

jh230017

ヘテロジニアス環境における「計算・データ・学習」融合による 新しい計算科学

中島研吾（東京大学情報基盤センター）

本研究では「計算（シミュレーション (Simulation)）・データ (Data)・学習 (Learning) (S+D+L)」融合による新しい計算科学の開拓と普及を目指し、関連するソフトウェア、数値アルゴリズム、アプリケーションの研究開発、研究成果普及・啓蒙のための環境整備、及び検証を、Wisteria/BDEC-01（東大）、不老（名大）等のヘテロジニアスな構成を有するスパコン、データ活用社会創成プラットフォーム「mdx」により実施する。2021・2022 年度は地震シミュレーションを中心とした研究開発を実施してきたが、本年度から大気シミュレーションを含む新たな適用分野への展開を実施した。またヨーロッパの各研究機関も参加し、ソフトウェア、アプリケーションの研究開発を共同で実施した。

1. 共同研究に関する情報

(1) 共同利用・共同研究を実施している拠点名

北海道大学 情報基盤センター

東京大学 情報基盤センター

名古屋大学 情報基盤センター

九州大学 情報基盤研究開発センター

mdx

(2) 課題分野

大規模計算科学課題分野

(3) 共同研究分野 (HPCI 資源利用課題のみ)

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

(4) 参加研究者の役割分担

代表：中島研吾，副代表：古村孝志（東大地震研）

- ① 地震シミュレーション：中島，古村，鶴岡，塙，坂口，笠井，大日向，住元，中尾，市村，藤田，河合，長尾，伊藤，依田，陳，Badri, Foerster
- ② 大気シミュレーション：八代，荒川，住元，下川辺，中島，山崎
- ③ ヘテロジニアス環境におけるシミュレーション：Caviedes-Voulliem, Di Napoli, Wu, Koh, Davidovic, Nenad, Badrinarayanan, 住元，荒川，坂口，深谷，今村
- ④ 電子状態シミュレーション：Boillod-Cerneux,

芝，住元，荒川，鈴木，華井，深谷， Genovese

- ⑤ ソフトウェア・実行環境：住元，荒川，八代，松葉，中島，星野，大島，Wellein, Hager, Afzal, 坂口，大日向，中尾，Ujeniya, Gruber, 植野

2. 研究の目的と意義

スーパーコンピューティングの役割は計算科学シミュレーションから、データ科学、機械学習とその範囲を広げている。本研究では「計算（シミュレーション (Simulation)）・データ (Data)・学習 (Learning) (S+D+L)」融合による新しい計算科学の開拓と普及を目指し、関連するソフトウェア、数値アルゴリズム、アプリケーションの研究開発、研究成果普及・啓蒙のための環境整備、及び検証を、Wisteria/BDEC-01（東大）(Fig.1)、不老（名大）等のヘテロジニアスな構成を有するスパコン、データ活用社会創成プラットフォーム「mdx」により実施する。2021・2022 年度は地震シミュレーションを中心とした研究開発を実施してきたが、本年度から大気シミュレーションを加え、更に新たな適用分野への展開も併せて検討する。また、ドイツ（Jülich Supercomputing Centre (JSC), Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU)), フランス (French Atomic Energy Commission (CEA)), クロアチア (Rudjer Boskovic Institute (RBI)) の各研究機関も参加

し、ソフトウェア、アプリケーションの研究開発を共同で実施する他、「S+D+L」融合を実現するエコシステム構築へ向けた議論も実施する。

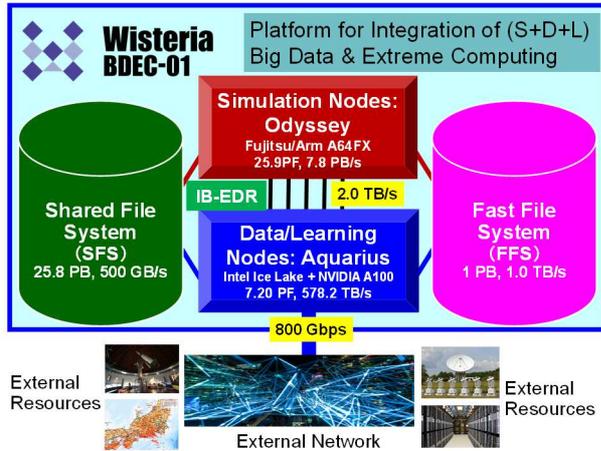


Fig.1 Wisteria/BDEC-01 の概要

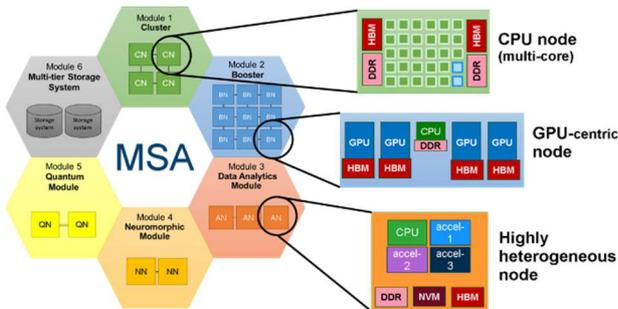


Fig.2 Modular Supercomputing Architecture (MSA)
(<https://juser.fz-juelich.de/record/862856>)

本研究は、東大地震研、同 情報基盤センター、名古屋大、九州大、国立環境研、理研、富士通、FAU、JSC、CEA、RBI の 4 ヶ国にわたる産学官の計算科学、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「S+D+L」融合を目指して実施される国際的な学際的研究である。東大センターでは、国内外各機関との緊密な協力のもと、Wisteria/BDEC-01 のようなヘテロジニアスな構成を有するスパコン上で「S+D+L」融合を推進するための革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」の開発を進めている。現在、Wisteria/BDEC-01 は「S+D+L」融合のためのプラットフォームとして本格的に稼働しており、h3-Open-BDEC は一般にも利用できるようになっている。JSC で実施されている Modular Supercomputing (Fig.2) 等のヘテロジニアス環境を

