固体地球シミュレーション プラットフォームの開発

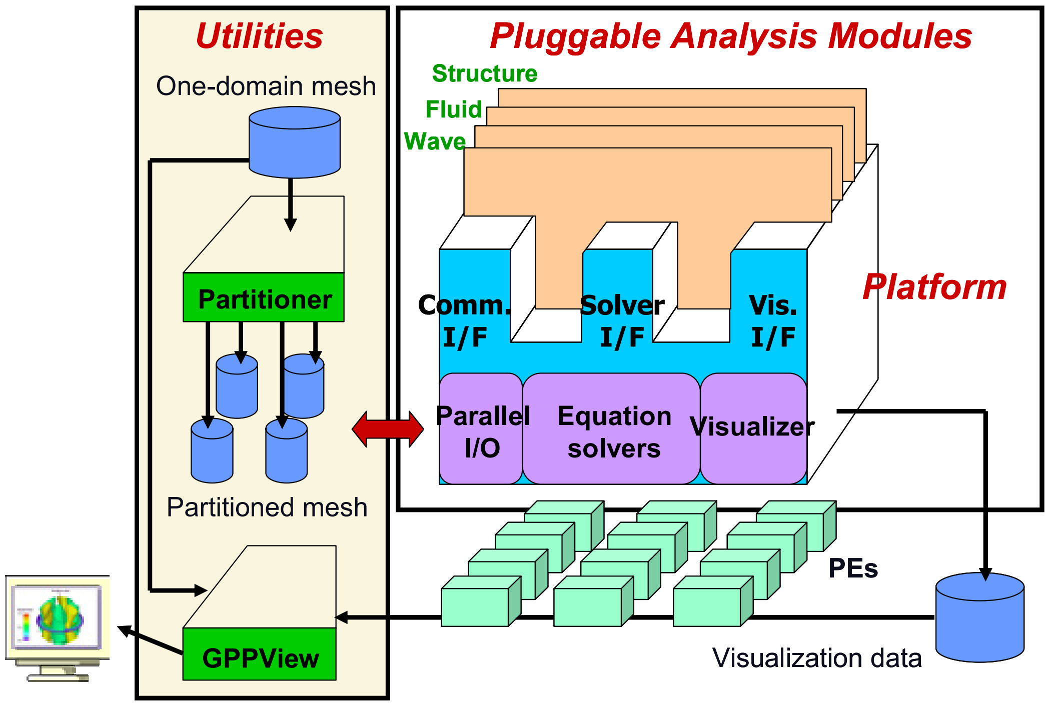
中島研吾（東大 理･地球惑星）

平成16年度 地球シミュレータ利用報告会 2005年1月7日

背景：GeoFEMプロジェクト

http://geofem.tokyo.rist.or.jp

- 科学技術振興調整費総合研究（1998～2002年度）「高精度の地球変動予測のための並列ソフトウェア開発」
  - 固体地球シミュレーション用プラットフォーム（有限要素法）



目 的

- 固体地球シミュレーション･プラットフォーム｢GeoFEM｣において，プラグイン形式による解析システム結合，大規模線形システムの高速並列解法，大規模並列可視化，その他の汎用的解析支援機能に関する研究を行う。
  - 並列反復法によるSMPクラスタ向け高速ソルバーの最適化，性能評価
  - 並列メッシュ生成，並列固体地球シミュレーション，連成解析カップラー，並列可視化からなる統合化プラットフォーム開発
  - 西南日本地震発生サイクル解析，地球外核電磁熱流動解析，へのプラットフォームの適用
  - 地下水流動･物質拡散解析，津波シミュレーション，実機工学問題解析
  - 構造格子系，離散粒子系へのプラットフォーム拡張
- 構成員
  - GeoFEMプロジェクトのメンバーが中心（機械，航空，情報系）

実施項目

- 線形ソルバー，並列アルゴリズム
  - 並列反復法によるSMPクラスタ向け高速ソルバーの最適化，性能評価
- プラットフォーム整備
  - 並列メッシュ生成，並列固体地球シミュレーション，連成解析カップラー，並列可視化からなる統合化プラットフォーム開発
- プラットフォーム適用（固体地球グループ）
  - 西南日本地震発生サイクル解析，地球外核電磁熱流動解析，へのプラットフォームの適用
- プラットフォーム適用（工学分野）
  - 地下水流動・物質拡散解析，津波シミュレーション，実機工学問題解析の実施
- プラットフォーム拡張
  - 構造格子系，離散粒子系へのプラットフォーム拡張

2002年度，2003年度の活動

- 線形ソルバー，並列アルゴリズム
  - 基本的な反復法，接触問題向け解法（Selective-Blocking）
- プラットフォーム整備
  - 可視化，I/O
  - 最適化
- プラットフォーム適用
  - 平原グループ（固体地球）
    - 「GeoFEM」を利用した日本列島周辺地震発生サイクルシミュレーション
  - 浜野グループ（固体地球）
    - FEMによる地球外核MHDシミュレーション
  - 古村グループ（固体地球）
    - 並列Volume Rendering可視化

2004年度計画

- 線形ソルバー，並列アルゴリズム
  - 接触問題を中心に，更なる安定，高効率なSMPクラスタ向け前処理手法を開発する。
- プラットフォーム拡張
  - AMR（Adaptive Mesh Refinement）ツール
  - 境界要素法型解法向けプラットフォーム拡張
  - 粒子法向け可視化手法
- プラットフォーム適用
  - プラットフォーム実用化のため固体地球分野内各グループとの連携を深めるほか，非構造格子，有限要素法によるアプリケーションに関係した他分野とも積極的に連携していく。
  - 有限要素法による工学アプリケーションの開発，シミュレーション実施（材料科学，圧縮性流体解析）：当グループ内

