

## 平成 29 年度（前期）東京大学情報基盤センター「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（以下、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）による、スーパーコンピュータ、大規模ネットワーク機器などの大型計算資源を使用した研究を対象とした公募型プロジェクトを実施しています。

センターの教員による審査の上、年間で 10 件程度の優れた研究提案を採択する予定です。採択された課題では申請した計算資源を無料で使用することができます。

採択された課題のうち、学際大規模共同利用・共同研究拠点（JHPCN）の萌芽型共同研究課題の条件を満たすものについては、同拠点共同研究課題審査委員会で審査の上、JHPCN の萌芽型共同研究課題としても採択され、更に毎年 7 月に開催される JHPCN のシンポジウムにて発表の機会が与えられる場合があります。

本制度に採択された課題は終了後、得られた成果をもとに、「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）」の公募型共同研究（一般課題、国際課題、企業課題）等へと進展することが大いに期待されます。

前期・後期の半年単位で募集を行う一般枠（継続申請と再審査の上、最大で 1 年間の実施が可能）のほか、学部・大学院生を対象とし、主に夏期における利用を想定したインターン制度があります。一般枠、インターン制度それぞれについて、パーソナルコース（個人単位で実施）、グループコース（グループ単位で実施）があり、様々な研究スタイルに対応しています。

このたび、以下の基準による厳正な審査のうえ、平成 29 年度（前期）の課題採択をさせていただきました。

- 本制度が提供する計算機システムを利用することで、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、メモリーコア、10 万コアを超える超並列環境など、将来の先端的なスーパーコンピュータ環境を目指した提案は特に歓迎します。

### ■平成 29 年度（前期）

課題名	Computational materials science and theory
-----	--

代表者名(所属)	Bhattacharyya Swastibrata (横浜国立大学大学院 工学研究院)
<p>局所密度近似、Hartree-Fock 法、GW 近似などの計算手法を、第一原理計算に基づくナノスケールシミュレーションである TOMBO に実装することにより、水素化合に伴う陽子輸送現象、X 線光電子分光、X 線吸収微細構造、核磁気共鳴などの解析を可能とすることを目的とする。</p> <p>計算科学的に挑戦的な課題であると判断するため、採択に値する。</p>	

課題名	拡張アンサンブル法を用いたタンパク質の構造変化と変異が及ぼす影響の解析
代表者名(所属)	大滝 大樹 (長崎大学大学院 医歯薬学総合研究科)
<p>拡張アンサンブル法の一つであるレプリカ交換 MD を用いたシミュレーションを行い、プリオンタンパクが取り得る構造を幅広く探索する。</p> <p>プリオンタンパクの凝縮に重要な因子を特定することにより、凝縮を阻害する薬の開発につながる事が期待でき、計算科学の観点から価値があると判断するため、採択に値する。</p>	

課題名	brucite の(001)面における摩擦特性の決定
代表者名(所属)	奥田 花也 (東京大学 理学部)
<p>層状鉱物 brucite (<math>Mg(OH)_2</math>) の(001)面における摩擦特性に対してすべり面以外の層の存在が与える影響を、第一原理電子状態計算手法を用いて見積もることを目的とする。</p> <p>層状鉱物の(001)面における摩擦特性の理解は海溝型巨大地震断層のすべり特性の理解に貢献することが期待できると考えられ、計算科学の観点から価値があると判断するため、採択に値する。</p>	

課題名	大規模並列環境における少精度型を用いたディープラーニングの学習精度の検証
代表者名(所属)	大山 洋介 (東京工業大学 情報理工学院)

半精度での計算をハードウェアでサポートする Pascal 世代の GPU を多数搭載する Reedbush-H を用いることで半精度・大規模並列環境での Deep Learning の速度面・精度面での評価を行う。

