

10-NA02

高並列海洋モデルの開発を通じた海洋循環のプロセス研究

羽角博康（東京大学）

概要 海洋の大規模循環形成における小規模物理現象の役割を明らかにすることを目的とした数値海洋モデルの開発と実行を行う。モデル開発においては、次世代の超高並列クラスタ型大型計算機を念頭に、既存の海洋大循環モデル COCO 及び非静力学海洋モデル kinaco に対して、高並列アーキテクチャにおいて最大限の性能が得られるような改良を施す。特に 10 万を越えるような並列規模を想定し、モデルに十分なスケーラビリティを発揮させるために通信の最適化、並列分割手法の最適化、大規模 I/O の効率化等を行う。開発されたモデルを用いて、南極沿岸を中心とした領域における局所的深層水形成に関わるプロセスを扱うシミュレーションを実行する。

1. 研究の目的と意義

海に存在する流れは、我々の生活環境に大きな影響を及ぼしている。日本の南岸の表層海洋に存在する黒潮を例にとると、これは全世界を代表する強い海流のひとつであるが、低緯度から運ぶ熱が日本の気候や気象に多大な影響を及ぼすとともに、海洋生物の棲息環境や輸送の面から日本近海の水産資源にとっても極めて重要である。この黒潮は主に風によって駆動されるが、日本付近の風は直接的に重要ではなく、北太平洋全体の海上風分布が決める北太平洋全域の流れとの関係の中で形作られている。したがって、黒潮の性質や変動を解き明かそうとするならば、日本付近の流れとしてのみならず、大規模な海洋循環という視点から黒潮を捉える必要がある。また、沿岸付近には黒潮のような強い海流以外にも様々な流れが存在し、それらは時として黒潮以上に我々の生活と密接に関わる。そうした小規模な流れは、付近に存在する黒潮のような強い海流の影響を大きく受け、それを通して海洋大循環ともリンクしている。特に全地球的な気候変動のもとでは、沿岸の小規模な流れやその変動を考える場合においても、海洋大循環の変動との関わりを無視するわけにはいかない。

一方、海洋の深層にも流れは存在する。それは我々の生活環境からは非常に遠くに位置し、しかもその流れの速さは黒潮に比べれば何十分の一に過ぎないのであるが、実は根本的なところで我々

の生活環境を大きく左右している。深層海洋の流れは深層だけに閉じておらず、表層海洋の流れとリンクしている。海水の密度は温度と塩分に依存し、海面付近で冷却されて低温化(もしくは蒸発等により高塩分化)した海水は、高密度のために深層へ沈む傾向が強くなる。現在の海洋の状態において、深さ数千メートルの深海に存在する水はいたるところで 0°C 近くの低温であり、これは高緯度の海面付近にある低温水が沈降して深層を占めていることを示す。図 1 はそうした海洋の深層と表層をつなぐ循環の概略を模式的に示したものであるが、その大きな特徴は、海面付近から深層海洋への沈降が、北大西洋高緯度と南極周囲の極めて限られた場所でのみ生じていることである。深層水形成と呼ばれるこの沈降過程は水平 1 km 程度のスケールで生じる対流現象に端を発している。その意味では、極めて限られた領域における微小規模の現象が全海洋規模の循環をコントロールしている。そしてこの循環は、地球上の熱を大規模に再配分する。その働きがあればこそ、例えばヨーロッパ北部は 70 度を越えるような高緯度にも関わらず人が居住できる環境にある。氷期等の過去に生じた大規模な気候変動はこの海洋大循環の変動と大きな関わりがあることが知られており、今後起こり得る気候変動の中でも、特に大規模かつ長期に及ぶものに関しては、この循環の振舞がひとつの焦点になる。その振舞を知るということは、すなわち、水平 1 km 程度のスケールにおける沈降

