

気象・気候アプリケーションソフトにおける緩やかな変革、 また異なる計算手法との緩やかな融合に向けて

八代 尚 (Hisashi YASHIRO)

国立環境研究所 地球システム領域

PCクラスタワークショップ in 柏 2021

2021/06/18

自己紹介

- 八代 尚 (Hisashi Yashiro)

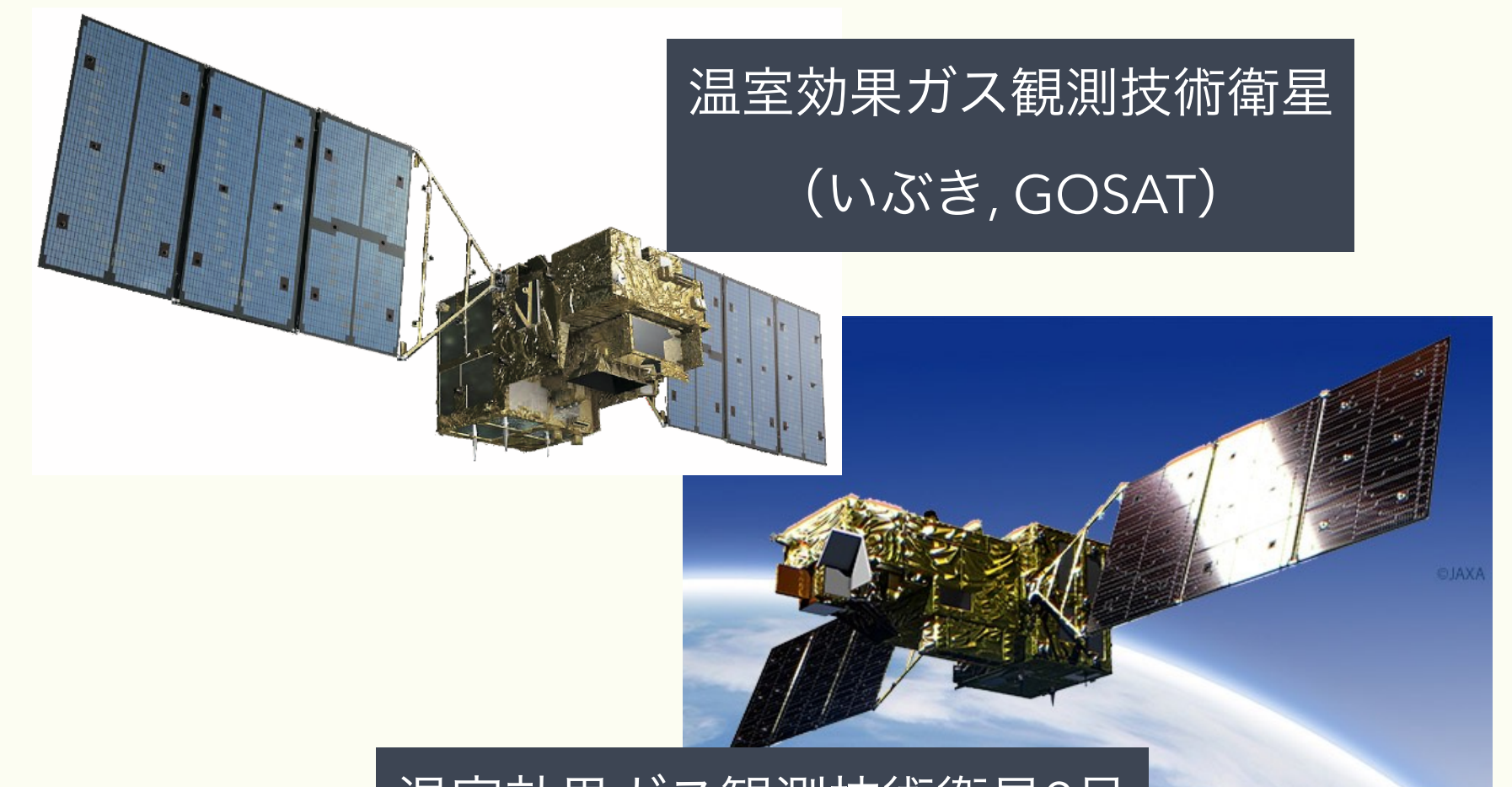
- 1978年生：青森県弘前市
- 専門：大気化学、高性能計算、大気科学
- 海洋研究開発機構→理研R-CCS(AICS)→国立環境研究所
- 温室効果ガス観測衛星「GOSAT」プロジェクトが現在の本務
- 全球非静力大気モデルNICAMの開発番頭：富岳での超高解像度・大アンサンブルデータ同化実験で昨年のGB Finalistに



スバルバル島ニーオルスン基地(北緯79度)



JAXA三陸大気球観測所（岩手県大船渡市）



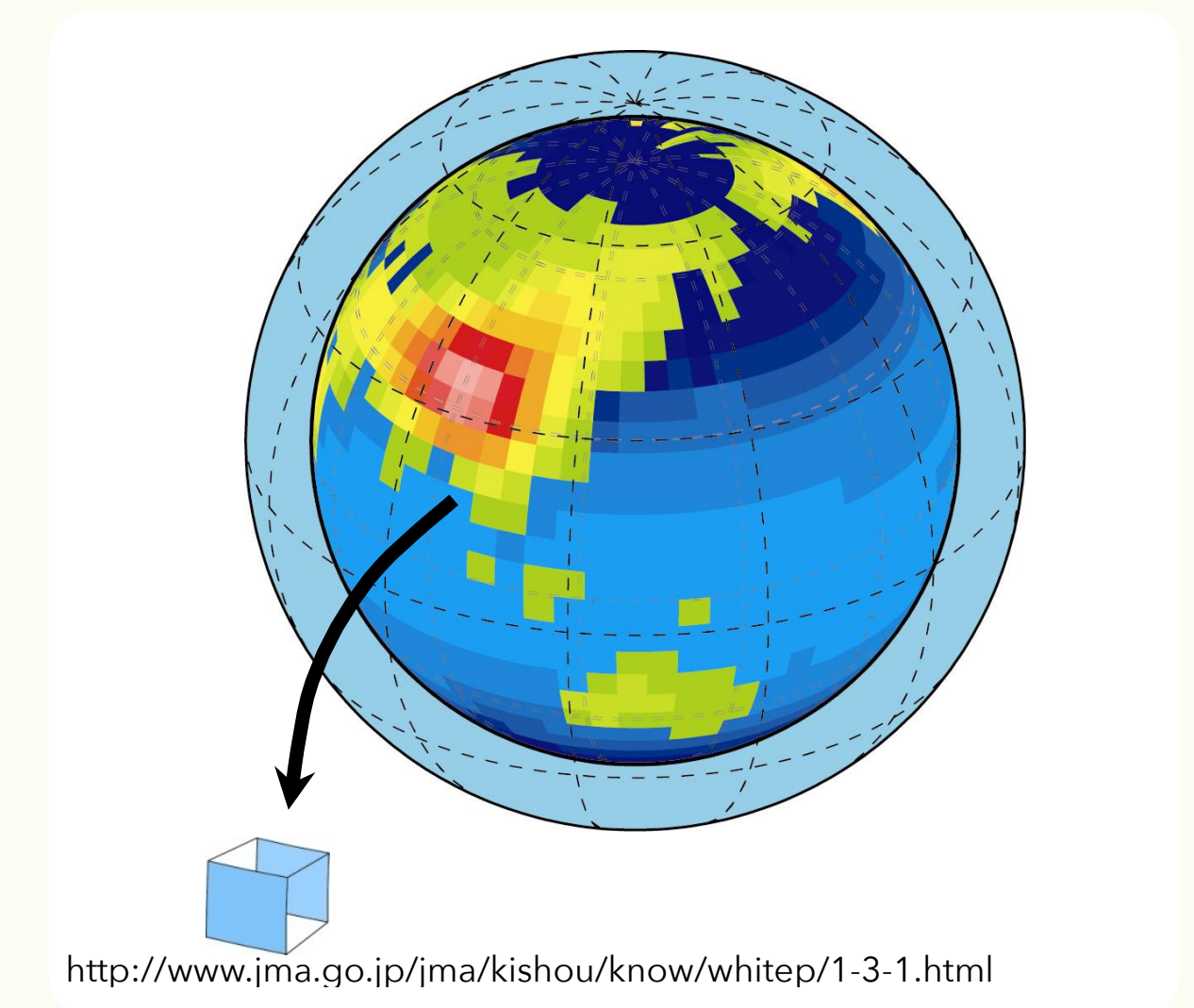
温室効果ガス観測技術衛星
(いぶき, GOSAT)

温室効果ガス観測技術衛星2号
(いぶき2号, GOSAT-2)

