

# 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、主にマントル・コア・マグマのダイナミクスの諸課題において特徴的な、しかし既存のアプローチでは扱いが困難な幾何形状、時空間解像度、そして物性に起因する数値的悪条件といった問題を克服するための先進的な手法開発を行っている。そして、既存にはない固体地球の大規模シミュレーション研究を実施するものである。また、マグマ対流や津波における堆積層形成、マントルの熱化学進化、コア形成時の内部構造変化、ダイナモ形成における内核の役割といった個々の問題の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、粒子法における動的負荷分散並列化手法開発ならびに本課題で開発したマントル対流コードを用いたスーパーアースのマントル対流の解明において、大きな進捗があったため本稿で紹介する。並びに現在取り組んでいる惑星ダイナモ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

## 1. 粒子法における動的負荷分散技術開発 (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、地球科学を含め多くの分野で活用されている。本課題でもマグマの結晶粒子を伴う混相流ダイナミクスを解明するために、高粘性流体の Stokes 流コードに DEM を結合させた Stokes-DEM 法を開発した [1]。しかしながら現状、既存のコードでの SPH、DEM の大規模並列計算は困難である。なぜなら、計算実行中に粒子分布が変化することで、計算コスト不均質性も激しく変化し並列化効率を妨げるためである。未だにこの問題の決定的な解決手法は確立されていない。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だ。

### 1.1 手法

開発の元となるのは既に論文発表等を行った SPH コード [2] であり、ノード内は OpenMP、ノード間は MPI による Hybrid 並列を実施している。SPH では近接粒子のみと相互作用するため、近傍粒子検索に有利なセル領域による並列化を用いた。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で 2次元の直交格子を採用した (図 2)。具体的にはまず x 方向の列要素 ( $I = 1, 2, 3, \dots, N_x$ ) に一次元領域分割を行い、y 方向には各列で各々異なる分割を ( $J = 1, 2, 3, \dots, N_y$ ) 行う。各要素はのりしろ領域 (halo) を持ち、毎ス

テップその領域の粒子群は MPI 通信により整合性を保つ。本研究では、このようにして定義される 2次元領域要素を動的に変更して MPI プロセス毎に負荷を均質にする事を試みる。計算負荷は各プロセスで演算時間と通信時間を計測する事で見積もった。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においても、容易に負荷分散が行え、また、近年の話題となっている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、既往研究のプロセス毎の粒子数を基準にする手法と比較して優れている。計測した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。ここで簡略化のため、で仕切られた I 方向 1次元領域分割を考える (図 1 (b))。n 回目のリスト更新時間に I 番目の並列化領域要素に費やした実行時間を  $t^n$  とすると、要素の境界  $x_i^n$  で時間差

$$f^n(x_i^n) = t_i^n - t_{i-1}^n \quad (1)$$

が定義できる。ここで、式 (1) を残差ベクトルとみなせば負荷分散の達成は  $t^n$  を  $x_i^n$  の関数として残差のノルムを最小化する非線形問題だとみなせる。非線形ソルバーとしてニュートン法が最も有名であるが、Jacobian 行列 ( $J = \partial t^n / \partial x^n$ ) を直接求めるのは計算コストが大きいため本研究では Picard 法による前処理解法を選択した。負荷分散バランサーではグリッド境界の変位量として、

$$\delta x = -\hat{J}f^n \quad (2)$$

を求める。ここでは Jacobian の対角前処理行列であり

$$\hat{J}_{II} = \frac{f^n(x_1^n) - f^{n-1}(x_1^{n-1})}{x_1^n - x_1^{n-1}} \quad (3)$$

である。これによりとして領域分割を変更することが出来る。近似ではあるが Jacobian を見積もることで、ノード数が増えた時に問題となる主に通信性能に起因する非線形な計算コストの振る舞いを考慮するのに適している。

