

# 固体地球シミュレータ GeoFEM における CFD

CFD in Solid Earth Simulator "GeoFEM"

奥田 洋司<sup>\*</sup>、松井 宏晃<sup>\*\*</sup>、矢川 元基<sup>\*</sup>

<sup>\*</sup>東京大学大学院システム量子工学専攻      <sup>\*\*</sup>(財)高度情報科学技術研究機構

Hiroshi Okuda, Hiroaki Matsui and Genki Yagawa

<sup>\*</sup>Department of Quantum Engineering & Systems Science, University of Tokyo

<sup>\*\*</sup>Research Organization for Information Science & Technology

E-mail: okuda@q.t.u-tokyo.ac.jp

## 1 はじめに

「固体」地球という名称からでは、なぜ流体力学と関連するのかイメージがかみ合わない方も多いと思われるが、つまりは、地表より下の、地球内部を指している。この固体地球のダイナミクスは多様な物理プロセスが様々な時間、空間スケールを持ちながら相互作用をする複雑なシステムであり、地震波動伝播、プレート境界における断層破壊プロセスといった固体力学によって記述される現象だけでなく、マントル対流および外核における対流といった、流体力学によって記述される現象も存在する。とりわけ、このマントル、核の大循環は、対流の空間スケール及び時間スケールが大きく(全球規模、数千年~1億年) 直接観測が不可能なことから、これらの現象の理解に対しては数値シミュレーションが大きな役割を担っている。

文部科学省では、地球環境問題の解決、自然災害に対する対策等への貢献を図るため、地球変動プロセス研究、地球観測、及びシミュレーションを三位一体として高度なシミュレーションによる地球変動予測を目指した地球シミュレータ計画を平成9年度より5ヶ年計画で実施している。本計画は、超高速並列計算機「地球シミュレータ(以下 'ES' と呼ぶ)」の開発および ES 用大規模並列ソフトウェアの開発とからなる。

地球シミュレータは、8 個のベクトルプロセッサがメモリ共有型のノードを構成し、そのノードが 640 台並列に接続された共有分散型ベクトル計算機であり、最大理論性能は 40TFlops に達する超大型計算機である。また、ES 用大規模並列ソフトウェアの開発に関しては、振興調整費「高精度の固体地球変動予測のための並列ソフトウェア開発に関する研究(平成10年度~)」のフレームワークのもと、大気・海洋分野、固体地球分野および情報科学分野の知見を結集した体制が敷かれ、いくつかの応用ソフトウェア開発が進行中である。

GeoFEM はそのひとつであり、固体地球分野を対象とした並列有限要素法システムである[1]。前述したように、固体地球における諸現象は、多様な物理、時空間スケールが相互作用

する複雑なシステムであり、この GeoFEM はこれらの固体地球の諸現象を記述するモデル（計算コード）をプラグイン化方式で取り込み、容易に並列計算の実施が可能となるようなプラットフォームである。GeoFEM は次の 2 つの段階を経て開発がなされている。すなわち、

Phase 1 GeoFEM/Tiger (1997-1998): 多目的の汎用並列有限要素法コードであり、固体地球科学のみならず様々な工学分野においても利用が可能である。本コードでは固体地球の諸現象については個別に取り扱われ、以下に述べる GeoFEM/Snake の基礎となるコードである。

Phase 2 GeoFEM/Snake (1999 - 2001): ES に向けて最適化され、マントル/核対流、プレート運動及び断層破壊、地震波動伝播といった固体地球における諸現象を特に対象としたコードである。

本稿では、GeoFEM の概要に続き、その並列反復法ソルバとメッシュデータ構造について紹介する。GeoFEM の特長の一つは、メッシュデータにプロセッサ間の通信情報を付加し、これを反復法ソルバで用いることにより、有限要素法の各種コードを容易に並列化するプラグイン構造を実現していることである。次に、GeoFEM 熱流動解析サブシステム、及び、計算例として外核をモデル化した回転球殻内の熱対流シミュレーションの結果について紹介する。

