

jh210022-MDH

三次元強震動シミュレーションとリアルタイムデータ同化の融合

中島 研吾 (東京大学)

概要

大地震における長周期地震動の予測と災害軽減に向けて、全国に展開された地震観測網の観測データと地震波動伝播のシミュレーションを融合した長周期地震動の予測手法が提案されており、古村らは三次元長周期強震動シミュレーションと観測データによる同化を実施するコード Seism3D/OpenSWPC-DAF (Data-Assimilation-Based Forecast) を開発している。本研究は、全国地震観測データ流通ネットワーク「JDXnet」による観測データを受信、処理し、Seism3D/OpenSWPC-DAF による「データ同化・シミュレーション」融合をリアルタイムに実施するフレームワークをスーパーコンピュータ上に構築し、長周期地震動に対する安全な防災行動、減災を実現することを最終的な目標とする。2021年度は、Wisteria/BDEC-01 (東京大学情報基盤センター) 及び「計算・データ・学習」融合を実現する革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」を使用し、新潟県中越沖地震 (2007年) について、「データ同化・シミュレーション」融合を実施した。またデータ同化手法、三次元地下構造を推定するための機械学習手法、及びヘテロジニアスな環境で「計算・データ・学習」融合を実現するための関連ソフトウェア開発を実施した。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同研究を実施した拠点名

東京大学 名古屋大学

(2) 共同研究分野

超大規模数値計算系応用分野

超大規模データ処理系応用分野

超大容量ネットワーク技術分野

超大規模情報システム関連研究分野

(3) 参加研究者の役割分担

- ・ 中島研吾 (東大・情基セ) (代表) ①
- ・ 古村孝志 (東大・地震研) (副代表) ②③④
- ・ 市村強・藤田航平 (東大・地震研) ②⑤
- ・ 鶴岡弘 (東大・地震研) ③④
- ・ 長尾大道・伊藤伸一 (東大・地震研) ④
- ・ 塙敏博・松葉浩也 (東大・情基セ) ①③
- ・ 河合直聡 (東大・情基セ) ④
- ・ 下川辺隆史・芝隼人 (東大・情基セ) ⑤
- ・ 八代尚 (国立環境研)・荒川隆 (RIST) ①
- ・ 大島聡史 (名大) ①
- ・ 坂口吉生・住元真司・野村征爾・田中雄貴 (富士通) ①③

注：①h3-Open-BDEC, ②強振動シミュレーション, ③リアルタイム処理, ④データ同化, ⑤機械学習

③リアルタイム処理, ④データ同化,

⑤機械学習

2. 研究の目的と意義

本研究では、全国地震観測データ流通ネットワーク「JDXnet (Japan Data eXchange network)」によって得られる地震観測データを利用したリアルタイムデータ同化と高精度な三次元強震動シミュレーションの融合による計算手法、機械学習による三次元地下構造モデルの改良手法、及び関連するソフトウェア群の研究開発を実施する。東京大学情報基盤センターの Oakforest-PACS (OFP), Oakbridge-CX (OBCX), Wisteria/BDEC-01 (Wisteria) システムを使用した検証を実施する他、革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」等のソフトウェア群を「富岳」を含む HPCI 計算資源群等に展開し、「シミュレーション (Simulation) + データ (Data) + 学習 (Learning) (S+D+L)」融合の促進に資する (図 1)。

また本研究は、リアルタイム観測に基づくデータ同化と三次元シミュレーションの融合により、地震波動伝播の精度の高いシミュレーション実行を可能とし、より精密な避難計画の策定にも資するものである。

3. 当拠点公募型研究として実施した意義

本研究は、東京大学地震研究所、同 情報基盤センター、名古屋大学、国立環境研究所、富士通株式会社等の産学官の計算科学、計算機科学、数値アルゴリズム、データ科学、機械学習の専門家の緊密な協力のもとに「シミュレーション+データ+学習 (S+D+L)」融合を目指して実施される学際的な研究である。本研究で利用予定のシステムのうち OBCX, Wisteria は、高い計算能力のみならず、外部ネットワーク経由に直接接続し、JDXnet による観測データの直接取得が可能であるとともに、データ解析、機械学習にも適したハードウェア、ソフトウェアを有し、「S+D+L」融合のためのプラットフォームとして最適である。近年は、名古屋大、大阪大、九州大等にもヘテロニアスなノード構成に基づき、「S+D+L」融合を指向したシステムが多数導入されており、本研究の成果をこれらのシステムに展開することによって、JHPCN 各センターにおける「S+D+L」融合促進にも貢献する。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要 該当せず

5. 今年度の研究成果の詳細

全体的に計画通りに進めることができた。

以下、(1) Wisteria/BDEC-01・h3-Open-BDEC を使用したリアルタイム観測データ同化・三次元強震動シミュレーションの融合、(2) データ同化手法、(3) 大規模機械学習、について述べる。関連ソフトウェア群については (1) において説明する。

(1) リアルタイム観測データ同化・三次元強震動シミュレーション融合

① Seism3D/OpenSWPC-DAF [25]

「Seism3D/OpenSWPC-DAF (Data-Assimilation-Based Forecast)」は、古村らによって開発され、三次元の運動方程式を差分法で解いている。従来のシミュレーション (Pure Simulation, Pure S) は、震源にある変位を初期条件として仮定し、それにより起こった地震波が伝わる様子を差分法で計算していた (図

1)。震源における初期条件の仮定が間違っていると正しい結果を計算することはできない。新しい「シミュレーション+データ同化」融合による手法 (Assimilation+Simulation, A+S) では、初期条件を仮定する必要がなく、実際の地震による変位を使用し、シミュレーション結果を観測結果でリアルタイムに補正、すなわち同化しながら進めている。同化には「最適内挿法 (Optimal Interpolation Method)」を使用している (図 1)。

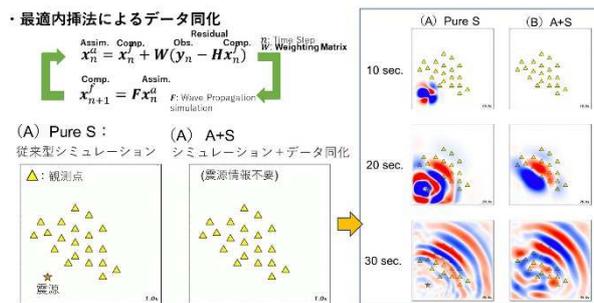


図 1 : Seism3D/OpenSWPC-DAF における「計算+データ同化」融合

②JDXnet [25]

