



An introduction of Scalable Computing for Advanced Library and Environment (SCALE)

2016.9.7 理研計算科学研究機構 八代尚



The SCALE developers(敬称略)

- ・ 理研・計算科学研究機構
 - ・ 富田浩文、西澤誠也、八代尚、足立幸穂、佐藤陽祐、山浦剛、吉田龍二、河合佑太、安藤和人
 - ・ 三好建正、Guo-Yuan Lien、本田匠
 - ・ 石川裕、堀敦史、亀山豊久、大野善之(NEC)、島田明男(日立)、今田俊寛(PEZY)、佐藤三久、村井均、下坂健則(日立)、安部達也(千葉工)、丸山直也、Mohamed Wahib
- ・ マイアミ大学：宮本佳明
- ・ 海洋研究開発機構：清木達也、野田暁
- ・ 東京大学：三浦裕亮、西川雄輝、松岸修平
- ・ 兵庫県立大学：島伸一郎
- ・ 気象研究所：梶野瑞王

“Standing on the shoulders of giants”

- ・ 開発に際し、その思想とスキームに影響を受けた気象モデル・気候モデルに敬意を示し、以下に記します。
 - ・ WRF
 - ・ JMA-NHM
 - ・ ASUCA
 - ・ CReSS
 - ・ COSMO
 - ・ ARPS
 - ・ NICAM
 - ・ MIROC
 - ・ DCPAM

Contents

- ・ SCALEの存在意義
- ・ SCALEで何が出来るか
- ・ SCALEで何をやったか
- ・ これからSCALEをどう発展させていくか

なぜ、今、日本で、新しい気象モデルが必要なのか？



気象・気候モデルとコンピュータ

- ・ 気象(コミュニティ、学者)は、最も古くからコンピュータを使ってきた
- ・ 気象予測性能の向上はコンピュータの性能の向上と共に成し遂げられてきた
- ・ 我々はこれからも、最先端のコンピュータを利用していくつもり

コンピュータの変遷に追従する必要性

- ・ より高速にたくさん計算するために、コンピュータのトレンドはどんどん変わっている
 - ・ 演算性能とデータ転送性能の向上率の違い
 - ・ ベクトル機→スカラー機
 - ・ 単一ノード→並列ノード
 - ・ strong CPU→GPU, many-core CPU
- ・ 計算機トレンドの変化に「継続的に」ついていけるモデルコード開発が必要

計算の大規模化に耐える必要性

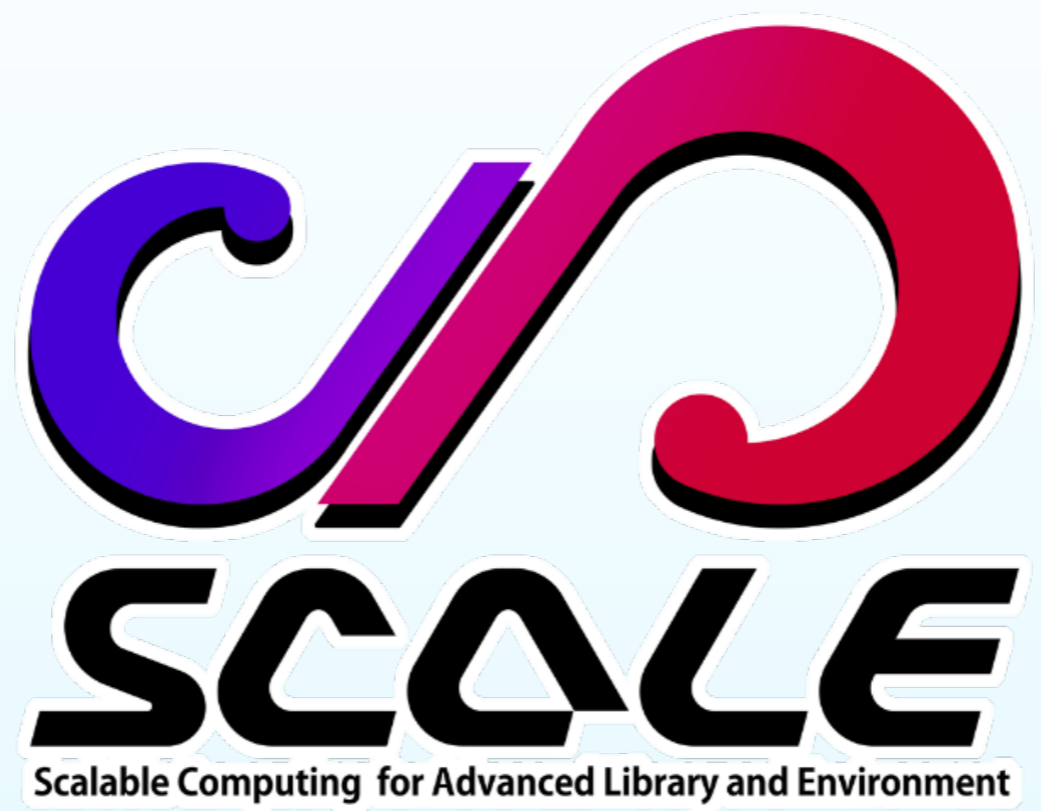
- ・ より高解像度、大アンサンブルのシミュレーションを行いたい
 - ・ ものすごいサイズ、ファイル数のデータが入出力される
 - ・ データの処理＝計算時間
 - ：シミュレーションだけスーパーコンピュータで高速に行っても、データ同化や前後処理・可視化・解析が律速してはどうしようもない
- ・ シミュレーション研究の一連の作業すべてで「ビッグデータ」を扱えるツールを揃えることが必要

気象・気候モデル開発の抱える問題

- ・ 近年の気象・気候モデル開発は昔より大変になっている
 - ・ もともと気象モデルは学際的な研究成果の複合体
 - ： 流体力学、雲物理学、大気放射学、統計力学、大気化学、 etc.
 - ・ さらに近年のコンピュータで効率よく計算するために、習得すべきプログラミング知識も増える一方
 - ： MPI、OpenMP、オブジェクト志向、OpenACC、 etc.
- ・ 研究するためのコンポーネントを網羅し、そのどれもが高速に動くよう整備する必要がある

より公正なシミュレーション性能比較に向けて

- ・ 科学的手法の根幹である「再現性」について、モデルシミュレーションはそれを厳密にコントロールできるはず
- ・ 気象・気候モデルはその巨大なコード規模と複雑なコンポーネント同士の相互作用により、問題を単純化するのが難しい
 - ：素過程と相互作用の研究がしやすいモデルプラットフォームが欲しい
- ・ もちろん、単なるスキームのコレクションに意味はない
 - ：適切で詳細な結果比較から、モデル化の違いが生む現象の再現性の違いを明らかにしたい



SCALEってどんなソフト？



SCALE講習会 2016.9.7 @FOCUS

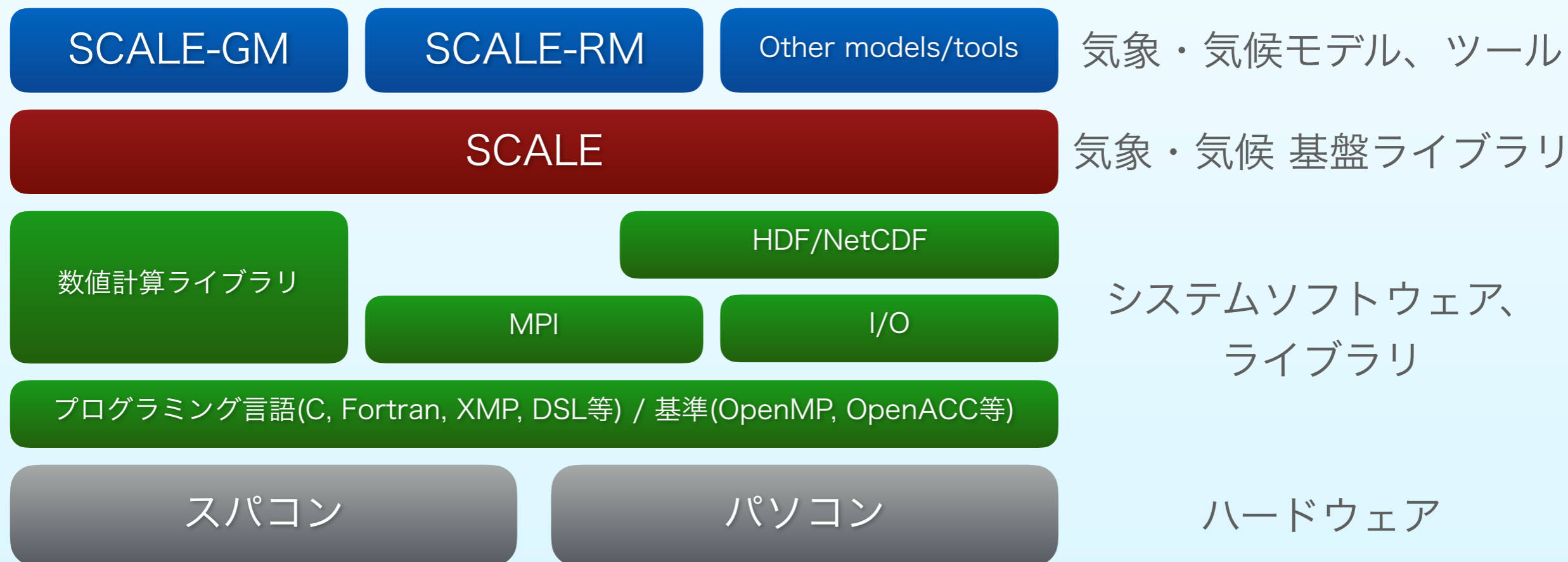


基盤ライブラリを元にしたモデル開発

階層的な構造で、各要素の独立性、再利用性、容易な組み合わせの変更を実現
：基盤ライブラリとして開発

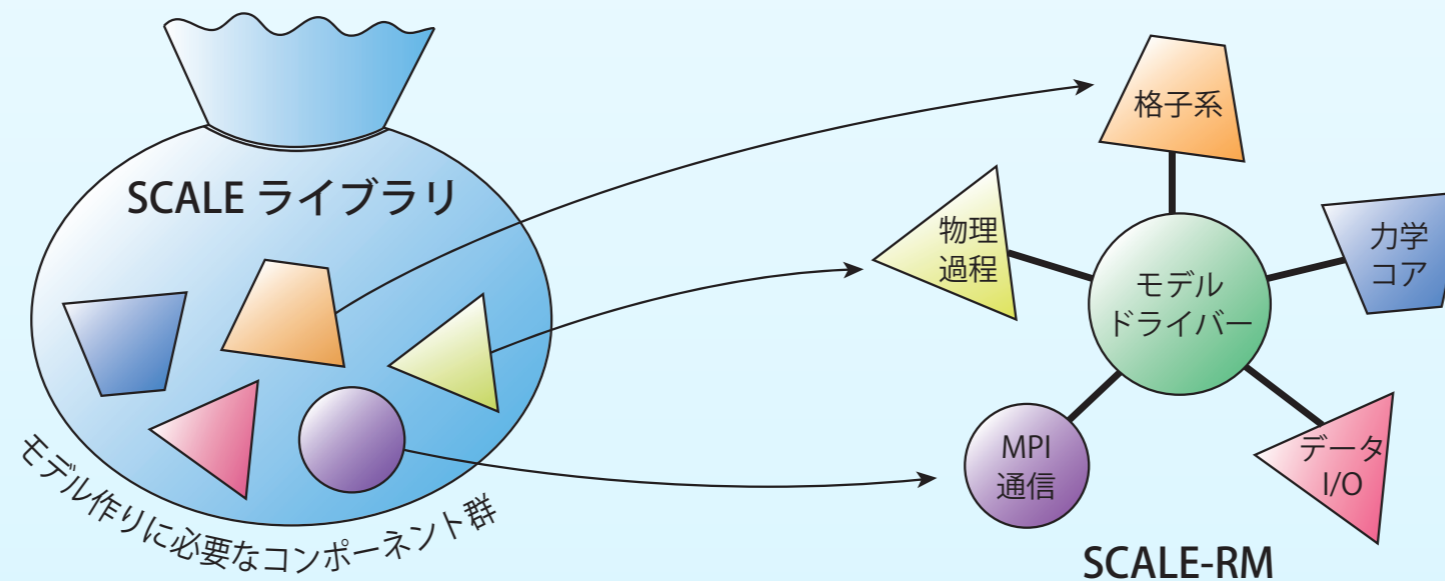


Scalable Computing for Advanced Library and Environment (SCALE)



