不連続ガラーキン法(DGM)を用いた大気力学コア SCALE-DG の開発進捗

河合佑太[*1], 任軒正博[*2], 西澤誠也[*1], 片桐孝洋[*2], 富田浩文[*1]

*1 理化学研究所 計算科学研究センター, *2 名古屋大学 情報学研究科

富岳 NEXT FS 気象・気候分野公開研究会,
第 4 回気象・気候 計算科学研究連絡会
@ビジョンセンター東京虎ノ門, 2025/02/27

DG 力学コア開発の背景

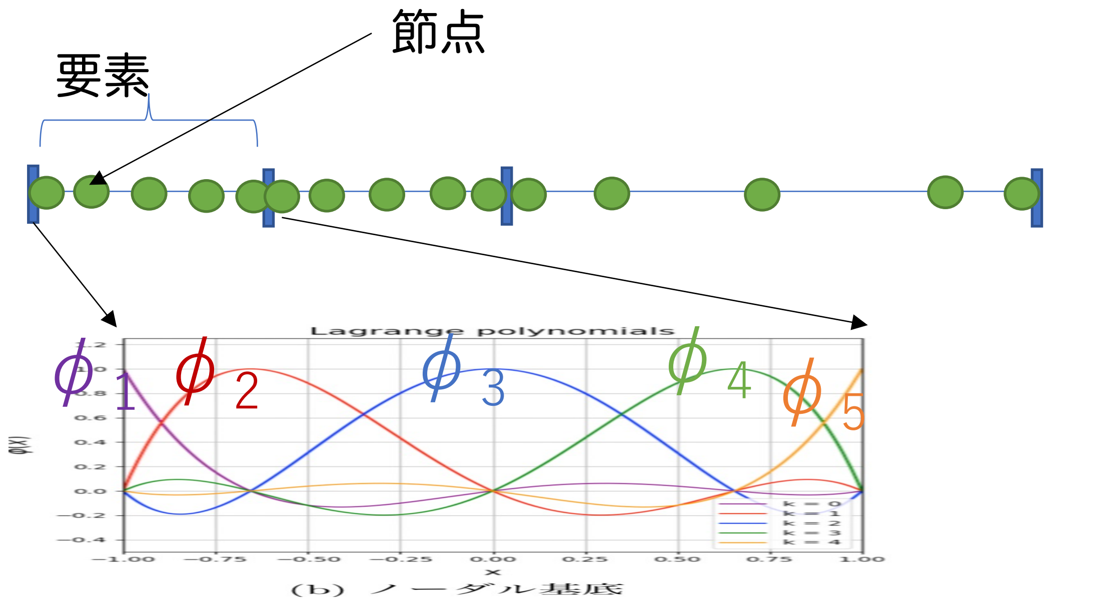
- 全球湿潤 LES といった将来的な高解像度大気計算を念頭に置いて, 従来的な大気力学コアの課題を検討してきた.
  - 格子幅が O(10 m) といった大気 LES において, 力学コアの離散誤差が乱流スキームの効果を卓越しないためには, 移流スキームに対して 7-8 次精度であることを示唆した (Kawai & Tomita, 2021).

従来的に用いられてきた低次精度の流体スキームに比べて必要精度はかなり高い

- 古典的な格子点法の高精度化は, 定式化の複雑化・ステンシル拡大によるデータ局所性の悪化といった問題がある.

=> そのため, 不連続ガラーキン法(DGM)に注目

不連続ガラーキン法の模式図



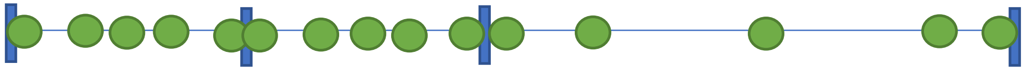
$$\sum_{n=0}^{N} M_{n,k}\frac{da_n}{dt} = \int_{-1}^{1} f(\tilde{\phi}_j)\frac{d\phi_k}{d\xi}\,\mathrm{d}\xi - \left[f(\tilde{\phi}_j(x))\phi_k(x)\right]_{-1}^{1}$$

$$\hat{f}(u_r, u_l) = \frac{1}{2}\left[f(u_r) + f(u_l) - \alpha(u_r - u_l)\right]$$

- 従来的な格子点法と比較した DGM の特徴
  - 高精度化の方法が単純である
  - データの局所性が高い

不連続ガラーキン法の空間離散化の例

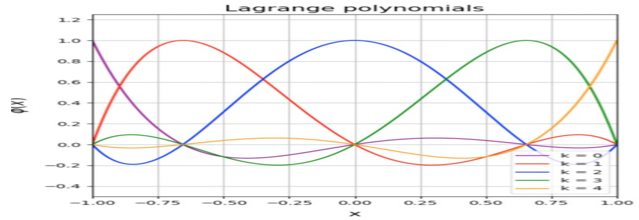
- 1次元スカラー保存則を考える $\dfrac{\partial q}{\partial t} + \dfrac{\partial (uq)}{\partial x} = 0,$



- 計算領域を分割し, 各要素内の変数の分布を, 有限個の展開関数の和として表現する

$$q(\xi, t)|_{\Omega_e} \simeq q^e(\xi, t) = \sum_{j=0}^{p} q_j^e(t) l_j(\xi),$$

- nodal 表現の場合
  - l_j はラグランジュ多項式, 補間点としては LGL node がしばしば用いられる.



(b) ノーダル基底

- 支配方程式の左辺(残差)の L_2 ノルムを, 自由度の時間変化率に対して最小化することを, 各要素ごとで要求する.

$$\frac{h_e}{2}\int_{-1}^{1}\left[\frac{\partial q^e}{\partial t} + \frac{\partial (uq^e)}{\partial x}\right] l_i \, d\xi = 0, \quad i = 0, \ldots, p.$$

- 左辺 2 項目を部分積分する(弱形式).

$$\frac{h_e}{2}\frac{\partial}{\partial t}\int_{-1}^{1} q^e l_i d\xi - \boxed{\int_{-1}^{1}(uq^e)\frac{dl_i}{d\xi}d\xi} + \boxed{[\widehat{uq}\ \ l_i]_{-1}^{1}} = 0.$$

$$\hat{f}(q_l, q_r) = \frac{1}{2}\left[(uq)_l + (uq)_r - |u|(q_r - q_l)\right]$$

要素境界のフラックスは,
数値流速により評価する.