現象と水平 10 万 km スケールに及ぶ海洋大循環がどのように相互に関わっているかを解き明かすということである。

我々は今、地球温暖化という全地球規模の長期気候変動に直面している。その中で海洋がいかに変化し気候変動をどのようにコントロールするか、またその結果が沿岸海況や水産資源への影響を通してどのようなインパクトを人類社会に及ぼすのかを知ることは喫緊の課題である。そのためには、上述のように幅広いスケールに渡る現象の相互作用として存在する海洋大循環を理解し、その物理プロセスを適切に表現した数値モデルによる海洋大循環シミュレーションが必要とされる。こうしたシミュレーションは必然的に大規模計算となるため、その実現のためには高い効率を持った数値計算アプリケーションの開発が必須である。

こうした背景のもと、本研究では、海洋の大規模循環形成における小規模物理現象の役割を明らかにすることを目的とした数値海洋モデルの開発と実行を行う。モデル開発においては、次世代の超高並列クラスタ型大型計算機を念頭に、既存の海洋大循環モデルCOCO及び非静力学海洋モデルkinacoに対して、高並列アーキテクチャにおいて最大限の性能が得られるような改良を施す。特に 10 万を越えるような並列規模を想定し、モデルに

十分なスケーラビリティを発揮させるために通信の最適化や並列分割手法の最適化等を行う。また、ペタフロップスクラスの次世代スーパーコンピュータ上の実験規模は総格子数が 10^{11} を越えることが想定されるが、これは例えば倍精度実数で入出力すると 1 変数・1 スナップショットあたりおよそ 1 TB のデータ量となる。数値モデルによる海洋物理研究では流速や各種トレーサ分布等、多数の変数を高い頻度で記録する必要がある、これらのデータの入出力や解析および可視化における負荷も今後研究を遂行する上で解決すべき課題として挙げられる。これらの事前・事後処理においても大型計算機上での分散処理が可能となるようなシステムを構築することも視野に入れる。

本研究が対象とする開発項目は、計算アルゴリズムの開発とチューニング・通信最適化・大規模 I/O の効率化・可視化と多岐に渡るが、その中でも特に、通信最適化と大規模 I/O の効率化を主たるターゲットとする。計算アルゴリズムの開発とチューニングに関しては、これまでも東京大学情報基盤センターとの共同研究等を通して一定の成果を挙げており、引き続いての開発を行う。一方可視化に関しては、これらの課題が解決された上での開発課題と位置づける。

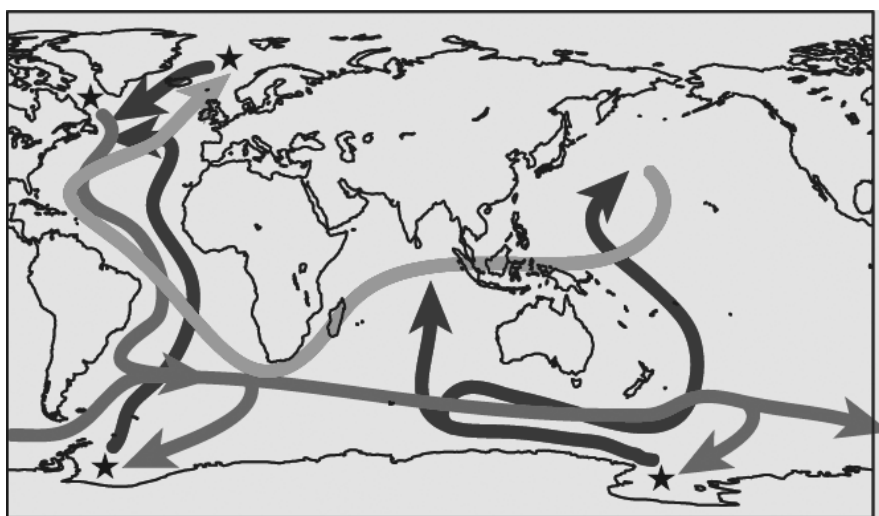


図 1: 全球規模熱塩循環の概略図。星印は深層水形成場所を示し、矢印は色が淡いものから順に表層（温度躍層から上）・深層（温度躍層から深度 3,000 m 程度）・底層（深度 4~5,000 m 程度）の水平流を示す。深層・底層の流れは徐々に上昇して表層の流れとなる。

