

先端的固体地球科学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 数理科学・先端技術研究分野

著者

古市 幹人 海洋研究開発機構 数理科学・先端技術研究分野

陰山 聡 神戸大学 大学院システム情報学研究科

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

亀山 真典 愛媛大学 地球深部ダイナミクス研究センター

西浦 泰介 海洋研究開発機構 数理科学・先端技術研究分野

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。そして、個々の問題解決を目指すとともに、それらを統一的な数値モデルの下で記述する数値惑星シミュレーションの実現をグランドチャレンジとする。

本年度は、粒子法における混相流問題に対する動的負荷分散並列化手法の適応、ならびにマントルシミュレーションにおいて、大きな進捗があったため、本稿で紹介する。また現在取り組んでいるシミュレーションについても紹介する。

キーワード：粒子法, 動的負荷分散, 津波 マントル対流, スーパーアース, プレート運動

1. 大規模粒子法計算の技術開発 (古市&西浦)

SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics Method) や DEM (Discrete Element Method) に代表される近接粒子相互作用の粒子法は大変形や混相流問題の扱いに強く、地球科学や防災・減災を目的とした諸問題において有効性が認められている [1]。しかしながら、計算実行中に粒子分布が激しく変化するためロードバランスに問題があり、大規模並列化の実現を阻む要因となっていた。そこで我々は、計算中に並列空間領域分割を変更する動的負荷分散技術の開発に取り組んでいる。該当年度では、開発したコードによる並列化性能測定と、空間充填曲線と通信の overlap を行う事で通信コストの削減に取り組んだ。さらに DEM-SPH の混相流コードにモデルを拡張した。

1.1 動的負荷分散粒子法コードの高速化

SPH や DEM の実装において、ノード内は OpenMP[2]、ノード間は MPI による Hybrid 並列を実施した。領域分割法には slice grid や orthogonal recursive bisection に用いられる各列において異なる分割が可能な 2 次元の直交格子を採用した (図 1a)。各 MPI プロセスが担当する 2 次元領域要素を動的に変更する事で MPI プロセス毎に負荷を均質にする。均質化する計算負荷を、各プロセスで演算時間と通信時間により計測する事で、本手法は境界壁粒子などの粒子毎

に異なる計算負荷の扱いや、ヘテロジニアスな計算機アーキテクチャにも適応が可能である点で、既往手法より優れている。計算負荷は疑似ニュートン法 [3] の枠組みで動的に負荷分散される。以上の動的負荷分散技術開発の効果を確認するために、並列化性能を測定した。その結果 ES の能力を十分に引き出せていることが確認された [4]。

1.2 空間充填曲線を活用した overlap 通信の実装

さらなる効率化のため、並列化性能の最大阻害要因である通信コストを通信と演算の overlap により遮蔽する事に取り組んだ。具体的には、通信に関わる袖領域 (図 2 のオレンジ色領域) とそれ以外の領域 (図 2 の緑色領域) に分けて、袖領域の粒子計算をした後に袖領域以外の粒子計算と同時に袖領域の通信を行った。ここで、袖領域とそれ以外の領域の粒子に分けてデータアクセスする必要が有るが、メモリ上の粒子データの格納順によって幾つかのタイプが考えられる。ここでは図 3 に示す 3 つの

