ペタスケールコンピューティングによる雲マイクロ物理解明のための

計算科学的基盤構築

後藤俊幸(名古屋工業大学)

雲の発生から成長に至るまでの過程における基本的な物理プロセスをと りこんだ大規模シミュレーションコードを作り上げるために必要な基礎技 術を計算機科学の最新の知見を取り込みながら開発を行っている. 雲粒を 輸送する非圧縮乱流速度場のシミュレーションにおいては高解像度のスペ クトル法を用いるため、 2次元分割による高効率の3次元FFTを開発し た.最適のプロセッサー配置を探索し,さらに流体ソルバー全体の効率化 を図ることにより,世界最大級である格子点数 4096³ でのシミュレーショ ンを実行できるようにした.また乱流による水蒸気や熱などのスカラー輸 送部分については,結合コンパクトスキームを開発しそのスケーラビリテ ィーを検証しながら 3 次元スカラー輸送コードに実装した.さらに簡単な 内部自由度を持った莫大な数の粒子を乱流中に浮遊させその総計的,力学 的挙動を解析できるようにプログラムを開発した.

1. 研究の目的と意義

目的

地球温暖化や気候変動の問題を考える上で極め て重要な要素でありかつ多くの謎に包まれている のが雲である. 雲の分布に従って地球のアルベド が変化し地球の熱収支に大きな影響を与えるので, 雲の物理の解明と予測は地球環境問題におけるグ ランドチャレンジ的な問題である.しかし、その 重要さにも関わらず雲の発生,成長,移動,降雨, 消滅などの基本的なふるまいの理解が十分ではな い. 本研究においては, 雲の発生から成長に至る までの過程において基本的な物理プロセスをとり こんだ大規模シミュレーションコードを作り上げ るのに必要な基礎計算技術を計算機科学の最新の 知見を取り込みながら開発することを目的とする. もとより、すべてを解明することは大きな困難を 伴うので、雲微物理と呼ばれる水蒸気を含んだ乱 流による混合, 凝結, 雲粒の集団運動までを視野 に入れる.数10cm³程度の領域を念頭におき,乱 流状態にある空気塊がどのように雲粒子を形成す るのか、雲粒子同士の衝突や合体、それらの空間

分布などを大規模並列計算によって解析を行う.

乱流と雲粒子,雲粒子同士の相互作用,乾燥空 気と湿潤空気の乱流混合を正しく解析するために は,乱流の間欠性による高渦度領域の微細構造(約 数 50 ミクロン)までを解析するオイラー的数値計 算と,10⁹個以上の数ミクロンの粒子運動を追跡 するラグランジュ的数値計算法が要求される.こ れらの数値計算をきわめて大きな並列計算機上で, むらなく,効率よく実行させるための計算技術を 開発する必要がある.そのため,ペタスケールコ ンピューティングに向けて流体方程式専用の3次 元 FFT や高精度差分計算法を,計算機科学の専門 家の協力を得てプロセッサアーキテクチャの詳細 まで考慮に入れて開発することを目的とする.

意義

雲の生成から消滅までには多くの物理過程が存 在し、その特性スケールは10kmから数ミクロンま で10桁以上にわたる.その重要さにも関わらず実 験的、観測上の様々な制限から雲に関するデータ は十分でなく、雲物理の基本的解明ができていな い. ペタスケールコンピューティングでは 10 cm 3 から数ミクロン程度までスケール比 10⁵の現象を 対象として、このスケールの雲の物理過程にでき るだけ忠実にシミュレーションを実行することに より,計算機内で雲の生成や分布を作り出すこと ができると予想される. 雲発生の詳細がこのよう な直接シミュレーションによって明らかにされる ことは、これまで観測や実験では得られなかった データや知見をもたらし、さらに大きなスケール での雲物理解明と予測のための物理モデルの構築 に大変役に立つ.また,大規模計算の観点からは, 2種類の計算方式(連続体計算と粒子計算)が同 時進行で動くことになり、きわめて多数のノード を持つ計算機の効率的な利用法、あるいは異なる 種類の計算機の同時的使用が求められる. 連続体 部分について, 流体方程式専用に3次元 FFT を開 発することは、他の分野への応用も可能であるの で大変重要である.また,流体計算格子上で局所 的な高精度差分解法は、雲粒子の相互作用や流体 と雲粒子の相互作用などの物理空間での現象の解 析に向いているので、雲物理解明には欠かせない 数値計算法であり,スケーラビリティーのよいコ ードを開発することはペタスケールマシンの利用 に当たって重要である.