2004年度成果（1/2）

- 線形ソルバー，並列アルゴリズム
  - SAI（Sparse Approximate Inverse）法による前処理手法を開発し，最適化を実施し，ハイブリッド型並列プログラミングモデルにおいて従来手法より高い性能を達成した。
- プラットフォーム拡張
  - AMRによるメッシュ分割ツールの開発，境界要素法型解法向けプラットフォーム拡張，粒子型解法向け可視化手法の開発を実施した。

2004年度成果（2/2）

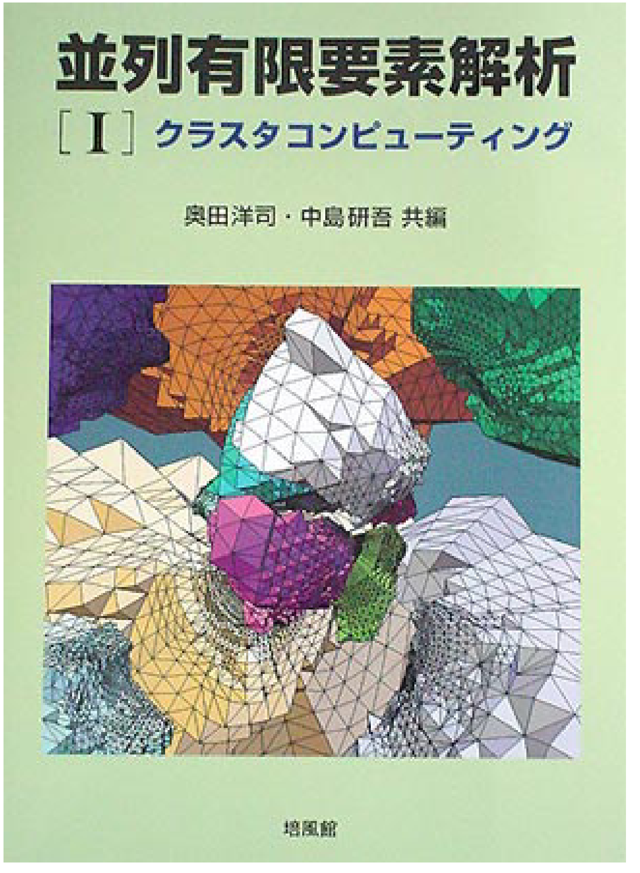
- プラットフォーム適用
  - 各グループへのツールの提供，最適化支援
  - 古村グループ（固体地球）
    - 並列Volume Rendering可視化
  - 平原グループ（固体地球）
    - GeoFEM，前処理付き並列反復法，AMRツール
  - 松浦グループ（固体地球）
    - 境界要素法型解法向けプラットフォーム
  - 阪口グループ（先進・創出：DEM）
    - ポアソン方程式ソルバー，粒子法可視化機能
  - 奥田グループ（先進・創出：原子力）
    - ポアソン方程式ソルバー，大規模メッシュ生成機能，並列可視化機能
  - 当グループ内
    - 有限要素法による第一原理計算コード開発，シミュレーション

外部発表等

- 査読付き論文：4件（投稿中，発行待ち含む）
  - L.Chen, I.Fujishiro, and K.Nakajima, “Parallel Visualization of Large-Scale Unstructured Geophysical Data for the Earth Simulator”, Journal of Pure and Applied Geophysics (in press), 2004.
  - K.Nakajima, "Preconditioned Iterative Linear Solvers for Unstructured Grids on the Earth Simulator", HPC Asia 2004 Technical Paper, pp.150-159, Ohmiya, Japan, 2004.
  - K.Nakajima, "Three-Level Hybrid vs. Flat MPI on the Earth Simulator: Parallel Iterative Solvers for Finite-Element Method", Applied Numerical Mathematics (in press), 2004.
  - K.Nakajima, "Parallel Iterative Solvers for Finite-Element Methods using an OpenMP/MPI Hybrid Programming Model on the Earth Simulator", submitted to Parallel Computing, 2004. (Special Issue of WOMPEI 2003)
- 口頭発表：13件

外部発表等（続き）

- 著書：1件
  - 奥田，中島編「並列有限要素解析〔I〕クラスタコンピューティング」，培風館，2004.
    - 「GeoFEM」の成果のまとめ
    - 「地球シミュレータ」上での最適化，シミュレーション結果を紹介



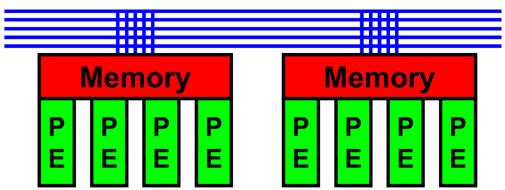
2004年度成果の実例

- 線形ソルバー，並列アルゴリズム
  - **SAI（Sparse Approximate Inverse）法による前処理手法**
- プラットフォーム拡張
  - AMRによるメッシュ分割ツールの開発
  - 粒子型解法向け可視化手法の開発
- プラットフォーム適用
  - 有限要素法による第一原理計算コード開発，シミュレーション

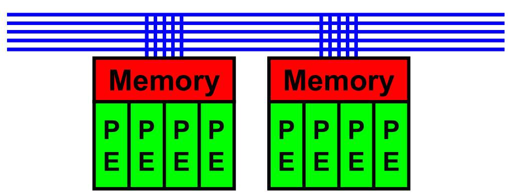
前処理付き反復解法と有限要素法

- Multicolorオーダリングが有効：ICCG系解法
- ノード数が増加するとHybridがFlat-MPIよりも有利
- 色数を増やすと反復回数は減るが，性能は低下
  - Hybridで著しい