### 1.2 結果

SPH による水塊問題を解きベンチマークテストを行った。壁粒子の上にお椀状に配置された水粒子の問題を、初期条件では粒子数を均質にするように空間領域分割を行い、その後、実行時間が均質になるように負荷分散を実施した。484 ノードを用いた計算での初期分割では (図 1 (c))、壁粒子と水粒子の計算コストが異なるために各ノードの実行時間のばらつきが 74% であったものが、ランサナー適応後には 37% (図 1 (d)) になり、実行時間では約 53% の削減が達成された。また並列化性能を測定では粒子分布偏差を持つ問題にもかかわらず、強弱スケリングが計測され (図 2 (a))、8.9 億粒子の計算では並列化率 99.96% を達成した。このことは、提案した手法が地球シミュレータの性能を十分に活用できることを示している。

これらの手法開発を SPH と DEM に実装を行う事で、近接粒子相互作用計算として世界最高規模である億単位粒子数の大規模計算を新 ES 上で可能にした (図 2 (b))。

## 2. 巨大内核を持つ惑星の惑星ダイナモシミュレーション (宮腰、陰山)

本課題は、その主な計算を平成 27 年度特別推進課題の一つとして実施したが、計算の一部を本課題でも実施した。

地球型惑星の内部は、マントル (岩石) とコア (金属) から構成されている。コアの部分はさらに外核と内核という、二層構造に分かれ、外核が液体金属、内核が固体金属から成る。金属は良導体であり、もし外核内の液体金属に対流が生じれば、電磁誘導の法則により磁場と対流運動の双方に直角に電流が流れる。この電流が元々あった磁場を強めることができれば惑星磁場は増幅、維持されると考えられる。この過程はどの惑星でも生じているわけではない (例えば、金星や火星には磁場が存在しない)。また、生じる磁場の強さも惑星によって異なっている (例えば水星の磁場は地球よりもかなり弱い)。太陽風や宇宙線などの高エネルギー荷電粒子は生命にとって有害であるが、惑星磁場はこれらが地球表層を直撃するのを防いでいる。この防御効果は磁場の強さに依存するため、ダイナモ活動の活発さは惑星表層の環境とも関係していると考えられる。

液体金属と磁場の相互作用を記述する、ダイナモ過程の支配方程式は電磁流体 (MHD, Magnetohydrodynamics) 方程式である。この方程式は 8 つの独立変数 (3 次元の場合) を持つ偏微分方程式であり、多数の非線形項を持ち、解析的に解く事は限られた状況を除いてほぼ不可能なため、数値シミュレーションが有効な解析手段となっている。加えてコアの対流の時間スケールは数千年以上で、また惑星深部の現象のためその流れを直接観察する事も出来ない。これらの点からも数値シミュレーションが有効な解析手段の一つとなっている。

ところで地球の内核の半径は、コア全半径の 35% ほどであるが、この大きさは不変ではない。惑星内部の冷却の進行に伴い、その大きさは増大していく。また、水星はコア半径に対し地球よりもかなり大きな割合の内核を

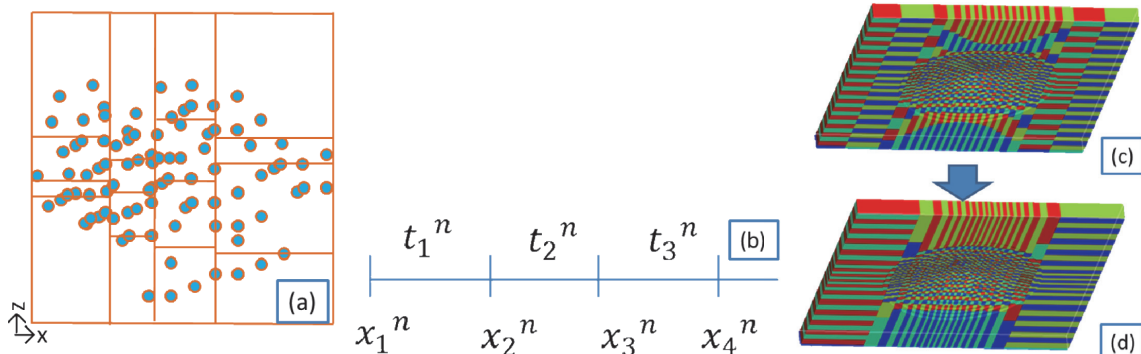


図 1 (a) 自由度をもった直交格子による領域分割 (b) 要素境界と計算時間の関係。各プロセスで粒子数 (c) or 実行時間 (d) を等しくした領域分割。