- もう一度部分積分を実行して, 強形式に書き換える場合もある.
- 少し変形すると..

$$\frac{h_e}{2}\sum_{j=0}^{p}\frac{\partial q_j^e}{\partial t}\int_{-1}^{1} l_i l_j d\xi + u\sum_{j=0}^{p} q_j^e \int_{-1}^{1} l_i \frac{dl_j}{d\xi}d\xi + u[(\hat{q} - q^e) l_i]_{-1}^{1} = 0.$$

- 行列表現

$$\frac{h_e}{2}\mathbf{M}\frac{\partial \mathbf{q}^e}{\partial t} + u\mathbf{S}^{\mathrm{T}}\mathbf{q}^e + u\mathbf{B}(\hat{\mathbf{q}} - \mathbf{q}^e) = 0,$$

ここで,

$$M_{i,j} = \int_{-1}^{1} l_i l_j d\xi,$$

$$S_{i,j} = \int_{-1}^{1}(l_j dl_i/d\xi)\, d\xi,$$

$$\mathbf{B} = \mathrm{diag}(-1, 0, \ldots, 0, 1)$$

<- 流体計算ライブラリとしては, この行列の構築, 効率的な行列-ベクトル積演算に注力すると良い

我々の近年の取り組み

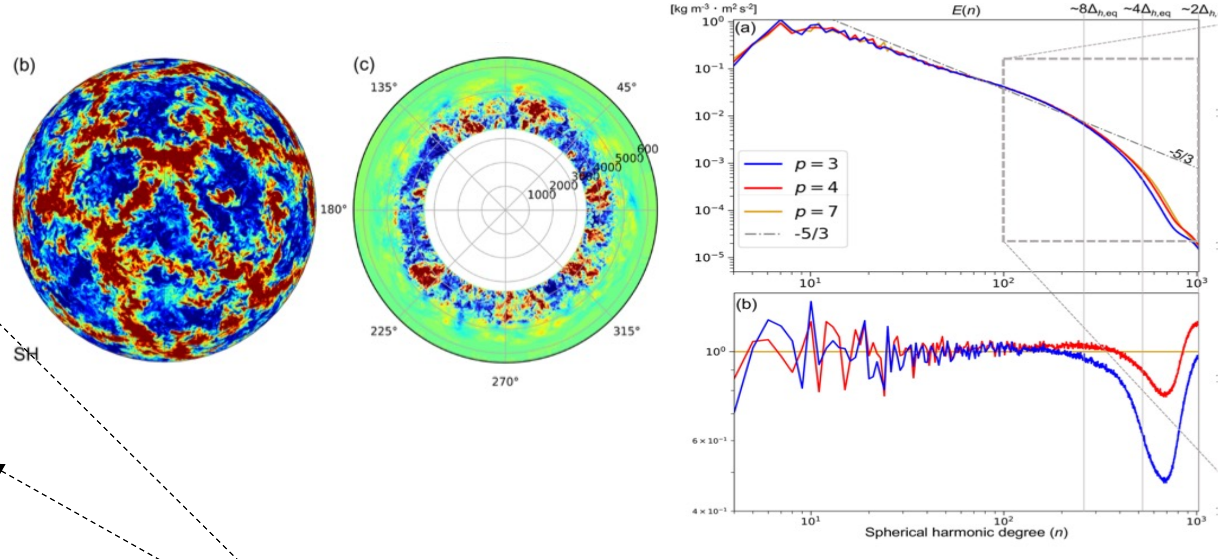
- DGM に基づく領域・全球力学コアを開発し, 大気シミュレーションにおける DGM の数値的特性の理解を深めながら, 有用性を調査してきた.
    - DGM の枠組みで大気 LES の必要精度を議論 (Kawai & Tomita, 2023).
    - 従来的な力学コアと比較した, 物理表現・計算コストを検証 (Moonshot 目標 8 の研究開発の一つ)
    - A64FX(富岳等)での DG 計算コードの性能評価と高速化 (名大 任さんとの共同研究)
    - 立法球面座標系を用いて, 領域力学コアを全球へと拡張 (Kawai & Tomita, 2025)
- 最近では, DG 力学コア-物理過程結合や現実大気実験への対応に進みつつある.

[全球 DG 力学コア論文] Kawai & Tomita (2025, GMD): Development of a high-order global dynamical core using the discontinuous Galerkin method for an atmospheric large-eddy simulation (LES) and proposal of test cases: SCALE-DG v0.8.0

DGM に基づく全球力学コアの開発
小惑星設定による理想化した惑星境界層乱流 LES

鉛直風の空間分布

三次元速度の
エネルギースペクトル

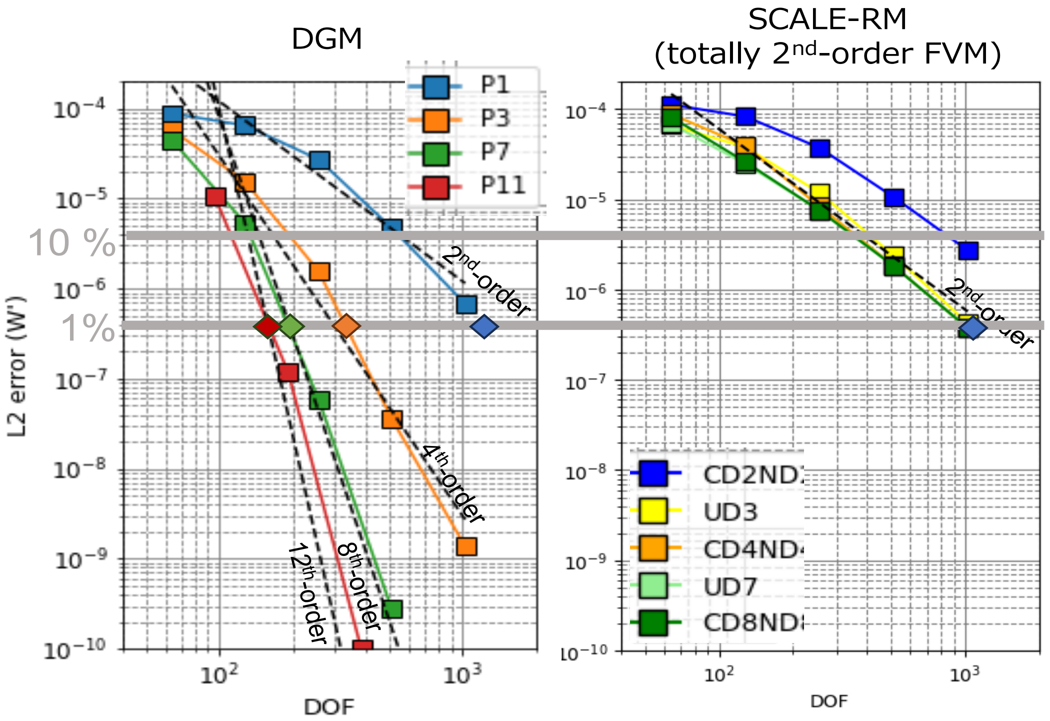


本発表では, 従来的な力学コアと比較した, 物理表現・計算性能を検証, 富岳での DG 計算コードの高速化に関する成果を発表する.

