

5. ポスト「京」時代に向けたモデリング・ 将来のスパコンと人材育成

富田 浩文*

1. はじめに

気象予測の可能性は、古くは Bjerknes (1904) の流体力学的考察から示唆されている。Richardson (1922) は気象予測を手計算で「実証」を試み、失敗に終わったが、「64,000人の計算者を巨大なホールに集めて指揮者の元で整然と計算を行えば、実際の天気の変化と同じくらいの速さで予測が行える」とリアルタイムでの天気予報を見積もっている。当時、人間が行うには膨大すぎる計算量であり、数値不安定などの概念がなかった時代であったが、その発想の豊かさに驚嘆させられる。特に Richardson の見積もりは、現在の並列計算手法そのものである。彼らが夢みた概念、試みた手法は、100年経った現在、当たり前のように実現されている。

1946年に電子計算機 ENIAC が登場して以来、物理法則に基づく方程式を使って、時間方向に積分して気象予測する技術は、またたく間に発展した。現在まで、半導体技術とともに計算機能力の飛躍的な向上はとどまるところを知らない。現在、あらゆる分野で国内外を問わず、大型電子計算機を用い、日夜、科学技術計算が行われている。今後の半導体技術は理論的には限界にきているが、当分はこの傾向は続くだろう。

日本での大型計算機と言えば、歴史的には、数値風洞、CP-PACS、地球シミュレータ、京コンピュータに代表される。これらは、いずれもその時代のフラグシップマシンとして我が国で開発されてきたスーパーコンピュータである。良くも悪くも日本の計算科学を牽引してきたと言えよう。

京コンピュータは、いわゆる汎用機として位置付け

られており、プロジェクトの中では、5つの戦略分野が設定されている。我々の気象・気候計算においては、地球シミュレータと比べると若干使いにくくなったかもしれない。ベクトル計算機である地球シミュレータは、京コンピュータのようなスカラ計算機と比べて、対演算性能に対するメモリー性能が高かった。また、ネットワークポロジも全球大気力学計算において主流であるスペクトル法にとって比較的有利なものであった。京コンピュータは、最終的にスカラ超並列機となり、対演算性能に対するメモリー性能は落ちた。しかしながら、プログラムコードの書き換えは伴うものの、圧倒的な物量によって、地球シミュレータ時代には大変であった計算がいくとも容易くできるようになっている。

昨年度より京コンピュータの後継機を開発する「フラッグシップ2020プロジェクト」が動き始めている。これを戦略的に使うため、より課題遂行重視型にシフトし、9つの重点課題が設定された。その一つは、「観測ビッグデータを活用した気象と地球環境の予測の高度化」である。ポスト「京」開発プロジェクトでは、更に、計算科学研究者と計算機研究者が、協力してシステム設計を行っていき、いわゆる Co-design (協調設計) が一つの柱となっている。これまでのシステム設計者からアプリケーション分野ユーザーへの一方向的、あるいは一回きりの情報交換だけでは限界があるという認識に基づいている。すなわち、アプリケーション研究者が、今まで以上にシステム側へ口を挟まざるを得なくなり、これまでの「与えられたものを使う」というスタンスでは性能向上が望めない時代へ突入したとも言える。

本稿では、ポスト「京」そのものの話というよりも、今後の計算機トレンドを意識しつつ、筆者が考えている現状の気象・気候モデリングの問題、今後のあ

* 理化学研究所計算科学研究機構。

htomita@riken.jp

© 2017 日本気象学会

り方を述べる。また、そのためにどのような人材が必要かを、僭越ながら申し述べたい。

2. 現状および今後の気象・気候モデリングの難関

今後の計算機のトレンドで避けて通れないことは、並列度が更に高まることである。モデリングやプログラミングをする者にとって、意識せざるを得ない事項の一つである。ここで言う並列度は、いわゆるコンピュータノードの数が増えるということだけではない。チップ内においても、演算コアがたくさん存在するし、コア内でも SIMD 幅が広がるなどの傾向にある。これらの並列性を十分に利用することを考えずに計算効率が上がらない。同時にメモリーの階層構造、ネットワークの転送速度とトポロジーなど、データ転送を意識することが演算能力を引き出す必要不可欠な要素となる。

