

## [2021]九州大学情報統括本部年報 : 2021年度

<https://hdl.handle.net/2324/4844360>

---

出版情報 : 九州大学情報統括本部年報. 2021, pp.1-, 2022-10-01. Information Infrastructure Initiative, Kyushu University

バージョン :

権利関係 :



## 第4章 先端計算科学研究部門

### 4.1 スタッフ一覧

職名	氏名	研究キーワード
教授	美添 一樹	探索アルゴリズム、並列アルゴリズム、マテリアルインフォマティクス、コンピュータ囲碁、ゲーム AI
准教授	天野 浩文※1	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	渡部 善隆	精度保証付き数値計算、偏微分方程式、有限要素法、区間解析、誤差評価
准教授	南里 豪志	並列処理、通信効率化、動的最適化
准教授	嶋吉 隆夫※2	ソフトウェア工学、形式手法、計算生理学、フィジオーム、数値解析、細胞モデリング、心臓シミュレーション

※1 2021年10月29日まで在職

※2 2021年10月31日まで在職

### 4.2 研究事例紹介

#### 4.2.1 「並列探索アルゴリズム、シミュレーション、深層学習を用いた新規化合物探索」

##### 概要

膨大な計算資源を背景とした機械学習的なアプローチが、過去には難しかった多くの問題を解きつつある。AlphaGo が囲碁棋士に勝利したことはその中でも最も有名な話題の一つであるが、これは深層学習の進歩とモンテカルロ木探索 (Monte-Carlo Tree Search, MCTS) によってもたらされた。HPC 分野でも高度なシミュレーションと機械学習を組み合わせることで今まで解けなかった大規模な問題を解く試みは数多く行われている。ここでは、我々が近年取り組んでいる化合物シミュレーションを背景として、機械学習と並列化された探索を組み合わせることで新規化合物発見を目指す研究について紹介する。

##### 背景

機械学習の急速な進歩によって今まで数値化できなかったものが数値として扱えるようになり、他の多くのアルゴリズムの適用対象も急激に拡大している。特に化合物に関連してもデータベースからの学習によって化合物らしいデータを生成する研究が盛んに行われている。多くの研究では、グラフニューラルネットワークや文字列によって化合物を表現し、深層ニューラルネットワーク (DNN) モデルを訓練することによって化合物を現すデータの生成に成功している。例えば多くの商用の化合物を含む ZINC データベースを教師例として、かなり高い確率で類似の化合物らしいデータを生成することができる。生成されたデータは多くの場合、未だ人類によって合成されたことのない化合物である。