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

- (1) 共同研究を実施した大学名
 名古屋大学
- (2) 共同研究分野 超大規数値計算系応用分野

(3) 当公募型共同研究ならではという事項など 本研究では、まず第1に大型並列計算機が十分 使える環境が必須であり、かつ近く稼働開始が予 定されているペタスケールマシンと同様のアーキ テクチャでコード開発を行うことが肝心と考える. 名古屋大学情報基盤センターにある Fujitsu FX1 はその条件を満たしている. さらに、高効率なス キームとプログラム開発をおこなうにはマシンの 特徴を十分に考慮することが必要不可欠であるの でセンターとの共同作業が欠かせない. さらに, きわめて多数のプロセッサー間の通信とキャッシ ュの利用などについては計算機科学の専門家の協 力が必要である.また、雲のマイクロ物理過程は 多階層にわたるものであり、分子動力学(MD)の知 識と経験をもとにした雲粒子形成や合体の MD シ ミュレーションとそこからのより巨視的なサイズ への接合としての数理モデル化や数値的接合が必 要である. 雲マイクロ物理解明においては、これ らすべての要素を取り入れた研究チームを構成し 研究開発する必要があり、この目的達成のために は本拠点公募型共同研究はより適したものになっ ている.また.研究対象は異なっても、共通する 数理モデリングや大規模並列計算のための各種の 新しい知識やプログラムについて情報交換ができ るという点で、この公募に応募することは大いに 意義のあることである.

研究成果の詳細

3-1 基礎方程式

乱流場の微細構造は局所的な非線形性(レイノ ルズ数)の強さに応じていくらでも小さくなる(間 欠性). 雲物理で対象となる雲粒が漂う流れ場の構 造,そして水蒸気や熱輸送を正しく解像すること が,雲粒子成長の速度や粒径分布を正しく計算す るために欠かすことができない. このデータはマ クロな雲のライフサイクルと空間分布の予測にお いて重要なものである. 基礎方程式は,先ずオイ ラー的記述に基づく Navier-Stokes 方程式,連続 の式,熱と水蒸気のスカラー輸送方程式

$rac{\partial u}{\partial t} + u \cdot abla u = abla p + u abla^2 u + Be_z + f$

$${oldsymbol
abla}\cdot u=0$$

$$egin{aligned} &rac{\partial T}{\partial t}+u\cdot
abla T&=\kappa
abla^2 T+rac{L}{c_p}C_d\ &rac{\partial q_v}{\partial t}+u\cdot
abla q_v=\kappa
abla^2 q_v-C_d\ &B&=g\left(rac{T-T_0}{T_0}+\epsilon(q_v-q_{v0})-q_c
ight) \end{aligned}$$

がある.ここで, *B* はブシネスク近似による浮力 の効果, *f* は乱流を駆動する外力を表す.また, ラグランジュ的記述である粒子の運動方程式は以 下の様に与えられる.

$$\begin{split} \frac{dX_j}{dt} &= V_j(t) \\ \frac{dV_j}{dt} &= \frac{1}{\tau_j(t)} \left(u(X_j(t), t) - V_j(t) \right) + ge_3 \\ R_j(t) \frac{dR_j(t)}{dt} &= KS(X_j(t), t)) \\ C_d(x, t) &\equiv \frac{1}{m_{air}} \frac{dm_l(x, t)}{dt} \\ &= \frac{4\pi r_l D}{\rho_0 a^3} \sum_{k=1}^{N_\Delta} R(X_j, t) S(X_j(t), t) \end{split}$$

 $R_i =$ 雲粒半径, S =過飽和度, K =const.

