

## [2022]九州大学情報統括本部年報 : 2022年度

<https://hdl.handle.net/2324/7157415>

---

出版情報 : 九州大学情報統括本部年報. 2022, pp.1-, 2023-11-01. 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 部門活動概要

計算科学 / 計算機科学の研究を核として、幅広い学術応用分野の応用に資する先端計算機利用の共通基盤技術開発と教育を担当し、最先端の計算技術を活用できる人材の育成を行うことにより、科学技術の発展に貢献する。

### 4.2 構成員

《部門長》	教授	美添	一樹
	准教授	渡部	善隆
	准教授	南里	豪志
	准教授	大島	聡史
	准教授	樋口	祐次

### 4.3 各員活動概要

#### 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

- 2015.04～ 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
- 2010.05～ 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

## 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：美添 一樹、九州大学

## 研究資金

### ・ 科学研究費補助金

- 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
- 2022年度11月～2025年度、学術変革領域研究(A)、分担、社会を志向した革新的アルゴリズムの実装

## 教育活動

### ・ 担当授業科目

2022年度・後期	プログラミング技法
2022年度・後期	情報理工学演示
2022年度・後期	情報理工学論述Ⅱ
2022年度・後期	情報理工学論議Ⅱ
2022年度・後期	情報科学講究
2022年度・後期	並列アルゴリズム
2022年度・後期	情報科学講究
2022年度・後期	並列アルゴリズム
2022年度・春学期	サイバーセキュリティ基礎論
2022年度・春学期	グラフ探索アルゴリズムⅠ
2022年度・夏学期	グラフ探索アルゴリズムⅡ
2022年度・通年	情報理工学研究Ⅰ
2022年度・通年	情報理工学演習
2022年度・通年	情報理工学講究
2022年度・前期	情報理工学読解
2022年度・前期	情報理工学論述Ⅰ
2022年度・前期	情報理工学論議Ⅰ

## 大学運営

- 学内運営に関わる各種委員・役職等

2022.04～ 情報基盤研究開発センター 副センター長

2022.04～ 情報基盤研究開発センター HPC 事業室 室長

### 4.3.2 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ある。

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、離散化による誤に加えて、計算機による丸め誤差が発生する。

「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する。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られる。

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る。

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る。

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る。

#### 所属学会名

日本数学会、日本応用数理学会、統計科学研究会

#### 主な研究テーマ

2002.04 ~ 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

#### 研究業績

##### ・ 原著論文

1. Kenta Kobayashi, Yoshitaka Watanabe, Improvement of infinity norm estimations related to computer-assisted proofs of the Kolmogorov problem, JSIAM Letters, 2022.07
2. Takehiko Kinoshita, Yoshitaka Watanabe, Nobito Yamamoto, Mitsuhiro T. Nakao, Inclusion method of optimal constant with quadratic convergence for H10-projection error estimates and its applications, Journal of Computational and Applied Mathematics, 2023.01
3. Yoshitaka Watanabe, Takehiko Kinoshita, Mitsuhiro T. Nakao, Efficient approaches for verifying the existence and bound of inverse of linear operators in Hilbert spaces, Journal of Scientific Computing, 2023.01

- 学会発表

1. 渡部 善隆, Proudman-Johnson 方程式の定常解に対する精度保証付き数値計算  
～ Miyaji-Okamoto 定理の別証～, 日本応用数学会 2022 年度年会講演予稿集, A3-1-1,  
2022.09
2. 渡部 善隆, 精度保証付き数値計算による Proudman-Johnson 方程式の定常解の存在別証,  
日本数学会 2022 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.79-80,  
2022.09
3. 木下 武彦, 渡部 善隆, 中尾 充宏, 楕円型線形作用素に対する近似逆作用素ノルムの収束性評  
価, 日本応用数学会 2023 年研究部会連合発表会, 2023.03
4. 木下 武彦, 渡部 善隆, 中尾 充宏, 2 階楕円型線形作用素に対する近似逆作用素ノルムの収束  
オーダー評価, 日本数学会 2023 年年会, 中央大学, 応用数学分科会講演アブストラクト,  
pp. 103-104, 2023.03

## 研究資金

- 科学研究費補助金

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 ---

## 教育活動

- 担当授業科目

2022 年度・前期	数値解析演習
2022 年度・夏学期	プログラミング演習 I (A)
2022 年度・通年	情報理工学演習
2022 年度・通年	情報理工学講究
2022 年度・後期	情報数値解析
2022 年度・後期	情報処理概論