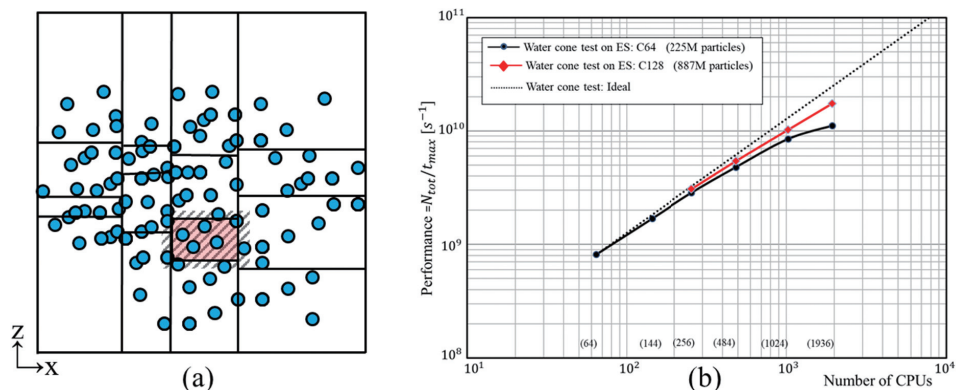


図 1 (a) 自由度をもった直交格子による領域分割と (b) スケーリング

タイプについて検討した。まず図 3(a)Type1 の様に、粒子データをセル番号順にソートしてある状態では、粒子データは袖領域とその他の領域で区別無くメモリ上に記憶されている。そこで、袖領域とその他の領域を区別する List Vector を用いて間接的にデータアクセスする。そのため、メモリアクセスが不連続になる。一方、図 3(b) Type2 では、袖領域とその他の領域で粒子データへのアクセスが連続になるように、予めメモリ上に分けて粒子データを格納する。これにより袖領域とその他の領域で分けて計算する時と通信を行う時に、粒子データへのメモリアクセスが連続になる。さらに、図 3(c)Type3 の様に袖以外の領域の粒子データを、空間充填曲線に倣ってメモリ上に格納することによって、相互作用する相手粒子のデータがメモリアドレス空間上で近くなり、キャッシュヒット率の向上が期待できる。

ES での測定結果を表 1 に示す。Non-overlap 場合と比較して Type1 + overlap では袖領域とその他の領域を分けるために必要なオーバーヘッドが大きく性能が大きく悪化した。一方で、Type 2 + overlap では袖領域データアクセスパターンの効率化により通信オーバーラップによる性能の改善が見られた。さらに空間充填曲線を用いた Type

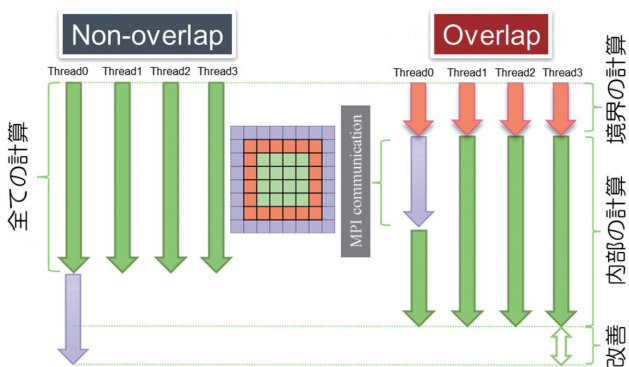


図 2 通信と演算のオーバーラップの概念図

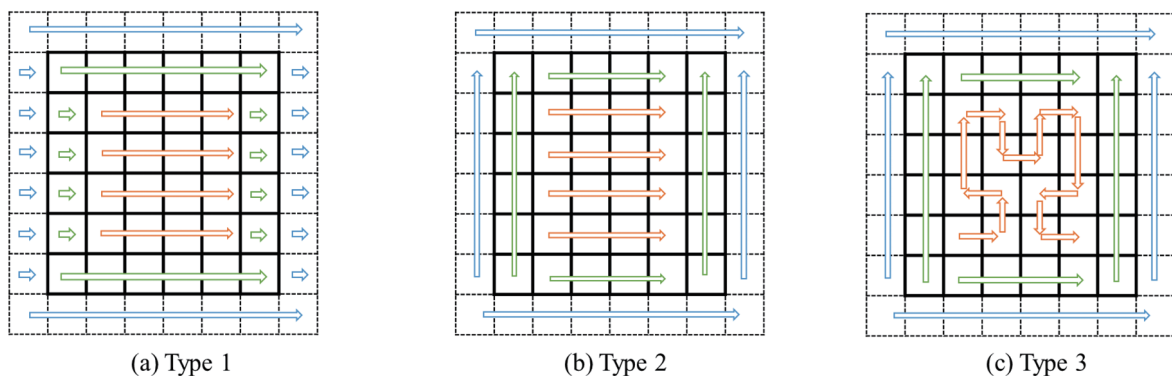


図 3 空間充填曲線を用いたセル順序の並び替えの概略

表 1 通信と演算のオーバーラップによる性能

	Type 1+Non-overlap	Type 1+Overlap	Type 2+Overlap	Type 3+Overlap
Arithmetic [ms]	120.0	264.4	123.1	120.9
Communication [ms]	5.5	-	-	-
Total [ms]	125.5	264.4	123.1	120.9
ADB hit ratio [%]	76.24	61.07	74.24	75.50

