

浅水波モデルにおける浮動小数点演算誤差の理論的時間変化

Theoretical time evolution of numerical errors when using floating point numbers in shallow-water models

- 山浦 剛, 理研 CCS, 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26, tyamaura@riken.jp
- 西澤 誠也, 理研 CCS, 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26, s-nishizawa@riken.jp
- 富田 浩文, 理研 CCS, 兵庫県神戸市中央区港島南町 7-1-26, htomita@riken.jp
- Tsuyoshi Yamaura, RIKEN Center for Computational Science, 7-1-26, Minatojima-minami-machi, Chuo-ku, Kobe, Japan
- Seiya Nishizawa, RIKEN Center for Computational Science, 7-1-26, Minatojima-minami-machi, Chuo-ku, Kobe, Japan
- Hirofumi Tomita, RIKEN Center for Computational Science, 7-1-26, Minatojima-minami-machi, Chuo-ku, Kobe, Japan

We carried out a theoretical investigation of the impact of the numerical errors caused by using floating point numbers (FPNs) in simulations, such as rounding errors. Under the presupposition that model variables can be written as the linear sum of the true value and the numerical error, equations governing the time evolution of numerical errors due to FPNs (FPN errors) are obtained by considering the total errors of the results of simulations of shallow-water models and estimating the errors incurred by using FPNs with varying precision. We can use the time evolution equations to estimate the behavior of the FPN errors, then confirm these estimations by carrying out numerical simulations.

1. はじめに

昨今の計算機の進化は凄まじいが、気象モデル計算においては高解像度化、物理スキームの精緻化、アンサンブル実験等、計算機に要求する演算コストは増大する一方であり、未だ計算機の演算性能は要求する演算コストに対して十分にあるとは言えない。演算コストと演算精度はトレードオフの関係にあり、演算コストを下げるには、演算結果の精度をある程度犠牲にする必要がある⁽¹⁾。そこで倍精度浮動小数点数 (FPN) を用いてきた従来の数値流体計算モデルに対し、単精度 FPN を用いて演算コストを大きく減少させる試みがここ数年行われてきている⁽²⁾⁽³⁾⁽⁴⁾。一方、これらの演算精度を減少させた場合の演算結果に対する影響の評価は、倍精度 FPN を用いた演算結果と比較して問題がみられないという手法が主である。この評価手法の問題点は、単精度 FPN を用いても問題ないことが比較した実験設定においてのみ保証されているということである。特に将来的に時空間解像度がより高まった場合、従来と同様に単精度 FPN 演算を行っても問題ないのかという疑問は残されたままである。本研究はその疑問に答えるために、支配方程式系から FPN 演算による計算誤差 (FPN 誤差) を推定し、その時間発展を理論的に明らかにすることを目的とする。本研究の詳細は Yamaura et al.⁽⁵⁾ にまとめられている。

2. 浮動小数点演算誤差の理論的時間変化

FPN 誤差を理論的に表現するために、計算誤差が次のように表現されると仮定する。

$$p = p^{(0)} + p^{(\varepsilon)}$$

ここで p はモデルの予報変数であり、浮動小数点数で表現される。 $p^{(0)}$ は真値であり、実数で表現される。FPN 誤差は $p^{(\varepsilon)}$ として表現され、真値同様、実数で表現される。これを図で表すと、図 1 のように示される。この $p^{(\varepsilon)}$ がどのように時間変化するかを考える。ただし、 $p^{(\varepsilon)}$ は計算機上で直接表現することはできないので、次のような近似を考える。

$$p^{(L)} - p^{(H)} = p^{(\varepsilon_L)} - p^{(\varepsilon_H)} \equiv p^{(\delta)}$$

ここで $p^{(L)}$ 、 $p^{(H)}$ はそれぞれ低精度、高精度 FPN であり、 $p^{(\varepsilon_L)}$ 、 $p^{(\varepsilon_H)}$ はそれぞれ低精度、高精度の FPN 誤差である。 $p^{(\delta)}$ は $p^{(\varepsilon_L)}$ 、 $p^{(\varepsilon_H)}$ の差を示す。低精度 FPN よりも十分に高精度の FPN の表現が

良い場合、即ち $p^{(\varepsilon_H)}$ が十分に小さい場合、 $p^{(\varepsilon_L)} \approx p^{(\delta)}$ というように近似できる。このようにして、FPN 誤差を近似的に得られる。

