

大規模並列GPU計算による地震波伝播シミュレーション

岡元太郎* 竹中博士** 中村武史*** 青木尊之****

*東京工業大学理工学研究科 **九州大学理学研究院 ***海洋研究開発機構 ****東京工業大学学術国際情報センター

2011年の東北地方太平洋沖地震は、強い地震動と巨大な津波によって東日本地域に計り知れないほどの被害をもたらした。この地震について、巨大地震の震源がどのようなものであったか、また巨大津波や地震動の励起はどのようになされたのかを探ることが、地球科学においてきわめて重要な課題となっている。そのためには大規模な地震波計算によって得られる理論波形を用いた定量的な解析が必要となる。我々はTSUBAMEのGPUを用いた高速・大規模計算によってこの問題に取り組んでいる。本稿では、我々が採用したGPU計算手法や計算性能について報告する。また、東北地方太平洋沖地震に関するシミュレーション例を紹介する。

はじめに

1

2011年3月11日に発生した東北地方太平洋沖地震(マグニチュード9、図1)は、強い地震動と巨大な津波によって東日本地域に計り知れないほどの被害をもたらした。しかし残念ながら、この地域ではこれほどの巨大地震の発生は想定されていなかった。そのため、巨大地震の発生条件や強震動・巨大津波励起の仕組みを探ることと、今後の地震防災に向けた研究を進めることが地球科学においてきわめて重要な課題となっている。

我々は地震波を解析することによって、この地震がどのようなものであったのかを推定し、地震時に発生した強震動や津波生成との関連を探る研究を進めている。その研究では、地球内部不均質性や地形・海水層などの効果を考慮した大規模な地震波の理論計算を繰り返し実行しなければならない。そのため、大規模で高速な計算資源が必要となっている。そこで我々はGPUの演算性能に着目し、大規模並列GPU計算による地震波伝播計算プログラムの開発を進めている。

GPU(Graphics Processing Unit)は、その名称の通り画像処理を高速に実行するためのデバイスである。GPUの特徴は、非常に多くの演算用コアを内蔵していることと、極めて高い数値演算性能を持つことである(図2)。最近のGPUは一千個以上の演算コアを内蔵し、単精度演算では2TFlops(テラ・フロップス)を越える理論ピーク演算性能を持っている。また、絶対性能と同時に電力あたりの性能も高い。さらに一般消費者向けに大量生産される製品であることから、高い演算性能にも関わらず安価にかつ容易に入手できるのもGPUの大きな特徴である。

GPUにはもう一つ、メモリ転送速度が非常に高速であるという重要な特徴がある(図2)。そのため、多量のメモリ読み出し・書き込みが発生するメモリ集中型(memory intensive)の計算問題でも高い性能を発揮する。地震波伝播のシミュレーションもメモリ集中型の問題であり、GPUを応用することには大きな利点がある。

本稿では、我々が開発してきたGPUプログラムについて紹介する^[1-3]。我々のプログラムは格子計算型的手法、すなわち食い違い格子型の

差分法にもとづいたものである。この手法は地震波伝播シミュレーションにおける時間領域解法の標準的な手法の一つとして広く用いられているものである。プログラムの主要部分の開発には東京工業大学学術国際情報センターのTSUBAME-1.2(2010年10月まで)、およびTSUBAME-2.0(2010年11月以降)を利用させていただいた。ここではTSUBAME-2.0による結果について報告する。

なお本稿は地震の研究をテーマとしているが、地震波計算は地球・惑星内部構造を推定するうえでも非常に重要な手法であることを付言しておきたい。特に資源探査の分野では地震波伝播を高速に計算する手法や高性能ハードウェアへの要請が非常に高く、GPU計算を応用した地震波計算や内部構造推定の研究が世界的に進められている。