地震観測網には大きく分けて、高感度地震観測網、広帯域地震観測網、強震観測網 (2. で使用した K-NET, KiK-net 等) がある。JDXnet (全国地震データ流通システム, Japan Data exchange network) が対象とするのは、観測点からデータがリアルタイムで 24 時間 365 日常時送られてくる高感度地震観測網 (Hi-net (High Sensitivity Seismograph Network Japan) 等) と広帯域地震観測網 (F-net (Full Range Seismograph Network of Japan) 等) である。日本列島には約 1,300 の高感度地震観測点 (Hi-net 等) と約 120 の広帯域地震観測点 (F-net 等) が設置され、日本列島周辺で発生した微小地震から巨大地震までの地震をいち早く検知して、その発生場所や地震の規模を求めるのに使用されている。気象庁が緊急地震速報を出すための観測点もこれらの観測点に含まれている。広帯域地震観測網は、日本列島周辺だけでなく世界の大地震の観測も可能で、周辺海域で発生する地震の津波警報の発表等にも利用されている。

これらの高感度地震観測網と広帯域地震観測網は、全国の 9 国立大学、気象庁、防災科学技術研究所、

海洋研究開発機構，産業技術総合研究所などが観測点を設置して実施している。全国地震データ流通システム JDXnet はこれらの各機関のすべての地震観測データを SINET/JGN 経由でリアルタイムにそれぞれの機関のみならず全国の大学等の研究機関に流通させている（図 2）。

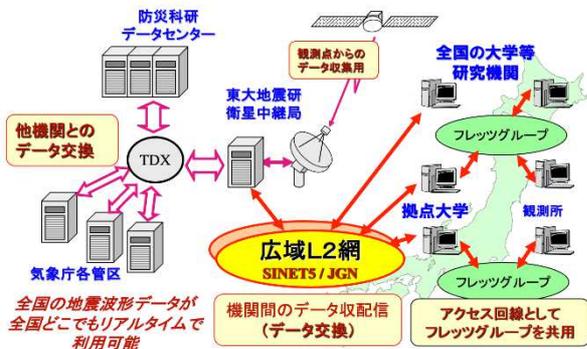


図 2 : JDXnet の概要

③ h3-Open-BDEC [9,10,21,26,36,37]

東京大学情報基盤センターでは，センター内外の計算科学，計算機科学，数値アルゴリズム，データ科学，機械学習の専門家と協力して，エクサスケール時代のスパコンの能力を最大限活用し，科学的発見を持続的に促進するために，（計算・データ・学習）融合による革新的シミュレーション手法を提案している。Wistria/BDEC-01 を（計算・データ・学習）融合のためのプラットフォームと位置付け，最小限の計算量・消費電力で融合シミュレーションを実現する研究開発，革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」の開発を実施している（図 3，図 4）。

h3-Open-SYS は Wistria/BDEC-01 のようなヘテロジニアスなシステムにおいて，シミュレーションとデータ処理実行を統合するソフトウェア群である。h3-Open-SYS/WaitIO [16,24,25] はその中核機能として，ファイルシステムを通じて複数の並列プログラムがデータの受け渡しを行うライブラリである。多くのスパコンで提供されている共有ファイルシステムをプログラム間のデータ連携手段として使用することで高い汎用性を確保し，ファイルを通信手段として用いる際に一般的に問題となる同期の問題を WaitIO ライブラリで解決する。WaitIO ライブラリは元々ファイルシステム経由で通信を前提としていた

が，複数の並列プログラム間での通信を実施するために，Odyssey と Aquarius 間の通信ライブラリとしても開発が進められている。

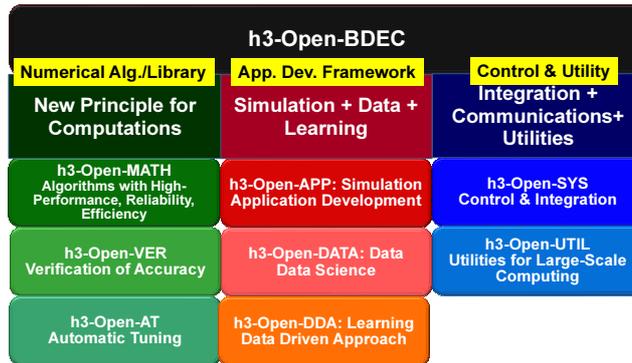


図 3 : h3-Open-BDEC の概要

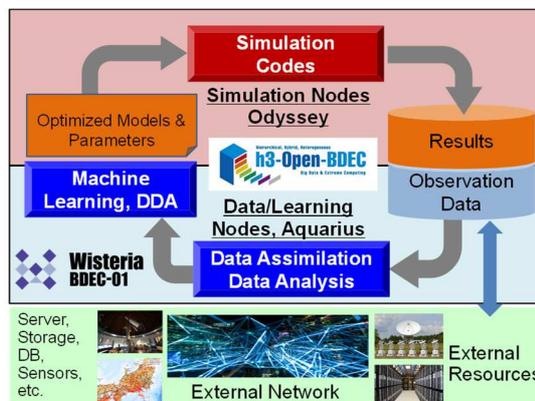


図 4 : Wistria/BDEC-01 及び h3-Open-BDEC 利用による「計算・データ・学習」融合のイメージ

h3-Open-SYS/WaitIO は，h3-Open-BDEC の多機能カプラ（Coupler）である h3-Open-UTIL/MP [18] と組み合わせることによって，Wistria/BDEC-01 のようなヘテロジニアスなシステム上で「S+D+L」融合を容易に実現できる。Odyssey と Aquarius 間の通信は既に WaitIO ライブラリによって実現されており，h3-Open-UTIL/MP も Odyssey と Aquarius 両者を同時に利用可能となっている。h3-Open-SYS/WaitIO と h3-Open-UTIL/MP は，Wistria/BDEC-01 上で 2022 年 6 月から利用者に公開される予定である[36,37]。

