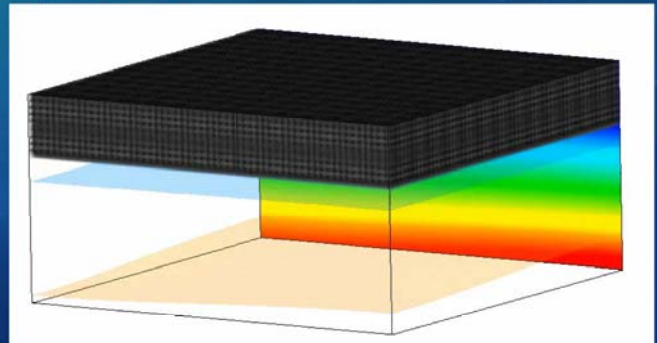
グランドチャレンジ:
数値惑星シミュレーションの実現へ

粒子法シミュレーションの動的負荷分散技術の開発：古市、西浦

- Discrete Element Method (DEM) やSmoothed Particle Hydrodynamics (SPH)といった粒子法は、離散的な粒子群や、境界の大変形、非拡散な移流計算等において、格子計算と比較して優れており、様々な研究分野で活用される
- 本プロジェクトにおいても、マグマだまりの熱進化ダイナミクスを解明するための、Stokes-DEM混相流計算手法を発表[Furuichi and Nishiura, G-cubed, 2014]。



Stokes flow (melt) + DEM (crystals) = dynamics at hot magma chamber



大規模粒子法シミュレーションの問題点と対策

- SPH, DEM等の近接粒子相互作用による粒子法では、粒子が動き回り計算コストの空間的不均質性が時間的に変化する。それゆえ空間領域分割による分散メモリ環境での効率的なノード間並列は最高ランクの技術的難易度の課題

本年度の成果：スーパーコンピュータを用いた大規模粒子法計算を実現するための動的負荷分散アルゴリズムを開発

粒子法コード並列化の概要

プロセッサレベル

・ループアンローリングによるベクトル化促進(情報基盤センター並びにNECの協力)

共有メモリ並列・最適化

・我々の既往研究で最高速な粒子間計算アルゴリズムの採用 (Nishiura, Furuichi and Sakaguchi, CPC, 2015)

分散メモリ並列・最適化

・スライスグリッド領域分割と擬ニュートン法を用いた動的負荷分散(本発表)

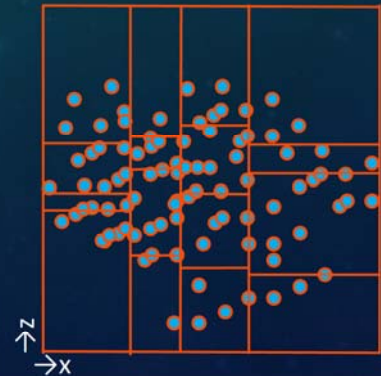


動的負荷分散: ①領域分割方法

- 2次元のスライスグリッド法を採用
 - 各列の計算コストが一樣になるように計算領域を垂直に分割
 - 各列を水平方向に分割し、計算コストが一樣な空間要素を作成
 - 各要素にMPIプロセスを割り当てる
- 特徴1: 他の空間充填曲線、グラフ、曲線、階層、3次元分割などの領域分割法と比べて、実装が比較的単純であり、格子の更新に必要な計算コストが少ない。
- 特徴2: スライスグリッドでは、長方形のジオメトリの制約が性能劣化を引き起こす場合がある。しかし粒子分布がそれほど離散的でなく2次元的な広がりを持つ場合(津波等の多くの地球科学の問題が該当)には、性能劣化の影響は限定的。