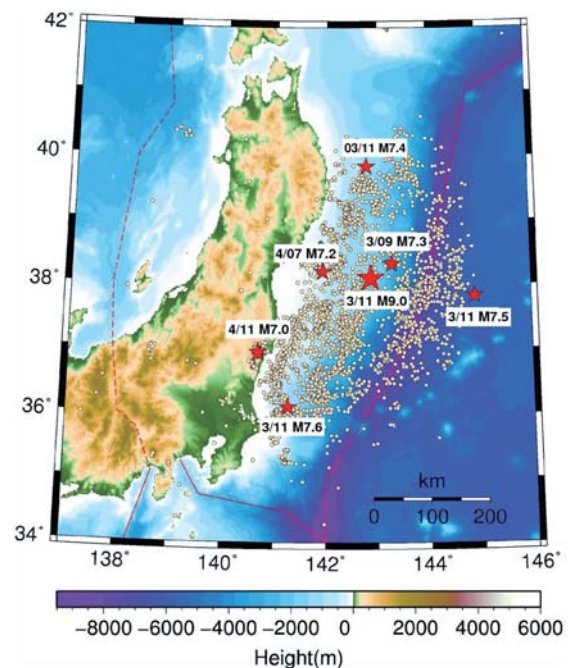


図1 東北地方太平洋沖地震(2011年3月11日)の余震分布(2011年3月9日から2011年4月11日、 $M_{JMA} \geq 4.0$)。マグニチュード7以上の地震の震央を星印で示した。震源データは気象庁による。

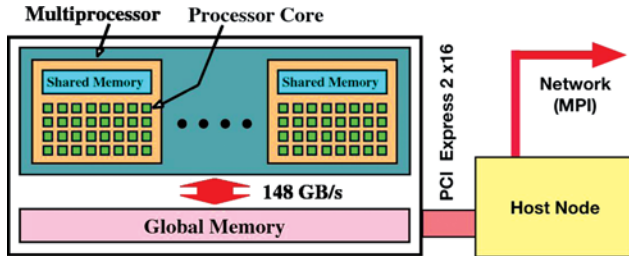


図2 本研究で利用した GPU (NVIDIA M5020) の構成の概念図。

計算スキームについて

2

本稿で紹介するプログラムでは、時間領域の差分法 (FDTD: finite-difference time domain) を用いている^[4]。この差分法では媒質の粒子速度 (v_i ; $i=x, y, z$) と応力 (τ_{ij} ; $i,j=x, y, z$) とを変数として、図3に示す食い違い格子を用いて計算領域を離散化する。このような食い違い格子は地震波計算のほか、電磁界シミュレーションでも広く利用されている^[5]。なお、本稿で紹介するプログラムでは、数値分散性を向上させるために空間差分精度は4次精度とした。時間差分精度は2次精度である。完全弾性体の場合には1単位セルあたりのデータは粒子速度・応力が計9個、物性パラメータが3個 (τ_{ij} と同じ格子点に置く)、合わせて12変数となる。非弾性減衰を含めた場合には変数の個数がこの数倍に増加する。(本稿で紹介する結果は全て弾性体版のものである。)

このスキームでは食い違い格子を用いるため、粒子速度変数と応力変数の時刻が時間刻みの半刻みだけずれることになる。計算上は、粒子速度と応力を片方ずつ更新していくことになる。

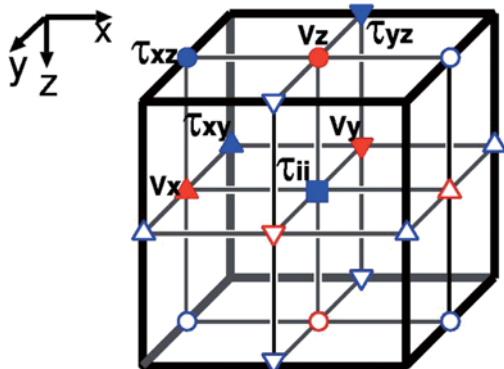


図3 食い違い格子と変数の配置。
図示した格子は単位セルに相当する。

地震波の差分法計算のようなメモリ集中型の問題では、GPU 内部のメモリ (グローバルメモリ) に差分法領域の変数全てを保存し、その変数に対して演算を行うことになる (図4a)。このグローバルメモリと演算ユニット間のメモリ帯域幅は、通常のCPUの帯域幅に比べると非常に大きい。しかしそれでもグローバルメモリから演算ユニットへのデータ転送には400-600サイクルの遅延が発生する。そのため、演算ユニット内部にある高速な共有メモリとレジスタを「キャッシュメモリ」として利用することが性能向上のためには重要である。