活用した研究は近年盛んであるが、Wisteria/BDEC-01 における「S+D+L」融合への取り組みは世界的にも注目されており、SC22 では BoF の題材としても取り上げられた。本研究は、これまでの 2 年間の成果に基づき、更に広範囲のアプリケーションにヘテロジニアス環境での「S+D+L」融合を推進する研究開発を実施し、mdx を使用した外部データ取得、成果普及・啓蒙のための環境を整備する。研究成果は、多様なアプリケーションに適用が可能である。これらの手法を h3-Open-BDEC に実装し、JHPCN 各センターを含む様々なスパコンにデプロイすることによって、「S+D+L」融合の推進、知見の普及に貢献するものと期待される。また国際協力を通じて、「S+D+L」融合を実現するエコシステム構築へ向けた議論も実施する。本研究は 3 年計画で、国際協力を深めることによって、2024 年度からは国際共同研究課題へ移行する。

3. 当拠点の公募型共同研究として実施した意義

本研究で利用する Wisteria/BDEC-01 (東大)、不老(名大)は、汎用 CPU ノード群、GPU ノード群を有するヘテロジニアスな構成に基づき、計算・データ解析・機械学習の広範囲なワークロードに対応可能で、「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。また、mdx とスパコン群の連携により、研究成果の普及、啓蒙に活用できる。この他、阪大、九大等にもヘテロジ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導入されており、本研究の成果の展開、検証に利用できる。

4. 前年度までに得られた研究成果の概要

2021・2022 年度は、JDXnet (Japan Data eXchange network) から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三次元強震動シミュレーションの融合による計算手法、データ同化・機械学習による三次元地下構造モデルの改良手法、及び関連ソフトウェア群の研究開発を実施した。東大センターの Oakbirdge-CX (OBCX)、Wisteria/BDEC-01 による検証 (Fig.3) の他、ソフ

トウェア群を 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)」融合の促進に貢献した。

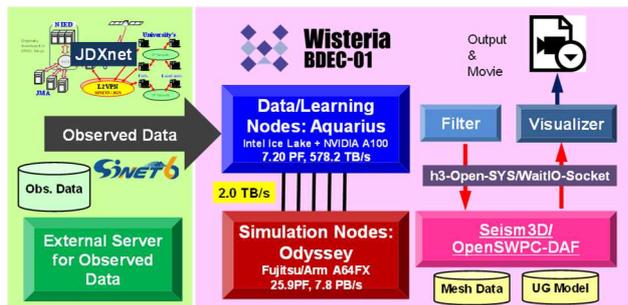


Fig.3 Wisteria/BDEC-01 による三次元強震動シミュレーション+リアルタイムデータ同化融合

5. 今年度の研究成果の詳細

(1) 概要

2023 年度は、①地震シミュレーション、②大気シミュレーション、③ヘテロジニアス環境におけるシミュレーション、④電子状態シミュレーション、⑤ソフトウェア・実行環境について研究開発を実施した。基本的には、2023 年度：予備的検討、手法開発、2024 年度：実装、2025 年度：大規模シミュレーションによる検証、ソフトウェア公開・普及、というスケジュールである。4 種類のシミュレーション (地震、大気、ヘテロジニアス環境下、電子状態)、ソフトウェア・実行環境の 5 項目を実施する。項目⑤ (ソフトウェア・実行環境) は他の項目と密接に連携する他、h3-Open-BDEC (h3-Open-SYS/WaitIO, h3-Open-UTIL/MP) を使用する他プロジェクトとも連携する。以下に各項目の成果について紹介する。

(2) 地震シミュレーション

(2-a) 地下構造推定

2023 年度は、2022 年度までに達成できなかった、地下構造推定に関する検討を中心に実施した。特に、理論地震動および観測結果のデータ同化による首都圏広域地下構造推定に注目し、レプリカ交換モンテカルロ (REMC) 法による理論地震動の計算結果と観測データの同化による首都圏広域の地下構造推定を実現するための研究を実施した。観測データとしては、首都圏地震観測網 (MeSO-net,

<https://www.mesonet.bosai.go.jp/mrportal/top>)

既存研究により、理論地震動の計算結果と観測結果のデータ同化によって小領域の地下構造の推定が実現できていたため、本研究ではこのデータ同化手法への並列化・最適化による高速化を施し、小領域のデータ同化の広範囲での実施による、首都圏広域の地下構造推定に挑戦した。研究開始時は理論地震動の 1 試行に 2 分以上、REMC では 40,000 回の試行が 1 つの小領域辺りに必要であり、首都圏広域の地下構造推定のためには 190 ヶ所の小領域での REMC が必要なため、概算として 30 年近くを要する計算となっていた。この計算時間を短縮するために、理論地震動計算、REMC、小領域毎の計算を階層的にとらえ、以下のように別々の並列化を施した。

- 理論地震動;F77→F90 への書き換え, OpenMP 並列化
- REMC : MPI 並列化
- 小領域毎の計算 : Xcrypt によるジョブ並列化

これらの並列化・最適化により、理論地震動の計算は 1 試行辺り 2 分から 2 秒への高速化を実現、REMC は異なる温度のメトロポリス法を並列に実行可能となったため、メトロポリス法の逐次的な試行回数を削減、計算時間削減を可能とした。小領域毎の計算はジョブレベルで並列化ができたため、最終的には一回の地下構造推定に要する時間は 2 週回程度まで削減できた。理論地震動計算の非線形な特性から多峰性や局所性が高く、定常的に妥当なデータ同化が困難なことが分かり、具体的な首都圏広域の地下構造推定には至らなかった。Fig.4 に MeSO-net 観測データによる本研究の流れについて示す。

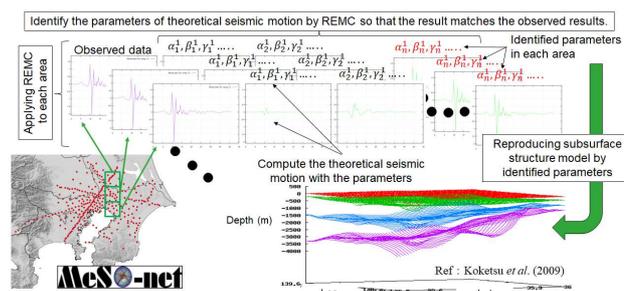


Fig.4 MeSO-net 観測データによる本研究の流れ

今後は REMC のようなベイズ推定に基づく同化手法のみではなく、遺伝的アルゴリズムや回帰モデルの適用可能性について検討を実施していく。

(2-b) PSD (Parallel Seismic Dynamics)