SCALEの特徴

- ・ オープンソース
 - ・ BSD2条項ライセンス
 - ・ 商用、非商用に関わらず自由な利用・改変・再配布が可能
- ・ ライブラリと共に、それを組み合わせて構築した気象モデルが同梱されている
 - ・ RM: Regional Model, GM: Global Model



SCALE開発体制の特徴

- ・ 開発へ参入しやすいように：オープンソース
- ・ 多人数での開発を前提としたソースコード管理
 - ・ Gitとそのツール(Gitlab)、開発フローモデル(git-flow)の利用
 - ・ コードの共同所有
 - ・ コードのピアレビュー
- ・ 個々の要素開発がしやすいように：理想実験の網羅的な整備
- ・ 継続的インテグレーション(CI)手法の採用
 - ：各テストケース（理想実験、現実実験）の結果がソースコードを変更しても変わらないことをマメに確認
- ・ プログラミング原則に従った開発
 - ・ **KISS**(Keep It Simple and Small)、**DRY**(Don't Repeat Yourself)、**YAGNI**(You Aren't Going to Need It)、**DTSTTCPW**(Do The Simplest Thing That Could Possibly Work)、**SLAP**(Single Level of Abstraction Principle)、名前可逆性、文芸的プログラミング、とか

ライブラリに含まれるコンポーネント

フレームワーク

- ・ バルクジョブ機能：1回のジョブで複数事例を並列実行
- ・ CF規約に基づくNetCDFファイル I/O

領域モデルのためのフレームワーク

- ・ 距離座標に基づいた三次元カーテシアン格子系
- ・ MPI通信を用いた二次元領域分割
- ・ 各種地図投影法
- ・ ネスティング：1wayに対応
 - ・ オンライン実行：複数ドメインの計算を同時に実行
 - ・ オフライン実行：あらかじめ計算した親ドメインの結果を用いて子ドメインを計算
- ・ 理想実験のための初期値データ生成
- ・ 標高・土地利用区分データの変換作成
- ・ 初期値・境界値データ変換作成
 - ・ WRF-ARW、GrADSフォーマットでの入力に対応

領域モデルのための力学コア

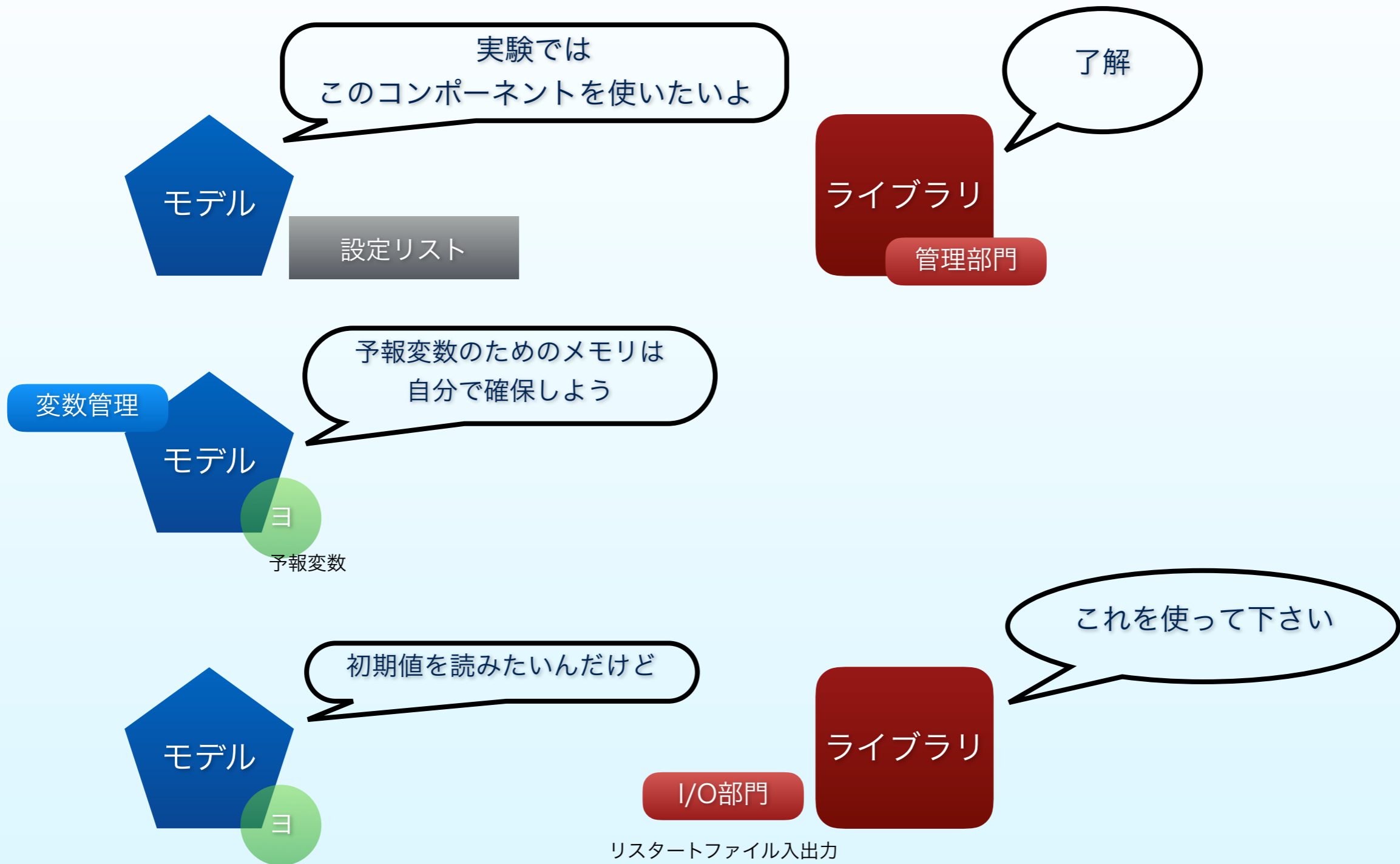
- ・ 方程式系: 3次元完全圧縮非静力学方程式系
- ・ 数値解法: 陽解法と陰解法の両方を実装
 - ・ 水平陽解法-鉛直陽解法 (HEVE)
 - ・ 水平陽解法-鉛直陰解法 (HEVI)
- ・ 空間差分: フラックス形式
 - ・ 2次中央差分、4次中央差分、6次中央差分
 - ・ 3次風上差分、5次風上差分
- ・ 時間差分
 - ・ Heun型3次ルンゲクッタスキーム
 - ・ Wicker and Skamarock (2002) の3段ルンゲクッタスキーム
 - ・ 4次ルンゲクッタスキーム
- ・ 非負保証:
 - ・ フラックス修正法 (FCT; Zalesak, 1979)
 - ・ Koren (1993) によるフィルター
- ・ 数値フィルター: 4次超粘性・拡散
- ・ 地形に沿った座標系