## 2 GeoFEM/Tiger の概要

1998 年より公開されている GeoFEM/Tiger は、以下の様なプラットフォームを目指して開発が進められている。

1. 並列有限要素法による多目的解析システム
2. 最大 1 億自由度、実用 100 万自由度まで解析可能なシステム
3. プラガブルデザイン
4. 大規模データに対する可視化
5. ソースの公開（<http://geofem.tokyo.rist.or.jp/> にて公開中）

固体地球に対する多様な物理現象を取り扱うため、基本的な解析機能として、非圧縮粘性流体の熱対流、線形構造解析、非弾性構造解析、接触構造解析、線形動的構造解析、および熱伝導解析の各解析機能を持つ。これらの機能は対応可能な要素タイプや解析機能の豊富さにおいて市販の汎用有限要素法ソフトウェアに劣るものの、高いベクトル及び並列性能とプラグイン機能を有している。このため、GeoFEM/Tiger には機能追加が容易であり、また、FEM 以外の構造格子を用いたシミュレーションコードに対してもメッシュデータ構造と並列ソルバを用いることにより、用意にプラグイン化が可能となるようになっている。以下では、これらの特徴のうち、メッシュデータの特徴と線形反復法ソルバについて紹介する。

### 2.1 局所化されたメッシュデータ構造

有限要素領域を分割して並列計算を実施する場合でも、基本的には単一プロセッサを使用した場合と全く同じデータ、アルゴリズムを使用して計算が可能である。要素、節点番号等も局所的なものが使用される。ただし、系全体としての保存則や整合性を保つための通信が必要となる。

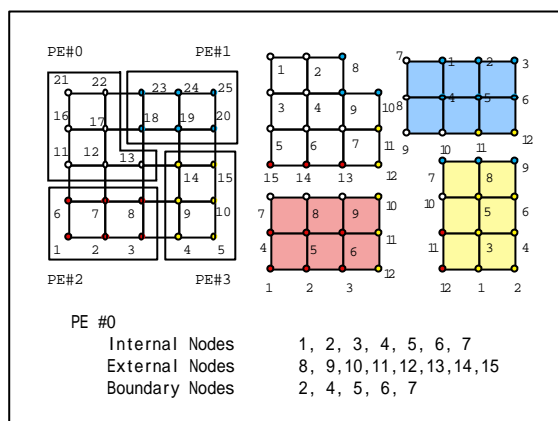


図 1: 節点単位の領域分割 [2]

有限要素領域を要素分割する場合には、

1. 要素単位で分割する
2. 節点単位で分割する

の 2 通りの考え方がある。GeoFEM においては図 1 に示すように節点単位の分割を適用している[2]。要素単位の分割は直感的にわかりやすく、分割アルゴリズムとしても容易であり、計算部分に関しても理解が容易である。しかしながら、前処理付き反復法を適用する場合には自由度が定義されている点すなわち節点を基準として分割する方が、前処理の効果を得やすい。

節点単位で分割する場合には、各領域の境界で要素がオーバーラップする（図 1）。このため、節点は以下の 3 種類に分類される。すなわち、

1. 内点：本来その領域に割り当てられた節点
2. 外点：本来当該領域に属してはいないが内点を含む要素を構成する節点

（図 1 では袖領域の深さを 1 層と仮定している。深さを変更することは可能。）

3. 境界点：内点のうち他の領域の外点となっている節点

節点の番号付けは内点を先に、外点をその後に順番づけし、インデックス配列に格納する。なお、境界点については「境界点ではない」内点と区別する必要はない。

外点と他の PE における境界点との対応づけのために通信テーブルを用意するが、この通信テーブルはメッシュデータを構成するデータの一部に含める。こうすると、並列ソルバ