3 ではキャッシュ (ADB) 効率の向上による性能改善が確認できた。結果 Type3 + overlap では、オリジナルの通信コスト (5.5ms) の約 84% を遮蔽することに成功した。

1.3 DEM-SPH モデルへの拡張

結晶に富んだマグマのダイナミクスや、遡上に伴う堆積層の形成過程の解明などにおいて必須となる流体と固体の混相流の大規模問題に取り組むことを目的として、動的負荷分散粒子法コードを DEM と SPH の混相流問題に拡張させた。我々の負荷分散手法は、経過時間を負荷として扱えるため、DEM と SPH で粒子毎に異なる計算コストをユニット毎に均質化する事が出来た。コードの検証として、粒を含むダムブレイク問題等に取り組み [5] 実験値を再現できることを確認した (図 4)。

2. マントルダイナミクスの数値シミュレーション (宮腰、亀山)

2.1 系外惑星スーパー・アースのマントル対流シミュレーション

マントル対流はその惑星の熱進化やプレート運動、表層環境と深く関わっている。我々は現在続々と発見されている系外惑星スーパーアースのマントル対流について、本プロジェクトにより開発されたマントル対流シミュレーションコード ACuTE 法 [6] を用いて調べている。

昨年度までの本テーマの成果 [7,8] に続き、本年度は巨大スーパーアースのマントル対流の進化過程を調べた。惑星形成過程の研究より、giant impact 後は上部マントルとコアマントル境界が加熱された状態になる事が示唆されているため、そのような状況からの進化過程を見た。図 5 は計算結果の一例 (ポテンシャル温度の時間発展) であるが、地球の場合とは様相が大きく異なり、対流が 2 層に分離した状態が非常に長く続く (この計算例では

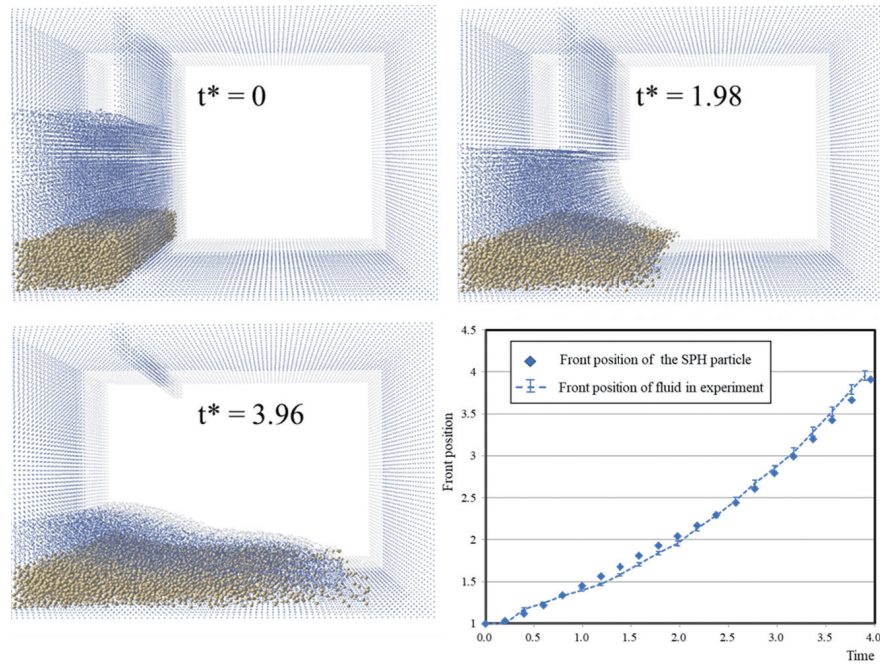


図4 粒子を含むダムブレイク問題と、実験値との検証 [5]

約 80 億年) 事が分かった。この計算結果からは、実際の巨大スーパーアースの内部では、対流は定常状態に近くなっているのではなく進化段階にある可能性が高い事が示唆される。また進化段階でこのような2層に分離した状態が長く続く事は、惑星表面の環境を考える上で重要な要素の一つになると考えられる。本成果は 2017 年 3 月に査読論文として出版された [9]。