本研究では、すべてを取り入れた計算を行う前 段階として、これらの方程式を高精度、高効率で 解くための基本的なソルバーを開発することを第 1の目的とした.すなわち、オイラー的記述の方 程式として

$$egin{aligned} &rac{\partial u}{\partial t}+u\cdot
abla u&=-
abla p+
u
abla^2 u+f \ &
abla \cdot u&=0 \ &
onumber \ &rac{\partial T}{\partial t}+u\cdot
abla T&=\kappa
abla^2 T+f_{ heta} \end{aligned}$$

を考え,高速高効率なプログラムができた時点で 浮力や潜熱の効果などを取り入れることとした.

また,粒子運動においては,きわめて多数の粒 子を追跡することが求められるが,通常,雲粒子 は乱流の微細スケールと比べて極めて小さいので, 乱流の散逸スケールよりもさらに小さいスケール までの高精度解像度が求められる.いきなりすべ てのスケールを解像することは困難を伴うので, 遠散逸領域までを十分解像した低レイノルズ数乱 流場中の多数粒子の追跡という問題を先ず設定し て,粒子運動を数値積分する基本コードを作成す ることを目指した.粒子は本来その周辺の雰囲気 に応じて半径が変化するのであるが,これを取り 入れるとなると方程式系が急に複雑になる.これ を避けるために,簡単な内部自由度を想定し,粒 子と流体との間で単に運動量交換のみを行うモデ ルを導入した.2 つの粒子がペアを構成して相対 距離に応じて非線形的に相互作用するとし,かつ それらが周辺の乱流場により流され抵抗を受けて 相対位置が変化し,加えて熱揺動を受けるという ものである.j番目の粒子ペアの運動方程式は重 心座標 X_i と内部座標 r_j について

$$\begin{aligned} \frac{dX_j}{dt} &= u(X_j(t), t) + W_j^+(t) \\ \frac{dr_j}{dt} &= r_j \cdot \nabla u(X_j(t), t) - \tau_s^{-1} f(r(t)) r_j + W_j^-(t) \\ f(x) &= (1 - x^2)^{-1} \end{aligned}$$

とモデル化した. ここで W^{\pm} は周囲の流体から受ける熱揺動を表し、ガウシアンホワイトなランダムノイズである. もし、 W^{\pm} と内部自由度 r_j を 無視するなら方程式は単に粒子の軌跡を追跡するだけになる.

3-2 大規模並列計算に向けたコード開発

スペクトル法では3次元 FFT が計算の核心であ る. これまで1次元分割での MPI 並列化された3 次元 FFT を使ってきたが (Gotoh et al. Physica D, 2010 to appear), ペタスケールマシンと相似であ る言われる Fujitsu FX1 での実行を考えて抜本的 にプログラムの改良を行った.3次元波数空間で 方程式を解くためこれを基本領域とした. 大規模 並列計算機では多数のプロセッサーでの計算とな ることから、波数空間を1次元分割するよりは2 次元分割とするほうがより性能を引き出せる. 配 列 a(k1, k2, k3)において, 第1 軸ではプリフェッ チ機能やソフトウエアパイプライン機能を利用す ることを意図して、FFT におけるバタフライ演算 軸を第2変数の方向にとり、分割は第1軸、第3 軸方向にとった.この結果,変換後には a(x2, x3, x1)という順でデータが格納される. 現時 点では FFT の基底は4 である. また, 通常の FFT では変数が 1≦k≦N と表現されることが多いが, Navier-Stokes 方程式の波数空間での解析的表現 は複素数であり,波数は -N/2≦k≦N/2-1 となっ ているので,このままの表現がプログラム上でも 可能になるようにした.さらに MPI_AlltoAllv に よる集団通信を効率よく行うために,ブロック転 置データを1次元配列として転送するようにした. 2次元分割の場合,各次元方向へのプロセス数

の割り当てはキャッシュサイズに依存してくる. 最適な分割数を見出すために,ある与えられたス ペクトルを持つランダムな乱流フーリエ係数を波 数空間内で与え,それを物理空間に変換後,再び 波数空間に戻す2回の変換を行い,1回の変換に かかる平均 CPU 時間を第1軸方向のプロセス数 (Npx)を変化させて計測した. 図1は空間格子点 数 N=2048³の場合に1つの MPI プロセス(rank=0) で計測した CPU time である.幾つかの総プロセス 数(M) に対して結果がプロットしてある.いずれ の場合にも Npx=4 以上で CPU time が小さくなっ ていることが分かる.これは配列a(k1,k2,k3)の



図1 第1軸方向の分割数を変化させた時の FFT と IFFT にかかる CPU Time. 格子点数 N=2048³. M は総プロセス数



図 2 幾つかの分割に対する CPU Time を 4 つの空間格子点数について計測したもの.