DG 力学コアの物理表現・計算コストの検証 (1/2)
: 内部重力波ケース等の決定論的テストの場合

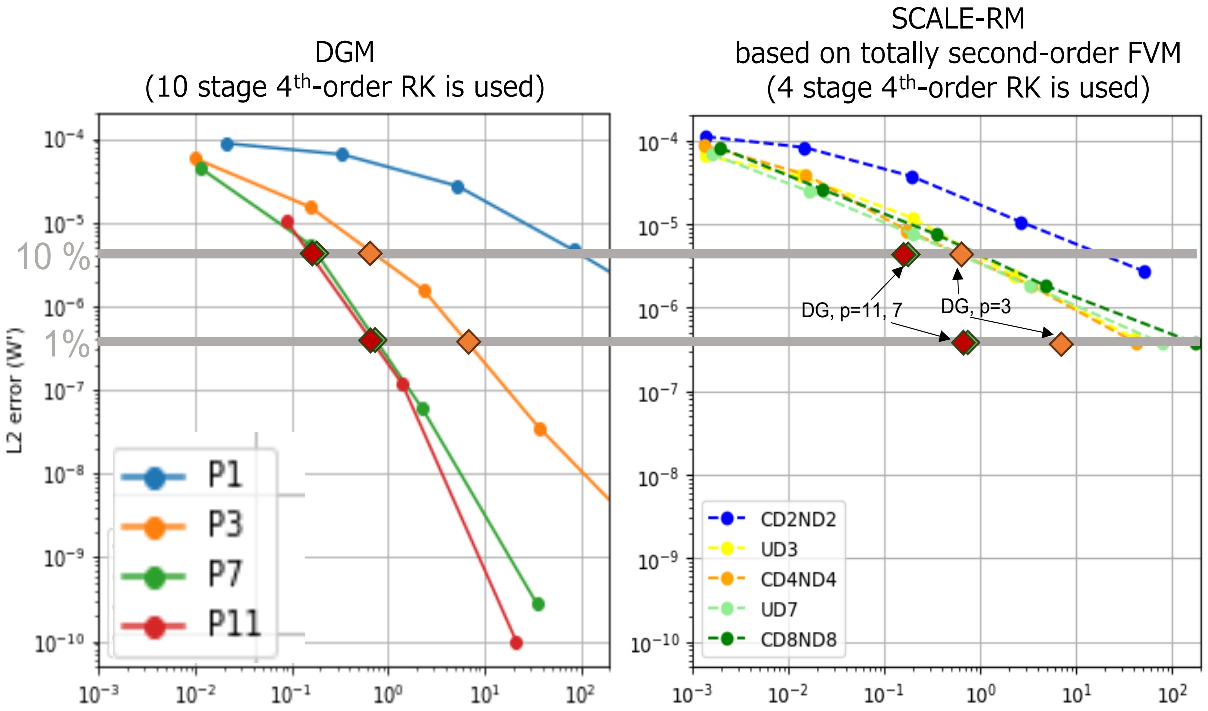
- DGM に基づく厳密な高精度化によって得られた高次の数値収束性により, 従来的な低次の力学コアに比べて, 目標数値誤差に達するための計算コストが小さくなり得る.

内部重力波テストにおける L2 誤差ノルムの解像度依存性・DGM の計算コスト



横軸: 空間解像度

DG 力学コアでは, p+1 (p は展開多項式の次数)次の数値収束率が得られている.



横軸: 富岳での使用資源量 (NH)

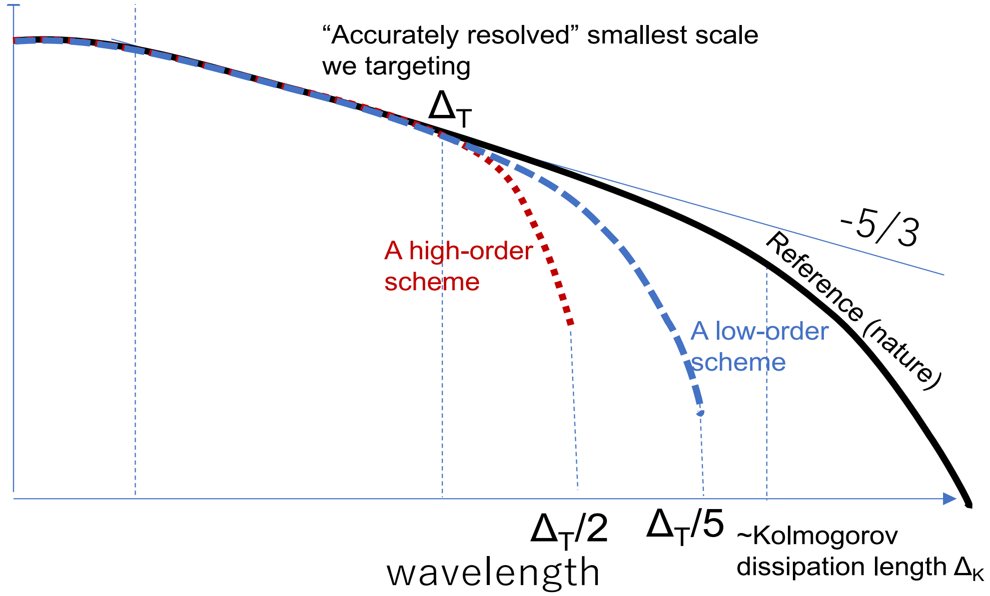
誤差を 1 % 減らすための計算コストは, 全体で 2 次の力学コアよりも p>=3 の DG 力学コアの方が少ない.

DG 力学コアの物理表現・計算コストの検証 (2/2) : 乱流シミュレーションの場合

- 次に, 乱流シミュレーションにおける高精度力学コアの利点を, エネルギースペクトルから示唆される有効解像度に注目して定量的に示したい.
  - Kawai & Tomita (2023) では, KT2021 の数値指標を DGM の枠組みに拡張して, 大気 LES で要求される展開多項式の次数(p)を議論したが, 有効解像度に対する次数の効果やそれによる計算コスト上の利点を十分に調べなかった.

レイリー・ベナール(RB)対流の直接数値実験(DNS)を実施し, DGM に基づく高精度力学コアの有効解像度やそれに基づく計算コストを調べる.