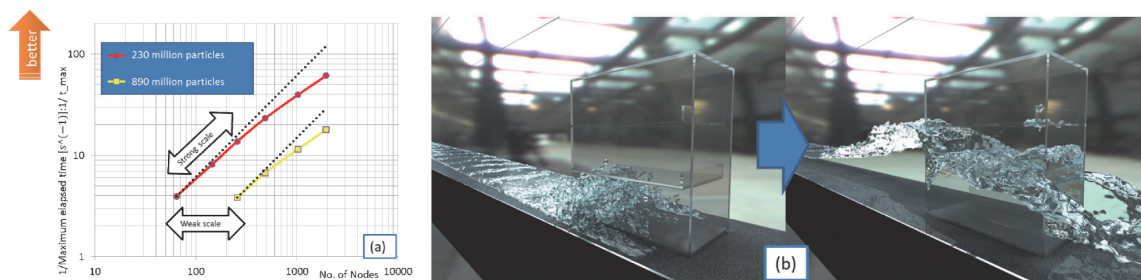


図 2 (a) 並列性能。 (b) 一億粒子によるダムブレイク問題の可視化例。

持つかもしれないと考えられている。このような、内核のサイズがコア対流やダイナモ過程に与える影響はまだ十分に解明されていない。そのため本課題では、内核がコア半径の9割を占める系におけるダイナモシミュレーションを実施した。

本課題では、メンバーである陰山教授（神戸大学）が開発した Yin-Yang ダイナモシミュレーションコードを用いて、これまで3度のプレスリリース論文[4-6]を含む成果を挙げてきた。Yin-Yang ダイナモコードは、野球のボールをその縫い目に沿って分割したような合同な格子系で球面を覆う事により、極上の座標特異点を回避し、球座標系における高効率な計算を実現した。しかしながら原点は依然として特異点となる。本年度、陰山教授は新たに、球殻内部を別の格子系で覆う Yin-Yang-Zhong ダイナモシミュレーションコード[7]を開発し、原点を含む系も容易に計算可能になった。本課題ではこのコードを用いて、内核内の磁場散逸も正確に解く計算を行った。

図3に結果の一例を示す。このモデルでは、レイリー数  $Ra$ （対流の活発さを表す無次元パラメータ） $=3 \times 10^5$ 、エクマン数  $Ek$ （粘性力/コリオリ力） $=1.1 \times 10^{-3}$ 、磁気プラントル数  $Pm$ （粘性拡散係数/磁気拡散係数） $=10$ 、メッシュ数  $71 \times 514 \times 1538 \times 2 + 1266 \times 1266 \times 1266$  で計算を行っている。図3は対流が発達しダイナモ過程により磁場も指数関数的に強められ安定した後の、外核の中ほどの温度構造である。シミュレーションボックスの上が北方向である。この図は中緯度から斜めに見下ろした図（俯瞰図）となっている。

地球のように内核のサイズが大きい場合、内核の南北の領域（極域）には、対流がほとんど生じない事が知られている。しかしながら図3を見ると、極域にもスケールの細かな活発な対流が生じている事が分かる。これはダイナモ過程や磁場の構造などに影響を与えられ、現在も計算及び解析を続行中である。