気象・気候アプリケーションとは？

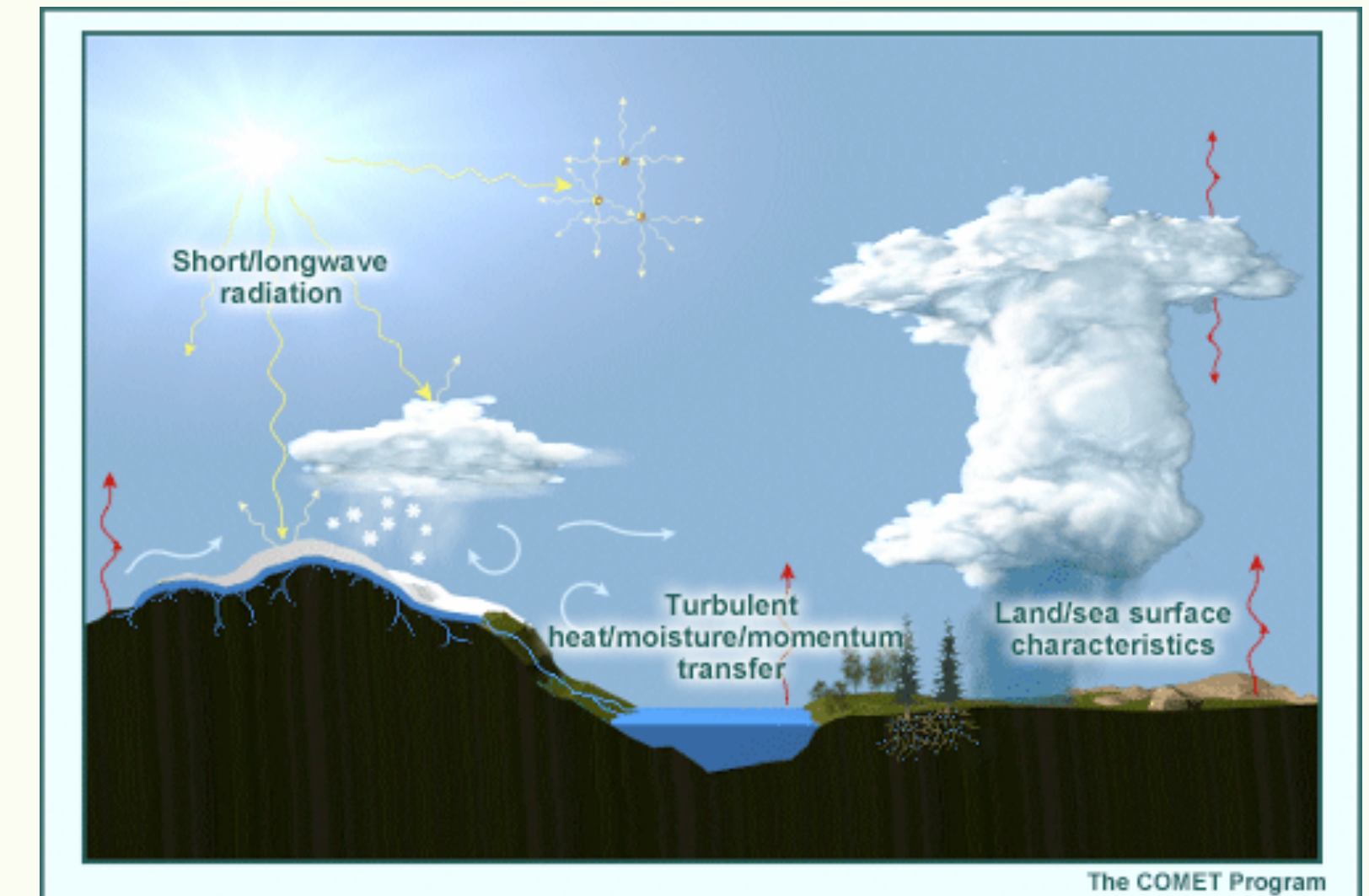
気象シミュレーション：数時間～数ヶ月

- 大気の状態を予測するのが主
- 初期値問題、データ同化の利用
- 解像度重視、リアルタイム性重視



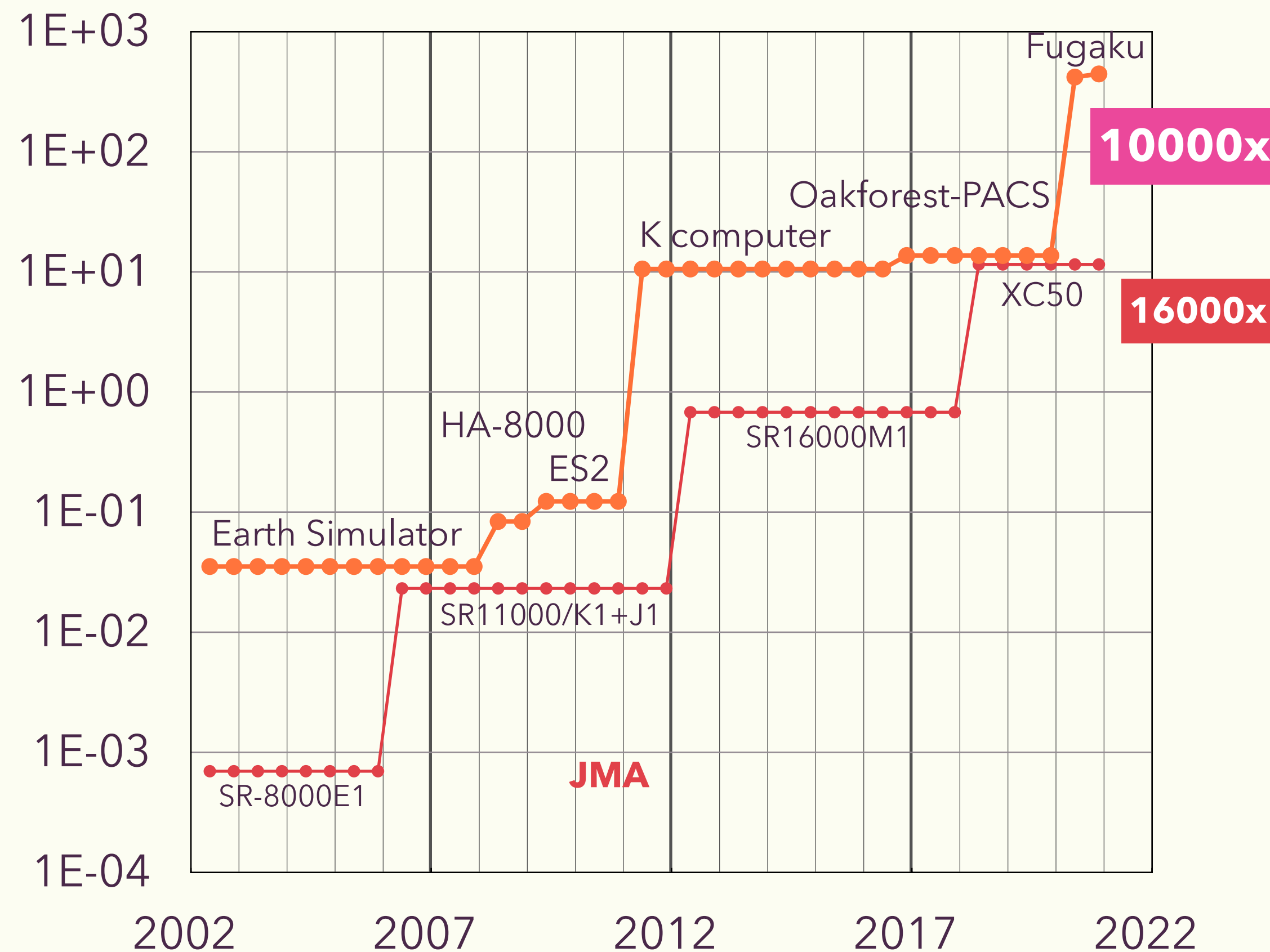
気候シミュレーション：数年～数百年

- 大気＋海洋＋海氷＋陸上生態系を含めた再現と予測
- 境界値問題
- 計算速度重視

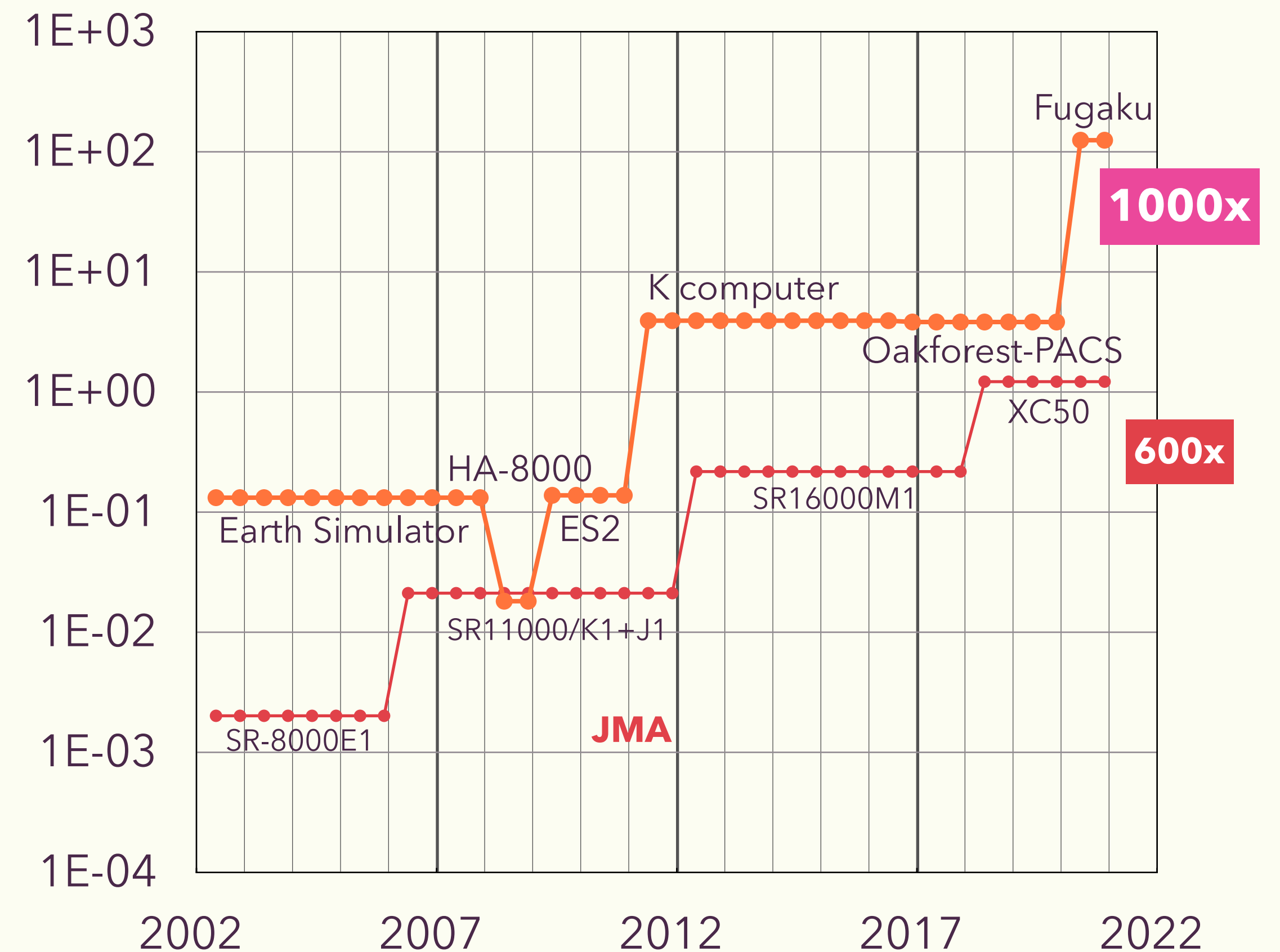