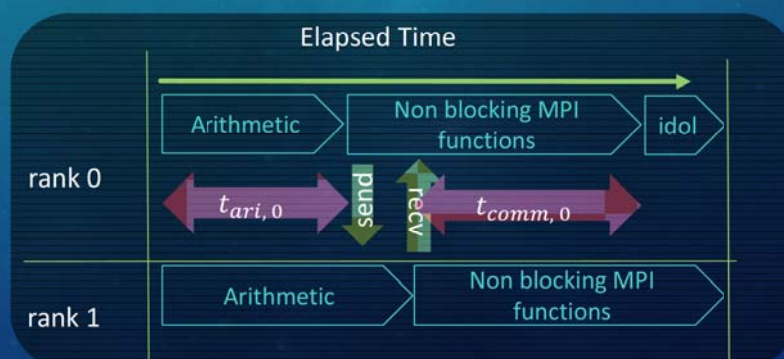
2-D slice gridの模式図

(e.g. Tsuzuki and Aoki, 2014)



動的負荷分散: ②計算負荷の評価

- 動的負荷分散は各MPIプロセスの計算コストを均質にするための前処理
- 既往研究では“粒子数=計算負荷”の例が多数。しかし“粒子数=計算負荷”では、粒子毎に異なる計算コストや境界条件処理、またヘテロな計算機環境に負荷分散を適応できないといった問題がある。
- 我々は各MPIプロセスで費やされた“計算経過時間=計算負荷”として採用。
- 経過時間 $t = t_{ari} + t_{comm}$ は算術 (arithmetic) に用いられた時間 t_{ari} とMPI通信に用いられた時間 t_{comm} を測定して求める。



動的負荷分散: ③擬ニュートン法によるアプローチ

- 残差(評価)関数 f を領域境界 x_I^n で定義し

$$f^n(x_I^n) = t_I^n - t_{I-1}^n,$$

負荷分散問題をノルム $\|f^n(x_I^n)\|$ を最小化する非線形問題と置き換える。

- ニュートン法の枠組みで境界位置を移動

$$x_I^{n+1} = x_I^n + \delta x_I,$$

ここで $\delta x = -\alpha \hat{J}^{-1} f^n,$

$$\text{かつ } \hat{J} = \frac{f^n(x_I^n) - f^{n-1}(x_I^{n-1})}{(x_I^n - x_I^{n-1})}.$$

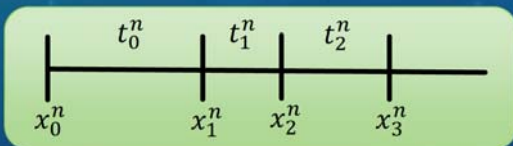


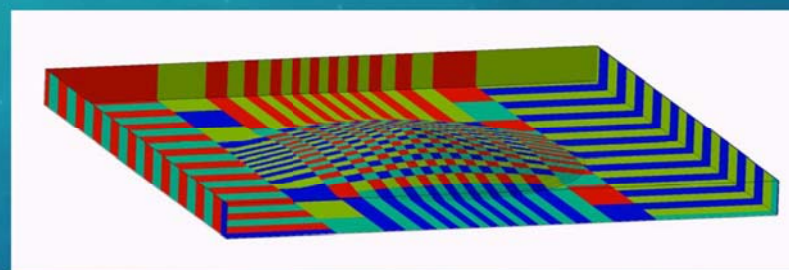
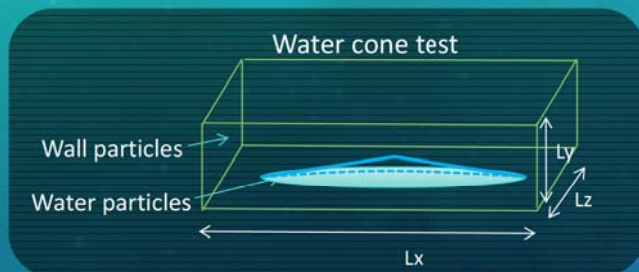
Fig. Executed time and domain boundary