にデータ通信部を集約させることにより、シミュレーションコード開発者は並列プログラミングを意識することなく（通信のステートメントを一切記述することなく）コードを開発することが可能となっている。

## 2.2 局所前処理付き並列反復法

反復法は、1.定常的手法(stationary)、2. 非定常手法(non-stationary) の2種類に分類される。定常的手法は Jacobi、 Gauss-Seidel、 SOR に代表される古典的な手法で、プログラミングは容易であるが、一般に収束は遅い。一方、非定常手法は共役勾配法 (Conjugate Gradient Method、 CG 法) に代表されるように直交するベクトル列を作り出すというアイデアに基づいている。

さて、これら連立一次方程式の反復解法にとって、前処理がその効率を主に左右することは言うまでもない。並列計算を行う際には、領域分割などの並列化に伴う処理が前処理の効果を阻害することを極力避けなければならない。ブロック対角行列による前処理の場合は逆行列を求めることが容易であり並列性を維持しやすいという利点がある。一方、ILU(0) (Fill-inなしの不完全LU分解) は、一般にブロック対角行列を用いた場合よりも速く収束するため、非対称行列の前処理に広く用いられているが、データのグローバルな依存性があるために並列化が困難である。そこで、我々はシミュレーション空間全体にわたる依存性がない局所LU分解(Localized ILU)を適用している。これはプロセッサ単位の「ローカルな」LU分解であり、前処理行列でそのプロセッサに含まれていない成分に相当する係数を0とする手法である。

この手法によって並列度は高くなり、ロードバランスも保たれるが、前処理手法としては本来の ILU 法ほど強力ではなくなり、プロセッサ数（領域数）の増加により収束が悪くなることが懸念される。

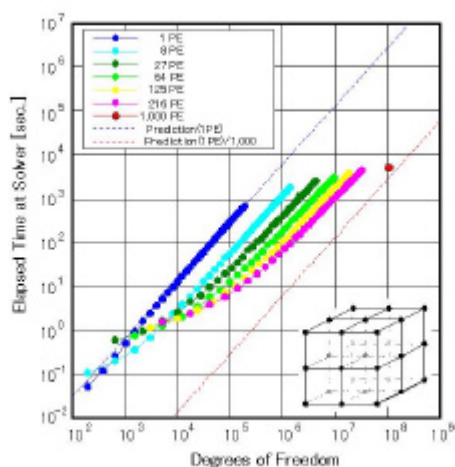


図2: 反復法ソルバに対する計算時間<sup>[3]</sup>

この点について、文献[3]において単純形状ではあるが 1 億自由度の弾性体解析を東京大学情報基盤センターの SR2201 を 1000PE 用いて解いた結果、1 プロセッサで解いた場合の推定計算時間と比較して、612 倍の高速化が得られるという結果が得られた。この時、CPU 利用率は 96% 以上を保っており、高速化率が 61.2 % となったのは前述の Localized ILU 分解による効率低下が原因であると考えられる。

### 3 GeoFEM 熱流動サブシステム

#### 3.1 GeoFEM/Tiger 熱流動サブシステム

本サブシステムは、マントル及び核の大循環を解明するためのシミュレーションコードのベースとなるもので、Boussinesq 近似を適用した非圧縮粘性流体について 3 次元、非定常シミュレーションを実施するサブシステムである。空間の離散化に対しては他のサブシステム同様、6 面体 Tri-linear 要素を適用し、速度場、圧力、温度場はすべて節点上で定義される。時間発展に際しては、1 次精度の Fractional Step 法を適用している。すなわち、

1. エネルギー方程式を陽的に解く
2. 速度の予測子に移流、粘性、浮力項を考慮して陽的に解く
3. この予測子の発散を求め、それに基づいて圧力 Poisson 方程式を解く
4. 次時間ステップにおける圧力を求める
5. 次時間ステップにおける速度場を求める