日本の気象・気候研究が使ってきたスパコンの変遷

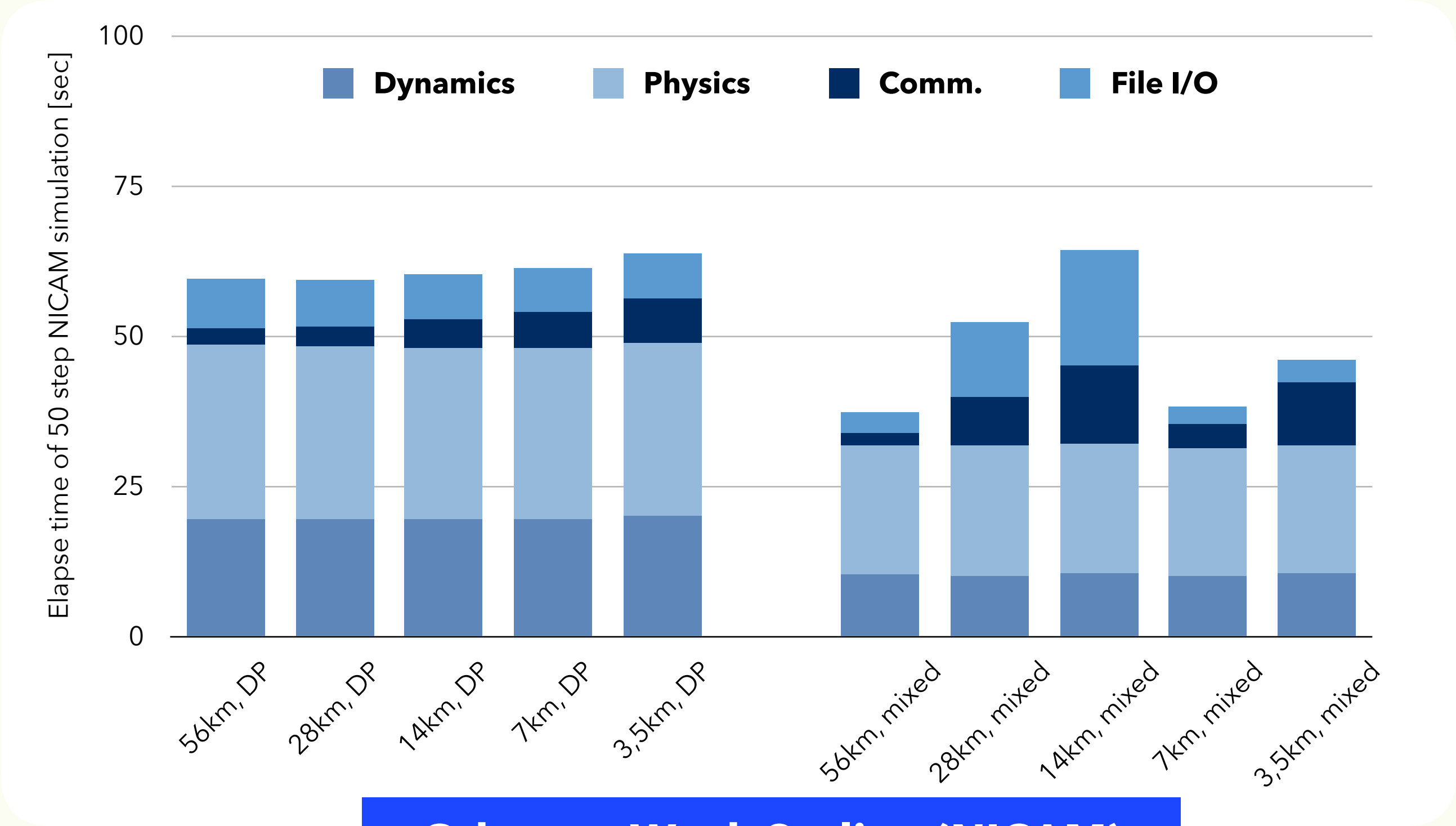
LINPACK Performance [PFLOPS]



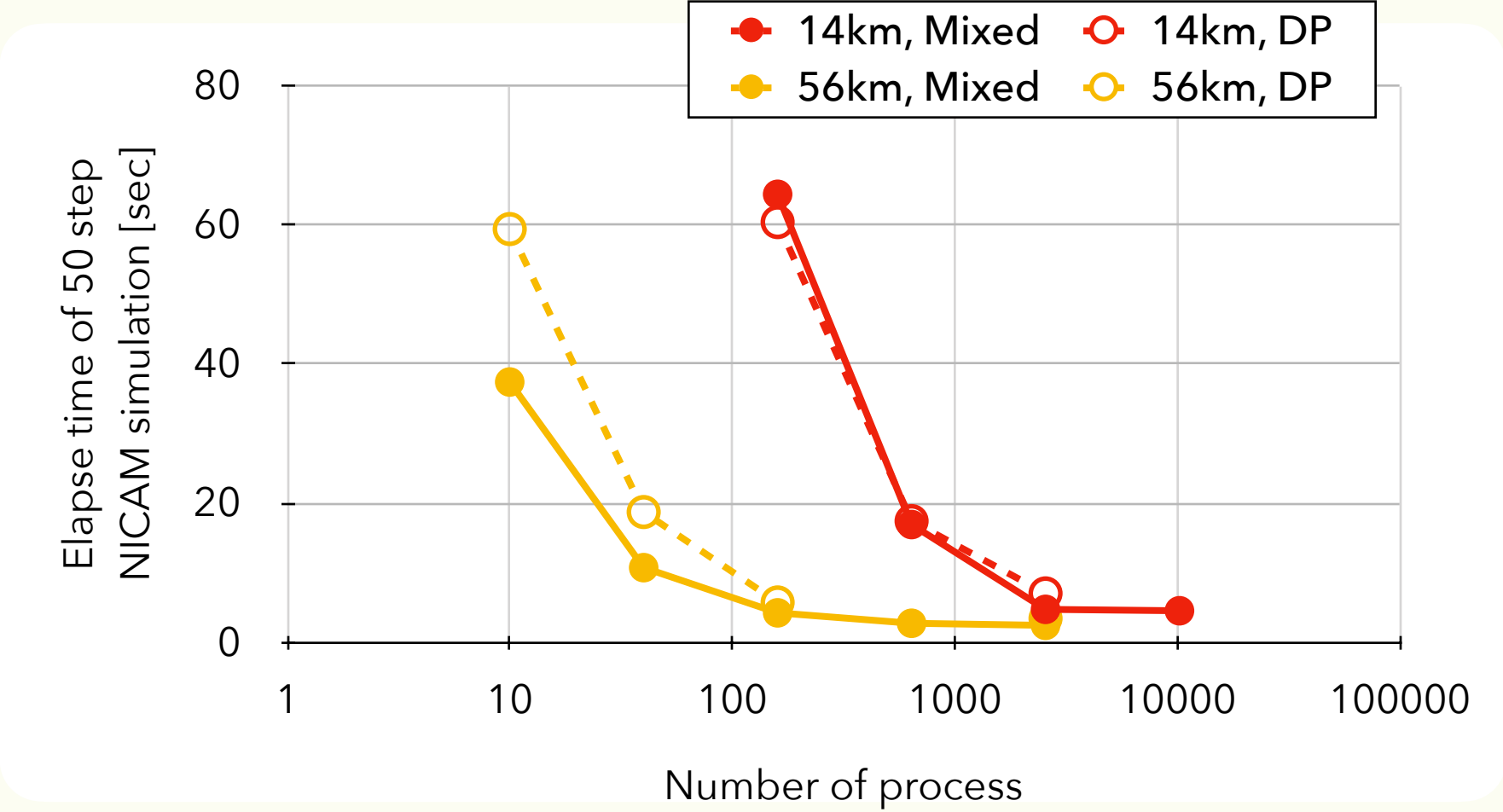
Total Memory Throughput [PB/s]



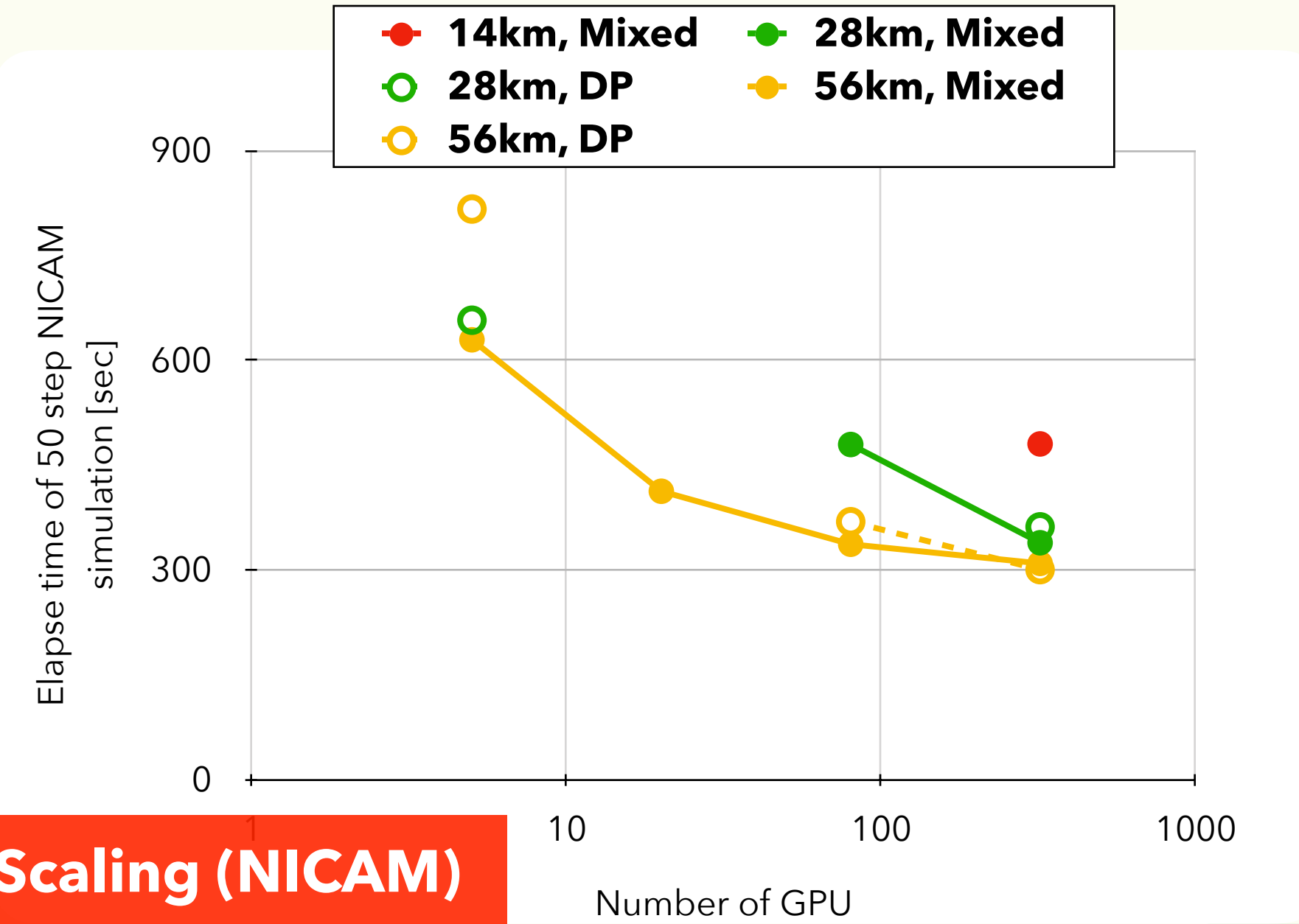
Wisteria/BDEC-01 ベンチマーク



Odyssey, Weak Scaling (NICAM)