ライブラリに含まれるコンポーネント

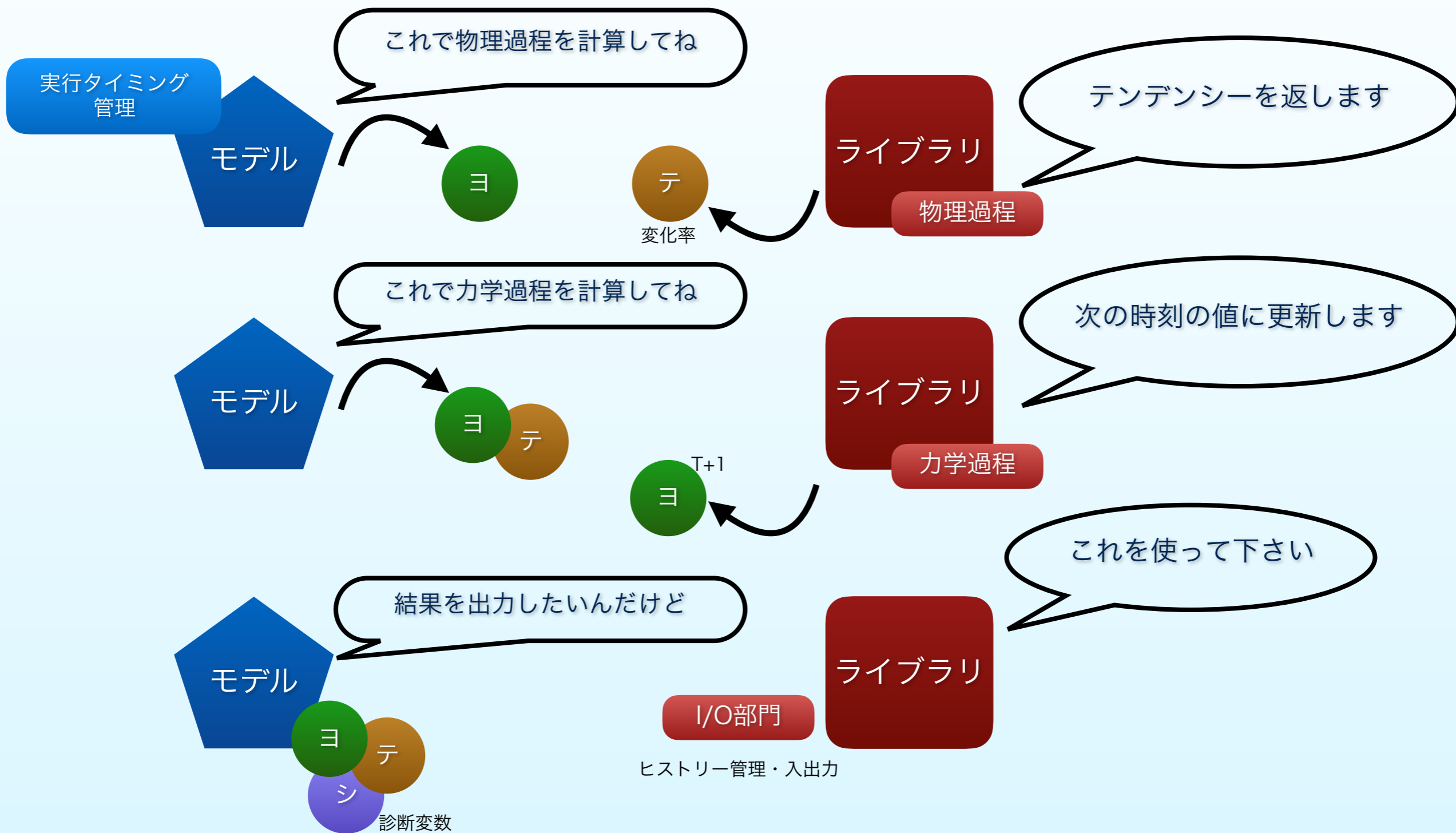
物理過程

- 乱流過程: 複数から選択可能
 - Smagorinsky (1963) & Lilly (1962) 型のサブグリッドモデル (Brown et al. (1994) と Scotti et al. (1993) による補正)
 - Deardorff (1980) サブグリッドモデル
 - Mellor and Yamada (1982); Nakanishi and Niino (2004) によるMYNN2.5境界層モデル
- 雲微物理: 複数から選択可能
 - Kessler (1969) による 3-class 1 モーメントバルクモデル
 - Tomita (2008) による 6-class 1 モーメントバルクモデル
 - Seiki and Nakajima (2014) による 6-class 2 モーメントバルクモデル
 - Suzuki et al. (2010) による 1 モーメントビン法モデル
 - Shima et al. (2009) による超水滴法モデル
- 放射過程:
 - Sekiguchi and Nakajima (2008) による 相関k分布法ブロードバンド大気放射伝達モデル
- 地表面モデル
 - 海面モデル: 初期値固定・外部データ入力・スラブモデル
 - 陸面モデル: 熱拡散・バケツモデル
 - 都市モデル: Kusaka et al. (2001) による 単層キャノピーモデル
 - バルク交換係数(陸面および海面): Beljaars and Holtslag (1991); Wilson (2001) の普遍関数によるバルク法、もしくは Uno et al. (1995) による Louis 型バルク法

ライブラリとモデルの関係

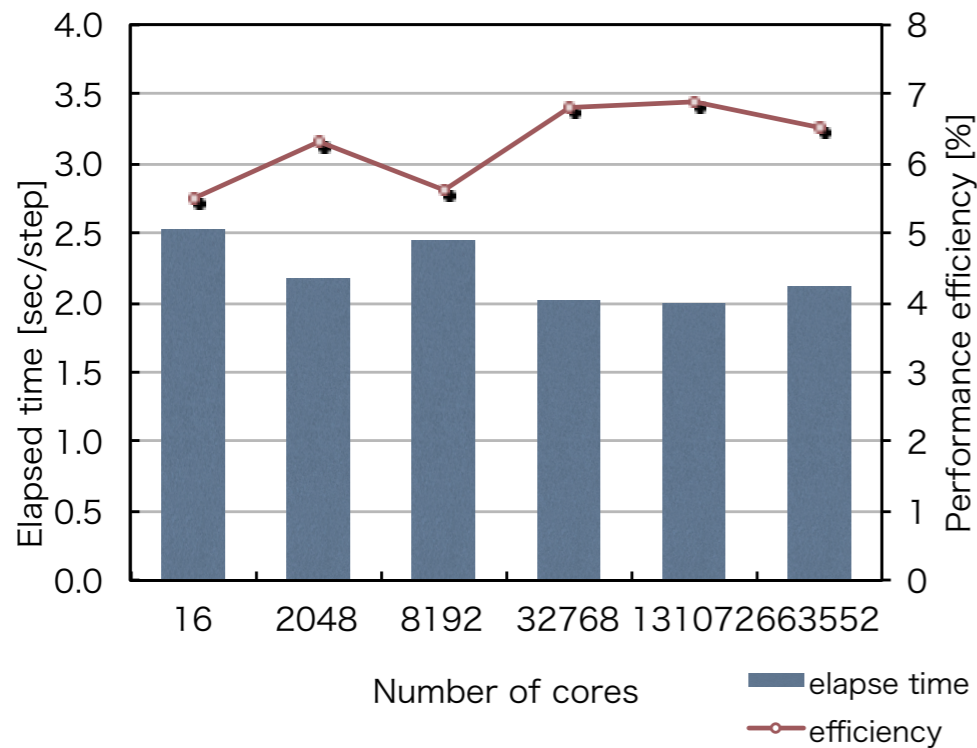


ライブラリとモデルの関係

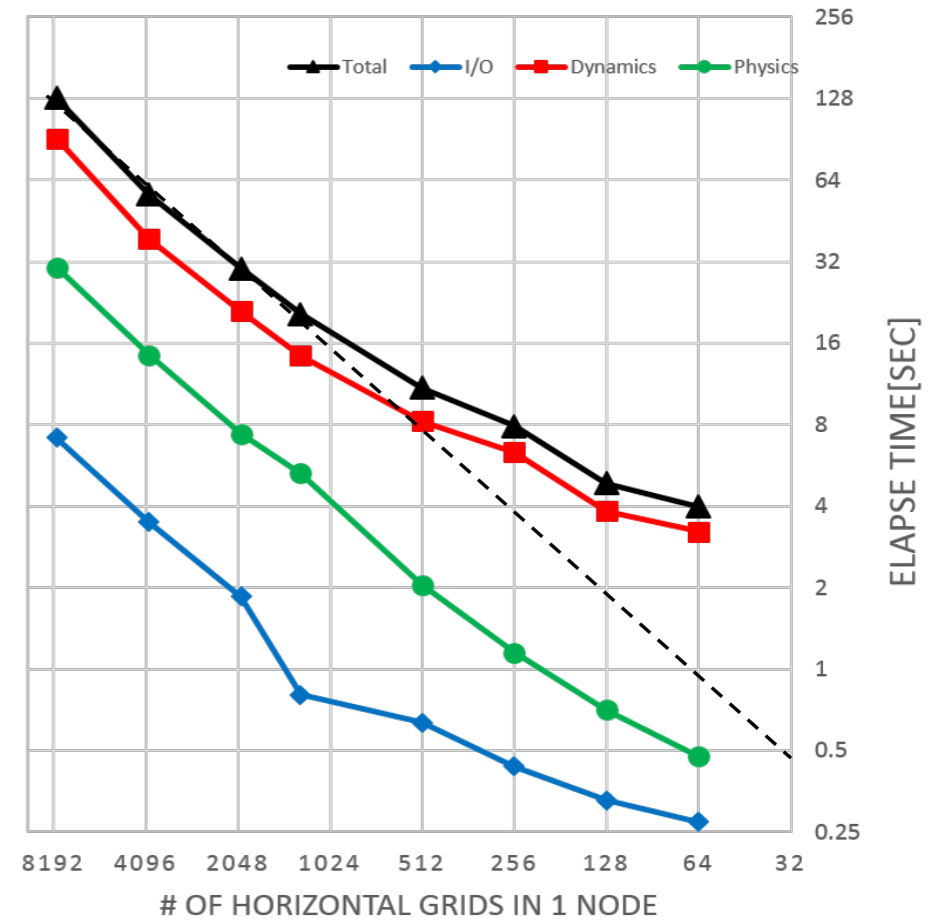


計算性能

ノード数と格子数を同じ割合で増やした場合
(=ウィークスケーリング)
: どこまで大規模な計算に耐えられるか?



総格子数を変えずにノード数を増やした場合
(=ストロングスケーリング)
: どれだけ同じ実験を早く終わらせられるか?