## 大学運営

- 学内運営に関わる各種委員・役職等

2019.04 ～ 広報事業室室長  
2019.04 ～ 広報 (年報) 担当委員

### 4.3.3 南里 豪志

#### 研究内容

##### ・ 研究業績

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。

##### ・ 教育活動

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。

##### ・ 大学運営

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

1. 2003.04～ 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
2. 2005.04～ 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
3. 2011.09～ 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

## 研究プロジェクト

1. 量子計算及びイジング計算システムの統合型研究開発 (NEDO)  
2020.04 ~ 2027.03 代表：川畑史郎、産業技術総合研究所
2. 次世代計算基盤に係る調査研究 (文部科学省)  
2022.07 ~ 2024.03 代表：近藤 正章、理化学研究所

## 研究業績

### • 学会発表

南里豪志, 松山和広, 田代皓嗣, 原田浩睦, 九州大学スーパーコンピュータとAWSクラウドサービスによるハイブリッド計算環境の相互補完的利用方法に関する調査, 大学ICT推進協議会 2022年度 年次大会, 2022.12

## 研究資金

### • 科学研究費補助金

2022年度～2024年度、基盤研究(C)、代表、NVDIMM上の時系列バッファ実装による効率的な非同期連成計算の実現

### • 競争的資金

1. 2020年度～2027年度、NEDO 高効率・高速処理を可能とするAIチップ・次世代コンピューティングの技術開発、分担、量子計算及びイジング計算システムの統合型研究開発
2. 2022年度～2023年度、文部科学省 次世代計算基盤に係る調査研究事業、分担、システムソフトウェア・ライブラリ調査研究

## 教育活動

### • 担当授業科目

2022年度・後期	(後期) 通信ネットワーク
2022年度・後期	情報理工学演示
2022年度・後期	情報理工学論述Ⅱ
2022年度・後期	情報理工学論議Ⅱ
2022年度・秋学期	(IUPE)Int. to Information Processing I
2022年度・冬学期	(IUPE)Int. to Information Processing II
2022年度・秋学期	通信ネットワーク A
2022年度・冬学期	通信ネットワーク B
2022年度・冬学期	情報ネットワーク特論

2022年度・前期	High-Performance Parallel Computing
2022年度・夏学期	High-Performance Parallel Computing II
2022年度・春学期	High-Performance Parallel Computing I
2022年度・前期	情報理工学論議 I
2022年度・前期	情報理工学論述 I
2022年度・前期	情報理工学読解
2022年度・通年	情報理工学講究
2022年度・通年	情報理工学演習
2022年度・通年	情報理工学研究 I
2022年度・前期	【修士】高性能並列計算法特論
2022年度・夏学期	高性能並列計算法特論 II
2022年度・春学期	高性能並列計算法特論 I
2022年度・春学期	サイバーセキュリティ基礎論

### 大学運営

- 学内運営に関わる各種委員・役職等  
2017.04 ～ 男女共同参画推進室

#### 4.3.4 大島 聡史

##### 所属学会名

オープンCAE学会、Association for Computing Machinery、  
Society for Industrial and Applied Mathematics、  
日本応用数理学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会、  
自動チューニング研究会、情報処理学会 プログラミング研究会、  
情報処理学会 ハイパフォーマンスコンピューティング研究会、  
情報処理学会 ゲーム情報学研究会

##### 主な研究テーマ

1. 2004.05～ GPUを用いた高性能計算に関する研究  
キーワード：GPU、GPGPU、GPU コンピューティング
2. 2009.10～ 並列数値計算の自動チューニングに関する研究  
キーワード：自動チューニング
3. 2016.04～ GPUを用いた低ランク近似行列計算法に関する研究  
キーワード：低ランク近似計算、GPU
4. 2021.04～ GPUの有するRTコアの計算科学分野における活用に関する研究  
キーワード：GPU、RTコア、計算科学

##### 研究プロジェクト

1. 科研2020：超巨大ニューラルネットの継続学習への型破りな線形代数技術の適用  
2020.04～2023.03、代表：横田 理央
2. 科研2021：レイトレーシング加速機構を備える画像処理ハードウェアを用いた高性能計算科学の創成 2021.04～2024.03、代表：大島 聡史
3. 科研2021：格子H行列に基づく数値線形代数の構築と最新アーキテクチャへの高性能実装法 2021.04～2024.03、代表：伊田 明弘
4. JHPCN2022：大規模分散医用画像処理アプリケーションの実用化に向けた研究  
2022.04～2023.03、代表：大島 聡史
5. HPCI2022：新規感染症のための計算科学的解析環境の整備、2022.04～2023.03
6. JHPCN2022：Innovative Multigrid Methods II、2022.04～2023.03
7. JHPCN2022：HPCと高速通信技術の融合による大規模データの拠点間転送技術開発と実データを用いたシステム実証試験、2022.04～2023.03
8. JHPCN2022：機械学習ソフトウェアへのソフトウェア自動チューニング技術の適用  
2022.04～2023.03