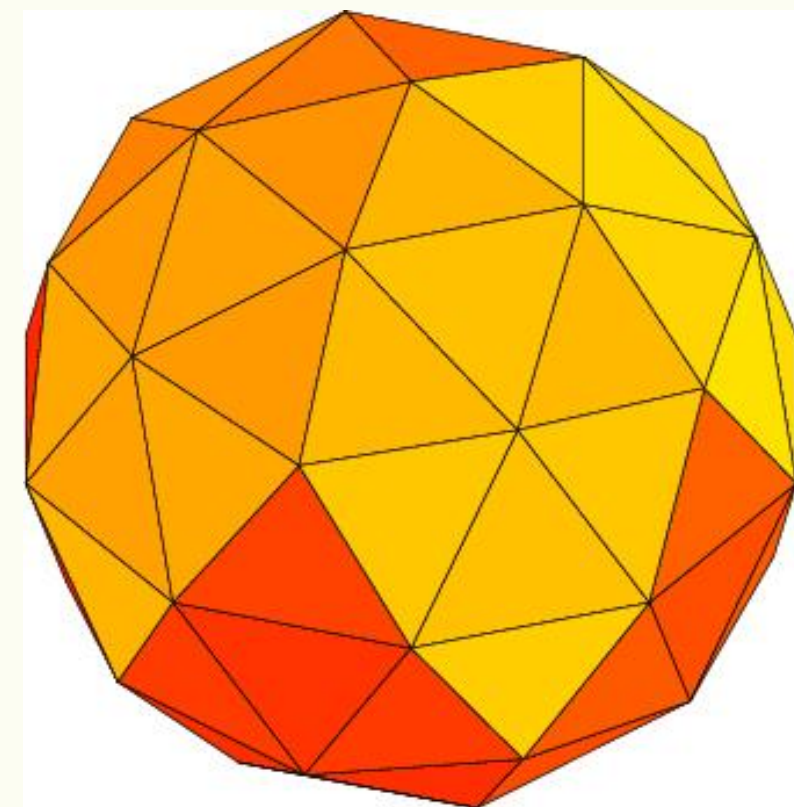
Odyssey, Strong Scaling (NICAM)



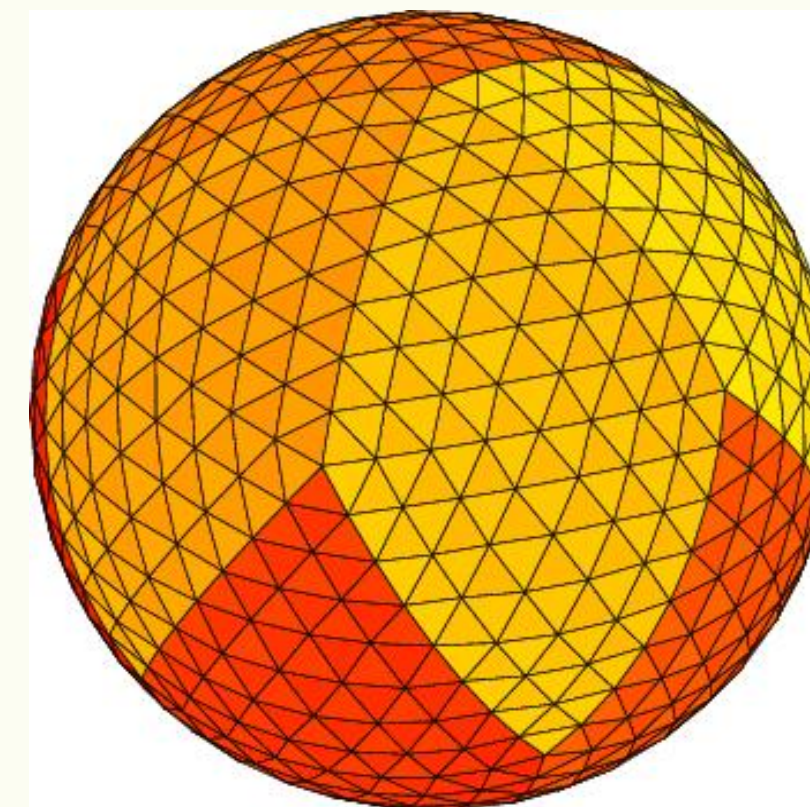
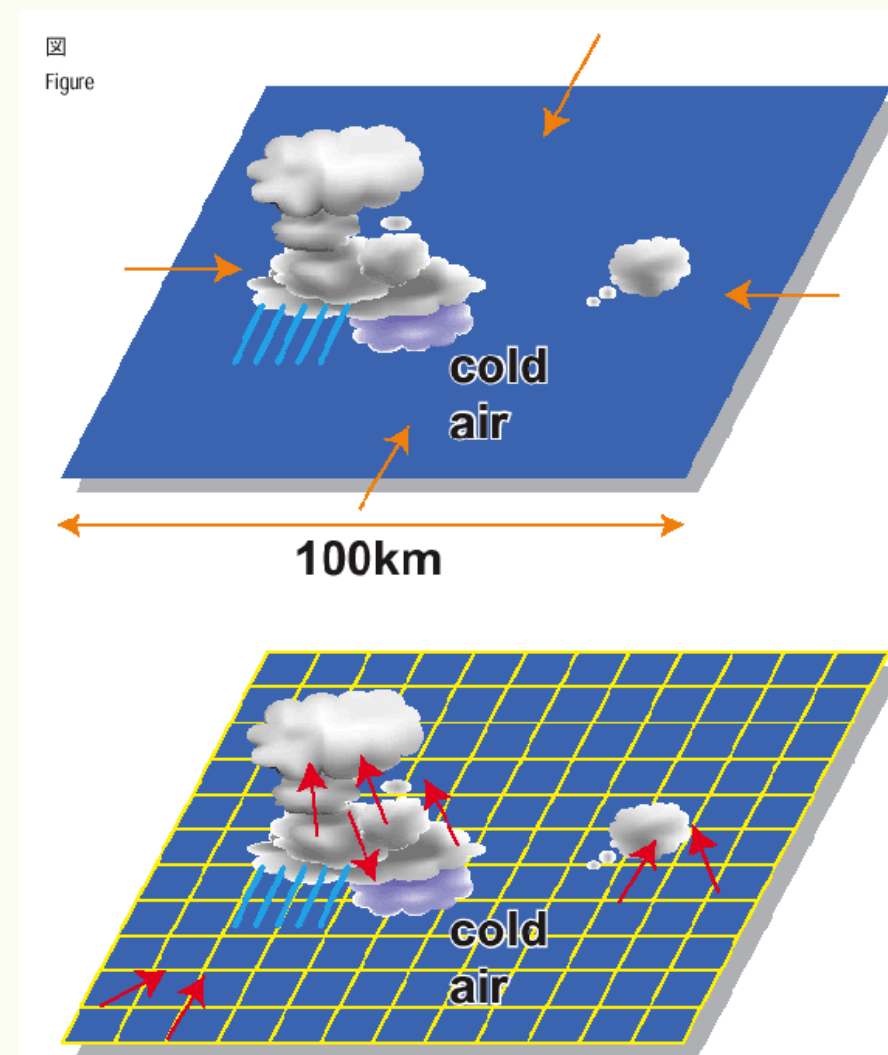
Aquarious, Strong Scaling (NICAM)

計算リソースはまだ足りない

- ・ 積雲を陽に解像できない
- ・ 雲が凝結できる湿度に到達しないので、雲量を診断



Low resolution



High resolution

- ・ より精緻な雲微物理
- ・ この解像度でもLESにはならず、境界層乱流はクロージャーモデル

なぜ高い空間解像度を欲するのか？

- ・ 気象シミュレーションは第一原理計算ではない
 - ・ 現象と計算領域の大きさがあまりにかけ離れている
 - ・ ある空間解像度の仮定をもった粗視化・簡略化モデルがある：不確実性の温床

気象・気候アプリは如何に最新スパコンに追隨してきたか

： 全球非静力大気モデルNICAMの場合（１）

開発当時(2000年)の設計コンセプト

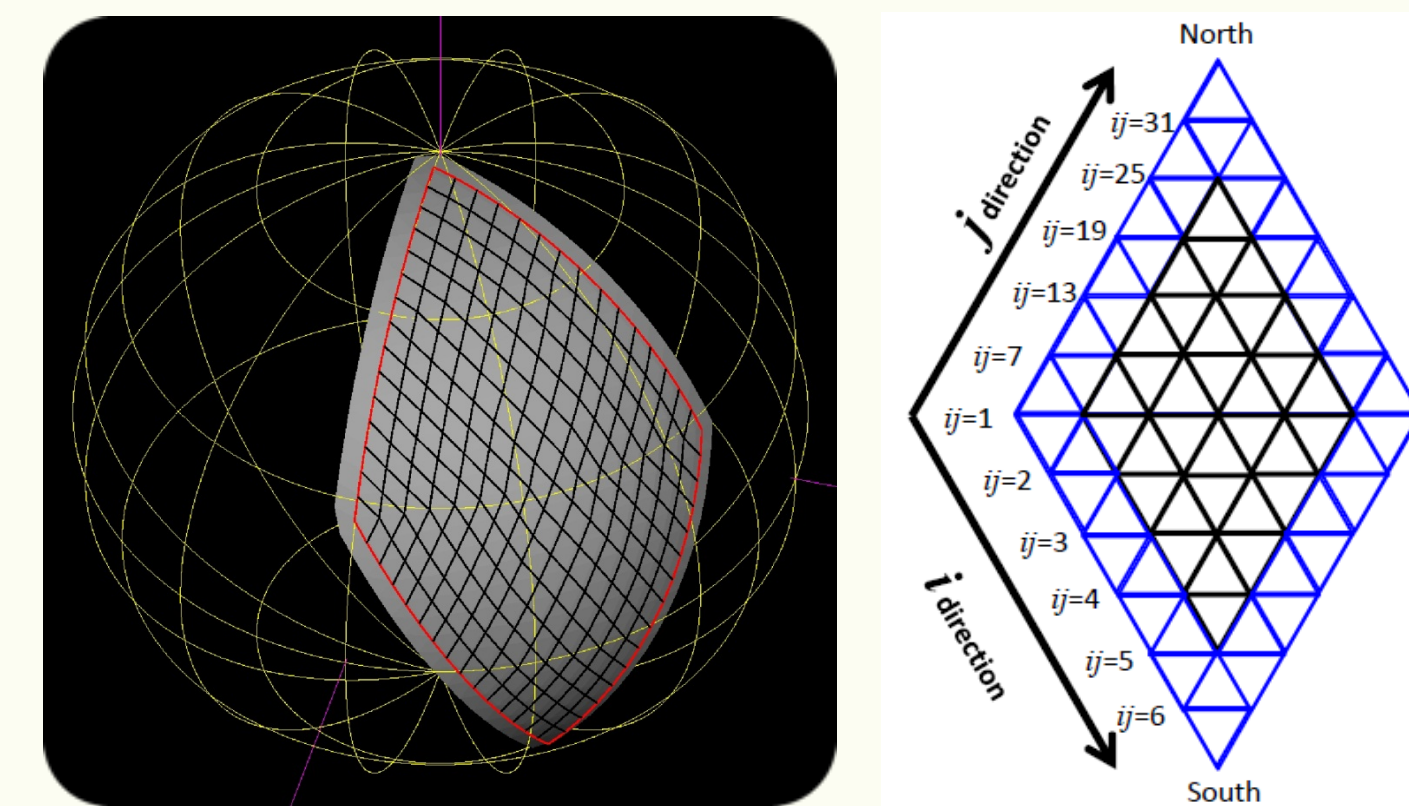
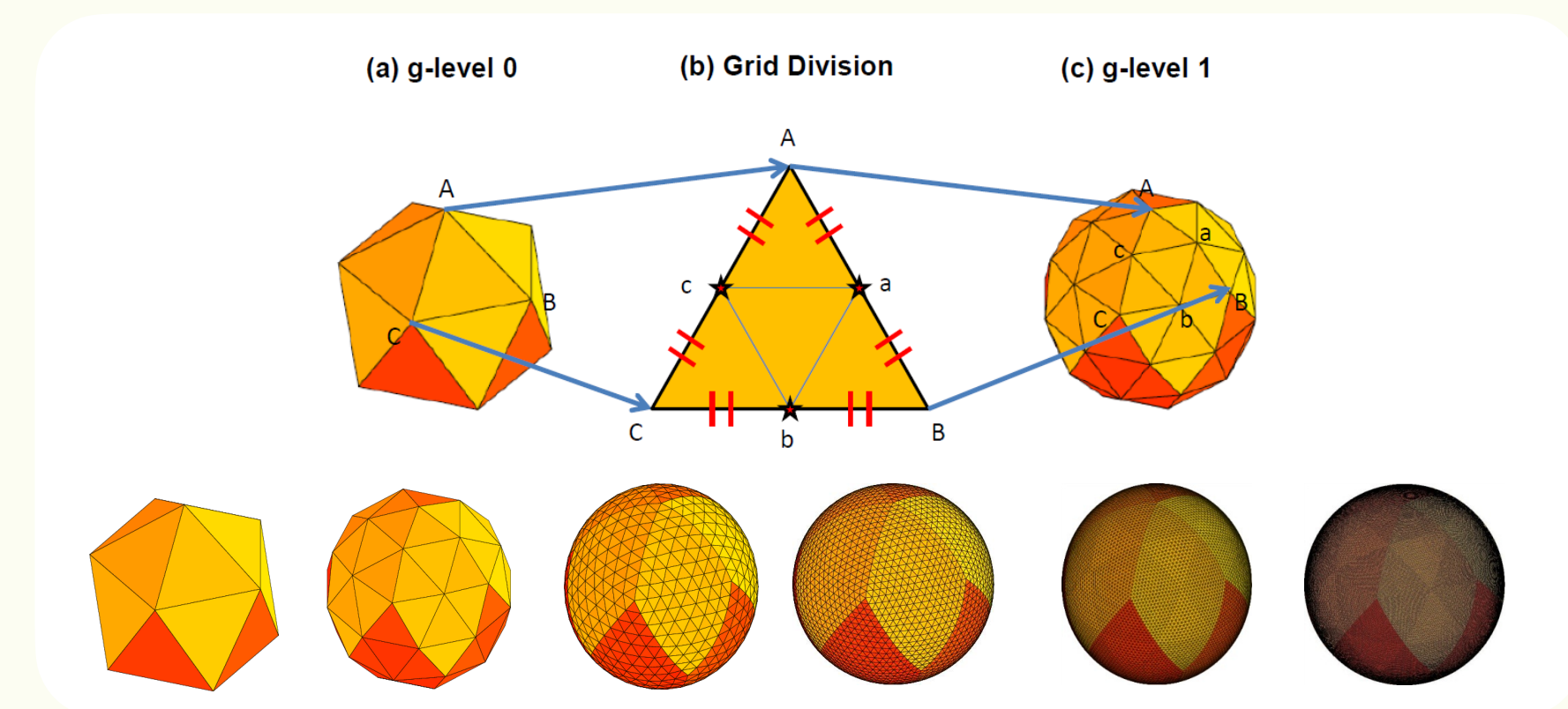
- 地球シミュレータで性能を出すための設計
 - ： 数百、数千プロセス並列に耐える、長いベクトル長を確保する