2. 当拠点公募型共同研究として実施した意義

(1) 共同研究を実施した大学名

東京大学

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

(3) 当公募型共同研究ならではの事項など

前述の目的に対しては、例えば全海洋を1 km以下の水平格子で表現した上で、数千年にわたる時間発展をシミュレートすることがひとつの直接的な解決方法となるであろう。しかし、ペタフロップスクラスの計算機を用いたとしても、その実現には程遠い。海洋の数値モデリング研究の進展は、これまでと同様今後も、計算機性能の進展に大きく制約を受けることは間違いない。有限の計算資源を用いて最大限の研究成果を得るためには、使用する計算機の特性を把握し、それに合わせて計算手法や実験設定を適切に選択することが極めて重要である。海洋物理を専門とする研究者と数値計算手法の開発を専門とする研究者が共同して課題に取り組み、知識を共有することによって、海洋物理学と計算機科学双方の発展に大きな貢献があると期待される。

また、次世代スーパーコンピュータに代表されるように、今後の計算機環境ではスカラー型プロセッサを多数接続した高並列クラスタが主流になることは疑い得ない。数万プロセスを越える高並列アーキテクチャ上で、その資源を十分に使い切るような大規模海洋シミュレーションを行うには、通信の最適化や並列分割の最適化のみならず、力学コアにおける各種アルゴリズムの再検討やチューニング、さらにはデータ入出力と解析及び可視化といった事前・事後処理に至るまで、数値モデルのあらゆる部分で対応が必要とされる。各要素とも高い専門性が要求されるものであり、それぞれのエキスパートたる研究者が共同して取り組むことが必要である。

3. 研究成果の詳細

ここでは、局所領域における微小規模現象と大規模循環のつながりを扱ったシミュレーション研究の例として、南極周囲における深層水形成に関するものを紹介する。

南極大陸周囲における深層水形成では、海水生成に伴う高塩分水排出が海水の高密度化にとって本質的に重要である。その意味では、沿岸ポリニヤ（風ないし海流によって海水が陸から引き剥がされる領域）における活発な海水生成が特に重要

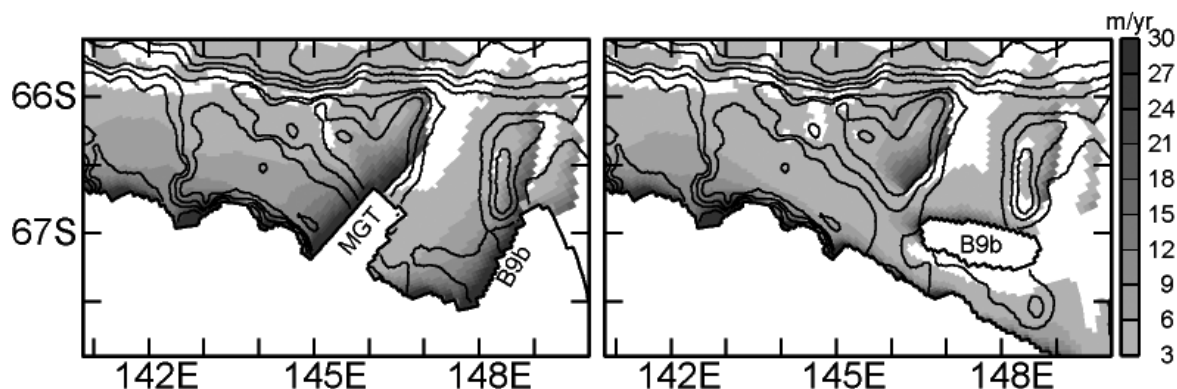


図2: 年間海水生成量（トーン）のモデリング結果。Mertz Glacier Tongue（図中のMGT）が（左）折れる前および（右）折れた後。等値線は海底の深度（等値線間隔100 m）。図中のB9bは大規模な冰山であり、過去10年程度に渡り左図のように座礁した状態にあったが、それが漂流してMGTにぶつかることでMGTが根元から折れた。なお、左図におけるMGTとB9bの先端から外洋方向には小規模な冰山が多数座礁しており、その風下にも沿岸ポリニヤが形成される。