<u>Flat-MPI：Each PE -> Independent</u>

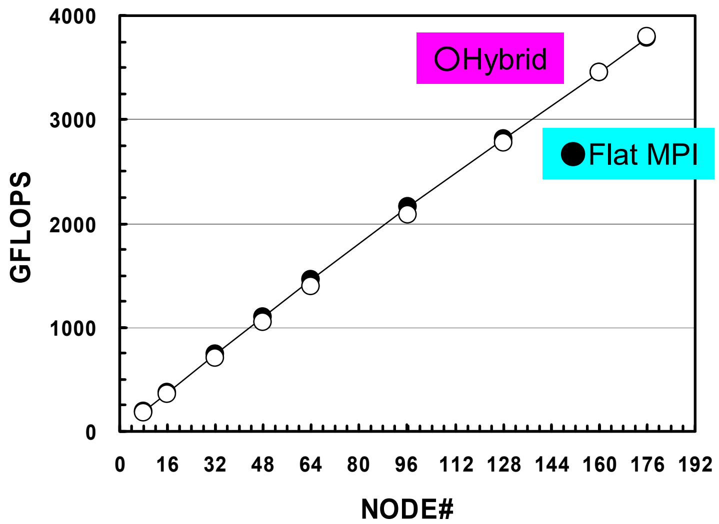


<u>Hybrid：Hierarchal Structure</u>

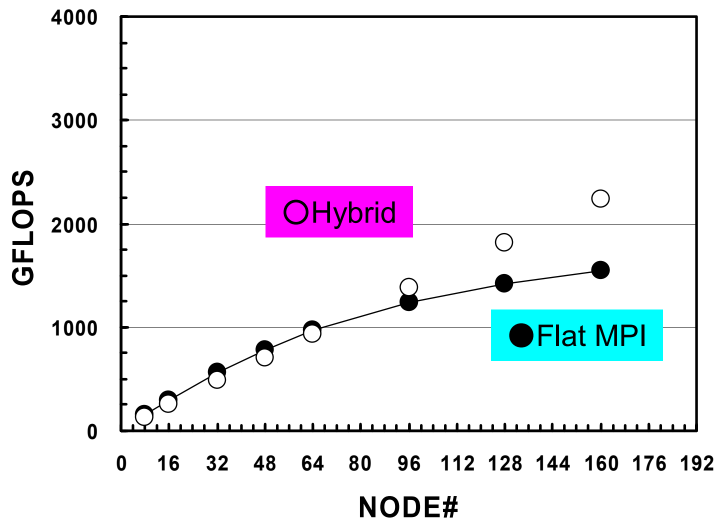


前処理付き反復解法と有限要素法

- ノード数が増加するとHybridがFlat-MPIよりも有利
  - 特に問題規模が小さい場合



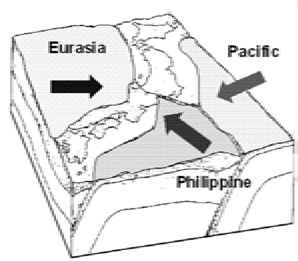
12.6 M DOF/SMP node

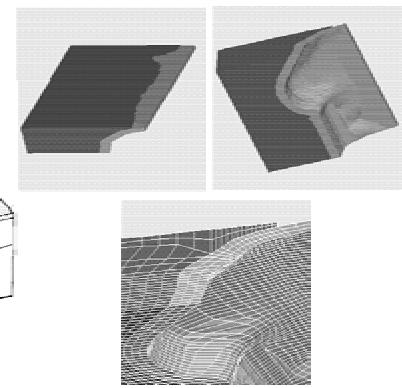


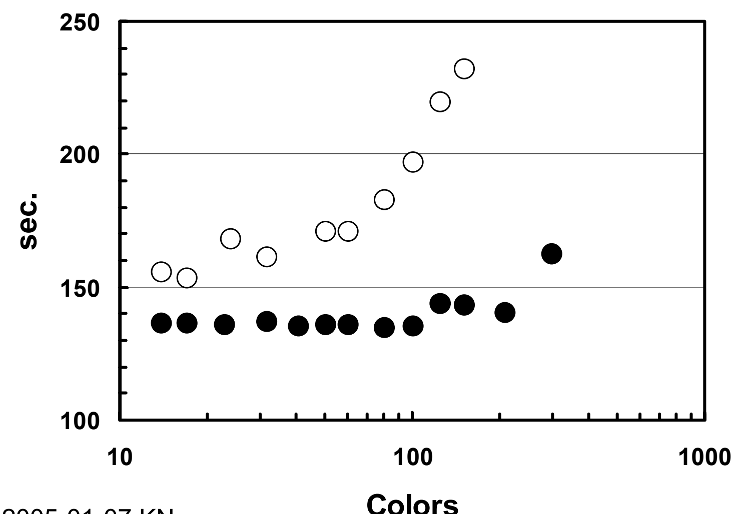
0.79 M DOF/SMP node

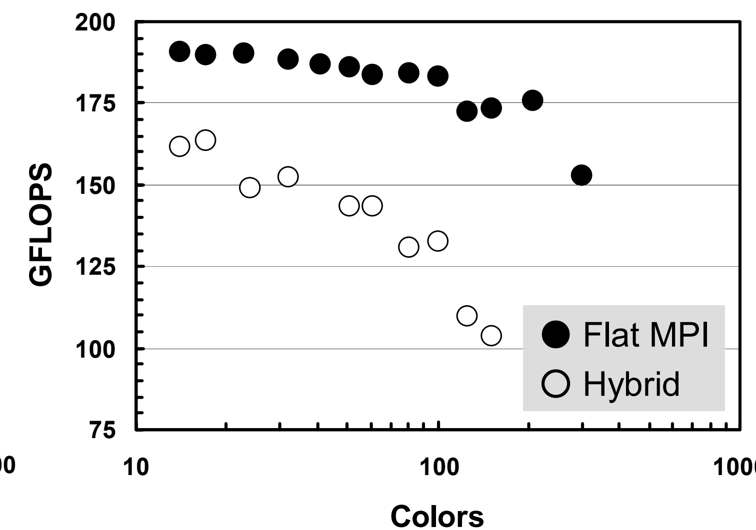
前処理付き反復解法と有限要素法

- 色数を増やすと反復回数は減るが，性能は低下
  - Hybridで著しい
- 接触問題の例









Many Colors ... Trade-Off

- Fast convergence according to iteration number
  - S.Doi et al.
- Smaller vector length
  - FLOPS rate decreases.

- Hybrid is much more sensitive to color number
  - + Synchronization overhead of OpenMP

Hybrid is much more sensitive to color numbers !

due to synchronization overhead of OpenMP

SMP parallel

Vectorized

```
do iv= 1, NCOLORS
!$omp parallel do private (iv0,j,iS,iE,i,k,kk etc.)
do ip= 1, PEsmpTOT
  iv0= STACKmc(PEsmpTOT*(iv-1)+ip- 1)
  do j= 1, NLhyp(iv)
    iS= INL(npLX1*(iv-1)+PEsmpTOT*(j-1)+ip-1)
    iE= INL(npLX1*(iv-1)+PEsmpTOT*(j-1)+ip  )
!CDIR NODEP
    do i= iv0+1, iv0+iE-iS
      k= i+iS - iv0
      kk= IAL(k)
      (Important Computations)
    enddo
  enddo
enddo
enddo
```

SAI (Sparse Approximate Inverse)