気象・気候学で用いられる大気モデルは、多くのコンポーネントの集合体であるが、大まかに力学過程と物理過程とに分けるのが一般的であるので、これに沿って話をする。

まず、力学過程であるが、1990年代から指摘され続けられているように、スペクトル法の使用はどんどん辛くなってきている。計算ノードの演算能力の伸び率と通信能力のそれとを比較すると、明らかに後者が遅いからである。スペクトル法の場合、たとえ演算方法に高速変換があったとしても、行列の転置による all-to-all 通信が必然的に発生し、アルゴリズム的にこれを回避することが困難である。通信能力に関わる項目として転送能力とトポロジーの二つがあるが、スペクトル法の場合、この二重苦にさらされることになる。後者は、初代地球シミュレータのような単段クロスバーネットワークがあれば比較的容易であるが、超並列機でこれを実現するのはリンクの数が飛躍的に増えて実現不可能である。スペクトル法では、これによる律速が避けがたい。スペクトル法の限界が指摘され始めたころから、全球モデルにおいても、局所的な情報を使う有限差分法的方法や準一様格子が多く提唱されており、モデリングのトレンドとなってきた。ここでの律速原因は、メモリーから CPU への転送能力である。差分法的手法の場合、現在においても、すでにメモリー転送の能力不足で演算機が回り切っていないのが実情である。今後もこの傾向は続く。救いは、地球流体力学で用いられる手法は、比較的、構造格子系が多いことである。非構造格子の場合、非連続

メモリアクセスとなり、そのままではメモリー転送能力すら最大限生かせない問題が生じる。非構造格子が必ずしも構造格子に比べて性能が悪いということはないが、現在でも小さなメモリーバンド幅を使い切るには計算機に応じたチューニング、つまり一般的にはあまりやりたくない仕事構造格子の時と比べてより多く発生するということである。上記では、メモリーと一言で書いたが、チップ内のキャッシュを含めると階層構造を意識せざるを得ず、これが更に悩ましい事柄の一つとなる。いずれにしても、差分法のような場合、データ転送量に対して演算量が少ないため、キャッシュメモリーを効率よく使ったとしても間に合わない場合が多い。メモリーからのデータ転送量に対する演算量の比を大きくすることは、例えば、移流計算において高次精度を用いるなどで可能ではあるが、そもそも物理過程との精度との兼ね合いで、本末転倒となる。

一方、物理過程は、格子を水平に2次元分割すると計算ノード内での局所性が保たれるものが多く、ノード間の通信速度は問題にならない。格子点あたりの演算量は、力学過程よりも多く、計算機のトレンドと合いやすい。また、物理過程を精緻化することは、演算量が多くなりやすく、計算機効率の観点からは有利に働くと思われる。ただし、高度化・精緻化は、何のために行うのかを十分に認識しておかないと、意味のない計算を増やす、ということになりかねない。このことは、力学計算で意味もなくむやみに精度を上げることと類似している。

モデル構造そのものには直接関係がないが、一つ有効な並列軸がある。アンサンブル数を増やすことである。一つ一つの計算同士には通信が発生しないため、計算機ノード数に合わせて素直に伸びていける軸である。数値シミュレーションに科学的な妥当性・知見を与えるために必須項目であるこのアンサンブル数の増大は、本質的には計算機のキャパシティーだけの問題であるので、成果効率の観点からは、極めて有効であると思われる。前述したスペクトル法も小ノード数での計算を並列に大量に流すという方法であれば、まだまだ健在であろう。実際、このような使い方は多いのではないかと思う。

