

より速く、より多く、より長く、より複雑に —気象・気候予測を支えるコンピュータとの共同作業

八代 尚（国立環境研究所 地球システム領域）

1. はじめに

現代の気象予報や気候変動予測は数値シミュレーションに支えられている。更なる予測精度向上のためには、気象・気候モデルの新たなアルゴリズムを開発するだけでなく、日々進化を続けるコンピュータにモデルのプログラムを適用させていくという努力が必要となっている。高速で効率良い計算を行うために、本講義では、気象・気候モデルとコンピュータが近年どのような協業（コデザイン）を行っているかについて紹介する。

2. 数値気象計算とコンピュータの黎明

世界で初めて数値計算による天気予報を行ったのは、L.F. リチャードソン(1881-1953)であると言われている。微分方程式を離散化して数値的に解くという、現代の数値気象予報の基本コンセプトは既にこの時用いられている。しかし、今から約 100 年前の当時、全ての計算は手計算であり、コンピュータ（計算手）という単語の持つ意味も筆算や計算尺、手回し計算機を使って計算を行う人間を指す言葉であった。彼の 1922 年の著書「数値手法による気象予報（Weather Prediction by Numerical Process）」の中では、後に「リチャードソンの夢」と呼ばれる構想が述べられている。すなわち、十分な数のコンピュータが同時に整然と計算を行えば、実際の天候と同じくらいの速度で気象予報が行える、という内容である。この構想が現実のものになったのは、コンピュータという単語が電子計算機を指すようになった、1950 年代の頃であった。

電子計算機を用いた世界最初の気象計算は、世界最初の大型コンピュータを用いて 1950 頃から行われた。ENIAC (Electronic Numerical Integrator and Computer) と名付けられたマシン上で、J. フォン・ノイマンや J. チャーニーらが順圧モデルを用いて北米領域のハインドキャストを実現した。当時のテレビに用いられていた真空管が数十個であった中、ENIAC に用いられていた真空管は約 18000 個であり、そのスケールの違いが窺い知れる。また、当時から多量の部品が故障せず、同時に動き続けるための工

夫は非常に重要であった。ENIAC の登場以降、コンピュータの進化は急速に進んだ。最初のプログラムが配線の付け替えで表現されていたところから、アセンブリ言語（第二世代言語、低水準言語）が用いられるようになった。1954 年には最初の高水準言語（第三世代言語）である FORTRAN が登場し、より抽象的な記述が可能になった。記憶装置（ドラムメモリから半導体メモリへ）や入出力装置（パンチカードから電磁記憶媒体へ）についても、短期間で目覚ましい発展を遂げた。その後、コンピュータの用途は大型計算機から個人利用のパーソナルコンピュータへ広がっていくことになる。中でもマシン規模が非常に大きく、演算性能が高い計算機システムを、スーパーコンピュータ（スパコン）と呼んでいる。

3. スーパーコンピュータの性能の進化

コンピュータ産業は、20 世紀において最も急速に成長した産業分野である。その成長を支えていたのは、デナード・スケーリングと呼ばれる半導体のスケーリング則である。この法則は大まかにいうと、半導体をより微細に加工できるようになると、面積あたりの消費電力は同じまま、回路をより多く搭載でき、また高速に動作させることが可能になるというものである。そのため、微細加工技術の進展がコンピュータの性能向上を継続的に支えてきた。G. ムーアは 1965 年の論文の中で、コンピュータに用いられる大規模集積回路（LSI）に用いられる部品数が毎年 2 倍になっていると分析し、その傾向が今後長期にわたって続くであろうと予言した。この予言は 1975 年に「集積回路上のトランジスタ数が 2 年毎に倍になる」と修正された。これが現在まで様々な場面で用いられている「ムーアの法則」と呼ばれる経験則である。実際にこの 50 年で、マイクロプロセッサ内のトランジスタ数はおよそ 2500 万倍に増えており、実に半世紀にわたってムーアの法則が守られていたことが示されている。1993 年には、定められたベンチマークソフトを指標に、世界のスパコンの性能を比較する「TOP500」というリストの作成が開始された。この TOP500 リストに載ったマ