有効解像度に注目した
高精度流体スキームの利点

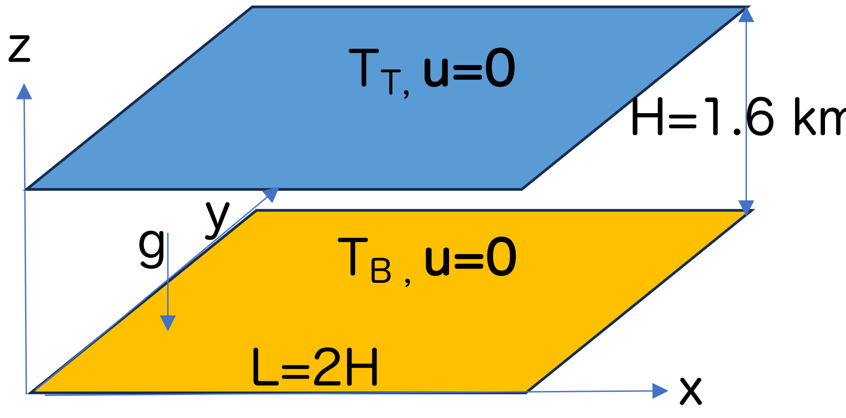


特定の空間スケールまでスペクトルを正確に表現するために必要な空間解像度は, 力学コアが高精度であるほど粗くて済むと期待できる.

=> その分だけ, 計算コストの点で有利になるのか?

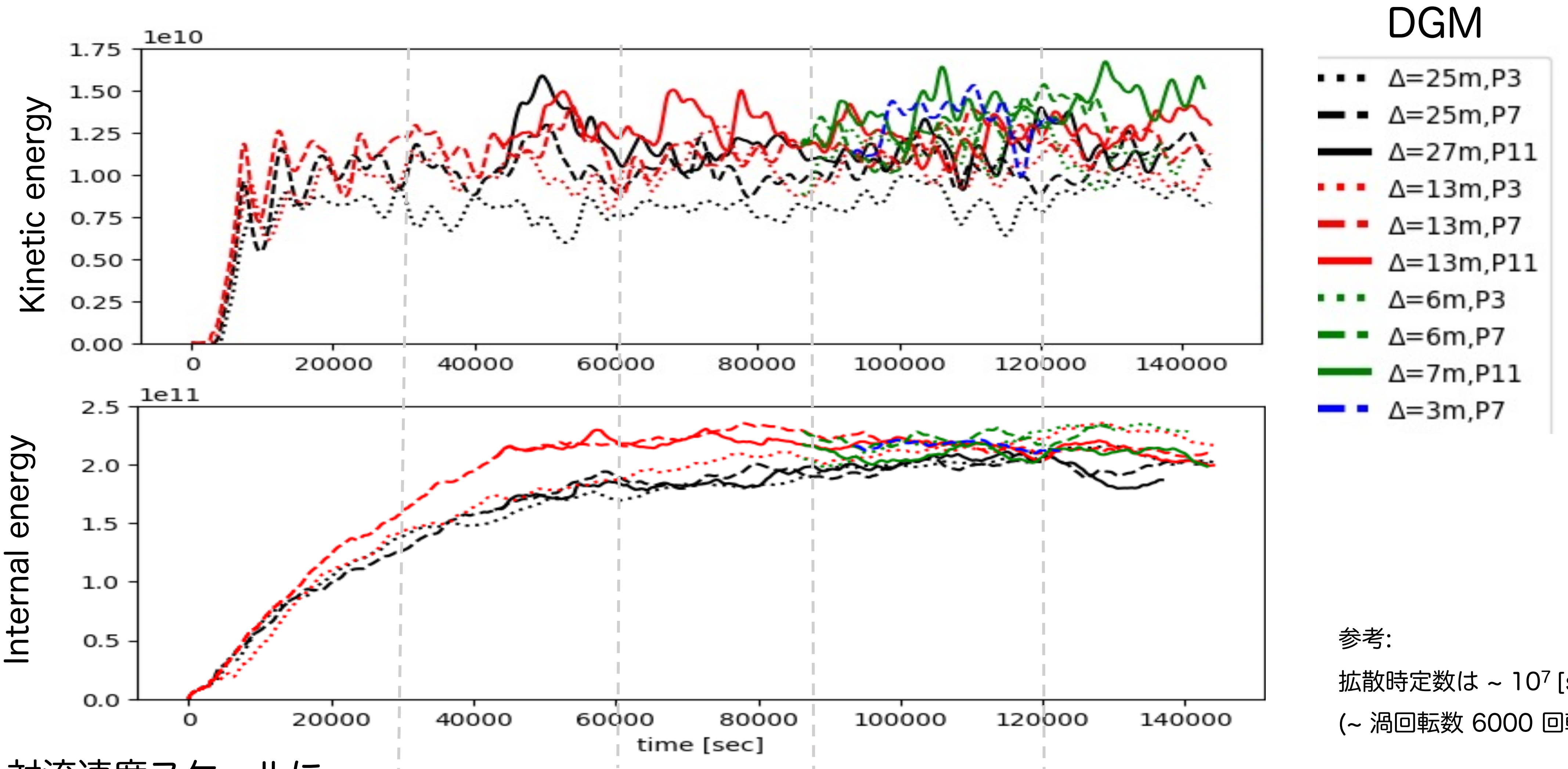
モデル・実験設定

- 支配方程式系: 3 次元完全圧縮方程式系
- 空間離散化
  - DGM: p=3, 7, 11
    - 数値流束は Rusanov フラックス, 数値安定化のためにモーダルフィルタ
  - 有限体積法 (FVM): 全体で 2 次精度 (SCALE-RM を使用)
    - 移流スキームは, 3 次風上・7 次風上フラックス (UD3, UD7), 8 次中心フラックス+ 8 階微分の数値フィルタ (CD8ND8)
- 時間離散化: 4 次の陽的 Runge=Kutta 法
- Ra~4x10^9 に対応するレイリー・ベナール対流の直接数値実験 (DNS) を実施した.
  - 乱流パラメタリゼーションは用いない.
  - DGM・FVM を用いて, 空間解像度を Δ ~ 25, 12, 6, 3 m と変更



- 動粘性係数・熱拡散係数
  - (ν, κ)= (1.8x10^{-1}, 1.5x10^{-1}) [m^2/s]
  - 対応するレイリー数は Ra~4x10^9, コルモゴロフの散逸長は約 1 m
- 上下端の境界条件
  - 滑りなし, 温度固定 (T_B=301.0 K, T_T=284.4 K)
- 初期条件: 温位一様・静止状態

結果: 領域積分したエネルギーの時間発展



対流速度スケールによる渦回転数: ~10 ~20 ~30 ~40

参考:

拡散時定数は ~ 10^7 [sec]