3. 将来へ向けての気象・気候モデリング

この節では、筆者の所属する研究チームにおけるモデリングの取り組みを紹介しながら、将来の気象・気

候モデルの一つの可能性として述べたい。計算科学研究機構複合系気候科学研究チームでは、前述の計算機トレンドを意識しながら、気象・気候計算コミュニティで幅広く使える基盤ライブラリー (SCALE: Scalable Computing for Advanced Library and Environment; <http://scale.aics.riken.jp/> 2016.12.4 閲覧) の整備を行っている。開発にあたり、いくつかの基本的ポリシーとして、以下を標榜している。

i) オープンソースであること

気象・気候コミュニティにおけるモデルの場合、あまりライセンスの概念がなく、兄弟関係にあるモデル同志では、双方の合意のもとプログラムコードの相互利用を行う。しかしながら、このやり方はグレーゾーンでもありトラブルのもとになりやすいともいえる。フリーなライセンスのもとで研究者が安心して自由に使えるように整備していくことは、今後のコミュニティ全体への貢献へつながらと考えている。SCALEはBSD2ライセンスとしている。

ii) トレーサブルであること

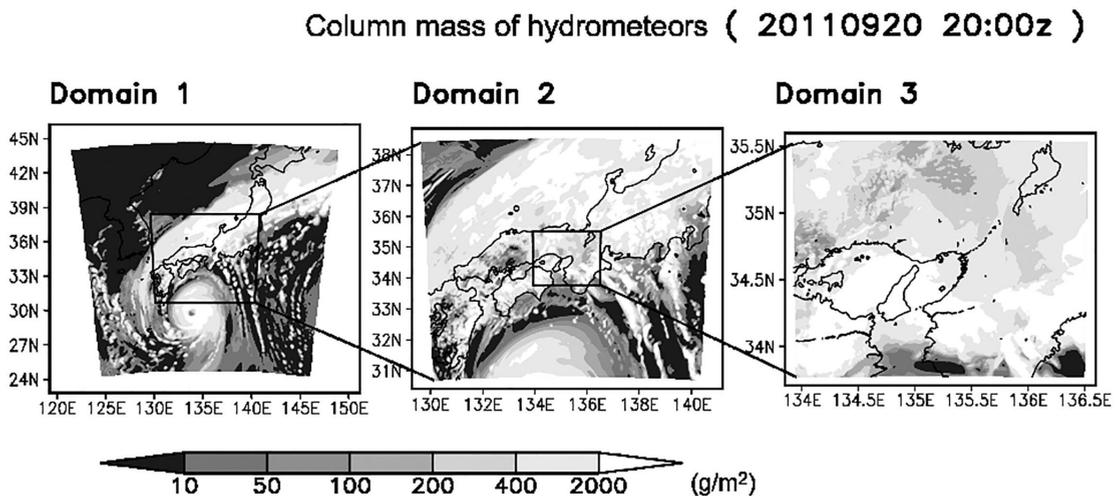
自ら開発する部分、他のモデルコミュニティから提供された部分、いずれにおいても、第3者が追試可能なようにしておくこと。モデルコンポーネント内部には、論文に載っていない些細な工夫や閾値などが組み込まれている。これらを明らかにしておくために重要なのが、ドキュメントの整備である。

iii) 他のモデルへ組み込みが容易であること

多くのモデル開発グループにも自由に使うためには、サブルーチンインターフェースが特に重要になってくる。インターフェースをある程度統一しておけば、簡単にあるいは気軽にテストすることができる。このような取り組みの一環として、国内の主要なモデル開発チームへ呼びかけ、インターフェース仕様策定のみならずテストケース整備などの活動を行い、SCALE開発チームもその一員として参加している (<http://cbleam.aics.riken.jp/> 2016.12.4閲覧)。

この基盤ライブラリーは、計算科学研究機構では計算機科学の研究者とも議論を重ね、幅広い意味でデザインを行っている。以下、例を挙げると、「京」での通信高速化のために作成した MPI persistent communication の使用、より高速通信を目指した RDMA ベースでの通信ルーチンの組み込み、実行中の耐故障性の検討、領域モデルのネスティングシステムにおける最適ノードマッピングの検討、並列化を意識せずにプログラムコードが記述できる XMP などのテストベッド、等々である。この SCALE ライブラリーを利用した領域モデル SCALE-LES (Nishizawa *et al.* 2015; Sato *et al.* 2015b) の一例を第1図に示す。