SAI は「近似逆行列」であり，以下に示す式（III-1.1）の最小二乗問題によって係数行列 A の逆行列を近似するような前処理行列 M^{-1} を求めるものである：

$$\min \left\| AM^{-1} - E \right\|_F^2 = \sum_{k=1}^{n} \min_{m_k \in R^n} \left\| A\mathbf{m}_k - \mathbf{e}_k \right\|_2^2 \qquad \text{III-1.1}$$

SAI (Sparse Approximate Inverse)

ただし，ベクトル $\mathbf{m}_k$ は行列 M^{-1} の k 列目の列成分，ベクトル $\mathbf{e}_k$ は単位行列 E の k 列目の列成分を表している。ベクトル $\mathbf{m}_k$ は式(III-1.1)の右辺を最小化するように求めればよいが，計算量を減少させるために，あらかじめ前処理行列 M^{-1} の非ゼロ要素の場所を決定しておきその非ゼロ要素のみを取り出すことを考える。最も簡単な方法としては，前処理行列 M^{-1} の非ゼロ要素の位置を係数行列 A と同じにすることである。ILU 系前処理と同様，Fill-in を許せば，前処理行列 M^{-1} の性能は向上するが，計算量，記憶容量ともに増加する。前処理行列 M^{-1} の非ゼロ要素の行インデックス集合を J，J の各々の行インデックスに対応する非ゼロ要素の列インデックス集合を I とすると，式(III-1.1)は：

$$\sum_{k=1}^{n} \min_{m_k(J)\in R^J} \left\| A(I,J)\,\mathbf{m}_k(J) - \mathbf{e}_k(I) \right\|_2^2 \qquad \text{III-1.2}$$

を解くことに帰着できる。

SAI (Sparse Approximate Inverse)

ここで式(III-1.2)は，n 本の I×J 次の最小二乗問題：

$$\min_{m_k(J)\in R^J} \left\| A(I, J)\, \mathbf{m}_k(J) - \mathbf{e}_k(I) \right\|_2^2 \qquad (1 \le k \le n) \qquad \text{III-1.3}$$

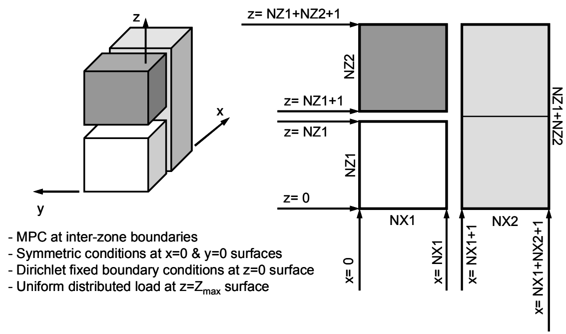
の計算を独立に行なうことができるので，式(III-1.3)の最小二乗問題を各 CPU に均等に割り当てて，並列に計算することが可能となる。式(III-1.3)の最小二乗問題は Givens 回転行列を使用して QR 分解によって解くことが可能である。

SAIの特長

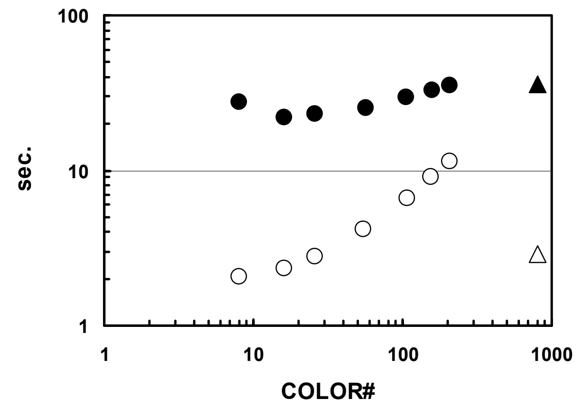
- M^{-1}の近似を陽的に求めることが可能
  - 疎行列の逆行列は必ずしも疎行列では無いが，SAIでは，「もとの行列と同程度に疎な」行列と仮定する。

