

特別推進課題に対する技術サポート報告

課題責任者

上原 均 海洋研究開発機構 地球情報基盤センター情報システム部計算技術グループ

著者

齋藤 友一^{*1}, 池田美紀子^{*1}, 今任 嘉幸^{*1}, 上原 均^{*1}

^{*1} 海洋研究開発機構 地球情報基盤センター情報システム部計算技術グループ

地球シミュレータの平成 27 年度第 2 期特別推進課題に対して地球情報基盤センターが実施した技術サポートについて報告する。

キーワード：特別推進課題, 地球シミュレータ, 技術支援

1. はじめに

地球シミュレータの平成 27 年度第 2 期特別推進課題は平成 27 年 10 月から平成 28 年 1 月にかけて実施された。特別推進課題の推進と地球シミュレータの運用管理を行う地球情報基盤センターでは、各課題に対する利用高度化と運用管理面からの技術支援を全面的かつきめ細やかにを行い、研究促進と成果創出に貢献した。以下では、その技術サポートの概要と種々の技術的なトピックスを述べる。

2. 技術支援の詳細

2.1 各課題と技術サポート担当

表 1 に示すように各特別推進課題に 1 名の担当者を設定して、技術サポートにあたった。

各課題の研究目標や学術的詳細については、各課題からの報告をご覧ください。

技術支援として、利用プログラムの地球シミュレータへの移植、計算結果確認、性能評価、高速化、効率的なプログラムの実行条件調査、ジョブスクリプト作成支援などを行った。運用上のジョブ数制限や実行時間制限などの各種利用制限の緩和のほか、利用上の疑問点や不具

合にも随時対応して、効率的な研究実施環境の維持・向上にも努めた。このように、プログラム実行前からプログラクドラン、後処理に至るまで、全面的かつきめ細かな技術支援を行った。

2.2 課題 #1「複数の次世代非静力学全球モデルを用いた高解像度台風予測実験」への技術支援

本課題では第 1 期に引き続き、気象研究所が開発した DFSM、海洋研究開発機構と東京大学、理化学研究所が開発した NICAM、海洋研究開発機構が開発した MSSG の 3 つの次世代非静力学全球モデルを使用して、水平解像度約 7km で全球高解像度実験を行う。この課題の利用プログラムに関する移植や最適化等は第 1 期で終了したため、今期は、基盤システムグループの協力の下、以下のポスト処理に注力して支援を行った。

- ・ NICAM の出力データを正 20 面体格子から緯度経度格子に変換するポスト処理環境を提供した。
- ・ zlib による圧縮に対応した NetCDF 環境を地球シミュレータ上に作成し提供した。
- ・ 可視化動画を課題メンバーで共有するための Web サーバについて、適宜設定した。

表 1 各特別推進課題と技術支援担当者の一覧

No.	課題代表者・所属	課題タイトル	担当
#1	竹内 義明 気象庁 気象研究所	複数の次世代非静力学全球モデルを用いた高解像度台風予測実験	池田美紀子
#2	坪井 誠司 海洋研究開発機構 地球情報基盤センター	ES の全ノードを用いた全球地震波形計算による地球内部構造の解明	今任 嘉幸
#3	宮腰 剛広 海洋研究開発機構 地球深部ダイナミクス研究分野	内核を取り込んだ新しい地球ダイナモシミュレーション	今任 嘉幸
#4	増田 周平 海洋研究開発機構 地球環境観測研究開発センター	海洋鉛直混合観測データを用いた全球海洋環境再現実験	齋藤 友一

2.3 課題 #2 「ES の全ノードを用いた全球地震波形計算による地球内部構造の解明」への技術支援

本課題では第1期に引き続き、より現実的な地球内部構造モデルを仮定した全球を伝播する理論地震波形を地震波の周期1秒の精度で計算する。この課題ではスペクトル要素法の計算プログラムである SPECFEM3D_GLOBE を用いて地球シミュレータの5,046ノード(20,184コア)で周期1秒の精度での理論地震波形計算を行う事を目指した。

研究目標の達成に必要なクラスタ間MPI通信は、第1期の技術サポート報告[1]でふれているため省略するが、今期はその並列実行機能を検証、改良した。検証はシステムメンテナンス期間中や拡張クラスタを占有して実施した。TCP/IP通信が増えるとストリームバッファ枯渇が発生するため、特別版カーネルを作成した。SPECFEM3D_GLOBEのストリームバッファ使用状況を確認し、ストリームバッファ枯渇が発生せず、かつOSが起動できる限界までカーネルを改良した。5,046ノードで検証した際の実行環境を以下に示す。

- ・ NPROC=58 (使用ノード数=5,046 MPI プロセス数=20,184)
- ・ NEX=464, RLIM=0.01
- ・ 論理山数: 50 (演算 101 + 通信 1) × 46 山 + (演算 100 + 通信 1) × 4 山