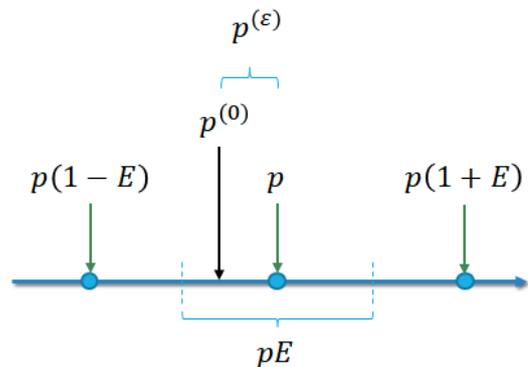


Fig. 1; Schematic diagram of the floating-point error when using bankers rounding, after substituting a value into the model variable p .

上記の近似により、 $p^{(\delta)}$ を得られることが分かった。この FPN 誤差の時間変化を理論的に調べるために、本研究ではまず単純な浅水波方程式を考える。

$$\triangleright \frac{\partial u}{\partial t} = -u \frac{\partial u}{\partial x} - v \frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial \phi}{\partial x} + fv$$

$$\triangleright \frac{\partial v}{\partial t} = -u \frac{\partial v}{\partial x} - v \frac{\partial v}{\partial y} - \frac{\partial \phi}{\partial y} - fu$$

$$\triangleright \frac{\partial \phi}{\partial t} = -u \frac{\partial \phi}{\partial x} - v \frac{\partial \phi}{\partial y} - \phi \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right)$$

ここで u, v, ϕ はそれぞれ、東西・南北流速 (m/s)、ジオポテンシャル (m^2/s^2) を示す。 f はコリオリパラメータ (1/s) で一定値とする。この微分方程式を差分化し、各予報変数の FPN 誤差を代入すると、次の式を得る。

$$\triangleright \frac{\Delta_N u_{i,j,N}^{(\delta)}}{\Delta t} = - \left(u_{i,j,N}^{(0)} \frac{\Delta u_{i,j,N}^{(\delta)}}{\Delta x} + u_{i,j,N}^{(\delta)} \frac{\Delta u_{i,j,N}^{(0)}}{\Delta x} \right) - \left(v_{i,j,N}^{(0)} \frac{\Delta u_{i,j,N}^{(\delta)}}{\Delta y} + v_{i,j,N}^{(\delta)} \frac{\Delta u_{i,j,N}^{(0)}}{\Delta y} \right) - \frac{\Delta \phi_{i,j,N}^{(\delta)}}{\Delta x} + f v_{i,j,N}^{(\delta)} + F_u$$

$$\begin{aligned} \text{➤ } \frac{\Delta_N v_{I,J,N}^{(\delta)}}{\Delta t} &= - \left(u_{I,J,N}^{(0)} \frac{\Delta_I v_{I,J,N}^{(\delta)}}{\Delta x} + u_{I,J,N}^{(\delta)} \frac{\Delta_I v_{I,J,N}^{(0)}}{\Delta x} \right) - \left(v_{I,J,N}^{(0)} \frac{\Delta_J v_{I,J,N}^{(\delta)}}{\Delta y} + \right. \\ &\quad \left. v_{I,J,N}^{(\delta)} \frac{\Delta_J v_{I,J,N}^{(0)}}{\Delta y} \right) - \frac{\Delta_J \phi_{I,J,N}^{(\delta)}}{\Delta y} - f u_{I,J,N}^{(\delta)} + F_v \\ \text{➤ } \frac{\Delta_N \phi_{I,J,N}^{(\delta)}}{\Delta t} &= - \left(u_{I,J,N}^{(0)} \frac{\Delta_I \phi_{I,J,N}^{(\delta)}}{\Delta x} + u_{I,J,N}^{(\delta)} \frac{\Delta_I \phi_{I,J,N}^{(0)}}{\Delta x} \right) - \\ &\quad \left(v_{I,J,N}^{(0)} \frac{\Delta_J \phi_{I,J,N}^{(\delta)}}{\Delta y} + v_{I,J,N}^{(\delta)} \frac{\Delta_J \phi_{I,J,N}^{(0)}}{\Delta y} \right) - \phi_{I,J,N}^{(0)} \left(\frac{\Delta_I u_{I,J,N}^{(\delta)}}{\Delta x} + \frac{\Delta_J v_{I,J,N}^{(\delta)}}{\Delta y} \right) - \\ &\quad \phi_{I,J,N}^{(\delta)} \left(\frac{\Delta_I u_{I,J,N}^{(0)}}{\Delta x} + \frac{\Delta_J v_{I,J,N}^{(0)}}{\Delta y} \right) + F_\phi \end{aligned}$$

