

テーマ3

「先進的大規模データ同化手法」

「富岳」成果創出加速プログラム「防災・減災に資する新時代の大アンサンブル気象・大気環境予測」

2020年度成果発表会

八代 尚（国立環境研究所） with テーマ3 チーム

2021年3月16日

テーマ3の課題

全球3.5km1000アンサンブル
データ同化実験

富岳の可用性を実証

シミュレーション+データ科学のグランドチャレンジ

気象場・大気質を同時に同化する
システムの開発検証

気象予測と大気環境予測のシナジー効果
観測ビッグデータの更なる活用

高解像度・大アンサンブルによる
地球環境予測

温室効果ガス排出量の検証高度化
PM_{2.5}等の大気汚染予測性能向上

テーマ3 実施体制

大規模計算手法

国立環境研究所
理化学研究所

衛星データ同化

理化学研究所 千葉大学
気象研究所 宇宙航空研究開発機構

温室効果ガス

国立環境研究所
気象研究所

雲・エアロゾル

国立環境研究所 東京大学 (AORI)
気象研究所 九州大学 北海道大学 京都大学
中国科学院大気物理研究所

大気化学

海洋研究開発機構
国立環境研究所 気象研究所
NASA/JPL

水同位体

東京大学 (生研) 国立環境研究所

テーマ3の全体計画

令和2年度

- 高解像度・大アンサンブル実験の実現と性能評価、先進的大規模データ同化手法の基盤的開発
- 富岳の試行利用期間におけるランドチャレンジ実験（3.5kmメッシュ,1000メンバー）、HPCI第二階層を利用した大気場・温室効果ガス同時同化システムの開発

令和3年度

- 観測ビッグデータ・全球大アンサンブル同化による予測性能へのインパクト評価と課題の抽出・検討
- 気象・温室効果ガス結合同化システムの大アンサンブル(1000メンバー)実験、高解像度(14km)実験

令和4年度

- 先進的大規模データ同化によって得られた知見を社会実装するためのシステムプロトタイプ提示
- エアロゾル同化システムの大アンサンブル実験とその解析、大アンサンブルデータ同化に基づく温室効果ガス吸排出量の推定

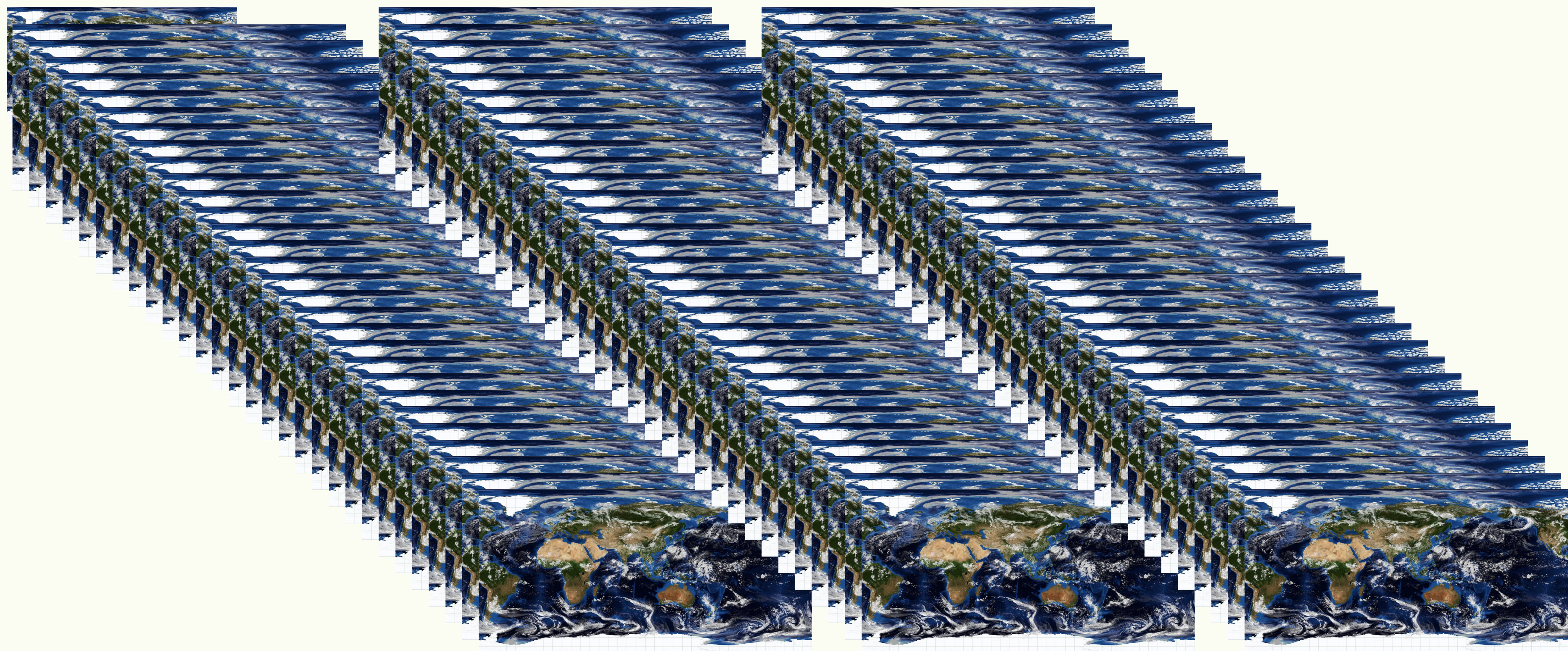
Key Performance Indicator

- 富岳を用いた全球水平3.5kmメッシュ、1024メンバーのアンサンブルデータ同化シミュレーションを実現する
- 全球14kmメッシュでの気象場+大気微量成分のアンサンブルデータ同化シミュレーションを実現する
- 全球56kmメッシュでの温室効果ガスの長期データ同化シミュレーションを実現する

テーマ3の今年度実施計画

- 富岳実機の試験利用が可能であった場合、グラウンドチャレンジ実験である3.5kmメッシュ1000メンバーアンサンブル同化実験を試行する
- 衛星観測データにおいて温室効果ガス等が放射輝度に影響を及ぼす波長の観測値を同化に用いる技術について、開発と初期的な結果を確認する
- エアロゾル・温室効果気体濃度のデータ同化シミュレーションにおいて、気象場の同化方法や数10から1000メンバーまでのアンサンブル数の変化が再現性能に与える効果を調べる
- NICAM-LETKFを用いた水同位体データ同化システムの構築に向けて、水同位体比シミュレーションの気候場再現性を検証
- NICAMを用いたエアロゾルシミュレーションの高度化と再現性検証

今年度の特筆すべき成果

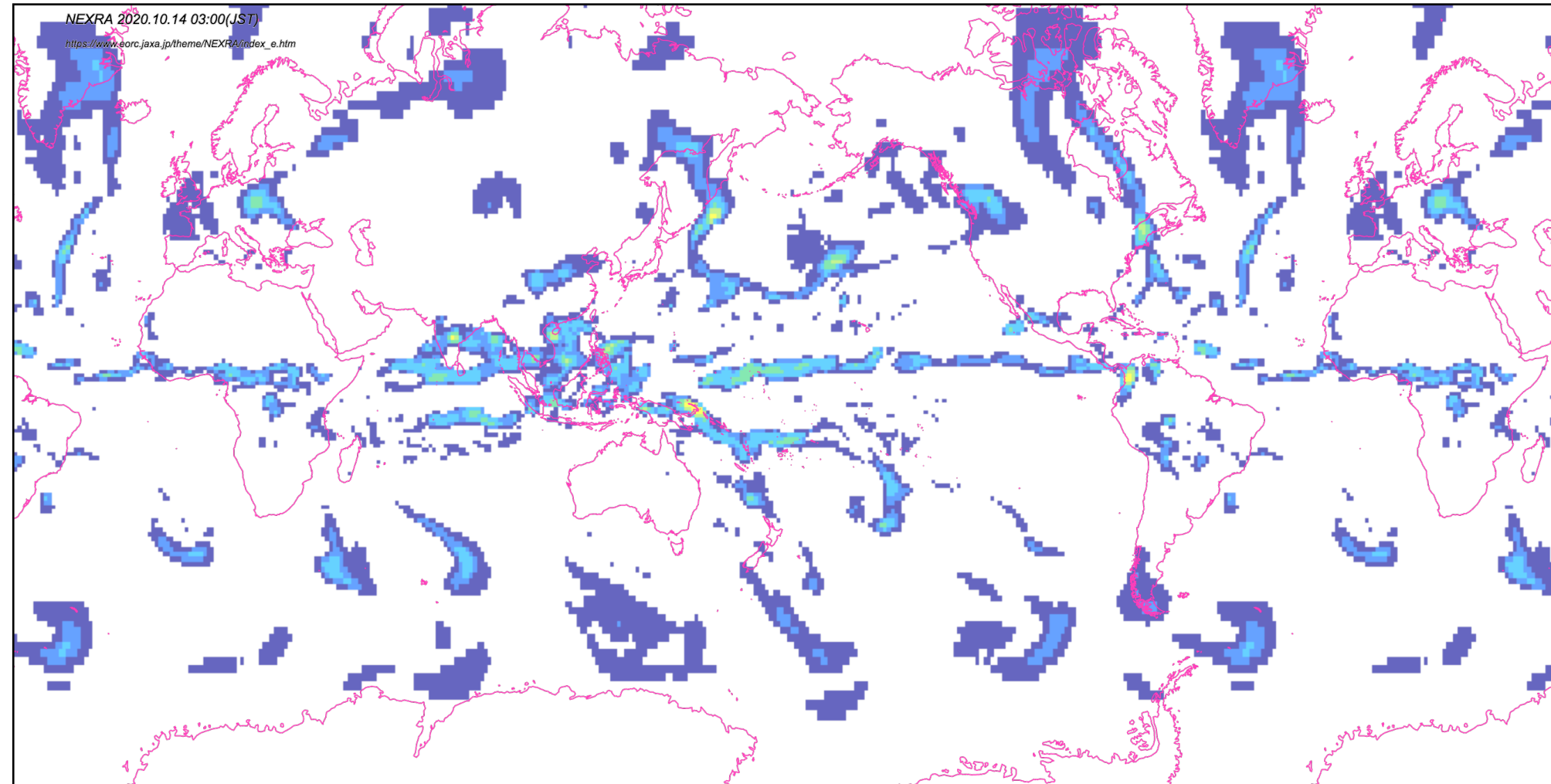


当初の計画通り、富岳を用いた全球3.5kmメッシュ・1024メンバーのアンサンブルデータ同化を実現→2020年ACMゴードン・ベル賞ファイナリストに選出

(このあとの発表で詳しくご紹介します)