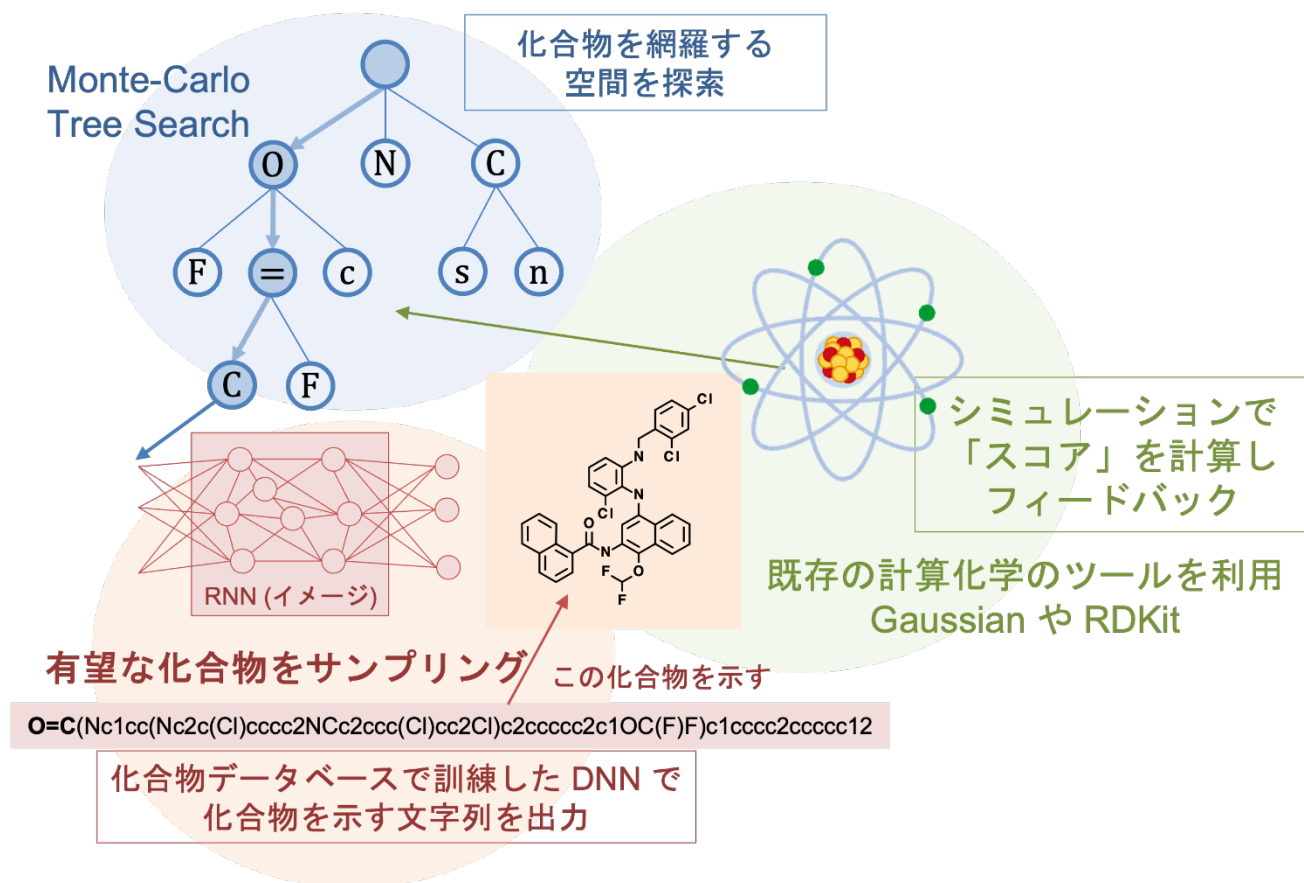


図 4.2.1

## 目的

化合物データの生成が可能となったことを踏まえて、これを用いて新しい有望な化合物を探索することが考えられる。通常、探索を行うためには、探索対象の有望度を示すスコアと探索空間を表現するデータ構造が必要である。化合物に対するスコアとしては、既存の計算化学の成果を応用し、Gaussian 等の高精度のシミュレータや RDKit 等のツールによって化合物候補の性質や合成しやすさなどの指標を元にスコアを定義することが可能である。また、探索空間としては単純に SMILES 文字列の空間を探索することが考えられる。新規化合物探索の全体像を図 4.2.1 に示す。SMILES 文字列（一例は図左下）を網羅するツリー状の探索空間（左上）を MCTS によって探索する。その際のスコアは Gaussian や RDKit 等で計算する。

## 探索方法

探索木の各節点は化合物の集合を示す。例えば図左上の O=C をたどった節点は、「O=C」で始まる SMILES 文字列全体の集合を示す。さらに機械学習モデルを用いて残りの文字列を生成する。ここには化合物データベースで事前に訓練した Recurrent Neural Network (RNN) の一種である Gated Recurrent Network (GRU) を用いた。このモデルは化合物の文字列を途中まで入力すると、後続の文字を確率的に生成する能力を持つ。これを用いて完全な化合物を現す文字列を一つ生成することができる。この文字列を計算化学シミュレータに渡してスコアを計算する。MCTS スコアの有望な方向へ重点的に探索を進める。

## 探索の並列化

当然、全体を並列計算機で高速に動作させることが望ましい。ところがここで用いる MCTS のようなグラフ探索は一般に並列化が困難だと考えられており、既存研究もかなり限定的である。しかし我々は過去に MCTS 等のグラフ探索の並列化に取り組んでおり、その経験を活用して MCTS の効率よい並列化に成功した。MCTS が並列化されることによって図 4.2.1 の全体を効率よく並列化することが可能となった。我々の方法は探索アルゴリズムの深さ優先変形とハッシュ駆動並列化を用いたもので、昨年度発表した手法では 256 並列以上で非常に良い並列化効率を達成している。