シンの性能向上トレンドもムーアの法則を体現している。性能は14~18ヶ月で2倍となり、我々気象・気候科学で利用可能な計算資源も着実に増え続けてきた。日本国内において、この20年で気象・気候分野が用いてきた最も速いスーパーコンピュータの変遷を図1に示す。海洋研究開発機構に2002年に設置された地球シミュレータは、世界的にも大きな注目を浴びたスパコンであった。現在の国内最速は理化学研究の「富岳」で、総演算性能は地球シミュレータの約10000倍の442PFLOPSである。このとき、P(ペタ)は10の15乗倍を表すSI接頭辞、FLOPS (フロップス、Floating Point

Operations Per Second) は1秒あたりの浮動小数点演算回数を表す単位である。

4. 気象モデルの計算科学的特徴

前述の通り、コンピュータは着実に高性能化している。ところで、我々の気象モデルは科学技術ソフトウェアの一つとして、その性能を十分に引き出しているのだろうか？ 演算性能という面では、答えはNoである。近年の計算機はソフトウェア実行時の浮動小数点演算回数や、メモリ転送量等をカウントする機能を備えている。これらを用いて気象モデルのピーク演算性能に対する演算量比率(実行効率という)を計測すると、概ね数%~10%程度であることが知られている。もっと沢山演算出来る性能をもったマシンの1割以下しか使えていないのである。これはなぜだろうか。ポイントは、データの転送にある。ある計算を行う際には、必要なデータをメモリから読み出し、中央処理装置(CPU)で演算処理を行なって、更新された変数をまたメモリに書き戻している。そのため、移動させるデータの量が多ければ、転送に時間がかかり、その間CPUは仕事をせずに待っていることになる。これがピーク性能を発揮出来ない理由である。コンピュータのメモリ転送性能と演算性能との比率は、Byte/FLOP比という形で表される。例えば富岳のB/F比は0.37であり、最近のサーバ向けIntel Xeon CPUのB/Fは0.1を下回ることも少なくない。一方で、例えば全球非静力大気モデルNICAM(Satoh et al., 2014)が要求する平均B/F比は、典型的なシミュレーションでカウントされるメモリ転送量と浮動小数点演算数から計算することが可能であり、その値は倍精度演算で3.6程度である。この値から、例えば富岳で計算中にメモリ転送帯域を常時100%使い切っていたとしても、実行性能は10%を超えられないことが示されている。ただ、コンピュータの性能は演算性能だけではないという観点に立てば、メモリ性能を使い切っているのだから有効に活用出来ていると言っても悪くはない。

気象・気候モデルは計算機にとって簡単ではないソフトウェアである。まず、模擬しようとしている過程の数と種類が大変に多い。純粋なナビエ・ストークス方程式を解けば気象予報ができるわけではなく、水蒸気等の移流、雲の微物理過程、大気放射過程、サブグリッドスケールの乱流過程など、とも