成果の社会実装

NEXRA



NICAM-LETKF JAXA Research Analysis (NEXRA)

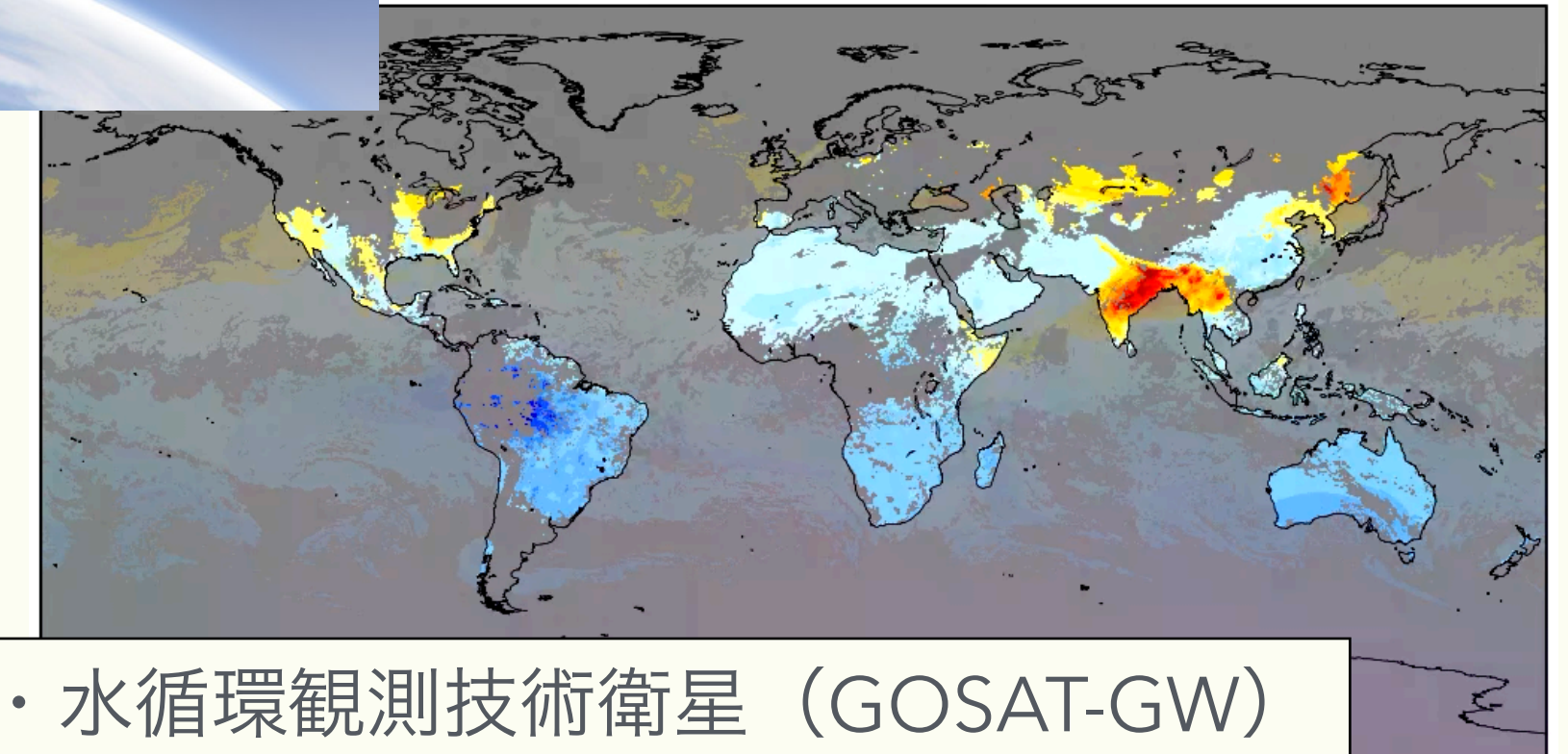
JAXA降水観測ミッションとの連携

- 研究成果のNEXRAシステムへの反映
- 富岳でのNICAM-LETKF高速・省メモリ化



温室効果ガス観測技術衛星2号
(いぶき2号, GOSAT-2)

TANSO-3 SWIR L2 (virtual synthetic image)
Time: 0001-05-01 01:30:00



温室効果ガス・水循環観測技術衛星 (GOSAT-GW)
で観測される二酸化炭素カラム平均濃度の想定図
(軌道考慮なし)

NIES GOSATプロジェクトとの連携

- NICAM-LETKFを用いた高精度炭素収支
解析システム構築に向けた開発

今年度成果リスト

査読論文 (抜粋)

- Cheng, C. T., and K. Suzuki (2021) Size-resolved aerosol microphysics in a global nonhydrostatic atmospheric model: Model description and validation. J. Meteor. Soc. Japan, 99, <https://doi.org/10.2151/jmsj.2021-031>.
- Yamashita, Y., Takigawa, M., Goto, D., Yashiro, H., Satoh, M., Kanaya, Y., et al. (2021) Effect of Model Resolution on Black Carbon Transport from Siberia to the Arctic Associated with the Well-Developed Low-Pressure Systems in September. Journal of the Meteorological Society of Japan. Ser. II, 2021-014. <https://doi.org/10.2151/jmsj.2021-014>
- Yashiro, H., Terasaki, K., Kawai, Y., Kudo, S., Miyoshi, T., Imamura, T., et al. (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. Atlanta, Georgia: IEEE Press. <https://dl.acm.org/doi/10.5555/3433701.3433703>
- Sato, M., Ishikawa, Y., Tomita, H., Kodama, Y., Odajima, T., Tsuji, M., Yashiro, H., et al. (2020) Co-Design for A64FX Manycore Processor and “Fugaku.” In Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis. Atlanta, Georgia: IEEE Press. <https://dl.acm.org/doi/abs/10.5555/3433701.3433763>
- Goto, D., Sato, Y., Yashiro, H., Suzuki, K., Oikawa, E., Kudo, R., et al. (2020) Global aerosol simulations using NICAM.16 on a 14km grid spacing for a climate study: improved and remaining issues relative to a lower-resolution model. Geoscientific Model Development, 13(8), 3731-3768. <https://doi.org/10.5194/gmd-13-3731-2020>

プレスリリース

- 国立環境研究所ほか, スーパーコンピュータ「富岳」を利用した史上最大規模の気象計算を実現, 2020年11月20日
: 日本経済新聞、朝日新聞、産経新聞、日刊工業新聞、電波新聞、PC watch ニュース、ZDNet Japan、Exciteニュース、Japan Corporate News Network等で取り上げられる

富岳を用いた3.5kmメッシュ・1024アンサンブル データ同化実験

(ACMゴードン・ベル賞ファイナリスト論文)

「富岳」成果創出加速プログラム「防災・減災に資する新時代の大アンサンブル気象・大気環境予測」

2020年度成果発表会

八代 尚 (国立環境研究所)

2021年3月16日

ACM Gordon Bell Prize

Innovations in applying high-performance computing to science, engineering, and large-scale data analytics

2020 Finalist paper!

H. Yashiro, K. Terasaki, Y. Kawai, S. Kudo, T. Miyoshi, T. Imamura, K. Minami, H. Inoue, T. Nishiki, T. Saji, M. Satoh, and H. Tomita, "**A 1024-Member Ensemble Data Assimilation with 3.5-Km Mesh Global Weather Simulations**," in *SC20: International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC)*, Atlanta, GA, US, 2020 pp. 1-10.

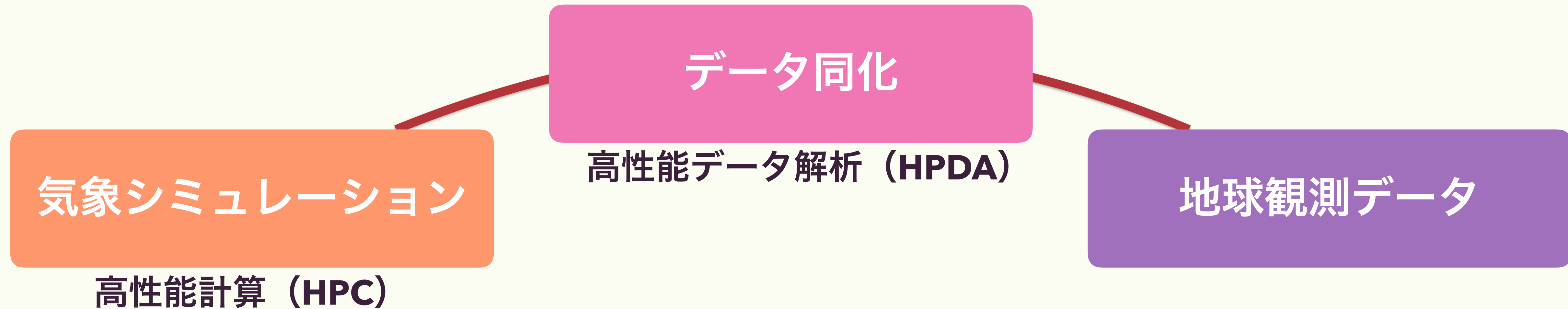
ゴードン・ベル賞とは？

- 計算科学において最も栄誉ある賞のひとつ
- その年において、高性能並列計算を科学技術分野へ適用することに関してイノベーションの功績が最も顕著な研究に与えられる