地震シミュレーションについては、2023 年度は中途よりフランス CEA のグループが加わり、CEA で開発されたシミュレーションコード PSD (Parallel Seismic Dynamics) に関する検討を開始した。本研究でこれまで扱ってきた Seism3D/OpenSWPC-DAF (差分法, 陽解法) に対して PSD は有限要素法 (四面体), 陰解法である。2023 年度は主として PSD の Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) への移植を中心に実施し, Fig.3 に示すリアルタイムデータ同化との融合を実現するための検討に着手した。ヘテロジニアス環境における異機種間通信機能 h3-Open-SYS/WaitIO を使用すれば, 容易に実現できる。2023 年 9 月 (フランス), 12 月 (日本) で対面の打ち合わせを実施した。

(3) 大気シミュレーション

「S+D+L」融合を推進するための革新的ソフトウェア基盤「h3-Open-BDEC」の一部として開発されているカプラ h3-Open-UTIL/MP (以下 UTIL/MP) はプロセス管理やデータ交換, 格子変換等一般的なカプラが持つ機能に加えて h3-Open-SYS/WaitIO (以下 WaitIO) と協調した異機種間連成, アンサンブル連成, Python インタフェース等の独自機能を持つ。Python は機械学習に関する豊富なライブラリ群を擁し, かつこれらのライブラリ群は GPU に最適化されているため, シミュレーションと AI の融合 (S+L) にとって UTIL/MP の諸機能は極めて適格的である。本研究では適用事例として大気モデル NICAM と機械学習ライブラリ PyTorch の連成を実施した。

NICAM による「全球雲解像シミュレーション」は, 詳細モデルによるシミュレーションと, 粗い格子による「Parameterization」から構成される。本研究では, シミュレーションと機械学習を Wisteria/BDEC-01 のヘテロジニアス環境上で連携させる高機能カプラ h3-Open-UTIL/MP を使用して, Parameterization (全計算の 25%程度) のサロゲ

トモデルによる置換を試みた。連成に際しては NICAM を Wisteria/BDEC-01 の Odyssey ノード群, PyTorch を Aquarius ノード群で実行し, ノード群間のデータ通信は WaitIO を用いている。ここでは NICAM の雲微物理過程サブルーチンの入力変数と出力変数を UTIL/MP を通じて PyTorch に与え, 入力変数から出力変数を再現するような学習を行った。用いた学習手法は 3 層の MLP である。結果の例を Fig.5 に示す。図は水蒸気密度の時間変化量である。(a) は NICAM の計算値, (b) は AI による再現値である。AI による再現値は値のレンジがやや縮小されているものの全体の分布はよく再現されていることが分かる。現在, 鉛直風, 降水量など新たなパラメータを導入することによる改良を進めている他, サロゲートモデルに関連する処理を SambaNova (<https://sambanova.ai/jp/>) を使用して実施する試みも平行して実施している。

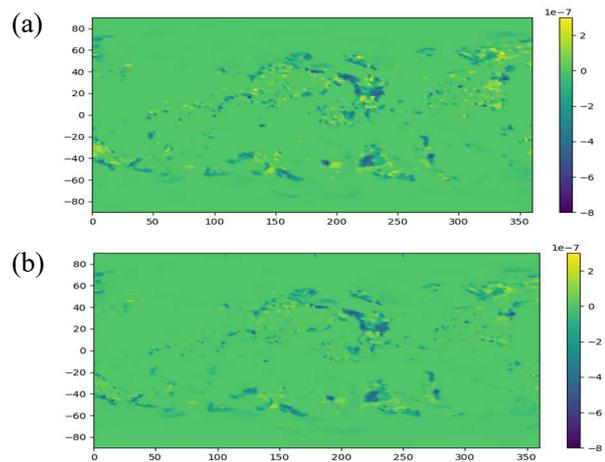


Fig.5 水蒸気密度の計算値と再現値
(a) 計算値, (b) 機械学習による再現値

(4) ヘテロジニアス環境におけるシミュレーション・電子状態シミュレーション

(4-a) 概要

本項目は, 欧州各機関 (JSC, CEA, RBI) との協力に基づき進めている :

- A) TSMP (大気・地下水連成コード) (JSC)
- B) ChASE (量子化学向け固有値ソルバー) (JSC, RBI)
- C) m-AIA (脳内血流向けマルチスケールシミュレーション) (JSC)

D) BigDFT/GENESIS (COVID19 シミュレーション向け密度汎関数法・分子動力学連成) (CEA) 2023 年度研究においては主として、Wisteria/BDEC-01 への移植を中心に実施し、Wisteria/BDEC-01 の環境と h3-Open-BDEC を活用するための検討を実施した。

A)-C)については、2024 年 3 月に当方が JSC へ出張、D)については CEA の研究者が 2023 年 12 月に来日し、対面で打ち合わせを実施した。

A), C)については、JSC の MSA に基づくヘテロジニアス環境である DEEP (https://www.fz-juelich.de/en/ias/jsc/systems/prototype-systems/deep_system) において実行が可能である。DEEP では CPU 部分と GPU 部分のホスト CPU が基本的 x86 系のアーキテクチャであるため、MPI による通信が可能であるが、Wisteria/BDEC-01 を利用するためには、通信に関連した部分を h3-Open-BDEC (UTIL/MP, WaitIO) で置き換える必要がある。2024 年 3 月の訪問以降、この部分の検討を集中的に実施しており、2024 年 5 月上旬時点で、DEEP, Wisteria/BDEC-01 の両システム上で h3-Open-BDEC を実装した連携アプリケーションの動作を確認し、アプリケーション間の通信が正しく行われていることは確認している。