ここで Δ_I , Δ_J はそれぞれ x , y 方向の差分演算子、 I , J , N はそれぞれ x , y , t 方向の格子番号、 F_u , F_v , F_ϕ はそれぞれ $u^{(\delta)}$, $v^{(\delta)}$, $\phi^{(\delta)}$ への外部強制項を示す。この方程式系に地衡風平衡状態、順圧不安定状態に相当する初期値を設定し、式を整理すると、地衡風平衡では FPN 誤差が振動しながら外部強制項によってその振幅が増大していくことを示す式を、順圧不安定では FPN 誤差を種とした順圧不安定波が成長していくことを示す式を得ることができる。

3. 数値実験

前述の式から得られる解を確認するために、数値実験を行う。初期値は地衡風平衡状態 (図 2)、および順圧不安定状態 (図 3) に相当する値を与える。ここで演算精度による演算結果への影響を定量的に評価するため、空間方向の二乗平均平方根で FPN 誤差を評価する。

$$RMS(p_N^{(\delta)}) = \sqrt{\frac{1}{I_{max}} \sum_{I=1}^{I_{max}} \frac{1}{J_{max}} \sum_{J=1}^{J_{max}} (p_{I,J,N}^{(\delta)})^2}$$

I_{max} , J_{max} はそれぞれ x , y 方向の格子数を示す。このとき、地衡風平衡実験では外部強制項の存在により徐々に FPN 誤差が増大するが、この強制は浮動小数点演算による丸め誤差が支配的であり、切り上げ・切り捨てにより正負両方に力が働く。そのためこの強制はランダムウォークのような変化を示すことが期待される。ランダムウォークの時間積分は、その標準偏差が時間の平方根に従うことが知られており、

$$RMS(p_N^{(\epsilon)}) = \sqrt{(RMS(p_0^{(\epsilon)}))^2 + \gamma_p^2 \cdot N}$$

というように書くことができる。ここで γ_p^2 はランダム強制の大きさを示す。このランダム強制の大きさは与えられた初期値から推定できるので、FPN 誤差の時間変化を推定することができる。図 4 は地衡風平衡において各予報変数の FPN 誤差の RMS 値の時間変化を示す。破線は理論的变化であり、実線は数値実験による $p_N^{(\delta)}$ の RMS 値を示す。図に示されるように、数値実験によって FPN 誤差の RMS 値が時間進行に対してその平方根で増大していくことが示され、理論的な推定値と一致していることが確認できる。これは FPN 誤差がランダムウォークのような変化をしていることを裏付ける。またこの FPN 誤差の自己相関関数を調査してもランダム的であるという結果が得られており (図 5)、FPN 誤差はランダム強制のように扱うことができることを示す。

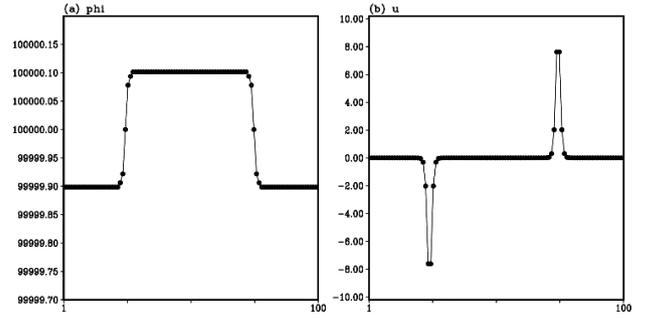


Fig. 2; The initial distribution of (a) ϕ and (b) u in the geostrophic wind balance experiment. The ordinate indicates the value of each variable. The abscissa is the grid coordinate in the y -direction.