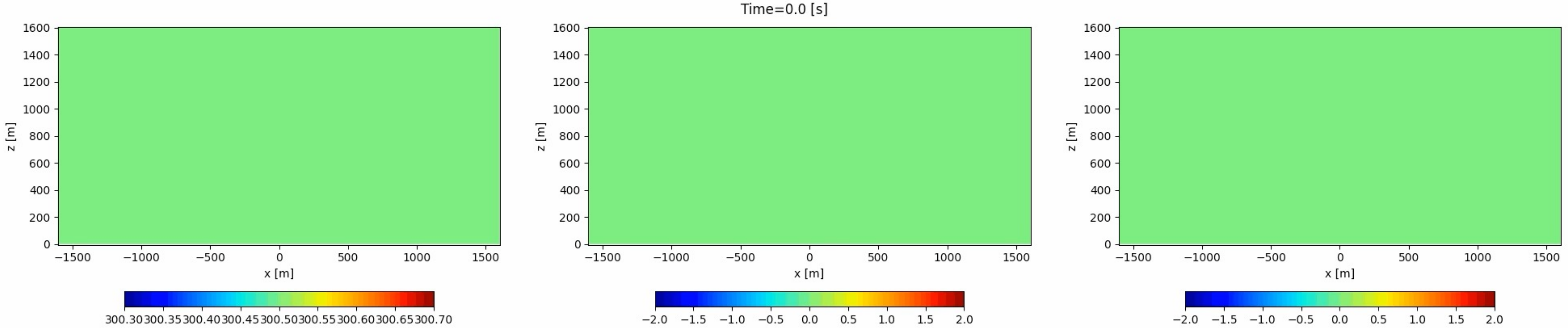
(~ 渦回転数 6000 回転ぐらいの時間スケール)

- 初期から 5×10^4 s 程度積分を行うと, 系は統計的平衡状態に達した.