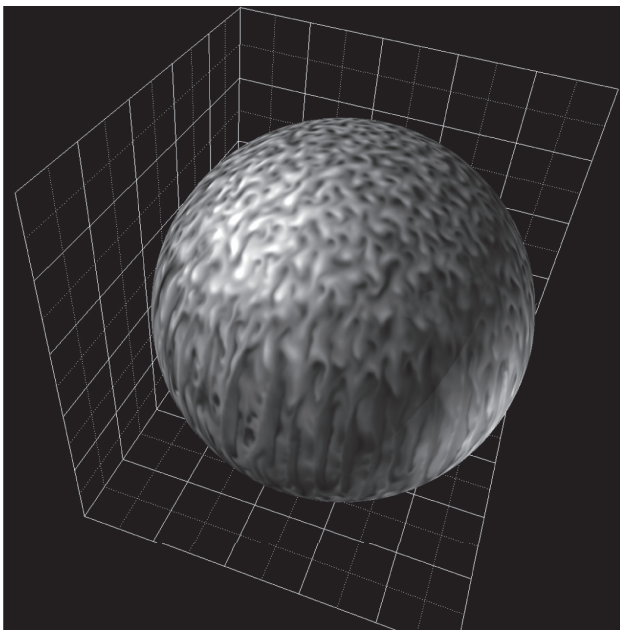


図3 薄球殻モデルにおける外核内の温度分布。

### 3. 系外惑星スーパー・アースのマンテル対流シミュレーション（宮腰、亀山）

マンテル対流は惑星表層–内部間の物質循環や、コア対流の活発さなどの惑星活動を支配しており、惑星のハビタビリティと深く関係すると考えられる。我々は近年続々と見ついている系外惑星スーパー・アースについて、そのマンテル対流を数値シミュレーションにより調べている。

昨年度の成果[8]に続き、本年度も論文を出版した[9]。地球の10倍質量を持つ巨大スーパーアースのマンテル対流について調べた。地球のマンテルよりもレイリー数がずっと高いにもかかわらず、その巨大な大きさからくる強い断熱温度変化の効果のため、浮上するホットブルームが不活発になること、形成されるプレートは厚くなり、対流の熱輸送効率が下がる事等を発見した。また、対流のレジームダイアグラムを見出し、地球マンテル対流モデル（断熱温度変化を考慮しないブシネスク近似モデル）の結果とは異なる特徴を持つ事を見出した。

本論文[9]中の図が、掲載紙 *Journal of Geophysical Research* 誌の掲載号の表紙に採用された。また、アメリカの一般向け科学オンラインジャーナル「*Science News*」よりメール取材を受け、本論文の内容を紹介する記事が掲載された。

加えて巨大スーパーアースのマンテル対流の進化過程について新たな発見があり、現在論文を執筆中である。

#### 文献

- [1] M. Furuichi and D. Nishiura, *Geochem. Geophys. Geosyst.*, 15 (2014) doi:10.1002/2014GC005281.
- [2] Daisuke Nishiura, Mikito Furuichi, Hide Sakaguchi, *Comp. Phys. Comm.*, 194, 18-32 (2015).
- [3] M. Furuichi and D.A. May, *Comput. Phys. Comm.* 192 (2015) 1--11.
- [4] A. Kageyama, T. Miyagoshi, and T. Sato, *Nature*, 454, 1106-1109 (2008).
- [5] T. Miyagoshi, A. Kageyama, and T. Sato, *Nature*, 463, 793-796 (2010).
- [6] T. Miyagoshi, and Y. Hamano, *Phys. Rev. Lett.*, 111, 124501 (2013).
- [7] H. Hayashi, and A. Kageyama, *Journal of Computational Physics*, 305, 895-905 (2016).
- [8] T. Miyagoshi, C. Tachinami, M. Kameyama, and M. Ogawa, *Astrophys. J. Lett.*, 780, L8 (2014).
- [9] T. Miyagoshi, M. Kameyama, and M. Ogawa, *J. Geophys. Res.*, 120, 1267-1278 (2015).



