

[2013]九州大学情報統括本部年報 : 2013年度

<https://doi.org/10.15017/1559839>

出版情報 : 九州大学情報統括本部年報. 2013, pp.1-, 2014. 九州大学情報統括本部
バージョン :
権利関係 :



第5章 学際計算科学研究部門

5.1 スタッフ一覧

職名	氏名	研究キーワード
教授	青柳 睦	計算化学, 電子状態理論, 第一原理計算, 並列計算, 分散処理, シミュレーション, 分子軌道法, GRID, 分子動力学, 反応動力学
准教授	天野 浩文	並列処理, 並列プログラミング言語, ジョブスケジューリング, 並列ファイルシステム, データベース, データベースプログラミング言語, グリッドコンピューティング
准教授	高見 利也	量子カオス, 最適制御, Rabi 振動, 連成シミュレーション, マルチスケール, マルチフィジックス

5.2 研究事例紹介

5.2.1 恒等変換を利用した時間方向並列計算とバケツリレー通信

研究の背景

時間方向並列計算のアルゴリズムとして広く知られているのは、2001年に Lions たちによって提案された Parareal-in-Time 法である。この手法による並列計算は、分子動力学や量子状態制御などの常微分方程式系から流体力学などの偏微分方程式系まで、多くの種類の時間発展計算において収束性と有効性が調べられている。

Parareal-in-Time 法は、時系列 $\{x_k\}$ ($x_{k+1} \equiv F_k(x_k)$) を計算する時、 k 方向の依存関係を近似関数 $G_k(x_k)$ を使って解消することにより、時間のかかる計算 $F_k(x_k)$ を並列化する。このため、

$$x_{k+1}^{(r+1)} = G_k(x_k^{(r+1)}) + F_k(x_k^{(r)}) - G_k(x_k^{(r)}) \quad (5.1)$$

で定義される r 次近似の時系列 $\{x_k^{(r)}\}$ を求めるが、問題に応じた $G(x)$ を必要とすることとスピードアップ比の限界など、問題点が多く存在する。

Identity Parareal 法の提案と適用例

そこで、近似関数 $G(x)$ を定義する代わりに、恒等変換 $G(x) = x$ を使うことを提案した^{1,2)}。これは、如何に近似の精度を高めて Parareal-in-Time 法の収束を速くするかを研究してきた従来の方向とは全く逆の試みであり、すべての依存計算 $x_{k+1} = F(x_k)$ に適用できる訳ではない。しかし、連続な時間発展をする問題に対しては、

$$\frac{d}{dt}x(t) = f(t, x(t)) \iff x(t + dt) = x(t) + \frac{\partial f}{\partial x} dt + O(dt^2) \quad (5.2)$$

と離散化されることに注意すると (右辺第一項は前の時刻の状態と同じ $x(t)$ であることに注意)、恒等変換による近似が正当化されるのである。このとき、繰り返し計算の漸化式は、

$$x_{k+1}^{(r+1)} = x_k^{(r+1)} + F(x_k^{(r)}) - x_k^{(r)} \quad (5.3)$$

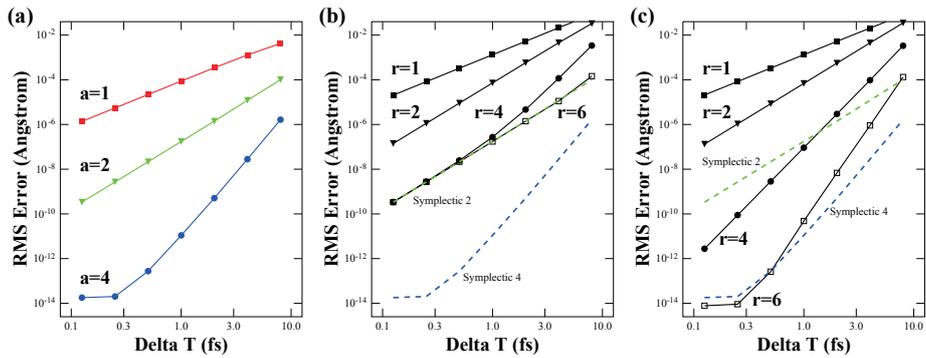


図 5.1: 16 時間ステップの分子動力学計算の誤差: (a) 1 次、2 次、4 次のシンプレクティック (SI) 法による誤差、(b) $F(x)$ として 2 次の SI 法を使った場合の iParareal 法の誤差、(c) $F(x)$ として 4 次の SI 法を使った場合の iParareal 法の誤差。

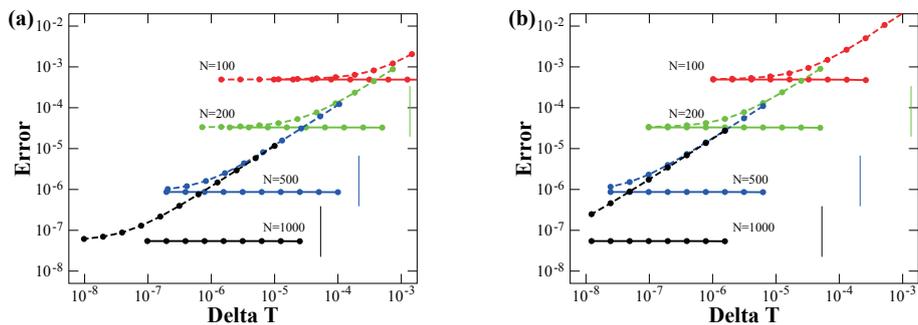


図 5.2: (a) バーガース方程式の離散化誤差 (点線は Euler 法、実線は中点法によるもの)、(b) iParareal 法 ($P = 16$) による誤差 (点線は $R = 1$ 、実線は $R = 2$ の結果)