過去20年での気象・気候分野での受賞者

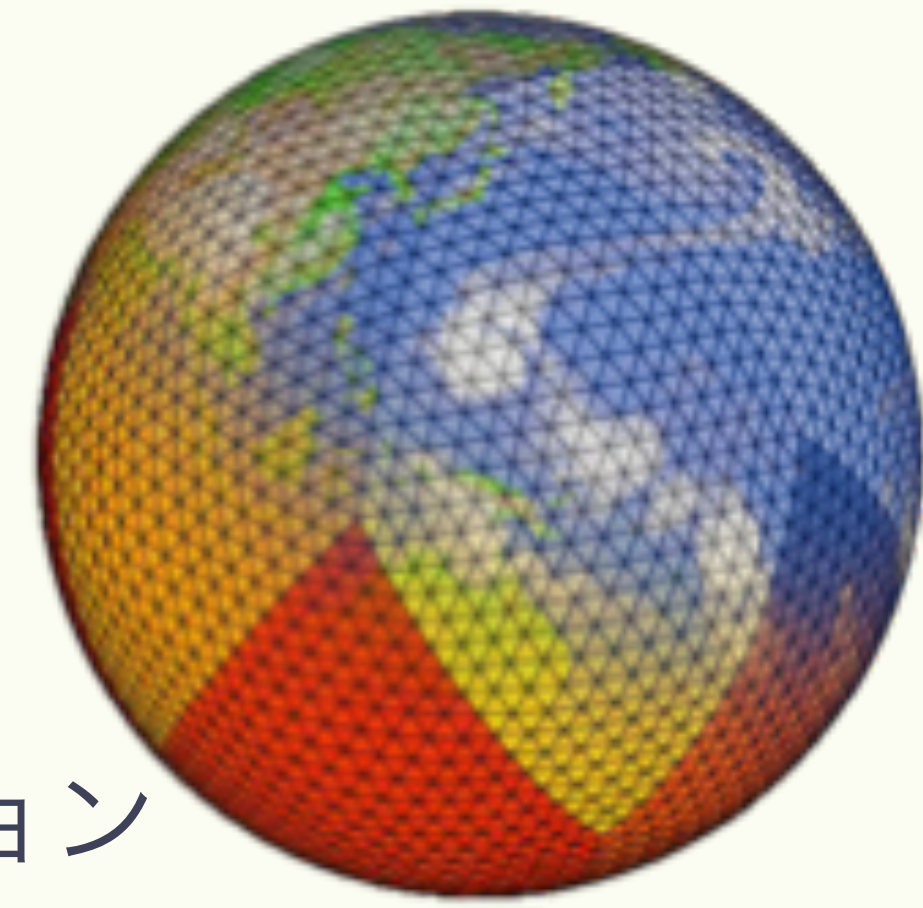
- 2002年
 - 地球シミュレータ（日本）を用いた全球スペクトル大気モデルの性能評価：AFES, 水平10kmメッシュで27TFLOPS
- 2016年
 - 神威太湖之光（中国）を用いた陰解法非静力大気力学コアの性能評価：水平488mメッシュの理想実験で8PFLOPS
- 2018年
 - Summit（米国）を用いた極端気象現象のパターン機械学習：CAM5, 0.25deg, 100年分のデータ(3.5TB)を教師データに
- 2020年は応募された論文のうち、6件がファイナリストに選出された

シミュレーションとデータ科学をつなぐ



- 理想実験によるベンチマークではない：現実大気のシミュレーションと実観測データ
- 計算規模も、データ規模も世界最大
 - 世界の気象機関が行っているアンサンブルデータ同化計算の500倍以上の規模：のべ4兆格子点
 - シミュレーションとデータ同化システムがおよそ1.3PBのデータをやり取りする

全球非静力大気モデルNICAM



- **2000年より開発開始**

Tomita and Satoh (2005), Satoh et al. (2008, 2014)

- 初代地球シミュレータを用いた世界初の3.5kmメッシュ全球シミュレーション

Tomita et al. (2005), Miura et al. (2007, Science)

- 京コンピュータを用いた世界初の0.87kmメッシュ全球シミュレーション

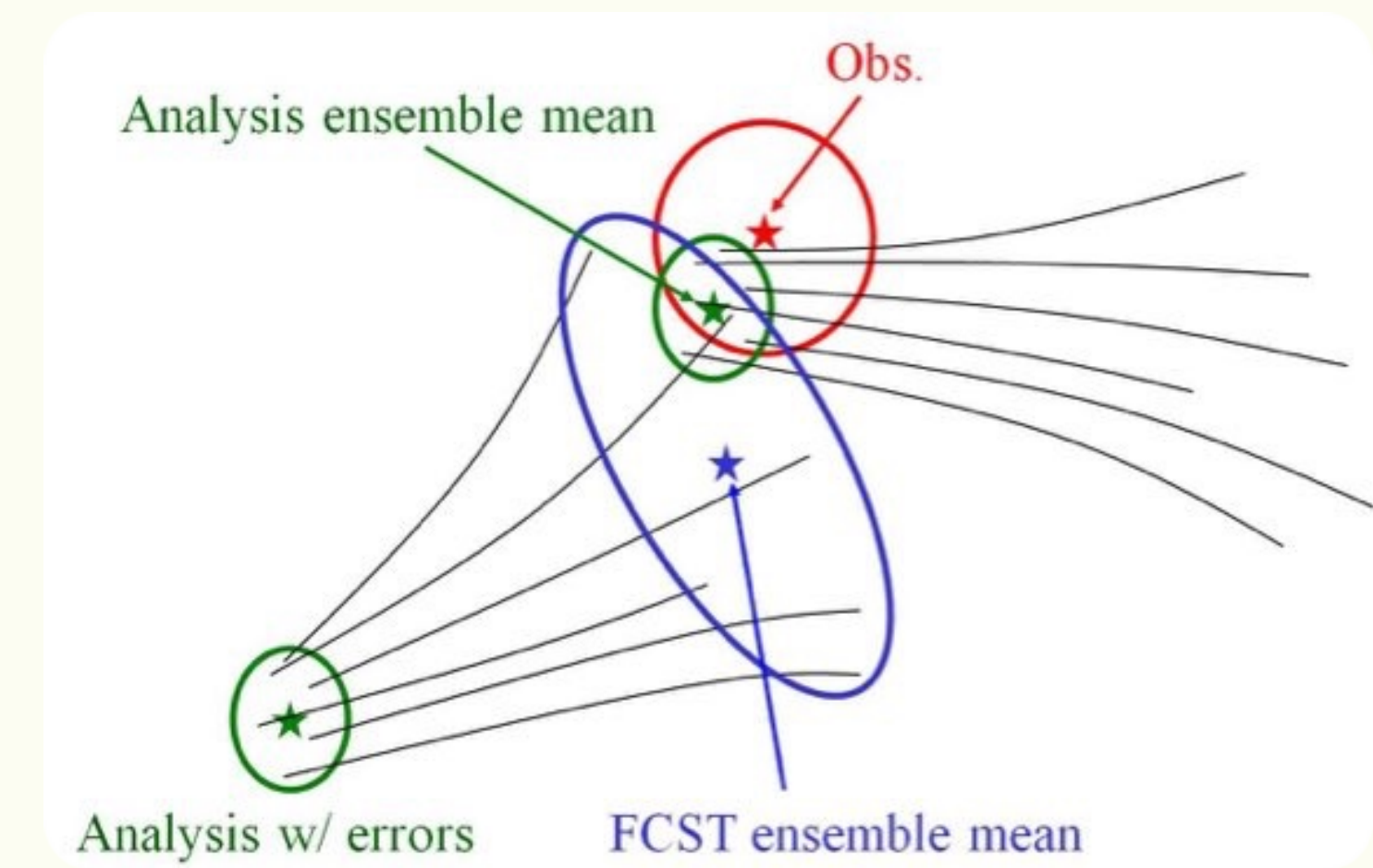
Miyamoto et al. (2013, 2015), Kajikawa et al. (2016)

- **正20面体格子系・有限体積法・HEVI**

- 球面調和関数展開のような大域通信を必要とせず、並列計算に適している
- 準構造格子：各MPIプロセスが担当する計算領域は構造格子を保っており、間接参照による性能の低下が無い
- 完全圧縮流体、静力学近似を用いない、質量とエネルギーの高精度な保存

局所アンサンブル変換カルマンフィルタLETKF

- アンサンブル計算を利用するデータ同化手法のひとつ
- 多くの気象予測システムでも採用されている
 - 京コンピュータを用いた世界初の10240メンバーアンサンブルデータ同化
Miyoshi et al. (2015), Kondo and Miyoshi (2016)
- 可搬性、並列性の高いアルゴリズム
 - 各格子点毎にデータ同化計算を適用するため、並列計算に適する
 - 変分法と違って、シミュレーションを逆回しするためのアジョイントコードを開発しなくてもよい
 - 非線形問題も扱える



スーパーコンピュータ「富岳」



RIKEN R-CCS, Kobe, Japan



F u g a k u

- 2020年にスパコンベンチマークで同時4冠を達成
- 2021年3月9日より供用開始
- 約16万ノード、432ラック
- スマートフォンにも使われているArm社のCPUを採用
- AIの学習にも活用される半精度(16bit)浮動小数点演算をサポート

富岳と他のマシンの比較

| | K | Fugaku | ECMWF 2020 | ABCI | Earth Simulator (v4) |
|-----------------|----------------|--------------|---------------|-------------------|----------------------------|
| | SPARK64III VFX | A64FX | AMD EPYC 7742 | NVIDIA Tesla V100 | SX Aurora TSUBASA Type-20B |
| FLOPS | 0.13 TFLOPS | 3.4 TFLOPS | 4.6 TFLOPS | 7.8 TFLOPS | 2.5 TFLOPS |
| Cores | 8 | 48 | 128 | 5120 | 8 |
| SIMD (for DP) | 2 | 8 | 4 | - | 256 |
| Mem. Cap. | 16GB DDR3 | 32GB HBM2 | 256GB DDR4 | 16GB HBM2 | 48GB HBM2 |
| Mem. throughput | 0.06 TB/s | 1 TB/s | 0.4 TB/s | 0.9 TB/s | 1.5 TB/s |
| LLCache | 6MB L2 | 8MB L2 | 256MB L3 | 8MB L2 | 16MB LLC |
| Byte/FLOP ratio | 0.5 | 0.30 | 0.09 | 0.12 | 0.62 |
| | | FP16 support | | FP16 support | PCI gen4 |