## 結果

昨年度までの研究で、いくつかのスコアに対して探索による新規化合物発見に取り組んでいる。本年度は蛍光物質の発見に応用に関する結果を発表した。Gaussian によるシミュレーション結果をスコアとして用いる並列探索によって新たな蛍光化合物の候補を発見し、そのうち有望な 8 個を実際に専門家に依頼して作成した。その結果、6 個が実際に蛍光を発することが確認された。化学者によれば意外なものも含まれているようであり、並列探索+深層学習+HPC による新規化合物探索の試みは有望だと言える。今後はさらにアルゴリズムの性能を高めるとともに、新たな応用を検討する方針である。

#### 4.2.2 「線形微分作用素の可逆性理論の改良と一般化」

昨年度に引き続き、2階楕円型線形作用素の可逆性の理論的な保証と数学的に厳密な意味での逆作用素ノルムの上界を精度保証付き数値計算によって求める研究に取り組んだ。楕円型作用素を理論的・数値的な知見が得られている2階微分作用素項と1階微分以下の摂動項に分離し、摂動項に対応する作用素と有限次元部分空間の基底との内積で構成される行列を用いることにより、可逆性の検証および逆作用素の上界の評価が既存の手法に比較して大幅に改良されることを理論面・応用面から明らかにした。あわせて、この理論と技術が一般のHilbert空間における線形作用素に拡張可能なことを明らかにし、非線形偏微分方程式の線形化から導かれる具体的な問題に対してその有効性を明らかにするとともに、学術論文として投稿した。

さらに、2階楕円型線形作用素の可逆性と収束性に対する理論的な検討を行い、自然な仮定と離散近似の下で、線形作用素の逆作用素のGalerkin近似が真の逆作用素にノルム収束することを証明した。これらの成果を2021年度に開催された2つの国際会議：19th GAMM-IMACS International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Validated Numerics (SCAN 2020) および International Workshop on Reliable Computing and Computer-Assisted Proofs (ReCAP 2022)において報告し、学術論文として投稿した。検証においては、九州大学情報基盤研究開発センターのスーパーコンピュータシステムITOを活用した。

## 4.2.3 「Kolmogorov 問題から導かれる無限次元最大値ノルム評価の改良」

3次元トーラス型領域に特別な境界条件と外力項を付加した Navier-Stokes の定常問題 (Kolmogorov 問題) においては、領域の形状と流体の粘性係数に応じて様々な非自明解が生じることが数値的に知られている。コンピュータにより Kolmogorov 問題の解の存在を数学的に厳密な誤差評価付きで検証するためには、無限次元空間における最大値ノルムの高精度かつ効率的な評価が不可欠である。2021 年度における共同研究の成果として、周期境界条件の下で問題を多次元 Fourier 級数展開して得られた無限次元空間において、最大値ノルム評価が極めて最適値に近い値で評価可能であることを示すことに成功し、さらにこれらの評価を用いることにより、非線形問題の解の検証そのものが精度良く実現可能となることを精度保証付き数値計算により明らかにした。

**2. Improved estimations of  $C_{11}$ – $C_{16}$**

**Theorem 2.1** Constants  $C_{11}$ – $C_{16}$  satisfying (2) can be taken as

$$C_{11} = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi^2} \left( \left[ \frac{2}{(1+\alpha^2)^3} - 1 - \frac{1}{\alpha^6} \right] \zeta(6) + 2 \left( 1 + \frac{1}{\alpha^6} \right) \zeta(5) \right)}, \quad (3)$$

$$C_{12} = \sqrt{\frac{\alpha}{4\pi^2 N^4} \left( 1 + \frac{1}{\alpha^6} \right)}, \quad (4)$$

$$C_{13} = \sqrt{\frac{1}{2\pi^2 \alpha^2} \left( \frac{1}{\alpha} \zeta(4) + \frac{3\pi}{8} \zeta(3) \right)}, \quad (5)$$

$$C_{14} = \sqrt{\frac{1}{2\pi^2 N^2} \left( \frac{3\pi}{8} + \frac{2}{3\alpha^3} \right)}, \quad (6)$$

$$C_{15} = \sqrt{\frac{1}{2\pi^2} \left( \alpha \zeta(4) + \frac{3\pi}{8} \zeta(3) \right)}, \quad (7)$$

$$C_{16} = \sqrt{\frac{\alpha}{2\pi^2 N^2} \left( \frac{3\pi}{8\alpha^3} + \frac{2}{3} \right)}, \quad (8)$$

where  $\zeta(x)$  denotes the standard Riemann zeta function.