となり、実際に沿岸ポリニヤの直下で顕著な高密度水形成が認められる。沿岸ポリニヤは陸地の風下ばかりでなく、南極上の大陸氷床が海洋上にせり出した氷河舌の風下にも存在する。実際のところ、Mertz Glacier Tongue と呼ばれる氷河舌の風下は南極大陸周囲でも有数の顕著な沿岸ポリニヤ域であり、そこにおける活発な海氷生成 (図2左) に伴う高密度水形成を起源とした深層水は、オーストラリアー南極海盆、ひいては太平洋に流入する深層水の主要な部分を占めると考えられている。この Mertz Glacier Tongue が折れるというイベントが最近発生した (2010年2月)。その折れる前後に関するシミュレーションを行ったところ、この領域での海氷生成量は顕著に低下し (図2右)、大陸棚上での高密度水形成も顕著に減少した。このシミュレーションにおいては、ターゲットとしている Mertz Glacier Tongue の直近では 3 km 程度の水平格子を採用しており、沿岸ポリニヤとそれに伴う高密度水形成過程が十分よく表現される一方、南極沿岸から離れるにつれて水平格子が大幅に大きくなるように座標系が設定されており、全海洋の循環を同時に表現している。

一方、大陸棚上で形成された高密度水が大洋深層を占める海洋深層水となる際には、高密度水が大陸斜面上を重力沈降流として下る過程で起こる様々な小規模 (水平 0.1~1 km スケール) プロセスの作用が重要である。大陸斜面の水平スケール (数百キロメートル) 全体にわたって 0.1 km の水平格子を適用することは現在のところ容易ではないため、重要となるプロセスのすべてを陽に表現するシミュレーションを行うことはできない。ここでは南極のウェッデル海における深層水形成過程をターゲットとした 1 km 弱の水平格子を適用したシミュレーションによって、大陸斜面上の小規模な地形的特徴が高密度水沈降過程に及ぼす影響について調べた。

シミュレートされた結果の特徴は以下のようにまとめられる (図3)。大陸棚から大陸斜面に流出した高密度水は 1500 m 程度の深度をほぼ等深度線に沿って西方に流れるが、その途中にある小規

模だが急峻な海嶺に沿って急激に下降する。高密度水はその後、3000 m 深あたりの海嶺の先端に達すると、一部はそれを迂回して再び等深度を西方に流れ、一部は渦運動によって海底深度の深い外洋へと輸送される。

斜面上において重力とコリオリ力の間のバランスだけを考慮する場合、コリオリパラメータ f 、等深度線に沿う流速 U 、斜面の勾配 α 、重力加速度 g 、高密度水の密度 ρ 、高密度水と周囲水の密度差 $\Delta\rho$ に対して $fU = -g\alpha\Delta\rho/\rho$ が成り立つ。この場合、任意の $f, \alpha, \rho, \Delta\rho$ に対して、バランスを満たす U が存在する。ただし、等深度線が曲率を持っている場合には、等深度線に沿う流れのバランスの中に遠心力の項が加わる。曲率半径を R とするとき (等深度線が沖に向かって凸の場合を正とする)、バランスの式は $fU + U^2/R = -g\alpha\Delta\rho/\rho$ となる。このバランスを満たす U が存在するためには、 R に上限値 $R_c = 4g\alpha\Delta\rho/\rho f^2$ が存在する。これよりも小さい正の曲率半径を持つ場合、等深度線に沿う流れは斜面に沿うことができず、剥離して外洋側へと向かう。外洋に向かう過程では高密度水層が上下に引き伸ばされることになるため、ポテンシャル渦度保存より高密度水層は f と同じ符号の渦度を獲得する。今回のシミュレーション対象における典型的な条

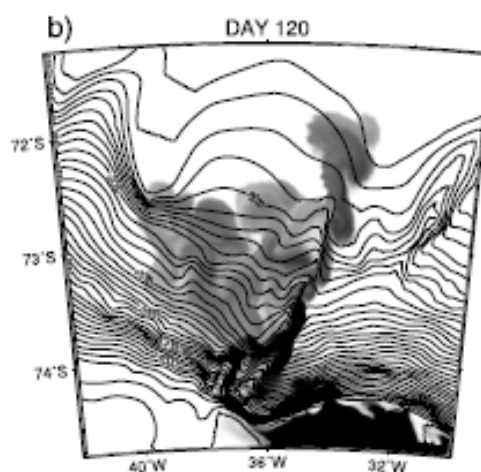


図3: 海底直上における大陸棚起源高密度水の濃度 (濃淡)。等値線は深度を表し、間隔は 100 m。図下部が大陸棚にあたり、右下の高密度水濃度の高い部分が流出源。