となる。この方法による時間並列計算を Identity Parareal (iParareal) 法と呼ぶ。

MD 計算で広く使われる二次のシンプレクティック積分法 (Velocity Verlet) に iParareal 法を適用した場合の誤差を、図 5.1 に示す。図 5.1(a) のシンプレクティック (SI) 法による離散化誤差の様子と比較すると明らかなように、時間発展計算として 2 次の SI 法を使った場合 (b) は (a) の 2 次の誤差曲線に、4 次の SI 法を使った場合 (c) は (a) の 4 次の誤差曲線に漸近する結果が得られている。この結果から、通常の MD 計算では $r = 4$ 程度の繰り返し、高精度の計算では $r = 6$ 程度の繰り返しが必要とされることがわかる。

偏微分方程式を対象とした例として Burgers 方程式の場合、レイノルズ数 $Re = 100$ で、Euler 法・中点法 (2nd Runge-Kutta) による数値解と厳密解との差をプロットすると、図 5.2(a) のようになる。ここでは、初期条件として $u(x) = \sin(2\pi x)$ を与え、 $t = 0.25$ での誤差を評価した。点線で示した Euler 法の誤差は時間刻みによって変動するが、中点法では十分に高精度な時間積分になっているため時間刻みによらず、安定に計算出来る範囲内では空間差分 (5 点中間差分) の誤差で決まる一定値となる。図 5.2(b) は、 $F_k(x_k)$ として中点法による時間積分を利用した iParareal 法の誤差を厳密解と比較したものである。 $R = 1$ では収束が不十分だが、 $R = 2$ では、通常の中点法による結果と同様に、時間刻みによらず収束していることがわかる。

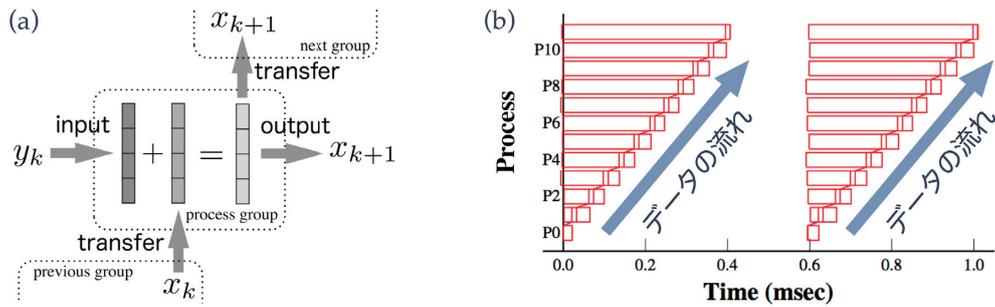


図 5.3: (a) バケツリレーの概念図と、(b) 実行のイメージ。

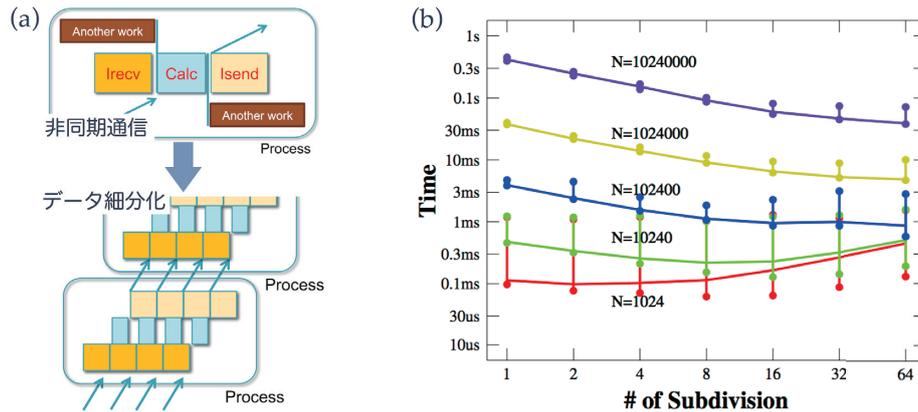


図 5.4: (a) 非同期通信とデータ細分化による高速化、(b) 転送時間の実測結果

バケツリレー通信

iParareal 法を分散並列計算する時は、漸化式 (5.3) を

$$y_k^{(r+1)} = F_k(x_k^{(r)}) - x_k^{(r)} \quad (5.4)$$

$$x_{k+1}^{(r+1)} = x_k^{(r+1)} + y_k^{(r+1)} \quad (5.5)$$

と分割し、前半をプロセス毎の計算、後半をバケツリレー通信関数として実装する³⁾。これは、図 5.3(a) に示すように、複数プロセス間で一方向にデータを転送しながら演算を行う、最も単純なパイプラインパターンで、特定のプロセス間にのみ一方向の転送が実行されることが特徴的である。