ESから京コンピュータへ

- 変えたこと：メモリ性能に頼ったコーディング、スレッド並列の利用
- 変えなかったこと：データレイアウト（SoA）
- 後回しにしたこと：OpenMPの適用（自動並列化の積極的利用）

京から富岳へ

- 変えたこと：混合精度の積極的利用、（OpenACCの利用）
- 変えなかったこと：データレイアウト（SoA）
- 後回しにしたこと：DSLによるFortranコードの置き換え



気象・気候アプリは如何に最新スパコンに追隨してきたか ： 全球非静力大気モデルNICAMの場合（2）

巨大レガシーソフトウェア開発にとって重要なこと

- いちから作り直さない
- 大胆な変更を拒絶しない
- 小さな変更を積み重ねていく：結果の後方互換が大事

プロジェクト推進にとって重要なこと

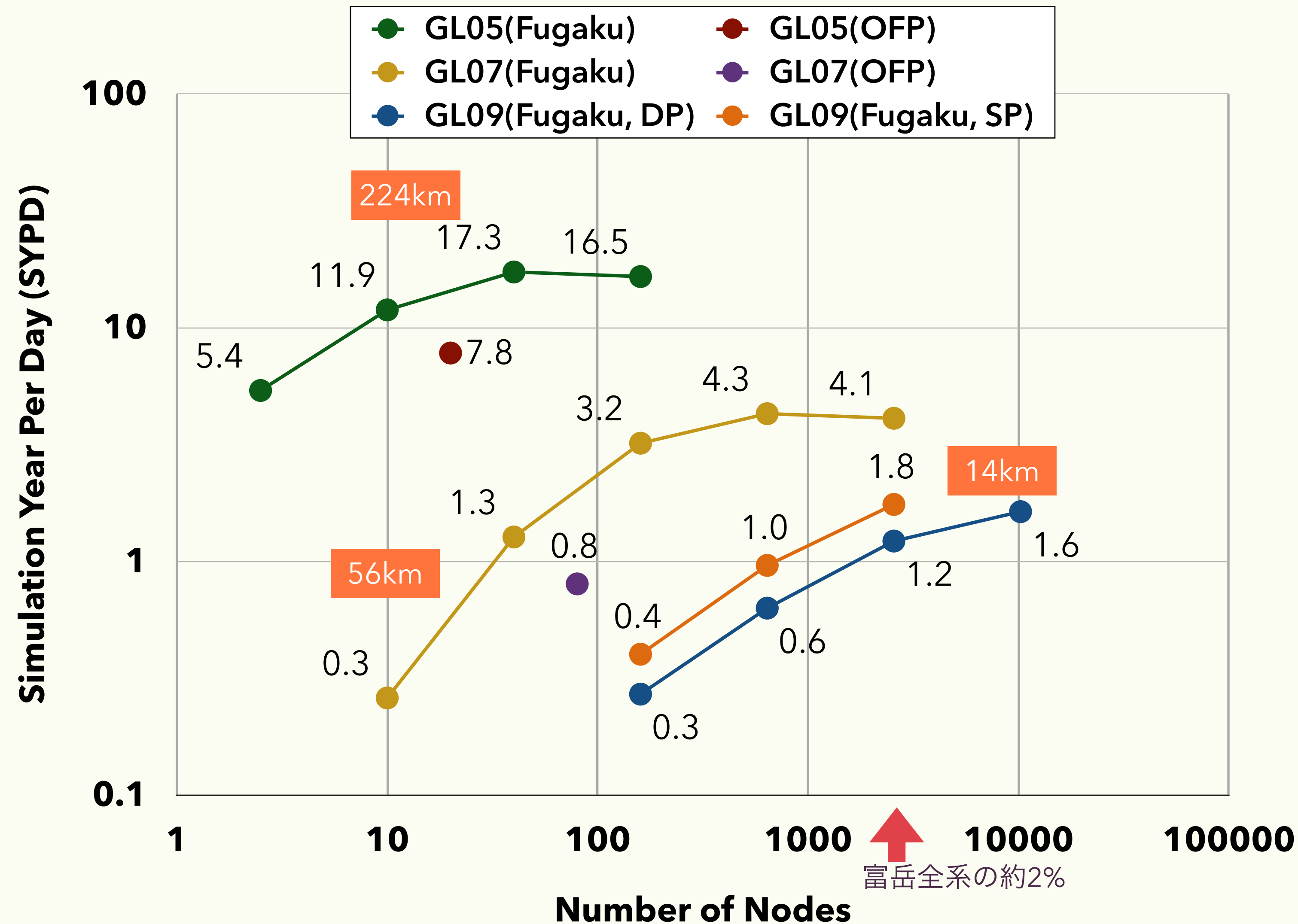
- 出来ない理由が「まだ計算リソースが足りないから」になるように準備する
- 計算リソースを無駄遣いして研究を先に進めることを恐れない
- 計算リソースを効率よく使えていないことを定量的に把握する：出来てないアプリが多すぎ

次の10年をどうするか？

NGACI (Next-Generation Advanced Computing Infrastructure) 白書

- 次期フラッグシップマシンに対する展望
- メモリ性能 (4x) とメモリ容量 (2x) に関しては気象・気候アプリにとって絶望的な内容
 - 不揮発性メモリの積極的な利用は不可欠だろう
- 電力性能の向上のために、HWは今以上にアルゴリズムの並列度を要求してくる
 - が、アプリ側はもう限界が近づいている
- 異なるアーキテクチャにどう追随していくか？
 - DSLの必要性
 - が、あくまでポータビリティのためであり、性能限界を越えられるわけではない

気候シミュレーションの直面する問題



- 解像度を2倍にすると問題サイズは8倍（空間方向4倍、時間方向2倍）
- 利用プロセス数を8倍利用して高速化しようとするストロングスケール問題になる
- 気候シミュレーションの高解像度化に待ち受ける壁は高い

次の10年でのアプリ性能100倍に向けて

Approximate Computingの活用

- HW性能が見込めず、アルゴリズム並列化では限界があるのなら、計算精度を落としてでも
「データを移動させない」「計算しない」
- 混合精度の積極的な利用は富岳時代の取り組み
- 従来の物理モデルと機械学習による「代理モデル」を使い分ける
→ Yet Another "Approximate Computing"

(物理モデル屋さんからしたら機械学習は心理的にApproximateな手法)