$$\begin{aligned} & \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{(\alpha^2 m^2 + n^2)^3} \\ &= \left( \underbrace{\sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{m-1}}_{\text{lower}} + \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{n-1}}_{\text{upper}} + \underbrace{\sum_{m=n=1}^{\infty}}_{\text{diagonal}} \right) \frac{2}{(\alpha^2 m^2 + n^2)^3} \\ &= \frac{2}{(1+\alpha^2)^3} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^6} + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{m-1} \frac{2}{(\alpha^2 m^2 + n^2)^3} - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2}{\alpha^6 m^6} \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{n-1} \frac{2}{(\alpha^2 m^2 + n^2)^3} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n^6} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{(\alpha^2 k^2 + k^2)^3} \\ &= \left[ \frac{2}{(1+\alpha^2)^3} - 2 - \frac{2}{\alpha^6} \right] \zeta(6) + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{m-1} \frac{2}{(\alpha^2 m^2 + n^2)^3} \\ &+ \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{n-1} \frac{2}{(\alpha^2 m^2 + n^2)^3} \\ &\leq \left[ \frac{2}{(1+\alpha^2)^3} - 2 - \frac{2}{\alpha^6} \right] \zeta(6) + \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{m-1} \frac{2}{\alpha^6 m^6} + \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=0}^{n-1} \frac{2}{n^6} \\ &= \left[ \frac{2}{(1+\alpha^2)^3} - 2 - \frac{2}{\alpha^6} \right] \zeta(6) + 2 \left( 1 + \frac{1}{\alpha^6} \right) \zeta(5), \end{aligned}$$

ノルム評価と証明の一部(投稿論文より抜粋)

## 共同研究

2021 年度に行なった共同研究は以下の通りである。

1. 無限次元線形化作用素の可逆性判定とノルム評価の効率化  
共同研究者: 中尾 充宏 (早稲田大学) 木下 武彦 (九州大学)
2. 非線形波動方程式に対する計算機援用証明  
共同研究者: Michael Plum, 長藤 かおり (ドイツ・Karlsruhe 工科大学)
3. Navier-Stokes 方程式に対する計算機援用安定性解析  
共同研究者: Shuting Cai (中国・Fujian Jiangxia 大学)
4. Proudman-Johnson 方程式の解の検証および解の形状に関する精度保証付き数値計算  
共同研究者: 宮路 智行 (京都大学)
5. Kolmogorov 問題から導かれる最大値ノルム評価の改良  
共同研究者: 小林 健太 (一橋大学)

## 4.3 研究内容紹介

### 4.3.1 美添 一樹

#### 研究内容

中心となる研究テーマとしてグラフ探索アルゴリズムや探索などの複雑なアルゴリズムの大規模並列化に取り組んでいる。

コンピュータ囲碁に関連するアルゴリズムやより広くゲーム AI もテーマとしている。

さらに探索と機械学習の応用として化合物など（いわゆるマテリアルインフォマティクス）や遺伝子解析（バイオインフォマティクス）などもテーマとしている。

教育としてはシステム情報科学府などを兼務し、グラフ探索などに関係する科目を担当予定。

情報基盤研究開発センターでスーパーコンピュータ関連の業務にも取り組む。

#### 所属学会名

電子情報通信学会，情報処理学会，人工知能学会，ICGA，ACM

#### 主な研究テーマ

- ・ 機械学習とグラフ探索によって化合物，材料科学などの実問題を解く  
キーワード：グラフ探索，機械学習，化合物，材料科学，2015.04～.
- ・ グラフ探索アルゴリズムの大規模並列化  
キーワード：グラフ探索アルゴリズム，分散メモリ並列化，2010.05～.