Algorithm of newton-like load balancer

Line 1: $n = 0$: given $x_I^0, \hat{J}, \delta x_I = 0$
 Line 2: Solve SPH kernels and observe t_{ari} and t_{comm} .
 Line 3: Compute residual $f^n(x_I^n)$
 Line 4: if $\delta x_I \neq 0$ then update $(\hat{J})_{II}$
 Line 5: Solve linearized problem $\hat{J} \delta x = -\alpha f^n$
 Line 6: Update $x_I^{n+1} = x_I^n + \delta x_I$
 Line 7: If $\|\delta x_I\| = 0$ then change α with line search.
 Line 8: $n = n + 1$: goto Line 2

結果: 並列環境における性能検証

- 粒子の空間分布と、粒子の種類によって計算負荷不均質性が現れる水塊問題 (Water cone test) をサンプル問題とし、並列化性能を測定



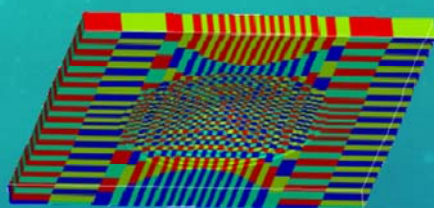
計算例: 異なる色は各MPIプロセスの担当領域

- 水粒子の分布形状 = 計算負荷の偏り
- 水粒子と壁粒子で異なる計算負荷 = 計算負荷の偏り

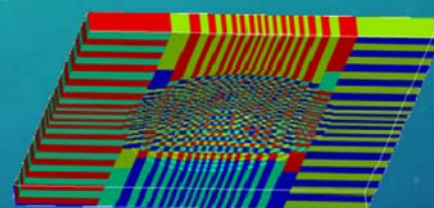
動的負荷分散アルゴリズムの効果を検証

粒子数ベース擬ニュートン法の検証

- ◆ Case0: 総粒子数 35万個
- ◆ Case1: 総粒子数 2.3億個



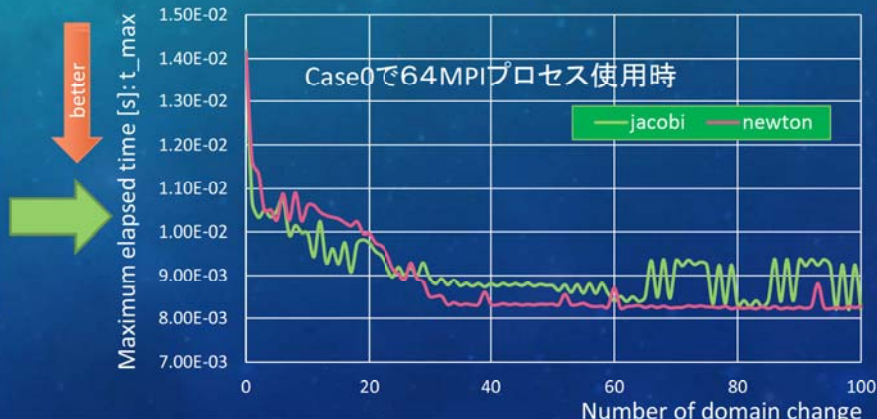
(a) 各プロセスで粒子数を等しくした領域分割
Case1で484ノード使用時 t_{max} : 5.96d-2 [s],
($t_{max}-t_{min}$)/ t_{max} : 74%



(b) 各プロセスで経過時間を等しくした領域分割
Case1で484ノード使用時 t_{max} : 2.74d-2 [s]
($t_{max}-t_{min}$)/ t_{max} : 37%

