

木星型惑星大気の高解像長時間積分シミュレーションのための高速球面調和関数変換ライブラリの開発

課題責任者

竹広 真一 京都大学数理解析研究所

著者

竹広 真一^{*1}, 佐々木 洋平^{*2}, 石岡 圭一^{*3}

^{*1} 京都大学数理解析研究所, ^{*2} 摂南大学理工学部建築学科(兼)基礎理工学機構, ^{*3} 京都大学大学院理学研究科

木星型惑星(木星・土星)表層大気の力学的な特色である縞状パターンはこれまでに多くの大気科学研究者の関心を引いてきたが、現在のところ、これらの特徴を矛盾なく整合的に説明できる満足な力学的描像と理解は得られてはいない。本研究では、地球シミュレータの豊富な計算資源を利用することにより、全球規模から微細規模対流までにわたる空間スケールを統一的にあつかう大規模数値計算を実行し、従来の数値モデルでは表現できなかった微細規模の対流や乱流の構造を解像し、木星型惑星大気に見られる表面流の大規模構造の力学的成因を解明することを目指している。これまでのわれわれの結果から、木星型惑星大気の縞状構造の生成維持機構を調べるには高解像度かつ長時間積分が必須であることが明らかになった。そのためにわれわれは高速かつ大規模な球面調和関数変換ライブラリ ISPACK3 とそれを利用した深さ方向の密度成層を考慮した回転球殻非弾性系熱対流モデルを開発し、さまざまなアーキテクチャに対するチューニングを行ってきた。今年度は、地球シミュレータの更新において新たに導入された x64 系 CPU と SX-Aurora TSUBASA からなる 2 つのシステム ES4CPU と ES4VE において ISPACK3 の導入とチューニングを行い、それぞれ良好な計算性能を引き出すことに成功した。

キーワード : 木星大気, 土星大気, 東西ジェット, 縞状構造, 球面調和関数変換

1. はじめに

木星と土星の表層の流れは、赤道周辺の幅の広い順行ジェットと中高緯度で交互に現われる互いに逆向きの幅の狭いジェットが特徴的である。この表層のジェットが深部領域の対流によって生成されているのか、表層の流体運動の結果なのかは未だに明らかになっていない。伝統的な知見では、流体層の厚さが惑星半径に比して十分小さい「浅い」モデル、すなわち、鉛直方向の静水圧近似の仮定の下で深部からの熱流と太陽加熱によって大気の運動が駆動されるモデルでは、中高緯度の交互に表われる幅の狭いジェットは再現されるものの、赤道域のジェットは必ずしも順行方向とはならない。一方で、流体層の厚さが惑星半径に匹敵する「深いモデル」、すなわち高速回転する球殻中の熱対流モデルでは、赤道域の順行するジェットは容易に生成されるものの、中高緯度の交互に表われるジェットの生成が困難である、と考えられていた。

このような状況において、これまでに考えられていた深いモデルよりも薄い球殻領域内の深部対流運動を考慮することで、赤道域の順行流と中高緯度の交互に現われる狭いジェットが共存する状態を数値的に再現できることを主張したのが Heimpel and Aurnou (2007) [1]である。この研究をきっかけとして、薄い回転球殻内の熱対流の研究が活発に行われるようになり、動径方向の密度変化を考慮した非弾性系モデルの高解像度数値計算によりジェット形成問題の研究が行われてきている(e.g. Gastine et al. 2014 [2], Heimpel et al. 2015 [3])。

しかしながら、これらの研究では経度方向の対称性を

仮定した、いわゆるセクター領域の計算であり、全球ではなく一部の領域の流体運動しか解いていない。このような領域の制限は流れ場全体の構造に影響を与えている可能性がある。例えば、2次元乱流的なエネルギーの逆カスケードが十分に作用し、互い違いの縞状ジェットが生成されないかもしれない。また、生成される帯状流が不安定となって縞状ジェットが壊されてしまうかもしれない。加えて統計的定常状態に達するに十分な長時間積分が行われているかが疑問であった。そこでわれわれは、薄い回転球殻内の熱対流の全球殻領域数値計算をこれまでの研究よりも長く時間積分を実行し、得られる赤道域および中高緯度領域の帯状流分布に計算領域が影響するかを吟味してきた。その結果、セクター計算の場合には赤道順行ジェットと中高緯度の縞状ジェットが長時間維持されるのに対して、全球計算においては中高緯度の縞状構造が消滅し、赤道および各半球の中高緯度に1本ずつ、3本の順行ジェットしか存在しない状態となった(Takehiro et al. 2015 [4])。このことは、木星型惑星大気の縞状構造の生成維持機構を調べるには高解像度かつ長時間積分が必須であることを示している。