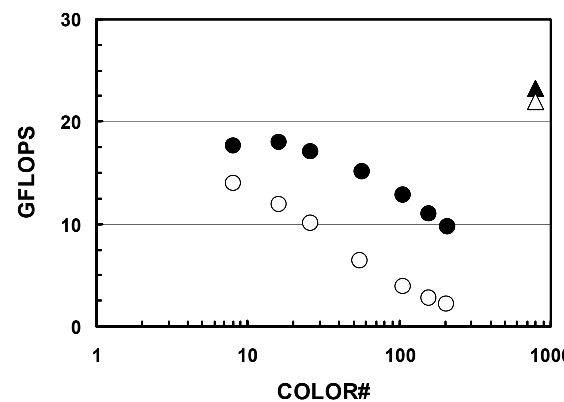
- 前処理部分を「行列ベクトル積」の形で表現でき，前進後退代入型と比べて，ベクトル化，並列化は容易。
  - 依存性が無いのでMulticolor オーダリングは不要
  - IC/ILU系よりも高いGFLOPS値が期待できる。
- M^{-1}の「近似度」の計算時間，収束性への影響。
  - M^{-1}の計算そのものにも時間がかかる。
  - N<50程度のQR分解を未知数分解く。並列化は容易だが，ベクトル長は短い。

接触問題への適用
地球シミュレータ1ノード



●: SB-BIC(0), ▲: SAI: Large (2.47M DOF)
○: SB-BIC(0), △: SAI: Small (0.35M DOF)





- 従来手法とほぼ同じ計算時間
  - GFLOPS値では上回る
  - 前処理（最小二乗法）が全体の20%程度（スカラー機では1%未満）
- 色数の影響は無い（行列ベクトル積のみ）
- 問題規模の影響が小さい
  - 小さいモデルでも高性能

2004年度成果の実例

- 線形ソルバー，並列アルゴリズム
  - SAI（Sparse Approximate Inverse）法による前処理手法
- プラットフォーム拡張
  - **AMRによるメッシュ分割ツールの開発**
  - 粒子型解法向け可視化手法の開発
- プラットフォーム適用
  - 有限要素法による第一原理計算コード開発，シミュレーション

AMR（Adaptive Mesh Refinement）

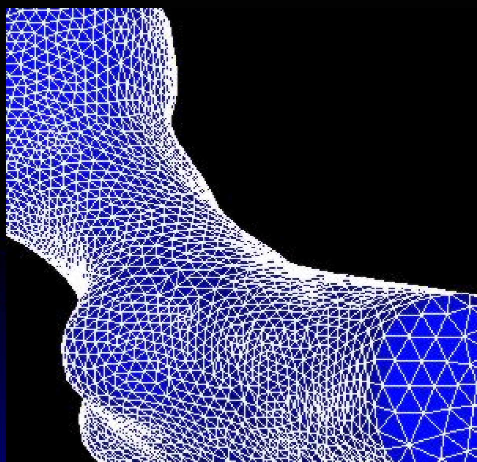
- 差分法，有限要素法などで空間を離散化する場合，精度良い解を求めるためには，細かいメッシュが必要である。
- 細かいメッシュを切ると，それだけ，計算量，必要記憶容量が増加する。
- 細かいメッシュを必要とするのは，解析領域全体ではなく，ごく一部である。
  - 衝撃波，渦，剥離
  - 応力集中，亀裂
  - 従属変数が急激に変化する領域

AMR（続き）

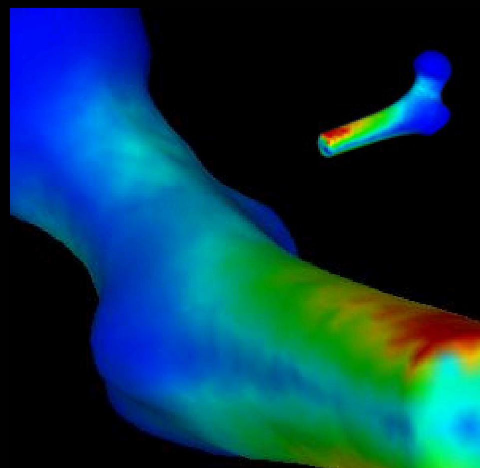
- しかしながら，多くの場合，これらの現象が生じる領域は，前もって分かっていない。
- 比較的粗いメッシュから始めて，計算結果に応じて，局所的な細分化（refinement）を自動的に実施し，精度良い解を効率的に求める手法が，適応格子法（Adaptive Mesh Refinement）である。
  - 非定常問題の場合，細かいメッシュが必要でなくなった領域のメッシュを粗くする（coarsening）場合もありうる。
  - 並列計算
    - 動的負荷分散（Dynamic Load Balancing）とセット