- ・ 少ないノード数から京コンピュータ全系まで、性能を維持したまま規模を拡大できる = スケーラブルである



SCALEを使ってどんな研究をしてきたか？

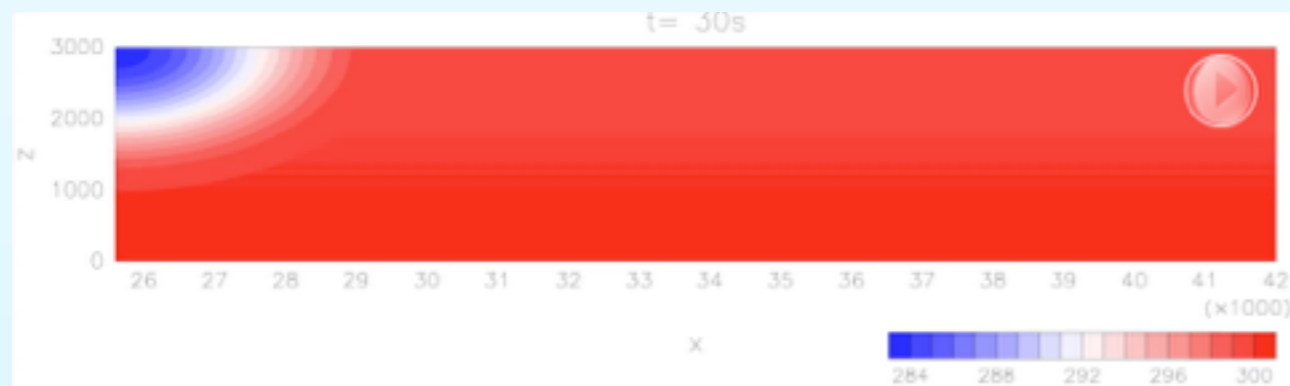


SCALE講習会 2016.9.7 @FOCUS

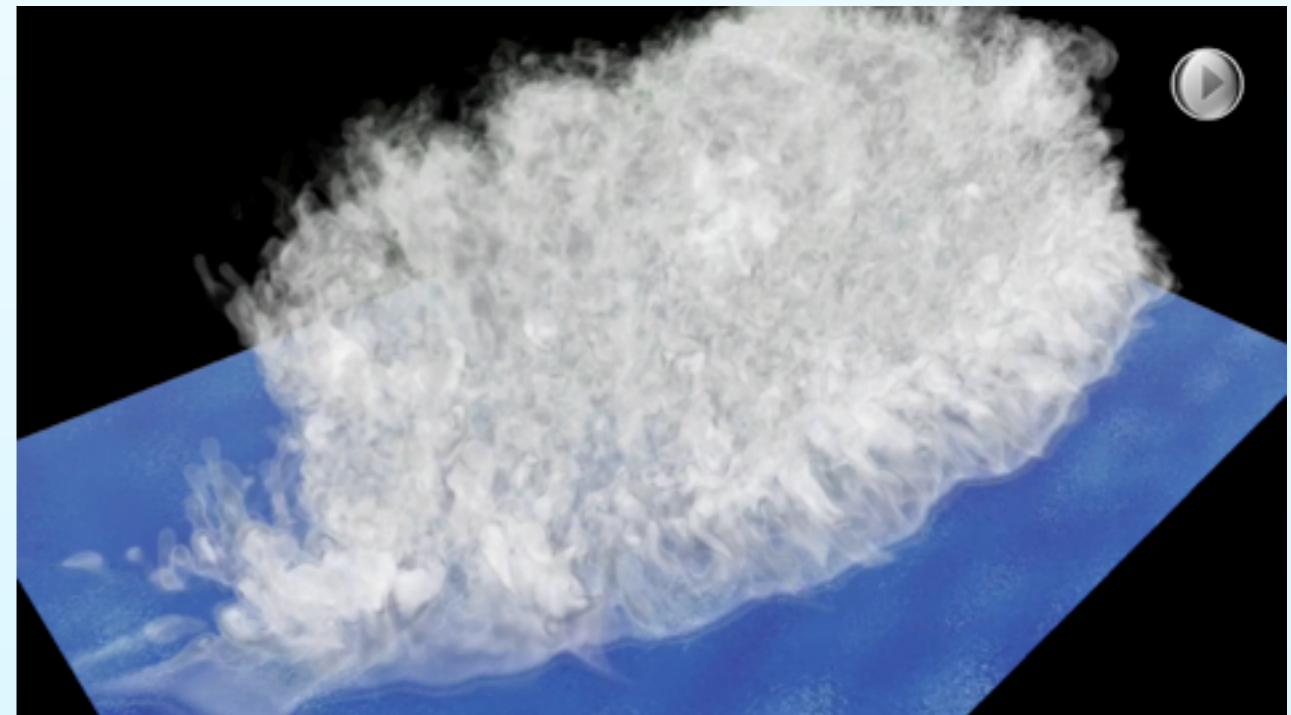


Focusing on "scales" by using SCALE

- *SCALE is scalable.*
 - ・ 高い性能で、小規模な計算からスーパーコンピュータを用いた大規模な計算までをカバーする
- *SCALE enables expression of the multi-scale interaction.*
 - ・ 巨大な計算資源を効率よく使える
= 今までよりも広い領域でのシミュレーションを高解像度で行う事ができる
 - ・ 小さなスケールの現象と大きなスケールの現象を同時に表現し、相互作用を議論できる



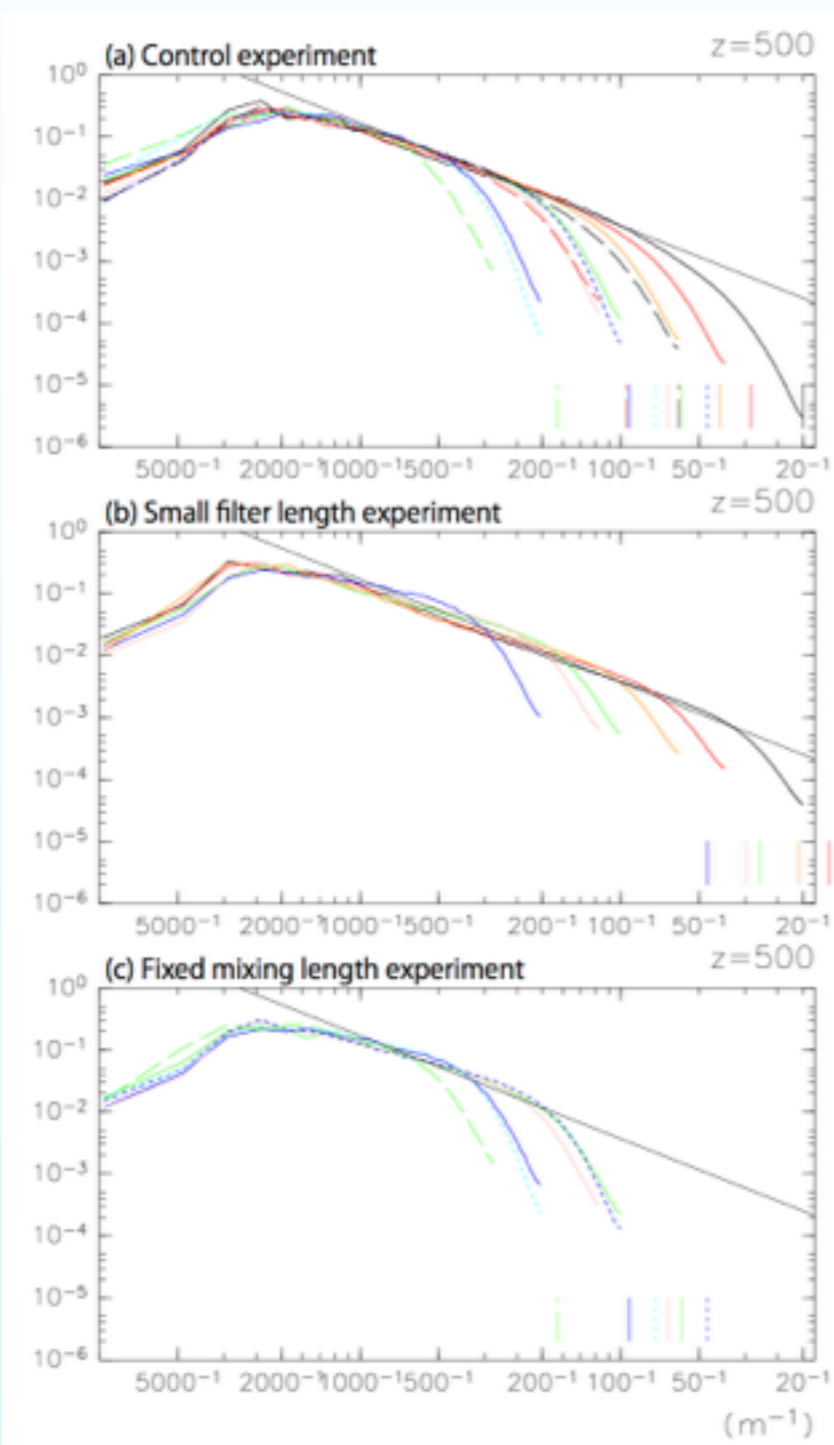
Density current test case $\Delta x = 1.6m$



GCSS Squall line test case $\Delta x = 100m$

LESにおける境界層乱流に対する格子アスペクト比の影響

Nishizawa et al., 2015, GMD

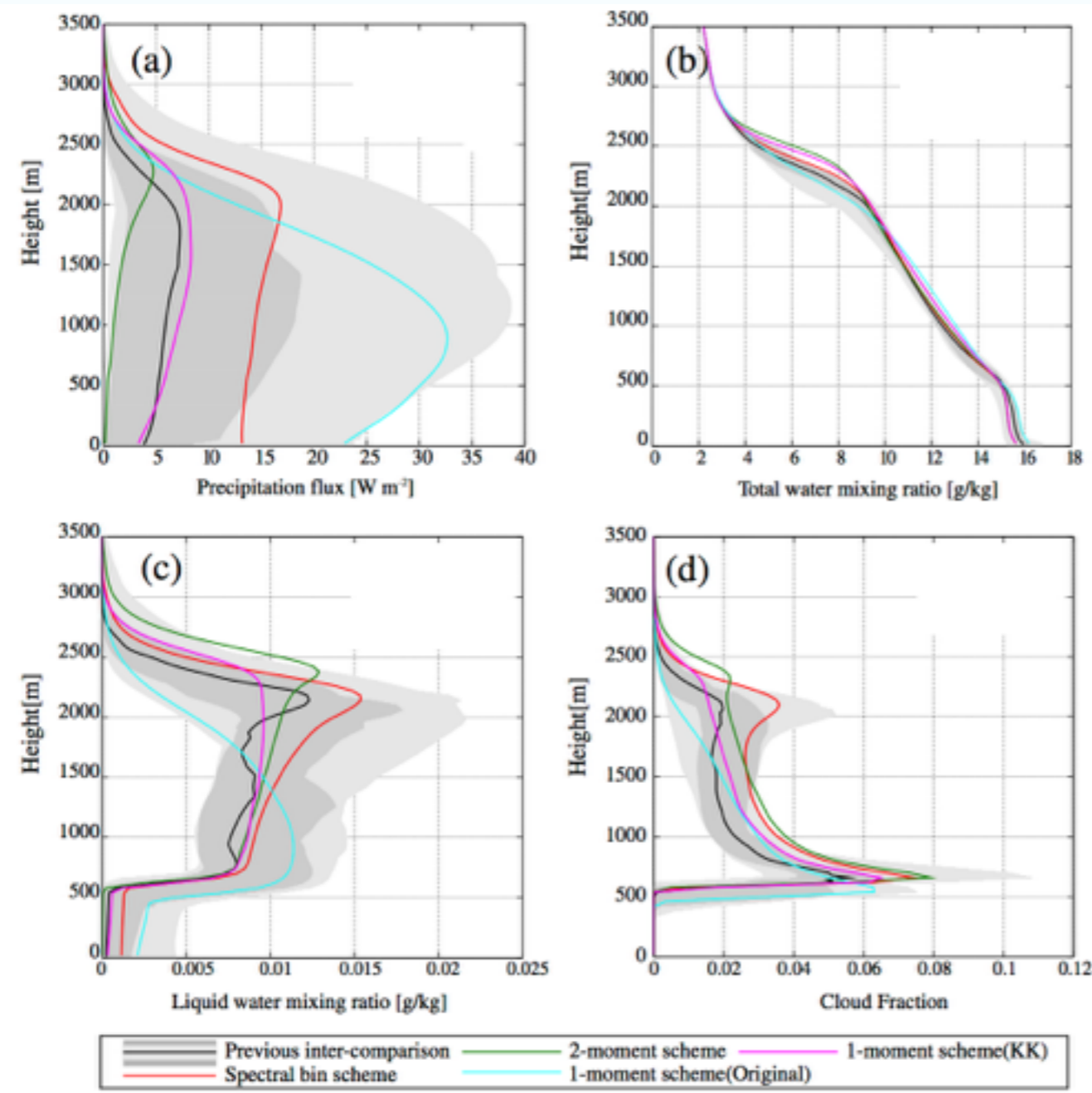


- Large Eddy Simulation (LES)としての利用
 - 水平格子間隔：10~150m
 - 鉛直格子間隔：5~30m
 - ドメイン：水平9.6km四方、鉛直3km
 - 水蒸気・水物質を含まない境界層乱流実験
- 理論で予測される、 $-5/3$ 乗則に従うエネルギースペクトル分布を得るためには、
 - サブグリッドモデルで格子間隔の2倍のフィルター長が必要
 - ：数値フィルターと同じ空間解像度
 - サブグリッドモデルで格子アスペクト比を考慮した混合長が必要

背の低い積雲のシミュレーションに 雲微物理スキームの違いが及ぼす影響

Sato et al., 2015, PEPS

- LESとしての利用
 - 実験設定はGCSS/RICOのケース
 - 水平100m、鉛直40m格子
 - ドメイン：水平12.8km四方、鉛直4km
- 3種類の雲微物理スキームで比較実験
 - 1モーメントバルク法では降水が早く始まり、総降水量も多い
 - 2モーメントバルク法では降水の開始が遅く、総降水量は少ない
 - 雲→雨への変換過程が重要
：感度実験で定量的に明らかに