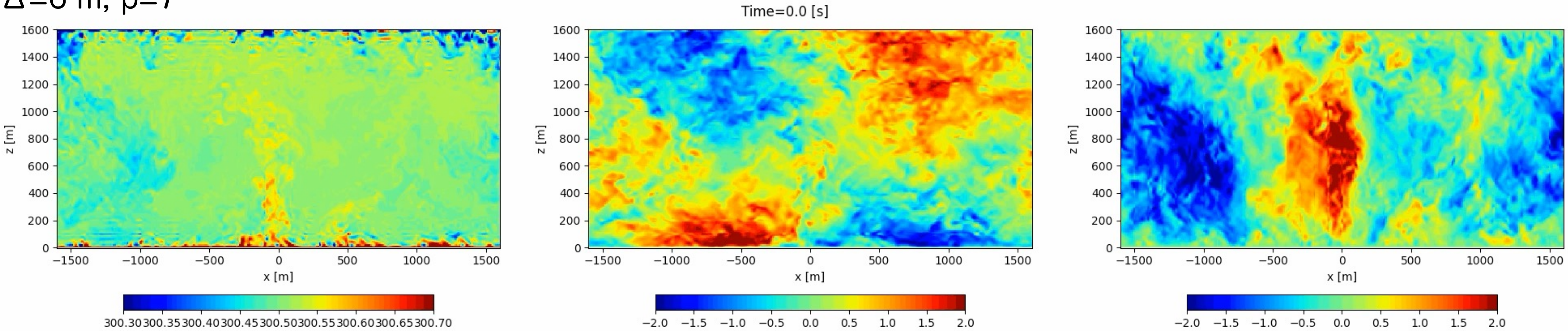
結果: x-z 平面における流体場の時間発展

温位　　　水平風 (x)　　　鉛直風

DGM, Δ=12 m, p=7

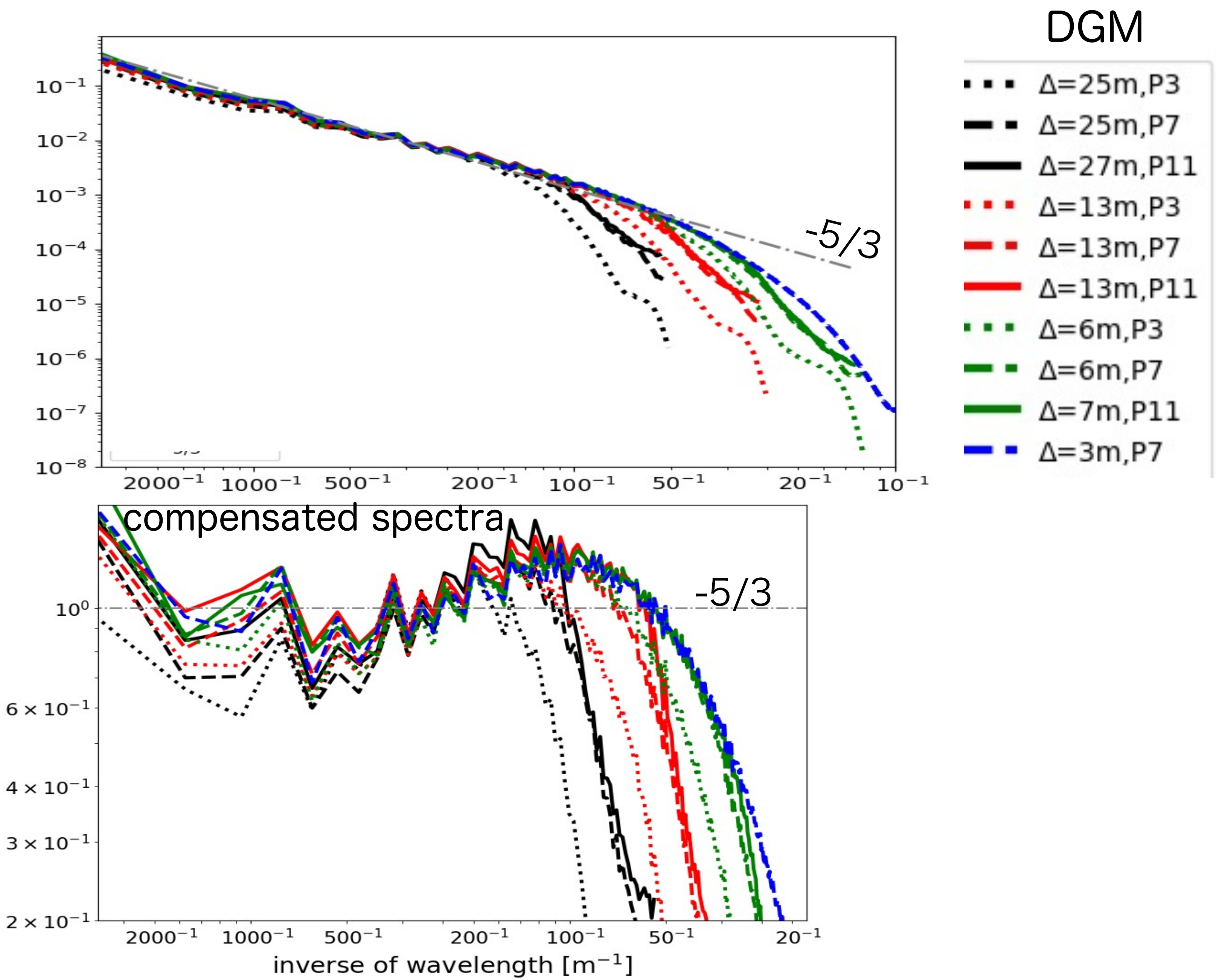


DGM, Δ=6 m, p=7



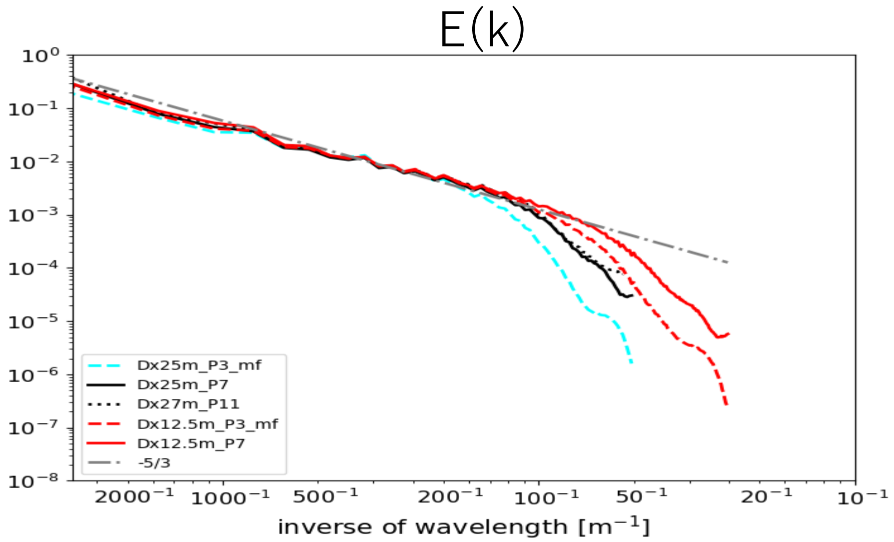
- 計算領域に 1 つ収まる対流セルが卓越する.
- 空間スケールが数十 m 以下の微細な構造が領域内部にも見られる.

結果: z=800 m における三次元速度のエネルギースペクトル

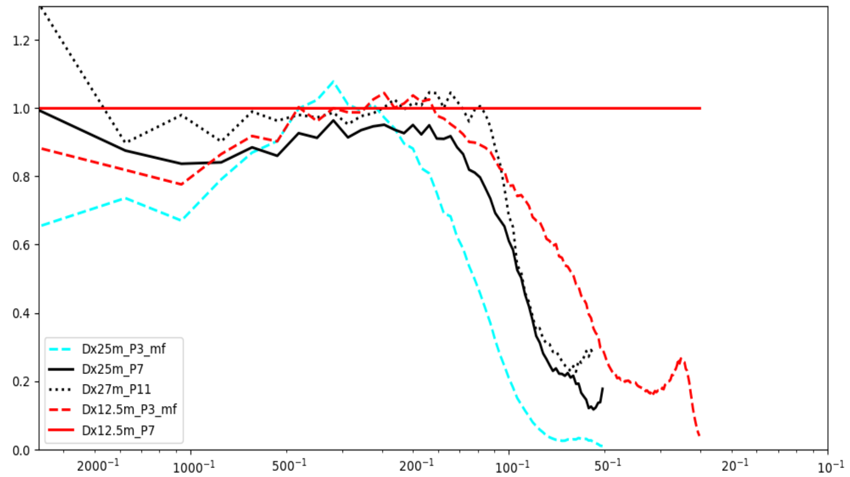


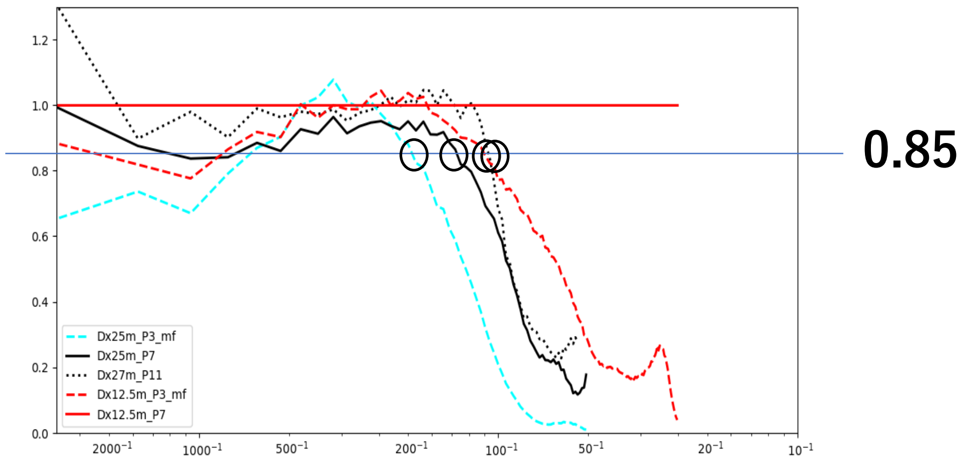
- 最高解像度実験(Δ=3 m)の結果(青線)に基けば, 本実験の粘性係数では, 波長 40 mよりも長波長側のスペクトルは, Kolmogorov 則に従っている.
    - それより高波数域は, “物理粘性”による散逸領域を反映している.

エネルギースペクトルに基づく有効解像度の見積もり: 手順



1. 最高解像度実験から得られたエネルギースペクトルを参照解として, 各ケースのスペクトルを規格化する.





2. 参照解のスペクトルの 0.85 倍となる波長を調べる.

(しきい値は, 現状 artificial に設定している)

	p=3	p=7	p=11
Δ ~25m	188 m	139 m	107 m
Δ ~12m	110 m	79 m	51 m

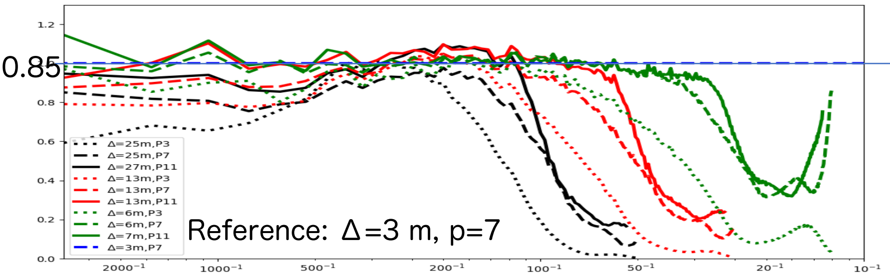
3. 2 で求めた波長を各ケースの格子幅(Δ)で割ることで, 有効解像度(単位: 格子数)の情報を得る.