検証の結果、メッシュ生成は1,547秒、ソルバー実行は5,422秒で完走した。しかし、最終目標であるNEX=3,712の計算では通信量が更に増え、特別版カーネルを用いてもストリームバッファ枯渇は避けられず、SPECFEM3Dの完走を実現することはできなかった。

2.4 課題 #3 「内核を取り込んだ新しい地球ダイナモシミュレーション」への技術支援

本課題では、これまで地球ダイナモシミュレーションで用いていたYin-Yang格子[2]を拡張した、 $r=0$ の原点上の座標特異点も含めて計算することができるYin-Yang-Zhong格子[3]という新しい計算格子系で、大規模な地球ダイナモシミュレーションを地球シミュレータで初めて実施する。

Yin-Yang-Zhongコードでは、地球内部全体を球座標格子に基づくYin-Yang格子と、カーテシアン格子に基づくZhong格子で構成する。Yin-Yang格子はYinとYangの2つの領域で構成され、全く同じ領域分割をするため、必ず2の倍数のプロセス数を使う。Zhong格子の領域分割はx, y, z軸方向の3次元分割まで対応する。

本課題への技術支援においては、まずYin-Yang-Zhongコードに対して、未初期化チェックと配列外参照チェックによる動作確認と計算結果確認を実施した。

次いでFlatMPI並列とHybrid並列実行での性能評価を実施した。FlatMPIはノード内4プロセス、Hybridはノード内1プロセス4スレッドで実行した。256ノード以上の大規模実行ではFlatMPI並列の方が若干高速であったが、大きな計算時間の差異はなく、各プロセスからの分散ファイルI/O対応を考慮し、Hybrid並列での利用を提案した。

さらにYin-Yang-Zhongコードは、Yin-Yang格子とZhong格子のプロセス数の配分や、Zhong格子の空間領域分割の方法によって、計算負荷が大きく変わる。そこでYin-Yang格子とZhong格子のプロセス数の配分や、3次元領域分割の各軸の分割数を変えながら計算時間を測定した。実行条件としてノード内プロセスは1、ノード内スレッドは4、Zhongのx軸分割数は1と固定して測定した。表2に測定結果例を示す。測定結果を基に、計算リソースと計算効率、4カ月間という限られた研究実施期間を考慮し、実計算には512ノード実行を提案した。目標とする計算はオリジナルコードでも達成可能なため、チューニングは実施しないこととした。

表2 Yin-Yang-Zhongコードの性能計測結果

Node 数	Zhong 分割数		プロセス数		RealTime (sec)
	y 軸 分割数	z 軸 分割数	Zhong	Yin- Yang	
128	8	8	60	68	1,484.237
256	8	8	60	196	1,135.151
256	8	16	116	140	1,082.038
512	8	16	116	396	832.972
512	16	16	224	288	893.660
1024	16	16	224	800	781.446

2.5 課題 #4 「海洋鉛直混合観測データを用いた全球海洋環境再現実験」への技術支援

本課題では、四次元変分法海洋同化システム(MOM_{da})に鉛直混合観測を直接取り入れられる新しいデータ統合スキームを完成させることが目標であった。データ統合スキームを完成させるため、計算モデルに新しい計算コードの実装、制御変数をファイルで受け渡す入出力環境の整備を行った。また、新しい計算コードについて高速化を実施した。新しいシステムを完成させるため、課題メンバーとの打合せにより、以下のように機能の実装、モデルの動作検証および高速化作業を進めていった。

まず利用システムに対して未定義変数、配列外参照、初期化漏れのチェックを行い、適宜修正した後に、課題メンバーが新たに作成したモデル拡散係数をアジョイント変数とする計算コードの組込みとその動作確認を行った。

次に新しい計算コード部分の性能分析を行い、高速化を行った。高コストのサブルーチンについて部分ベクトル化の解消を行ったところ計算時間を2009秒から186秒に短縮することができ、約10倍の高速化を達成した。

さらに、これまでの計算モデルでは制御変数によるデータ受け渡しを行っていたが、新たに外部入出力ファイルから取り込めるように機能を実装し、その動作を検証した。

最後に、これまでのモデルに鉛直混合観測データ統合実験を実装するための計算コードの組込みを行って動作検証し、コードの微修正の上、完成した。

上記作業を経て、本課題では、新しい計算コードの実装、データ入出力周りの実装および高速化作業を行いデータ統合スキームのシステムを完成させた。

3. おわりに

特別推進課題は、限られた期間内、限られた人的リソースの中で、新ESで画期的なサイエンスとしての成果を出さなければならない、という非常に強いプレッシャーのもとで実施された。その中でサポート要員も従来以上に業務で創意工夫し、技術的な知見を深めた。これらは今後の特別推進課題や他の課題の技術サポートに活かしていきたい。