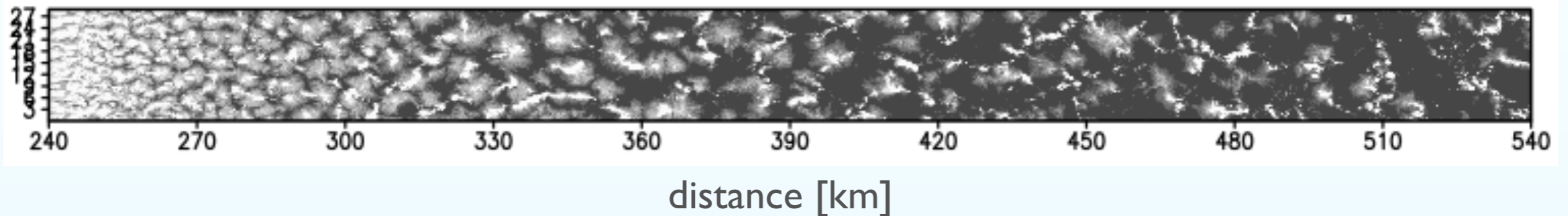


広領域層積雲実験における雲量の遷移

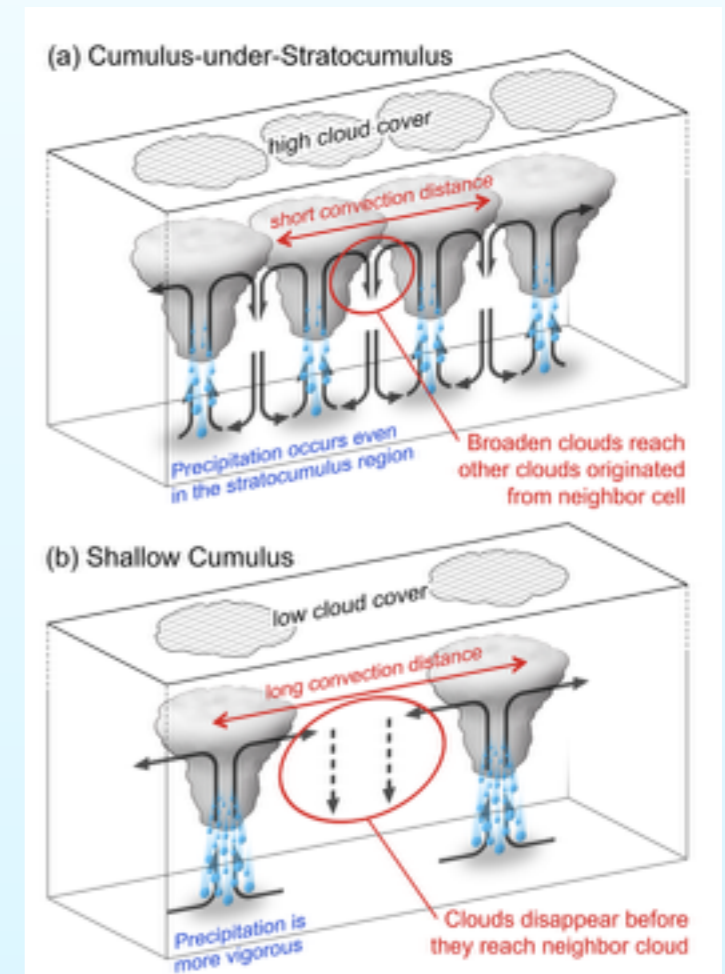
Sato et al., 2015, SOLA

←エアロゾル量多い

熱フラックス多い→



- LESとしての利用
 - 実験設定はDYCOMS-II RF01をベースに
 - 水平50m、鉛直5m格子
 - ドメイン：水平768kmx28km、鉛直2km
 - 下層からの熱フラックスとエアロゾル量に関し、東西方向になだらかなコントラストを与える
- 雲量が高い領域から低い領域へ遷移する様子を再現
 - 境界条件と雲量との関係性を定量的に明らかに
 - GCMでの低層雲再現性の向上に

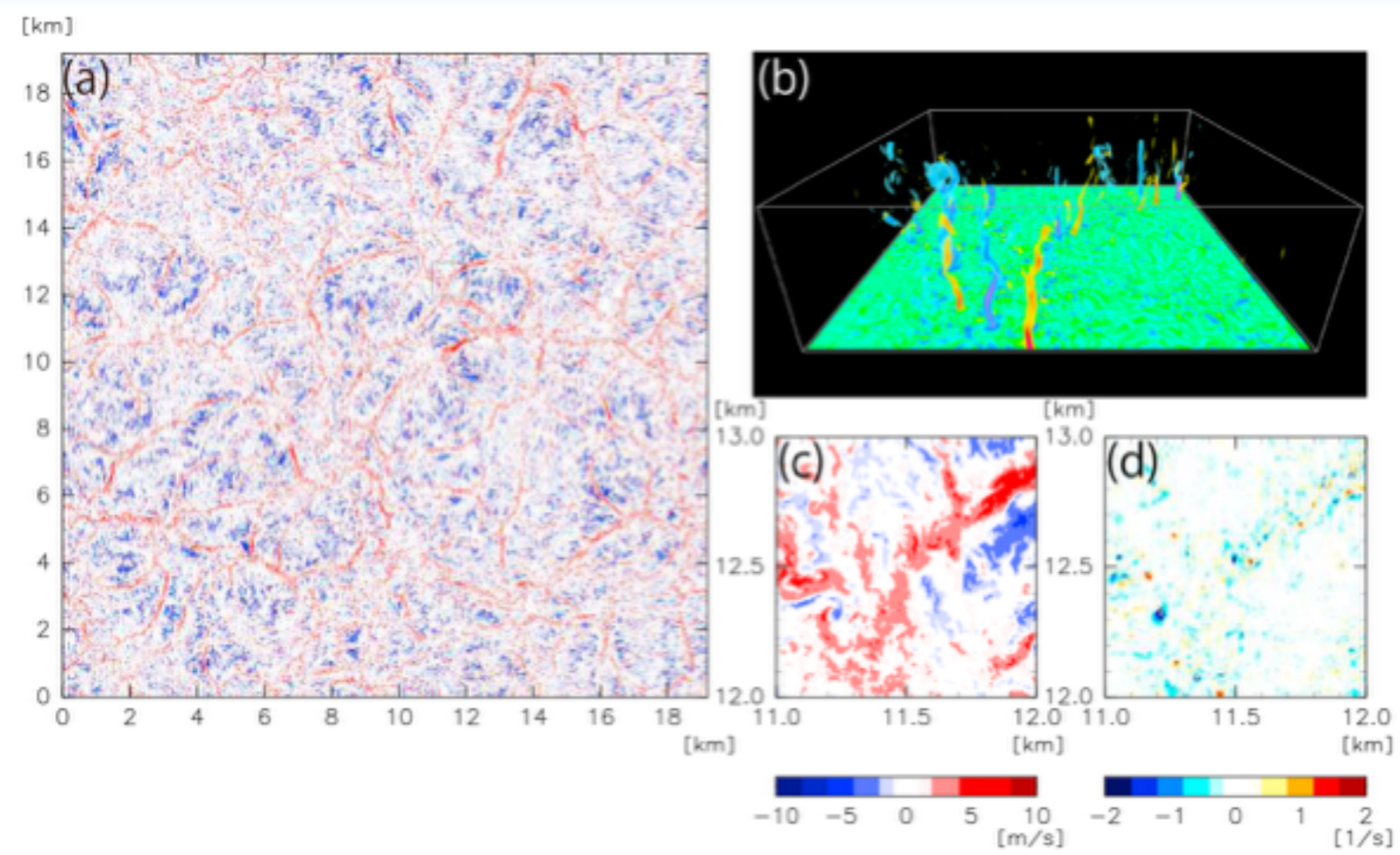


火星のダストデビル(塵旋風)のシミュレーション

Nishizawa et al., 2016, GRL
(Research spotlight of EOS)

- LESとして利用

- 水平・鉛直5m格子
- ドメイン
: 水平・鉛直20km
- 火星環境下での境界層乱流実験

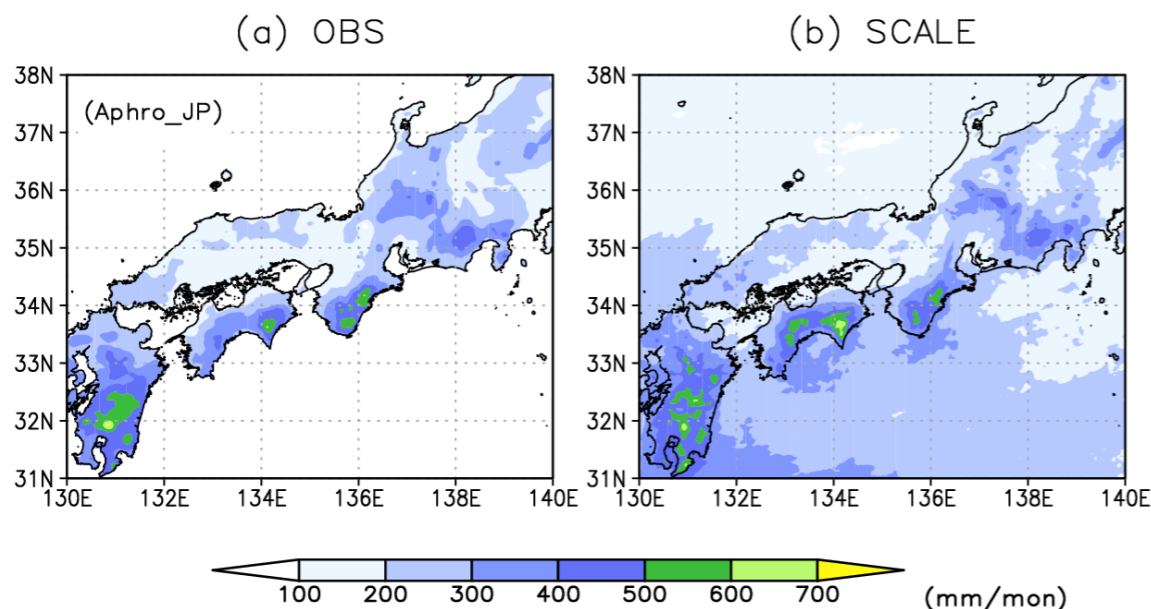


- 3000個以上のダストデビルの発生に成功

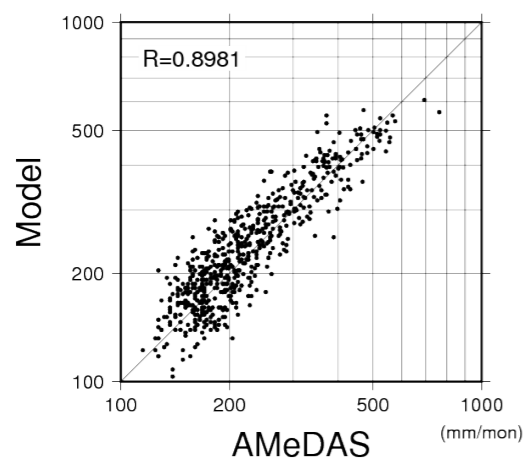
- ダストデビル(水平スケール数m~数百m)からより大規模な対流活動(~10km)までを同時に表現
- 大きさや強さの統計的性質を解析
- 有人探査機における火星への着陸・地上活動への貢献に期待