④ h3-Open-SYS/WaitIO [16,24,25,36]

h3-Open-SYS/WaitIO は複数の並列プログラム間で通信を行うためのライブラリである。各並列プログラムは典型的には MPI プログラムであるが，MPI 以外の形の並列プログラムからも利用できるよう汎用

的に設計されている。

h3-Open-SYS/WaitIO は多様な並列計算機環境を想定している。特に、通信を行う並列プログラムが同一の並列計算機で動作する場合はもちろん、図 4 に示す *Odyssey* と *Aquarius* のように各々の並列プログラムが異なる並列計算機で動作する場合にも対応する。そのために通信経路としてファイルと TCP/IP を想定する。

ファイル経由での通信を行う h3-Open-SYS/WaitIO を特に h3-Open-SYS/WaitIO-File (以下, WaitIO-File) と呼ぶ。WaitIO-File は同時実行される並列プログラム間の通信手段が共有ファイルシステムに限られる状況を想定し、共有ファイルを通信用として使用するものである。一般にスーパーコンピュータは、並列プロセスに対して割り当てたノード群から外への通信を許さない運用が多いため、共有ファイルを用いたデータの受け渡しは非効率であるものの現実的な手段である。WaitIO-File は通信を行うプロセスのペアそれぞれに対して通信方向別に 1 個ずつのファイルを準備する。送信側は送信データをファイル末尾に追記し続け、受信側はそのファイルを読み込む動作が基本であるが、特に受信側はファイルの末尾以降を読み込もうとした場合には新たなデータの追記を待つ点が通常のファイル I/O と異なる。

TCP/IP を用いて通信を行う h3-Open-SYS/WaitIO を特に h3-Open-SYS/WaitIO-Socket (以下, WaitIO-Socket) と呼ぶ。WaitIO-Socket は並列プログラムを構成する各プロセスが、別の並列プログラムの各プロセスに直接通信できる環境を想定している。前述のように現在のスーパーコンピュータの通常の運用ではこのような通信は許されていないことが多いが、並列計算機を構成するインターコネクトは TCP/IP での通信をサポートしていることが多いため、セキュリティ上の問題を考慮の上、運用方針を明確にすれば技術的には容易に実現可能な環境と言える。WaitIO-Socket の基本アイデアは、並列プログラムを構成する各プロセスが通信相手の並列プログラムの全プロセスに対して TCP/IP のコネクションを張り通信を行うものである。この基本アイデアはシンプルであるが、各並列プロセスが 1 万を超える数のプロセ

スから構成されるような大規模環境を想定する際に、通信ソケットだけでメモリ資源を使い尽くすようなことがないように、設計、実装上の工夫が必須である。

表 1 : WaitIO-MPI Conversion ライブラリ API [24,25]

WaitIO-MPI API	概要
<code>int waitio_mpi_isend (const void *buf, int count, WAITIO_MPI_Datatype datatype, int dest, int tag, WAITIO_MPI_Comm comm, WAITIO_MPI_Request *request);</code>	WaitIO 実装版 MPI_Isend
<code>int waitio_mpi_irecv (void *buf, int count, WAITIO_MPI_Datatype datatype, int source, int tag, WAITIO_MPI_Comm comm, WAITIO_MPI_Request *request);</code>	WaitIO 実装版 MPI_Irecv
<code>int waitio_mpi_reduce (const void *sendbuf, void *recvbuf, int count, WAITIO_MPI_Datatype datatype, WAITIO_MPI_Op op, int root, WAITIO_MPI_Comm comm);</code>	WaitIO 実装版 MPI_Reduce
<code>int waitio_mpi_bcast (void *buffer, int count, WAITIO_MPI_Datatype datatype, int root, WAITIO_MPI_Comm comm);</code>	WaitIO 実装版 MPI_Bcast
<code>int waitio_mpi_allreduce (const void *sendbuf, void *recvbuf, int count, WAITIO_MPI_Datatype datatype, WAITIO_MPI_Op op, WAITIO_MPI_Comm comm);</code>	WaitIO 実装版 MPI_Allreduce
<code>int waitio_mpi_waitall (int count, WAITIO_MPI_Request *array_of_requests, int *array_of_statuses);</code>	WaitIO 実装版 MPI_Waitall
<code>int waitio_create_universe (WAITIO_MPI_Comm *comm);</code>	Waitio 初期化サポート関数

WaitIO-Socket は, WaitIO-MPI Conversion ライブラリ [24] を使用して, C/C++, Fortran から MPI と同様のインタフェースで呼び出すことが可能である。現状, 実装されている関数を表 1 に示す。非同期送受信関数 (isend, irecv) の他, 集団通信関数 (bcast, reduce, allreduce) であり, 扱う Datatype は数種の基本 Datatype に限定している。アプリケーションの必要に応じて拡張する予定である。現状, 関数名と datatype, op などの MPI オブジェクト表記は WAITIO_ の prefix を機械的に追加することで WaitIO 向けに書き換えるようにしている。

⑤ h3-Open-UTIL/MP [5,25]

h3-Open-SYS/WaitIO-Socket を基盤として複数の並列プログラムを連成するための上位ソフトウェア(カブラ)としてh3-Open-UTIL/MPが開発されている。h3-Open-UTIL/MP は異なる格子系を持つ複数のモデルコンポーネントに対して設定された時間間隔でデータを交換し格子変換を行う。更に、これらの基本機能に加えて、結合されたモデル群を並列に実行し統計処理を行う結合アンサンブル機能や Python アプリケーションを結合するための Python インタフェースを装備している。モデルと結合される Python アプリケーションには I/O や作画ライブラリなどが想定されるが、有力なアプリケーションの一つが機械学習である。シミュレーションモデルを機械学習と結合することで、計算負荷の高いプロセスを機械学習に代替させる、パラメータを用いない高解像度計算の結果をパラメータ化が必要な低解像度計算に反映させるといった、多くの利点を得られる。このような背景に基づき、大気モデル NICAM と機械学習ライブラリ PyTorch を結合するプロジェクトが進行中であり、既に予備的な結果が得られている。しかしながら、PyTorch による学習は計算負荷が高く実行のボトルネックとなっている。この状況を改善するにはシミュレーションモデルをシミュレーションノード群 (Odyssey) で、機械学習ライブラリをデータ・学習ノード群 (Aquarius) で実行し結合する方法が考えられる。この機能を実現するためのプログラム構成を図5に示す。