(4-b) TSMP

TSMP (Terrestrial Systems Modeling Platform) は土壌・植生・大気の前成問題を解くコードであり、CERAFACS (フランス) で開発された MPI ベースの OASIS3 (<https://oasis.cerfacs.fr/en/home/>) というオープンソースのライブラリを使用して DEEP システム上で動くようになっている (Fig.6)。今回は、OASIS3 部分を UTIL/MP で置き換えるために、OASIS3 と同じインタフェースで UTIL/MP を呼び出せるような機能の整備を実施している。

(4-c) m-AIA

m-AIA (<https://www.hpccoe.eu/2021/06/04/m-ai/>) はドイツの RWTH Aachen University で開発された、数値流体力学 (Computational Fluid Dynamics) 向けのコード群であり、様々な手法をサポートしており、マルチスケール・マルチフィジックスシミュ

レーションが可能である。本研究では、格子ボルツマン法 (Lattice Boltzmann Method, LBM), 有限体積法 (Finite-Volume Method, FVM), 不連続 Galerkin 法 (Discontinuous Galerkin, DG) の 3 つの手法を組み合わせた連成を実施する。

(4-d) ChASE

B) (ChASE) については、主に Odyssey (A64FX) 向けの最適化に注力した。ChASE では二次元形状に MPI プロセスが配置されているため、Tofu-D インタコネクトを採用している Odyssey 上では、陽的にプロセスマッピングを実施する必要がある [14]。[14] に示したプロセスマッピング手法を適用することにより、128 ノードでも 20% 程度の速度向上を得ることができた。

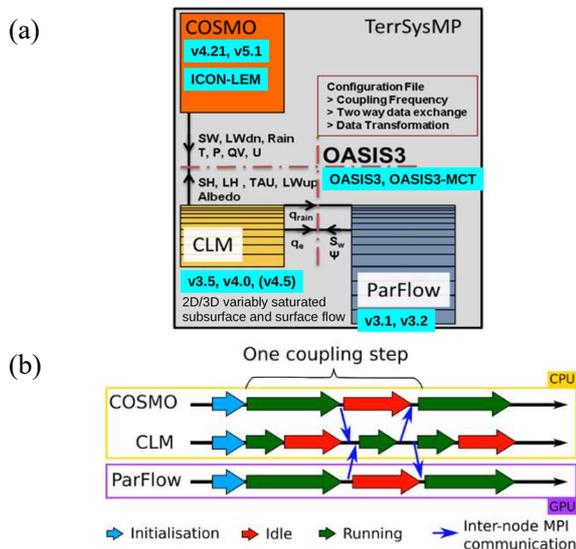


Fig.6 TSMP のワークフロー (a) コード全体構成, (b) OASIS3 によるカップリング, アプリケーション間通信の概要

(4-e) BigDFT/GENESIS

D) (BigDFT/GENESIS) では COVID-19 のようなウイルスに対する創薬開発、特に薬剤耐性に関連したシミュレーションを実施する。このようなシミュレーションは、古典的な分子動力学 (MM, MD) によるシミュレーションを複数のタイミングで実施し、その結果を第一原理的な量子化学的手法 (QM) によるシミュレーションに入力条件として与える、いわゆる QM-MM 法によって実現可能である。本研究では、密度汎関数法によるオープン

ソース第一原理量子化学コードである BigDFT (<https://1.sim.gitlab.io/bigdft-doc/>) を QM, 理化学研究所で開発された分子動力学コード GENESIS (Generalized-ensemble simulation system, <https://www.r-ccs.riken.jp/labs/cbrt/>) を MM としたワークフローを形成し, BigDFT を Odyssey, GENESIS を Aquarius で実行し, WaitIO で両者の間の通信を実施する (Fig.7)。当初は MM 部分に CEA で開発した Polaris コードを適用する予定であったが, 2023 年 12 月の打ち合わせで方針を変更した。

現状想定しているシミュレーションでは, MM ⇒QM の一方通行であるため, WaitIO を使用することは必ずしも必要ではないが, 共同研究者の一人である Genovese 博士 (CEA) は, 「WaitIO のようなソフトウェアがあれば, 今まで不可能だと考えていたようなシミュレーションを実現できる」と述べており, 2024 年度は両者を WaitIO で連結する予定である。

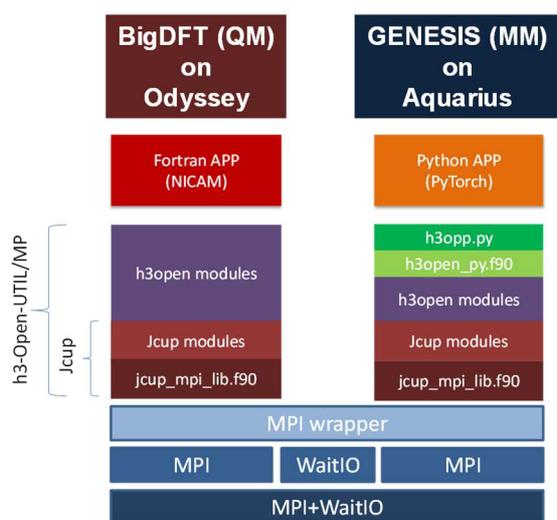


Fig.7 BigDFT(QM)-GENESIS(MM)ワークフロー

(5) ソフトウェア・実行環境

(5-a) Web 実行環境・Open OnDemand

2022 年度は, 防災・減災教育・啓蒙のための Web ベース地震シミュレーション実行環境のプロトタイプを整備した。利用者は mdx 上の仮想環境に構築された Web サーバーに接続し, アプリケーションサーバー経由で Wisteria/BDEC-01 で大規模シミュレーションを実行できる。2023 年度は, JDXnet のリアルタイム観測データを直接利用できるよう

に改良を実施する他, クラスタ用 Web ポータル Open OnDemand (<https://openondemand.org/>) の適用についても検討を実施し, 試験的ではあるが, Open OnDemand から Odyssey, Aquarius をそれぞれ別個に利用することは可能となっており, 今後は, Odyssey-Aquarius 連携ジョブ実行が可能となるよう検討を継続する。