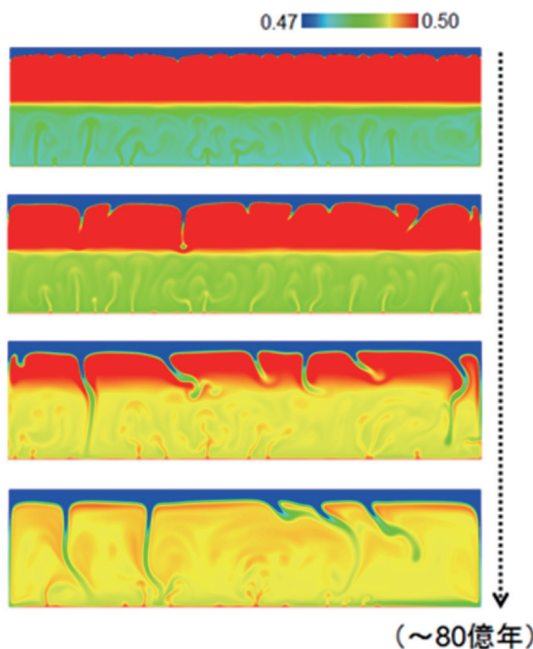


図5 地球の 10 倍質量を持つ、スーパーアースのマンテル対流の進化計算の一例。色はポテンシャル温度を表す。

2.2 応力履歴依存粘性を考慮したマンテル対流の数値シミュレーション

地球のプレートは、かかる応力により破壊が起きるが、元となった応力を取り除いてもすぐに元の固い状態には

復帰しない。すなわちその破壊（粘性率）には応力の履歴依存性がある。地球のプレートはかかる応力が同じで、破壊を受けている部分と固い部分とが共存している。プレート運動の持つ特徴を正確に再現し調べるには、この効果を適切に取り扱う事が必要である。

我々は ACUTE 法 [6] にこの応力履歴依存粘性を導入したコード開発を行っている。図6が計算結果の一例である。応力履歴の他に、温度および圧力に対する粘性率の依存性も考慮している。ホットプルームの周囲に、変形の集中した領域が形成され、そこからリソスフェアが沈み込んでいる。この計算ではマンテル最上部と最下部間の初期粘性率コントラスト（温度依存分-圧力依存分）が $O(10^3)$ 、レイリー数が $O(10^6)$ 程度なのであるが、これらの値を（地球に近づけて）より現実的な大きな値にすると数値不安定が発生して計算がうまく進まない。これは解像度（この計算では $512 \times 512 \times 128$ ）の不足、および時間刻み幅が適切でない事等が原因として考えられるため、来年度はさらに大規模な計算を実施する予定である。

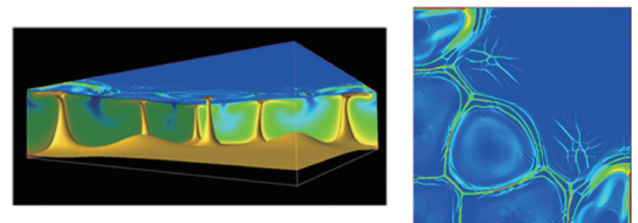


図6 [左] 熱いプルーム等値面（黄色）、プレートが受けているダメージ（上面）、温度分布（側面）[右] 惑星表面においてプレートが受けているダメージの分布。緑や黄色、赤の部分でプレートが強い変形を受け、割れている事を示す。

文献

- [1] M. Furuichi and D. Nishiura, *Geochem. Geophys. Geosyst.*, 15 (2014) doi:10.1002/2014GC005281.
- [2] Daisuke Nishiura, Mikito Furuichi, and Hide Sakaguchi, *Comp. Phys. Comm.*, 194, 18-32 (2015).
- [3] M. Furuichi and D.A. May, *Comput. Phys. Comm.* 192 (2015) 1--11.
- [4] M. Furuichi and D. Nishiura, *Comput. Phys. Comm.* (in press).
- [5] X. Sun, M. Sakai and Y. Yamada, *Journal of Computational Physics*, 248 147-176.
- [6] Kameyama M, Kageyama A, and Sato T (2005), *J Comput Phys* 206:162–181.
- [7] Takehiro Miyagoshi, Chihiro Tachinami, Masanori Kameyama, and Masaki Ogawa, *Astrophys. J. Lett.*, 780, L8 (2014).
- [8] Takehiro Miyagoshi, Masanori Kameyama, and Masaki Ogawa, *J. Geophys. Res.*, 120, 1267-1278 (2015).
- [9] Takehiro Miyagoshi, Masanori Kameyama, and Masaki Ogawa, *Earth, Planets and Space*, 69, 46 (2017).