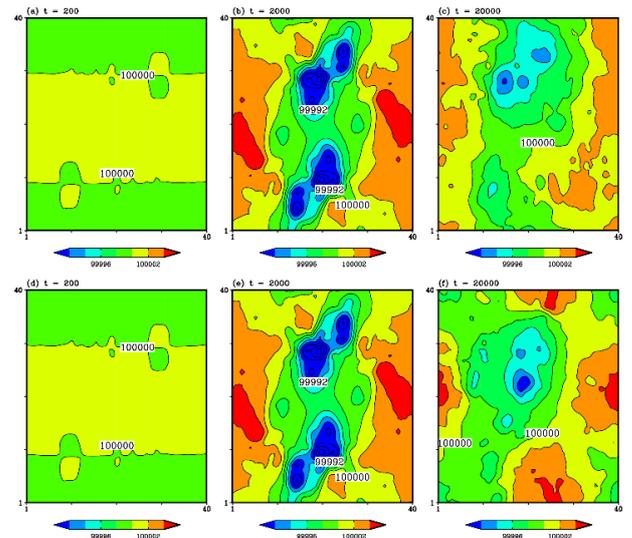


Fig. 3; The spatial pattern of geopotential obtained from the barotropic instability experiment after (a) 200 seconds, (b) 2,000 seconds, and (c) 20,000 seconds (QP FPNs). (d), (e), and (f) are as (a), (b), and (c), except that DP FPNs were used.

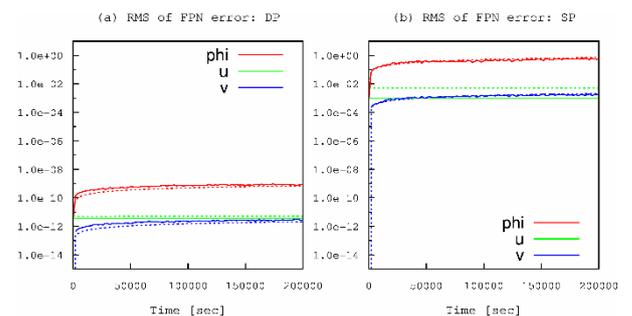


Fig. 4; (a) The time evolution of the root-mean-square of the floating-point number (FPN) errors from the geostrophic wind balance experiments using double-precision (DP) FPNs. The output is recorded every 2,000 seconds. The solid (dotted) lines are the experimental (ideal) values of the FPN errors. The ideal equation is described in detail in the text. (b) The same as (a), except for single-precision (SP) FPNs.

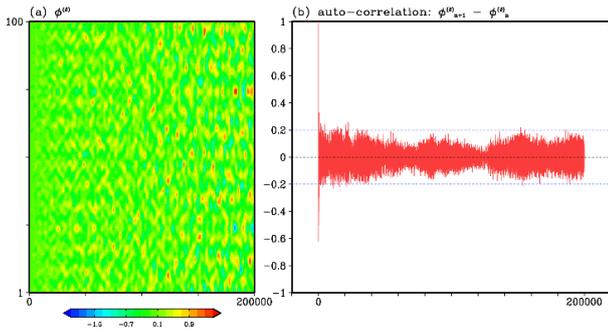


Fig. 5; (a) The difference in geopotential ($\phi^{(\delta)}$) between the quadruple-precision (QP) FPN and SP FPN analyses (SP - QP) in the geostrophic wind balance experiment. The abscissa is integrated time at 2,000 second intervals; the ordinate is the y-grid number. (b) The auto-correlation time series of the one-step difference of $\phi^{(\delta)}$ in the geostrophic wind balance experiment. The abscissa is delayed time; the ordinate shows correlation coefficients. The blue dashed line indicates the 5% significance level (100 samples).

順圧不安定実験では、FPN 誤差の RMS 値は通常の順圧不安定波のように成長することが分かる (図 6)。実験開始後 400 秒あたりまでは時間の平方根に従う時間変化を示すが、400 秒~5000 秒あたりは順圧不安定波の線形最大成長率に従う大きさに発達していくことが分かる。その後、やや成長率が低下し、12000 秒あたりで RMS 値の成長は止まる。この FPN 誤差の成長停止は実験設定に由来すると考えられる (側面境界の存在)。

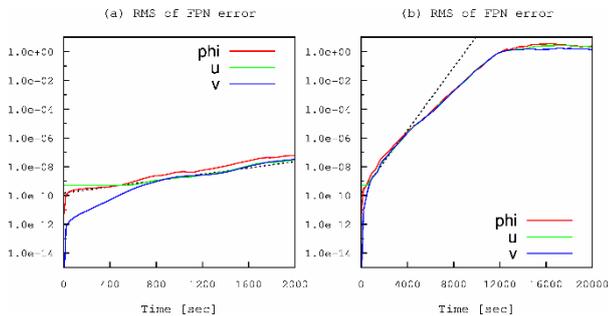


Fig. 6; (a) The time evolution of the FPN error in the barotropic instability experiment, up to 2,000 seconds. The output interval is 20 seconds. The solid lines indicate the experimental values of the FPN error. The dotted black line indicates the theoretical growth rate of the barotropic instability wave. (b) As (a), except time integration proceeds to 20,000 seconds and the output interval is 200 seconds.