適応格子法の応用例

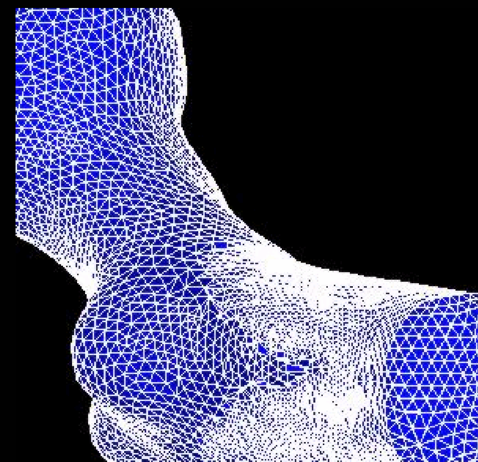
構造力学，有限要素法



Initial Mesh



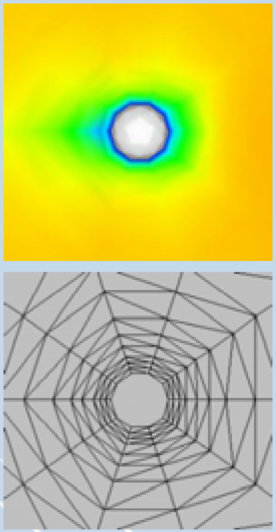
Mises Stress



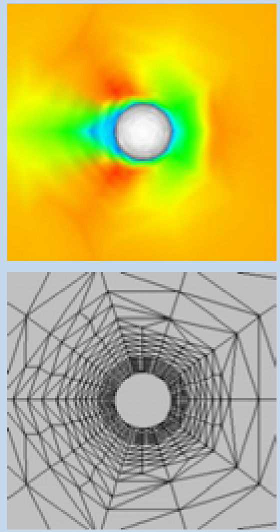
Adapted Mesh

Supersonic Flow around a Sphere

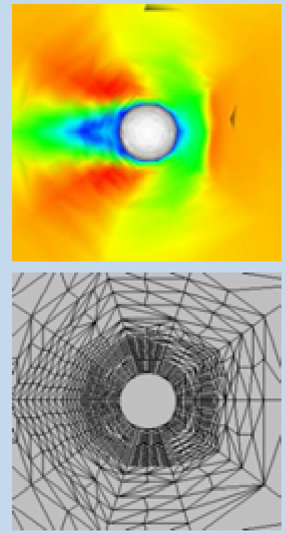
M=1.40 Uniform Flow, Ideal Gas, Re=10^6
4 PE cases (tetrahedron only)



Initial Grid



1-Lev. Adapted

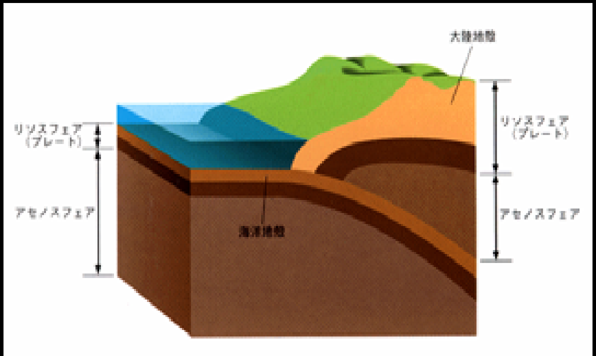


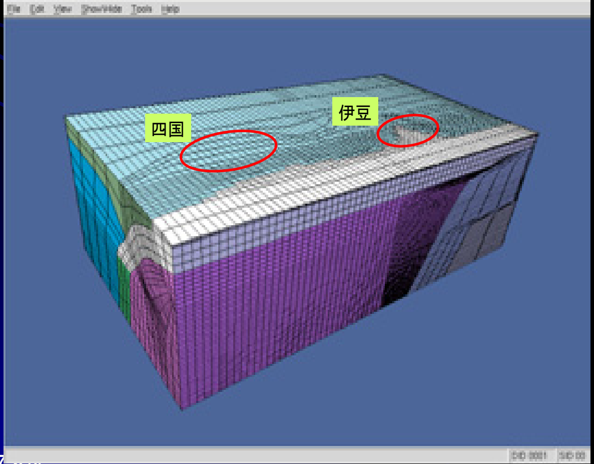
2-Lev. Adapted

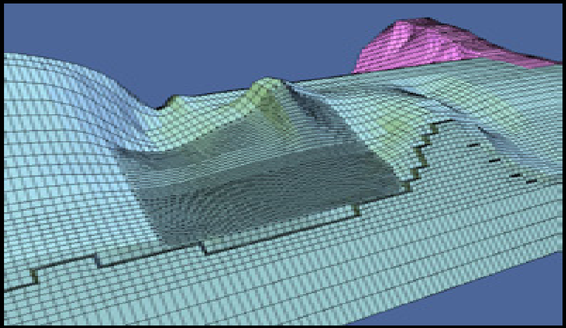
	Initial Grid before	Initial Grid DRAMA	1-Lev. before	1-Lev. DRAMA	2-Lev. before	2-Lev. DRAMA
PE0	137	-	793	652	3834	2527
PE1	137	-	696	650	2769	2526
PE2	136	-	668	652	2703	2522
PE3	136	-	448	651	1390	2524