ダウンスケーリング気候実験

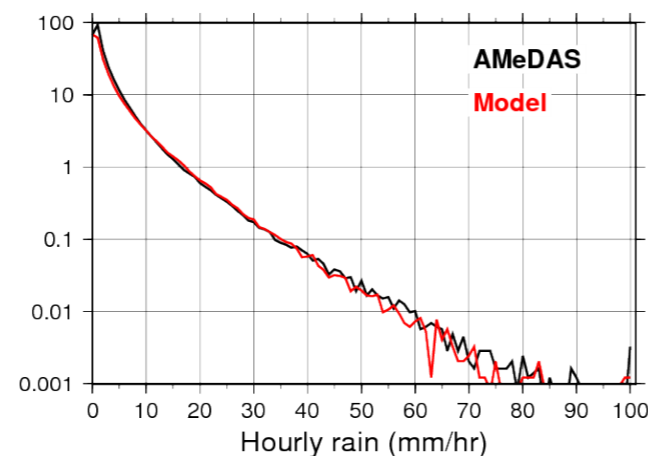
Nishizawa et al., submitted, Adachi et al., in prep



夏季の月積算降水量(3年平均)



月積算値の相関

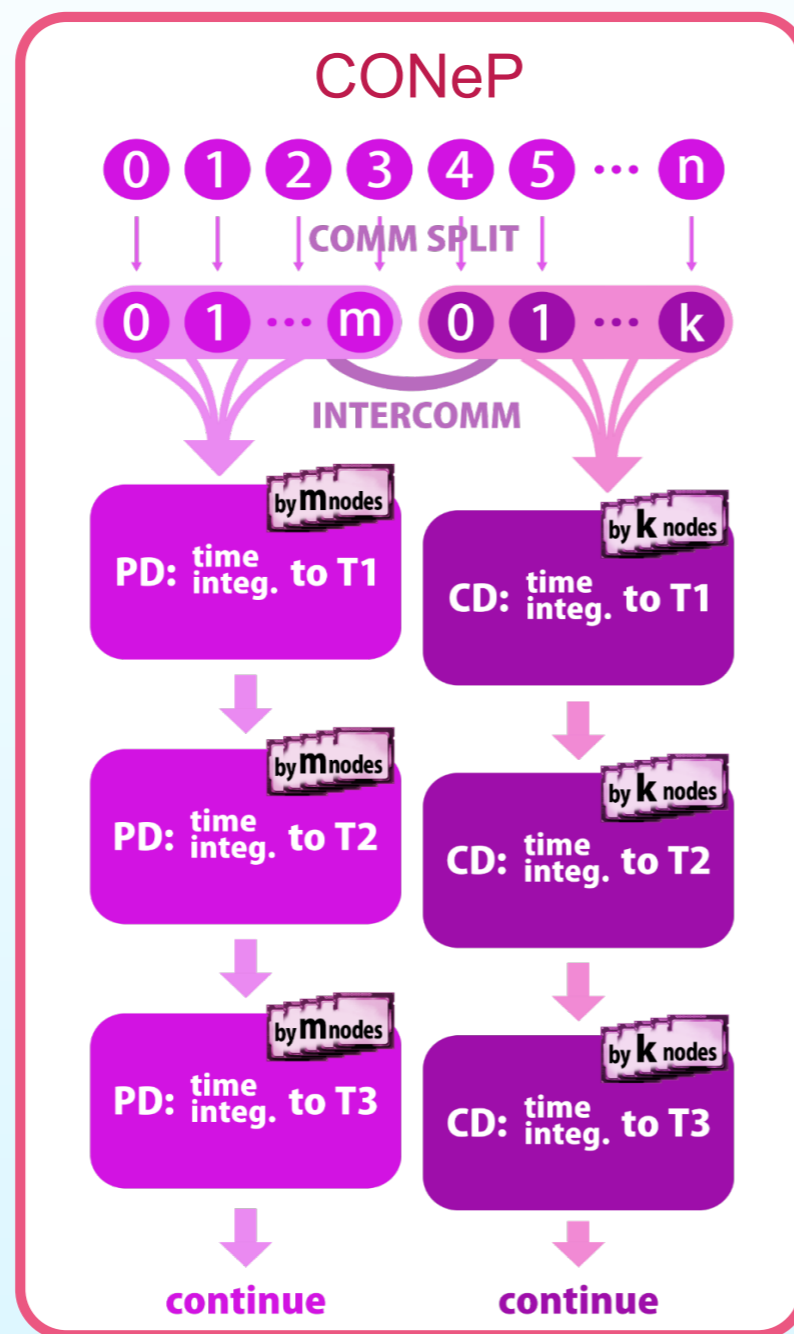
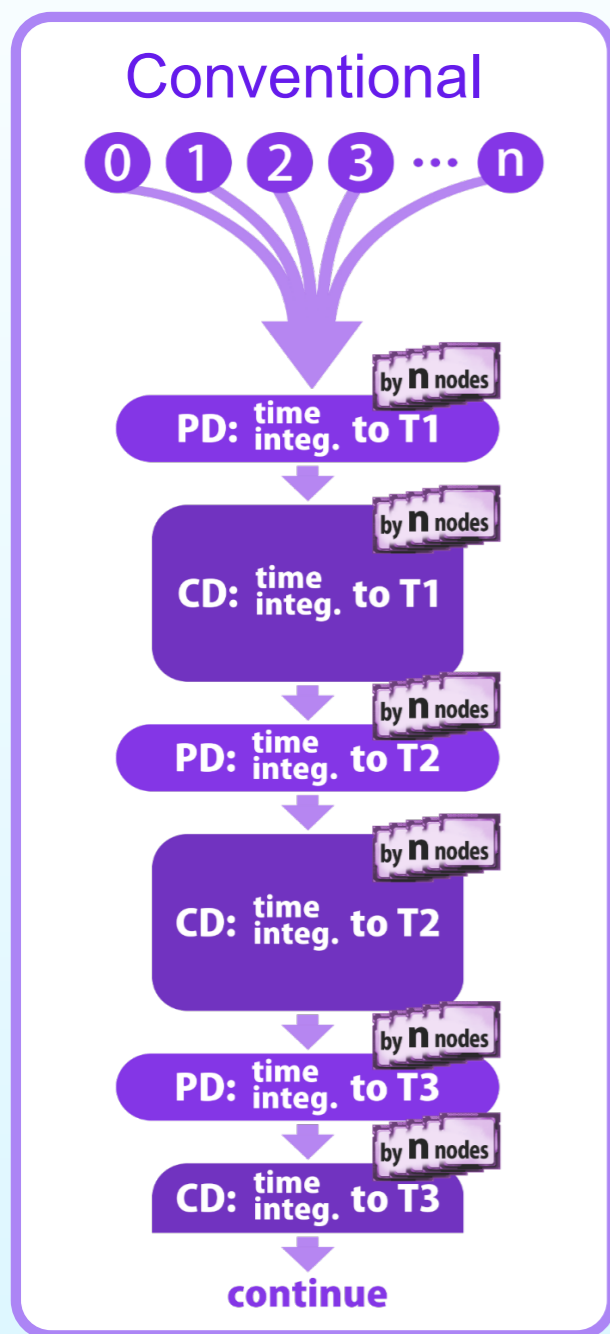


1時間降水量のヒストグラム

- ・ 領域気候モデルとして利用
- ・ 日本域を2段ネスティングでシミュレーション
- ・ 第1ドメイン (2500km四方) : 水平7.5km格子、36層
- ・ 第2ドメイン (1000km四方) : 水平2.5km格子、60層
- ・ 夏季のタイムスライス実験を実行、現在気候での降水をよく再現する (左図)
- ・ 直接ダウンスケーリングや擬似温暖化手法を用いて将来の降水量変化について解析中

高速なネスティングシステムの開発

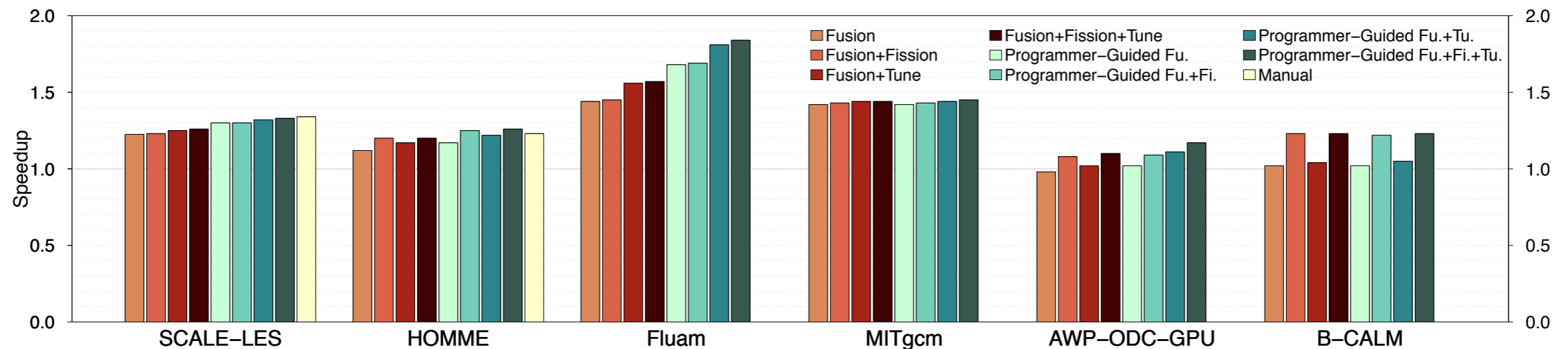
Yoshida et al., 2016, submitted



- CONeP: より効率的なオンラインネスティング法
- ネスティングを用いた領域気象実験で、本気で高速に計算するつもりなら、一般的に用いられている方法では限界がある
- 親ドメインも子ドメインも一番高速に計算できるノード数をそれぞれ選択出来るように