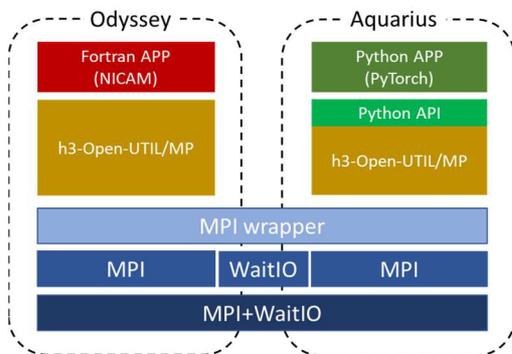


図5 : WaitIO-Socket と MPI を併用した異機種間結合プログラムの構成 [5,25]

最下層は機種をまたぐ大域通信を行うレイヤで MPI

と WaitIO-Socket を併用し大域通信を実現する。第2層目はアプリ内通信とアプリ間通信を行うレイヤで、アプリ内は従来通りの MPI を、アプリ間は WaitIO-Socket を用いて通信を行う。第3層目は MPI の wrapper で、これにより従来の MPI ルーチンコールとシームレスに異機種間通信ができるようにする。

MPI と WaitIO-Socket を併用した大域通信の例を図6に示す。図6は MPI_Bcast の事例で、黄色い四角が Bcast の起点となる root プロセスを表す。まず root から root が所属する King にデータを送受信する。この通信は MPI で行われる。次いで King 同士の通信を WaitIO-Socket で行い、最後に各マシンの King が MPI_Bcast でデータを分配する。

作成した通信ルーチン群を h3-Open-UTIL/MP に適用し NICAM と PyTorch を模したテストプログラムでの結合試験を実施した。想定される計算規模においても Odyssey-Aquarius 間のデータ交換は問題なく実行されており WaitIO-Socket の有用性が確認された。

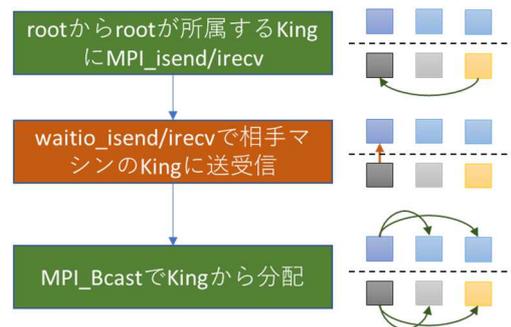


図6 : MPI と WaitIO-Socket を併用した大域分配の概要 [5,25]

⑥ 「三次元強震動シミュレーション+データ同化」融合 [25]

本研究では、Seism3D/OpenSWPC-DAF による「三次元強震動シミュレーション+データ同化」と JDXnet によるリアルタイムデータ同化を融合させた新しいシミュレーション手法の開発を④, ⑤で紹介した h3-Open-SYS/WaitIO, h3-Open-UTIL/MP を使用して実施している。本研究では、Oakbridge-CX (東京大学情報基盤センター, OBCX) 上で試算、動作確認を実施したのち、図8に示すような融合システムのプロトタイプを Wisteria/BDEC-01 上に構築した。実システムでは、JDXnet から観測データをリアルタ

イムで取得，処理した結果を，Seism3D/OpenSWPC-DAF で読み込んでいる。通常時は，Seism3D/OpenSWPC-DAF は観測データの内挿のみを実施するが，地震時には「データ同化+シミュレーション (Assimilation+Simulation, A+S)」，次いで「シミュレーション (Pure Simulation, Pure S)」に移行する。

これらの一連の処理を Wisteria/BDEC-01 上で実装した。フィルタリング処理を Aquarius，データ同化・シミュレーションを Odyssey で実施する (図 7)。