カップラーを用いたフレキシブルな開発

カップラーとは？

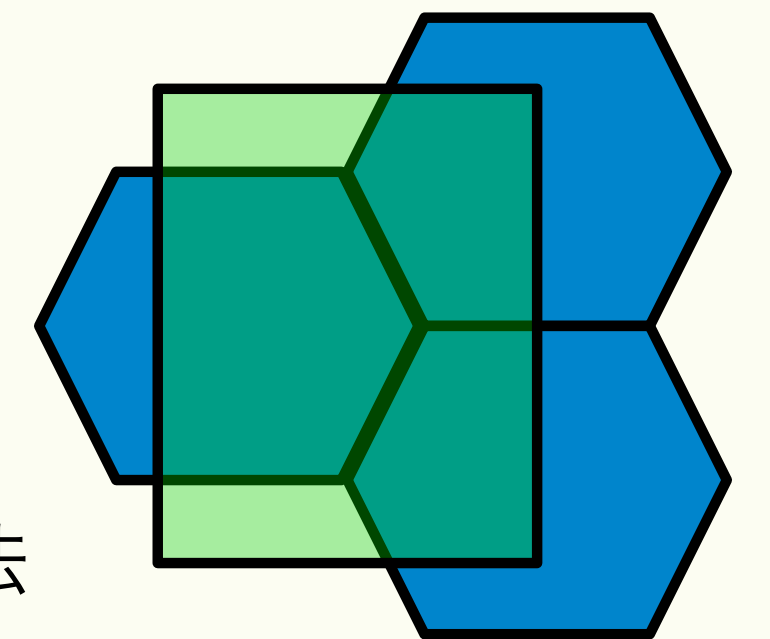
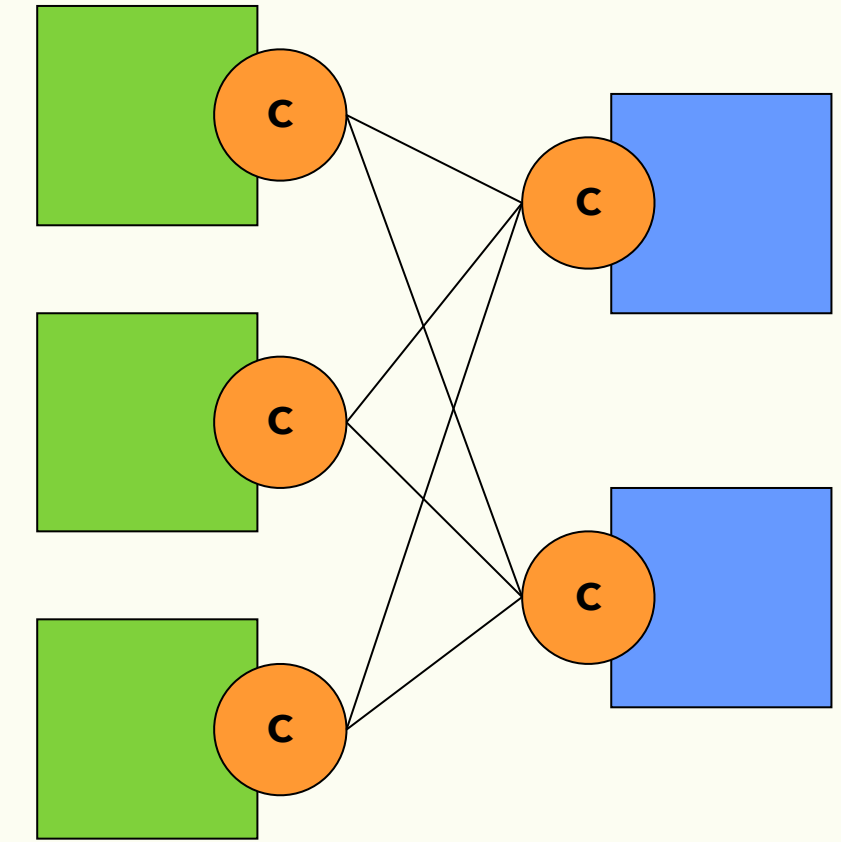
- 異なるソフトウェアを結合する
- MPI通信によってデータを交換し、必要に応じて時空間的な変換を行う

ppOpen-MATH/MP

- カップリングライブラリJcup (Arakawa et al., 2014, 2020)をベースに持つ
- 疎結合・弱連成：ソフトウェア統合よりも分散開発が良い場合もある
- 機能を強化し、ツールとしての可用性を拡大

→h3-Open-UTIL/MP

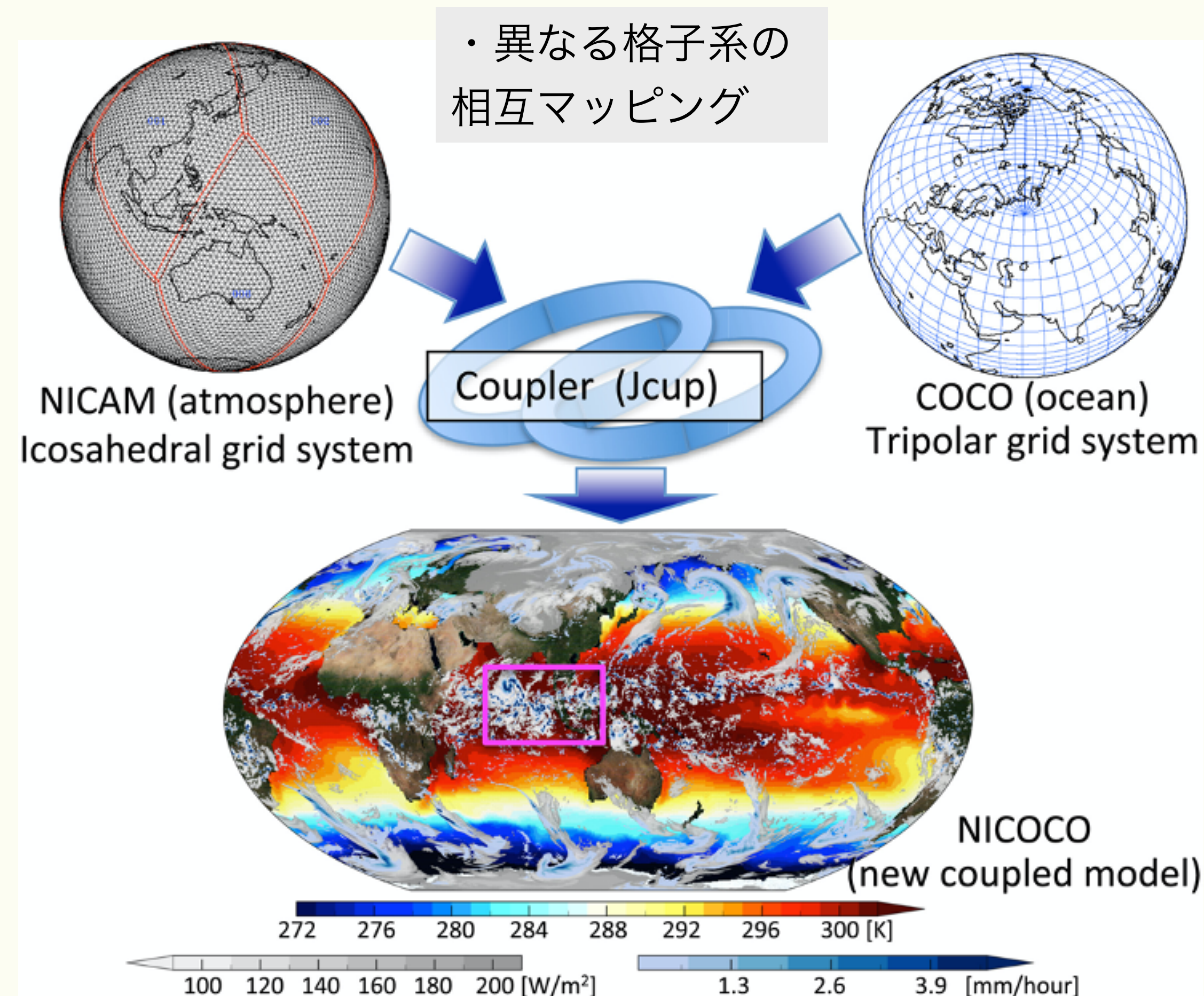
- 科研費基盤S「（計算＋データ＋学習）融合によるエクサスケール時代の革新的シミュレーション手法（PI:東大中島研吾先生）」での取り組み



Multi Physics Coupling

- 例えば：大気海洋結合

- MPI並列 (100-10000proc.)
- 正20面体格子系

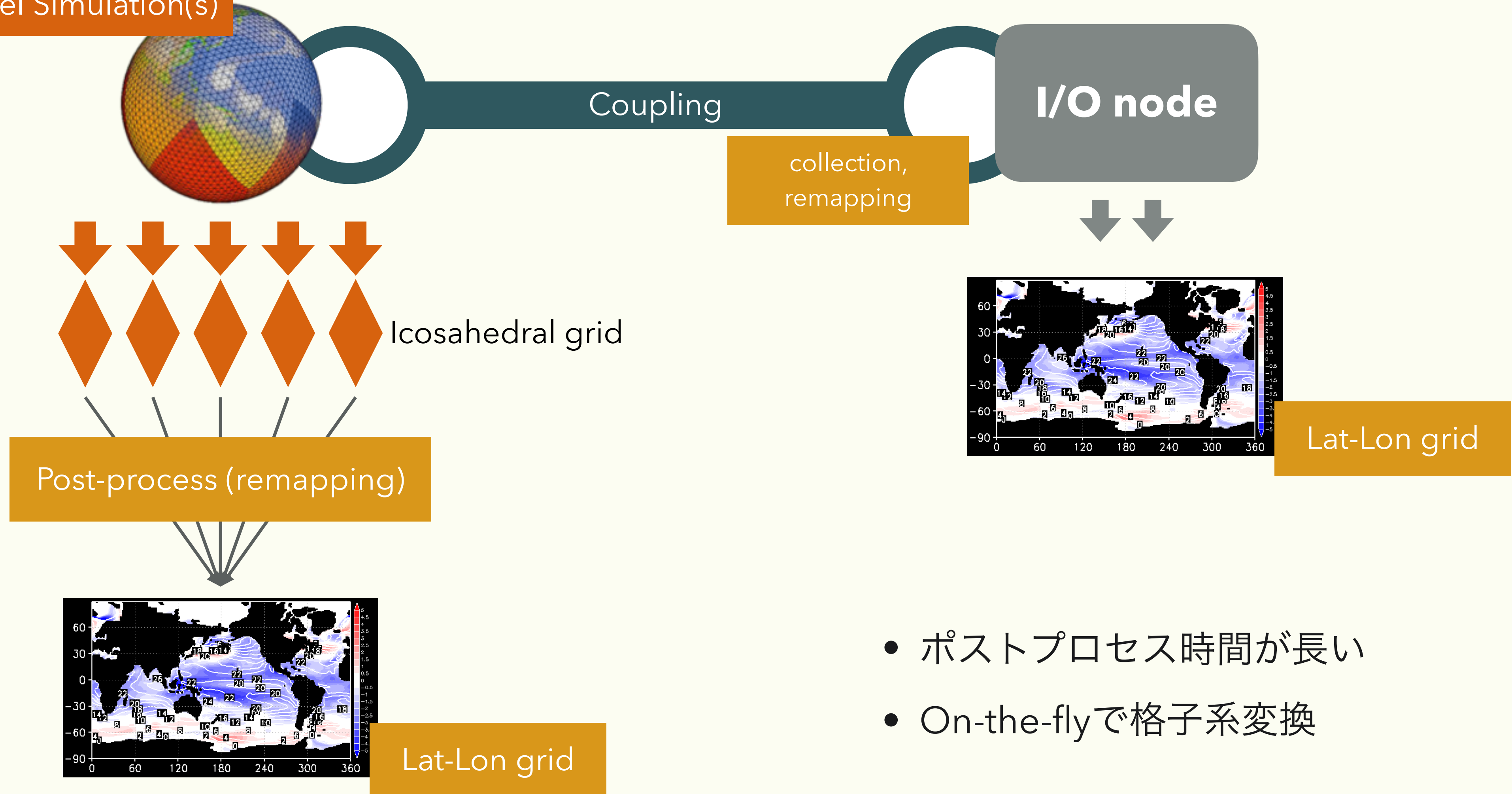


- MPI並列 (100-1000proc.)
- 3極格子系
(北緯63度あたりで正距円筒図法とステレオ図法を結合)