FPN 誤差の RMS 値は物理量に依存するため、実際にどの程度その誤差が重要なかは不明である。直観的に FPN 誤差の相対的寄与を理解するために、FPN 誤差の大きさを標準偏差で規格化する。

$$NIFE(p_N) = \frac{RMS(p_N^{(\epsilon_L)})}{STD(p_N)}$$

規格化 FPN 誤差指標 (NIFE) は、どの程度の大きさで影響が小さいとするかは問題次第であるが、予報変数の標準偏差でその FPN 誤差を割るので無次元化され、異なる変数同士の FPN 誤差の重要性を比較できる (図 7)。

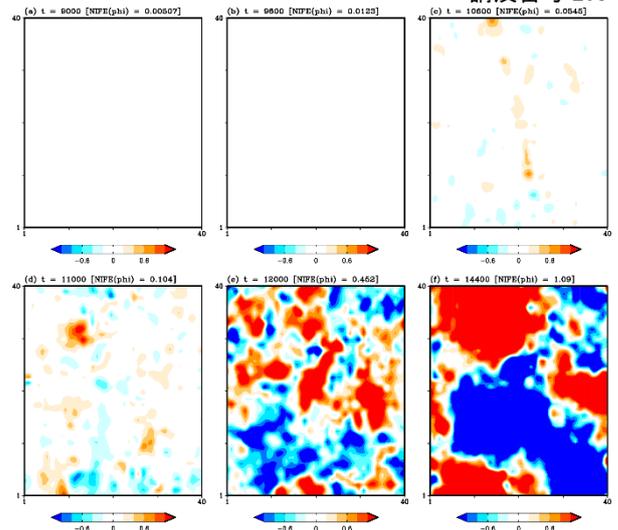


Fig. 7; Using DP FPNs, the FPN error patterns of the geopotentials obtained from the barotropic instability experiment after (a) 9,000 seconds, (b) 9,600 seconds, (c) 10,600 seconds, (d) 11,000 seconds, (e) 12,000 seconds, and (f) 14,400 seconds. The shading scale is shown at the bottom of each panel and the geopotential normalized index of FPN error (NIFE) is shown at the top of each panel.

4. まとめ

本研究では数値気象モデルにおける FPN 誤差の演算結果に対する影響について調査した。その結果、FPN 誤差の時間発展方程式を導いて、定常解と不安定解における線型時間発展方程式の理論的な解を得ることができた。また得られた解は、数値モデルによって検証が行われた。これらの結果は浅水波モデルでの結果であるが、将来的にはより実際の数値気象モデルへの応用を見込んでいる。

参考文献

- (1) Lingamneni, A., C. Enz, J. L. Nagel, K. V. Palem, and C. Piguet, "Energy parsimonious circuit design through probabilistic pruning", *Proceedings of Design, Automation and Test in Europe Conference Exhibition (DATE)*, Grenoble, (2011), pp.1-6.
- (2) Yamagishi, T., and Y. Matsumura, "GPU acceleration of a non-hydrostatic ocean model with a multigrid Poisson/Helmholtz solver", *Procedia Computer Science*, 80 (2016), pp.1658-1669.
- (3) Vaña, F., P. Düben, S. Lang, T. Palmer, M. Leutbecher, D. Salmond, and G. Carver, "Single Precision in Weather Forecasting Models: An Evaluation with the IFS", *Mon. Wea. Rev.*, 145 (2017), 495-502.
- (4) Nakano, M., H. Yashiro, C. Kodama, and H. Tomita, "Single Precision in the Dynamical Core of a Nonhydrostatic Global Atmospheric Model: Evaluation Using a Baroclinic Wave Test Case", *Mon. Wea. Rev.*, 146 (2018), pp.409-416.
- (5) Yamaura, T., S. Nishizawa, and H. Tomita, "Theoretical time evolution of numerical errors when using floating point numbers in shallow-water models", *J. Adv. Model Earth Sys.*, (in press).