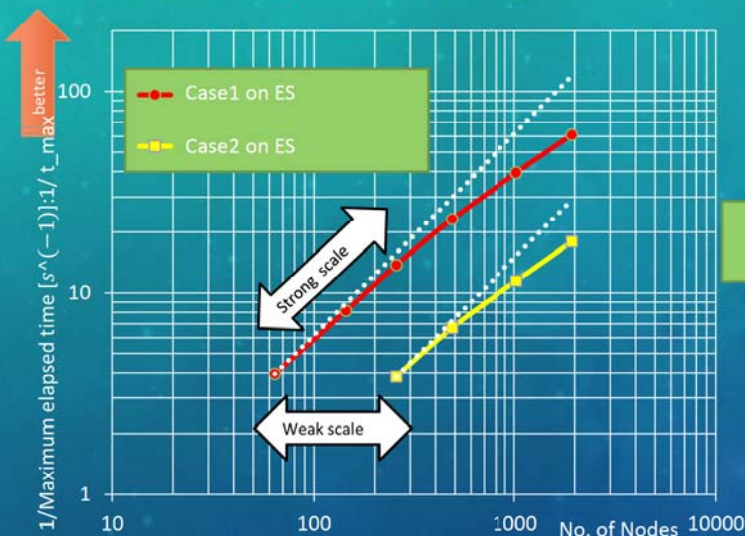
・経過時間ベースの負荷分散
バランサーは粒子数ベースの
方法より効率的に並列化性能
を引き出せる

- ・ 右図において擬ニュートン手法 (newton) と、シンプルに近接ノード間の経過時間差符号のみで領域境界移動を行うバランサー (jacobi: ヤコビアンが定数) を比較。
- ・ newton法では振動が少ない収束性が見られた



ESにおける強スケールの評価

ESでの強スケーリング測定



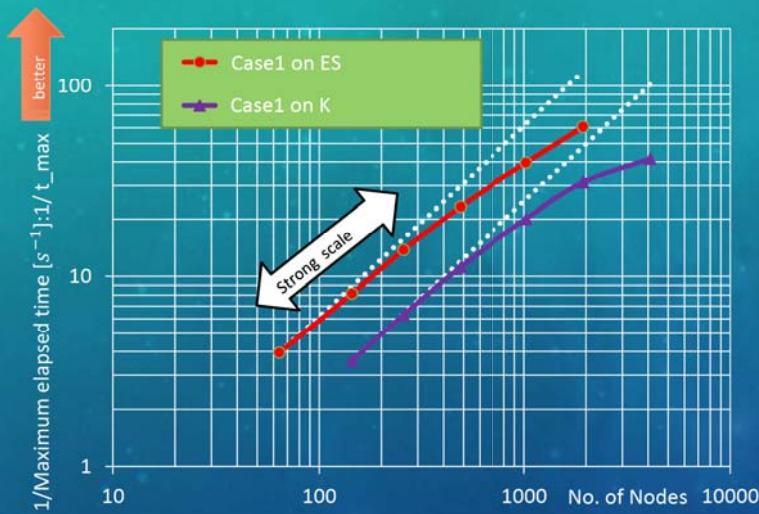
◆ Case1: 総粒子数 2.3億個
(うち水粒子 1.8億粒子), (Lx, Ly, Lz)=(64, 4, 64)
並列化率測定値: 99.947% 理想値(*1): 99.963%
(64ノード → 1936ノードで計測)
粒子分布偏差による性能劣化は0.016%

◆ ケース2: 総粒子数 8.9億個
(うち水粒子 7.2億粒子), (Lx, Ly, Lz)=(128, 4, 128)
並列化率測定値: 99.960%(*2) 理想値(*1): 99.981%
(256ノード → 1936ノードで計測)
粒子分布偏差による性能劣化は0.021%