Development of Advanced Simulation Methods for Solid Earth Simulations

Project Representative

Mikito Furuichi

Department of Mathematical Science and Advanced Technology, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

Authors

Mikito Furuichi

Department of Mathematical Science and Advanced Technology, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

Akira Kageyama

Graduate School of System Informatics, Kobe University

Takehiro Miyagoshi

Department of Deep Earth Structure and Dynamics Research, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

Masanori Kameyama

Geodynamics Research Center, Ehime University

Daisuke Nishiura

Department of Mathematical Science and Advanced Technology, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

Large-scale particle simulation: We have developed dynamics load balancing algorithms for particle simulation method involving short-range interactions, such as Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH), Moving Particle Semi-implicit method (MPS), and Discrete Element method (DEM). The proposed method utilizing an iterative nonlinear solver and 2D orthogonal grid domain decomposition, successfully demonstrated the strong and weak parallel scalabilities on the new Earth simulator. Efficient implementations of communication overlapping method were also examined. The overlapping technique with reordering cell label using space filling curve could improve the performance. The proposed methods were applied to the SPH-DEM coupled model.

Mantle convection: We have studied evolution processes of mantle convection in massive (ten times the Earth's mass) super-Earths with the ACuTEMAN numerical code which was developed in this project. We found that two-layered convection continues for a very long time unlike the Earth. In addition, we have tried to introduce stress-history dependent viscosity in the ACuTEMAN code to treat plate motion more precisely.

Keywords: Particle simulation, Dynamic load balancing, Tsunami, Core, Mantle Convection, super-Earths, Plate motion

1. Dynamic load balancing (Furuichi & Nishiura)

Complexities arising from granular and fluid system are fundamental for dynamics of such as the crystal rich magma, accretion prism and Tsunami sedimentation [1]. The numerical modeling with Particle Simulation Methods (PSM) involving short-range interactions, such as Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH), Moving Particle Semi-implicit (MPS) method, and Discrete Element method (DEM) are an effective approach for understanding such dynamics. A number of particles is essential for improving the accuracy and extending the system size in PSM. Thus, an efficient parallelization of the code is important. Moving Lagrangian particle methods, however, inherently suffer from the workload imbalance problem with the simple fixed sub-domains, because particles move around during the simulation. A dynamic load balancing is a key technique to overcome such limitation.

We have developed a new dynamic load balancing algorithms of PSM to handle over the billions of particles on the current HPC systems [2]. Our method utilizes flexible orthogonal domain decomposition which allows sub-domain

boundaries in the column to be different for each low. We regard the imbalances of the executed time between parallel logical processes as the nonlinear residual. The load balancing is attained by minimizing the residual within the framework of the iterative non-linear solver combined with the multi-grid level technique for the local relaxation. The performance test of SPH code (Fig. 1) shows good parallel (strong and weak) scalabilities

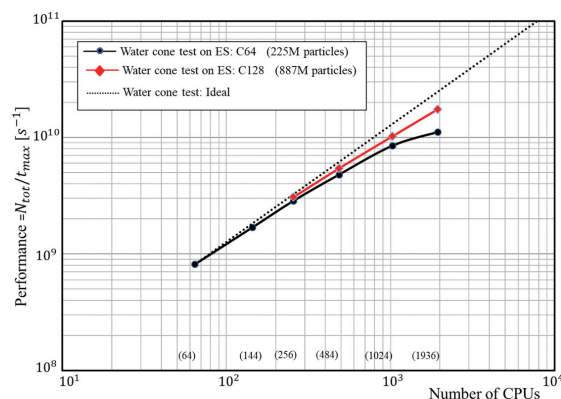


Fig. 1 Strong and weak scaling of the parallel performance on the new Earth simulator .

of our proposed method for water mass breaking problem.

For a further optimization, we have applied the overlapping technique which overlaps communication task with arithmetic computation. Key point is the division of the data access into the boundary and inside grid without degrade the performance. For an efficient implementation of overlapping method, three types of cell ordering in Fig. 2 were examined. Type 1 is the native ordering. In Type 2, particles on the boundaries are divided on the memory array for an efficient memory access for inner and outer domains. Type 3 utilizes the space-filling curve for cache-aware data access in inner domain. The performances with non-overlapping and overlapping methods by using three types cell ordering methods are shown in Table 1. We found that reordering scheme was successfully divide the loop operations into boundary and inner domains without sacrificing

the performance on the Earth Simulator. The ordering with space filling curve is found to improve the hit ratio of ADB. As a result, our overlapping method with space filling curve successfully hid about 84% of the communication cost.