謝辞

各課題の先生方や関係各位には技術支援担当者との頻繁な打ち合わせを寛容かつ前向きに受け入れていただきました。また地球シミュレータ運用面では地球情報基盤センター情報システム部 塚越部長、基盤システムグループ各位に大変なご尽力をいただきました。さらに運用面での調整やプログラムの移植・最適化等で日本電気株式会社の関係各位に大変なご助力をいただきました。ここに記して感謝の意を表します。

文献

- [1] 特別推進課題（平成27年度第1期）成果報告書、平成28年2月。
- [2] A. Kageyama and T. Sato, "Yin-Yang grid": An overset grid in spherical geometry, *Geochem. Geophys. Geosyst.*, 5, Q09005 (2004).
- [3] Hiroshi Hayashi and Akira Kageyama, Yin-Yang-Zhong grid: An overset grid system for a sphere, *Journal of Computational Physics*, 305, 895-905 (2016).

Report of Technical Support for Strategic Project with Special Support

Project Representative

Hitoshi Uehara Center for Earth Information Science and Technology, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

Authors

Yuichi Saito^{*1}, Mikiko Ikeda^{*1}, Yoshiyuki Imato^{*1} and Hitoshi Uehara^{*1}

*1 Center for Earth Information Science and Technology, Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

Using the new Earth Simulator, which was opened in March 2015, four research projects were completed in the second term of the Strategic Project with Special Support in FY2015 (from Oct 2015 to Jan 2016). This report covers the details of the technical support for these research projects.

Keywords: Strategic Project with Special Support, Earth Simulator, Technical Support

1. Report

Strategic project with special support is a short-term project spanning four months. Significant results were achieved using the state-of-the-art supercomputer, the Earth Simulator. To deliver significant results within a limited period, technical support in all aspects of high performance computing played an important role.

Technical staff took charge of the support for each project (as shown in the Table.1). The technical staff proactively provided support for all aspects of the research project implementation.

Project #1 aims to perform high-resolution calculations with three global 7-km mesh nonhydrostatic atmospheric models, from the previous period. These models have been already ported to the Earth Simulator and optimized in the previous term. Therefore, technical support for project #1 in this period has been focused on post processing, as follows:

- Supplying post processing environment for conversion from icosahedral mesh to lat-lon mesh
- Supplying the NetCDF library, including the compression

function, on the Earth Simulator

- Setting up the Web server for sharing images and animations among project members

Project #2 aims to compute the theoretical seismic waveform with the program SPECFEM3D_GLOBE using 5,046 nodes (20,184 cores) of the Earth Simulator. The Earth Simulator comprises seven clusters; Message Passing Interface (MPI) communication is available in each cluster. The project needed the MPI communication beyond the clusters. We realized special MPI implementation only for this project. We also made a special OS kernel to avoid overflowing stream buffers that were used in special MPI implementation. To avoid overflow, a large number of stream buffers are required. The special OS kernel maximizes the number of assigned stream buffers on limited memory space. As a result, even though the target scale simulation was aborted because of the maximally assigned number of stream buffer was not enough to avoid overflow, a small-scale simulation with inter-cluster communication was completed.

Table 1 Each Project and Support Staff

No.	Project Name	Name of Support Staff
#1	High Resolution Typhoon Prediction Experiments using Multiple Next-generation Nonhydrostatic Global Models	Mikiko Ikeda
#2	Global Seismic Wave Simulation Using Full Nodes of the Earth Simulator	Yoshiyuki Imato
#3	Geodynamo Simulation with the Inner Core	Yoshiyuki Imato
#4	Global Ocean State Estimation by using Oceanic Vertical Mixing Observations	Yuichi Saito

The objective of Project #3 is to conduct the first trial of the large-scale geodynamo simulation using a new grid system called the Yin-Yang-Zhong grid on the Earth Simulator. First, we checked that the program is clean as regards to non-initialization and out-of-bound array access. Next, we evaluated the parallel programming performance for both hybrid and flat MPI. Based on the results, we recommended a hybrid parallel programming model because there was no difference in terms of the elapsed time; moreover, the file operation cost can be reduced. Furthermore, we evaluated its scalability and suggested 512 MPI × 4 OpenMP, as the optimal configuration.

Project #4 aims to complete the new data consolidation scheme, which can directly use vertical mix observation data, on the 4-dimensional variational ocean assimilation system, called MOM_da. The completion requires the implementation of new computation code and additional input/output functions. First,

we ensured that MOM_da is clean. Next, we optimized the new computation code that integrates oceanic vertical mixing observations data into the assimilation system. The optimized code is 10 times faster than that before optimization. We also implement additional input/output functions. Finally, we integrated new functions into the MOM_da system.

By providing support for each project, the support staff gained high-level technical knowledge. We will make full use of this knowledge to support other research projects.

Acknowledgement

All project members accepted meetings with us, even though the meetings were frequent. The Director, Mr. Tsukakoshi, and the Earth Simulator operation staff in CEIST strongly supported projects from the aspect of system administration. The NEC staff were invaluable to the in successfully providing support. We are deeply grateful to them.