第1軸変数の要素数が512の時に相当する.また, 空間格子点数を変化させた時にも第1軸変数の要 素数が512で同様な傾向を示す.FX1の1次キャ ッシュは64KBであること,基底4のFFTを用いて いることなどからこの傾向は説明できる.図2は 幾つかの分割に対するCPU Timeを4つの空間格子 点数について計測したものである.図3と図4は, 各格子点数とNpx:Npzの各組み合わせについての CPU Time の計測を示したものである.極端な Npx:Npz の組み合わせは効率を下げることが分か る.また,プロセス数の増加とともにCPU time は ほぼ傾き-1で減少するが(スケーラビリティー), プロセス数が大きくなると通信のオーバーヘッド によりスケーラビリティーが悪くなることが分か る.

3次元FFTを改良したのと同時にNavier-Stokes ソルバーも2次元分割に合わせて改良した.キャ ッシュを最大限利用するようにプログラムを修正



図3 プロセス配置の変化 (Npx×Npz) と CPU Time Npx:Npz=1:4 と 1:8.



図4 プロセス配置の変化 (Npx×Npz) と CPU Time Npx:Npz=1:16 と 1:32.

した. その結果, L2 キャッシュミスをすべてのア プリケーションでほぼ1%以下に抑えることに成 功し,全体として格段の高速化が図られた.

これらの改良されたプログラムのテストを兼ね て、一様等方乱流により輸送されるパッシヴスカ ラー(濃度など)の大規模シミュレーションを行 った.これまで我々の持つ空間格子点 N=2048³速 度場とスカラー場のデータを初期値として空間格 子を N=4096³に増やし、さらに高いレイノルズ数 の直接シミュレーションを512ノード2048 MPI 並 列により行った.図5は運動エネルギーとスカラ 一分散の各スペクトルの時間発展である.時間経 過とともに遠散逸領域へのスペクトルの輸送がみ られる.乱流レイノルズ数は & =820 (Sc=1,シュ ミット数)であり、N=2048³のときの & =730 と比 べるとあまり大きくはない.これは雲粒子の近傍 の速度場は十分な精度で解像される必要があるの で、レイノルズ数を上げるよりは高波数側に格子



図 5 N=4096³ での一様等方乱流によるエネルギースペク トル(上図)とスカラースペクトル(下図)の時間発展

点を配置するようにしたためである. N=4096³での スカラー場まで含んだ乱流シミュレーションは現 時点で世界最大規模であり,他には米国の P.K. Yeung のグループが ORNL で行った Jaguar XT5 (with hex-core AMD processors) 計算があるだ けである (ただし 32K core).しかし,彼らのレ イノルズ数は R_{λ} =240 (Sc=32)であるので高レイ ノルズ数でのスカラー輸送の直接シミュレーショ ン (DNS) では我々の DNS が現時点で世界最大のレ イノルズ数を実現している.ただし,いまだテス トケースなので十分な積分時間を確保していない. これらの結果は Israel Weizmann Institute of Physics でのシンポジウムそして Eilat でのワー クショップで発表された.

雲物理のスカラー輸送方程式の右辺には潜熱 の効果が取り入れられている.将来的には、この ほかにも様々な雲マイクロ物理過程が入りこみ、 多くの場合それらは物理空間での数理モデルとし て表現される.この場合、スカラー場の計算には 必ずしもスペクトル法が有利とは限らない.そこ で、速度場はスペクトル法で高精度に積分すると して(圧力のポアッソン方程式を解く際に有利)、 スカラー場には高解像度な差分法を用いることが 考えられる.また、スカラー場には圧力項がない ため、すべての演算が空間的に局所的である.こ れらのことを踏まえて、スカラー場方程式は結合 コンパクトスキームを用いた方法で解くという、 ハイブリッド的なアプローチを考えた.関数f(x) の微分f'を、