# 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

**Dynamic load balancing:** We have developed a dynamics load balancing algorithm for particle based simulations using over millions to billion particles performed on the new Earth simulator. Such a large number of particles are required for the realistic simulation of geodynamical problems, such as tsunami with a floating body, magma intrusion with granular flow, and shear zone pattern generation of sand box experiment. Our proposed method utilizes the imbalances of the executed time of each MPI process as the nonlinear term of parallel domain decomposition and minimizes them with the Newton like iteration method. In order to perform flexible domain decomposition in space, the orthogonal domain decomposition commonly used by improved slice-grid and orthogonal recursive bisection algorithm is used. We have implemented our load balancing algorithm for the codes of Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) and Discrete Element Method (DEM). Numerical tests show that our method is suitable for solving the particles with different calculation costs (e.g. boundary particles) as well as the heterogeneous computer architecture. **Thin shell planetary dynamo:** The thin shell is thought to be in the Mercury, for example. We found that there is an active convection in the tangential cylinder, which is not found in the Earth's model. **Mantle convection:** We found the convection regime diagram in massive super-Earths, which is published in this fiscal year.

**Keywords:** Particle simulation, Dynamic load balancing, Tunami, Core, Dynamo, Mantle, super-Earths

## 1. Dynamic load balancing (Furuichi & Nishiura)

Fully Lagrangian methods such as Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) and Discrete Element Method (DEM) have been widely used to solve the continuum and particles motions in the computational geodynamics field [1,2]. These mesh-free methods offer effective numerical applications to the geophysical flow and tectonic processes, which are for example, tsunami with free surface and floating body, magma intrusion with fracture of rock, and shear zone pattern generation of granular deformation. In order to investigate such geodynamical problems with the particle based methods, huge computational cost is required. However, an efficient parallel implementation of SPH and DEM methods is difficult especially for the distributed-memory architecture because particles move around and workloads change during the simulation. Workload imbalance problem arises with the fixed parallel domain decomposition in space. Therefore dynamic load balance is key technique to perform the large scale SPH and DEM simulation.

Our method utilizes the imbalances of the executed time consisting of arithmetic and communication cost as the work load on each MPI process. This method is suitable for solving the particles with different calculation costs (e.g. water vs boundary wall particles) as well as the heterogeneous computer architecture (e.g. CPU and GPU or MIC). Our load balancer minimizes the imbalances of the executed time by iteratively changing the spatial domain decomposition with the Newton like method [3]. We applied orthogonal spatial decomposition. First, a whole domain is divided by columns using vertical lines. Then, each column is divided into subdomains by horizontal lines independently for each column (Fig 1(a)).

The performance test of SPH code shows good parallel (strong and weak) scalabilities of our proposed method for water mass breaking problem. We have performed large scale dam break test with 100 million SPH particles for analyzing the water flow inside a building at Tunami event.

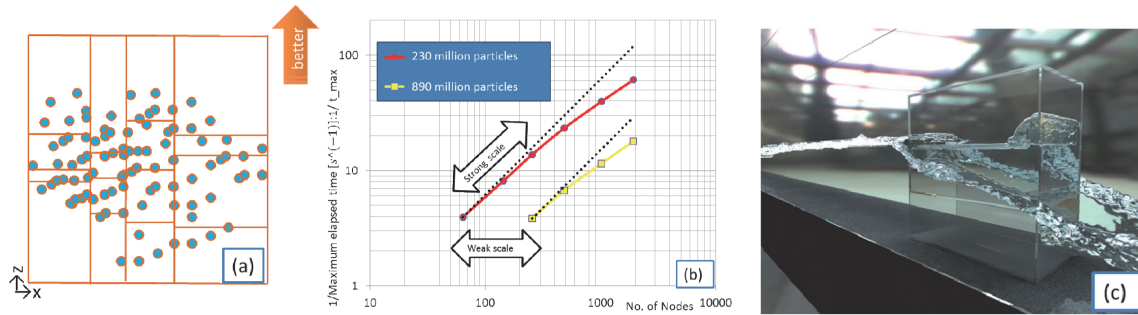


Fig.1 (a) Example of domain decomposition, (b) Parallel scaling, (c) Dam break with building.