バケツリレーの様子を時系列として可視化したものを図 5.3(b) に示す。12 プロセス間のバケツリレーを 2 回繰り返して測定したものであるが、各プロセスで現れる三個の長方形は、受信待ち、計算、送信待ちの状態に対応したものである。すべてのデータを受信するまで待つて演算を開始し、演算がすべて終わった後に転送するという方法では、無駄な待ち時間が大きくなってしまうため、データを細分化してパイプライン的に実行することで、通信、あるいは、演算の部分を隠蔽できる (図 5.4(a) の下半分)。図 5.4(b) は、12 プロセス間で N 個の倍精度実数データを、 $m = 2, 4, \dots, 64$ などに細分化してバケツリレー転送し、実測したものである。データサイズが小さい場合は平均的に 0.1 msec 前後のレイテンシが必要で、12 プロセス全体のスループットは 10 MBytes/sec 程度であるが、データサイズが大きい $N = 10^6$ と $N = 10^7$ の場合は、分割数を大きくすれば、約 4 msec、40 msec で転送を完了することが出来、2 GBytes/sec 程度のスループットが得られている。全体 (P0 は演算をしないため 11 プロセス) で 3 GFlops 弱の演算を行っていることになるが、異なるプロセスの演算は異なる CPU で同時に実行されるため、決して過大な性能ではない。通信と計算のチューニングにより、

さらに高性能を目指すことは可能であると考えられる。

文献

- 1) 高見 利也, 福留 大貴, 「恒等変換による時間並列化法 Identity Parareal の性能とパケツリレー通信」, 情報処理学会研究報告 HPC-141-12, 1-8 (2014).
- 2) T. Takami and D. Fukudome, “An efficient pipelined implementation of space-time parallel applications,” Adv. Par. Comp. **25**, 273-281 (2014).
- 3) D. Fukudome and T. Takami, “Parallel Bucket-Brigade Communication Interface for Scientific Applications,” Proc. EuroMPI, p. 135 (2013).

5.2.2 秘密分散法とストレージ仮想化技術を利用した安全なオフサイトバックアップシステムの開発

2012年度までの研究の経過と問題点

組織の持つほとんどすべての IT システムが同時に大きな損害を受けるような大規模災害の際でも重要な情報を失わないようにするため、これまでに、以下のような機能を持つストレージシステムの開発を行ってきた。

- 本ストレージシステムは、Linux 上で広く用いられている iSCSI ターゲット tgt を改良したもの (tgt-x) である。現在の主要な OS に標準で搭載されている iSCSI イニシエータの機能を利用してローカルボリュームと等価にアクセスできるため、既存の OS やアプリケーションを変更することなく利用できる。
- tgt-x は、ブロック書き込みの要求が来ると、それをローカルのボリュームに保存するとともに、秘密分散法を適用して同じサイズの符号化データ n 個 を生成し、これをリモートサイトのボリュームの同じ論理ブロックアドレスに自動的に分散保存する。 (k, n) -しきい値型秘密分散法 (図 5.5) が適用されているため、 n 個のデータのうち k 個を集めてこなければ元の情報を復元することはできない。このため、リモート (バックアップ) サイトの管理者が預かったデータの内容を知ることはできない。遠隔ボリュームへの符号化データの書き込みはローカルボリューム上への一時保存→リモートボリュームへの遅延書き込みの二段階で処理されるため、書き込み応答速度が改善されるだけでなく、一時的な通信障害やバックアップ先システムの長時間の保守に対応できる (図 5.6)。
- 対象となるストレージボリューム全体に秘密分散法を適用して遠隔バックアップを行うため、メタデータの内容もリモートサイトの管理者に漏洩する恐れがない。
- 各サイトで tgt-x を動作させて重要なデータのバックアップ相互保持を行えるように、tgt-x の起動シーケンスにおいて、バックアップ先のボリュームがマウントできない (バックアップ先の tgt-x がまだ起動していない) 状態でも起動できるように改良されている。

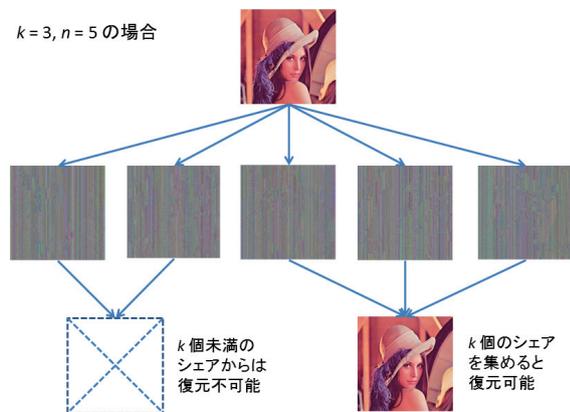


図 5.5: (k, n) -しきい値型秘密分散法

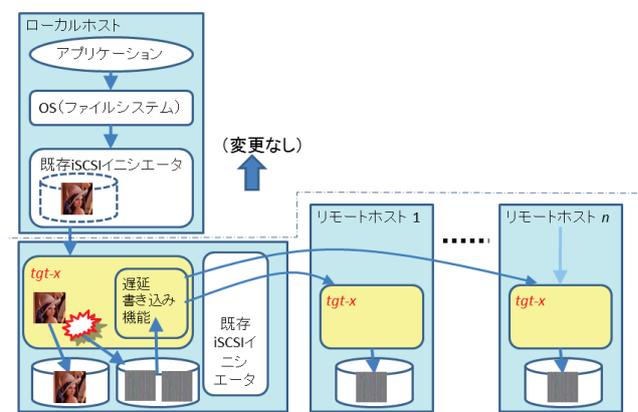


図 5.6: tgt-x の遅延書き込み機能

ただし、2012年度までのシステムでは、「大規模災害の後も復旧に必要な情報がどこかに保全されている」ことが保証されているだけで、実際の復旧処理の機能は実装されていなかった。また、サービスの再開に先立って、失われた原データボリューム全体の復元を完了させておく必要がある。

一方、電子情報に大きく依存する現代の社会においては、単に重要な電子情報を大規模災害から保護するだけでなく、重要なサービスをできるだけ迅速に再開させることも不可欠である。

