

[2023]九州大学情報統括本部年報 : 2023年度

<https://hdl.handle.net/2324/7234372>

出版情報 : 九州大学情報統括本部年報. 2023, pp.1-, 2024-09-01. 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 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

1. グラフ探索や機械学習を使ってゲームをプレイするアルゴリズム
キーワード：ゲーム AI、探索アルゴリズム、機械学習
2005.04～

2. 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～
3. 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

1. 社会を志向した革新的アルゴリズムの実装
2021.10～2025.03 代表：安田 宜仁、日本電信電話株式会社 NTT コミュニケーション科学基礎研究所
2. 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

研究実績

• 原著論文

Shoichi Ishida, Tanuj Aasawat, Masato Sumita, Michio Katouda, Tatsuya Yoshizawa, Kazuki Yoshizoe, Koji Tsuda, Kei Terayama, ChemTSv2: Functional molecular design using de novo molecule generator, Shoichi Ishida, Tanuj Aasawat, Masato Sumita, Michio Katouda, Tatsuya Yoshizawa, Kazuki Yoshizoe, Koji Tsuda, Kei Terayama, 2023.07

研究資金

• 科学研究費補助金

1. 2021年度～2025年度、学術変革領域研究(A)、分担、社会変革の源泉となる革新的アルゴリズム基盤の創出と体系化.
2. 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

2023年度・後期	並列アルゴリズム
2023年度・秋学期	並列アルゴリズムⅠ
2023年度・冬学期	並列アルゴリズムⅡ.
2023年度・春学期	サイバーセキュリティ基礎論.
2023年度・春学期	サイバーセキュリティ基礎論.
2023年度・春学期	グラフ探索アルゴリズムⅠ.
2023年度・夏学期	グラフ探索アルゴリズムⅡ.

2023年度・通年	【通年】情報理工学研究Ⅰ.
2023年度・通年	【通年】情報理工学演習.
2023年度・通年	【通年】情報理工学講究.
2023年度・前期	情報理工学読解.
2023年度・前期	情報理工学論述Ⅰ.
2023年度・前期	情報理工学論議Ⅰ.
2023年度・春学期	Graph Search Algorithms I.
2023年度・夏学期	Graph Search Algorithms II.

大学運営

・ 学内運営に関わる各種委員・役職等

2024.04～	データ駆動イノベーション推進本部データ分析支援部門長.
2022.04～2024.03	情報基盤研究開発センター 副センター長.
2022.04～2024.03	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、統計科学研究会

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～

研究実績

・ 原著論文

1. Yoshitaka Watanabe, Tomoyuki Miyaji, Another computer-assisted proof of unimodality of solutions for Proudman Johnson equation, Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, (published online) 03 January, 2024, 2024.01
2. Takehiko Kinoshita, Yoshitaka Watanabe, Mitsuhiro T. Nakao, On some convergence properties for finite element approximations to the inverse of linear elliptic operators, Acta Cybernetica, 2023.06

学会発表

1. 寺尾 剛史, 渡部 善隆, 尾崎 克久、無限次元線形作用素の近似逆作用素ノルムに対する精度保証付き特異値計算、日本数学会 2024 年年会, 大阪公立大学, 応用数学分科会講演アブストラクト, pp.177-178、2024.03
2. 木下 武彦, 渡部 善隆, 中尾 充宏、実 2×2 行列の 2 ノルムと近似逆作用素ノルムの収束オーダーの改善について、日本数学会 2024 年年会, 大阪公立大学, 応用数学分科会講演アブストラクト, pp.175-176、2024.03
3. 寺尾 剛史, 渡部 善隆, 尾崎 克久、線形作用素の近似逆作用素ノルムに対する精度保証付き数値計算、日本応用数理学会第 20 回 (2024 年) 研究部会連合発表会、2024.03
4. 木下 武彦, 渡部 善隆, 中尾 充宏、近似楕円型線形作用素のノルムに関する収束性評価の改良、日本応用数理学会第 20 回 (2024 年) 研究部会連合発表会、2024.03
5. Yoshitaka Watanabe、Some computer-assisted proofs for nonlinear differential equations involved with self-similar blowup in wave equations、Nonlinear Analysis, Spectral theory and PDEs, Workshop in Honor of Prof. Dr. Michael Plum、2024.02
6. 渡部 善隆、非線形波動方程式の自己相似爆発解に対する精度保証付き数値計算、RIMS 共同研究 (公開型)「新時代における高性能科学技術計算法の探究」(Research on High-performance Scientific Computing in a New Era)、2023.10
7. 渡部 善隆, 宮路 智行、精度保証付き数値計算による Proudman-Johnson 方程式の単峰性解の存在検証、日本数学会 2023 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.195-196、2023.09
8. Yoshitaka Watanabe, Kaori Nagatou, Michael Plum, Birgit Schörkhuber, Mitsuhiro T. Nakao、A computer-assisted proof for a nonlinear differential equation involved with self-similar blowup in wave equations、Minisymposia: Verified Numerical Computations and Applications, in the 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM)、2023.08