富岳と他のマシンの比較

富岳は気象・気候シミュレーションに有利なマシン

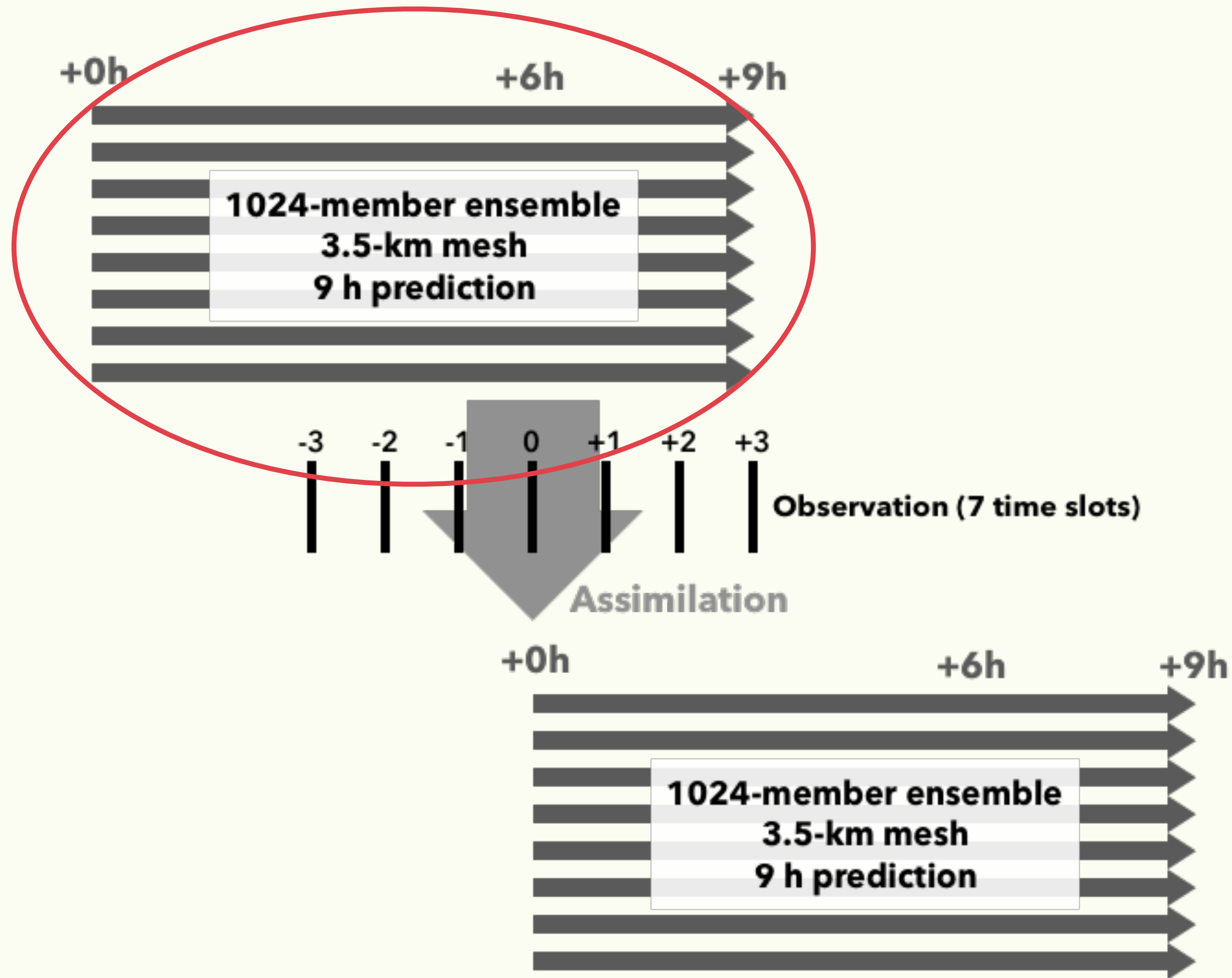
- メモリ転送性能に優れる：GPUやベクトル機並み
- ノード同士の通信性能が高い
- ファイルの読み書き（ストレージ）性能も高い
- GPUのように特別なプログラムをたくさん書いて最適化しなくても、性能が出る
- さらに
 - 省エネルギーモードを選択すると、（気象・気候モデルなら）性能はそのままで電力消費量を抑えられる
 - プログラムの性能を計測するツールがよく揃っている

HPCGベンチマーク

Graph500ベンチマーク

本研究でのデータ読み書き

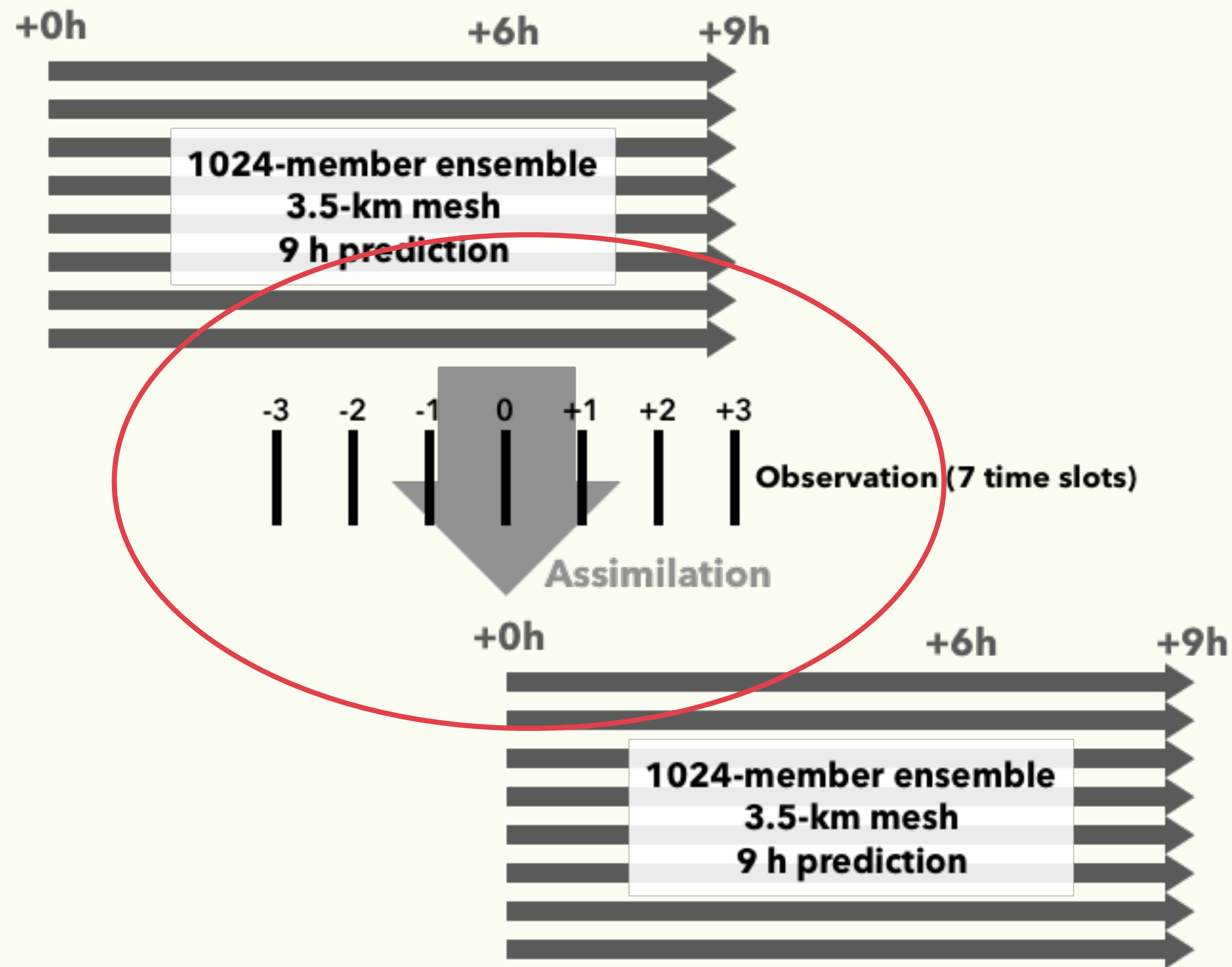
本研究でのデータ同化実験の概要



シミュレーション部分

- シミュレーションを9時間分進める
- 1024個の初期値の異なる実験
 - 結果が少しずつ異なる
 - 結果のばらつきがシミュレーションの「不確かさ」
- 6時間後±3時間の結果を観測と比較するために保存しておく