この目的のために、われわれは高速かつ大規模な球面調和関数変換ライブラリ ISPACK3 と、それを利用した深さ方向の密度成層を考慮した回転球殻非弾性系熱対流モデルを開発し、さまざまなアーキテクチャに対するチューニングを行ってきた。今年度は、地球シミュレータの更新において新たに導入された x64 系 CPU と SX-Aurora TSUBASA からなる 2 つのシステム ES4CPU と ES4VE において ISPACK3 の導入とチューニングを試みた。

2. ISPACK3 チューニング

ISPACK3 は当初 x64 系 CPU をターゲットとして開発が行われた。高速変換のためのコーディングにおけるポイントとして、ルジャンドル陪関数の漸化式を高速に計算する新たな手法 (Ishioka 2018 [5]) を実装したことがあげられる。この計算法は天文分野や惑星内部ダイナモ計算のために開発している他の球面調和関数変換ライブラリにも取り込まれている。もう一つのポイントは CPU の SIMD 命令を最大限利用するために、変換計算の最下層のサブルーチンをアセンブラで実装したことである。さらに、CPU のキャッシュを意識したコーディングを行うことで高速化を図っている。その他の特筆すべき機能として、経度方向の格子点数を 2 のべき乗だけでなく、2, 3, 5 を素因数する格子点を許容していること、多層モデルでの利用を想定して、MPI 並列のコミュニケータを分割可能にしていること、が挙げられる。

SX-Aurora へのチューニングとして、まず長いベクトル長をサポートした。x64 系 CPU のための実装においてベクトル長を 4 または 8 に設定していたところを、今回はベクトル長 256 にすることで SX-Aurora に対応した。さらに、ベクトルの内積型の計算を繰り返す箇所においては、ベクトル長 256 のベクトルの総和を求めた後に、そのベクトル内での reduction をすることによって、できるだけ内積型の演算を避けるように変更した。

今回開発した ISPACK3 ライブラリはネットワーク上のサーバーにて公開している (<https://www.gfd-dennou.org/library/ispack/>)。

3. ベンチマーク結果

表 1 は単層スレッド並列のベンチマーク計算である。上に述べた工夫によって、ES4CPU(x64 系 CPU)における変換計算速度がピーク性能程度まで出せている。ES4VE においてもベクトル加速のピーク性能の 4 割程度までの速度で計算可能となった。

| M | 4095 | | 8191 | | 16383 | | 性能 (%) |
|--------|------|------|------|------|-------|------|---------|
| | bw | fw | bw | fw | bw | fw | |
| ES4CPU | 1380 | 1582 | 1813 | 1996 | 2094 | 2405 | 91, 105 |
| ES4VE | 648 | 379 | 798 | 622 | 893 | 866 | 36, 35 |

表 1. 単層スレッド並列計算の性能比較. ES4CPU: AMD EPYC 7742, 64 threads. ES4VE: SX-Aurora TSUBASA, 8 threads. ES4CPU のピーク性能は 2300 GFlops, ES4VE のピーク性能はベクトルアクセラレータの 2450 GFlops を用いてピーク性能比を表している。M は切断波数。

図 1 と図 2 はそれぞれ ES4CPU および ES4VE での単層並列時のストロングスケーリング性能を調べたベンチマーク計算の結果である。ES4CPU, ES4VE のどちらでも、並列化加速率がほぼ 100%と良好な結果が得られている。経