GPUでの性能最適化

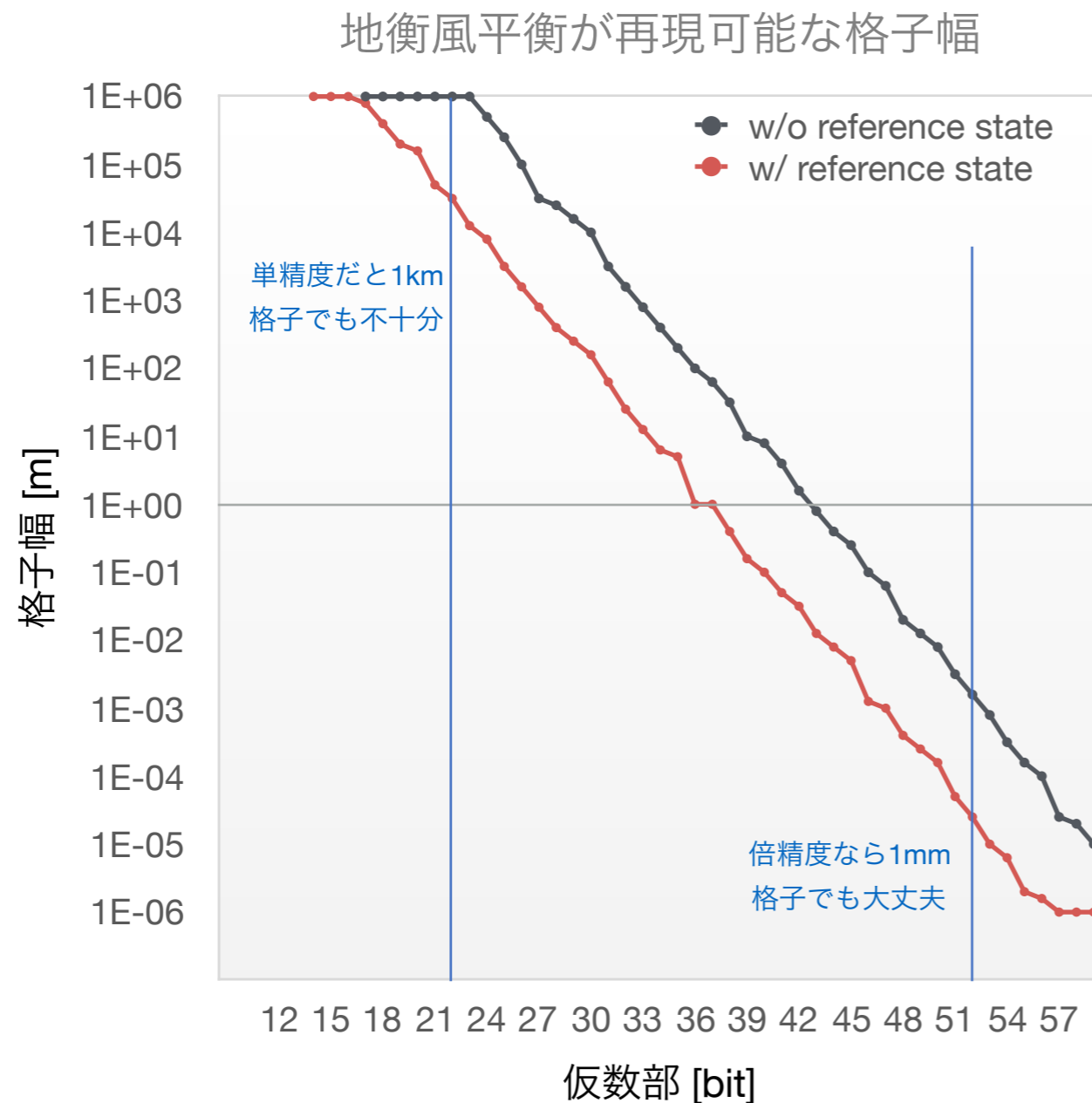
Wahib and Maruyama, 2014; 2015



- 力学過程 (HEVE) をCUDAでGPU向けに書き直し
 - 気象モデルの力学過程はかなり多くのループブロックで構成されていることに気がつく
 - 個々のループブロックをCUDAのカーネルにするより、いくつかまとめたり分割したほうが速くなる
 - 最適な「まとめ上げ」を行うシステムをSCALEで開発
 - 他の気象・気候モデルでも有効であることを示した

単精度での性能評価

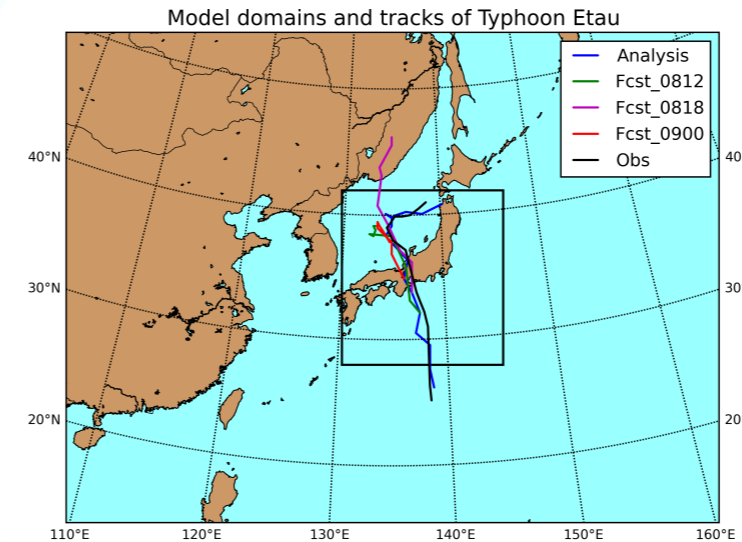
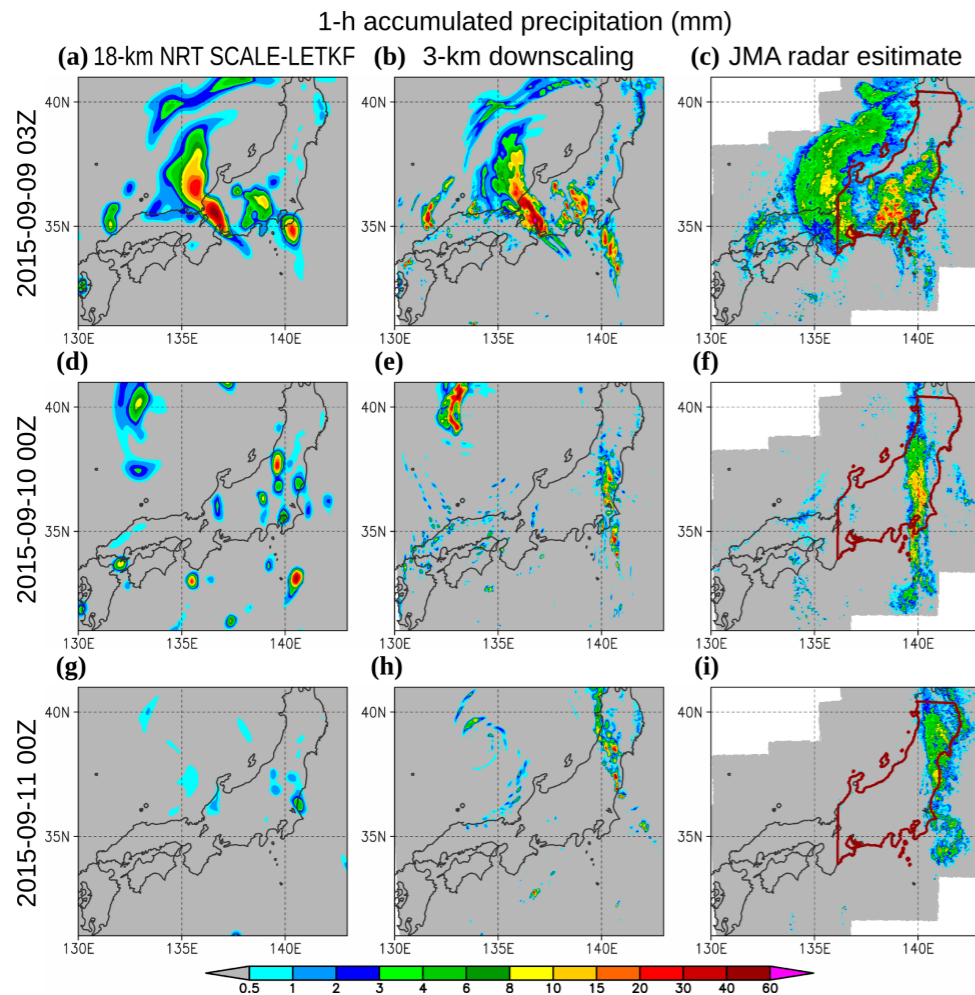
Yamaura et al., in prep.



- ・ 倍精度よりも単精度計算の方が高速
：移動するデータ量が減るため
- ・ 浮動小数点の計算には丸め誤差があるため、仮数部が十分にならないと計算結果の精度が落ちる
- ・ モデル内で用いる差分方程式が、表現したい平衡状態を維持できる浮動小数点精度の限界を調査
- ・ 平均場からの差をとった値で計算したほうが計算結果の精度を上げられる

データ同化シミュレーション

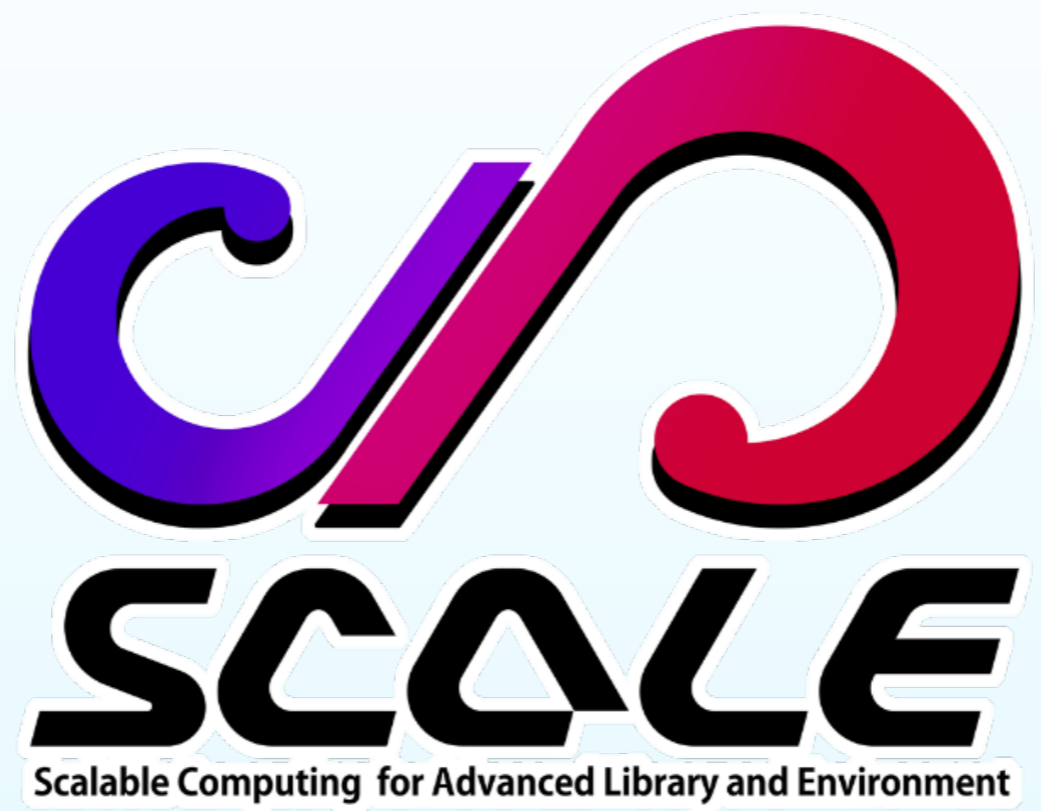
Lien et al., 2016, SOLA, in revision



SCALE-LETKFを用いた準リアルタイム予測システムの計算領域（黒枠内）
実線は平成27年台風第18号 (Etau)の進路と予測結果

SCALE-LETKF(18km格子,右列)の解析値を元に予測実験(3km格子,中列)を行った結果
：鬼怒川氾濫の事例(左列はレーダー観測結果)

- ・ 領域アンサンブルデータ同化システムSCALE-LETKFの開発
- ・ 2015年3月より試験的に準リアルタイム予測実験を継続中
- ・ 平成27年9月関東・東北豪雨でもよい予測結果を示した