(5-b) WaitIO の改良

h3-Open-SYS/WaitIO (WaitIO) は Wisteria/BDEC-01 のようなヘテロジニアスな環境におけるアプリケーション間通信には有効である, ネットワーク (IB-EDR) 経由の WaitIO-Socket, 高速ファイルシステム経由の WaitIO-File (Fig.1 参照) が利用可能である。しかしながら, Odyssey における Socket 通信性能の律速により, さらなる異種システム間の高性能通信が必要となっている。Wisteria/BDEC-01 での通信の高速化を実現するには WaitIO の RDMA 通信利用が必須であるが, 実現するには WaitIO の Tofu インターコネクトと InfiniBand 向け RDMA 対応化, Tofu と InfiniBand 間の Zero-Copy ルーティングが必要になる。2023 年度は, その第一段階として WaitIO-Tofu と WaitIO-Verbs を実現した。[64]では, Wisteria/BDEC-01 での通信高速化を実現するための全体設計並びに WaitIO-Tofu と WaitIO-Verbs の設計と評価について紹介している。また, 共同研究機関の一つである FAU のグループでは, WaitIO の性能評価に取り組み, 修士論文のテーマの一つにもなっており [70], 2024 年 5 月末に学位取得見込みである。

(5-c) アンサンブル連成 (Ensemble Coupling)

h3-Open-UTIL/MP (UTIL/MP) は本来, 構造・流体, 大気・海洋などの複数アプリケーションの弱連成を実施するマルチフィジックス・カプラであるが, 本研究では, その機能を拡張し, (3) で示したような, シミュレーション (Odyssey) ~機械学習 (Aquarius) の他, アンサンブル連成 (Ensemble Coupling) が可能となっている。

アンサンブル連成はアンサンブル計算と連成計算を組み合わせたものである。この機能を用いると例えば大気モデルアンサンブルと海洋モデルア

ンサンプルを連成させた大気海洋アンサンプル連成が可能となり高い再現性を得ることが期待できる。本研究で実施したのは Fig.8 に示す低解像度大

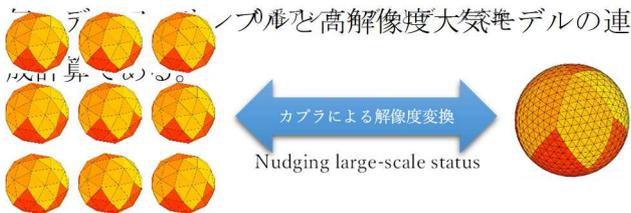


Fig.8 大気モデルアンサンプル連成の模式図

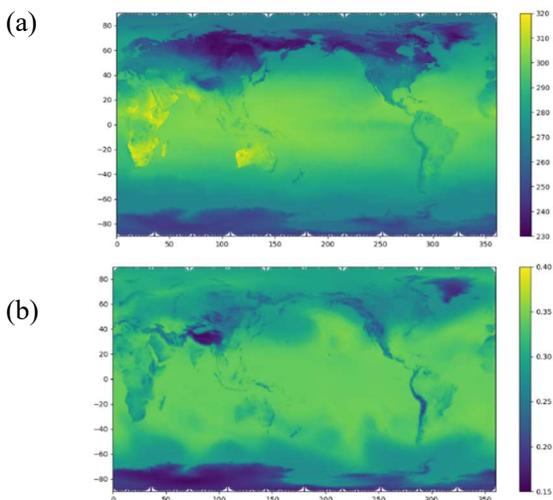


Fig.9 9時間積分後 (a) 地上気温, (b) 大気密度

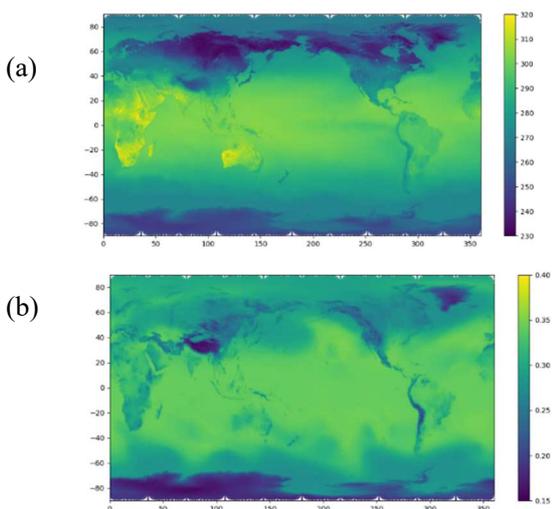


Fig.10 高解像度モデル単体 (a) 地上気温, (b) 大気密度

この方法を用いると高解像度大気モデルのアンサンプル計算に比して計算リソースを大幅に削減することが可能となる。さらに、大域的な場の再

現性に優れた低解像度モデルと詳細な場の再現性に優れた高解像度モデルを連成することにより、高解像度モデル単体のアンサンプル計算に比してより高い再現性を得ることが可能となる。本研究では機械学習の事例と同じ大気モデル NICAM を用いて計算を実施した。計算条件は低解像度側が水平解像度約 220km のモデルを 64 アンサンプル、高解像度側が水平解像度約 14km の単体モデルである。Wisteria/BDEC-01 の Odyssey ノード群を用いモデル時間 9 時間の積分で用いたリソースは 19.3 ノード時間であった。**この結果は高解像度モデルを 64 アンサンプルで 9 時間積分した場合の使用リソース 2,240 ノード時間に対して 112 倍の効率化を達成したことを意味する。**

9 時間積分後の高解像度側の結果（地上気温と 40 層目の大気密度）を Fig.9 に、高解像度モデル単体を 9 時間積分した場合の結果を Fig.10 に示す。9 時間積分ではアンサンプル計算と単体実行でほとんど差異はなく、アンサンプル計算でも妥当な結果が得られていることが分かる。なお、詳細な再現性の検証については気候場の比較が必要であり少なくとも 1 ヶ月程度の積分と気象学的な解析が要求されるため今後の課題である。