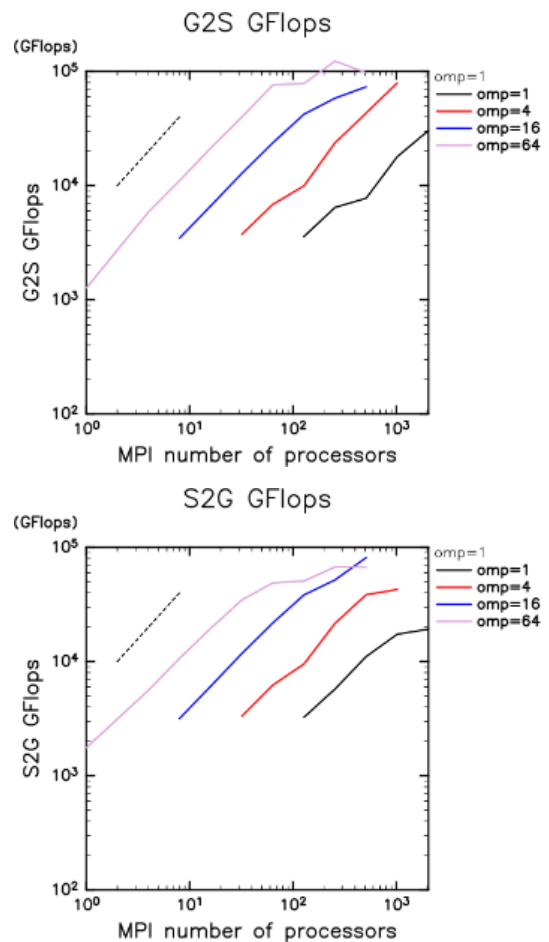


図 1. ES4CPU での単層並列時の球面調和関数変換のストロングスケーリング性能。上が正変換、下が逆変換の結果を表す。切断波数は 16883、経度×緯度格子点数は 32768x16384 点である。スレッド並列数は 1 (黒実線), 4 (赤実線), 16 (青実線), 64 (紫実線) である。黒点線は傾き 1 を表す。

度緯度格子点数がそれぞれ 32768 および 16384、切断波数が 16883 の計算においては、ES4CPU では使用コア数 4096 程度まで十分な並列化による加速が図れるが、それ以上は計算速度が頭打ちとなる。ES4VE では 256 MPI 並列まで並列化による加速が図れるが、それ以上は計算速度が頭打ちとなる。

図 3 と図 4 は ES4CPU および ES4VE において、層方向

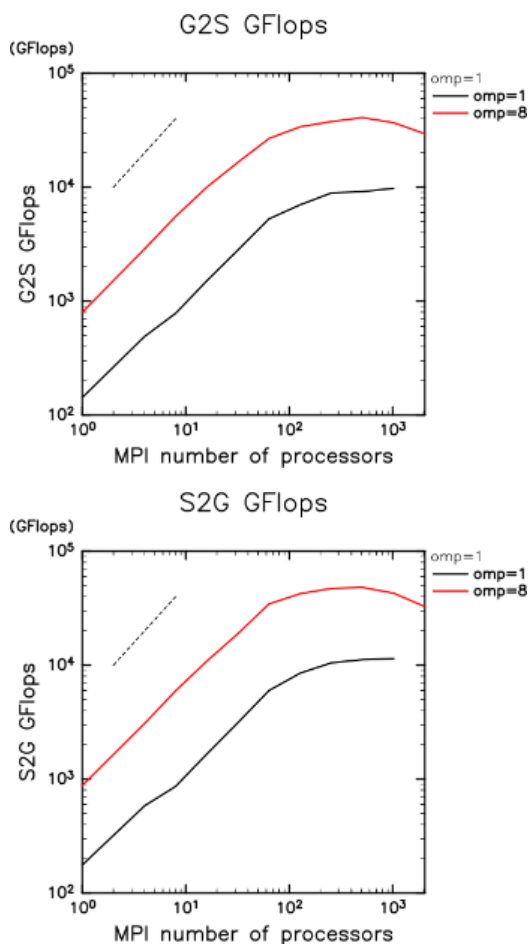


図2. ES4VEでの単層並列時の球面調和関数変換のストロングスケーリング性能。上が正変換，下が逆変換の結果を表す。切断波数は16883，経度×緯度格子点数は32768x16384点である。スレッド並列数は1（黒実線）と8（赤実線）である。黒点線は傾き1を表す。