件で R_c を見積もるとおよそ4 kmとなる。シミュレーション結果で渦が切離した海嶺の先端の極率半径は3~5 kmであり、この渦は上述の理由によって生成するものと考えられる。

一方、海嶺の手前の部分は曲率が負であり、遠心力は流れを斜面に押し付ける方向に働くため、高密度水の沈降を阻害する要因として働く。その一方で、この部分では等深度線に沿って進むにつれて斜面の勾配が急になっていく。この場合には、バランスの式において、斜面勾配が空間的に変化する影響を表す項が新たに追加されることになる。ここでは具体的な式は割愛するが、その結果として、曲率・コリオリパラメータ・斜面勾配それぞれについて等深度線に沿って考えた微分が問題となり、それらの兼ね合いによって沈降が生じるかどうかが決まる。これについてもやはり今回のモデリング対象における典型的な条件で評価したところ、海嶺の手前は確かに高密度水の沈降が生じるべき場所に当たっていた。

4. これまでの進捗状況と今後の展望

(1) スカラープロセッサ向けチューニング

海洋大循環モデルCOCOに関しては、最高負荷部分であるトレーサ輸送アルゴリズムSOMに対してループのブロック化等を行い、ループ内変数がキャッシュメモリに同時に乗るようなチューニングを試みた。

SOMの計算に現れる変数は最大3次元であり、配列の1次元目は水平2次元を1次元化したもの、2次元目は鉛直次元、3次元目はトレーサ(温度・塩分、およびその他必要に応じた溶存物質濃度)の次元に対応している。プログラム中では、水平次元がIJ、鉛直次元がK、トレーサ次元がNによるループで表されており、デフォルトのコーディングではIJが最内・Nが最外ループとなっている。ループ長は、IJについては並列数(モデルは基本的に水平的に領域分割する)に依存するが通常は最も長く、次いでKが50~100程度、Nが2~10程度である。ループ内では、水平座標の計量など、

K, Nに依存しない変数が多数用いられる。その事情に鑑み、IJおよびKによるループについて、それぞれ次のようなチューニングを行った。

水平方向のトレーサ輸送計算では、Kループを一番外に出し、このループをOpenMPでスレッド並列化した上で、IJループを可能な限り統合した。一方、鉛直方向のトレーサ輸送計算では、メモリアクセスの局所化を狙ってIJループをブロック化し、配列サイズも可能な場合は小さくした。また、そのブロック化されたIJループをOpenMPでスレッド並列化した。

上記の水平方向に関するチューニングは、鉛直1層分の変数がL2キャッシュのサイズ(512 KB)に収まることを前提に行われている。その条件の適否は当然1プロセスあたりの水平格子数、すなわち問題サイズと並列数に依存する。HA8000の64ノードを用いて64プロセス4スレッドのハイブリッド並列化を行う場合について、この条件が満たされる問題サイズのモデルを設定して、チューニングの性能を調べたところ、2.2倍の高速化が実現された。

一方、非静力学海洋モデルkinacoに関しては、最高負荷部分であるポワソンソルバーに対して高速化チューニングを行った。このモデルではポワソンソルバーとして、多重格子法を前処理とした共役勾配法を用いている。この手法に基づくソルバーは計算量が格子数に線型に依存するため大規模計算に適しており、また、並列計算との親和性が高いことが知られている。

このポワソンソルバーでは行列 L に対して $\mathbf{a} = \mathbf{x} + L\mathbf{y}$ の形の演算を行うが($\mathbf{a}, \mathbf{x}, \mathbf{y}$ は3次元変数をベクトルとして表したもの)、この部分の並列実効性能が低いことが判明した。 L は各行に7個のみの非ゼロ要素を持つ疎行列であり、コード上では、水平第1次元がI、水平第2次元がJ、鉛直次元がKによるループで表されるとするとき、 $A(I, J, K) = X(I, J, K) + L(-3, I, J, K) * Y(I, J, K-1) + L(-2, I, J, K) * Y(I, J-1, K) + L(-1, I, J, K) * Y(I-1, J, K) + L(0, I, J, K) * Y(I, J, K) + L(1, I, J, K) * Y(I+1, J, K) + L(2, I, J, K) * Y(I, J+1, K) + L(3, I, J, K) *$