#### 研究プロジェクト

- ・ 機械学習と探索の協調による高性能最適化アルゴリズム  
2020.04～，代表者：美添 一樹，九州大学

## 研究業績

### ● 原著論文

1. Xiufeng Yang, Tanuj Kr Aasawat, Kazuki Yoshizoe, Practical Massively Parallel Monte-Carlo Tree Search Applied to Molecular Design., The Ninth International Conference on Learning Representations (ICLR2021), 2021.05.
2. Ryuichiro Hataya, Jan Zdenek, Kazuki Yoshizoe, Hideki Nakayama, Meta Approach to Data Augmentation Optimization., WACV, 10.1109/WACV51458.2022.00359, 3535-3544, 2022.01.
3. Masato Sumita, Kei Terayama, Naoya Suzuki, Shinsuke Ishihara, Ryo Tamura, Mandeep K. Chahal, Daniel T. Payne, Kazuki Yoshizoe, Koji Tsuda, De novo creation of a naked eye-detectable fluorescent molecule based on quantum chemical computation and machine learning, Science Advances, 10.1126/sciadv.abj3906, 8, 10, 2022.03.

## 研究資金

### ● 科学研究費補助金

1. 2020年度～2024年度, 基盤研究(B), 代表, 機械学習と探索の協調による高性能最適化アルゴリズム

## 教育活動

### ● 担当授業科目

1. 2021年度・秋学期, 情報科学講究
2. 2021年度・秋学期, 国際科学特論Ⅱ
3. 2021年度・後期, 情報科学講究

### 4.3.2 天野 浩文

#### 研究内容

- ・ ストレージ仮想化技術の研究データ管理への応用

研究不正の防止や研究成果のオープン化によるイノベーションの促進のため、研究データを適切に保全し公開することの重要性は広く認識されつつある。しかし、そのような目的であっても、研究者個人が安定的なストレージを運用することは容易ではなく、研究機関がそのような設備を整備する必要がある。本研究では、そのような機関ストレージに仮想化技術を応用することによって、研究者個人が研究データ保全のため過大な負担を強いられることなく適切な研究データ管理が行えるような基盤を構築することを目指す。

- ・ 汎用的な計算環境のための拡張公平性スレッドスケジューリングの研究

オペレーティングシステム (OS) のスケジューラは、実行中のプロセスが、アイドル状態となったとき、または、CPU 上でタイムスライスと呼ばれる単位時間を消費したときに、次のタイムスライスを待機中のどのプロセスに割り当てるかを決定する。単一のスレッドで動作する従来のアプリケーションプログラム (AP) に加えて、近年は複数のスレッドを利用する新しい AP が増加しつつあり、新しい AP のプロセスにより多くのタイムスライスが割り当てられるために従来の AP のプロセスの実行が阻害される恐れが出てきている。また、単一 CPU 内のコア数の増大や単一計算機上で複数の OS を同時に動作させる仮想計算機 (VM) 環境の普及により、スケジューラは、単一コア内・同一 CPU 内コア間・VM 間の各レベルでプロセス間の公平性を保証しなければならない。本研究では、これらの各レベルにおける公平性を保証する新たなスケジューリング技術を模索している。

- ・ 次世代 NVRAM に対応したシングルレベルストレージサブシステムの研究

これまでの主記憶装置に用いられてきた DRAM とはまったく異なる原理に基づく不揮発性メモリ (NVRAM) が実用化されつつある。このような次世代 NVRAM は、電源を切っても内容が失われることなく、DRAM なみの応答速度を持つと期待されている。しかし、次世代 NVRAM がただちに SSD や HDD の座を完全に奪うことは考えにくい。このため、将来の計算機内には、HDD、SSD、主記憶と同等の応答速度を持つ装置、の三種類の記憶装置が混在する可能性がある。これらの記憶媒体をアクセス頻度等に応じて適切に使い分けることは、現在の SSD と HDD を使い分けるよりもさらに複雑になるであろう。そこで、ストレージ仮想化技術を用いて三種類の記憶媒体を統合し、その内部で自動的にデータの配置・移動を制御することの可能なシングルレベルストレージシステムの研究を行っている。

- ・ 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バックアップ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手法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, IEEE (The Institute of Electrical and Electronics Engineers, Inc.)

## 主な研究テーマ

- ・ ストレージ仮想化技術の研究データ管理への応用  
キーワード: ストレージ仮想化技術, 研究データ管理, 2020.04～.
- ・ 汎用的な計算環境のための拡張公平性スレッドスケジューリングの研究  
キーワード: スレッド, スケジューリング, マルチコア CPU, 仮想計算機, 2016.04～.
- ・ 次世代 NVRAM に対応したシングルレベルストレージサブシステムの研究  
キーワード: シングルレベルストレージ, 2015.09～.
- ・ 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～.