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

2023年度・秋学期	Numerical Analysis for Information Science I.
2023年度・春学期	工学概論.
2023年度・後期	情報処理概論.
2023年度・冬学期	情報数値解析 II.
2023年度・秋学期	情報数値解析 I.
2023年度・冬学期	Numerical Analysis for Information Science II.
2023年度・通年	情報理工学講究.
2023年度・通年	情報理工学演習.
2023年度・前期	数値解析演習.

大学運営

- 学内運営に関わる各種委員・役職等

2019.04 ~ スポークスパーソン

4.3.3 南里 豪志

研究内容

1. 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。

2. 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。

3. 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. 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 ～
2. 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 ～
3. 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 ～

研究プロジェクト

1. 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
2. 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

研究実績

• 原著論文

荒川 隆之介, 北村 拓也, 園部 陽平, 才本 明秀, 南里 豪志,
一様等方性乱流における前進および後退多粒子拡散、日本機械学会論文集、2024.01

• 学会発表

Y. Miyake, Y. Sunada, Y. Tanaka, K. Nakazawa, @T. Nanri, K. Fukazawa and Y. Katoh,
Implementation of Coupled Numerical Analysis of Magnetospheric Dynamics and Spacecraft
Charging Phenomena via Code-To-Code Adapter (CoToCoA) Framework、ICCS 2023、
2023.06

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

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

2023年度・秋学期	(IUPE)Int. to Information Processing I.
2023年度・冬学期	(IUPE)Int. to Information Processing II.
2023年度・秋学期	通信ネットワークⅠ.
2023年度・冬学期	通信ネットワークⅡ.
2023年度・秋学期	通信ネットワークA.
2023年度・冬学期	通信ネットワークB.
2023年度・後期	(後期)通信ネットワーク.
2023年度・冬学期	情報ネットワーク特論.
2023年度・後期	情報理工学演示.
2023年度・後期	情報理工学論述Ⅱ.
2023年度・後期	情報理工学論議Ⅱ.

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. 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
2004.05 ～
2. 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
2009.10 ～
3. 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
2016.04 ～
4. 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
2021.04 ～

研究プロジェクト

1. 次世代計算基盤に係る調査研究（文部科学省）
2022.08 ～ 運用技術調査研究チーム 代表：埴敏博
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

研究実績

• 原著論文

1. 大島聡史, 南里豪志, 美添一樹, 平島智将, 原田浩睦, 池田嗣穂、九州大学情報基盤研究開発センター新スーパーコンピュータシステムの紹介、大学 ICT 推進協議会 2023 年度 年次大会、2023.12
2. Kenji Sugisaki, Srinivasa Prasanna, Satoshi Ohshima, Takahiro Katagiri, Yuji Mochizuki, Bijaya Kumar Sahoo, Bhanu Pratap Das、Bayesian phase difference estimation algorithm for direct calculation of fine structure splitting: accelerated simulation of relativistic and quantum many-body effects、Electronic Structure、2023.09
3. 大島聡史, 伊田明弘, 河合直聡, 横田理央, 山崎市太郎、CUDA Fortran+MIG+UVM を用いた BLR 行列 QR 分解の大規模高速化、情報処理学会研究報告 (Web)、2023.07
4. 杉崎研司, Prasanna V. S, 大島聡史, 片桐孝洋, 森野慎也, 望月祐志, Sahoo B. K, Das B. P、
「不老」Type II 上で cuQuantum 量子シミュレータを用いた相対論的量子化学計算の事例、第 28 回計算工学講演会 予稿集、2023.06
5. 青木 将太, 片桐 孝洋, 大島 聡史, 永井 亨, 星野 哲也、数値計算ライブラリの自動チューニングにおける XAI 適用の試み—An Adaptation of XAI to Auto-tuning for Numerical Calculation 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、2023.05
6. Shinya Hashinoki, Satoshi Ohshima, Takahiro Katagiri, Toru Nagai, Tetsuya Hoshino、
Implementation of Radio Wave Propagation using RT Cores and Consideration of Programming Models、IPDPS Workshops、2023.05
7. Satoshi Ohshima, Akihiro Ida, Rio Yokota, Ichitaro Yamazaki、QR Factorization of Block Low-Rank Matrices on Multi-Instance GPU、Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies、2023.04
8. Satoshi Ohshima, Akihiro Ida, Rio Yokota, Ichitaro Yamazaki、QR Factorization of Block Low-Rank Matrices on Multi-instance GPU、Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies、2023.04