6. 進捗状況の自己評価と今後の展望

東大情報基盤センターを中心とした本研究の参加各研究機関では、2015 年頃から「計算・データ・学習 (S+D+L)」融合の重要性を認識して、ハードウェア、ソフトウェアの開発に協力して取り組んで来た。Wisteria/BDEC-01, h3-Open-BDEC, 本研究などの取り組みによって、「S+D+L」融合の有効性は、着実に定着しつつあり、新しい計算科学の開拓に貢献し、国際的にも高く評価されている。業績リストに「招待講演」が非常に多いことから明らかである。

本文中にも示したように、WaitIO や UTIL/MP を紹介すると、「そんな便利なものがあるのか」、「是非使ってみよう」と反応されることが多い。JHPCN においても h3-Open-BDEC を利用して「S+D+L」融合に取り組む共同研究課題は増加しており、今

後もソフトウェア改良を進めつつ、「S+D+L」融合の普及に貢献して行きたい。

COVID-19 期間中は新規の国際協力を進めることは非常に困難であったが、2023 年度はほぼ COVID-19 以前と同様に海外との往来が可能となった。本文中にも示したように、対面でのミーティングを重ねることによって、大幅な進捗を得ることができた。本研究は、2024 年度は国際課題として採択されており、今後も国際協力を推進して行きたい。これまでも講習会等でソフトウェアの普及活動 [69] を実施してきたが、現在は海外からも WaitIO, UTIL/MP の講習会の依頼が来ており、今後対応していく。

7. 研究業績

(1) 学術論文 (査読あり)

- [1] 徳田智磯,, 長尾大道, 混合ウィシャートモデルに基づくマルチプル・クラスタリングによる低周波地震検出のための観測点選択, 応用統計学 特集号「機械学習とその応用」応用統計学 52 (2), 99-112, 2023, doi:10.5023/jappstat.52.99
- [2] Tokuda, T., Nagao, H., Seismic-phase detection using multiple deep learning models for global and local representations of waveforms, *Geophys. J. Int.*, Vol. 235, Issue 2, Pages 1163–1182, doi:10.1093/gji/ggad270, 2023
- [3] Kaneko, R., Nagao, H., Ito, S., Tsuruoka, H., Obara, K., Detection of deep low-frequency tremors from continuous paper records at a station in southwest Japan about 50 years ago based on convolutional neural network, *J. Geophys. Res. Solid Earth*, Vol. 128, Issue 2, doi:10.1029/2022JB024842, 2023
- [4] Ito, S., Kano, M., Nagao, H., Adjoint-based uncertainty quantification for inhomogeneous friction on a slow-slipping fault, *Geophys. J. Int.*, Vol. 232(1), pp. 671-683, 2023
- [5] Nakao, A., T. Kuwatani, S. Ito, and H. Nagao, Adjoint-based data assimilation for reconstruction of thermal convection in a highly viscous fluid from surface velocity and temperature snapshots, *Geophysical Journal International* 236(1) 379-394, 2024, doi: 10.1093/gji/ggad417
- [6] Ryo Yoda, Matthias Bolten, Kengo Nakajima, Akihiro Fujii, Coarse-grid operator optimization in multigrid reduction in time for time-dependent Stokes and Oseen problems, *Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics* (in press), 2024
- [7] Akihiro Fujii, Teruo Tanaka, Kengo Nakajima, Light Weight Coarse Grid Aggregation for Smoothed Aggregation Algebraic Multigrid Solver,

IEEE Access (in press), 2024

- [8] Yen-Chen Chen, Kengo Nakajima, A Cascadic Parareal Method for Parallel-in-Time Simulation of Compressible Supersonic Flow, *IPJS Transaction on Advanced Computing Systems* (in press), 2024
- (2) 国際会議プロシーディングス (査読あり)
- [9] Y. Asahi, Naoyuki Onodera, Yuta Hasegawa, Takashi Shimokawabe, Hayato Shiba, and Yasuhiro Idomura, Generating observation guided ensembles for data assimilation with denoising diffusion probabilistic model, *ICML 2023 Workshop, Synergy of Scientific and Machine Learning Modeling*, 2023
- [10] Murakami, S., Fujita, K., Ichimura, T., Hori, T., Hori, M., Lalith, M., Ueda, N., Development of 3D Viscoelastic Crustal Deformation Analysis Solver with Data-Driven Method on GPU, *Lecture Notes in Computer Science 14074 (Proceedings of ICCS 2023)*, 2023
https://doi.org/10.1007/978-3-031-36021-3_45
- [11] Yamazaki, K., Porting an Atmospheric Model to GPUs: Low-Cost to High-Performance Results, *Open Accelerated Computing Summit 2023 (OACS)*, 2023
- [12] Shinji Sumimoto, Toshihiro Hanawa, Kengo Nakajima, MPI-Adapter2: An Automatic ABI Translation Library Builder for MPI Application Binary Portability, *ACM Proceedings of IXPUG Workshop in conjunction with HPCAsia'24*, 63-68, 2024, doi:10.1145/3636480.3637219
- [13] Kodama, C., Yashiro, H., Arakawa, T., Takasuka, D., Matsugishi, S., and Tomita, H., Parallelized Remapping Algorithms for km-scale Global Weather and Climate Simulations with Icosahedral Grid System, *ACM Proceedings of the International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPCAsia '24)*, 35-46, 2024, doi:10.1145/3635035.3635040
- [14] Kengo Nakajima, Communication-Computation Overlapping for Parallel Multigrid Methods, *IEEE Proceedings of iWAPT 2024 in conjunction with IPDPS 2024* (in press), 2024
- (3) 国際会議発表 (査読なし)
- [15] Nagao, H., Kaneko, R., Ito, S., Tsuruoka, H., Obara, K., Detection of deep low-frequency tremors from continuous paper records at a station in southwest Japan about 50 years ago based on convolutional neural network, *European Geosciences Union (EGU) General Assembly 2023, Vienna*, 2023
- [16] Nakajima, K., Furumura, T., Tsuruoka, H., Yashiro,