## 研究資金

### ● 科学研究費補助金

1. 2018 年度～2021 年度, 基盤研究(C), 代表, 次世代 NVRAM を活用可能なシングルレベルストレージシステムの開発.

## 教育活動

### ● 担当授業科目

1. 2021 年度・春学期, サイバーセキュリティ基礎論
2. 2021 年度・夏学期, 基幹教育セミナー
3. 2021 年度・夏学期, プログラム設計論特論

## 社会貢献・国際連携等

### ● 社会貢献・国際連携活動概要

情報基盤研究開発センターの研究用計算機システムのサービスの国際化に資するため、同システムの web サイトの英語化作業に貢献した。また、外国人や国外居住者が同システムを利用しようとする際の申請手続きの整備においても、本学における安全保障輸出管理のための各種説明文書や申請書類の英訳作業に大きく寄与した。

### ● その他の優れた社会貢献活動

2021 年度、東京大学情報基盤センター・データ活用創成プラットフォーム共同研究基盤立ち上げ WG 委員として、同基盤の設置並びに運用に関する事項について、企画、立案、検討及び連絡調整に参画している。

## 大学運営

### ● 学内運営に関わる各種委員・役職等

1. 2019.04～2023.03, 九州大学学術情報リポジトリ専門委員会
2. 2019.04～2023.03, 九州大学附属図書館電子ジャーナル等検討専門委員会
3. 2011.01～, 事務用業務システム運用部会メンバー
4. 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
5. 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

### 4.3.3 渡部 善隆

#### 研究内容

「精度保証付き数値計算」とは、数理科学上に現れる関数方程式の解を、その存在証明および誤差評価込みで数値的に厳密に捉えようという方法です。

自然界のモデルから導かれる関数方程式の解を数値計算によって近似的に求める場合、離散化による誤差に加えて、計算機による丸め誤差が発生します。「精度保証付き数値計算」はこれら二つの誤差を厳密に評価することによって数値計算の信頼性を保証します。また、この方法は理論的に解の存在証明が困難な解析学の問題に対するアプローチとしても重要であると考えます。

現在は、有限要素法とその誤差評価をもとに、非線形偏微分方程式、特に Navier-Stokes 方程式に対する解の存在の数値的検証法の研究を進めています。

また、センターの全国共同利用計算機システムとして公開されている最新のハイパフォーマンスコンピュータ上で動作する数値計算プログラムライブラリの研究開発、性能評価などを行なっています。

教育・広報活動としては、プログラム言語、アプリケーションライブラリの利用方法に関する解説記事の執筆、利用の手引の作成、講習会の講師、プログラム相談、プログラムライブラリ開発の支援等を担当しています。

#### 所属学会名

日本数学会, 日本応用数理学会

#### 主な研究テーマ

- ・ 非線形偏微分方程式の解に対する事後誤差評価  
キーワード：偏微分方程式 精度保証付き数値計算 有限要素法, 2002.04～.

#### 研究業績

##### ● 原著論文

1. Shuting Cai, Yoshitaka Watanabe, Computer-assisted proofs of the existence of a symmetry-breaking bifurcation point for the Kolmogorov problem, Journal of Computational and Applied Mathematics, <https://doi.org/10.1016/j.cam.2021.113603>, 395, 113603, 2021.11.

● 学会発表

1. 渡部 善隆, Shuting Cai, 定常 Kolmogorov 問題の対称性破壊分岐点に対する精度保証付き数値計算, 日本応用数学会 2021 年度年会講演予稿集, pp.424-425, 2021.09.
2. akehiko Kinoshita, Yoshitaka Watanabe, and Mitsuhiro T. Nakao, On some convergence properties for finite element approximations to the inverse of linear elliptic operators, 19th GAMM-IMACS International Symposium on Scientific Computing, Computer Arithmetic, and Validated Numerics (SCAN 2020), 2021.09.
3. 渡部 善隆, Shuting Cai, Kolmogorov 問題の対称性破壊分岐点に対する計算機援用証明, 日本数学会 2021 年度秋季総合分科会 応用数学分科会講演アブストラクト, pp.123-124, 2021.09.
4. 渡部 善隆, 木下 武彦, 中尾 充宏, 2 階楕円型境界値問題から導かれる近似作用素ノルムの収束性, 日本応用数学会 2022 年研究部会連合発表会, 2022.03.
5. Yoshitaka Watanabe, Kaori Nagatou, Michael Plum, Takehiko Kinoshita, Mitsuhiro T. Nakao, A computer-assisted proof toward the critical Reynolds number for the Orr-Sommerfeld problem, International Workshop on Reliable Computing and Computer-Assisted Proofs (ReCAP 2022), 2022.03
6. 渡部 善隆, 長藤かおり, Michael Plum, 木下 武彦, 中尾 充宏, OrrSommerfeld 方程式の臨界 Reynolds 数に対する計算機援用証明, 日本数学会 2022 年年会, 埼玉大学, 応用数学分科会講演アブストラクト, pp. 153-154, 2022.03.