9. JHPCN2022：三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  
2022.04～2023.03
10. JHPCN2022：高性能かつ高信頼な数値計算手法とその応用、2022.04～2023.03
11. JHPCN2022：FMO プログラム ABINIT-MP の高速化と超大規模系への対応  
2022.04～2023.03
12. JHPCN2022：Hierarchical low-rank approximation methods on distributed memory and GPUs、2022.04～2023.03
13. JHPCN2022：多粒子分散系の乱流輸送に関する大規模シミュレーション  
2022.04～2023.03
14. JHPCN2022：管楽器および音響機器の大規模流体音響解析 管楽器および音響機器の大規模流体音響解析、2022.04～2023.03

## 研究業績

### • 原著論文

1. 大島聡史, 伊田明弘, 横田理央, 山崎市太郎, マルチインスタンス GPU 上における BLR 行列の QR 分解, 日本応用数理学会年会講演予稿集 (CD-ROM), 2022, 2022.09
2. Shouhei Yamanashi, Hisashi Yashiro, Takahiro Katagiri, Toru Nagai, Satoshi Ohshima, Autotuning Power Consumption and Computation Accuracy using ppOpen-AT., MCSoc, 10.1109/MCSoc57363.2022.00041, 208-215, 2023.01
3. 望月 祐志, 中野 達也, 坂倉 耕太, 渡邊 啓正, 佐藤 伸哉, 奥脇 弘次, 秋澤 和輝, 土居 英男, 大島 聡史, 片桐 孝洋, FMO プログラム ABINIT-MP の整備状況 2022, J. Comp. Chem. Jpn., 10.2477/jccj.2022-0037, 21, 4, 106-110, 2022.12
4. 定方 翼, 沼波 政倫, 片桐 孝洋, 大島 聡史, 永井 亨, 磁場閉じ込めプラズマの乱流シミュレーション・データに対する画像を用いた解析—Image-based Analysis for Turbulence Simulation Data of Magnetic Confined Plasmas—小特集 プラズマ・核融合シミュレーション研究の最近の進展, シミュレーション = Journal of the Japan Society for Simulation Technology / 日本シミュレーション学会 編, 41, 4, 228-233, 2022.12
5. Tsubasa SADAKATA, Shuta KITAZAWA, Masanori NUNAMI, Takahiro KATAGIRI, Satoshi OHSHIMA, Toru NAGAI, A Novel Approach for Data Analysis Based on Visualization of Phase Space Distribution Function in Plasma Turbulence Simulations, Plasma and Fusion Research, 10.1585/pfr.17.2403079, 17, 2403079-2403079, 2022.06
6. 片桐 孝洋, 青木 将太, 大島 聡史, 永井 亨, 高精度行列積ライブラリの性能チューニングにおける XAI の適用と評価—Adaptation and Evaluation of XAI to Performance Auto-tuning on an Accurate Precision Matrix-Matrix Library, 計算工学講演会論文集 = Proceedings of the Conference on Computational Engineering and Science / 日本計算工学会 編, 27, 548-551, 2022.06

7. Toyotaro Suzumura, Akiyoshi Sugiki, Hiroyuki Takizawa, Akira Imakura, Hiroshi Nakamura, Kenjiro Taura, Tomohiro Kudoh, Toshihiro Hanawa, Yuji Sekiya, Hill Hiroki Kobayashi, Shin Matsushima, Yohei Kuga, Ryo Nakamura, Renhe Jiang, Junya Kawase, Masatoshi Hanai, Hiroshi Miyazaki, Tsutomu Ishizaki, Daisuké Shimotoku, Daisuke Miyamoto, Kento Aida, Atsuko Takefusa, Takashi Kurimoto, Koji Sasayama, Naoya Kitagawa, Ikki Fujiwara, Yusuke Tanimura, Takayuki Aoki, Toshio Endo, Satoshi Ohshima, Keiichiro Fukazawa, Susumu Date, Toshihiro Uchibayashi, mdx: A Cloud Platform for Supporting Data Science and Cross-Disciplinary Research Collaborations., CoRR, 10.48550/arXiv.2203.14188, abs/2203.14188, 2022.05