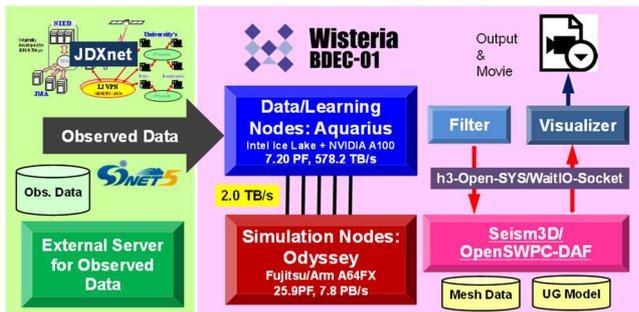


図 7: Wisteria/BDEC-01 上に構築した「リアルタイム観測データ同化+強震動シミュレーション」融合システムのプロトタイプ

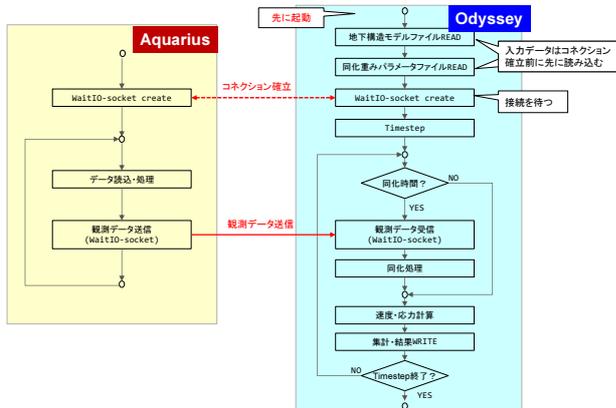


図 8: Aquarius・Odyssey におけるテストプログラム，WaitIO-Socket による通信

```

program dny_filter
<省略: 宣言等>
call mpi_init (ierr)
call mpi_comm_size (MPI_COMM_WORLD, nprocs, ierr)
call mpi_comm_rank (MPI_COMM_WORLD, myrank, ierr)
call WAITIO_CREATE_UNIVERSE (WAITIO_UNIVERSE, ierr)

if (myrank==0) then
open(100,File='./obsfile_list.txt',Form='formatted',Status='old',Iostat=ierr)
do i=1,100
<省略: obsデータ読み込み処理>
print *, "Send obs data ....."
call WAITIO_MPI_ISEND (NTMAX1_o, 1, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,1, WAITIO_COMM_UNIVERSE, req(1,1), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (DT_o, 1, WAITIO_MPI_FLOAT, 2,2, WAITIO_COMM_UNIVERSE, req(1,2), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (NSI_o, 1, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,3, WAITIO_COMM_UNIVERSE, req(1,3), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (AT_o, 1, WAITIO_MPI_FLOAT, 2,4, WAITIO_COMM_UNIVERSE, req(1,4), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (T0_o, 1, WAITIO_MPI_FLOAT, 2,5, WAITIO_COMM_UNIVERSE, req(1,5), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (ISO_Y_o, NSMAX, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,6, WAITIO_COMM_UNIVERSE, req(1,6), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (ISO_Z_o, NSMAX, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,7, WAITIO_COMM_UNIVERSE, req(1,7), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (ISX_o, NSMAX, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,8, WAITIO_COMM_UNIVERSE, req(1,8), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (ISY_o, NSMAX, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,9, WAITIO_COMM_UNIVERSE, req(1,9), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (ISZ_o, NSMAX, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,10, WAITIO_COMM_UNIVERSE, req(1,10), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (ISTX_o, NSI, WAITIO_MPI_INTEGER, 2,11, WAITIO_COMM_UNIVERSE, req(1,11), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (ISTY_o, 6*NSI, WAITIO_MPI_CHAR, 2,12, WAITIO_COMM_UNIVERSE, req(1,12), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (VzAll_obs, NSI*NOBS_LEN, WAITIO_MPI_FLOAT, 2,13, WAITIO_COMM_UNIVERSE, req(1,13), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (VzAll_obs, NSI*NOBS_LEN, WAITIO_MPI_FLOAT, 2,14, WAITIO_COMM_UNIVERSE, req(1,14), ierr)
call WAITIO_MPI_ISEND (VzAll_obs, NSI*NOBS_LEN, WAITIO_MPI_FLOAT, 2,15, WAITIO_COMM_UNIVERSE, req(1,15), ierr)
call WAITIO_MPI_WAITALL (15, req, status, ierr)
call sleep(1)
enddo
close (100)
endif
call WAITIO_FINALIZE (ierr)
call mpi_finalize (ierr)
end
    
```

図 9: WaitIO-Socket による送信 (Aquarius 側)

[25]では，WaitIO-Socket が正常に動作することを確認するために，フィルタリング済みデータを WaitIO-Socket により 1 秒ごとに Aquarius から Odyssey へ送り，Odyssey 側の Seism3D/OpenSWPC-DAF で受け取ってデータ同化・シミュレーションを実施するテストプログラムを作成した (図 8)。図 9，図 10 はそれぞれ，表 1 に示した WaitIO-MPI Conversion ライブラリによる Aquarius 側 (送信)，Odyssey 側 (受信) の記述例である。

Seism3D/OpenSWPC-DAF は Fortran で記述されているが，Fortran プログラムから MPI 関数を呼び出すのとはほぼ同じ方法で，WaitIO-Socket の機能を利用できることがわかる。

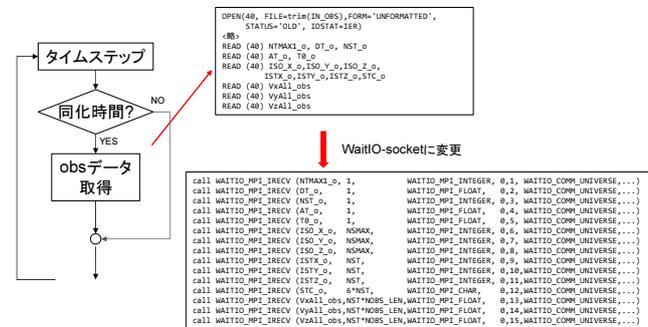


図 10: WaitIO-Socket による受信 (Odyssey 側)

図 8 に示すテストプログラムの動作検証，性能評価を Wisteria/BDEC-01 を使用して実施した。Wisteria/BDEC-01 では，図 8 に示す処理では，Aquarius 側では 1 ノード，Odyssey 側では 256~2,048 ノードを使用した。

2007 年新潟県中越沖地震を対象として，動作確認を実施した。一辺 240m の立方体メッシュを使用し，メッシュ数は 1,920×1,920×240 (合計 8.85 億)，460.8 km×460.8 km×57.6 km の領域を扱っている，対象領域である関東甲信越地方には，Hi-net : 349 点，F-net : 18 点の観測点があるが，本研究では，このうち 315 点の観測データを使用している。

図 11 は，地震発生から 30, 50, 70, 及び 90 秒後の同化結果に基づき，地震発生から 200 秒後までの未来の波動場を予測した結果と，東京都江東区における観測結果を比較したものである。計算結果と観測結果は良く一致しており，観測結果との一致も良好である。図 11 に示すように，(A+S) を 50 秒まで

実施すれば、観測値に近い計算結果を得られることがわかる。

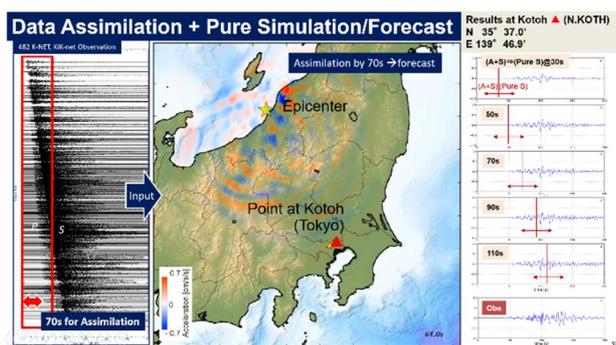


図 11 : Seism3D/OpenSWPC-DAF による「データ同化+シミュレーション」融合事例, 2007 年新潟県中越沖地震

表 2 : Seism3D/OpenSWPC-DAF 計算時間

ノード数	(A+S) 60 秒分	(Pure S) 240 秒分
256	61.1	134.6
512	61.6	84.12
1,024	62.1	62.95
2,048	60.1	27.84