オンデマンド再構築とバックグラウンド再構築

そこで、2013年度は、災害後のサービス再開までに要する時間を短縮するため、**オンデマンド再構築機能**と**バックグラウンド再構築機能**の基本設計と試作を行った。これらの機能は、tgt-xとは独立の**データ復元デーモン**として実装した。

まず、復元すべきボリュームと同じサイズの空のボリュームを用意する。その後、データ復元デーモンを起動し、災害によって失われたボリュームを必要とするサービスを再開する。

オンデマンド再構築処理は、データ復元デーモン内のスレッドとして実装され、以下のような手順で行われる。各ステップの番号は、図 5.7 の左側の模式図内の丸数字に対応している。オンデマンド再構築処理とバックグラウンド再構築処理が共通で使用することになる管理テーブルは、ボリュームに含まれる全ブロックについて、そのブロックの再構築が完了したかどうかを記録している。

1. アプリケーションがデータブロックを要求する。
2. iSCSI イニシエータが、tgt-x にブロックを要求する。
3. tgt-x は、管理テーブルの情報から、そのブロックがまだ復元済みでないことを知ると、データ復元デーモンにブロックを要求する。
4. データ復元デーモンは、復元に必要なバックアップのブロックをリモートホストから回収し、秘密分散法を逆に適用して元データを復元し、復元されたブロックをローカルボリュームに書き込む。
5. このとき、データ復元デーモンは、どのブロックを復元したかを示す管理テーブルも合わせて更新する。
6. tgt-x は、復元後のデータを iSCSI イニシエータに返す。
7. iSCSI イニシエータは、復元されたデータをアプリケーションに返す。

バックグラウンド再構築処理はデータアクセス要求が来ていないときに発動されるもので、オンデマンド再構築機能と同様にデータ復元デーモン内のスレッドとして実装され、以下のような手順で処理される。各ステップの番号は、図 5.7 の右側の模式図内の丸数字に対応している。

1. データ復元デーモンが、まだ復元されていないブロックの修復に必要なバックアップのブロックをリモートホストから回収し、秘密分散法を逆に適用して、元データを復元し、復元されたブロックをローカルボリュームに書き込む。
2. このとき、データ復元デーモンは、どのブロックを復元したかを示す管理テーブルも合わせて更新する。

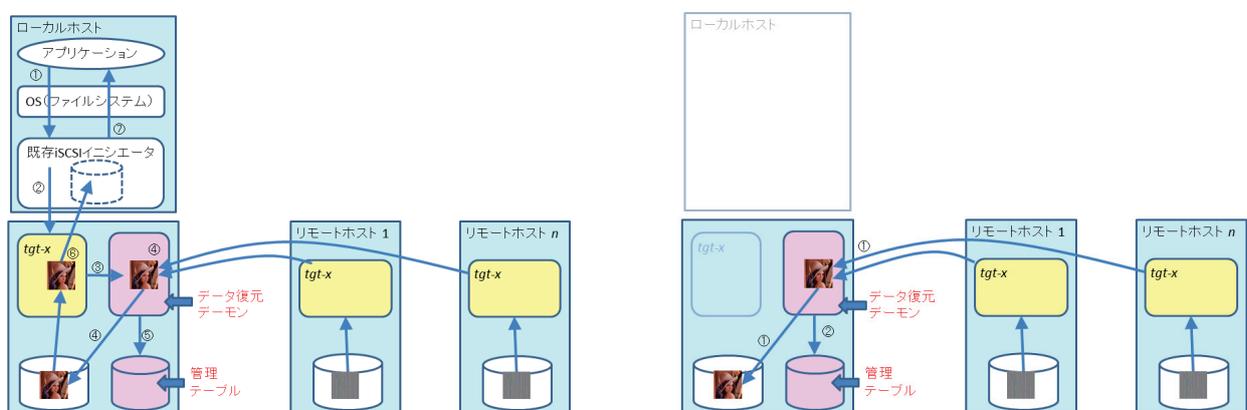


図 5.7: オンデマンド再構築処理 (左) とバックグラウンド再構築処理 (右)

管理テーブルが保持する情報は、ボリューム全体の復元が終了すれば不要となるものであるが、データ復元デーモンとは別のプロセスである `tgt-x` もその内容にアクセスしなければならないこと、さらに、ボリューム全体の復元が完了する前にシステムのシャットダウンが行われた場合にそれまでの復元処理を無駄にしないため、メモリマップトファイル I/O 機能を用いて二次記憶上にファイルとしても保存する。

2013 年度の成果

2013 年度は、前節で述べたデータ復元デーモンの基本設計と試作を行い、`tgt-x` と連携させることによって、迅速なサービス再開が可能であることを確認した。

旧システムでは、復旧対象の空のボリュームを用意した後のデータの復元処理に、1GB で約 16 分、10GB で約 165 分の時間が必要であった。このことから、100GB のボリュームが災害で失われた場合には、サービス再開に必要なハードウェアの手配とデータボリュームの作成が終了してからもなおサービスが再開できるまでに、少なくとも 1 日以上時間を要することが推定される。2013 年度の成果であるデータ復元デーモンを利用すれば、データ復元処理の時間を事実上ゼロにまで短縮することができる。この成果は、重要な情報システムが災害で機能を喪失した後、できる限り短時間でそのサービスを再開させるのに非常に有用である。

ただし、データ復元デーモンによる再構築が完了するまでの間は、データ再構築中の RAID における `degrade mode` と同じような動作となり、通常のローカルストレージへのアクセスと比べると応答性能は大きく低下する。どの程度性能が低下するかについては、今後、評価を行う予定である。