本研究でのデータ同化実験の概要



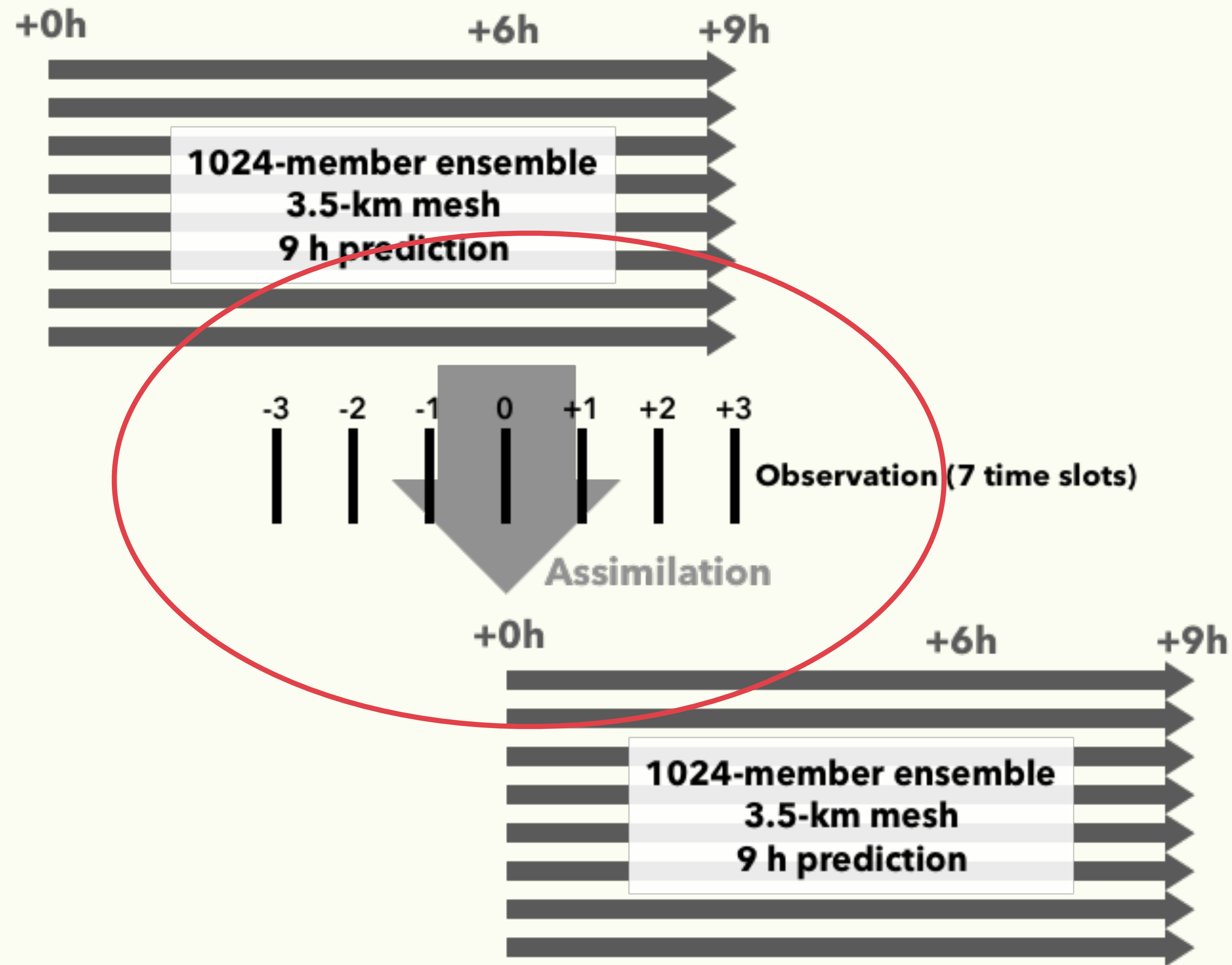
シミュレーション部分

- シミュレーションを9時間分進める

データ同化部分

- StoOパート
- シミュレーション結果を観測値と比較できる形に変換する
- 観測地点への内挿、観測された変数への変換など

本研究でのデータ同化実験の概要



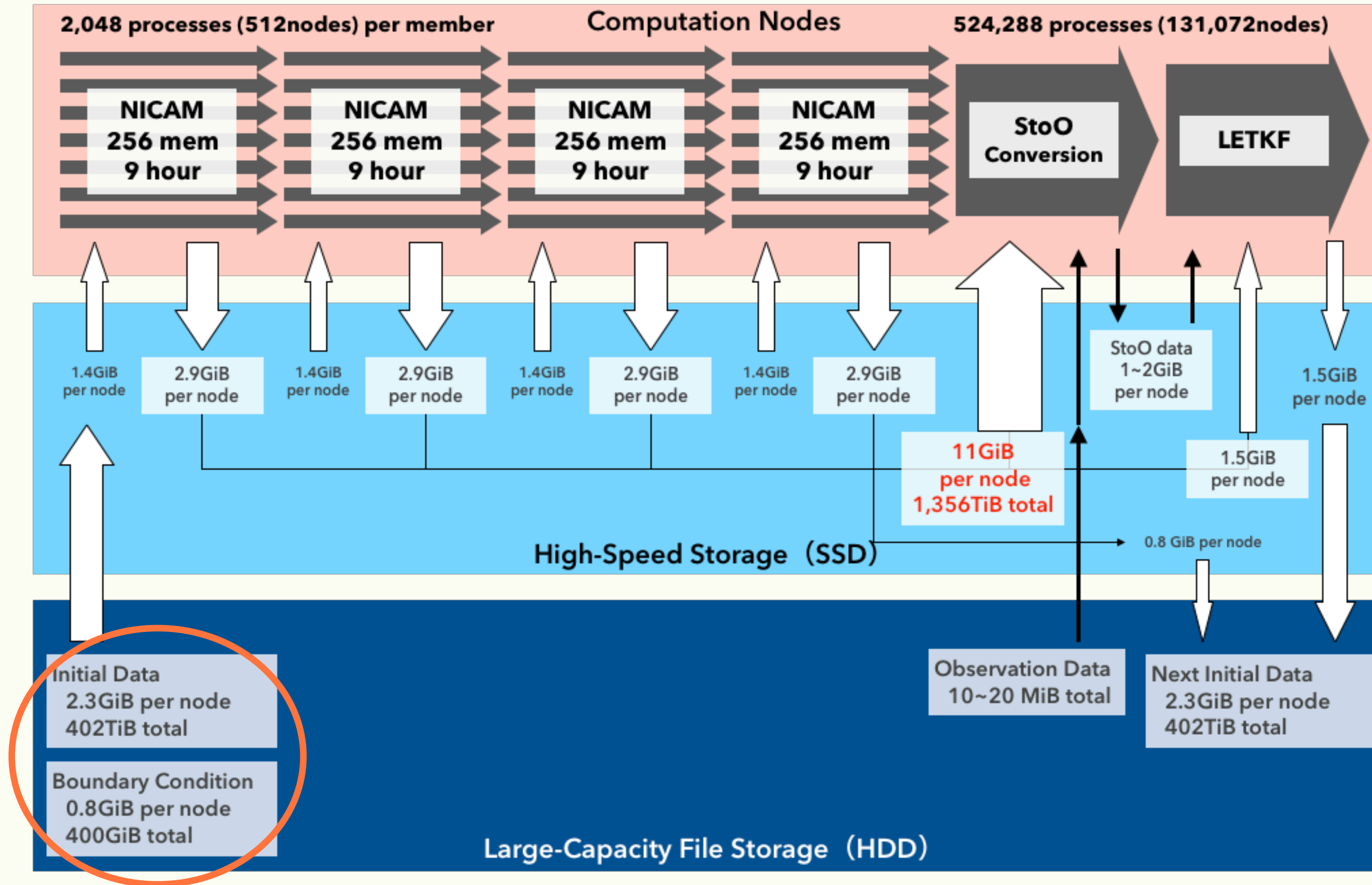
シミュレーション部分

- シミュレーションを9時間分進める

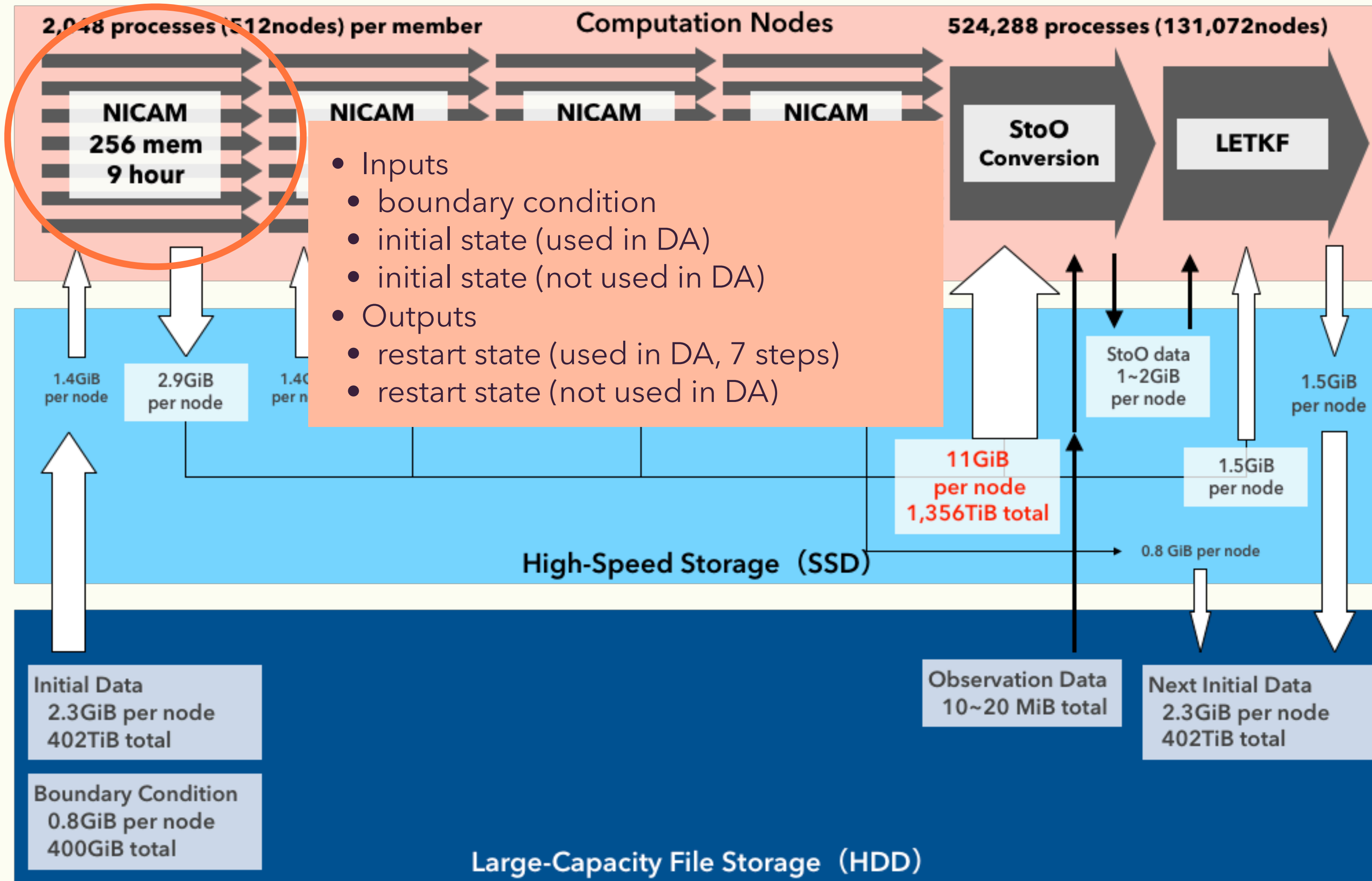
データ同化部分

- StoOパート（観測値に変換）
- LETKFパート
 - 観測値とシミュレーション結果のずれを、ベイズ推定に基づいて次の初期値へ反映する
- ここまでの一連の流れを1サイクルとして、これを繰り返しながら進める