*1: 理想値は粒子分布を空間的に均質にしたケースにて別途測定
*2: ESフルノード使用可能

適切な動的負荷分散の実施により、異なるノード数において強スケーリングが確認された。

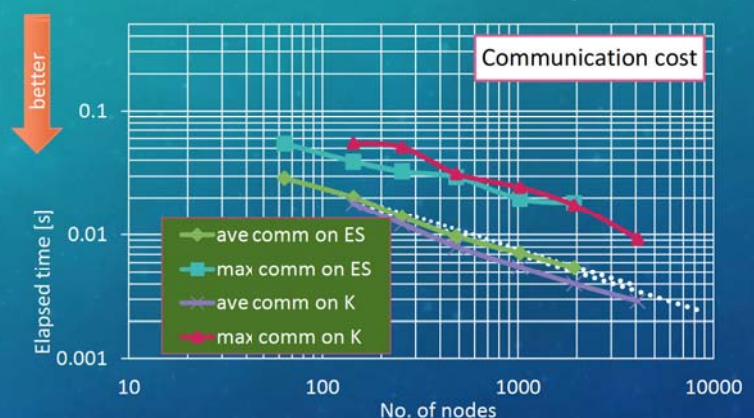
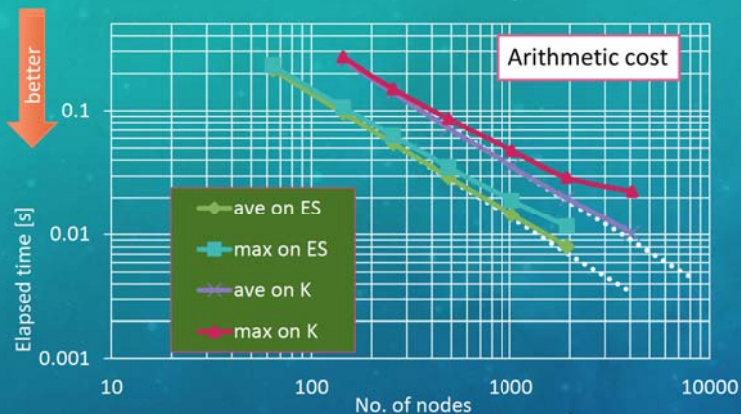
ESとKコンピュータの比較: ①強スケーリング



- ◆ Case1: 総粒子数 2.3億個 (うち水粒子 1.8億粒子), (Lx, Ly, Lz)=(64, 4, 64)
- ◆ 京コンピュータはESと比較して高い並列化性能 99.947% on ES vs 99.961% on K computer
- ◆ 同じノード数の経過時間ではESの方が優れている。

ESとKコンピュータの比較: ②算術コストと通信コストの関係

- 計算コスト＝経過時間を算術部分 (arithmetic) と通信部分 (communication) に分離して解析



Node	K-computer(K)	Earth Simulator (ES)
Peak performance	128 GFLOPS	256 GFLOPS
Memory size	16 GB	64 GB
Interconnect	5GB/s × 2	4GB/s × 2