- H., Sumimoto, S., Arakawa, T., Integration of 3D simulation of long-period strong ground motion and real-time data assimilation on the Wisteria/BDEC-01 system with h3-Open-BDEC, HPC Workshop for Nuclear Explosion Monitoring 2023, CTBTO (Preparatory Commission for the Comprehensive Nuclear-Test-Ban Treaty Organization), Vienna, Austria, 2023 **[Keynote Talk]**
- [17] Kaneko, R., Nagao, H., Ito, S., Tsuruoka, H., Obara, K., Detection of deep low-frequency tremors from continuous paper records at a station in southwest Japan about 50 years ago based on convolutional neural network, The International Union of Geodesy and Geophysics, The 28th General Assembly (IUGG 2023), Berlin, Germany, 2023
- [18] Tokuda, T., Nagao, H., Seismic-phase detection using multiple deep learning models for global and local representations of waveforms, The International Union of Geodesy and Geophysics, The 28th General Assembly (IUGG 2023), Berlin, Germany, 2023
- [19] Yashiro H., Arakawa T., Sumimoto S., Nakajima K., Application Optimization and Scalability of NICAM-LETKF on Fugaku, The Platform for Advanced Scientific Computing (PASC) 2023 Conference, 2023
- [20] Arakawa, T., Sumimoto, S., Yashiro, H., Nakajima, K., Development of a Heterogeneous Coupling Library h3-Open-UTIL/MP, 20th Annual Meeting of Asia Oceania Geosciences Society (AOGS2023), Singapore, 2023
- [21] Yashiro H., Arakawa T., Nakajima, K., On-the-fly Data Streaming from Climate Simulations for Training the Data-driven Surrogated Models, 20th Annual Meeting of Asia Oceania Geosciences Society (AOGS2023), Singapore, 2023
- [22] Kaneko, R., Nagao, H., Ito, S., Tsuruoka, H., Obara, K., Detection of deep low-frequency tremors from continuous paper records at a station in southwest Japan about 50 years ago based on convolutional neural network, 20th Annual Meeting of Asia Oceania Geosciences Society (AOGS2023), Singapore, 2023
- [23] Tokuda, T., Nagao, H., Seismic-phase detection using multiple deep learning models for global and local representations of waveforms, 20th Annual Meeting of Asia Oceania Geosciences Society (AOGS2023), Singapore, 2023
- [24] Nakajima, K., Innovative Supercomputing in the Exascale Era by Integration of Simulation/Data/Learning, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2023), Tokyo, 2023
- [25] Murakami, S., Fujita, K., Ichimura, T., Hori, T., Hori, M., Lalith, M., Ueda, N., GPU-accelerated viscoelastic crustal deformation analysis with data-driven method, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2023), Tokyo, 2023
- [26] Arakawa, T., Sumimoto, S., Yashiro, H., Nakajima, K., h3-Open-UTIL/MP: A coupling library for heterogeneous computing, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2023), Tokyo, 2023
- [27] Sumimoto, S., System-Wide Coupling Communication for Heterogeneous Computing Systems, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2023), Tokyo, 2023
- [28] Nakajima, K., Innovative Supercomputing by Integration of Simulation/Data/Learning at the Information Technology Center, The University of Tokyo, The 6th International Workshop on Nonhydrostatic Models (NHM-WS 2023), Sapporo, 2023 **[Invited Talk]**
- [29] Yashiro, H., Performance, scalability, and portability of Nonhydrostatic ICosahedral Atmospheric Model on GPUs, The 6th International Workshop on Nonhydrostatic Models (NHM-WS 2023), Sapporo, 2023 **[Invited Talk]**
- [30] Yamazaki, K., Porting MIROC-SCALE Superparameterization to GPU using OpenACC, The 6th International Workshop on Nonhydrostatic Models (NHM-WS 2023), Sapporo, 2023
- [31] Nakajima, K., Long but “Straight” Road towards Integrations of Simulations/Data/Learning on Oakforest-PACS II, Open Accelerated Computing Summit 2023 (OACS), 2023 **[Keynote Talk]**
- [32] Nakajima, K., Innovative Supercomputing by Integrations of Simulations/Data/Learning on Oakforest-PACS II, 14th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Heterogeneous Systems (ScalAH23) in conjunction with SC23, Denver, CO, USA, November 13, 2023 **[Invited Talk]**
- [33] Nakajima, K., Supercomputing in the Exascale Era by Integrations of Simulations/Data/Learning, Northeast Asia Symposium 2023 (The International Conference of New Generation Databases and Data-Empowering Technologies), Guangzhou, China, 2023 **[Invited Talk]**