Picture from Miyakawa et al., 2017, GRL

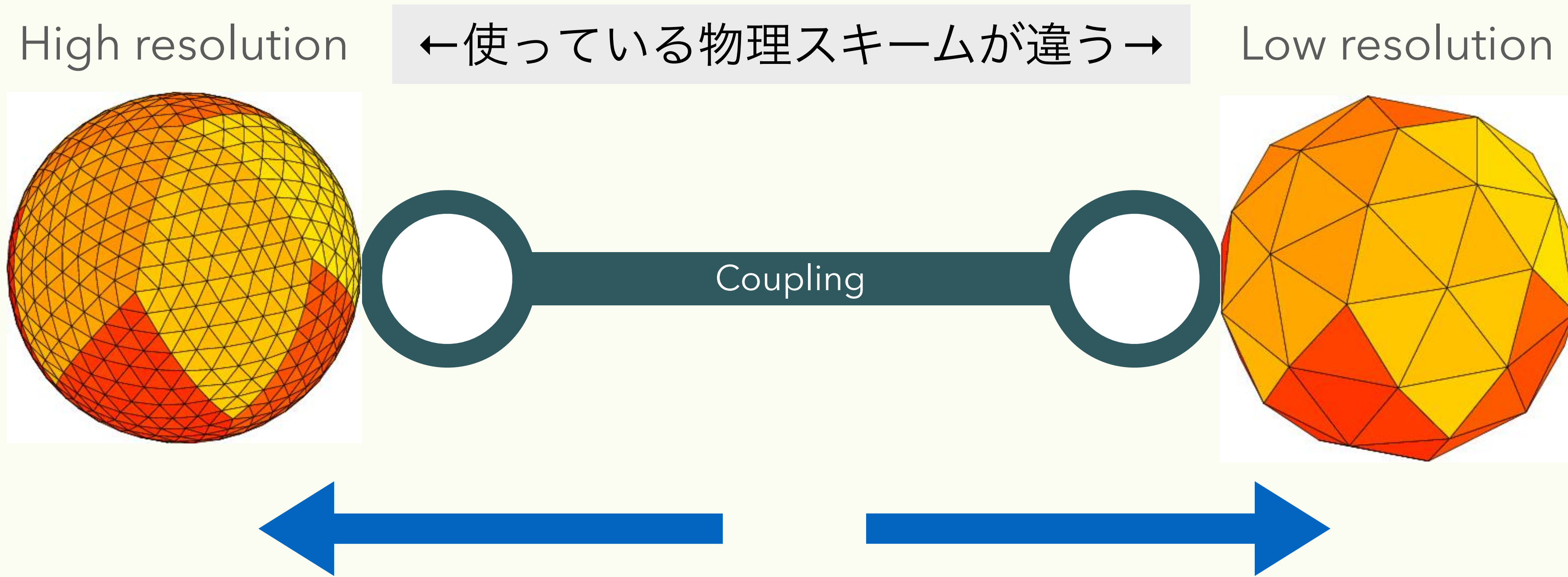
I/O Node Coupling

Model Simulation(s)



- ポストプロセス時間が長い
- On-the-flyで格子系変換

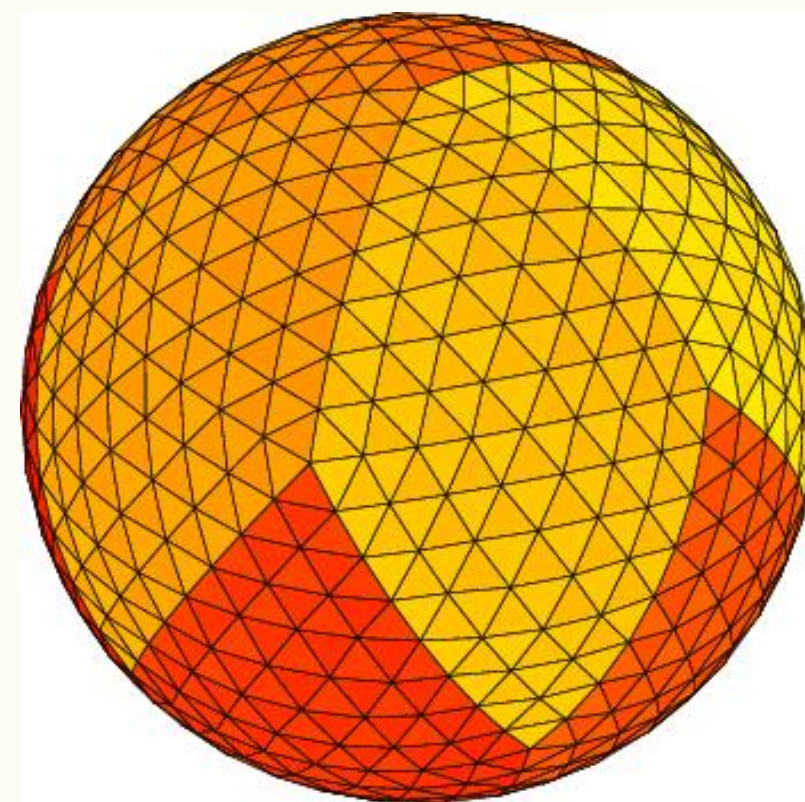
Multi Detailed-level Coupling



- 低解像度側がより正しいケース
filterdナッシング法：
低波数成分のみニュートン緩和
- 高解像度側がより正しいケース
陽的に計算された結果と粗視化モデル
で計算された結果を同じ解像度で比較
出来る

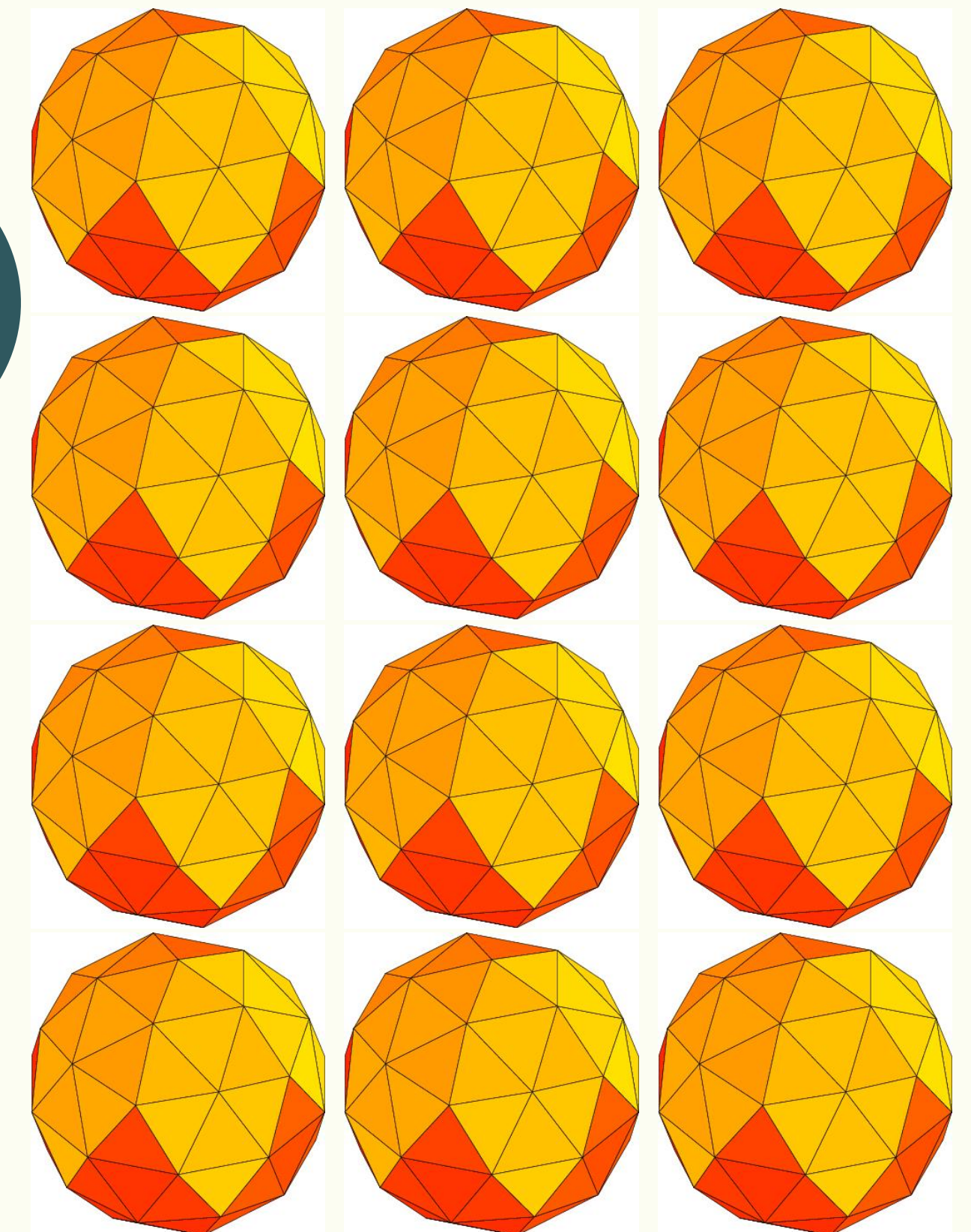
Multi Detailed-level Coupling + Ensemble