への並列化も含めたハイブリッド計算のベンチマークである。単層球面上の並列化だけでは用いるコア数を増加させると計算速度が頭打ちになる状況を，さらに層方向に並列化を施すことによって解消できることが示されている。経度緯度格子点数がそれぞれ8192，4096，切断波数が4095，16層の計算において，ES4CPUでは層方向の並列化を行わない場合には4MPI並列（256コア）から並列加速率が下がり始めるが，層方向の並列化を行うことで，より多くのコア数まで良い並列加速率を維持することができている。ES4VEでは層方向の並列化を行わない場合には16MPI並列（128コア）で計算速度が頭打ちになるが，層方向の並列化を行うことで，より多くのコア数まで並列化による加速を実現できている。

4. まとめ

新しい地球シミュレータのx64系CPUとSX-Aurora TSUBASAの2つのシステムに対して高速かつ大規模な球

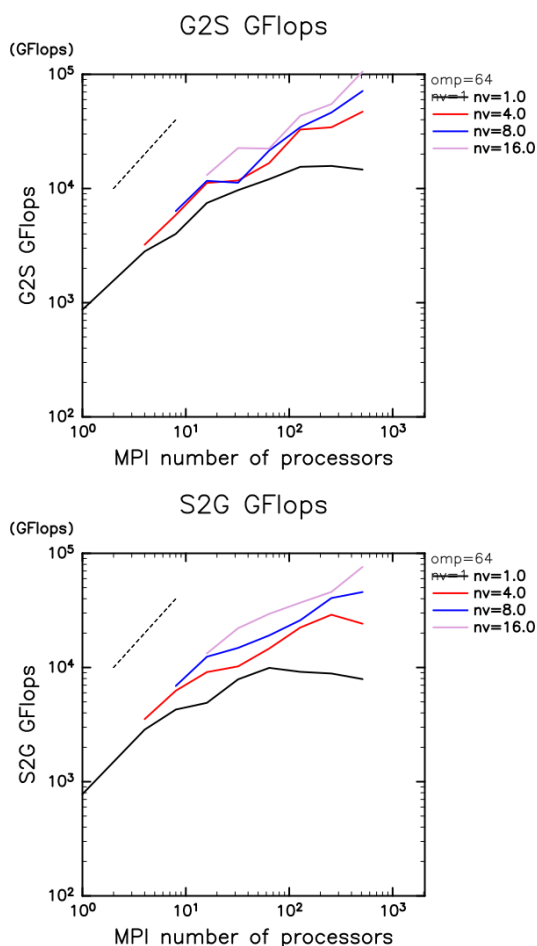


図3. ES4CPUでの多層並列時の球面調和関数変換のストロングスケーリング性能。上が正変換，下が逆変換の結果を表す。切断波数は4095，経度×緯度格子点数は8192x4096，鉛直層数は16である。層方向の並列数は1（黒実線），4（赤実線），8（青実線），16（紫実線）である。黒点線は傾き1を表す。並列数は64である。

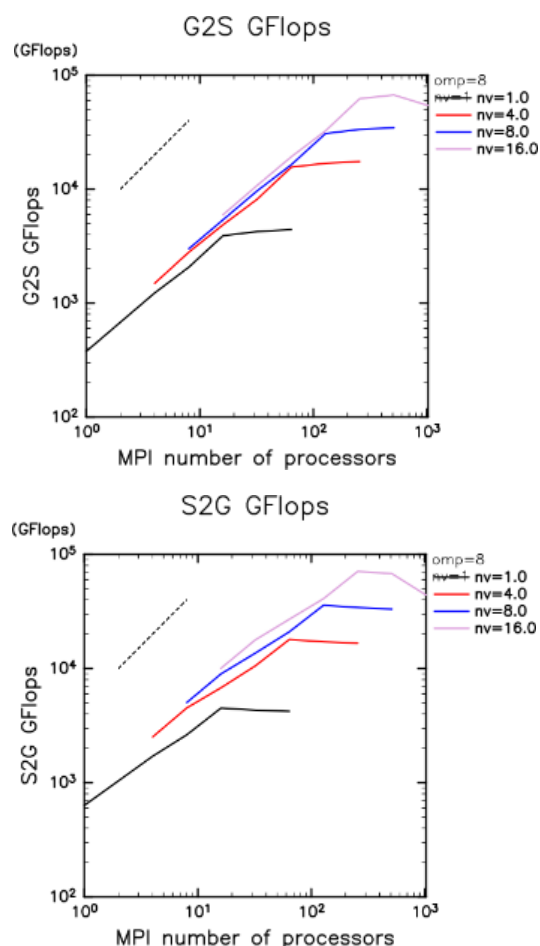
面調和関数変換ライブラリISPACK3の導入とチューニングを行い，それぞれ良好な計算性能を引き出すことに成功した。この成果を踏まえて，非弾性回転球殻惑星大気モデルにISPACK3を導入し，今後は木星大気モデルにこのライブラリを実装して，高解像度長時間積分に挑む予定である。