$A_{ij}f'_j = B_{ij}f_j$

と近似することを考えると、 $A_{i,\bar{f}}$ である時には 通常の差分公式となるが、Aをすこしばかり巾を 持ったバンド行列とすることで空間精度を大幅に 良くすることができる.通常の差分公式よりは A^{-1} の演算を必要とするので計算負荷がかかるが、FFT と比べるとはるかに通信量も少なくて済む.結合 コンパクトスキームでは同時に多数階の微分も計 算できるため、MPI 並列化では特に必要なスキー ムである.本研究では第1のステップとして、コ



図6 1, 2, 3 次元分割による結合コンパクトスキームの 並列化のスケーラビリティ

ンパクトスキームの MPI 並列化コードを作成する ことを考えた. 図6は8プロセス時での CPU Time を1とした時のプロセス数の増加に対する CPU Time の比である. 1 次元分割ではスケーラビリテ ィがよくないが, 2 次元および 3 次元分割では良 好なスケーラビリティーが実現されていることが 分かる. 2 次元分割はスペクトル法による速度場 とのマッチングを考慮に入れたためである.

次に、雲粒子を追跡するためのラグランジアン コードを作成した.中程度のレイノルズ数の乱流 をプロセス数 Nt の DNS により生成し、その場のデ ータを他の Np のプロセッサーに転送して粒子座 標を追跡した. 図7はNt=1,Np=63の場合の計算 方法の概略である.また、粒子は流れ場にパッシ ヴに流されていく場合と(1 way coupling)、流れ への反作用を持つ場合(2 way coupling)を計算 することも可能である.



図7 乱流中の粒子追跡法のスケッチ. 乱流プロセスと粒 子プロセスを分離する



図8 乱流運動エネルギーの減衰. 粒子の影響により 2way の減衰が速くなる



図9 エネルギースペクトルの時間変化. 粒子数が多いほ ど高波数領域でスペクトルがより自然に減衰

典型例として,減衰乱流場を 128³の格子点で計 算し,初期レイノルズ数が R₂=52,粒子数は 10⁹ の場合の計算結果を以下に示す.図8は乱流運動 のエネルギー減衰の時間変化を示す.2 way couplingの時には,乱流エネルギーが早く減衰す ることを示している.また,図9は粒子数を変化 させた場合の乱流運動エネルギースペクトルの変 化を比べたものである.高波数付近では,粒子数 が多い場合にスペクトルはより自然に減衰するこ とが分かる.これまでのこの種の DNS では高波数 側でスペクトルの異常性が出現することが報告さ れているが,これは粒子数を十分とることにより この問題が回避されることが分かった.

図 10 は, 2 way coupling のときの粒子分布と場 の伸張度の分布を描いたものである. 粒子数が



図 10 減衰乱流中における準2次元的(1格子幅)粒子 分布(3万個で表示打ち切り)と局所的ストレイン場(伸 張領域).青から赤にかけて流れの伸張度が大きくなる.





図 10 減衰乱流中の渦度分布 上図:1 way coupling,下 図:2 way coupling

きわめて多いため,図に垂直な方向に1格子分の 厚さを持った準2次元空間内にある粒子を約3万 個で打ち切って表示したものである.また同時に 各点での流れ場の伸張度を青(伸張0)から赤(伸 張最大)までのカラーで表示してある.このテス トケースでは粒子の慣性を無視しているため粒子 の空間分布はほぼ一様であるが、高伸張度の領域 は高度にたたみこまれた空間分布を持っているこ とが分かる.

粒子数が 10⁹となると、1つの流体計算格子に 数 100 個の粒子が入ることになり、これが空間的 になめらかな応力分布を生じさせ、自然なエネル ギースペクトルテイルをもたらすこととなる. 図 11 は、粒子からの反作用がないとき(上図)と、 粒子からの反作用があるときの渦度分布を比較し たものである. 粒子からの反作用が乱流に取り入 れられると、渦度分布は相対的になめらかになる 傾向にあることがわかった.