これからのSCALE



SCALE講習会 2016.9.7 @FOCUS



今後拡充する予定のコンポーネント

- ・ 全体
 - ・ OpenMPを用いたスレッド並列
 - ・ OpenACCを用いたGPU最適化
- ・ GMフレームワーク、力学過程
 - ・ 全球非静力学、正20面体格子モデル
 - ：NICAMの力学過程（オープンソース化済み）を導入
- ・ RM力学過程
 - ・ 急峻な山岳を取り扱うことの出来る手法：Thin-wall等
- ・ 物理過程
 - ・ 積雲パラメタリゼーション
 - ：Kein-Fritschスキーム、Arakawa-Schubert系スキーム
 - ・ 陸面過程：MATSIRO
 - ・ エアロゾル・化学過程

今後拡充する予定のこと

- ・ データ同化
 - ・ アンサンブルデータ同化システムの利用支援
- ・ 可視化・解析
 - ・ 多くの可視化ツールへの対応とサンプルの整備 (NCL、ParaView等)
 - ・ 並列解析ツールの整備と充実
- ・ ドキュメントの充実
 - ・ モデル実行のためのユーザズガイド
 - ・ 用いた定式の解説書
 - ・ ライブラリとして使うためのガイド
- ・ ユーザー支援
 - ・ 利用講習会の定期的な開催
 - ・ 開発者間の情報交換・ミーティング

まとめと我々の願い

- ・ SCALEは、気象気候研究のための基盤ライブラリです。
- ・ これまでにSCALEを用いて気象モデル(SCALE-RM)を構築し、その性能について実証してきました。
- ・ 我々はSCALEとSCALE-Xモデルをコミュニティソフトウェアとして広め、多くの方に利用してもらいたいと考えています。
 - ・ 利用者として。
 - ・ 開発者として。
- ・ SCALEは、これからまだまだ育てていくところです。
 - ・ 新たな研究、新たな開発、新たな性能の向上、新たな使い勝手の向上。
 - ・ フィードバックを心より歓迎します。



ご清聴ありがとうございました

- ・ SCALEウェブサイト

<http://scale.aics.riken.jp/>

- ・ ユーザーズガイド

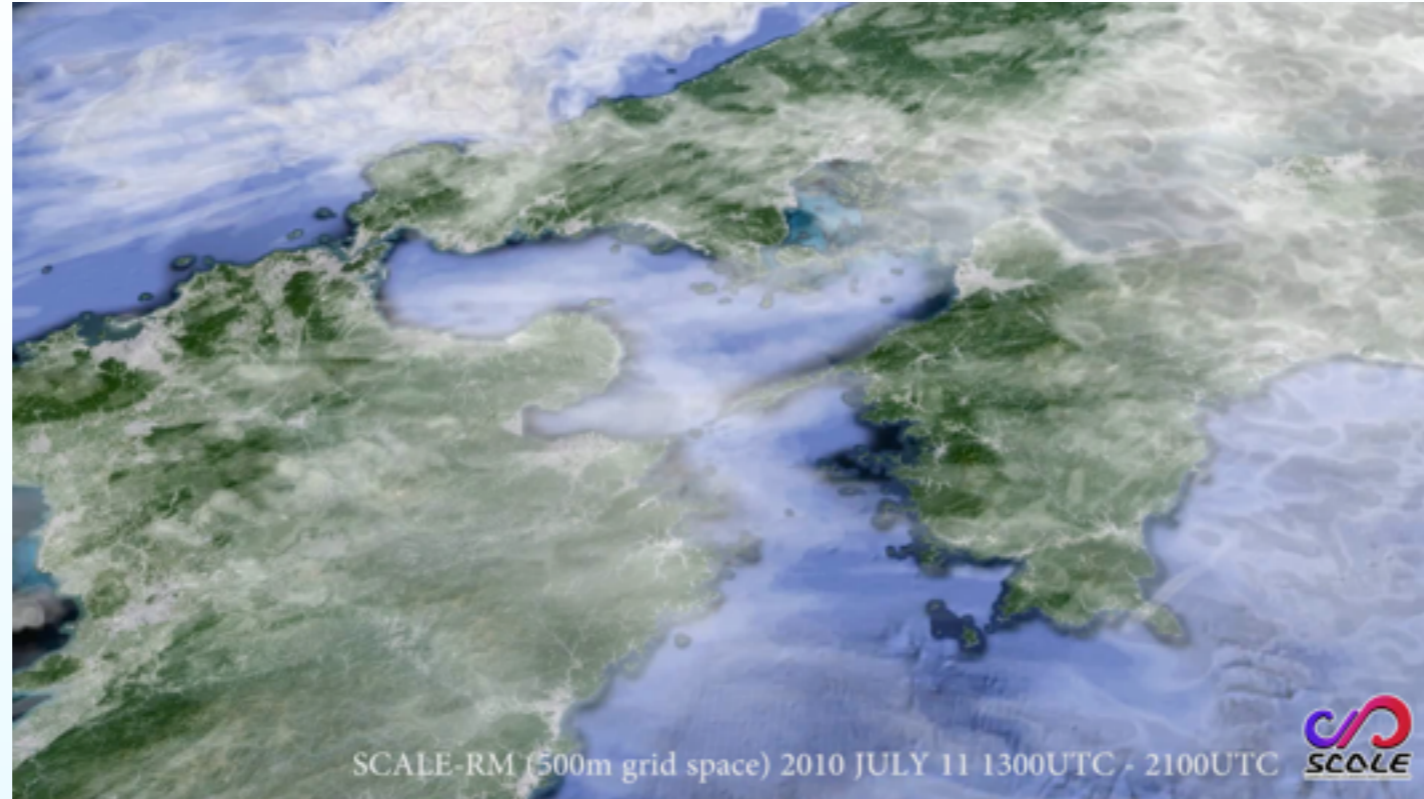
http://scale.aics.riken.jp/doc/scale_users_guide_v5.1.0.pdf

- ・ ユーザーML

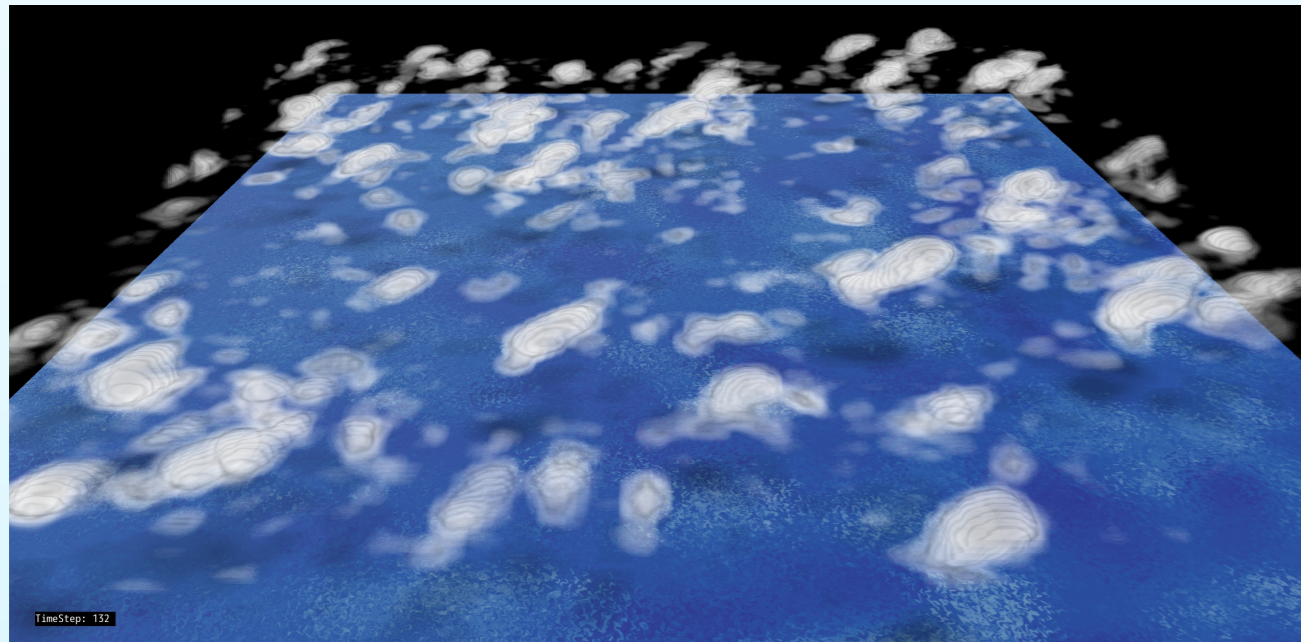
- ・ 登録依頼先：**scale-admin@riken.jp**

- ・ タイトルに「ML登録依頼」、本文にお名前・所属と登録したいe-mailアドレスを書いてお送りください

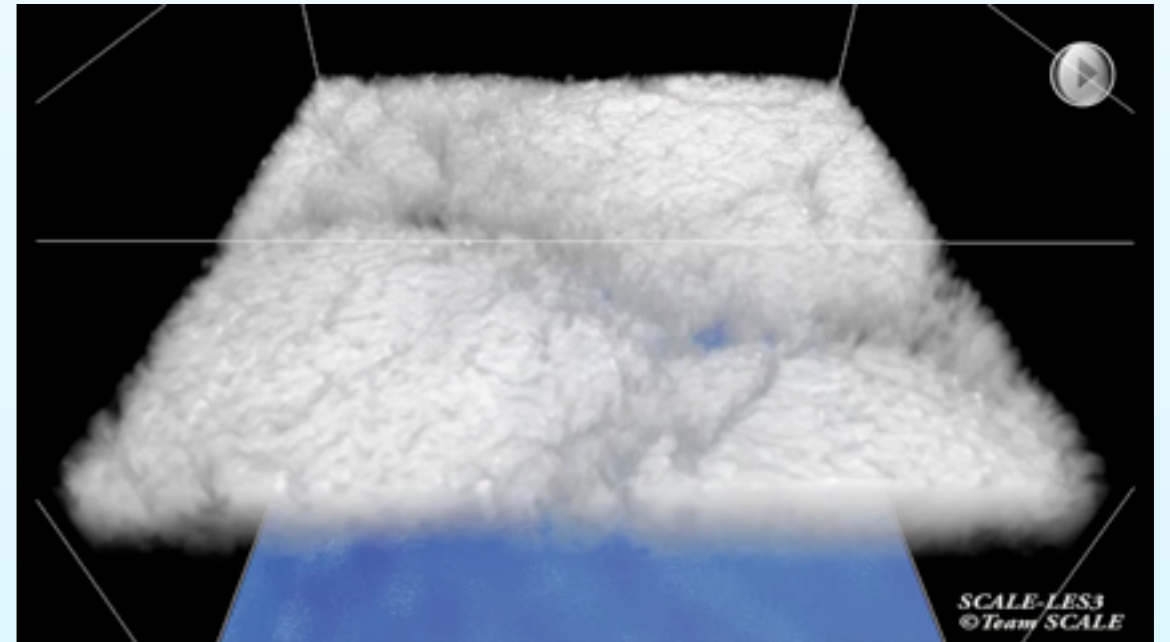




2010年7月
集中豪雨事例
 $\Delta x=500m$



RICO case $\Delta x=100m$



DYCOMS-II case $\Delta x=50m$