というプロセスにより時間発展を行う。ここで、3. における圧力 Poisson 方程式を解くためのソルバには CG 法を、前処理として SSOR 法を適用している。また、温度場及び速度場の予測子の時間発展に際して SUPG 法を適用している。また、計算時間の短縮のために、プロセス 1、2、4、5 については各要素における数値積分に 1 点積分を適用し、3. の圧力計算についてのみ 8 積分点を用いて数値積分を実施している（積分点数は変更可）。

#### 3.2 解析例：回転球殻における熱対流

地球外核をモデル化した回転球殻における Boussinesq 流体の熱対流のシミュレーション結果を紹介する[4]。地球の外核は鉄、ニッケルを主成分とする電磁流体からなり、その動粘性係数は水のそれに近いと推定されている。また、地球磁場はこの外核の流体運動により運動により生成、維持されていると推定されている。地球磁場の起源とその変動を理解することは、すなわち外核における流体運動のダイナミクスを理解することに他ならない。外核では、地球自転によるコリオリ力と電磁気力が大きな役割を担っていると考えられており、この複雑な物理プロセスの理解のためには 3 次元、非定常の数値シミュレーションが本質的な役割を持っている。しかし、地球磁場の特徴を再現するシミュレーションが成功するようになったのは Glatzmaier(1995)[5]をはじめとするごく最近のことであり、また、現実の地球外核において推定されている無次元数を用いてのシミュレーションは困難であるために、更なる大規模なシミュレーションが求められている対象である。本シミュレーションでは、コ

リオリ項に対する安定性を得るために、陽的な時間発展に際して 2 次精度の Adams-Bashforth 法を適用した。解析は、図 3 に示すような約 4000 節点が分布する球面を半径方向に 65 層積み上げることによって得られる約 23 万節点からなる有限要素メッシュを用いて実施された。この解像度は、地球の外核の空間スケールにおいては、赤道上でおよそ 3 度、また、半径方向にはおよそ 34km の解像度に相当する。なお、本解析においても、解析が実施可能な範囲の無次元数、すなわち、Prandtl 数  $P_r = 1$ 、Taylor 数  $T_a = 2.5 \times 10^5$ 、および Rayleigh 数  $R_a = 1.5 \times 10^4 = 1.8 R_{ac}$  ( $R_{ac}$  は臨界 Rayleigh 数) を適用してシミュレーションを実施した。ここで、分子粘性を考慮した場合、外核での  $T_a$  および  $R_a$  はそれぞれ  $10^{30}$  に達すると推定されている。図 4 に、 $2.2 \times 10^5$  ステップの時間発展を実施し、準定常状態に達した時点における対流構造を圧力分布と渦度を用いて示す。シミュレーションの結果、自転軸に対してほぼ平行な対流構造が再現され、スペクトル法によるシミュレーションと同様の特徴をもつ対流構造が得られ、定量的には表 1 に示すように、球殻内の平均運動エネルギーと対流パターンの経度方向の移動速度を考えた場合、それぞれ 3% 程度の差違が見られた。

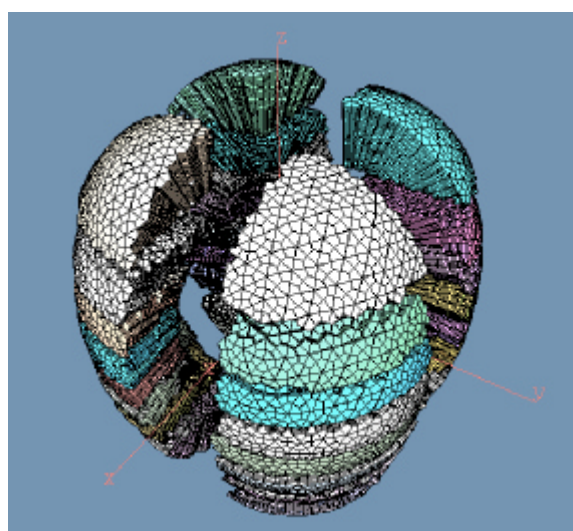


図 3: 回転球殻モデルに対する有限要素分割 (領域分割図)

