

地球シミュレータ用・非静力学海洋モデルのためのポアソンソルバーの開発

Development of Poisson solver in non-hydrostatic ocean model for the Earth Simulator

○高橋桂子 (ESC), 後藤浩二 (NEC), 平井圭輔(名大院理), 渡邊國彦 (ESC)

Keiko Takahashi*, Koji Goto**, Keisuke Hirai*** and Kunihiro Watanabe*

*JAMSTEC/The Earth Simulator Center, Yokohama 236-0001, Japan

**NEC Corporation, Fuchu, Tokyo 183-8501, Japan

***Graduate School of Science of Nagoya University, Nagoya, Aichi 464-8603, Japan

We have been developing a non-hydrostatic coupled ocean-atmosphere simulation code that can treat explicitly not only large scale phenomenon such as global general circulations but convections. We focus on the ocean component of this coupled simulation code in this report, especially efficient schemes for solving Poisson equations. We divided pressure terms into hydrostatic and non-hydrostatic pressure terms. In this implementation, it is essential to solve 2-dimensional Poisson equations with high performance, because our simulations will be performed with high resolution. We evaluate the introduced schemes, some Krylov subspace methods, from the view points of wall clock time and the number of iterations on the Earth Simulator. Moreover we will discuss the characteristics of the coefficient matrix on the overset grid called the Yin-Yang grid.

1. はじめに

現在、地球シミュレータセンターでは、陰陽格子¹⁾を用いて全球規模の現象を対象とした非静力学・大気海洋結合モデルの開発^{2,3)}を行っている。陰陽格子は、Fig. 1のように同一な2つの緯度経度格子系を組み合わせて全球を扱うことができ、以下のような利点がある。

- ・ 極での CFL 条件を緩和できる。
- ・ CIP 法⁴⁾などの高精度スキームの導入が容易である。
- ・ 領域大気モデルでのノウハウを活かすことができる。
- ・ 高い計算性能を実現できる。

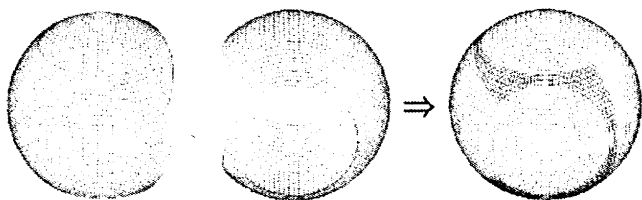


Fig. 1 Yin-Yang Grid

2. 非静力学海洋モデルの開発

非静力学・大気海洋結合モデルの海洋コンポーネントは、単純な Reduced Gravity Model から非静力学モデルへと段階的に開発を行っている。現在は、海洋コンポーネントとして静力学ブシネスク近似モデルを用いてさまざまなテストを行っている。多くの海洋大循環モデルは、静力学モデルであるが、海表面を自由表面とし、海面高度を予報することで、ポアソン方程式を解かない場合が多い。しかし、高解像度化が進むと、前述の実装では、海中の音波項の扱いや、海面高度が変化する速度による時間刻み幅の制限、自由表面の扱いにおける通信コストなど考慮しなければならない。また、海表面の高度変化が1層目の厚さを超える場合が考えられ、海水が計算点において定義できない場合の定式化も考慮の対照となる。現時点で開発中の静力学モデルにおいて、海表面を Rigid-Lid とする場合には、海面圧力についての2次元のポアソン方程式を解く必要がある。開発が進んで非静力ブシネスク近似モデルを採用する際には、圧力に関する3次元のポ

アソン方程式を解く必要がある。海洋における非静力学的現象は数10mから数100mのスケールの現象を扱うことができる水平解像度が必要となることから、ポアソン方程式として大自由度の線形システムを解くことが求められる。そこで、既存の解法について大自由度での反復回数や計算時間、対象問題に対する適性の評価を行うとともに、地球シミュレータ上での計算効率を実測評価したので報告する。

3. ポアソン方程式とその数値解法

海洋モデルでは、圧力に関するポアソン方程式を解く際に、海岸線や海底などの境界においてノイマン型の境界条件を仮定した問題を対象とする。今回の評価では、共役勾配法に代表されるクリロフ部分空間法について行った。それらの特徴については Table 1 にまとめる。

3. 1 陰陽格子上の係数行列

陰陽格子では、解くべき線形システムの係数行列が非対称となる。ここでは、簡単のため Fig. 2 のような1次元の重合格子について考える。

Table 1 Krylov subspace methods

クリロフ部分空間法	
解法	特徴
共役勾配法	係数行列が対称正定値であることが必要。計算量は少ない。
MINRES 法	対称非正定値に適用可能。
BiCG 法	非対称正定値に適用可能。ただし収束が不規則。
CGS 法	非対称正定値に適用可能。ただし、BiCGと同様収束が不規則。
BiCGSTAB (2) 法	BiCG 法、CGS 法に比べて計算は安定するが、計算量は増加。
GMRES (5) 法	MINRES 法の非対称行列への拡張。計算の途中でリスタートすることで、メモリと計算量が反復回数に応じて増加することを避ける。