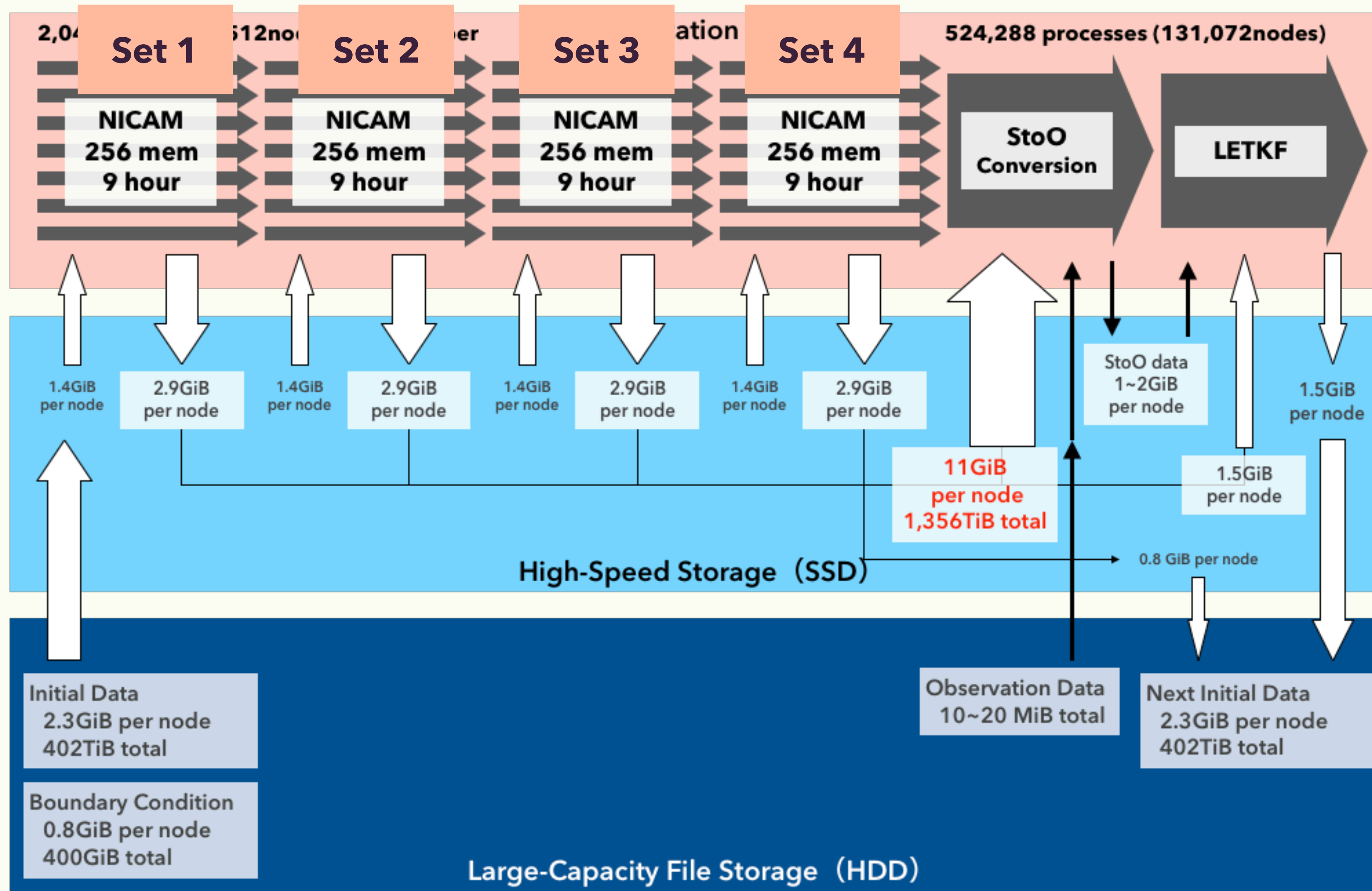
本研究での計算の流れ



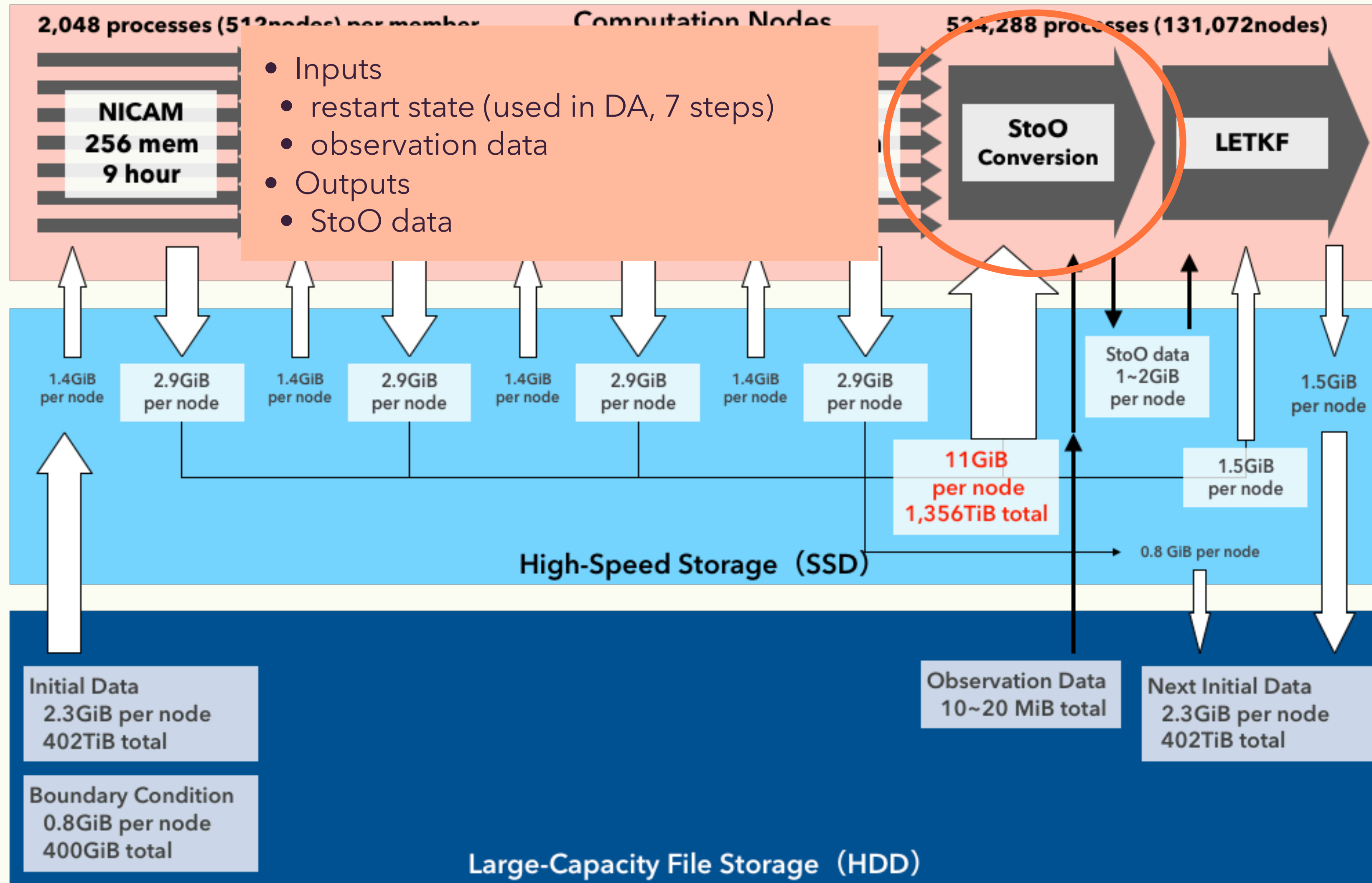
本研究での計算の流れ



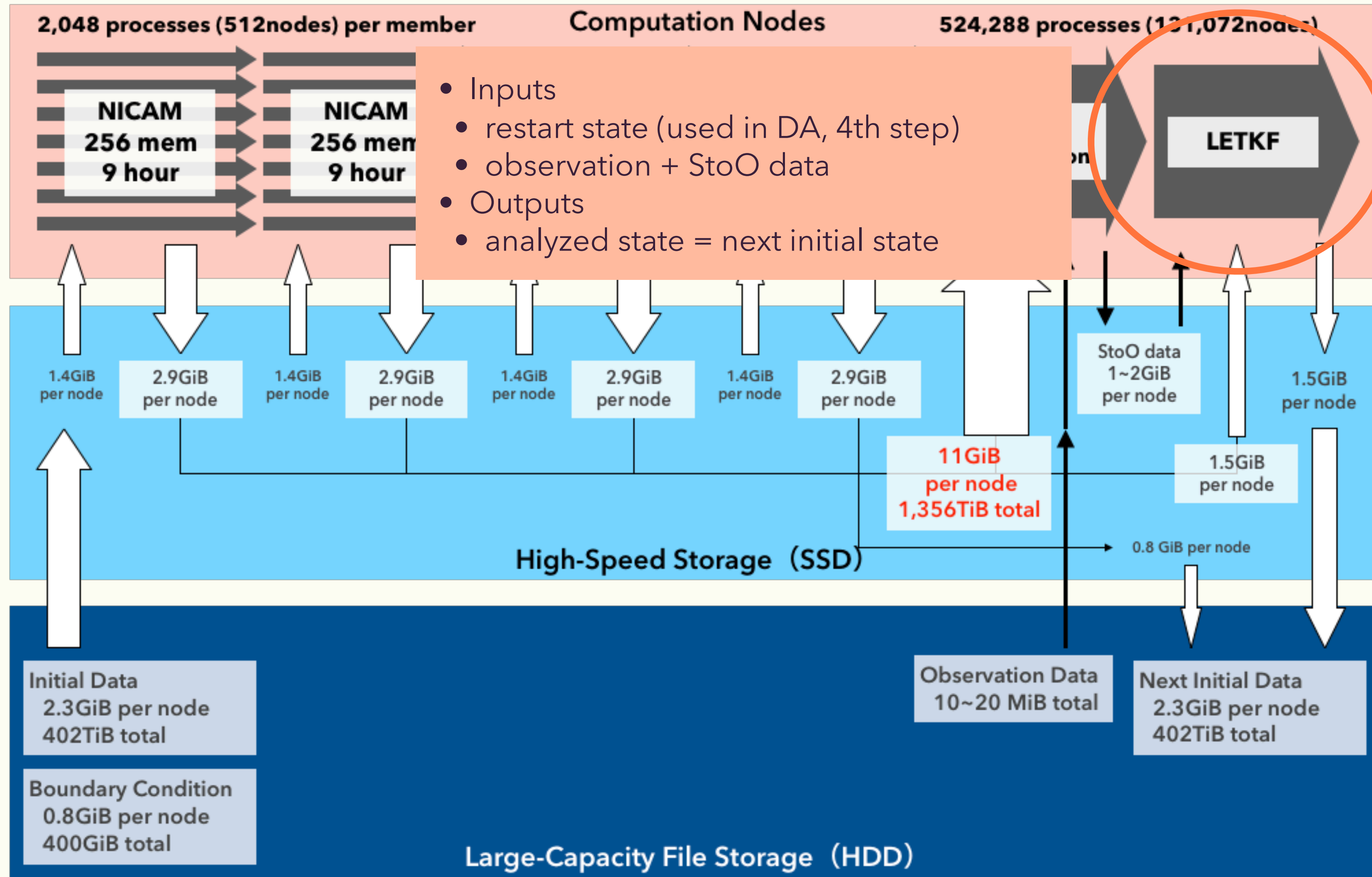
本研究での計算の流れ



本研究での計算の流れ



本研究での計算の流れ



最適化戦略

- 1) データ中心のデザインの適用 (同化システム)
- 2) 「家計簿法」と呼ぶ計算時間のムダ削減 (NICAM)
- 3) 富岳開発と一体となったソースコードの最適化 (NICAM, LETKF)
- 4) 積極的な単精度実数の利用 (NICAM, LETKF)
- 5) 小規模で多量反復する固有値計算のためのライブラリ開発 (LETKF)