謝辞

研究の数値計算に海洋研究開発機構の地球シミュレータ(ES4)を用いた。

文献

[1] M. Heimpel and J. Aurnou, “Turbulent convection in rapidly rotating spherical shells: A model for



[5] K. Ishioka, “A New Recurrence Formula for Efficient Computation of Spherical Harmonic Transform”, J. Met. Soc. Japan, 96, 241-249, (January 2018)

図4. ES4VEでの単層並列時の球面調和関数変換のストロングスケーリング性能。上が正変換，下が逆変換の結果を表す。切断波数は4095，経度×緯度格子点数は8192×4096，鉛直層数は16である。層方向の並列数は1（黒実線），4（赤実線），8（青実線），16（紫実線）である。黒点線は傾き1を表す。スレッド並列数は8である。

equatorial and high latitude jets on Jupiter and Saturn”, Icarus, 187, 540-557, (April 2007)

[2] T. Gastine, M. Heimpel and J. Wicht, “Zonal flow scaling in rapidly-rotating compressible convection”, Phys. Earth Planet. Inter., 232, 36-50, (April 2014)

[3] M. Heimpel, T. Gastine and J. Wicht, “Simulation of deep-seated zonal jets and shallow vortices in gas giant atmospheres”, Nature GeoSci., 9, 19-23, (November 2015)

[4] S. Takehiro, Y. Sasaki and K. Ishioka, “Disappearance of Surface Banded Structure Produced by Thermal Convection in Rapidly Rotating Thin Spherical Shells”, Annual Report of the Earth Simulator, April 2014-March 2015, 128-129, (November 2015)

Development of a Fast Spherical Harmonic Transform Library for Numerical Simulations of Jovian Type Planetary Atmospheres with High-Resolution and Long-Time Integration

Project Representative

Shin-ichi Takehiro

Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University

Authors

Shin-ichi Takehiro ^{*1}, Youhei Sasaki ^{*2}, Keiichi Ishioka ^{*3}

^{*1}Research Institute for Mathematical Sciences, Kyoto University, ^{*2}Department of Architecture/Institute of Fundamental Sciences, Faculty of Science and Engineering, Setsunan University, ^{*3}Graduate School of Science, Kyoto University

Banded structures and alternating zonal jets observed in the surface atmospheres of Jupiter and Saturn have attracted many researchers in planetary atmospheric sciences, however, their physical explanations and understandings are not satisfactory. In this study, we try to perform massive parallel numerical experiments treating both small scale convection and planetary scale flows simultaneously, and to illustrate dynamical origin of global scale structures of surface flows of Jovian planets. Our previous results showed that high-resolution and long-time integration is essential to investigate the formation and maintenance mechanisms of the banded structures in Jovian type planetary atmospheres. For this purpose, we have been developing ISPACK3, a fast and large-scale spherical harmonic transform library in order to use our planetary atmosphere model. Now we introduced ISPACK3 on two systems with x64 CPUs (ES4CPU) and SX-Aurora TSUBASA (ES4VE) of the updated Earth Simulator, and have succeeded in obtaining good computational performance on each system.

Keywords : Jupiter, Saturn, zonal jet, banded structure, spherical harmonic transform

1. Introduction

The surface flows of Jupiter and Saturn are characterized by broad, prograde jets around the equator and alternating narrow jets in the mid- and high-latitudes. It is still unclear whether these surface jets are generated by convection in deep regions or are the result of fluid motion in the surface layer. One of the numerical simulations succeeded in illustrating these features was Heimpel and Aurnou (2007) [1]. They argued that deep convective motion in a thinner spherical shell than those considered so far can reproduce the coexistence of an equatorial prograde jet and alternating narrow jets in the mid- and high-latitudes. This work led to the active studies of thermal convection in thin rotating spherical shells, and recently, high-resolution numerical simulations of anelastic models have been performed to study the jet formation problem (e.g., Gastine et al. 2014 [2], Heimpel et al. 2015 [3]).