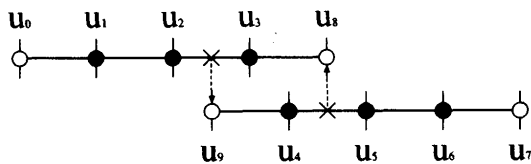


Fig. 2 Schematic figure of 1-dimensional overset grid

2次精度中心差分により離散化された1次元のポアソン方程式は

$$u_{i-1} - 2u_i + u_{i+1} = f_i \Delta x^2 \equiv f_i$$

となる。重合部分の値 (u_8, u_9) は、相手の格子系から補間によって求め、線形補間を用いると、

$$u_8 = \frac{u_4 + u_5}{2}, u_9 = \frac{u_2 + u_3}{2} \quad (\text{線形補間})$$

となる。したがって、 x_3, x_4 点方程式は、

$$u_2 - 2u_3 + u_8 = u_2 - 2u_3 + \frac{u_4 + u_5}{2} = f_3$$

$$u_9 - 2u_4 + u_5 = \frac{u_2 + u_3}{2} - 2u_4 + u_5 = f_4$$

となる。行列形式で離散化されたポアソン方程式を表すと以下のように係数行列は非対称となる。

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_5 \\ f_6 \end{pmatrix}$$

したがって、Table 1 のクリロフ部分空間法の中で係数行列が非対称の場合に対応した解法について、反復回数と計算時間を評価した。

4. 問題設定

静力学ブシネスク近似モデルでは、2次元のポアソン方程式を解く必要があり、また、非静力学ブシネスク近似モデルにおいても、圧力を2次元の静水圧と3次元の非静水圧に分離し、それぞれについてポアソン方程式を解くことで、3次元のポアソン方程式を解く計算コストを減らすことができると考えられる。ここで、まず2次元の問題について評価を行う。テスト問題としては以下のような2次元の移流拡散方程式と境界条件を採用した。

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} - v \frac{\partial u}{\partial x} = 0$$

$$u(x=0, y) = u_{in}, u(x=X, y) = u_{out}$$

$$\frac{\partial u}{\partial y}(x, y=0) = \frac{\partial u}{\partial y}(x, y=Y) = 0$$

ここで、 X, Y, u_{in}, u_{out}, v は

$$X=4, Y=2, u_{in}=0, u_{out}=40, v=1$$

とした。ただし、この問題を解く際には大規模問題に適用した際の計算効率を評価するために、重合格子部分がない格子系で評価した。

5. 結果

BiCGSTAB (2) 法, GMRES (5) 法, CGS 法, Red-Black SOR 法について4. のテスト問題を大規模化し、地球シミュレータ上で収束までの反復回数と計算時間を評価した。ここで、収束条

件は、 $\varepsilon = \|r\|/\|f\| < 10^{-12}$ ($\|r\|$ は残差の L_2 ノルム) とした。結果の中から最も計算時間が短かった BiCGSTAB (2) 法の結果を Table 2 に示す。Table 3 には、格子数が 8006001 (=4001x2001) の場合の BiCGSTAB (2) 法の計算時間の大半を占める3つのコンポーネント (行列ベクトル積、ベクトルの内積、ベクトルスカラー積) の計算性能についてまとめた。

Table 2 Wall clock time and number of iteration

BiCGSTAB (2)		
格子数 N	反復回数	計算時間 [sec]
861	43	1.18e-2
80601	300	7.13e-1
8006001	4807	9.40e+2

Table 3 Computational performance of component of BiCGSTAB (2) solver

コンポーネント	MFLOPS (理論ピーク性能比 [%])
行列ベクトル積	3266.9 (40.8)
ベクトル内積	3385.6 (42.3)
ベクトルスカラー積	3784.5 (47.3)

6. まとめと課題

今回のテスト問題では、Table 2 から分かるように、BiCGSTAB (2) 法の反復回数は、格子数 N として $O(N^{1/2})$ であり、計算時間は $O(N^{3/2})$ であり、理論的な予測値の範囲にある。しかし、我々の目的とする解像度はここでテストしたものより高く、さらに計算時間短縮を検討する必要がある。計算時間短縮には、反復回数の削減と1反復あたりの計算時間の削減が考えられる。反復回数については、前処理により大幅に削減されることが期待でき、実際、前処理として不完全LU分解を用いた場合は、反復回数は大幅に減少した。しかし、計算時間は逆に増加した。1反復あたりの計算時間が増大しないような前処理を検討する必要がある。1反復あたりの計算時間の削減は、計算のベクトル化や並列化による最適化が考えられる。しかし Table 3 に示すように、各コンポーネントのベクトル計算効率は理論ピーク性能の40%を越えていないので、さらに大規模な問題に対しても本性能を維持できるかを検証する必要がある。並列化については2CPUと4CPUでの計算時間から見積もった並列化率が96%であるので、通信コストの最適化を行い改善する予定である。

引用文献

- 1) A. Kageyama, T. Sato. The "Yin-Yang Grid": An Overset Grid in Spherical Geometry, Submitted to Geochem. Geophys. Geosyst. E-print: physics0403123
- 2) 高橋桂子 等: 第17回数値流体力学講演論文集 2003. C6-3
- 3) 平井圭輔 等: 日本海洋学会春季大会予稿集 2004 pp. 287
- 4) 彭新東 等: 第17回数値流体力学講演論文集 2003. C6-1