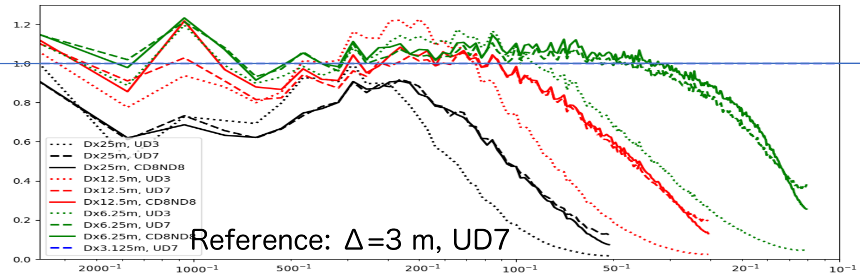
	p=3	p=7	p=11
Δ ~25m	7.5 grid	5.6 grid	4.0 grid
Δ ~12m	9.5 grid	6.6 grid	4.3 grid

結果: 有効解像度に対する力学コアの高精度化の効果

DGM	全体で 2 次の FVM

参照解で規格化した三次元速度のエネルギースペクトル





有効解像度

	p=3	p=7	p=11
Δ~25m	7.5 grid	5.6 grid	4.0 grid
Δ~12m	9.5 grid	6.6 grid	4.3 grid
Δ~6 m	11.1 grid	5.4 grid	4.2 grid

	UD3	UD7	CD8ND8
Δ~25m	9.1 grid	7.5 grid	8.0 grid
Δ~12m	9.1 grid	6.4 grid	6.6 grid
Δ~6m	10.2 grid	4.2 grid	3.8 grid

計算コストの指標 (DGM, p=3 の場合で規格化) 値が小さいほど計算コストが小さい

	p=3	p=7	p=11
Δ~25m	(-)	0.37	0.27
Δ~12m	(-)	0.26	0.08
Δ~6 m	(-)	0.06	0.05

	UD3	UD7	CD8ND8
Δ~25m	0.65	0.43	1.0
Δ~12m	0.25	0.10	0.24
Δ~6 m	0.28	0.016	0.016

- DGM において, p が大きいほど有効解像度は向上し, 計算コストが小さくなる.
- 有効解像度の観点で DG 力学コアの計算コストを評価すると, 従来的な有限体積法に基づく力学コアと同程度かより多い場合がある.

有効解像度を揃えて見積もった計算コスト
(富岳での計算リソース [node hr.]
/ 富岳での P3 の計算リソース [node hr.])
x (有効解像度/ P3 の有効解像度)^4

課題

- エネルギースペクトルによる有効解像度に基づく計算コストの評価では, 従来的な有限体積法の力学コアと比べると, DGM の計算コストが同程度かより多い場合がある..
  - 主な要因
    1. DG の方が 2 倍ほど時間刻み幅の制約が厳しい.
    2. DNS 設定で長期間の計算安定性を担保するために, 強めのモーダルフィルタを使用した.
    3. 計算コードの最適化が不十分である.

- 3. については, 現状の計算コードは, 様々な形状の要素に対する微分・Lift 演算を評価できるように, 汎用的な実装(疎行列ベクトル積のアルゴリズムの使用等)を採用していることが関係している.
  - テンソル積によって要素を多次元化する場合に適用できる sum factorization や, 展開多項式の次数ごとにコードを陽に生成する等によって, (少なくとも富岳等の A64FXでの)計算効率は大幅に改善できる可能性はある. <- 一部, 昨年の FS 研究会で報告

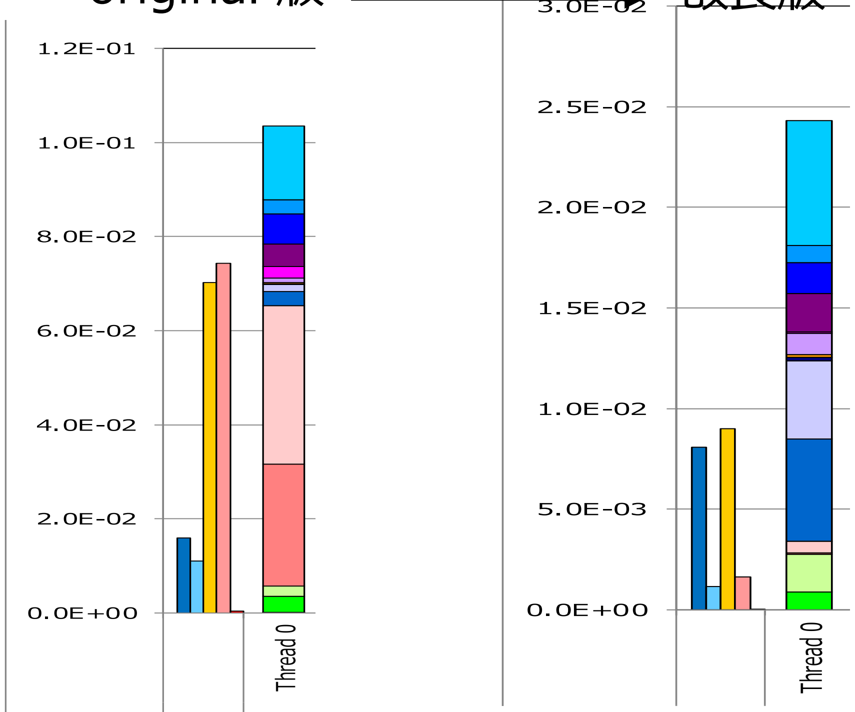
DG 計算コードの高速化 (1/2)
(昨年の FS 研究会で報告した高速化ポテンシャル)

名大 任さんとの共同研究

空間微分と関係する
行列ベクトル積の計算カーネル (p=7)