表 2 は, Seism3D/OpenSWPC-DAF の計算時間を比較したものである。60 秒分の「データ同化+シミュレーション (A+S)」, 続いて 240 秒分の「シミュレーション (Pure S)」を実施した場合について, 可視化処理のための通信, I/O などを除いた時間を表示してある。(A+S) の部分は, フィルタリング済み結果を 1 秒毎に受信して, データ同化+シミュレーションを実施しているため, 実時間 (60 秒) より短くなることはないが, (Pure S) の部分は, 2,048 ノード利用時に実時間の約 10 分の 1 程度で計算が終了していることがわかる。2007 年新潟県中越沖地震の例では, 図 19 に示すように, 約 100 秒後に強い揺れが東京で発生している。地震発生 50 秒後に (A+S) から (Pure S) に切り替えた場合, 5 秒程度で地震発生 100 秒後 (切り替えから 50 秒後) の結果が予測可能である, ということになる。

[25] の段階では, フィルタ済みの結果を Aquarius から送信していたが, 2021 年度末の時点で, 図 7 に示すように, フィルタリング処理も含めて Wisteria/BDEC-01 上で実施できるようになっている。

(2) データ同化手法

本研究では, 高精度な地震シミュレーションのための地下構造推定を行うデータ同化の高速化に関する研究を行っている。

データ同化手法にはシミュレーションの時間経過とともに観測データを使用して, モデルを修正するデータ駆動型と, 計算結果と観測結果を比較しながら必要な精度が出るまでシミュレーションを再試行するプロセス駆動型がある。本研究ではプロセス駆動型のデータ同化を対象とする。プロセス駆動型のデータ同化では, 複数回のシミュレーション(Forward 計算)を必要とし, 多くの計算リソースが必要となる。本研究では, レプリカ交換モンテカルロ法によるパラメータ探索, および 4 次元変分法を用いたプロセス駆動型データ同化の高速化を行っている。

① レプリカ交換モンテカルロ法の高速化

レプリカ交換モンテカルロ法による地下構造の推定は, 地層などの情報を元に 1 次元理論振動モデルを作成, 震源情報を入力して, 観測点の地震動を計算, 観測結果と比較してデータ同化を行う。使う地震動の計算が 1 次元モデルであり, 少ないパラメータの探索でデータ同化ができることから, 比較的容易広範囲の地下構造推定が可能である。パラメータ推定で得られる結果は地下方向の 1 次元であるため, 3 次元地下構造を得るために, 地上を 2 次元メッシュで分割し, メッシュ毎にパラメータ探索をする方法を採用している。パラメータ探索はレプリカ交換モンテカルロ法を用いており, これは多峰性のある確率分布を対象に最適解を見つけるのに適した手法である。レプリカ交換モンテカルロ法では初期条件の異なるメトロポリス法を複数実行し, 特定のタイミング, 条件でレプリカを交換する。これらの手法の並列化を考えた場合, メッシュ毎の計算と 1 次元理論地震動の特定の計算部分がまず並列化可能であり, レプリカ交換モンテカルロ法の複数のメトロポリス法も並列に行える。ただし, レプリカの交換のために, 特定の回数メトロポリス法の試行事に同期, レプリカの交換が必要となる。本研究では, メッシュ毎の計算およびレプリカ交換モンテカルロ法を

MPI で、1 次元理論地震動の計算を OpenMP で並列化し、高速化を図っている。2021 年度は、レガシーコードの Fortran90 化、広範囲の地下構造推定を実施するための改良も併せて実施した。

② 4 次元変分法の高速化

本研究における 4 次元変分法の Forward 計算では、有限体積法で離散化した 2 次元構造解析コードを使用している。レプリカ交換モンテカルロ法で使用した 1 次元モデルよりも、高精度な地下構造推定が可能となる。4 次元変分法の並列化は、Forward 計算の並列化に依存するため、本研究ではこの 2 次元構造解析コード部も含めて高速化を行っている。2 次元構造解析コードは、問題サイズに対して比較的多くのタイムステップを要しており(問題の自由度が 32×32 に対して、タイムステップは 50,000 など)、通常の領域分割法による 2 次元空間の並列化だけでは、十分な高速化が期待できない。よって、時間方向並列化 (Parallel in Time (PinT)) も検討している。PinT は Multigrid 法の考えを元に時間方向の並列化を実現した手法である。具体的には、簡易的に計算した初期値を元に時間方向の計算を並列に行い、算出された結果の不整合を、よりタイムステップ幅の大きい条件で計算した結果を元に修正する。PinT は近年広く研究されているが、アプリケーションに依存する部分が多いため、対象とする 2 次元構造解析問題に適した手法を検討している。4 次元変分法の実装に関しては、並列化以外に、評価関数の計算が計算時間のほとんどを占めている問題があったが、コンパイルオプションおよび実装の見直しにより、2,000 倍程度早くなっており、その他の部分を留意すれば良い状態となっている。

(3) 大規模機械学習 [3,4,7]

本研究では緊急時対応を目指した研究開発の他、通常の小規模な地震時に得られるデータを対象として、観測結果+シミュレーション結果に基づき、機械学習による地下構造推定手法の開発を目指している。地下構造推定においては地下の不均質構造を解像しうる分解能における順解析を多数回実施する必

要があり、順解析の高速化・安定性向上が課題となっていた。そこで本年度においては、以下の 2 点に取り組んだ。

- 1) 有限要素法シミュレーションの GPU による高速化 [7]、および、有限要素法における非線形構成則利用時の解析安定化 [3] に関する研究開発を実施した。開発手法を V100 GPU 計算環境で活用することで、図 12 に示すような 7 億自由度の高分解能モデルの非線形動的地震応答解析を高速・安定的に実行できることを示した。
- 2) 機械学習による有限要素法シミュレーションの高速化手法を開発した [4]。大規模解析実行中に生成される大規模データから知見を抽出 (data learning) し、解析効率向上を目指す様々な方法が提案されているが、良好な超並列効率で良好な結果を得ることは案外難しい。本研究では、解の局所領域でのスパースさや解空間のマルチスケールさを活用しつつ高次モードを効率的に推定するアルゴリズムを開発することで、「富岳」73984 ノード上で従来手法と比較して 25.4 倍の高速化を達成した。また、開発手法を使うことで、従来は解析コストの面から難しいとされてきた 3 次元低次非構造要素を用いた断層から構造物までの一括地震応答解析を実現した。本研究の成果を紹介した論文 [4] は、HPC Asia 2022 Best Paper を受賞した。