先に述べたように地震波計算では単位セルあたりの変数が多く、その一方で共有メモリのサイズは小さいため (M2050の場合 16 kB または 48 kB)、共有メモリに3次元のブロックを確保することは困難である。そこで我々のプログラムでは共有メモリとレジスタとを併用する (図4a)。すなわち横方向への差分操作が必要になる2次元平面のセルのデータは共有メモリに配置し、同時にこの2次元平面上の各セルに一つのスレッドを割りあてる。こうすると図の縦方向に位置するセルのデータについては縦方向への差分のみが発生しスレッド間で共有する必要がないので、これらのデータは各スレッドのレジスタに配置すればよい (図4b)。

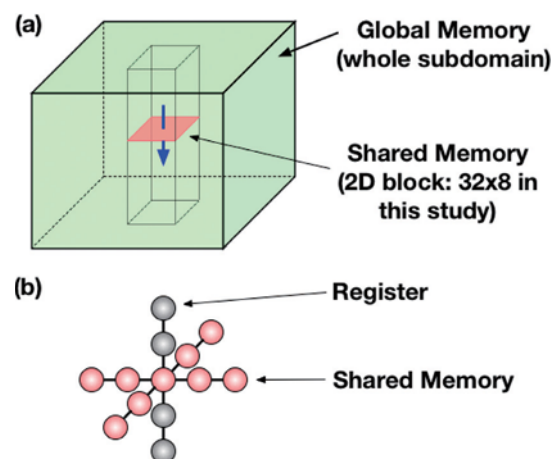


図4 共有メモリとレジスタを併用する方法の概念図。(a) 副領域の変数をすべてGPUのグローバルメモリに収める。さらに、その中の小さな2次元ブロック (赤色) を共有メモリにコピーする。青矢印は計算が進行する方向を示す。(b) 差分法計算に関するデータ配置の概念図。赤色の格子点のデータは共有メモリ、灰色の格子点のデータはレジスタにそれぞれコピーする。

大規模並列 GPU 計算による地震波伝播シミュレーション

そして、縦方向へ計算を進めていく際に共有メモリまたはレジスタに一度読み込んだデータを、一種のパイプラインのようにレジスタと共有メモリとの間で交換することによって、グローバルメモリへのアクセスを低減することができる。このようなレジスタと共有メモリの利用法は地震波シミュレーション^[1,6-9]や気象シミュレーション^[10]で利用されて効果をもたらしている。

この最適化のほかに、物性パラメータに関して参照テーブル方式を採用することや、単位セル中心以外の格子点での物性パラメータをセル中心の物性値を用いて毎回計算すること^[11]などの方法によって、グローバルメモリへのアクセスを減らすようにしている。

このようにして作成したプログラムの性能を図5に示す。この性能は、次に述べるマルチGPU計算の機能を組み込んだプログラムを用いて、単一GPUで測定したものである。比較のために、TSUBAME-2.0のホストノードCPUを用いて袖領域処理やMPI機能を含まない差分法プログラムの性能を測定した。参考的な比較となるが、これらのプログラムに関してはGPU 1基はホストノードのおよそ3倍の性能を持つ。

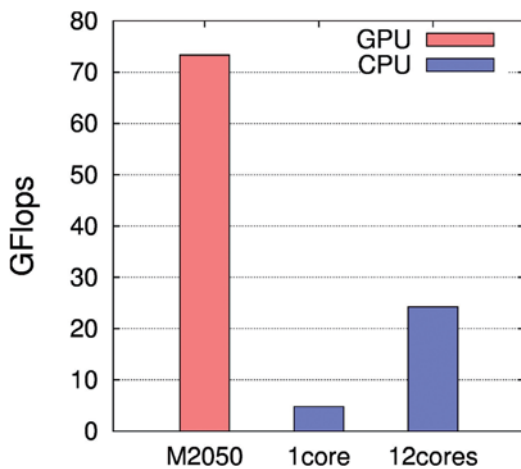


図5 GPUとCPUでの地震波計算プログラムの性能。GPUの性能は領域サイズ $320 \times 320 \times 320$ の場合について単一GPUを用いて測定した。CPUでは、袖領域処理を含まない差分法プログラムをFortranとOpenMPを用いて作成し、PGI Fortranコンパイラ(-fastsseオプションを利用)でコンパイルした。領域サイズは $320 \times 320 \times 320$ (1コアの場合)、および $320 \times 320 \times 3840$ (12コアの場合)とした。