今後の展望

2013 年度の試作システムでは、迅速にサービスを再開させるためのオンデマンド再構築とバックグラウンド再構築の基本的な機能が実装されたのみである。実用的な遠隔バックアップシステムにおいては、サービス再開を急ぐあまり、重要なデータが正当な権利を持たない者の手に落ちることがあってはならない。

そこで、今後は、安全かつ迅速なデータ復旧を可能にするような機構を開発する必要がある。その処理手順は、大規模災害直後の混乱の中でも現実的に運用することが可能でなければならない。このため、正当な権利を有する者であることを証明するための手順と、それが証明された者だけがデータ復旧とサービス再開を行えることを保証する自動機構とを分けて考える必要がある。

文献

- 1) H. Amano, Y. Dohi, H. Ikeda: “An Approach to Safe Off-Site Backup Utilizing Secret Sharing Scheme and Storage Virtualization,” *Proc. IIAI International Conference on Advanced Information Technologies 2013 (CD-ROM)*, Jakarta, Indonesia, November 28–30, 2013.

5.3 研究内容紹介

5.3.1 青柳 睦

研究内容

研究テーマは Multi-Scale, Multi-Physics シミュレーション技術の開発とその応用をメインテーマとして、数理モデルと階層性という概念にこだわりを持ち研究を行っている。その他、次世代の高性能計算機の性能予測、広域分散計算環境、クラウド・コンピューティングといった計算科学の幅広い研究テーマで基礎と応用の研究を行っている。

● 連成シミュレーションによる溶媒中タンパク質の電子構造の解明

ナノサイズの複雑な物理現象の解析においては空間・時間スケールや物理法則が異なるシミュレーション間の連携(マルチスケール・マルチフィジックス連成解析)がしばしば重要である。九州大学と日立製作所の共同研究により、我々は分散計算環境の上で大規模な連成解析を支援するツールを開発してきた。今回、連成に関わるアプリケーション・コンポーネントの独立性を保持しながら、幅広いナノアプリケーション群を簡単な操作で連成可能なグリッド連成ミドルウェア(名称: Mediator)を開発した。Mediatorの使用によりコンポーネント毎に異なる方式で離散化された物理量のデータ交換を効率良く行うことが可能である。連成計算の例として無限個の溶媒溶質相互作用を取り込む RISM 法とナノ分子の電子状態を解析する FMO 法の連成による水溶液中におけるタンパク質の電子状態計算の解析を実施した。

FMO 法はナノ分子を小さな部分系(フラグメント)に分割し並列計算により効率的に電子状態を解析する方法である。一方 RISM 法では分子性液体の統計力学に基づく積分方程式(RISM 方程式)を解くことにより溶質-溶媒間のサイト-サイトペア相関関数 $h(r)$ を求める。連成計算では初期値から出発して3次元-RISMによる溶媒分布とFMOによる溶質分子のモノマー計算が自己無撞着となるまで繰り返し、各繰り返しの最後に溶媒分布と溶質原子上の有効電荷を交換する。RISM法により3次元等間隔メッシュ上の値として得られた溶媒分布のデータはFMOの計算量節約のために溶質の近傍で密、遠方で疎なアダプティブメッシュ上の値へと変換(マッピング)される。変換に必要なメッシュ間の相関関係を計算開始時に Mediator に登録することにより、連成アプリケーション開発者は離散化手法の異なる個々のアプリケーション内でそれぞれのデータ構造と交換データの格納場所等を頭に意識せずに、効率的なデータ交換が可能であることを示した。

生化学的な成果としては、RISM-FMO 連成計算の応用例としてリゾチウムの溶菌作用を解析するために水溶液中のリゾチウムの電子構造計算を行い、この生体内酵素反応では活性中心から細胞壁を構成する糖タンパク(Peptidoglycan)へのプロトン移動が酵素反応にとって重要な働きを持っていることを示した。分子動力学シミュレーションによる水和構造を用いて行った計算では、プロトンの位置が移動するにつれて Peptidoglycan の電子構造に大きな変化が認められ、糖鎖の結合乖離のミクロの過程を RISM 法と FMO 法の大規模な連成計算によって解明することに成功した。そのほか RISM-FMO の他にも分子動力学(MD)と有限要素法(FEM)の連成計算やMDとPB(ポアソン-ボルツマン方程式)解法の連成計算等にも Mediator を応用し成果を上げている。

● 流体-音 連成シミュレーション

近年さまざまな分子科学系に対して連成シミュレーションによる方法が試されており、われわれも日立製作所との共同研究による連成ミドルウェア Mediator の開発などを通して連成計算を容易に構成できるような仕組みを研究してきた。このような連成シミュレーションは、化学

反応によるエネルギー変換過程や熱や物質の伝播を考える場合には、さらに多数の理論を組み合わせて複雑な構成となる場合がある。例えばエンジン中での燃焼など、化学反応の進行を流体力学計算も含めたシミュレーションとして構築しなくてはならないような時でも同様のアプローチを適用していくために、ここでは流体力学を含むダイナミクスを考えた。今年度は九州工業大学との共同研究により、まず手始めに流体力学と音波との連成計算について研究を行った。計算対象とするのは、比較的低マッハ数の空気ジェットと鋭角の構造物（エッジ）より生ずる高レイノルズ数の乱流である。これは、フルートなどのエアリード楽器のシミュレーションに相当するもので、流体のジェットから音波へのエネルギー変換過程を調べるものである。