$Y(I, J, K+1)$ の形の演算を実行する。 L の非ゼロ要素の値は隣接する格子と共有する面の面積によって決められる（海底においては格子の全部または一部が「陸」であるとして扱われ、その場合、上記の面積は「陸」の部分を除いたものとなる）。

モデルでは鉛直座標を深度としているため、ある格子点とその直下の格子点に対する L の非ゼロ要素は、両格子点の鉛直格子幅が同じであり、かつ格子点を取り囲む海陸の状況が同じであれば、同一になる。あるプロセスが受け持つ水平領域全体についてこれがあてはまる場合、 $L(-3:3, :, :, K+1) = L(-3:3, :, :, K)$ となるため、 K ループが I および J ループの外側であれば、 L を新たにキャッシュ上に読み出さずに一つ前の K に対する L で流用することができる。そのようなコーディングを施したところ、理想化された海底地形（一定勾配の斜面）を用いたテストケースではこの部分の並列実効効率が格段に改善された。現実の海底地形のもとでのシミュレーションの場合には上記の条件が適用される割合がプロセス（水平分割領域）によって大きく異なり得るため、そのロードバランスの問題を解決することが今後の課題となる（図4）。

以上の通り、高負荷部分の高並列チューニングについては着実に進捗している。

(2) 大規模 I/O の効率化

海洋大循環モデルと非静力学海洋モデルはともに、空間3次元の変数を頻繁に入出力する。並列実行において、問題サイズが小規模の場合には、MPIのgather/scatterを用いて1プロセスで入出力を行うことで計算効率上の問題は生じず、これらモデルのI/Oはデフォルトではそのようにコーディングされている。一方、高並列の場合には、入出力ファイルをプロセスごとに分割する手法も採り得るが、並列数が1万を越えるような超高並列を想定した場合には、前・後処理の煩雑さやファイルのポータビリティの面から、あまり現実的な解決策とは言えない。

超高並列における大規模I/Oへの対応策として、ここではMPI-IOの導入を行い、他の入出力方法との比較を行った。本共同研究で割り当てられた計算資源ではないが、おそらくは関連性を認めていただいた上で、東京大学HA8000の512ノードを1日使う機会を得た。そこで、8192並列のもとで非静力学海洋モデルkinacoを用い、MPI-IOを含むいくつかの入出力方法に関する基本的性能測定を行った。試した入出力方法は、1)単一ファイルに対して各プロセッサがファイル内の位置を指定して直接入出力、2)3次元変数のうち鉛直1層分の2次元分についてだけ1プロセスがgather/scatterを行ってファイル入出力を担当(そ