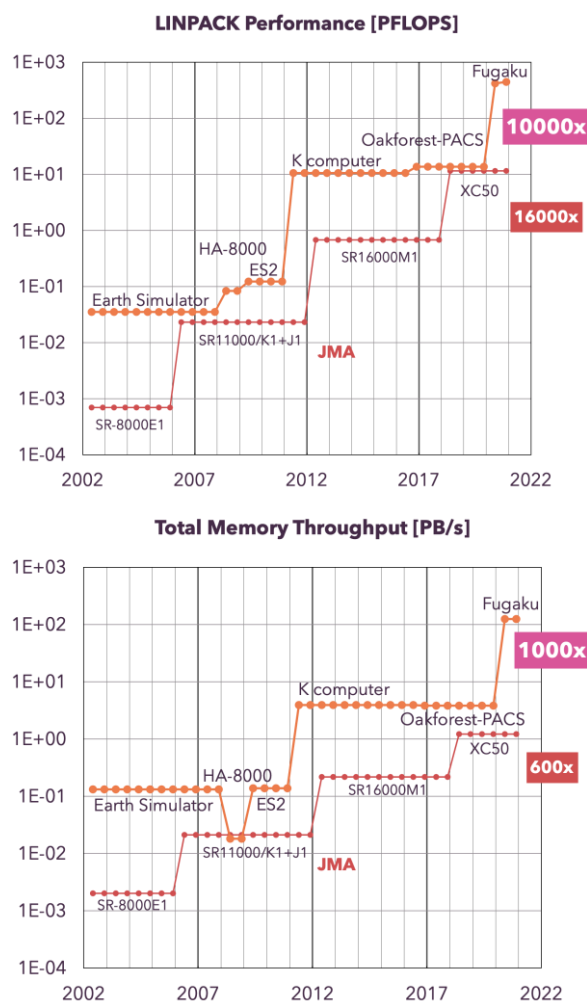


図1 日本国内で気象・気候シミュレーションに利用可能であった代表的なスパコン(橙線)、および気象庁の保有していたスパコン(赤線)の性能の遷移。それぞれTOP500(HPL)におけるシステム最大性能(上図)、システム全体でのピークメモリ転送性能(下図)を表す。

すれば根ざしている研究分野が異なる過程を全て導入してはじめて、気象を表現することが可能になる。そのため、ソフトウェアそのものが学際的な集合体である。計算科学的な側面でみた場合、それぞれの過程で用いられているアルゴリズムは、どれも要求する B/F 比が高い傾向にある。計算科学ソフトウェアの中には、コアとなる計算パートの計算量が圧倒的に大きく、そこさえしっかりチューニングすれば性能を発揮するようなものも多くない。そのような、シミュレーション内での計算量と経過時間の多くを占めるような部分を「ホットスポット」と呼んでいる。気象・気候アプリケーションにはホットスポットがほとんど無い。長大なソースコードの中で、どの部分もそれなりに時間がかかり、しかも時間のかかる原因が演算ではなくデータ移動なのである。我々はこの特徴を「Flat Profile」と呼んでいる (Lawrence et al., 2018)。コンピュータプログラムの最適化を行う際に考慮せねばならないものに、アムダールの法則がある。この法則は以下の式で表される。

$$E = \frac{1}{(1 - P) + \frac{P}{S}}$$

ここで、E は性能向上率、P は最適化を行う部分の経過時間が全体の経過時間に占める割合、S は最適化を行う部分の性能向上率である。例えば、ある過程を 20 倍高速化したとして、その過程が全体の経過時間の 5% しか占めていないのであれば、シミュレーション全体としては元の 1.05 倍しか速くならない。ホットスポットの存在しない我々のモデルには、計算性能向上のためのスマートで効率の高い解決策が無く、数十万行以上にわたるソースコード全体を最適化しないとイケない。このことは、気象・気候モデルを新しい計算機に合わせて、ソフトウェア的な改良を施していく際に大きな障壁となっている。

5. 計算機の質的な変化とソフトウェアの最適化

シミュレーションソフトウェアの最適化方針を立てるために、近年のコンピュータの性質をよく知ることが重要である。前述の通り、コンピュータは登場以来ずっと性能向上し続けてきた。しかし、同じ手法で性能を上げてきたわけではない。最近 20 年においても、まず 2000 年代までに、Message Passing

Interface (MPI) を用いた複数計算ノードでの並列計算が本格化した。それまでは計算機を 1 台だと思って処理を考えていたものが、初めから複数台に処理を分散させるという思想のもとで、ソフトウェアを構築する必要が出てきた。また、2000 年代を越えたあたりから、CPU のクロック周波数は頭打ちになってしまった。CPU の消費電力はクロック周波数に比例し、また電圧の 2 乗に比例する。デナード則の恩恵を受けて電圧を下げられた分だけ、クロック周波数は増加の一途を辿っていたが、微細になり過ぎた回路内での電流漏れに起因する発熱が無視できない程大きくなってしまったために、1GHz を超えたあたりからクロック周波数は上げ続けることが困難になってしまった。この問題を打破するために、CPU の内部に演算機構のサブセットを並べる「マルチコア化」という手法がとられた。ここでもまた、各コアを余すところなく利用するための処理の並列化についてソフトウェア側が考慮しなくてはならなくなった。すなわち、各コアを独立したメモリを持ったプロセスと見なして、MPI を用いた並列化を行うか、メモリが共有された状態で処理をスレッドという単位に分割し、各コアに分散して担当させる「スレッド化」という並列化を行う必要が出てきた。このように、解くべき問題のアルゴリズムを考える上で、計算の「並列性 (Parallelism)」を考慮する重要性は高まり続けており、今後も計算機の性能を、並列度を上げることで確保するのであれば、ソフトウェア側の並列度の確保はより深刻な問題となる。