袖領域転送の効率化

GPUのグローバルメモリのサイズは大きくない(M2050の場合では3GB)。そのため大規模計算では、計算領域を多数の副領域に分割して複数のGPUに副領域を割り当てることが不可欠となる。本研究では大規模計算で標準的に利用される3次元領域分割を用いる(図6)。副領域間の通信にはMPIを用いる。

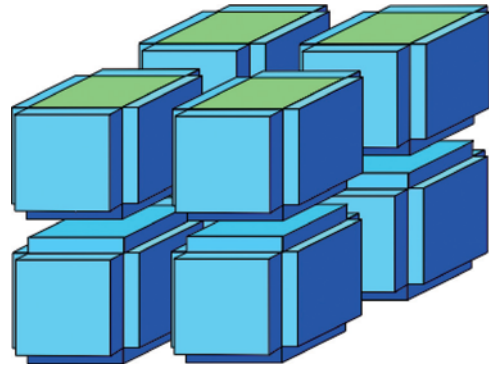


図6 3次元領域分割の概念図。青い部分が袖領域を示す。

3次元領域分割では隣接する副領域との間で「袖領域」(ghost zone)を交換する必要がある。GPU計算では、この袖領域のメモリ並びに関して問題が発生する。これは、現状ではGPU間で直接データを交換することはできないことと関係している。図2に示すように、データを交換するためにはまずホスト計算機のメモリにGPUからデータを転送し、そのデータを別のホストに送るという段階を経なければならない。

袖領域のメモリを割り当てる方法としては、図7(a)のように内部領域の配列を延長する方法がしばしば採用される。しかし、袖領域内部ではメモリ並びは不連続となるため、袖領域のデータをホスト計算機のメモリに転送する際にはcudaMemcpyなどのデータ転送関数を細切れのデータごとに繰り返し呼び出すことになる。そのため袖領域全体を転送するには非常に長い時間がかかることになり、この方法はGPU計算では実用にならない。そこで、本研究では図7(b)のように内部領域とは独立の連続なメモリを袖領域に割り当てる。こうすると、一度のデータ転送関数呼び出しで袖領域全体をGPUからホストに転送することが可能となり、データ転送時間を(a)の場合よりも大幅に短くすることができる。ただしGPU内部では、袖領域メモリのデータを共有メモリブロックに転送するための複雑なマッピングが追加される。

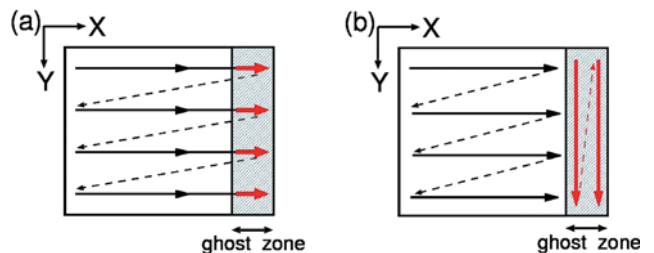


図7 袖領域(ghost zone)のメモリ並びの概念図[1]。(a)内部領域の配列の延長として割り当てた場合。袖領域内部では数多くの小さなデータが不連続に並んだメモリ並びになる。(b)内部領域とは独立の連続なメモリ領域を割り当てた場合。

計算と通信のオーバーラップ

食い違い格子では粒子速度成分と応力成分を交互に時間積分していく。そのため、それぞれの積分演算を行うGPUカーネルも別々のものになる。さらに我々のプログラムでは、計算に要する全体の時間を短縮するために、内部領域についての積分と袖領域通信とをオーバーラップさせている。そのため、側面ブロックのみを処理するカーネルと内部ブロックのみを処理するカーネルの2つのカーネルを作成して利用している。計算と通信のオーバーラップのためには、GPUとホスト間のメモリ転送においてCUDAの非同期通信関数(cudaMemcpyAsync)を用いる必要がある。また、各MPIプロセス間のデータ転送にはMPIのnon-blocking関数(MPI_Isend, MPI_Irecv)を用いた。