さて、およそ5年後のポスト「京」時代の気象・気候モデルといっても、短期間で根本的なアルゴリズムが大幅に変わることは期待できない。ボトルネックと



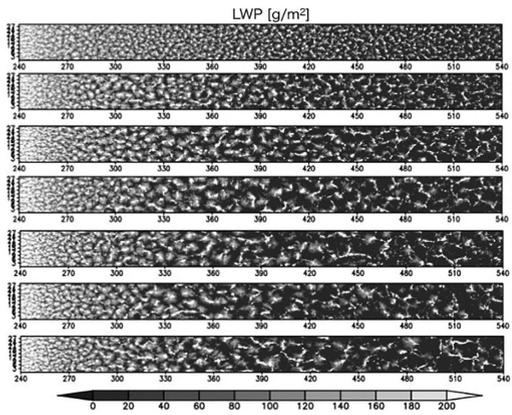
第1図 SCALE-LESによる計算の一例。水凝結物の鉛直積分量を示す。水平格子間隔7.5 km, 2.5 km, 0.5 kmの3段ネスティングによる関西地域に焦点を当てたシミュレーション。GSMを初期値・境界値とした。現在、兵庫県神戸市「研究教育拠点 (COE) 形成推進事業」での集中豪雨研究に利用されている。

なる力学過程も、やはり現在用いられているスキームがもともになる。この時代、前節で述べたメモリーバンド幅や通信バンド幅の相対的低下が極端化することはないと期待したい。

4. 弱スケールから強スケールへ

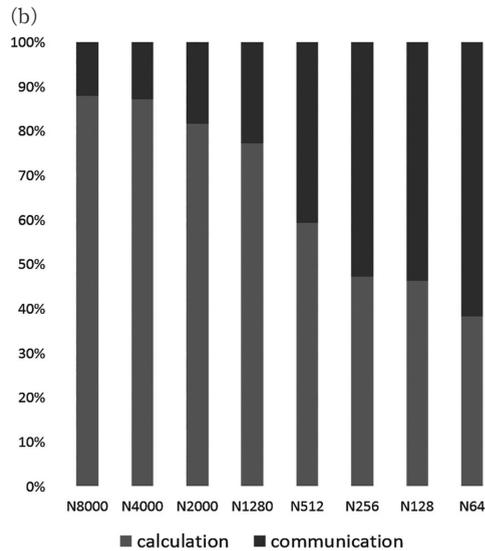
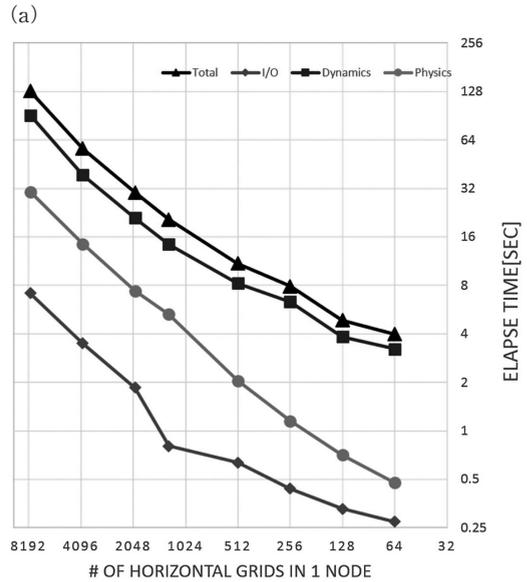
すでに述べたように、ポスト「京」のような汎用大規模計算機で成果効率を最大化する一つの方策は、一つ一つの問題規模はあまり大きくとらず大量のアンサンブル計算を行うことであるが、その一方で、単一の大規模計算を行い、次の時代への可能性を広げることも極めて重要である。例えば、京コンピュータ上では、短時間積分ながらも、NICAM (Sato *et al.* 2014) による格子間隔 1 km を切る全球計算が行われた。この計算によって、対流の統計的性質が解像度によってどのように変わるのか、あるいはどの解像度で収束がみられるのかが議論されている (Miyamoto *et al.* 2013, 2015)。SCALE-LES を使った実験では、層積雲の形態のメカニズムを探るべく、超高解像度で広領域での数値実験を行い、オープンセル、クローズセルの遷移過程を再現し、そのメカニズムについて論じている (第2図参照)。

