

平成 25 年度（後期）スーパーコンピューター若手・女性利用者推薦採択課題

スーパーコンピューティングチーム

東京大学情報基盤センターでは、概ね 40 歳以下の若手研究者（学生を含む）及び女性研究者（年齢は問わない）を対象とした利用者向け推薦制度による課題を公募しています。

スーパーコンピューティング研究部門の教員により審査の上、採択された課題の計算機利用負担金をセンターが負担します（計算機の利用期間は半年です）。年 2 回公募し、年間で 4 件程度の優れた研究提案を採択する予定です。継続申請と再審査の上で、最大で 1 年間の無料利用ができます。

今回の公募から、各採択課題について、スーパーコンピューティング研究部門の教員が技術的・学術的補佐を行う共同研究者として参加し、各採択課題の支援を行います。共同研究実施のため、東京大学情報基盤センター柏キャンパスにおける共同研究場所の確保、および、必要に応じて柏キャンパスまでの旅費（最大で 1 週間程度）を支給します。

このたび、以下の基準による厳正な審査のうえ、平成 25 年度（後期）の課題採択をさせていただきます。

- スーパーコンピューターを利用することで、学術的にインパクトがある成果を創出できると期待される提案を積極的に採択します。
- スーパーコンピューターの利用環境の改善に寄与すると期待されるソフトウェア開発に関する提案も歓迎します。
- 現状の環境にとどまらず、メニーコア、10 万コアを超える超並列環境など、将来の先進的なスーパーコンピューター環境を目指した提案は特に歓迎します。

■平成 25 年度（後期）

課題名	課題責任者名 課題責任者所属	概要
大規模並列化量子モンテカルロ法の開発と冷却ボーズ原子系のシミュレーション	正木 晶子 東京大学 物性研究所	「量子モンテカルロ法のアルゴリズム開発」と「極低温冷却ボーズ原子気体の普遍的な熱力学的性質の解明」の 2 つを主軸とした理論研究を行う。量子モンテカルロ法（QMC）のワームアルゴリズムは並列化が非自明であったが、開発した並列化マルチワームアルゴリズム（PMWA）は並列化が可能で、従来のアルゴリズムでは到達できなかったサイズの計算が可能である。希薄ボ

		<p>一原子気体の熱力学的性質は古くから知られている摂動計算によって示されていたが、近年これまで知られていた結果と異なることが分かった。申請者は PMWA を用いて精密なシミュレーションを行い、正しい理論を検証する。</p> <p>量子モンテカルロ法の並列アルゴリズム開発は、当該分野において重要と判断する。また、極低温冷却ボーズ原子気体の普遍的な熱力学的性質の解明は、科学的な価値があると判断するため、採択に値する。</p>
<p>相変化現象の大規模分子動力学解析</p>	<p>James Cannon 東京大学 工学系研究科</p>	<p>相変化現象は原子・分子間の相互作用に強く依存するため、原子・分子スケールでのシミュレーションが必要不可欠である。本研究は分子動力学を用いて沸騰と凍結の相変化現象のシミュレーションを行う。凍結のシミュレーションでは、異種・混入液体による水素結合などの相互作用への影響や液体構造、自由エネルギー計算を行う。沸騰のシミュレーションでは、ナノスケール観点から界面形状による初期核生成を調査する。</p> <p>相変化は広範囲でみられる現象で、沸騰や蒸発などの相変化現象は実際の冷却技術の一部として用いられている。これらの現象の解明は、科学的な価値があると判断するため、採択に値する。</p>
<p>高性能バルク熱電変換材料の第一原理格子熱伝導解析</p>	<p>志賀 拓磨 東京大学 工学系研究科</p>	<p>シリサイド系材料と酸化物系材料が近年注目され、日本を中心に精力的に研究されている。これら材料の基礎物性に関しては、電気伝導の第一原理計算が精力的に行われており、実験を比較的よく再現する結果が得られているが、熱伝導、特に格子熱伝導解析は、従来の熱伝導モデルによる解</p>

		<p>析に留まっており、正確かつ微視的な格子熱伝導解析は十分に行われていない。原子間力定数を正確に計算するため、数百以上の原子を含む系、高い計算精度（十分なエネルギーカットオフ、密な波数メッシュ）のため、スーパーコンピューターを利用する。後期課題では、理論的に熱電変換の発展に貢献するため、従来用いられていない置換元素の影響や、合金化以外の構造制御の影響を評価する。</p> <p>高性能バルク熱電変換材料の基礎物性の解析は、当該分野において重要と判断する。科学的な価値があると判断するため、採択に値する。</p>
--	--	---

本制度の詳細は、以下の HP をご覧ください。

<http://www.cc.u-tokyo.ac.jp/service/wakate/>

以上