このようにして作成したマルチGPUプログラムについて、TSUBAME-2.0で全領域サイズを変えて計算を実行したときの、GPU数に対する性能を図8に示す。この例では副領域サイズを固定しているので、グラフは弱スケーリング性能を示すことになる。図からわかるように、800 GPUの場合まで理想的なスケーリングに近い(GPU数にほぼ比例する)実効性能が得られた。絶対値としても、800 GPUの場合に約50 TFlops、1200 GPUの場合に約61 TFlopsという、非常に高い実効性能を達成できた(いずれも単精度性能)^[3]。

なお、1200 GPUのときには理想的な場合よりも少し性能が低下しているように見える。800 GPUの場合の性能は理想的な数値の約85%、1200 GPUの場合には約69%である。この計測では800GPUまでは2 GPU/node、1200 GPUのときは3 GPU/nodeの条件で計算した。そのため、後者の場合にはノード間通信が増加してスケーラビリティがやや低下したと考えられる。この点は今後改良を進める必要がある。

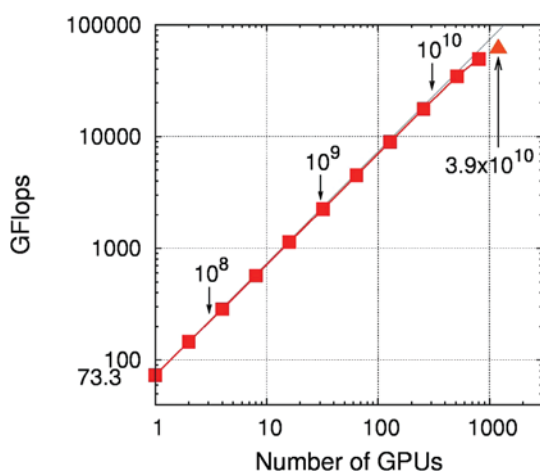


図8
TSUBAME-2.0での実効性能。副領域サイズを320 × 320 × 320に固定して、全領域サイズを変えて(つまり分割数=GPU数を変えて)弱スケーリング性能を測定したもの。いくつかの点での単位セル数も矢印と数値のペアで示す。

ここで紹介する計算例では、全世界観測網の広帯域地震波形データを用いて推定した震源モデル^[12]を用いる。遠方の観測点のデータを用いているため分解能に制限があり、やや長波長側の震源モデルになっている。この震源モデルは断層面上におよそ20kmおきに配置した格子点(23個×11個)に割り当てた点震源から構成される。東日本地域の3次元不均質速度構造モデルは、複数の既存構造モデル^[13-16]をコンパイルして作成した。差分法計算のパラメータは次の通りである: 格子間隔0.15 km、時間間隔0.005 s、格子サイズ6400 × 3200 × 1600、時間ステップ数44000、周波数帯域の上限0.61 Hz。この計算ではTSUBAME-2.0の1000 GPUを利用した。これはTSUBAME-2.0の全GPUの約24%にあたる。なお、計算時間は5768 s、演算性能は33.2 TFlopsである。図8に示した例よりも性能が低下したが、これは計算結果のファイル出力に伴うオーバーヘッドが大きいためと考えられる。この点も今後の改良が必要な部分である。

このようにして計算した地震波動場を可視化したものを図9と図10に示す^[2]。断層各部からの波動場が、地形や構造による散乱も加わって非常に複雑に干渉しながら伝播していく様子がわかる。また130秒後から150秒後にかけて、上向き速度と下向き速度の領域が顕著なペアになって福島県海岸線付近に現れ、震央付近から到来する波動のパターンを掻き消すような様子になっていることもわかる(図10、黄色の円形枠)。このペアの領域をもたらした波源域は福島県海岸線付近の深さ約60kmにあるやや大きなすべり領域と考えられる。このような領域は陸上観測点の強震動記録からも推定されており、福島県海岸線付近を始め数か所のSMGA (strong-motion-generation-area)が推定されている(例えば^[17])。このような領域を含めた震源モデルの全体像について、研究を続ける必要がある。