#### • 学会発表

1. 大島聡史, 大規模分散医用画像処理に向けた医用画像処理アプリケーションの最適化, JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第14回シンポジウム, 2022.07
2. 大島聡史, 大規模分散医用画像処理アプリケーションの実用化に向けた研究, JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 第14回シンポジウム, 2022.07
3. 大島聡史, スーパーコンピュータ「不老」の"クラウド的な"利用の状況について, PC クラスタワークショップ in 神戸 2022「クラウドとHPC」, 2022.05
4. 大島聡史, 伊田明弘, 横田理央, 山崎市太郎, BLR-QR on GPU: マルチインスタンス GPU を用いた多数の小密行列計算の高速化, 第14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 (ATTA2022), 2022.12
5. Satoshi Ohshima, Akihiro Ida, Rio Yokota, Ichitaro Yamazaki, QR Factorization of Block Low-Rank Matrices on Multi-Instance GPU, The 23rd International Conference on Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies (PDCAT' 22), 2022.12

#### 研究資金

##### • 科学研究費補助金

1. 2020年度～2022年度、挑戦的研究（開拓）、分担、超巨大ニューラルネットの継続学習への型破りな線形代数技術の適用
2. 2021年度～2023年度、挑戦的研究（萌芽）、代表、レイトレーシング加速機構を備える画像処理ハードウェアを用いた高性能計算科学の創成
3. 2021年度～2023年度、基盤研究 (B)、分担、格子 H 行列に基づく数値線形代数の構築と最新アーキテクチャへの高性能実装法

### 4.3.5 樋口 祐次

#### 研究内容

新規材料設計の実現のためには、材料の構造とダイナミクスを分子論的立場から理解することが必要だと考え、大規模計算を中核とした分子シミュレーションを用いて研究を行っている。高分子材料、生体材料、セラミックス材料などの物性解明に取り組んでいる。

ソフトマター材料に関しては、実材料の複雑な構造をモデル化することが難しく、マクロな実験事実と比べて分子スケールの物性解明が遅れている。ソフトマターは分子が集合して構造や機能を発現することや、階層的な秩序構造を持つことから、その構造や物性を分子レベルからメゾスケールまで幅広く理解する必要がある。そこで、化学・工学・物理・情報などを基盤とした量子化学計算・全原子計算・粗視化計算を用いてマルチスケールにモデリングとシミュレーションを行っている。

#### 所属学会名

日本機械学会、高分子学会、日本物理学会、日本化学会、分子シミュレーション学会  
ソフトマター研究会

#### 主な研究テーマ

2022.04 ~ 大規模計算を中核とした分子シミュレーションによるソフトマターの研究  
キーワード：高分子、ソフトマター、分子シミュレーション、大規模計算

#### 研究業績

##### • 原著論文

Noriyuki Uchida, Yunosuke Ryu, Yuichiro Takagi, Ken Yoshizawa, Kotono Suzuki, Yasutaka Anraku, Itsuki Ajioka, Naofumi Shimokawa, Masahiro Takagi, Norihisa Hoshino, Tomoyuki Akutagawa, Teruhiko Matsubara, Toshinori Sato, Yuji Higuchi, Hiroaki Ito, Masamune Morita, Takahiro Muraoka, Endocytosis-Like Vesicle Fission Mediated by a Membrane-Expanding Molecular Machine Enables Virus Encapsulation for In Vivo Delivery, Journal of the American Chemical Society, 2023.02

##### • 学会発表

1. Yuji Higuchi, Fracture Process of Polymer Materials by Molecular Simulation, The 71st SPSJ Annual Meeting, 2022.05
2. 樋口祐次, リン脂質二重膜上の水分子のダイナミクス, Mini-Symposium on Liquids 2022, 2022.07
3. 樋口祐次, 伊藤弘明, 下川直史, 荷電リン脂質二重膜の分子シミュレーション, 第71回高分子討論会, 2022.09

4. 樋口祐次, 分子シミュレーションによる高分子材料の内部構造と破壊メカニズムの解析, 株式会社 R & D 支援センター セミナー, 2023.01
5. 樋口祐次, ソフトマター材料の変形・破壊・自己組織化に関する分子シミュレーション, 日本接着学会 東北・北海道支部講演会, 2023.03

## 研究資金

- **科学研究費補助金**

2019年度～2023年度、新学術領域研究（研究領域提案型）、分担、計算科学による水圏機能材料の設計

## 大学運営

- **学内運営に関わる各種委員・役職等**

2022.04～2024.03 クラウドサービス導入支援事業室室長

2022.04～2024.03 HPC 事業室委員