これらの手法で得られた知見を活用することで、地下構造推定に必要な多数回解析を高速・安定的に実行できるようになると期待される。

6. 今年度の進捗状況と今後の展望

リアルタイムデータ同化+三次元強震動シミュレーション、データ同化、機械学習、関連ソフトウェア開発について、2021 年度はほぼ所定の目標を達成できた。このうち、データ同化、機械学習については予備的な検討が中心であったため、2022 年度は本格的に取り組む予定である。関連ソフトウェアとしては、WaitIO-File を開発する。WaitIO-File はより汎用性が高いと考えられ、名古屋大「不老」など JHPCN の他

システムへのデプロイも図る。更に h3-Open-UTIL/MP, WaitIO-File の連携により, I/O 及び可視化処理を計算とオーバーラップさせてアプリケーションの高速化を図る機能についても検討を実施する。

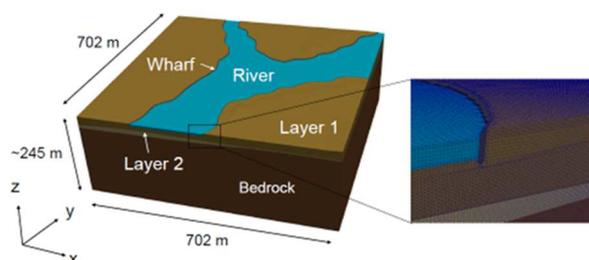


図 12: 非線形地震応答解析の対象領域 (このような複雑地形を非常に細かいメッシュで離散化した場合でも安定的に非線形動的有限要素解析が実施できることを示した)

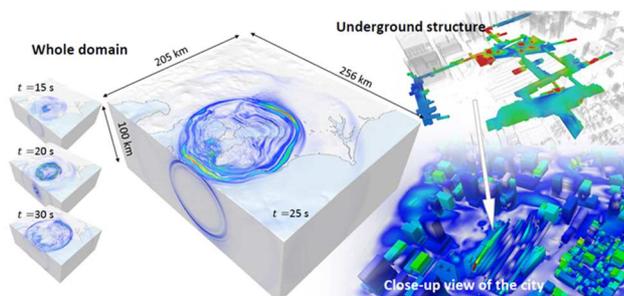


図 13: 機械学習により高速化された有限要素解析を用いた断層から都市までの一括非線形地震応答解析例 (開発手法を用いることで従来手法比で 25.4 倍の高速化を「富岳」上で実現した)

7. 研究業績一覧

(発表予定も含む。投稿中・投稿予定は含まない)

(1) 学術論文 (査読あり)

- [1] Matsumura, T., Y. Kuwayama, K. Ueki, T. Kuwatani, Y. Ando, K., Nagata, S. Ito, and H. Nagao, Bayesian modelling of the equation of state for liquid iron in Earth's outer core, Geophys. Res. Solid Earth, Vol. 126, Issue 12, 2021
- [2] Kaneko, R., H. Nagao, S. Ito, K. Obara, and H. Tsuruoka, Convolutional neural network to detect deep low-frequency tremors from seismic waveform images, Lecture Notes in Computer Science, Vol. 12705, 2021, pp. 31-43

(2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)

- [3] Kusakabe R., Ichimura T., Fujita K., Hori M., Wijerathne L., Large-Scale Stabilized Multi-physics Earthquake Simulation for Digital Twin, Proceedings of ICCS 2021, Lecture Notes in Computer Science 12743, 3-15. Springer, 2021
- [4] Ichimura, T., Fujita, K., Koyama, K., Kusakabe, R., Kikuchi, Y., Hori, T., Hori, M., Madgededara, L., et al. (2022), 152K-computer-node parallel scalable implicit solver for dynamic nonlinear earthquake simulation, HPCAsia2022: International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, **Best Paper Award of HPC Asia 2022.**
- [5] Arakawa T., Yashiro H., Nakajima K., Development of a coupler h3-Open-UTIL/MP, ACM Proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2022), 2022
- [6] Sumimoto, S., Hanawa, T., Nakajima, K., A Process Management Runtime with Dynamic Reconfiguration, IXPUG Workshop in conjunction with HPC Asia 2022, 2022
- [7] Ryota Kusakabe, Tsuyoshi Ichimura, Kohei Fujita, Muneo Hori, Lalith Wijerathne (2022), GPU-accelerated Multiphysics-based Seismic Wave Propagation Simulation and its Surrogate Model with Machine Learning, Poster for HPCAsia2022: International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region, **HPC Asia 2022 Best Student Poster Award in Memory of Hiroshi Nakashima (1st Prize).**
- (3) 国際会議発表 (査読なし)
- [8] Nakajima K., Iwashita T., Yashiro H., Shimokawabe T., Nagao H., Matsuba H., Ogita T., Katagiri T., Wisteria/BDEC-01 & h3-Open-BDEC: Innovative Scientific Computing in the Exascale Era, ARM SVE for HPC, 18th ACM International Conference on Computing Frontiers (CF'21), May 2021 (Invited Talk)