We extend our model to the mesoscale fluid-particle (SPH-DEM) coupling model which resolves the dynamics over length scale much larger than particle size. Such systems are ubiquitous in geodynamics and industry fields. We performed validation test for dam break test with solid particles [3]. The result shown in Fig. 3 indicates that the collective particle behavior in the numerical model approximately coincides with the physical observations. This comparison confirms the applicability of our method to the qualitative evaluation of fluid-solid coupled particle dynamics.

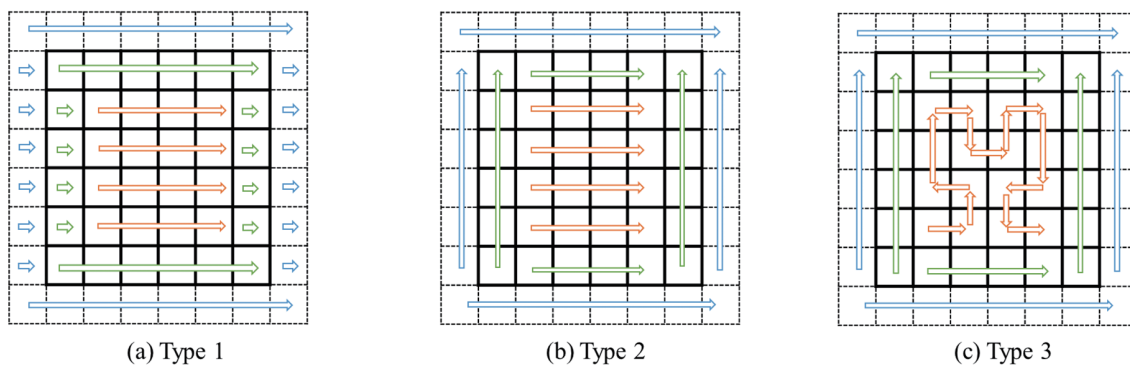


Fig. 2 Three types of cell ordering examined for efficient overlapping method.

Table 1 Performance of overlapping method with different reordering methods

	<i>Type 1+Non-overlap</i>	<i>Type 1+Overlap</i>	<i>Type 2+Overlap</i>	<i>Type 3+Overlap</i>
Arithmetic [ms]	120.0	264.4	123.1	120.9
Communication [ms]	5.5	-	-	-
Total [ms]	125.5	264.4	123.1	120.9
ADB hit ratio [%]	76.24	61.07	74.24	75.50

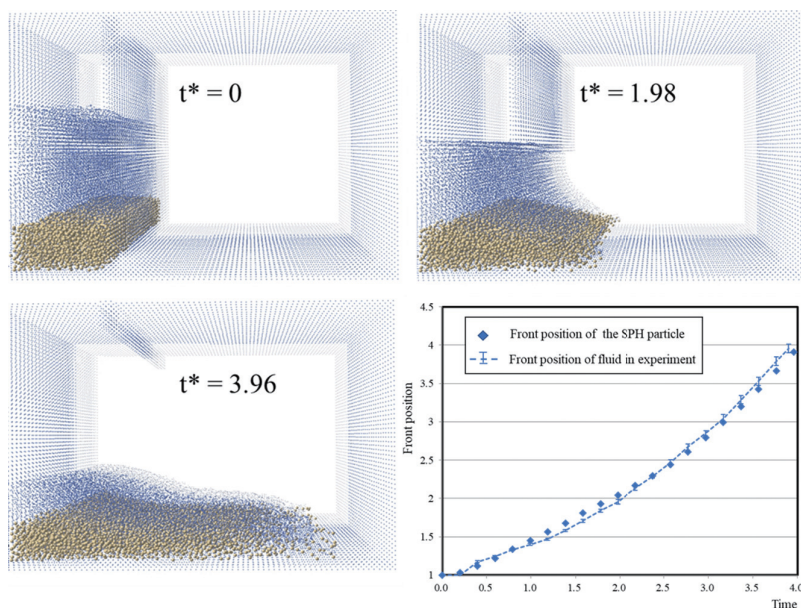


Fig. 3 Solid-fluid dam-break test with SPH-DEM coupled method and comparison result with experiment.