このような大規模計算は、計算科学的観点からは、ある意味、弱スケール問題で、ノードあたり実効効率の高い問題規模に合わせて、全体の問題設定を行って



第2図 SCALE-LES による大規模層積雲の理想実験 (Sato *et al.* 2015a)。図に示す領域は30 km×30 kmで、格子間隔は50 mで計算している。図は水凝結物の鉛直積算量を示す。クローズセルからオープンセルへの遷移過程が表現されている。

いる。弱スケール問題は比較的スケールしやすい問題である。しかしながら、「同一規模あるいは少しだけ大きな問題を素早く解きたい」という強スケール問題への要求も多い。現場の気象予測などは時間との戦いであろう。この場合、使用する計算ノードを増やしていくため、一つの計算ノードが受け持つ演算量が少な



第3図 (a) SCALE-LES の強スケール性能。1計算ノードに割り当てる水平格子点数に対する経過時間。(b) 演算と通信の割合 (Miyoshi *et al.* 2016より)。

くなり、計算ノード数に反比例して計算速度が上がることを期待するが、そう簡単にはいかない。力学過程のステンシル計算では、毎時間ステップ必ず隣接通信が発生するため、この通信量が演算量に比して、無視できなくなる。簡単に言うと、2次元問題において使用する計算ノード数を4倍にすると、一つの計算ノードが受け持つ演算自身は4分の1になるが、通信量は、2分の1にしかない。従って、理想的な効率を得られず、どこかで頭打ちになる。第3図に、ある問題設定での「京」上でのSCALE-LES強スケール性を示す。第3図aに示すように、通信を伴わない物理過程は比較的素直にスケールしているのに対し、力学過程は、計算ノード増加によるゲインが少しずつ低下している様子が分かる。第3図bには、演算と通信の割合を示す。力学過程でのゲインの劣化は、通信量の相対的増加が大きな要因の一つである。水平 16×16 (N256のケース)の格子点数の問題では、実に半分以上が通信である。

演算の効率を高めれば高めるほどこの傾向は顕著になる。通信と演算のオーバーラップさせることにより、ある程度緩和することは可能であるが、プログラムコードの可読性が悪くなる上、通信隠蔽準備のためのオーバーヘッドを考慮しながらの実装となる。

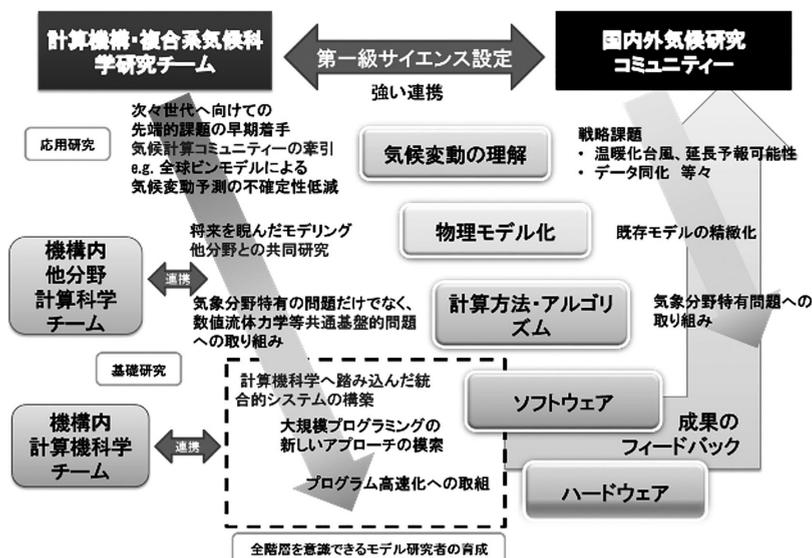
以上は、ポスト「京」時代以降さらに顕在化するであろう問題を、シミュレーション計算速度の観点から