- [9] [Nakajima K.](#), [Iwashita T.](#), Yashiro H., [Shimokawabe T.](#), Nagao H., [Matsuba H.](#), Ogita T., [Katagiri T.](#), Integration of (Simulation+Data+Learning) for Innovative Scientific Computing by h3-Open-BDEC on Wisteria/BDEC-01, Arm HPC User's Group (AHUG) Workshop, ISC High Performance 2021 Digital, June 2021 (Invited Talk)
- [10] [Nakajima K.](#), Overview of h3-Open-BDEC: Innovative Software Infrastructure for Scientific Computing in the Exascale Era by Integrations of (Simulation+Data+ Learning), International Workshop on the Integration of (Simulation+Data+Learning): Towards Society 5.0 by h3-Open-BDEC, 2021
- [11] [Shimokawabe T.](#), Fast Prediction Method for Approximating Steady Flow Simulations over Multiple Domains, International Workshop on the Integration of (Simulation+Data+Learning): Towards Society 5.0 by h3-Open-BDEC, 2021
- [12] [Shiba H.](#), Enhancement of Molecular Dynamics Simulation by Machine Learning, International Workshop on the Integration of (Simulation+Data+Learning): Towards Society 5.0 by h3-Open-BDEC, 2021
- [13] [Nakajima K.](#), Integration of 3D Earthquake Simulation & Real-Time Data Assimilation using h3-Open-BDEC, International Workshop on the Integration of (Simulation+Data+Learning): Towards Society 5.0 by h3-Open-BDEC, 2021
- [14] Nagao, H., Optimization and uncertainty quantification based on the four-dimensional variational method, International Workshop on the Integration of (Simulation+Data+Learning): Towards Society 5.0 by h3-Open-BDEC, 2021
- [15] Yashiro, H., h3-Open-UTIL/MP: A General-purpose Coupling Library Bridging Legacy HPC Applications and the Future, International Workshop on the Integration of (Simulation+Data+Learning): Towards Society 5.0 by h3-Open-BDEC, 2021
- [16] [Matsuba H.](#), A Generic TCP/IP and File-based Communication Library for Heterogeneous Parallel Computer, International Workshop on the Integration of (Simulation+Data+Learning): Towards Society 5.0 by h3-Open-BDEC, 2021
- [17] Morikawa, K., H. Nagao, S. Ito, Y. Terada, S. Sakai, and N. Hirata, Forecasting temporal variation of aftershocks immediately after a main shock using Gaussian process regression, Asia Oceania Geosciences Society, 2021
- [18] Kaneko, R., H. Nagao, S. Ito, K. Obara, and H. Tsuruoka, Convolutional neural network to detect deep low-frequency tremors from seismic waveform images, PAKDD2021 Workshop on Machine Learning for Measurement Informatics, 2021
- [19] Kaneko, R., H. Nagao, S. Ito, K. Obara, and H. Tsuruoka, Convolutional neural network to detect deep low-frequency tremors from seismic waveform images, Asia Oceania Geosciences Society, 2021
- [20] Yashiro, H., Challenges to large-scale weather/climate simulation for disaster prevention and mitigation, The International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2022), Online, 12-14 Jan. 2022 (**Keynote Talk**)
- (4) 国内会議発表 (査読なし)
- [21] [中島研吾](#), [槁敏博](#), [下川辺隆史](#), [伊田明弘](#), [芝隼人](#), [三木洋平](#), [星野哲也](#), [有間英志](#), [河合直聡](#), [坂本龍一](#), [近藤正章](#), [岩下武史](#), [八代尚](#), [長尾大道](#), [松葉浩也](#), [萩田武史](#), [片桐孝洋](#), [古村孝志](#), [鶴岡弘](#), [市村強](#), [藤田航平](#), 「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュータシステム「Wisteria/BDEC-01」の概要, 情報処理学会研究報告 (2021-HPC-179-1), 2021
- [22] [中島研吾](#), Wisteria/BDEC-01 : 『計算・デー

- タ・学習』融合による Society 5.0 実現へ向けて、PC クラスタワークショップ in 柏 2021, (招待講演)
- [23] 八代尚, 気象・気候アプリケーションソフトにおける緩やかな変革, また異なる計算手法との緩やかな融合に向けて、PC クラスタワークショップ in 柏 2021, 2021 (招待講演)
- [24] 住元真司, 荒川隆, 坂口吉生, 松葉浩也, 八代尚, 埜敏博, 中島研吾, WaitIO-Socket : 異種システム上の複数 MPI プログラムを結合する通信ライブラリの試作, 情報処理学会研究報告 (2021-HPC-181-7), 2021
- [25] 中島研吾, 古村孝志, 鶴岡弘, 松葉浩也, 坂口吉生, 住元真司, 笠井良浩, 池田輝彦, 八代尚, 荒川 隆, 埜敏博, 観測データ同化による長周期地震動リアルタイム予測へ向けた試み, 情報処理学会研究報告 (2021-HPC-182-08), 2021
- [26] 中島研吾, Wisteria/BDEC-01 & h3-Open-BDEC (計算・データ・学習) 融合による Society 5.0 実現へ向けて, サイエンティフィック・システム研究会 (SS 研), 科学技術計算分科会 2021 年度会合, 2022 年 1 月 20 日 (オンライン) (招待講演)
- [27] 長尾大道, 機械学習の基礎, 日本機械学会熱工学部門講習会, 2022
- [28] 森川耕輔, 長尾大道, 伊藤伸一, 寺田 吉彦, 酒井慎一, 平田直, ガウス過程回帰を用いた本震直後における余震分布の推定, 日本地震学会 2021 年度秋季大会, 2021
- [29] 金子亮介, 長尾大道, 伊藤伸一, 小原 一成, 鶴岡弘, 地震連続波形画像からの深部低周波微動検出に向けた 畳み込みニューラルネットワークの構築, 日本地震学会 2021 年度秋季大会, 2021
- [30] 森川耕輔, 長尾大道, 伊藤伸一, 寺田吉彦, 酒井慎一, 平田直, ガウス過程回帰を用いた本震直後における余震分布の推定, 2021 年度統計関連学会連合
- [31] 金子亮介, 長尾大道, 伊藤伸一, 小原一成, 鶴岡弘, 畳み込みニューラルネットワークを用いた地震波形画像からの深部低周波微動の検出, 2021 年度統計関連学会連合大会
- [32] 八代尚, 寺崎康児, 中野満寿男, 小玉知央, 河合佑太, 富田浩文, 計算機システムと気象・気候分野のアプリケーションのコードデザイン: NICAM-LETKF の経験から, 日本気象学会 2021 年度秋季大会, 2021
- [33] 八代尚, 全球大気モデル NICAM の最近の取り組み紹介, 2021 年度 次世代陸モデル開発・応用・社会実装に関する合同ワークショップ, 2022
- [34] 八代尚, 大気環境シミュレーションとデータ同化, 「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」2021 年度成果発表会, 2022
- [35] 八代尚, 大規模気象・気候計算への挑戦と課題, 「富岳」成果創出加速プログラム 研究交流会「富岳百景」, 2022
- (5) 公開したライブラリなど
- [36] h3-Open-SYS/WaitIO-Socket (東京大学情報基盤センター) (2022 年 6 月公開予定)
- [37] h3-Open-UTIL/MP (東京大学情報基盤センター) (2022 年 6 月公開予定)
- (6) その他(特許, プレスリリース, 著書等)