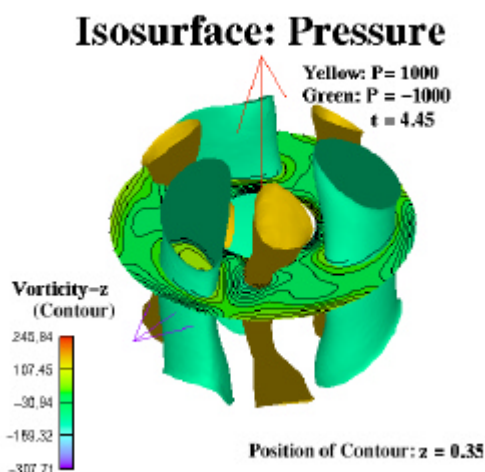


図 4: 準定常状態における等圧力面分布と、赤道付近における自転軸方向の渦度成分の強度分布 (等値線図)

表 1 準定常状態における GeoFEM とスペクトル法のシミュレーション結果の比較、  
(ドリフト速度については東向きを正としている)

	平均運動エネルギー	ドリフト角速度
GeoFEM	32.7	-0.87
スペクトル法	33.5	-0.85



地球の外核におけるダイナミクスの理解のためには磁場を考慮に入れた MHD シミュレーションが不可欠である。上記のシミュレーション結果では磁場を考慮に入れていないが、現在、磁場を考慮に入れた MHD シミュレーションコードを開発中である。

#### 4 おわりに

本稿では、並列有限要素法プラットフォームである GeoFEM の根幹をなす技術である局所化された通信テーブル付きメッシュデータ構造、連立一次方程式の反復解法における前処理と通信について紹介し、さらに、熱流動サブシステムの概要と計算例について紹介した。現在、GeoFEM/Tiger Ver.4.0 が公開されており、今後も第 2 フェーズである Snake の開発にあわせてバージョンアップが図られる予定である (<http://geofem.tokyo.rist.or.jp/>)。具体的には、

1. 現象間連成およびスケール間連成
2. 最大 100 億・実用 1 億自由度の並列計算
3. 固体地球モデルのプラグイン化
4. ES への最適化

を念頭に置いた諸機能の開発、解析を予定している。この開発にあわせて、GeoFEM プラットフォームは FEM 以外、すなわち FDM、スペクトル法、粒子法といった他の手法に対しても拡張される。また、熱流動サブシステムについては、外核に対する MHD ダイナモシミュレーションコード、その他の拡張が予定されている。

#### 謝辞

本稿で紹介した内容は、GeoFEM 開発メンバーの中島研吾氏(RIST)、柄谷和輝氏（開発当時 RIST、現在 CRC 総合研究所）に負うところが大きい。ここに記して謝意を表する。

#### 参考文献

- [1] <http://geofem.tokyo.rist.or.jp>
- [2] K. Nakajima and H. Okuda, Parallel Iterative Solvers with Localized ILU Preconditioning for Unstructured Grids on Workstation Cluster, Int. J. for Comp. Fluid Dyn., 12, pp.315-322, 1999.
- [3] 柄谷和輝、中村壽、奥田洋司、矢川元基、並列有限要素法コード GeoFEM の性能評価、日本計算工学会論文集 Vol.2, 171-177, 2000
- [4] H. Matsui, Thermal Convection Analysis in a Rotating Shell by a Parallel FEM - Development of a Thermal-Hydraulic Subsystem of GeoFEM -, 2nd ACES(APEC Cooperation for Earthquake Simulation) Workshop, Oct, 2000.
- [5] G.A. Glatzmaier and P.H. Roberts, A three-dimensional self-consistent computer simulation of a geomagnetic field reversal, Nature, 377, 203-209, 1995.