連成シミュレーション手法による計算科学的な利点を定量的に調べることである。そのために、連成シミュレーションとして、非圧縮性流体を表す Navier-Stokes 方程式を音波の波動方程式と連成して構成した計算と、音波の伝播まで含む圧縮性流体の計算について、計算量などを比較した。ただし、ここでは計算科学的な量に注目するため、楽器そのもののシミュレーションではなく、Lighthill や Howe の理論による渦音源からの発音が観測できる最も簡単な系でのシミュレーションを想定した比較である。

フルートなどのエアリード楽器の発音機構は、渦音源からの音波の発生、エッジトーン、開口端反射、共鳴器からのフィードバックなどの要素からなるもので、発振の機構を明らかにするためには、これらの相互作用の様子を詳細に見ていく必要がある。今年度は、二次元化した楽器モデルを導入して、発振までの比較的長時間（秒のオーダー）のシミュレーションを行い、これにより、それぞれの機構の持つ固有振動数が、非線形相互作用により互いに引き込む形で増幅され、楽器としての発振にまでいたるといふ発音機構の概要を示すことができた。

● **レイテンシコアの高度化・高効率化による将来の HPCI システムに関する調査研究**（インターコネクト性能推定環境の検討）

東京大学が代表を務める文部科学省からの委託研究「レイテンシコアの高度化・高効率化による将来の HPCI システムに関する調査研究」の分担研究課題として、次世代のスーパーコンピュータのインターコネクト性能をシミュレーションにより推定する環境を開発した。シミュレーション環境（各種設定ファイルの作成も含む）を用いたインターコネクト性能推定ならびに各種解析を行い、東京大学や株式会社日立製作所等から提供されたアプリケーションにおいて、通信部分に着目したインターコネクト・シミュレーションを実施した。これにより、通信衝突を考慮した通信レイテンシ、ならびにプロセス配置が通信性能に与える影響等を明らかにすることが出来た。またインターコネクトシミュレータの改良を継続して行うと共に、性能推定環境の整備を進め、通信衝突を可視化するツール類を整備した。

理学部物理学科情報理学コース、およびシステム情報科学府の講義と演習科目を担当した。数値解析、数値解析演習、並列アルゴリズム、計算科学特論

所属学会名

情報処理学会、HPC 研究会

研究プロジェクト

- **レイテンシコアの高度化・高効率化による将来の HPCI システムに関する調査研究**
2012.04～2014.03, 代表者：石川裕, 九州大学、富士通、日立製作所、日本電気（日本）

研究業績

- 原著論文

1. Kin'ya Takahashi¹, Takuya Iwasaki¹, Takahiro Akamura¹, Yuki Nagao, Ken'ichiro Nakano, Taizo Kobayashi, Toshiya Takami, Akira Nishida, and Mutsumi Aoyagi, Effective techniques and crucial problems of numerical study on flue instruments, Proceedings of Meetings on Acoustics, 19, 35021-35029, 2013.06.

研究資金

- 科学研究費補助金

1. 基盤 (C) 「並列分散計算環境における連成シミュレーション用ミドルウェアの開発と応用」

- 競争的資金

1. 「レイテンシコアの高度化・高効率化による将来の HPCI システムに関する調査研究」(分担)

教育活動

- 教育活動

1. 2002 年後期より理学部物理学情報理学コースで次の講義科目を担当「数値解析」, 「数値解析演習」, 「並列アルゴリズム」
2. 2002 年後期よりシステム情報科学府情報理学専攻で次の講義科目を担当「計算科学特論」

社会貢献・国際連携等

- 社会連携活動

1. 2011- HPCI コンソーシアム委員
2. 2011- 学際大規模情報基盤共同利用共同研究拠点委員

大学運営

- 学内運営に関わる各種委員・役職等

1. 2008.10～, 九州大学 産業技術数理研究センター委員会委員.
2. 2003.04～, 教育改革推進室協力教員.

5.3.2 天野 浩文

研究内容

- ストレージ仮想化技術を応用した安全な遠隔バックアップ方式の研究

社会における電子情報の重要性が増すにつれ、災害やシステム障害等でそれが失われた場合の影響も深刻になる。組織の持つほとんどすべての機能が同時に大きな損害を受けるような大規模災害の際には、災害やシステム障害に備えて組織内で採取・保持されているバックアップ情報自体も同時に危険にさらされるおそれがある。しかし、大きな費用や労力がかかること、あるいは、電子情報の外部預託に心理的抵抗があることにより、自力では地理的に離れた地点に複数のバックアップを保持することが困難な組織も多い。

そこで、これらの組織が共同で費用を負担することによって個々の組織あたりの金銭的負担を軽減するとともに、一定のネットワークセキュリティレベルを有する組織どうしが複製情報を相互に保持し合うことによって心理的な抵抗も軽減できるようなバックアップ手法の研究を行っている。

- 電子認証基盤と計算機センター業務フローの融合に関する研究

わが国の全国共同利用情報基盤センター群は、対面による確認が困難な全国の大学・短大等の研究者にもサービスを提供するため、大学等の経理担当者による間接的な保証や郵便物の到達性にもとづき、個々に利用者アカウントを発行してきた。ここに電子認証技術を利用したシングルサインオン環境を導入しようとする、そこで交付される電子証明書は本人性確認のレベルの問題から海外のグリッド環境では信用されず利用できないという問題があった。そこで、従来型の利用を希望する利用者への対応は変更なく継続しつつ、国際的に通用する電子証明書の交付も可能となるような新たな業務フローを確立するため、海外のグリッド環境でも承認されるような電子認証局プロファイルで求められる要件と、従来からのセンター業務を融合させるための検討を行い、わが国で最初のスパコングリッドの試行運用に貢献した。これらの成果は、2012年度からサービスを開始する予定のHPCIの認証基盤構築の基礎となった。