However, these studies are based on the so-called sectorial domain calculations assuming longitudinal symmetry, and only solve for fluid motion in a part of the domain, not the whole spherical shell. We have therefore performed numerical calculations of thermal convection in a thin rotating spherical shell in the whole domain, and found that the mid- and high-latitude banded structure disappears after longer integration time than in previous studies (Takehiro et al. 2015 [4]). This indicates that high-resolution and long-time integration is essential to investigate the formation and maintenance mechanism of the banded structure of Jovian type planetary atmospheres.

For this purpose, we have been developing a fast and large-

scale spherical harmonic transform library ISPACK3 and an anelastic thermal convection model in a rotating spherical shell with density stratification in the depth direction by using ISPACK3, and tuning it for various architectures. Now we installed and tuned ISPACK3 on two systems, ES4CPU and ES4VE, which consist of x64 CPUs and SX-Aurora TSUBASA, newly introduced in the updated Earth Simulator.

2. ISPACK3 Tuning

ISPACK3 was initially developed targeting x64 CPUs. One of the key points in coding for fast transforms is the implementation of a new method (Ishioka 2018 [5]) for fast computation of the asymptotic formulas of Legendre functions. This method is also incorporated into other spherical harmonic transform libraries for astronomical and planetary interior dynamo calculations. Another point is that the lowest-level subroutines of the transforms are implemented in assembler in order to take full advantage of the SIMD instructions of the CPU. In addition,

| M | 4095 | | 8191 | | 16383 | | Performance (%) |
|--------|------|------|------|------|-------|------|-----------------|
| | bw | fw | bw | fw | bw | fw | |
| ES4CPU | 1380 | 1582 | 1813 | 1996 | 2094 | 2405 | 91, 105 |
| ES4VE | 648 | 379 | 798 | 622 | 893 | 866 | 36, 35 |

Table 1. Performance of single-layer spherical harmonic transforms. ES4CPU: AMD EPYC 7742, 64 threads. ES4VE: SX-Aurora TSUBASA, 8 threads. Peak performance of ES4CPU is 2300 GFLOps, and that of ES4VE is 2450 GFLOps for the vector accelerator. M denotes truncation total wavenumber.

faster calculation speed is achieved with the code in consideration of the CPU cache. Other notable features are that the number of grid points in the longitude direction is not limited to powers of 2, but also allows the numbers with prime factors of 2, 3, and 5, and that the MPI parallel communicator can be partitioned for application to multilayer models.

For the SX-Aurora system, we first supported long vector lengths. In the implementation for x64 CPUs, the vector length was set to 4 or 8, while it is set to 256 for the SX-Aurora system. Moreover, in the sections of the inner-product type computation, we modified the code to avoid the inner-product type computations as much as possible by performing the reduction within the vector after calculating the sum of vectors with the length of 256.

The ISPACK3 library developed in this study is available on the web server (<https://www.gfd-dennou.org/library/ispack/>).

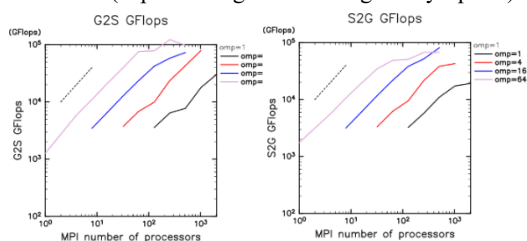


Fig. 1. Strong scaling performance of single-layer spherical harmonic transforms on ES4CPU. The left and right panels show the results of the forward and backward transforms, respectively. The number of parallel threads is 1 (black), 4 (red), 16 (blue), and 64 (purple). The black dotted line indicates slope 1.

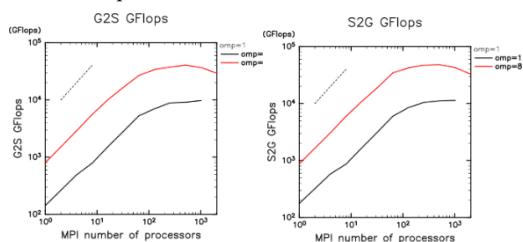


Fig. 2. Same as Fig. 1 but for ES4VE. The number of parallel threads is 1 (black solid line) and 8 (red solid line).