- [34] Nakajima, K., Integration of Simulation/Data/Learning and Beyond, International Workshop on "Integration of Simulation/Data/Learning and Beyond" (45th ASE Seminar), 2023
- [35] Hiromichi Nagao, Deep Learning to Extract Earthquakes and Low-Frequency Tremors in Continuous Seismic Waveforms, International Workshop on "Integration of Simulation/Data/Learning and Beyond" (45th ASE Seminar), 2023
- [36] Hisashi Yashiro, Algorithmic transformation from physical models to data-driven models using the coupling library: a case of a climate model, International Workshop on "Integration of Simulation/Data/Learning and Beyond" (45th ASE Seminar), 2023
- [37] Takashi Shimokawabe, Fast Prediction Methods for Fluid Simulation Results Using Deep Neural Networks, International Workshop on "Integration of Simulation/Data/Learning and Beyond" (45th ASE Seminar), 2023
- [38] Shinji Sumimoto, h3-Open-SYS/WaitIO: A System-wide Heterogeneous Communication Library to Couple Multiple MPI programs, International Workshop on "Integration of Simulation/Data/Learning and Beyond" (45th ASE Seminar), 2023
- [39] Nagao, H. Ito, S., Foundation of Data Assimilation and Its Application to Phase-Field Models MRM2023 & IUMRS-ICA2023, Kyoto, December 14, 2023 **[Invited Talk]**
- [40] Tokuda, T. and H. Nagao, Two-stage approach for transfer learning of seismic-phase detection model to a small sample size data via multiple clustering-based classification, American Geophysical Union Fall Meeting, 2023
- [41] Kaneko, R., H. Nagao, S. Ito, H. Tsuruoka, and K. Obara, Detection of deep low-frequency tremors from continuous paper records at a station in southwest Japan about 50 years ago based on convolutional neural network, The International Union of Geodesy and Geophysics, The 28th General Assembly, 2023
- [42] Tokuda, T. and H. Nagao, Seismic-phase detection using multiple deep learning models for global and local representations of waveforms, The International Union of Geodesy and Geophysics, The 28th General Assembly, 2023
- [43] Nakajima, K., Integration of 3D Earthquake Simulation & Real-time Data Assimilation, SEU-ASEAN High-Performance Computing (HPC) School 2023 **[Invited Talk]**
- [44] Kengo Nakajima, Integration of Simulation/Data/Learning and Beyond, 14th ADAC Symposium in conjunction with SCAisa 2024, Sydney, Australia, **[Invited Talk]**
- [45] Nakajima, K., Integration of Simulation/Data/Learning and Beyond, MS31: Progress & Challenges in Extreme Scale Computing & Big Data SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP24), Baltimore, MD, USA, 2024
- [46] Kengo Nakajima, Integration of Simulation/Data/Learning and Beyond, 2024 Conference on Advanced Topics & Auto Tuning in High-Performance Scientific Computing (ATAT in HPSC 2024), 2024 **[Invited Talk]**
- (4) 国内会議発表（査読なし）
- [47] Nakajima, K., Innovative Supercomputing by Integration of Simulation/Data/Learning, 第 42 回 ASE 研究会（Advanced Supercomputing Environment）, 東京大学情報基盤センター, 2023
- [48] Nakajima, K., Innovative Supercomputing by Integration of Simulation/Data/Learning, ITC セミナー, 東京大学情報基盤センター, 2023
- [49] 中島研吾, 「計算・データ・学習」融合が切り拓く革新的スーパーコンピューティング, 日本地球惑星連合 2023 年大会, 千葉, 2023 **[招待講演]**
- [50] 荒川隆, 住元真司, 八代尚, 中島研吾, h3-Open-UTIL/MP カプラを用いた NICAM アンサンブル連成計算, 日本地球惑星連合 2023 年大会, 千葉, 2023
- [51] 長尾大道, 人工知能による地震研究の新展開, 第 37 回人工知能学会全国大会, 熊本, 2023 **[招待講演]**
- [52] 金子亮介, 長尾大道, 伊藤伸一, 鶴岡弘, 小原一成, 残差学習に基づく地震波形紙記録からの低周波微動の検出, 第 37 回人工知能学会全国大会, 熊本, 2023
- [53] 住元真司, 堀敏博, 中島研吾, コンテナによるジョブ可搬性実現とファイルアクセス高速化, 情報処理学会研究報告 2023-HPC-190-004, 2023
- [54] Sumimoto, S., System-Wide Coupling Communication for Heterogeneous Computing Systems, 第 43 回 ASE 研究会（Advanced Supercomputing Environment）, 東京大学情報基盤センター, 2023
- [55] 長尾大道, 4 次元変分法データ同化の理論深

- 化と応用展開, 第 50 回 ものづくり企業に役立つ応用数理手法の研究会, オンライン, 2023
【招待講演】
- [56] 荒川隆, 住元真司, 八代尚, 中島研吾, 異機種間連携ライブラリの性能評価, 第 22 回情報科学技術フォーラム (FIT2023), 大阪, 2023
- [57] 徳田智磯, 長尾大道, 混合ウイシャートモデルに基づくマルチプル・クラスタリングによる低周波地震検出のための観測点選択, 2023 年度統計関連学会連合大会, 京都, 2023
- [58] 山崎一哉, スーパーパラメタリゼーション化 MIROC の GPU による高効率実行, 日本気象学会 2023 年度秋季大会, 仙台, 2023
- [59] 徳田智磯, 長尾大道, 少量データに適用可能な地震波検出モデルの転移学習: マルチプル・クラスタリングを用いた二段階アプローチ, 日本地震学会秋季大会, 2023
- [60] 中島研吾, いまさら聞けないスパコンの常識, 構想設計コンソーシアム, 産業技術総合研究所, 2023 **【招待講演】**
- [61] 下川辺隆史, 深層学習を用いたシミュレーション結果を予測する代理モデル開発の取り組み, 第 7 回 HPC ものづくり統合ワークショップ, 2023 **【招待講演】**
- [62] 中島研吾, (計算・データ・学習) 融合による革新的スーパーコンピューティングとその先にあるもの, 第 15 回 自動チューニング技術の現状と応用に関するシンポジウム (ATTA2023), 2023
- [63] 柳田真輝, 徳田智磯, 加藤慎也, 長尾大道, 最適輸送理論に基づく地震波形データからのイベント検出とその分類, 日本統計学会春季集会, 2024
- [64] 住元真司, 荒川隆, 坂口吉生, 松葉浩也, 八代尚, 大島聡史, 埜敏博, 中島研吾, WaitIO の RDMA による通信高速化, 情報処理学会研究報告, 第 194 回 HPC 研究会 (in press), 2024
- (5) 公開したライブラリなど
- (6) その他 (特許, プレスリリース, 著書等)
- [65] 長尾大道, 日本経済新聞, サイエンス・フロンティア, 地震データ, AI で分析 g, 2023 年 8 月 18 日
- [66] Nakajima, K., Heroux, M., Petiton, S., MS-02458: Progress and Challenges in Extreme Scale Computing and Big Data, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2023), Tokyo, 2023
- [67] 長尾大道, NHK, 漫画家イエナガの複雑社会を超定義, なぜ地震って予知できないの?, 2023 年 9 月 1 日
- [68] 長尾大道, 毎日新聞, 科学の森, 地震観測 いずれみんなのスマホから, 2023 年 9 月 21 日
- [69] 住元真司, 荒川隆, 東京大学情報基盤センター, 第 217 回お試しアカウント付き並列プログラミング講習会「異種システム間連成アプリケーション開発を学ぶ: WaitIO/MP 講習会: シミュレーションと機械学習融合編」, 2023 年 10 月 19 日 (オンライン) <https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/events/lectures/217>
- [70] Adutya Ujeniya (+), Extending a Simulation Framework for Performance Assessment of Parallel Applications, Masters Thesis, Department of Computer Science, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg (FAU), 2024 (in press)