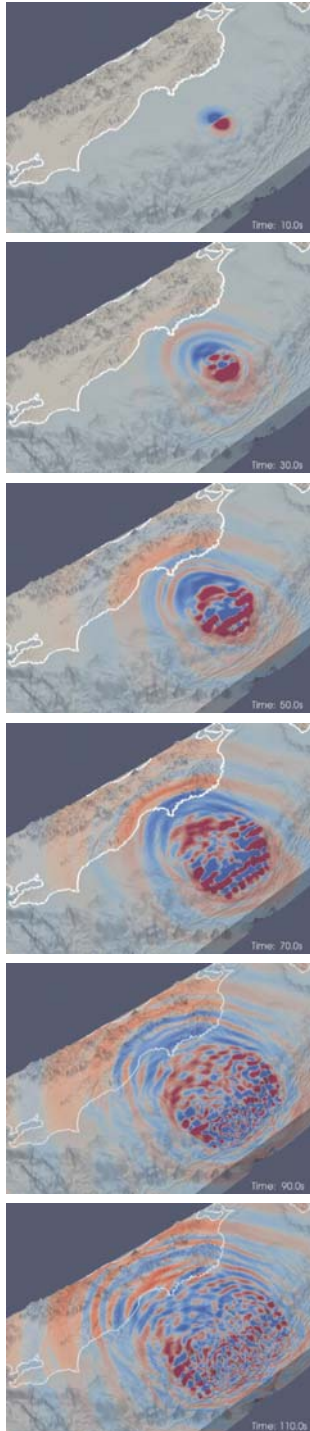


図9 シミュレーションによる地震波伝播のスナップショット。地表および海底の固体側表面での鉛直地動速度を可視化したもの。赤と青はそれぞれ上方向、下方向への動きを示す。上から下にかけて、破壊開始時刻から10秒後、30秒後、50秒後、70秒後、90秒後、110秒後のスナップショットを示す。海水中の音波伝播は計算で考慮されている。

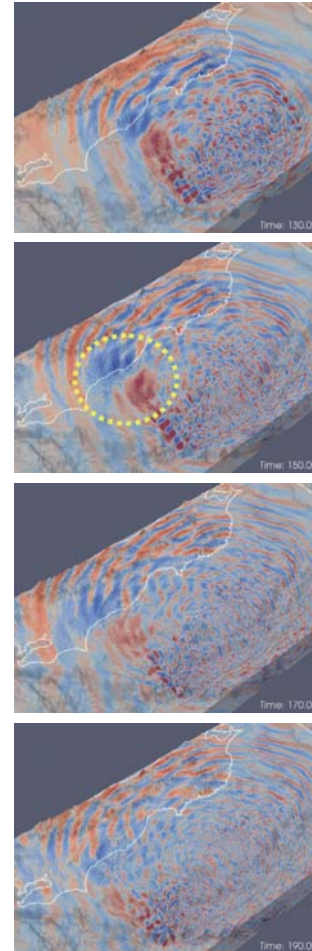


図10 破壊開始点から130秒後、150秒後、170秒後、190秒後のスナップショット。

まとめ

5

地震波伝播シミュレーション、特に東北地方太平洋沖地震のような巨大地震のシミュレーションを行うために、マルチGPUを用いた並列差分法計算手法を開発した。今回、TSUBAME-2.0の1000 GPUを使うことによって、330億個の単位セルからなる領域について上限周波数が0.61 Hzであるようなシミュレーションを実用的な時間内で実行することができた。計算された地震波動場は、観測データの（やや長周期側での）特徴を定性的に再現している。このような計算が可能になったことから、今後は、日本列島の各地で観測された地震波波形データを用いた震源モデル解析を行うための『グリーン関数波形』をTSUBAME-2.0によって生成できる。そのようにして計算したグリーン関数波形を用いて震源モデルの改良と推定を進める必要がある。

謝 辞

構造モデルデータを提供して下さった各機関の方々に感謝申し上げます。また、TSUBAME-2.0における大規模計算（グランドチャレンジ）の機会をご提供下さった学術国際情報センターの方々に感謝申し上げます。この研究の一部に科学研究費補助金(23310122)を使用しました。