本年度作業:平原グループ

- 複雑断層面上のすべり応答関数算出

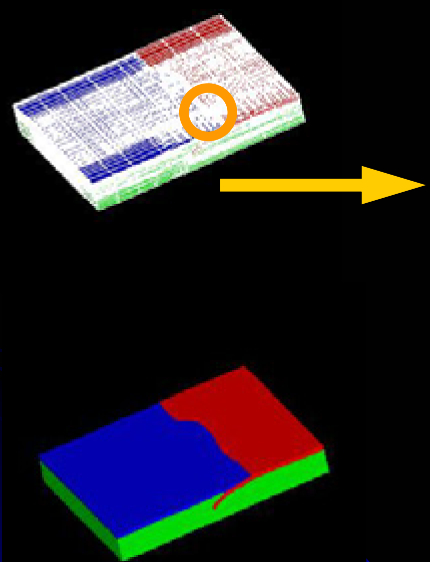


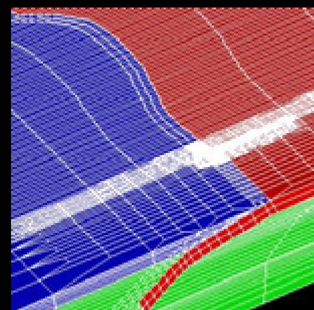


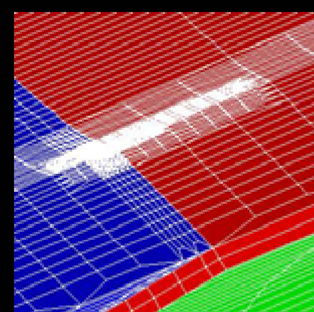


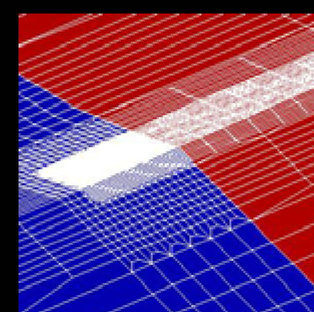
複雑断層面上でのすべり応答関数算出

対象領域を局所的細分化







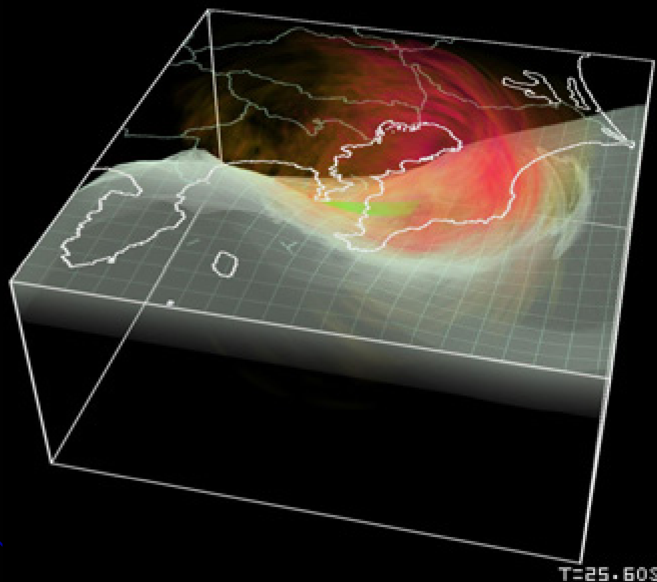


- 本年度作業
  - ES上でのシリアル版ツールの開発

2004年度成果の実例

- 線形ソルバー，並列アルゴリズム
  - SAI（Sparse Approximate Inverse）法による前処理手法
- プラットフォーム拡張
  - AMRによるメッシュ分割ツールの開発
  - 境界要素法型解法向けプラットフォーム拡張
  - 粒子型解法向け可視化手法の開発
- プラットフォーム適用
  - 有限要素法による第一原理計算コード開発，シミュレーション

Structured Grids for FDM



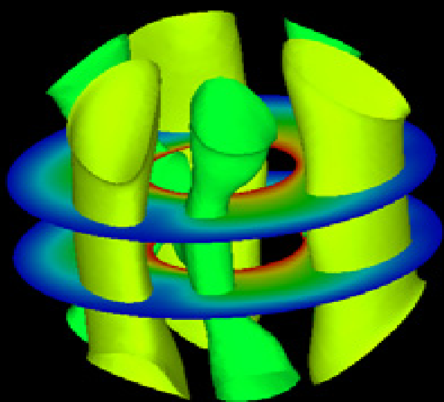
Parallel volume rendering for a regular dataset (Tokyo scenario earthquake simulation, Data courtesy of Prof. Takashi Furumura, ERI/University of Tokyo)

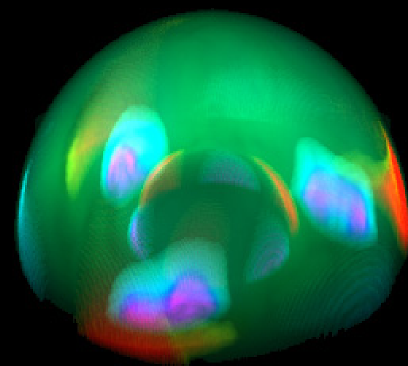
Unstructured Grids for FEM

Hybrid of tetrahedra, hexahedra, prisms, etc.