研究資金

● 科学研究費補助金

1. 2021 年度～2024 年度, 基盤研究(B), 代表, 精度保証付き数値計算の前進---有限と無限をつなぐもの---

● 競争的資金

1. 2014 年度～2021 年度, 戦略的創造研究推進事業 (文部科学省), 分担, モデリングのための精度保証付き数値計算論の展開(研究領域: 現代の数理科学と連携するモデリング手法の構築)

教育活動

● 教育活動概要

1. 情報数値解析 (システム情報科学府) 平成 21 年度～ (継続)
2. 情報処理概論 (工学部) 平成 14 年度～ (継続)

3. 平成 10 年度～ 研究用計算機システム講習会講師担当 (継続)
4. 平成 10 年度～ 研究用計算機システム利用の手引き・広報記事執筆 (継続)

● 担当授業科目

1. 2021 年度・夏学期, プログラミング演習 IA
2. 2021 年度・秋学期, Numerical Analysis for Information Science I
3. 2021 年度・秋学期, 情報数値解析 I
4. 2021 年度・後期, Numerical Analysis for Information Technology
5. 2021 年度・後期, 情報数値解析
6. 2021 年度・後期, 情報処理概論
7. 2021 年度・冬学期, Numerical Analysis for Information Science II
8. 2021 年度・冬学期, 情報数値解析 II

大学運営

● 学内運営に関わる各種委員・役職等

1. 2007.04～, 新キャンパス計画専門委員会
2. 2005.04～, スペースコラボレーションシステム委員会

#### 4.3.4 南里 豪志

##### 研究内容

平成8年に九州大学大型計算機センター（現在の情報基盤研究開発センター）に就職後、主に並列計算機におけるプログラムの実行環境について研究を行ってきた。

現在、大規模計算を行うための計算機としては、独自の記憶装置を持つ計算機を複数台ネットワークで接続した分散記憶型の並列計算機が主流である。このような環境では、計算機間の通信を効率よく行うための通信ライブラリの最適化が重要である。しかしながら、大規模な並列計算機環境では、実行時のプロセスの配置状況やほかのジョブの影響によって基本性能が変化するため、実行前の情報だけで最適化を行うことが困難となることが予想されている。そこで、実行時の状況に応じた自動最適化技術が求められている。その手段の一つとして、並列プログラムの実行中に取得したプロセスの配置や負荷状況、通信性能等の情報を用いて通信ライブラリの内部アルゴリズムやパラメータを調整する動的最適化技術を研究している。

情報基盤研究開発センターにおいて、利用者に対する講習会の講師を務めている他、並列プログラミングに関する大学院生向けの講義を担当している。

情報統括本部において HPC 事業室に所属し、スーパーコンピュータをはじめとする大規模計算機の調達や運用、利用者向けの講習などを担当している。

##### 所属学会名

IEEE , 情報処理学会

##### 主な研究テーマ

- ・ 高スケーラブル並列計算に向けた基盤技術の研究開発  
キーワード：スケーラビリティ、並列計算、高性能計算, 2011.09～.
- ・ 大規模並列計算機向け通信ライブラリの動的高速化手法に関する研究  
キーワード：並列計算, 動的最適化, 2005.04～.
- ・ 階層型クラスタシステム上のプログラム開発環境に関する研究  
キーワード：クラスタシステム, 並列計算, 分散共有メモリ, コンパイラ, 2003.04～.

##### 研究業績

###### ● 学会発表

1. Yuto Katoh, Keiichiro Fukazawa, Takeshi Nanri, Yohei Miyake , Cross-reference simulation by Code-

To-Code Adapter (CoToCoA) library for the study of multi-scale physics in planetary magnetospheres, 2021 Ninth International Symposium on Computing and Networking Workshops (CANDARW), 2021.12.