4. これまでの進捗状況と今後の展望

本研究において幾つかの中核となるプログラム 開発を行ってきたが,基本的な部分(3次元FFT, 結合コンパクトスキーム,粒子追跡のMPI並列化) はおおむね達成されつつあると考えている.

高解像度高レイノルズ数乱流ソルバーについて は、今後はキャッシュの有効利用をさらに進める こと、FFT の4基底を8基底にとりかえることを 考えている. FX1は1ノードあたり4コアを有す るので、SMP 並列と MPI 並列とのハイブリッド方 式が可能である.そこで、すべてを MPI 並列にす る Flat MPI 方式との比較を行ったが、空間格子点 数に関わらず Flat MPI 方式のほうが約 10%程度高 速であるという結果を得ている.1ノードあたり8 コアの次世代機ではこの違いがどれほどになるの か不明である.今後、さらに Fujitsu の方とも相 談をしながらさらなる高速化を目指していく予定 である.

スカラー場についての3次元結合コンパクトス キームは、現在、速度場と(スペクトルコード) のハイブリッド化を行い、実装して格子点数1024³ でテスト段階に入ったところである.最適化に向 けてのチューニングを行う必要がある.粒子追跡 コードは基本はできたが、より高いレイノルズ数 でのシミュレーションを行うには、乱流側のプロ セス数を増やす必要がある.そのため、粒子ソル バーと乱流ソルバーとの通信方法を改良する必要 が出てくるので、今後この方向に進む予定である. また、潜熱のやりとり、雲粒子の半径変化や熱収 支、衝突プロセスなどの雲微粒子の数理モデルを 順次加えていく予定である.

雲粒子の生成や動力学をより微視的な視点から 計算し、マクロな数理モデルを構築するという研 究も少しずつ進んでいる. 極微な水滴の MD シミ ュレーションを進めている.水分子の集合体を表 現する分子間ポテンシャルは様々あるが、個々の 水分子を剛体として扱う TIP4P ポテンシャルは, 原子振動を追いかける必要がないため時間ステッ プを大きくとることができ, 高速なダイナミクス シミュレーションに向いている. 尾形グループの 樋山等は(M. Hiyama, T. Kinjo, and S. Hyodo, J. Phys Soc. Jpn., Vol. 77, pp. 064001-12, (2008)), このような剛体分子系のシミュレーションを比較 的大きな時間ステップにおいても安定して実行で き,時間反転対称性を有する時間発展アルゴリズ ムであるベルレ法を, 剛体分子の角運動量につい ても適用出来るように発展させた. ただし、この アルゴリズムには,時間反転対称性を破っている 部分が含まれていることも分かっていた. そこで 鍜島, 樋山, 尾形は本研究において, 樋山等のア ルゴリズムを計算時間をほとんど増大させずに, 時間反転対称性が高まるように改良することに成 功した. 実際に TIP4P ポテンシャルによる水ク ラスター系に関して我々のアルゴリズムを適用す ると、典型的な場合では同じ時間ステップにおい て、全エネルギーの保存からのずれが樋山等のア ルゴリズムによる場合に比べて一桁程度良くなる ことを示した. さらに, 酸素間の2体密度分布 等、ミクロな内部構造についても問題が無い事を 確かめた.現在 JPSJ への投稿を準備中である.

今後、これらの基礎部分を順次組み合わせて少 しずつ雲マイクロ物理過程のシミュレーションコ ードのプロトタイプ作成に向かう予定である.

5. 研究成果リスト

- (1) 学術論文
- (2) 国際会議プロシーディングス
- (3) 国際会議発表

T. Gotoh and T. Watanabe, "Computational Physics of Turbulence", Symposium celebrating the70th Birthday of Prof. Steinberg : Experimental Hydrodynamics: from superfluids and patter formation to soft matter hydrodynamics, Weizmann Institute of Physics, Rehovot, Israel, Oct.28-29, 2010,

T. Gotoh and T. Watanabe, ``Large scale fluctuations and small scale intermittency of passive scalar", Workshop on TURBULENCE AND MIXING, Eilat, Israel, Oct.31-Nov.5, 2010.

- (4) 国内会議発表
- (5) その他(特許,プレス発表,著書等)