Hierarchical

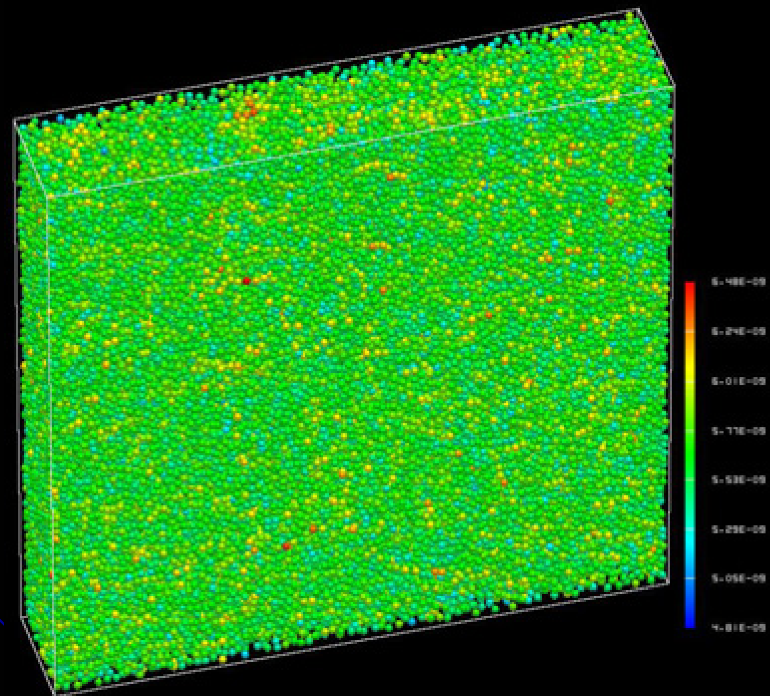
Higher order elements





Parallel visualization images for the unstructured magnetohydrodynamic simulation datasets: Parallel surface rendering image (left); Parallel volume rendering image (right) (Data courtesy of Dr. H. Matsui, University of Chicago)

Particle Data for DEM



Parallel surface rendering image for displaying large number of particles (Data courtesy of Dr. Daisuke Nishiura, Doshisha University)

2004年度成果の実例

- 線形ソルバー，並列アルゴリズム
  - SAI（Sparse Approximate Inverse）法による前処理手法
- プラットフォーム拡張
  - AMRによるメッシュ分割ツールの開発
  - 境界要素法型解法向けプラットフォーム拡張
  - 粒子型解法向け可視化手法の開発
- プラットフォーム適用
  - 有限要素法による第一原理計算コード開発，シミュレーション

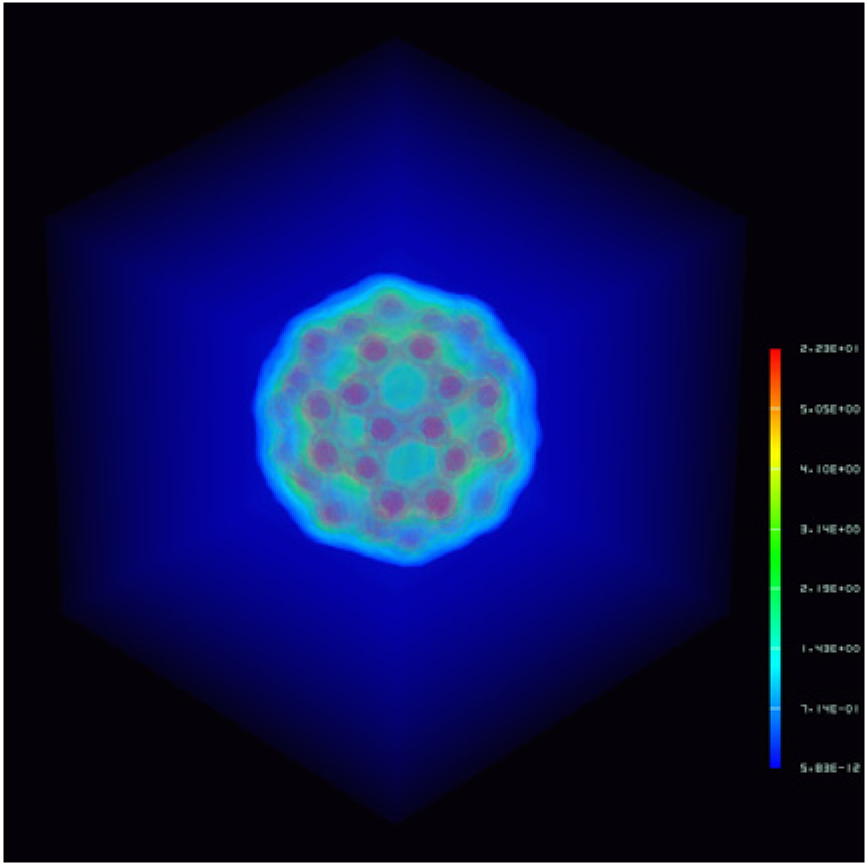
背景・目的

- 第一原理計算の必要性
  - 実験不可能な微小領域／時間の予測
  - 電子構造の影響が大きい領域の解析
- 現在の状況
  - 周期性のある系（結晶系）
  - 低分子有機，～数千原子
- 将来展望
  - 高分子有機（たんぱく質，数万原子）
  - 化学反応予測

実空間第一原理計算

- 超並列計算に適した，有限要素法で離散化
  - GeoFEMを用いて開発
  - C60 fullerenで測定．原子数大　→　高効率
  - 計算時間，規模等
    - 64,000要素×60原子×4電子= 15,360,000 DOF
    - 1ステップ当たり5 sec.（1 SMPノード）⇒50,000ステップ必要
    - 現在実施中の計算
      - 100 SMPノード，100M要素×240原子×4電子
- Kohn-Sham方程式が基礎方程式
  - 密度汎関数理論

計算例



- C60 fulleren
- 電子密度を表示
- GeoFEM付属PVRで可視化

2004年度達成度，今後の展望

- 線形ソルバー，並列アルゴリズム
  - SAIについては，今後大規模問題への適用，評価が必要。
  - Multigrid系解法：SmoothingのGauss-Seidelの色数，AMG
- プラットフォーム拡張
  - AMRについては更なる最適化，並列化が必要。
  - 境界要素法型解法向けプラットフォーム拡張については，地震発生時における不安定性の解決が必要。
- プラットフォーム適用
  - 各グループとの協力，ツール提供に関しては，良い成果を得られた。今後も積極的に活動し，協力関係を広げたい。
  - 第一原理計算コードについては，更に実用的なシミュレーションを実施する。
  - 圧縮性流体解析：AMR機能との連携