述べてきたが、実は今後、もっと真剣に取り組むべき問題は、大量のデータをどのように処理するかである。観測データはもとより、それをを用いたシミュレーションデータも膨大な量になる。筆者は、既に地球シミュレータ時代から、このデータ量問題に直面している。当時は、NICAMを使つてのチャンピオン計算の解析にとつてもなく時間を費やした。現在、「京」を使った実験においても、シミュレーションによる計算はすぐに終わるが、出力されるデータの解析に多大な時間を費やしている。解析のスループットが最終的な成果を律速している。極端な例を言うと、「計算はスパコンで、解析はパソコンで」と言うようなやり方である。パソコンはさすがにないにしても、一度手持ちのサーバー上に落として、「じっくり」解析する、というのが現状であろうと思われる。しかし、大半の時間をデータ移動に費やし、なおかつ、解析をシリアルで行うという方法は非常に時間と労力もつたない。解析プログラムもすべて並列化して行い、最低限必要な解析はシミュレーションと同時に行うべきである。このための仕組みやライブラリーは業界として整備されるべきである。ポスト「京」時代以降での真の課題は、このあたりにあると筆者は考えている。

5. 今後求められる人材

本稿の題目に、人材育成とある以上、少しは述べなくてはならないだろう。経験豊かな諸先輩方を目の前にして、自分が「人材育成」を語るのにはなほだおこがましい限りであり大変恐縮する次第である。

スパコンを使いこなす、計算機を意識しながらモデルを作りこんでいくということに関しては、やはり計算機科学の研究者と対話できる人たちが必要であると思う。スパコンとモデルを気象・気候学のツールの一つと扱うには、ハードウェアやシステムソフトウェアを完全にブラックボックスと捉えるわけにはいかなくなってきている。与えられ



第4図 計算科学研究機構複合系科学研究チームの標榜する体制。

たコンピュータに甘んじていては、先がないように思う。第4図は、筆者の所属する研究チームが標榜する概念図である。「上から下へトップダウン的な理解が必要」と体のいいことが書かれている。水平方向にも垂直方向にも分業化が進む中、網羅的にすべて理解することは困難であるが、少なくとも、いくつかの階層にオーバーラップできる人材が必要なのではないかと思う。

モデルそのものをつくる機会も残念ながら少なくなってきたように感じる。一つ懸念されるのは、筆者は全くそう思わないが、どこかしら「モデルを作っていると、論文がなかなか書けない」という風潮があることである。モデリングをする過程、それを実装する過程において、モデルの限界を知り、パラメータ感度などは、身をもって実感することができる。そこは、研究のネタの宝庫であり、アイデア次第でいくらでも論文になるように思う。

6. おわりに

ポスト「京」時代、それ以降の計算機事情を鑑みると、「ほっておけばバラ色」という時代が本当に終わりを迎える。モデルを作る人たちは、計算機技術動向を意識せざるを得ないし、積極的に口をはさむ時代に来ている。現在、フラッグシップ2020プロジェクトでは、重点課題実施機関とともに、アーキテクチャやシステムソフトウェアとのコデザインが進行中である。個人的には、これらを通して、計算科学者、計算機科学者の双方の理解が深まり、よりよい方向が見えればと、切に願う次第である。

振り返って読んでみると、本稿は、筆者の私見が散りばめられていて、まったく客観的なものになっていないと反省している。また、学術的なものではなく、筆者のこれまでの経験に基づく極めて主観的な内容になっている。これは、筆者自身が暗中模索の状態におり、本題の将来を予測するための整理ができていないことに起因する。本稿によって多くの批判を受けることは覚悟しているが、一人の気象・気候計算に携わるものとして、少しでも多くの人と生産的な方向へ議論が展開できれば幸いである。言い過ぎ、間違いなどお叱りを受けるところも多々あろうかと思うが、筆者自身が、与えられた題目に対して、明確な答えに行きついておらず、人財育成に関しては、自身が「育成され中」であるため、どうかご容赦いただきたい。