- ◆ ESと京のハードウェア性能差によって、経過時間と並列化率の差が説明可能
- ◆ ノード間通信による律速

アプリケーション

先端技術: 動的負荷分散技術

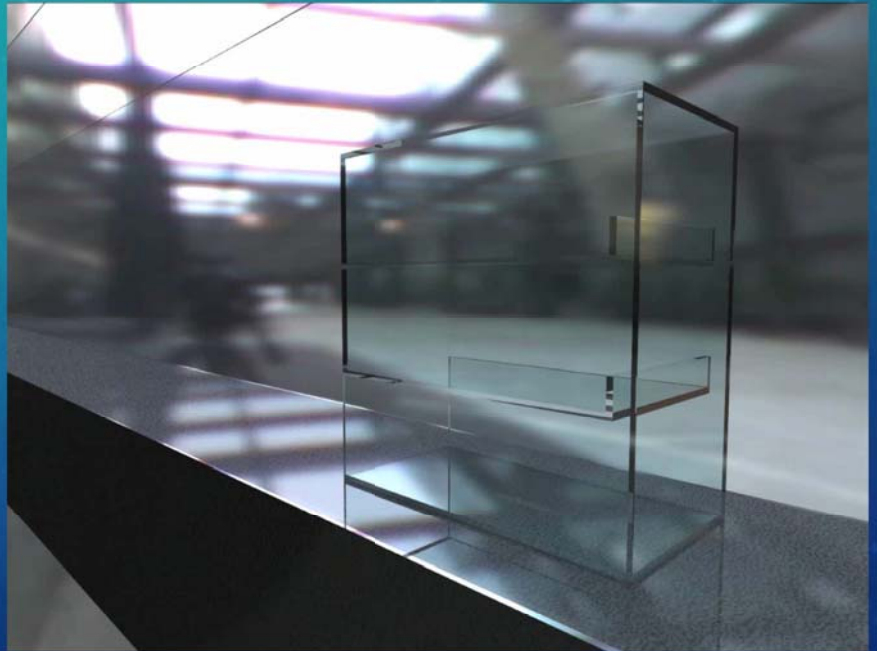
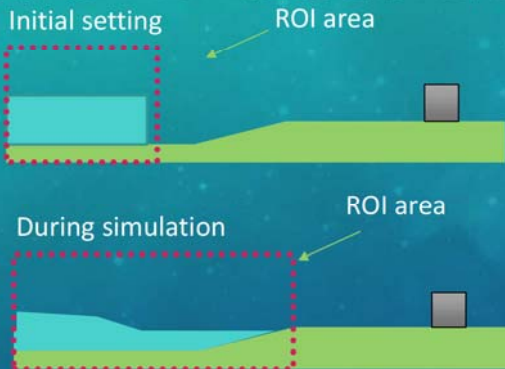


地球シミュレーター



既存にはない超大規模粒子法計算によるイノベーションへの挑戦: 技術開発の波及効果

事例: ①5000万~1億粒子を用いた水塊問題



効率的な計算を行うためにRegion of Interest (ROI) アルゴリズムを採用した。計算は赤い点線で囲まれた部分のみで行い、水塊崩壊に伴って対象領域(壁粒子群)を動的に加える。

津波遡上プロセスの解明へ

事例: ②25億DEM粒子を用いた砂箱実験問題の再現

全領域

Zoom up

フロンタルスラスト形成過程、特にその予兆現象を理解することで、地震発生メカニズムの理解に貢献

事例: ③SPH-DEM混相流計算

今後の取り組み:

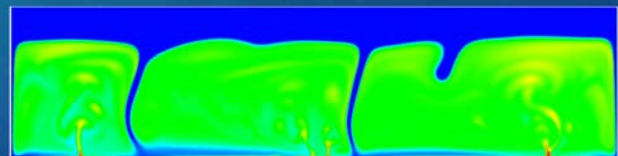
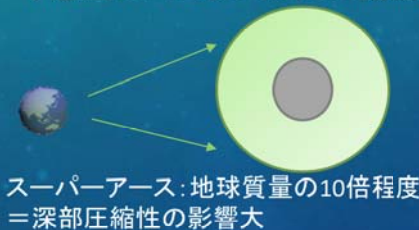
開発した技術を津波、堆積層形成問題の解明に活用すると共に、数値惑星の実現に向けたコア形成シミュレーションや、マグマだまりのStokes-DEMシミュレーションの大規模並列化に逐次適応させて、ESを用いた大規模計算に取り組む。

本プロジェクトの主な成果

- スライスグリッドと擬ニュートン法を組み合わせた動的負荷分散技術を開発し、世界最高規模の大規模粒子計算をES上で可能にした。(本発表)
- 内核を含めた新しいダイナモシミュレーションを新しい重合格子Yin-Yang-Zhong格子を用いてESで実施 (特別推進課題枠にて宮腰が発表)
- スーパーアースのマンテル対流シミュレーションにおいて、圧縮性の効果に対流に及ぼす影響を詳細に調べ、惑星のハビタブル性の議論を深めた。



[Hayashi and Kageyama, JCP, 2016]



[Miyagoshi et.al., JGR-Planets, 2015]

これらは、ロバストな非線形ソルバー、球殻格子そして高度な並列化技術といった、本プロジェクトでのオリジナルな数値手法開発、並びにそれらの効率的な実装により得た成果である。