富岳開発と一体となったソースコードの最適化（コデザイン）

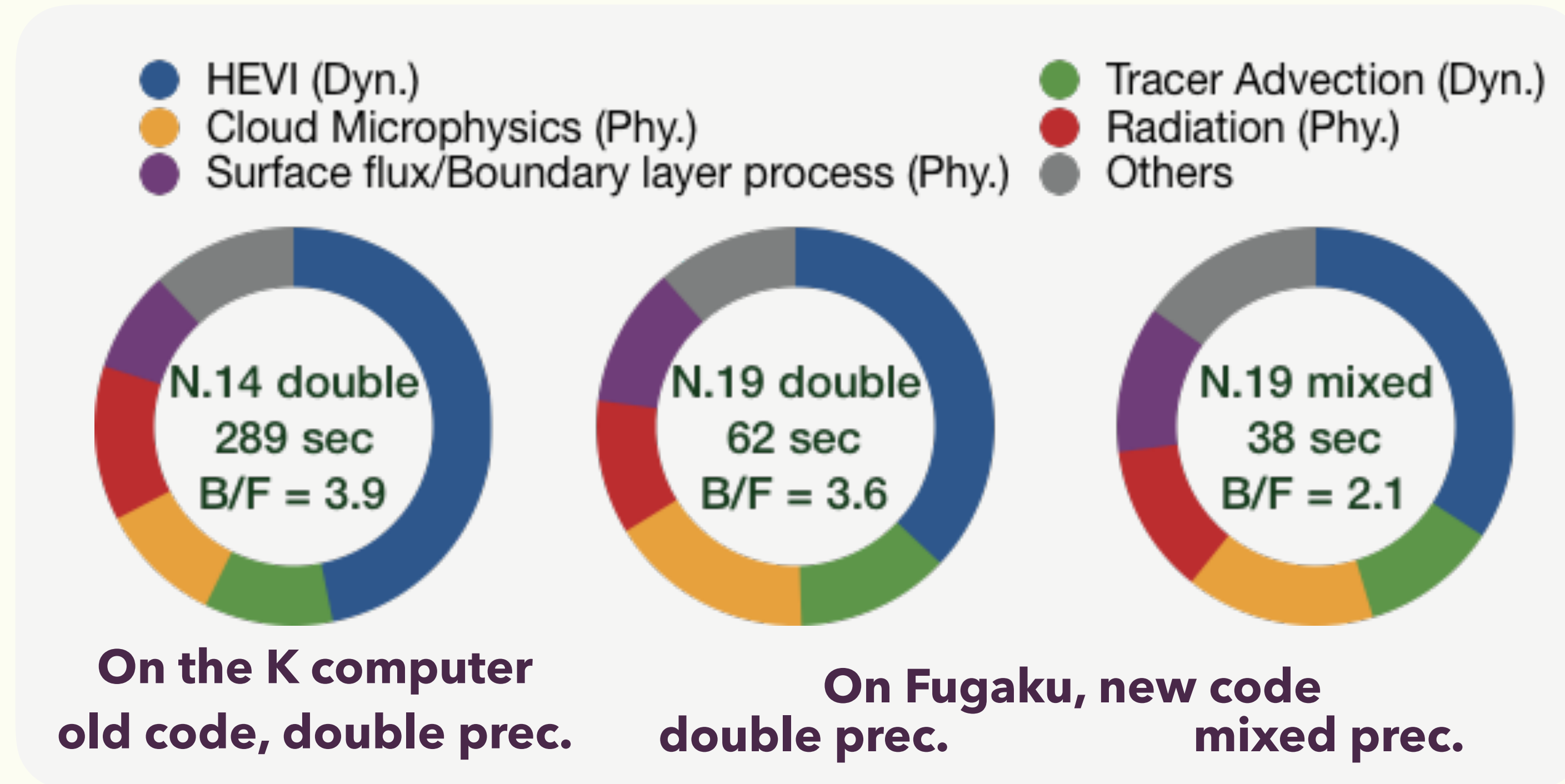
並列性の確保 vs データ局所性の確保

- データを連続で、並列に処理しなければ演算が速くならない
- データを小さいかたまりにして再利用性を上げなければメモリ転送に時間がかかる
- データ構造はStructure of Arrays (SoA)のまま、ループ構造をArray of Structures of Arrays (AoSoA)型に
→実機が出来る前からシミュレータ、試作機で試行錯誤できた

データ局所性の確保 vs レジスタスピル

- ループ内で一気に計算し、中間配列の利用を減らせばメモリの利用量が減る
- ループ内の変数が多いとレジスタ（演算器の手前にある作業領域のようなもの）があふれ、キャッシュに退避し呼び戻すのに時間がかかる
- レジスタスピルを解消するには再度ループを分割しないといけない。最適な分割数は？
→コンパイラによる自動分割機能の強化

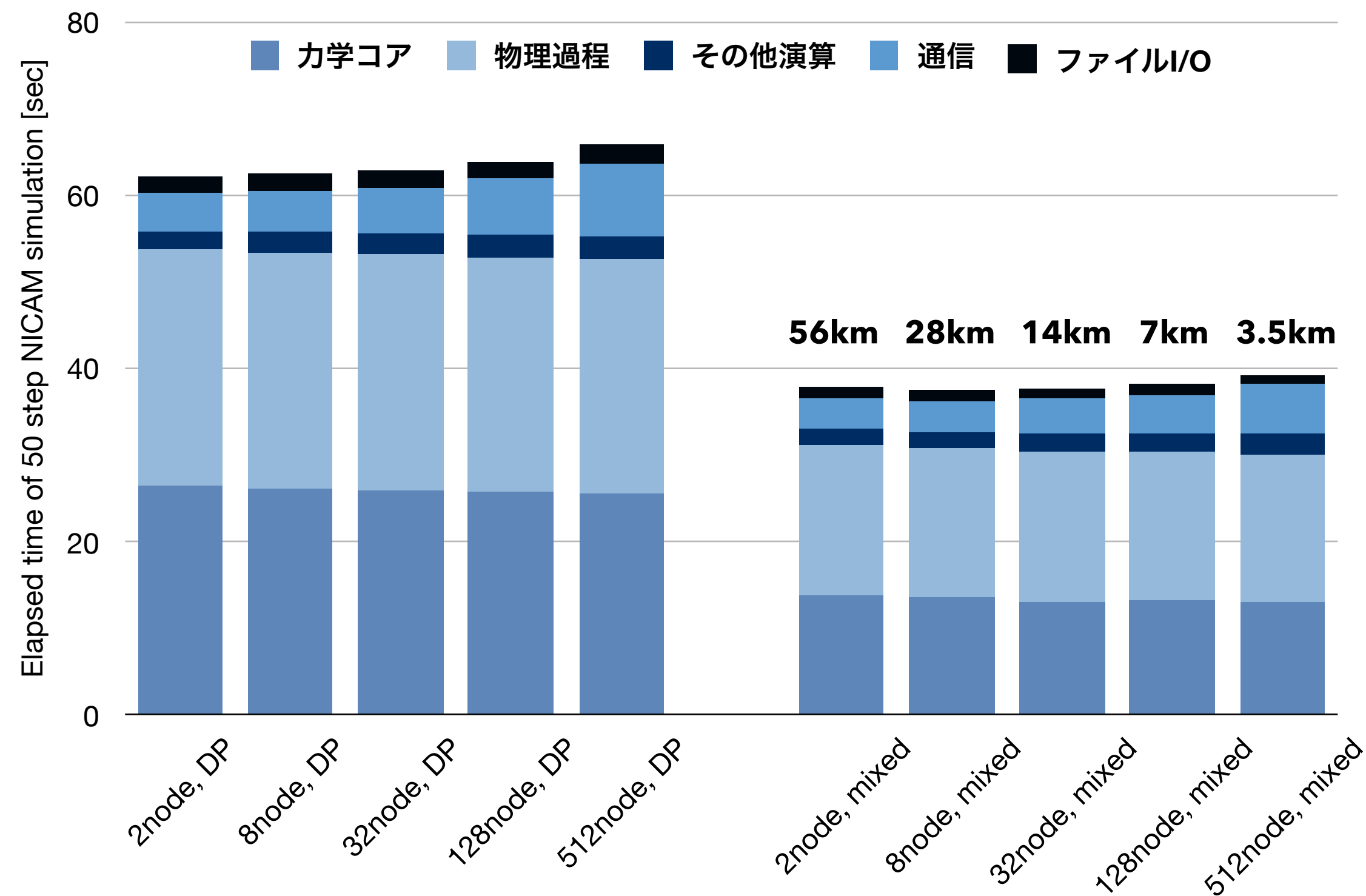
NICAM部分の性能評価



京：1ノードに1プロセス(8コア)
富岳：1ノードに4プロセス(12コア)