謝辞

本稿を執筆するにあたって、このような機会を与えていただきました気象学会企画の皆様に深く感謝いたします。また、本稿での画像を提供していただいた理化学研究所計算科学研究機構・複合系気候科学研究チームの皆さんに感謝いたします。

略語一覧

BSD2ライセンス：フリーソフトウェアで使われるライセンス形態の一つで、GPL (GNU General Public License) などと同様に現在広く用いられている。

MPI：Message Passing Interface の略。複数の計算プロセスを使う並列計算において現在最も標準的なインターフェースの一つ。

RDMA：Remote Direct Memory Access の略。ある計算ノードから異なる計算ノードへのメモリを直接アクセスすることで、並列化のオーバーヘッドを減らすことができる。

SIMD：Single Instruction Multiple Data の略。一つの命令を同時に複数のデータにアクセスする。同時処理する数のことをSIMD幅と呼ぶ。

XMP：Xcalable MP 並列化言語の一つ。ソースコードの中にディレクティブを挿入することで簡単に並列化ができる。

参考文献

- Bjerknes, V., 1904: Das problem der wettenvorhersage, betrachtet vom standpunkte der mechanik und der physik. Meteor. Z., 21, 1-7.
- Miyamoto, Y., Y. Kajikawa, R. Yoshida, T. Yamaura, H. Yashiro and H. Tomita, 2013: Deep moist atmospheric convection in a subkilometer global simulation. Geophys. Res. Lett., doi:10.1002/grl.50944.
- Miyamoto, Y., R. Yoshida, T. Yamaura, H. Yashiro, H. Tomita and Y. Kajikawa, 2015: Does convection vary in different cloud disturbances? Atmos. Sci. Lett., 16, 305-309.
- Miyoshi, T., G.-Y. Lien, S. Satoh, T. Ushio, K. Bessho, H. Tomita, S. Nishizawa, R. Yoshida, S. A. Adachi, J. Liao, B. Gerofi, Y. Ishikawa, M. Kunii, J. Ruiz, Y. Maejima, S. Otsuka, M. Otsuka, K. Okamoto, H. Seko, 2016: "Big Data Assimilation" toward post-petascale severe weather prediction: an overview and progress. Proceedings of the IEEE, 104, 2155-2179. doi:10.1109/JPROC.2016.2602560.
- Nishizawa, S., H. Yashiro, Y. Sato, Y. Miyamoto and H. Tomita, 2015: Influence of grid aspect ratio on planetary boundary layer turbulence in large-eddy

- simulations. *Geosci. Model Dev.*, **8**, 3393-3419.
- Richardson, L. F., 1922: *Weather Prediction by Numerical Process*. Cambridge University Press, 236pp.
- Sato, Y., Y. Miyamoto, S. Nishizawa, H. Yashiro, Y. Kajikawa, R. Yoshida, T. Yamaura and H. Tomita, 2015a: Horizontal distance of each cumulus and cloud broadening distance determine cloud cover. *SOLA*, **11**, 75-79.
- Sato, Y., S. Nishizawa, H. Yashiro, Y. Miyamoto, Y. Kajikawa and H. Tomita, 2015b: Impacts of cloud microphysics on trade wind cumulus: which cloud microphysics processes contribute to the diversity in a large eddy simulation? *Prog. Earth Planet. Sci.*, **2**, 23, doi:10.1186/s40645-015-0053-6.
- Satoh, M., H. Tomita, H. Yashiro, H. Miura, C. Kodama, T. Seiki, A. T. Noda, Y. Yamada, D. Goto, M. Sawada, T. Miyoshi, Y. Niwa, M. Hara, T. Ohno, S. Iga, T. Arakawa, T. Inoue and H. Kubokawa, 2014: The Non-hydrostatic Icosahedral Atmospheric Model: Description and development. *Prog. Earth Planet. Sci.*, **1**, 18, doi:10.1186/s40645-014-0018-1.
-