計算機のトレンドは、市場の影響も大きく受けてきた。1970-80 年代はベクトル機全盛の時代であった。ベクトル機は B/F 比が高く、気象・気候モデルには非常に有利なマシンである。しかし、1990 年代を境にベクトル機は衰退していき、TOP500 リストからは次々に消えていった。2002 年に地球シミュレータが登場し、その高い性能で世界に大きな衝撃を与えたにも関わらず、ベクトル機の時代が再興することにはなかった。なぜなら、ベクトル機に代わって主流となったスパコン (いわゆるスカラ一機) は、世界中に普及し始めたパーソナルコンピュータと同系統の CPU を備え、圧倒的に安価に構築できたからである。このような市場主導のトレンド変化は 2010 年代にも起こり、Graphic Processing Unit (GPU) を利用したスパコンが台頭してきた。これも PC での GPU 普及に伴って安く手に入るようになったことが最初の

引き金であり、またエネルギー効率を CPU よりも高められることがそれを後押しした。近年では GPU の演算性能に支えられた機械学習技術の目覚ましい発展が起こり、さらに GPU への需要が高まり高性能化が進んでいる。現在の TOP500 の 30% 強 (上位 100 機では約 60%) が GPU を備えるようになってきている。このような変化に対応するために、OpenMP のようなスレッド並列化を実現する言語拡張や、OpenACC のような GPU へのデータ転送と計算実行 (Offloading) を実現するしくみを用いて、ソフトウェアの最適化が行われている。一方で、今後も変化するスパコンに毎回追従してソースコード全体を書き換えるのではなく、モデルのアルゴリズムと計算機アーキテクチャへの最適化を分離するようなフレームワークが普及しつつある (例えば、kokkos (Bertagna et al., 2019) や GridTools (Afanasyev et al., 2021))。これは、C 言語や Fortran を用いたプログラミングからの手法転換ということだけではなく、気象・気候分野の研究者と計算機科学の研究者が、お互いの専門性を持ち寄ってソフトウェアを開発していくという体制の変更をも意味している。

6. 「京」「富岳」でのコデザイン

日本のフラッグシップスパコンである「京」、「富岳」の開発では、計画段階から気象・気候モデルがターゲットアプリケーションの一つとして選定され、スパコンの設計や性能評価に貢献した。また、これらのマシンでの実行性能を向上するために、モデル側で行うべき改良についても研究が行われた (例えば、Yashiro et al., 2020 とその引用を参照)。ここではそのいくつかについて紹介する。まず、削減可能な計算時間のある部分を、ホットスポットの無いプログラムの全区間から探すための手順 (我々は「家計簿法」と呼んでいる) を考案し、NICAM で性能最適化の実証を行った (Yashiro et al., 2016a)。また、律速となるデータ転送を削減するために、モデルシミュレーションとデータ同化システム間のデータやりとりに着目し、データ移動距離を最小にするようなファイル入出力、プロセス間ネットワーク通信を設計した (Yashiro et al., 2016b)。さらにモデル内で用いる浮動小数点変数と計算の精度を落とした計算の積極的な利用を進めた。これはいわゆるモデルの単精度化であり、この改良では計算速度と計算精度との間にトレードオフが発生する。その

ため、シミュレーション結果の劣化をどこまで許容できるかについて、気象学の観点から評価を行った (Nakano et al., 2018)。単精度化のような戦略的な高速化は、結果の変わらない単純なチューニングとは違い、気象学・気候科学からの知見を元にした最適化戦略なしに実現することが難しい。