約 4 倍の高速化

original 版 → 改良版

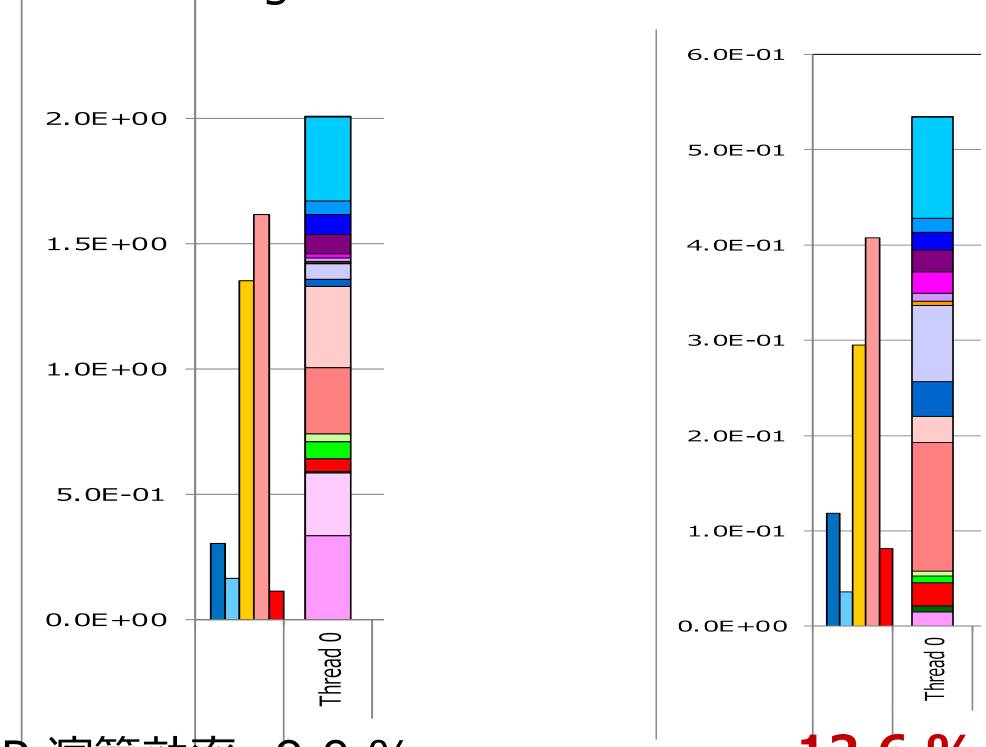


FP 演算効率: 4.9 % → **21.6 %**

要素ごとの体積分・面積分と関係する区間
全体で見ると.. (p=7)

約 4 倍の高速化

original 版 → 改良版



FP 演算効率: 9.0 % → **12.6 %**

メモリスループット: 5.7 % → **15.3 %**

- テンソル積による要素の多次元化を考慮した sum factorization, 展開多項式の次数ごとにコードを陽に生成することで, HEVE の計算コードの演算効率やメモリスループットが大きく改善する.

DG 計算コードの高速化 (2/2)

名大 任さんとの共同研究

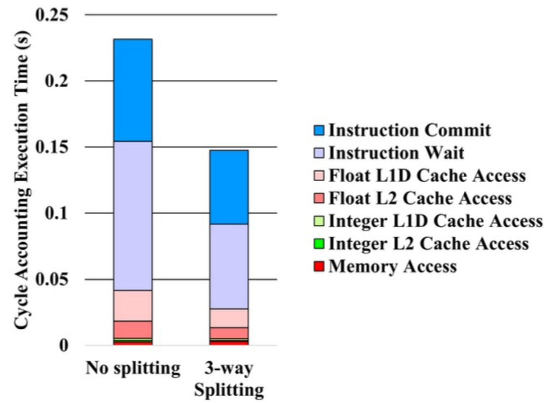
(任さんの最近の研究によって明らかになった高速化ポテンシャルの一例)

- 展開多項式の次数(p)ごとに陽にコード生成することにより計算効率は向上する. 演算器待ちが次の問題となる.
  - 演算器律速の問題を改善するために, ループボディ内の積和演算を適度に分割することが重要である.
- Ren et al. (第197回HPC研究会, IWAHPCE-2025)
  - 分割数探索のチューニングプロセスを提案し, p=3~11 に対する適切な分割サイズを調べた.

分割数 \ 次数P	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00	1.00
2	0.93	0.99	1.00	1.02	1.02	1.15	1.19	1.21	1.17
3	1.00	0.99	0.95	0.86	0.88	1.15	1.20	1.25	1.26
4	0.89	1.00	0.95	0.89	1.01	1.15	1.14	1.23	1.21
5		1.01	0.91	0.89	0.88	1.13	1.09	1.21	1.16
6			0.95	0.86	0.88	1.10	1.15	1.20	1.10
7				0.93	0.96	1.12	1.10	1.22	1.14
8					0.91	1.14	1.10	1.24	1.10
9						1.14	1.13	1.18	1.09
10							1.10	1.22	1.08
11								1.24	1.19
12									1.10

$$\text{Speedup} = \frac{T_{\text{分割なし}}}{T_{N\text{分割}}}$$

```fortran
subroutine apply_filter_x_direction(filterMat, q_in, q_tmp)
    !-- x direction
    do k=1, 12
    do j=1, 12
    do i=1, 12
        tmp1 =  filterMat(i, 1) * q_in( 1,j,k) + &
                filterMat(i, 2) * q_in( 2,j,k) + &
                filterMat(i, 3) * q_in( 3,j,k) + &
                filterMat(i, 4) * q_in( 4,j,k)
        tmp2 =  filterMat(i, 5) * q_in( 5,j,k) + &
                filterMat(i, 6) * q_in( 6,j,k) + &
                filterMat(i, 7) * q_in( 7,j,k) + &
                filterMat(i, 8) * q_in( 8,j,k)
        tmp3 =  filterMat(i, 9) * q_in( 9,j,k) + &
                filterMat(i,10) * q_in(10,j,k) + &
                filterMat(i,11) * q_in(11,j,k) + &
                filterMat(i,12) * q_in(12,j,k)
        q_tmp(i,j,k) = tmp1 + tmp2 + tmp3
    end do
    end do
    end do
```



p > 7 で, 積和演算の分割が効果的で, 最適な分割数は 3 分割.
=> 高次 DG の微分計算カーネルを 1~2 割さらに高速化できることを示唆している.

- これまでに得られた高速化の知見を取り込めば, 富岳における現状の DG 力学コア(HEVE)は数倍は高速化する可能性がある.
- 今後, 高速化した計算コードを用いて, 有効解像度に基づく計算コストを再評価したい.

まとめ

- 従来的な低次の力学コアと比較した DGM の流れ場の物理表現の有効解像度や計算コストを評価するために, レイリー・ベナール対流の DNS を実施した.
    - エネルギースペクトルから各精度に対する有効解像度や計算コストを見積もると, DGM において p が大きいほど有効解像度は向上し, 計算コストが小さくなる傾向がみられた.
    - 一方で, 従来的な有限体積法の力学コアと比べると, DGM の計算コストが同程度かより多い場合がある.
        - 要因: 1) DG の方が 2 倍ほど時間刻み幅の制約が厳しい. 2) DNS 設定で長期間の計算安定性を担保するために, 強めのモーダルフィルタを使用した. 3) 富岳での計算コードの最適化が不十分である.
- 今後の展開
    - DG 力学コアの計算カーネルは, (要素内の自由度程度のサイズを持つ) 行列ベクトル積・行列行列積を扱うが, 計算環境の動向(GPU への対応 等)に応じてデータ構造やアルゴリズムの改良が今後も必要と考えられる.
    - 湿潤過程を含む現実大気計算や高解像度 LES を目指して, 地表面の複雑形状の扱いや, DGM の枠組みでの力学-物理過程の結合手法の開発を進める.