- 受賞

1. 大学 ICT 推進協議会 2020 年度年次大会優秀論文賞, 大学 ICT 推進協議会, 2021.04.

## 研究資金

- 科学研究費補助金

1. 2019 年度～2021 年度, 基盤研究(C), 代表, NVDIMM 上の通信バッファによるスケーラブルな非同期通信レイヤの開発

## 教育活動

- 教育活動概要

1. 工学部の留学生向けに、プログラミングに関する講義を英語で行っている。また、システム情報科学研究府の大学院生向けにネットワークに関する講義を行っている。

- 担当授業科目

1. 2021 年度・秋学期, (IUPE)Int. to Information Processing I
2. 2021 年度・冬学期, (IUPE)Int. to Information Processing II
3. 2021 年度・冬学期, 情報ネットワーク特論

## 大学運営

- 学内運営に関わる各種委員・役職等

1. 2017.04～, 男女共同参画推進室

### 4.3.5 嶋吉 隆夫

#### 研究内容

- ・ 計算機シミュレーション用ソフトウェアシステム

近年では、自然科学・工学・経済学だけでなく、生命科学や医学分野などでも計算機シミュレーションを用いた研究が盛んに行われている。この中で、新たな計算モデルを構築するような研究においては一般的に、何らかのシミュレーション用プログラムを研究者自らが実装しなければならないことが多い。しかし、そのためには、研究分野の知識だけでなく、数値計算とその実装方法、さらには、実行環境となる計算機に対する知識が要求される。これは、数値計算を用いた研究の普及に対する大きな障壁である。また従来は、シミュレーションプログラムは計算性能が最重要視され、ソフトウェアの保守性や拡張性、再利用性などはあまり重視されていなかった。そこで、オントロジーや形式手法といったソフトウェア工学の方法論を計算モデリングや計算機シミュレーションの分野に適用する研究を行っている。

- ・ 生理機能の理論解析

近年の生命科学研究は、新たな方法論の開発や計測技術の向上により著しく進展しており、それに伴って生命現象を対象とした計算機シミュレーション研究も普及しつつある。生命の仕組みを解き明かすことを目的とする生理学の分野では以前から数理モデルによる現象の説明が行われてきたが、近年の観測データの急速な蓄積や高性能計算環境の一般化などによって、生理学現象をより詳細かつ精密に再現する複雑大規模な計算モデルの構築が進んでいるが、未だ生理機能には未解明の点が多い。そこで、大規模計算や数値解析を用いて生理機能を理論的に解析する研究を進めている。

#### 所属学会名

Institute of Electrical and Electronics Engineers, Association for Computing Machinery, 情報処理学会, 電子情報通信学会, 日本生体医工学会

#### 主な研究テーマ

- ・ 数値計算アルゴリズムを対象とした形式手法  
キーワード：ソフトウェア工学, 記述言語, 数値計算, 2010.04～.
- ・ 細胞生理機能モデルの数理解析手法  
キーワード：計算生理学, フィジオーム, 2009.04～.
- ・ 心循環器系の多階層シミュレーション  
キーワード：心臓, 心室, 血管系, 細胞生理学, 電気生理学, 構造力学, 2003.04～.

- ・ 実用情報システム  
キーワード：計算機ネットワーク，システム設計，情報セキュリティ，1999.04～.

## 研究資金

### ● 科学研究費補助金

1. 2020年度～2022年度，基盤研究(C), 個体差を考慮した細胞数理モデルの構築・解析手法の開発
2. 2020年度～2022年度，基盤研究(C), 軽量コンテナによる大規模高集積メールホスティング基盤における送信機能の高機能化

## 教育活動

### ● 担当授業科目

1. 2021年度・夏学期，情報処理概論
2. 2021年度・前期，計算機シミュレーション特論Ⅰ
3. 2021年度・前期，計算機シミュレーション特論Ⅱ

## 大学運営

### ● 学内運営に関わる各種委員・役職等

1. 2018.04～，情報統括本部 情報共有基盤事業室
2. 2016.10～，情報統括本部 九大 CSIRT
3. 2015.11～，情報統括本部 ネットワーク事業室