## 2. MHD dynamo simulation with large inner core (Miyagoshi & Kageyama)

We have studied the planetary dynamo with the large inner core (thin outer core shell). The thin shell is thought to be in the Mercury, for example. This subject is carried out in the “tokubetsu suisin kadai” of the Earth simulator in this fiscal year, and a part of calculations is performed in this project.

Figure 2 shows one of the numerical simulation results. It shows the temperature distribution in the core from the bird’s-eye view. In this model, the radius of the inner core is 90% of the radius of the core. In the Earth’s dynamo model, it is found that there is almost no convection in the tangential cylinder (polar region). However, from Fig. 2, active convection occurs not only around the low and mid latitude but also high latitude. In addition, convection structure is different between them. In the low and mid latitude, the structure is like the convection column, while that is small scale flow in the high latitude. These structures probably affect the dynamo process. We continue the calculation and analysis of numerical simulation results.

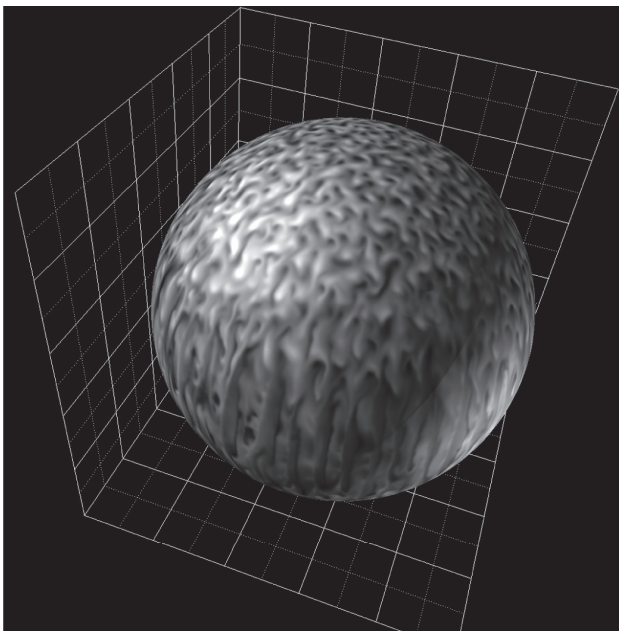


Fig. 2 Temperature distribution of the thin shell dynamo model.

## 3. Mantle convection simulation in super-Earths (Miyagoshi & Kameyama)

Mantle convection is one of the keys to understand the habitability of the planet because it governs the plate motion, material circulation between surface and interior of the planet, and planetary magnetic field strength through the vigor of the core convection. We have studied the mantle convection of massive super-Earths to clarify differences from the Earth’s mantle convection.

In addition to the paper in the last fiscal year [4], we published a paper in this fiscal year [5]. We studied about massive (ten times the Earth’s mass) super-Earths. We found that rising hot plume activity is considerably lowered by the strong adiabatic compression effect due to the large size of the planet. Although the Rayleigh number is considerably larger than the Earth’s one, the efficiency of heat transport by the thermal convection is low and the thickness of the lithosphere becomes much larger than that of the Earth. We also found the convection regime diagram in massive super-Earths and clarified the difference from the Earth’s model without the adiabatic compression effect.

### References

- [1] M. Furuichi and D. Nishiura, *Geochem. Geophys. Geosyst.*, 15 doi:10.1002/2014GC005281 (2014).
- [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] T. Miyagoshi, C. Tachinami, M. Kameyama, and M. Ogawa, *Astrophys. J. Lett.*, 780, L8 (2014).
- [5] T. Miyagoshi, M. Kameyama, and M. Ogawa, *J. Geophys. Res.*, 120, 1267-1278(2015).