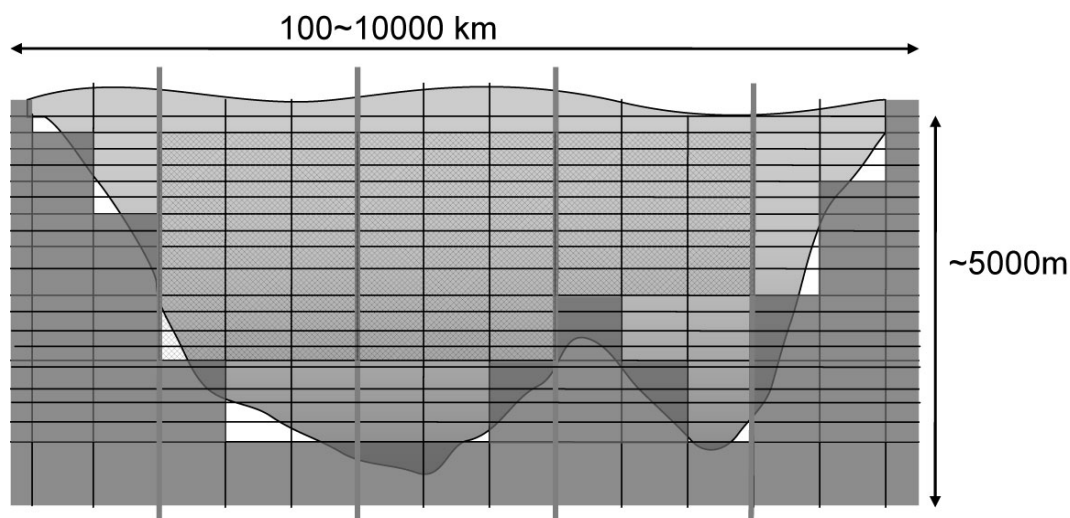


図4: 各水平分割領域（太縦線で区切られた領域）において、上下方向に海陸分布が同じ範囲（網掛け）では、係数行列の要素が一致する。

の際の `gather/scatter` はノンブロッキング通信で行い、ファイル入出力の裏で行うことで通信隠蔽が可能なようにコーディング)、3)MPI-IO を使用、である。このうち 1)の方法は 8192 並列のもとでは 2)、3)とは比較にならないほど動作が遅かったため、以下では 2)、3)の結果のみを比較する。なお、MPI-IO ではブロッキング通信とノンブロッキング通信の両方の手続きが可能だが、今回両者をもとに試してみたところ、結果に差は現れなかった。ノンブロッキング通信の手続きが HA8000 上で実装されていないということだろうか。

性能測定においては、水平・鉛直格子数のいくつかの組み合わせに対して、3 次元変数を 6 個出力させる形で行った。それに要した時間をまとめたものが表 1 である。それぞれ 1 回のみの測定であるため注意が必要であるが、データ量が最小のケースを除いて MPI-IO を用いる方が明確に高速である。特にデータサイズが数 GB を越える場合にはその差が顕著であり、本モデルによる大規模問題の高並列実行において、MPI-IO の優位性が示された。

以上の通り、大規模 I/O の効率化に関しては、各種の方法を試して性能測定を行い、対応として MPI-IO を用いるという方針を確定させ、必要な

モデル開発を行った。ユーザ側の対応としては当初の目的は達したものと言える。あとは計算機側の実装の問題となるだろう。

(3) その他

主要なターゲットのひとつに挙げた通信最適化については、本格的な開発やチューニングには残念ながら至っていない。ただし、上記の MPI-IO の場合に見られるように、ノンブロッキング通信が実装に反映されていないと想像されるケースがあり、今後、計算機システム側の人々と密に連絡を取り、状況を調査しながら開発作業を進める必要を感じる。

5. 研究成果リスト

- (1) 学術論文 (投稿中のものは「投稿中」と明記)
- Kusahara, K., H. Hasumi and G. D. Williams, Impact of the Mertz Glacier Tongue calving on dense water formation and export, *Nat. Commun.*, in press.
- Kusahara, K., H. Hasumi and G. D. Williams, Dense shelf water formation and brine-driven circulation in the Adelie and George V Land

表 1: I/O 所要時間の比較。「—」は設定時間内に実行が終了しなかった等、不測の事態により測定できなかったことを示す。

格子数	1 変数あたりデータ量 (MB)	1 プロセスによる入出力の所要時間 (秒)	MPI-IO による入出力の所要時間
1024×512×60	240	16.29	20.56
1024×512×120	480	27.29	17.63
1024×512×240	360	51.85	24.65
2048×1024×60	960	49.57	16.57
2048×1024×120	1920	101.7	69.26
2048×1024×240	3840	199.1	—
4096×1024×60	3840	241.0	45.93
4096×1024×120	7680	431.2	29.06
4096×1024×240	15360	—	93.89
8192×4096×60	15360	—	235.8

region, *Ocean Modelling*, in press.

Matsumura, Y., and H. Hasumi: Dynamics of cross-isobath dense water transport induced by slope topography, *J. Phys. Oceanogr.*, submitted.

(2) 国際会議プロシーディングス
なし

(3) 国際会議発表
なし

(4) 国内会議発表
なし

(5) その他（特許，プレス発表，著書等）
なし