High resolution



Coupling

Low resolution Ensemble

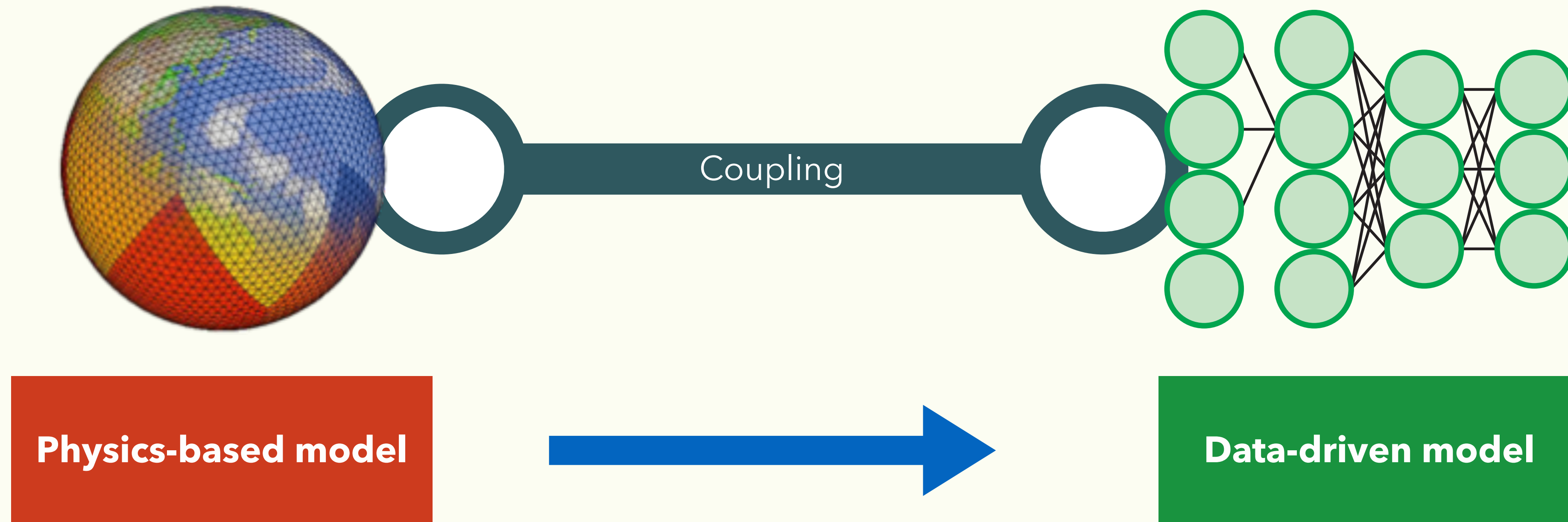


Data assimilation

- 低解像度側がより正しいケース
filterdナッシング法：
低波数成分のみニュートン緩和



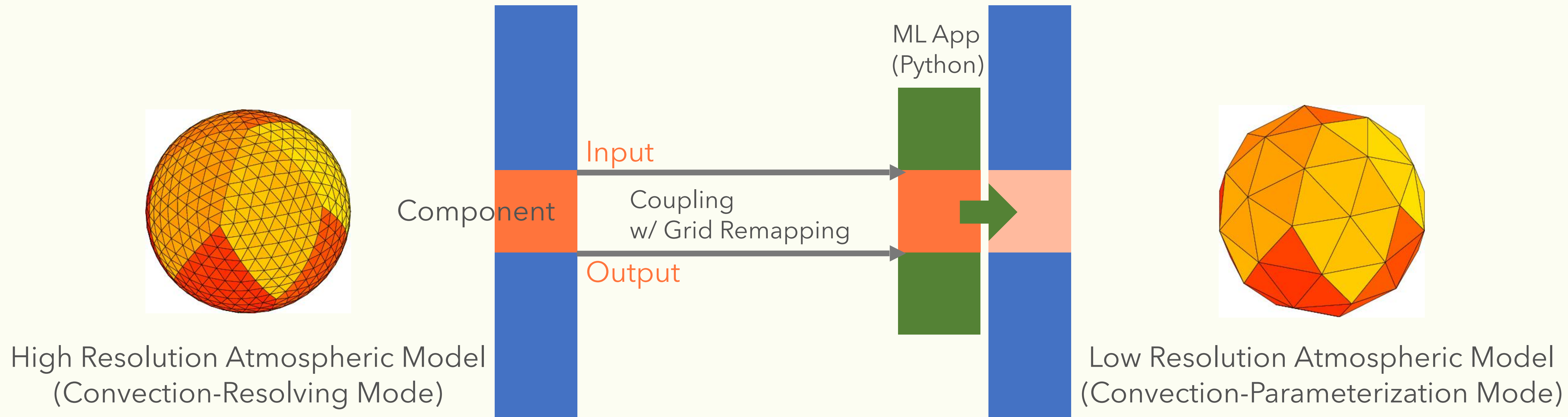
Multi Approach Coupling



- 教師データをOn-the-flyで供給
- アプリ全体ではなく、ターゲットとなるモデルコンポーネント毎にプラグイン

Wistria/BDEC-01を用いたマルチカップリング構想

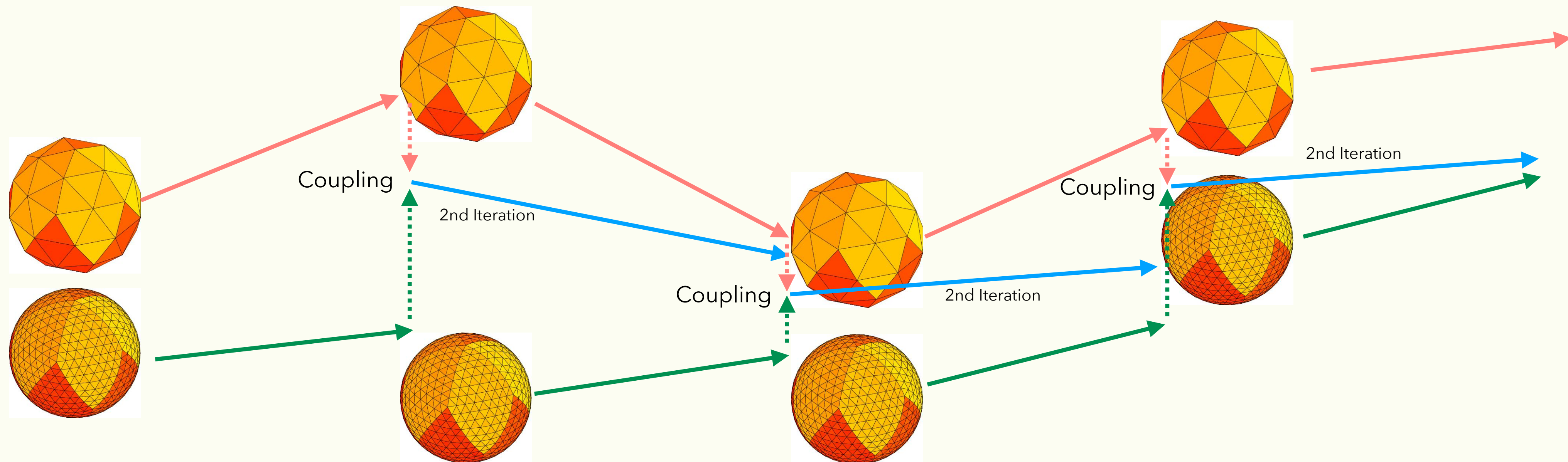
Multi Detailed-level + Multi Approach



- 低解像度シミュレーションで使っている粗視化モデルを、高解像度シミュレーション結果を教師にした機械学習モデルに置き換える

高解像度気候シミュレーションの壁を越えるために

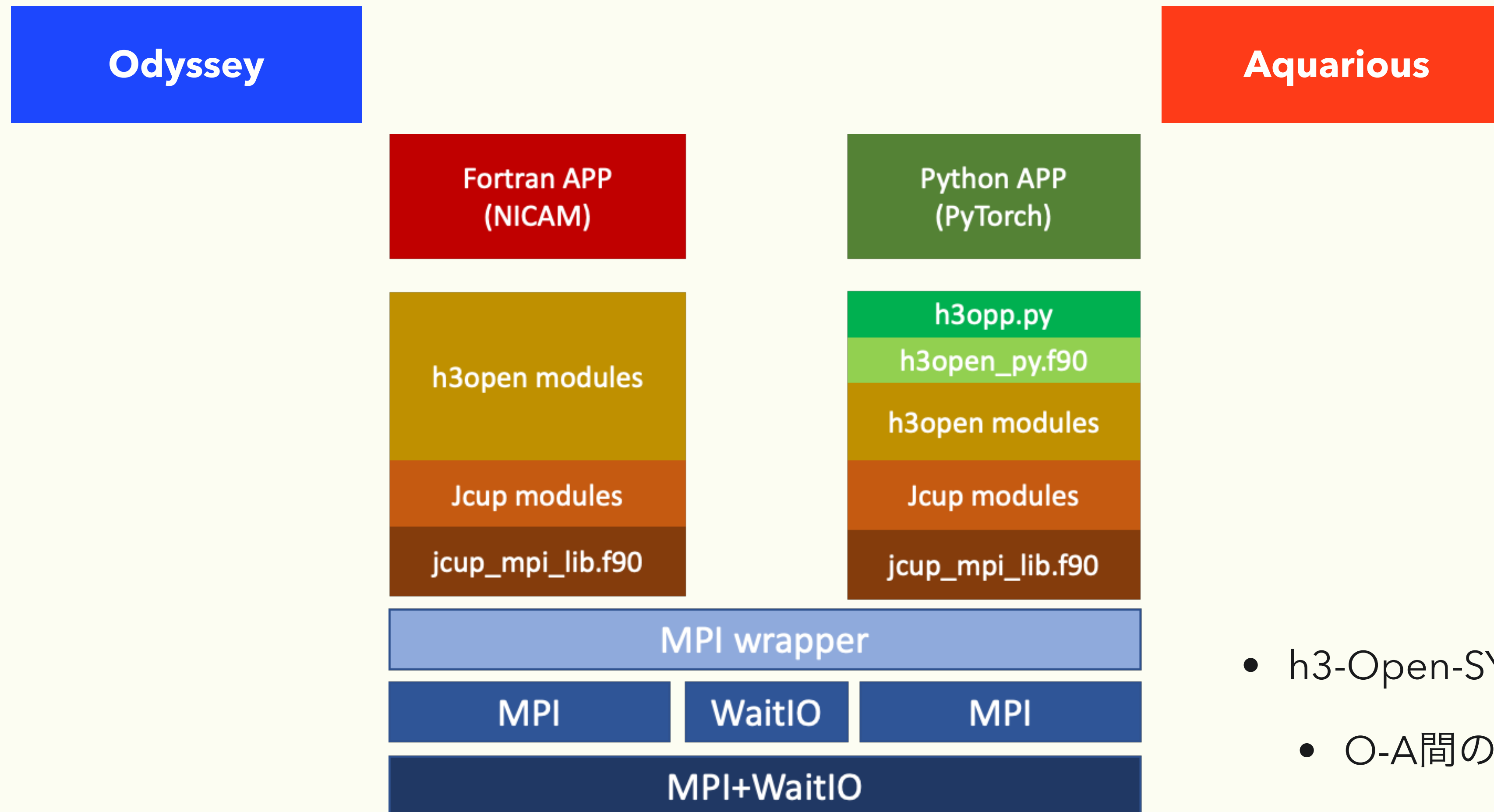
ML-based Approximate computing + Parallel in Space&Time



- 空間方向だけではなく、時間方向を並列化することでストロングスケーリング問題を打破したい
- 詳細度の大きく異なるモデルを用いたPinSTは収束性が悪い
：低解像度モデルの精度向上が大事！

Wistria/BDEC-01を用いたマルチカップリング構想

Multi Detailed-level + Multi Approach + Multi HPC System



- h3-Open-SYS/WaitIOとの連携
- O-A間の通信を実現

まとめと今後の課題

気象・気候モデルはBig Simulation志向であり、まだまだ計算リソースを必要としている

- しかし、これまでの延長線上のマシンでは、ただ待っていても出来ることが増えない
- アプリケーション側は一步一步、しかし着実に変革する必要がある
 - AI技術をさらなるapproximate computingと捉える
- 引き続き、HPCシステムとの密なコデザインが重要