3. Benchmark results

Table 1 shows the benchmark calculations for single-layer spherical harmonic transforms. With the above-mentioned innovations, the conversion speeds on ES4CPU (x64 CPUs) are about 100% of the peak performance. Even on ES4VE, the speed of transforms are about 40% of the peak performance.

Figs. 1 and 2 show the strong scaling performance of single-layer spherical harmonic transforms on ES4CPU and ES4VE, respectively. The truncated wavenumber is 16883, and the longitude and latitude grid points are 32768 and 16384, respectively. Both on ES4CPU and ES4VE systems, good parallelization acceleration rates of almost 100% are achieved.

Figs. 3 and 4 show benchmarks of hybrid calculations on

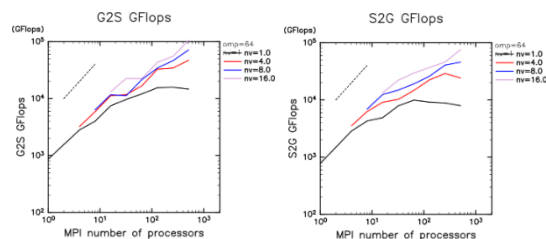


Fig. 3. Strong scaling performance of multi-layer spherical harmonic transforms on ES4CPU. The left and right panels show the results of the forward and backward transforms, respectively. The number of parallel threads is 1 (black), 4 (red), 8 (blue), and 16 (purple). The black dotted line indicates slope 1. The number of parallel threads is 64.

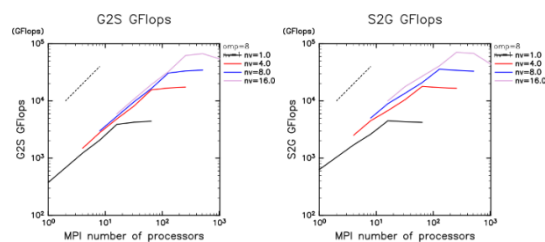


Fig. 4. Same as Fig. 3 but for ES4VE. The number of parallel threads is 8.

ES4CPU and ES4VE, respectively. The truncated wavenumber is 4095, and the longitude and latitude grid points are 8192 and 4096, respectively, and the number of vertical layers is 16. Acceleration of conversion speed stops with a small number of the CPU cores for the parallelization on a single layer alone, while acceleration can be extended for larger numbers of the core by parallelizing in the layer direction.

4. Summary

We have introduced and tuned ISPACK3, a fast and large-scale spherical harmonic transform library, to two new Earth Simulator systems, x64 CPUs and SX-Aurora TSUBASA, and have succeeded in obtaining good computational performance on each system. Based on these results, we have implemented ISPACK3 in our anelastic Jovian type planetary atmosphere model. By using this model, we will perform numerical simulations with high-resolution long-time integration.

Acknowledgement

The Earth Simulator (ES4) of the Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology (JAMSTEC) was used for the numerical calculations of the study.

References

- [1] M. Heimpel and J. Aurnou, "Turbulent convection in rapidly rotating spherical shells: A model for equatorial and high latitude jets on Jupiter and Saturn", *Icarus*, 187, 540-557, (April 2007)
- [2] T. Gastine, M. Heimpel and J. Wicht, "Zonal flow scaling in rapidly-rotating compressible convection", *Phys. Earth Planet.*

Inter., 232, 36-50, (April 2014)

[3] M. Heimpel, T. Gastine and J. Wicht, "Simulation of deep-seated zonal jets and shallow vortices in gas giant atmospheres", Nature GeoSci., 9, 19-23, (November 2015)

[4] S. Takehiro, Y. Sasaki and K. Ishioka, "Disappearance of Surface Banded Structure Produced by Thermal Convection in Rapidly Rotating Thin Spherical Shells", Annual Report of the Earth Simulator, April 2014-March 2015, 128-129, (November 2015)

[5] K. Ishioka, "A New Recurrence Formula for Efficient Computation of Spherical Harmonic Transform", J. Met. Soc. Japan, 96, 241-249, (January 2018)