さらに現在、「富岳」の次世代機となる、日本のフラッグシップスパコンについての議論が開始されている。ほとんどの気象・気候モデルはメモリ転送性能によって律速されているため、演算性能の向上よりも、将来のメモリ転送性能の向上トレンドが必要になってくる。計算ノードあたりのメモリ性能は演算性能よりもより緩やかにしか進展しない。その速度は概ね 1 年で 1.16 倍と見積もられており、10 年で 4.4 倍しか高速化しないことになる。図 1 に示したここ 20 年の国内スパコンのメモリ性能の推移では 1000 倍に向上しており、矛盾していると感じるかもしれないが、このシステム全体のメモリ転送性能は計算機の台数を増やすことによって向上させられたものである。実際、初代地球シミュレータが 640 ノードであったのに対し、富岳のノード数は 158,976 ノードであり、およそ 250 倍にも増えている。しかし、これ以上のノード数の増加は将来的にもあまり考えづらい。これは、ノード数が増加することによってシステム全体としての平均故障間隔が短くなりすぎることや、管理できる MPI プロセス数の限界に近づいていることから想像されるものである。そのため、総メモリ転送性能の向上は次世代機においてかなり小さな幅に収まってしまいかもかもしれないという懸念がある。一方で、メモリの積層技術の進展により、CPU に近いところに高速で容量の大きいメモリを装備できるかもしれないという期待もある。これらを受けて、ソフトウェア側の最適化方針についても、新たな方向性を模索することが必要となってくる。

7. おわりに

シミュレーションを用いた気象・気候システムの更なる理解のために、必要とする計算資源は未だ増大の一途を辿っている。より速く、より多く、より長く、より複雑な計算を行うためには、その時代の最先端のスパコンを最大限に活用することが重要である。そのためには、気象・気候の研究を行う者がコンピュータの技術的な変遷を理解し、追従してい

かなくなくてはならない。これは相当に厳しい仕事である。であるからこそ、計算機科学の研究者との連携がより強く求められている。気象学のような分野と計算機を繋ぐ領域を研究対象とする学問分野は計算科学と呼ばれる。ぜひ、この学際的な研究分野である気象・気候の計算科学に興味を持ってもらい、多くの直面する課題に取り組む者が増えて欲しいと願っている。

参考文献

- Afanasyev, A., M. Bianco, L. Mosimann, C. Osuna, F. Thaler, H. Vogt, O. Fuhrer, J. VandeVondele, and T. C. Schulthess (2021) GridTools: A framework for portable weather and climate applications. *SoftwareX*, 15: 100707
- Bertagna, L., Deakin, M., Guba, O., Sunderland, D., Bradley, A. M., Tezaur, I. K., Salinger, A. G. (2019). Hommexx 1.0: a performance-portable atmospheric dynamical core for the energy exascale earth system model. *Geoscientific Model Development*, 12 (4), 1423-1441. doi: 10.5194/gmd-12-1423-2019
- Lawrence, B. N. et al. (2018) Crossing the chasm: how to develop weather and climate models for next generation computers? *Geosci. Model Dev.*, vol. 11, no. 5, pp. 1799-1821, doi: 10.5194/gmd-11-1799-2018.
- Nakano, M., H. Yashiro, C. Kodama, and H. Tomita (2018) Single precision in the dynamical core of a nonhydrostatic global atmospheric model: Evaluation using a baroclinic wave test case. *Mon. Weather Rev.*, vol. 146, no. 2, doi: 10.1175/MWR-D-17-0257.1
- Satoh, M., Tomita, H., Yashiro, H. et al. (2014) The Non-hydrostatic Icosahedral Atmospheric Model: description and development. *Prog. in Earth and Planet. Sci.* 1, 18. <https://doi.org/10.1186/s40645-014-0018-1>
- Yashiro, H., M. Terai, R. Yoshida, S.-I. Iga, K. Minami, and H. Tomita (2016a) Performance analysis and optimization of nonhydrostatic icosahedral atmospheric model (NICAM) on the K computer and TSUBAME2.5. in *PASC 2016 - Proceedings of the Platform for Advanced Scientific Computing Conference*, doi: 10.1145/2929908.2929911
- Yashiro, H., K. Terasaki, T. Miyoshi, and H. Tomita (2016b) Performance evaluation of a throughputaware framework for ensemble data assimilation: The case of NICAM-LETKF. *Geoscientific Model Development*, 9, 2293-2300
- Yashiro, H., K. Terasaki, Y. Kawai, S. Kudo, T. Miyoshi, T. Imamura, K. Minami, H. Inoue, T. Nishiki, T. Saji, M. Satoh, and H. Tomita (2020) A 1024-member ensemble data assimilation with 3.5-km mesh global weather simulations. In *Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC '20)*. IEEE Press, Article 1, 110.