• 学会発表

1. 大島聡史、九大新スパコン玄界による限界のないコンピューティングへの挑戦、Supercomputing JAPAN 2024、2024.03
2. Satoshi Ohshima、Considering multi process calculations on current GPU、ATAT in HPSC 2024、2024.03
3. 大島聡史、一万計算コア超時代の GPU に向けたプログラム最適化と自動チューニングを考える、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)、2023.12

研究資金

・ 科学研究費補助金

1. 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
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

社会貢献・国際連携等

・ 社会貢献・国際連携活動概要

2023.6～2024.1

経済産業省「AKATSUKIプロジェクト」採択事業である「福岡未踏的人材発掘・育成コンソーシアム」にリードPMと参加し、若手人材の発掘・育成事業に関わった。

大学運営

・ 学内運営に関わる各種委員・役職等

2022.10～ HPC事業室.

受賞

Best Paper Award of PDSEC 2023, PDSEC committee, 2023.05.

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、マクロな実験事実に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

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
2022.04～

研究実績

• 原著論文

1. Dimitrios G. Tsalikis, Mihai Ciobanu, Costas S. Patrickios, Yuji Higuchi, Model Amphiphilic Polymer Conetworks in the Bulk: Dissipative Particle Dynamics Simulations of Their Self-Assembly and Mechanical Properties, *Macromolecules*, 2023.11
2. Hiroaki Ito, Naofumi Shimokawa, Yuji Higuchi, Lateral Transport of Domains in Anionic Lipid Bilayer Membranes under DC Electric Fields: A Coarse-Grained Molecular Dynamics Study, *The Journal of Physical Chemistry B*, 2023.10
3. Takayuki Ota, Valentina Montagna, Yuji Higuchi, Takashi Kato, Masaru Tanaka, Haritz Sardon, Kazuki Fukushima, Organocatalyzed ring-opening reactions of γ -carbonyl-substituted ϵ -caprolactones, *RSC Advances*, 2023.09
4. Md. Khalidur Rahman, Takeshi Yamada, Norifumi L. Yamada, Mafumi Hishida, Yuji Higuchi, Hideki Seto, Quasi-elastic neutron scattering reveals the relationship between the dynamical behavior of phospholipid headgroups and hydration water, *Structural Dynamics*, 2023.07
5. Yuji Higuchi, Klemen Bohinc, Jurij Reščič, Naofumi Shimokawa, Hiroaki Ito, Coarse-grained molecular dynamics simulation of cation distribution profiles on negatively charged lipid membranes during phase separation, *Soft Matter*, 2023.05

学会発表

1. 樋口祐次、ソフトマター周囲の水分子の回転ダイナミクス、第15回分子集合系計算科学セミナー、2024.03
2. 樋口祐次、分子シミュレーションによるソフトマターの構造・物性の理解、日本物理学会2024年春季大会、2024.03
3. 樋口祐次、分子シミュレーションを用いた高分子材料の破壊メカニズムの解析、株式会社技術情報協会 セミナー、2024.03
4. 樋口祐次、結晶性高分子の分子スケールにおける変形・破壊プロセスと低劣化・高耐久に向けた材料設計指針、サイエンス&テクノロジー株式会社 セミナー、2024.02
5. 樋口祐次、分子スケールにおける高分子材料の内部構造と破壊メカニズム、株式会社R&D支援センター セミナー、2024.01
6. 樋口祐次、菱田真史、水の回転拡散に対する第二水和圏の重要性、第37回分子シミュレーション討論会、2023.12
7. 樋口祐次、高分子材料の変形・破壊に関する粗視化分子動力学シミュレーション、日本機械学会 第36回計算力学講演会 (CMD2023)、2023.10
8. 樋口祐次、菱田真史、分子シミュレーションによる分子の水和状態と水の回転拡散、第72回高分子討論会、2023.09
9. 樋口祐次、高分子材料の機能物性に関するシミュレーションの基礎、第27回高分子計算機科学研究会講座、2023.07

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**

2022.04～2025.03 HPC事業室委員
2022.04～2024.03 クラウドサービス導入支援事業室室長

受賞

2023.12 第36回計算力学講演会 (CMD2023) 優秀講演表彰、日本機械学会
2024.03 第18回(2024年)日本物理学会若手奨励賞(領域12)、日本物理学会