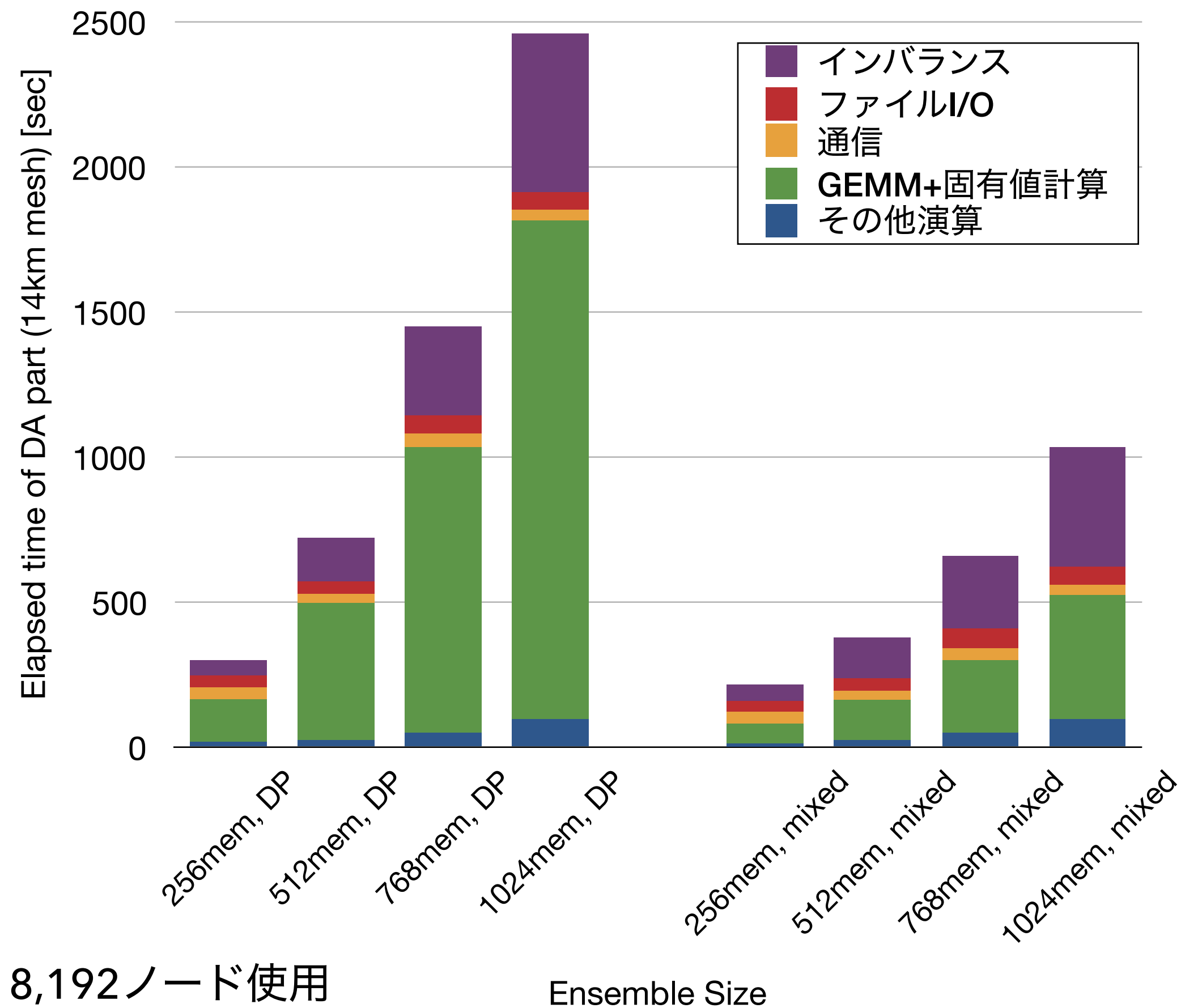
- 6年間のソースコード見直しの結果、アプリケーションが必要とするByte/FLOP比を8%削減
 - 富岳から京へのプロセスあたりメモリ性能の向上比（4倍）より大きい4.7倍の高速化を実現
- 単精度演算の積極的な利用により、さらに速度は1.6倍

NICAM部分の性能評価：ウィークスケーリング性能



- 1メンバでの実行、94層
- ノードあたりの格子点数を一定に、2ノード8プロセスから512ノード2048プロセスまで増加
- 良好なスケーリング性能（ピーク比5.8%）
- アンサンブル実行すると、メンバ間のインバランスがあるため10%程度時間が伸びる

データ同化部分の性能評価 (14kmメッシュ)



- アンサンブルサイズを増加
→固有値計算の配列サイズが増加
- 倍精度計算は非線形に経過時間が伸びるが、混合精度計算では固有値計算部分の経過時間の伸びが小さい：matrix deflationの効果と考えられる
- ファイルI/Oにほとんど時間がかかっていない
：「データ中心」デザインを適用した成果
- 3.5km計算では同じアンサンブル数で16倍利用ノード数を増やした（131,072ノード）
- ノードあたりの計算量は14kmと同じ
- 計算時間は14kmとほぼ同じ！

データ同化サイクルの性能評価

A. 14-km Mesh, 1024-member

| | Time [sec] | Computation [TFLOPS] | Memory Throughput [TB/s] |
|------------------------------|--------------|----------------------|--------------------------|
| One DA Cycle total | 5,007 | 2,589 | 2,858 |
| Simulation part total | 3,973 | 1,824 | 3,517 |
| NICAM set1 | 1,026 | 1,766 | 3,404 |
| NICAM set2 | 982 | 1,845 | 3,556 |
| NICAM set3 | 981 | 1,847 | 3,561 |
| NICAM set4 | 984 | 1,841 | 3,550 |
| DA part total | 1,034 | 5,527 | 326 |
| StoO | 83 | 77 | 99 |
| LETKF | 951 | 6,003 | 345 |

B. 3.5-km Mesh, 1024-member

| | Time [sec] | Computation [TFLOPS] | Memory Throughput [TB/s] |
|--|---------------|----------------------|--------------------------|
| One DA Cycle total | 14,200 | 33,234 | 54,990 |
| Simulation part total (estimated from set1 x 4) | 13,042 | 29,174 | 59,459 |
| NICAM set1 (estimated from shorter time steps) | 3,260 | 29,174 | 59,459 |
| DA part total | 1,158 | 78,970 | 4,653 |
| StoO | 196 | 522 | 671 |
| LETKF | 961 | 94,995 | 5,466 |

- 14kmメッシュ, 1024メンバは富岳の5% (8,192ノード, 22PFLOPS) を用いて1サイクルの計算に1.5時間
 - 現業にも十分耐えうる速度
- 3.5kmメッシュ, 1024メンバは富岳の82%を用いて1サイクルの計算に4時間程度
 - 京では2週間以上かかる計算を、**100倍**に高速化

まとめと今後の計画

富岳を用いて、気象シミュレーションとデータ同化の複合大規模実験を実現

- データ移動に着目した最適化により、大規模アプリケーション全体の高速化を行った

富岳加速課題での今後の展開

- 最適化されたNICAM-LETKFを積極的に利用し、テーマ1-3の研究に活用する
- JAXAの降水予測システムNEXRAに成果を反映
- NICAM以外のデータ同化システムへ知見を還元

補足資料

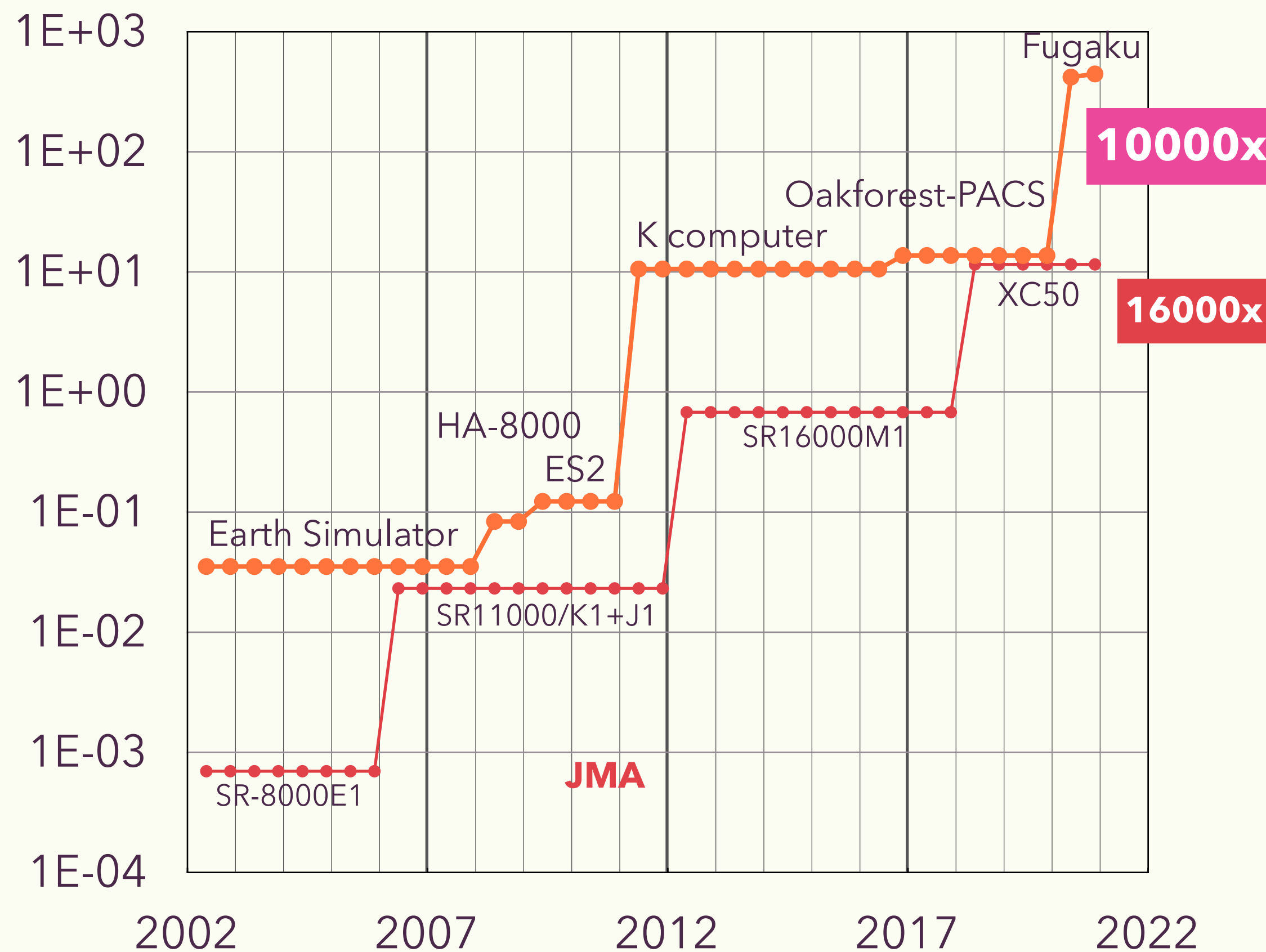
ゴードン・ベル賞とは？

過去20年での日本の受賞者

- 2000年：MD-GRAPE2を用いた分子動力学計算、GRAPE-6を用いたブラックホール計算
- 2001年：GRAPE-6を用いたブラックホール計算
- 2002年：地球シミュレータを用いた全球大気計算、3次元乱流DNS計算、核融合3次元流体計算
- 2003年：地球シミュレータを用いた地震計算、GRAPE-6を用いたベンチマーク
- 2004年：地球シミュレータを用いたダイナモ計算
- 2006年：MD-GRAPE2を用いた分子動力学計算
- 2009年：GPUを用いたN体計算
- 2010年：GPUを用いたN体計算
- 2011年：「京」を用いた材料の電子状態計算、TSUBAMEを用いたフェーズフィールド計算
- 2012年：「京」を用いたN体計算

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]