参考文献

- [1] Okamoto, T., Takenaka, H., Nakamura, T. and Aoki, T. "Accelerating large-scale simulation of seismic wave propagation by multi-GPUs and three-dimensional domain decomposition", *Earth, Planets and Space*, vol. 62, no. 12, pp. 939-942 (2010).
- [2] Okamoto, T., Takenaka, H., Nakamura, T., and Aoki, T. "Large-scale simulation of seismic-wave propagation of the 2011 Tohoku-Oki M9 earthquake", *Proceedings of the International Symposium on Engineering Lessons Learned from the 2011 Great East Japan Earthquake*, pp. 349-360 (2012).
- [3] Okamoto, T., Takenaka, H., Nakamura, T. and Aoki, T. "GPU-accelerated simulation of seismic wave propagation", in *GPU Solutions to Multi-scale Problems in Science and Engineering*, Yuen, D., Wang, J., Johnsson, L., Chi, C.-H., Shi, Y. (Eds.), 250 pp., Springer, in press.
- [4] Graves, R. W. "Simulating seismic wave propagation in 3D elastic media using staggered-grid finite differences", *Bull. Seism. Soc. Am.*, vol. 86, no. 4, pp. 1091-1106 (1996).
- [5] Yee, K. "Numerical solution of initial boundary value problems involving maxwell's equations in isotropic media", *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 14, no. 3, pp. 302-307 (1966).
- [6] Abdelkhalek, R., Calandra, H., Coulaud, O., Roman, J. and Latu, G. "Fast seismic modeling and reverse time migration on a GPU cluster", *International Conference on High Performance Computing & Simulation*, pp. 36-43 (2009).
- [7] Micikevicius, P. "3D finite-difference computation on GPUs using CUDA", *GPGPU-2: Proc. 2nd Workshop on General Purpose Processing on Graphics Processing Units*, pp. 79-84, Washington DC, USA (2009).
- [8] Michéa, D. and Komatitsch, D. "Accelerating a three-dimensional finite-difference wave propagation code using GPU graphics cards", *Geophys. J. Int.*, doi: 10.1111/j.1365-246X.2010.04616.x (2010).
- [9] 岡元太郎, 竹中博士, 中村武史. "GPUによる地震波伝播シミュレーション", *先進的計算基盤システムシンポジウム(SACSIS2010) 論文集*, pp. 141-142 (2010).
- [10] 下川辺隆史・青木尊之, "次世代気象モデルのフルGPU計算 - TSUBAME2.0 の3990 GPUで145 TFlops - ", *TSUBAME e-Science Journal*, vol. 2, pp. 9-13 (2010).
- [11] Takenaka, H., Nakamura, T., Okamoto, T. and Kaneda, Y. "A unified approach implementing land and ocean-bottom topographies in the staggered-grid finite-difference method for seismic wave modeling", *Proc. 9th SEGJ Int. Symp.*, CD-ROM Paper No.37 (2009).
- [12] Okamoto, T., Takenaka, H., Hara, T., Nakamura, T. and Aoki, T. "Rupture Process And Waveform Modeling of The 2011 Tohoku-Oki, Magnitude-9 Earthquake", *American Geophysical Union, Fall Meeting*, U51B-0038, San Francisco, USA (2011).
- [13] Kisimoto, K. "Combined bathymetric and topographic mesh data: Japan250m.grd", *Geological Survey of Japan, Open-file Report*, No. 353 (1999).
- [14] Fujiwara, H., Kawai, S., Aoi, S., Morikawa, N., Senna, S., Kudo, N., Ooi, M., Hao, K. X.-S., Hayakawa, Y., Toyama, N., Matsuyama, H., Iwamoto, K., Suzuki, H. and Liu, Y. "A study on subsurface structure model for deep sedimentary layers of Japan for strong-motion evaluation", *Technical Note of the National Research Institute for Earth Science and Disaster Prevention*, No.337 (2009).
- [15] Baba, T., Ito, A., Kaneda, Y., Hayakawa, T. and Furumura, T. "3-D seismic wave velocity structures in the Nankai and Japan Trench subduction zones derived from marine seismic surveys", *Abstr. Japan Geoscience Union Meet.*, S111-006, Makuhari, Japan (2006).
- [16] Nakamura, T., Okamoto, T., Sugioka, H., Ishihara, Y., Ito, A., Obana, K., Kodaira, S., Suetsugu, D., Kinoshita, M., Fukao, Y. and Kaneda, Y. "3D FDM simulation for very-low-frequency earthquakes off Kii Peninsula", *Abstr. Seism. Soc. Japan*, P1-06, Hiroshima, Japan (2010).
- [17] Kurahashi, S. and Irikura, K. "Source model for generating strong ground motions during the 2011 off the Pacific coast of Tohoku earthquake", *Earth Planets Space*, Vol. 63, 571-576 (2011).