- 広域分散メタコンピューティングのための並列データ転送機構の研究

グリッドコンピューティングは、地理的・組織的に分散する多数の計算機資源を超高速ネットワークで接続しそれらを統合運用することによって、「巨大仮想スーパーコンピュータ」や、「スーパーコンピュータ付き仮想先端科学技術実験施設」の実現などを目指すものである。

このグリッド上の計算サーバで動作するプログラムの多くは並列プログラムであるが、「巨大仮想スーパーコンピュータ」や「スーパーコンピュータ付き仮想先端科学技術実験施設」を実現するためには、これら間で大容量のデータを高速に転送する技術が必要になる。このため、遠隔地の並列プログラム間で並列にデータを転送する機構の研究を行っている。

- グリッドコンピューティングのための資源管理技術の研究

グリッドコンピューティングのもう一つの目的は、ネットワーク上のどこからでも計算機資源の所在地を意識することなく、誰もが簡単にスーパーコンピュータを利用できる「仮想パーソナルスーパーコンピュータ」を実現することである。ところが、各地に整備されたスーパーコンピュータは、それぞれ規模・性能・運用方針などが異なっており、それらの差異を意識せずに最適な資源を選択して利用できるような資源管理機構はまだ実現されていない。そこで、本研究では、実行ホストを特定せずに利用者から与えられた処理要求から、それを実行するのに最適なホストを自動選択する技術、および、利用者の処理要求をその実行ホストに合わせた処理要求へと自動変換する技術の研究を行っている。

所属学会名

情報処理学会, 電子情報通信学会

主な研究テーマ

- 電子認証基盤と計算機センター業務フローの融合に関する研究
キーワード：電子認証技術, 計算機センター利用者支援業務, 2011.04.～
- ストレージ仮想化技術を応用した安全な遠隔バックアップ方式の研究
キーワード：ストレージ仮想化, 遠隔バックアップ, 2010.04～.

研究業績

- 原著論文
 1. Tetsuya Nakatoh, Hirofumi Amano, Sachio Hirokawa, Prediction of Growth Rate of Operating Income Using Securities Reports ,Proceedings of the IIAI International Conference on Advanced Applied Informatics (IIAI AAI 2013),2013.08.
 2. Hirofumi Amano, Yuki Dohi, Hiromune Ikeda, An Approach to Safe Off-Site Backup Utilizing Secret Sharing Scheme and Storage Virtualization, Proceedings of the IIAI International Conference on Advanced Information Technologies 2013 (IIAI AIT 2013),2013.11.

研究資金

- 科学研究費補助金
 1. 2012 年度～2014 年度, 基盤研究 (B), 分担, 自己都合による廃止権を持つ組織間連携分散ファイル管理システムの研究開発.
 2. 2011 年度～2013 年度, 基盤研究 (C), 代表, ストレージとネットワークの仮想化による電子情報の遠隔バックアップ技術の開発.

教育活動

- 教育活動概要
 1. 大学院システム情報科学府情報知能工学専攻「プログラム設計論特論」
 2. 工学部電気情報工学科「電気情報工学入門」(1 年生, コアセミナー)
 3. 工学部電気情報工学科「コンピュータシステム II」(3 年生, 計算機工学課程)
 4. 全学教育科目「情報科学 III～サーバーサイドプログラミング論～」
- 担当授業科目
 1. 2013 年度・前期, 電気情報工学入門.
 2. 2013 年度・前期, プログラム設計論特論.
 3. 2013 年度・後期, コンピュータシステム II.

社会貢献・国際連携等

- 社会貢献活動

1. 2013年度, HPCI セキュリティインシデント即応委員会 委員.
2. 2013年度, HPCI 連携サービス運営・作業部会 副部長.
3. 2013年度, 国立情報学研究所「学術情報ネットワーク運営・作業部会 認証作業部会」委員.
4. 2013年度, 九州大学情報基盤研究開発センター民間利用審査委員会 委員.

大学運営

- 学内運営に関わる各種委員・役職等

1. 2013.04～, 男女共同参画推進室 室員.
2. 2011.04～, 九州大学情報基盤研究開発センター民間利用審査委員会委員.
3. 2011.01～, 事務用業務システム運用部会メンバー.
4. 2010.05～, 英語表記検討ワーキンググループ委員.
5. 2008.04～, 九州大学情報基盤研究開発センター公募型プロジェクト審査委員会委員.
6. 2007.03～, 箱崎地区共通施設利用検討チーム委員.
7. 2007.04～, 九州大学情報基盤研究開発センター全国共同利用運営委員会委員.
8. 2007.04～, 九州大学情報基盤研究開発センター計算委員会委員.

5.3.3 高見 利也

研究内容

自然界に見られる現象は、単一の物理学理論で記述するにはあまりにも複雑であるため、大規模な計算機を利用した複数スケールに渡るシミュレーションという研究手法が、様々な分野で広く使われるようになってきている。これまでの研究テーマでは、半古典論を介した量子力学と古典力学系の結合系、外部から与えられる電磁場（レーザー光など）による量子状態の制御ダイナミクス、統計力学に従う溶液中での生体分子の電子状態、楽器中に見られる音波や振動と圧縮性流体の相互作用など、様々なスケールでの非線形現象を扱ってきた。これらの現象を計算機の上で再現するだけにとどまらず、背後にある数理的な構造や法則を明らかにしていくことが最終的な目的である。

情報統括本部では HPC 事業室に所属し利用者支援を担当している。計算科学全般におけるアプリケーションソフトウェアの発掘を行い、情報の提供を行うとともに、学内外の様々な分野の know-how の共有を目指して利用者相互の情報交換の場を提供する。

所属学会名

情報処理学会, 日本物理学会, オープン CAE 学会.