2. Mantle dynamics (Miyagoshi & Kameyama)

2.1 Mantle convection in super-Earths

We have studied thermal convection in the mantle of super-Earths by ACuTE method[4] which was developed in this project. Following the results until last year[5,6], we have studied evolution process of mantle convection in massive (ten times the Earth's mass) super-Earths in this fiscal year. Figure 4 is one of the numerical simulation results (time development of potential temperature distribution). We found that unlike the Earth, two-layered convection continues for a very long time (in this example, about 8 billion years). This result may be important to consider the surface environment of massive super-Earths. The results are published in March, 2017[7].

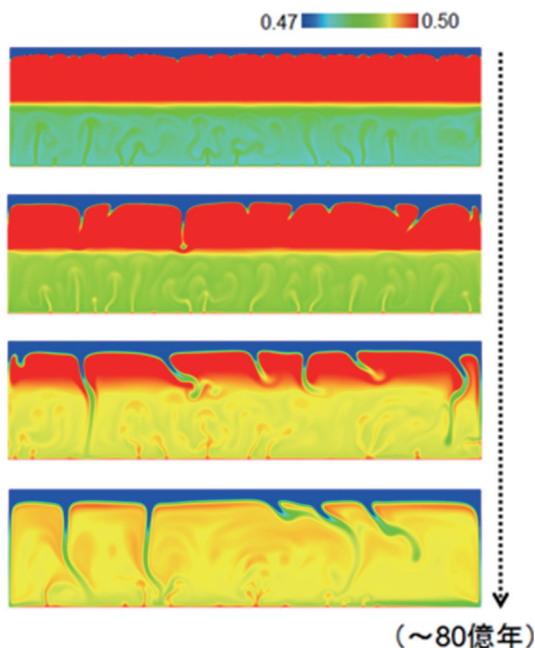


Fig. 4 Time development of potential temperature distribution.

2.2 Mantle convection with stress history, temperature, and pressure dependent viscosity

We have tried to introduce stress history dependent viscosity in ACuTEMAN[1] to treat plate dynamics precisely. Figure 5 is an example of numerical simulation results. Narrow plate boundaries are reproduced. In this simulation, initial viscosity contrast between the surface and core-mantle boundary (temperature dependent contrast minus pressure dependent one) is $O(1E3)$, and the Rayleigh number is $O(1E6)$. The calculation was stopped with more realistic (Earth-like) parameters. We consider that the causes are the lack of resolution (in this calculation, 512 times 512 times 128), and/or the large time interval in the time integration. In the next fiscal year, for calculations with more realistic parameters, we plan to perform larger scale numerical simulations.

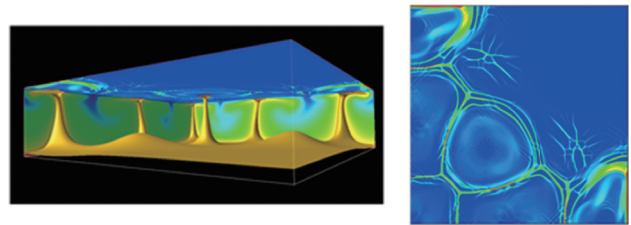


Fig. 5 [left] isosurface of temperature (yellow), damage distribution (surface plane), and temperature distribution (side planes) [right] damage distribution at the surface.

References

- [1] M. Furuichi and D. Nishiura, *Geochem. Geophys. Geosyst.*, 15 (2014) doi:10.1002/2014GC005281.
- [2] M. Furuichi and D. Nishiura, *Comput. Phys. Comm.* (in press).
- [3] X. Sun, M. Sakai, and Y. Yamada, *Journal of Computational Physics*, 248 147-176.
- [4] Kameyama M, Kageyama A, and Sato T (2005), *J Comput Phys* 206:162–181.
- [5] Takehiro Miyagoshi, Chihiro Tachinami, Masanori Kameyama, and Masaki Ogawa, *Astrophys. J. Lett.*, 780, L8 (2014)
- [6] Takehiro Miyagoshi, Masanori Kameyama, and Masaki Ogawa, *J. Geophys. Res.*, 120, 1267-1278 (2015)
- [7] Takehiro Miyagoshi, Masanori Kameyama, and Masaki Ogawa, *Earth, Planets and Space*, 69, 46 (2017)