主な研究テーマ

- マルチスケール・マルチフィジックス連成シミュレーションの数理と応用
キーワード：連成シミュレーション, マルチスケール, マルチフィジックス 2004.10～.
- 量子カオス系の状態制御
キーワード：量子カオス, 最適制御, Rabi 振動 2002.09～.

研究プロジェクト

- 省メモリ技術と動的最適化技術によるスケーラブル通信ライブラリの開発
2011.10～2017.03, 代表者：南里 豪志, 科学技術振興機構 戦略的創造研究推進事業 CREST 「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」
今後数年間で、スーパーコンピュータの CPU コア数は 1 億個以上になると予想されています。本研究では、スーパーコンピュータの重要な基盤ソフトウェアである通信ライブラリについて、計算機の規模によらず少ない使用メモリ量で効率よく通信を行う省メモリ技術と、実行中の状況に応じて自律的に動作を調整する動的最適化技術を用いた通信ライブラリを開発するとともに、この通信ライブラリの機能を活かした効率の良いプログラムの作成技術を研究開発します。

研究業績

- 原著論文
 1. Toshiya Takami, Daiki Fukudome, An Efficient Pipelined Implementation of Space-Time Parallel Applications, Advances in Parallel Computing, 25, 273-281, 2014.03.
 2. Daiki Fukudome, Toshiya Takami, Parallel Bucket-Brigade Communication Interface for Scientific Applications, Proceedings of the 20th European MPI Users's Group Meeting (EuroMPI 2013), 135-136, 2013.09.

3. T. Akamura, Y. Nagao, T. Iwasaki, K. Nakano, K. Takahashi, T. Kobayashi, T. Takami, A. Nishida, M. Aoyagi, Numerical analysis of the interaction between fluid flow and acoustic field at the mouth-opening of a flue instrument, Proceedings of Meetings on Acoustics, 19, 035023-1-8, 2013.06.
 4. K. Takahashi, T. Iwasaki, T. Akamura, Y. Nagao, K. Nakano, T. Kobayashi, T. Takami, A. Nishida, M. Aoyagi, Effective techniques and crucial problems of numerical study on flue instruments, Proceedings of Meetings on Acoustics, 19, 035021-1-8, 2013.06.
 5. T. Iwasaki, T. Kobayashi, K. Takahashi, T. Takami, A. Nishida, M. Aoyagi, Numerical study on the function of tone holes of a recorder like instrument from the viewpoint of the aerodynamic sound theory, Proceedings of Meetings on Acoustics, 19, 035024-1-7, 2013.06.
- 総説, 論評, 解説, 書評, 報告書等
 1. 高見利也, 福留大貴, 恒等変換による時間並列化法 Identity Parareal の性能とバケツリレー通信, 情報処理学会研究報告 [ハイパフォーマンスコンピューティング], 2014-HPC-143(12), 1-8, 2014.02
 - 学会発表
 1. 高見利也, 福留大貴, 新しい時間並列化法 iParareal とマルチスケール解析, HPCS, 2014.01.07.
 2. 高見利也, Parareal 法の応用とマルチスケール解析, 日本応用数理学会環瀬戸内応用数理研究部会 第 17 回シンポジウム, 2014.01.12.
 3. 高見利也, 非線形物理学における高性能計算の実像, 今後の HPC に関するワークショップ, 2013.12.09.
 4. T. Takami, Identity Parareal for Time-evolution Problems, 4th AICS International Symposium, 2013.12.02.
 5. Toshiya Takami, Daiki Fukudome, An Efficient Pipelined Implementation of Space-Time Parallel Applications, International Conference on Parallel Computing (ParCo 2013), 2013.09.11.
 6. Toshiya Takami, Daiki Fukudome, A simple implementation of parareal-in-time on a parallel bucket-brigade interface, 10th International Conference on Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM2013), 2013.09.09.
 7. Toshiya Takami, Michiko Shimokawa, Hiroshi Fujisaki, Taizo Kobayashi, Random Aggregation Models and Simulations for Coffee Fractals on Milk, XXV IUPAP International Conference on Statistical Physics (Statphys25), 2013.07.25.
 8. Toshiya Takami, Hiroshi Fujisaki, Optimal control of nonlinear dynamics: Quantum-classical correspondence, XXXIII Dynamics Days Europe, 2013.06.07.

研究資金

- 科学研究費補助金
 1. 2013 年度～2015 年度, 挑戦的萌芽研究, 分担, 非平衡非定常現象への統計科学の展開と生体分子の機能発現機構に対するその応用.
 2. 2011 年度～2013 年度, 基盤研究 (C), 代表, 身近な非線形現象に対するマルチスケールの手法の確立と応用.

3. 2011 年度～2013 年度, 基盤研究 (C), 分担, 流体音響理論を用いたエアリード楽器の解析.

- 競争的資金 (受託研究を含む)

1. 2011 年度～2016 年度, 戦略的創造研究推進事業 (CREST) 「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」, 分担, 省メモリ技術と動的最適化技術によるスケーラブル通信ライブラリの開発 (研究代表者: 南里豪志).

教育活動

- 教育活動概要

1. 2010 年後期より、システム情報科学研究院情報学専攻にて「仮想実験特論」を担当

大学運営

- 学内運営に関わる各種委員・役職等

1. 2010.11～, 新キャンパス計画専門委員.
2. 2010.04～, HPC 事業室 利用者支援担当.