人工知能分野における革新技術である Deep Learning の高度化に寄与すると期待でき、計算機科学の観点から価値があると判断するため、採択に値する。

課題名	OpenFOAM を用いた乱流スカラー輸送の大規模数値計算
代表者名(所属)	恒吉 達也 (名古屋大学 工学研究科)
<p>スカラー場の拡散係数の違いが壁面の伝達現象に及ぼす影響を明らかにすることを目的とし、OpenFOAM を用いて、オフィス下流やエルボ管流れ等の複雑流動場における、熱や物質のスカラー輸送の過程を解析するための数値計算を実施する。</p> <p>乱流スカラー輸送の効率的な利用や制御に繋がる重要な知見が得られるものと期待され、計算科学の観点から価値があると判断するため、採択に値する。</p>	

課題名	ハイブリッドクラスタシステムにおける通信削減 QR 分解実装
代表者名(所属)	高柳 雅俊 (山梨大学大学院 総合研究部)
<p>行列分解の一つである QR 分解の、CPU/GPU ハイブリッド型クラスタシステム向けのライブラリ実装を目指す。</p> <p>行列分解が計算時間の大部分を占める密行列に対する特異値分解や固有値分解は、データマイニングや画像解析などの多くの分野で利用される数値計算であり、これら的高速化に寄与することが期待でき、計算機科学の観点から価値があると判断するため、採択に値する。</p>	

課題名	タンパク質-リガンド複合体への共溶媒効果の系統的解析
代表者名(所属)	山守 優 (大阪大学 基礎工学研究科)
<p>共溶媒がタンパク質-リガンド複合体に及ぼす効果を全原子型分子動力学シミュレーション(MD)と溶液理論を用いてエネルギー・構造の両面から解析することを目的とする。</p> <p>高機能なタンパク質の大規模な生産を可能にするという化学・生物工学的な意義及び波及効果を期待でき、計算科学の観点から価値があると判断するため、採択に値する。</p>	

課題名	超大規模な線形数値計算に対する精度保証付き数値計算法の開発と評価
代表者名(所属)	寺尾 剛史 (芝浦工業大学大学院 理工学研究科)
<p>計算機を用いた数値計算は丸め誤差の影響を受け、大規模計算においてその影響は非常に大きくなるが、精度の研究は速度の研究と比較して多くはなされていない。精度保証付き数値計算法を基に先端的計算機環境における高信頼ソフトウェアの基盤の創出を目標とする。</p> <p>スパコンでの数値計算において丸め誤差の影響は重大であり、計算機科学の観点から価値があると判断するため、採択に値する。</p>	

課題名	カスケード型超並列シミュレーションに立脚した遷移経路探索法の開発
代表者名(所属)	原田 隆平 (筑波大学 計算科学研究センター)
<p>生体分子の構造遷移を効率的に探索するための計算手法として、異なる初期条件(遷移確率の高い初期構造)から短時間分子動力学(MD)シミュレーションをリスタートし、構造探索のサイクルを繰り返すことで生体反応経路を探索する「カスケード型超並列シミュレーション」の概念を拡張し、より定量的で堅牢な生体反応経路探索法へ発展させることを目的とする。</p> <p>理論生物物理化学分野の発展に寄与すると期待でき、採択に値する。</p>	

課題名	第一原理計算に基づく大規模自己組織化ナノ構造における熱電特性の計算
代表者名(所属)	新屋 ひかり (大阪大学大学院 基礎工学研究科)
<p>高効率熱電材料としてのフォノングラスを実現する上で、最も困難でかつ重要な課題である熱伝導解析に必要な、界面を含むナノ構造の作成を、第一原理計算であるKorringa-Kohn-Rostoker(KKR)法に基づくモンテカルロシミュレーションにより行う。</p> <p>得られた系に対して定量的なフォノン解析を行うことで、微視的な観点から効果的なフォノン散乱機構の構築が期待でき、材料工学分野の発展に寄与すると考えられるため、採択に値する。</p>	

課題名	磁気回転不安定性によるブラックホール降着流の角運動量輸送機構の解明
代表者名(所属)	町田 真美 (九州大学大学院 理学研究院)
<p>活動銀河中心核などで観測される X 線の爆発的増光現象は、中心のブラックホールの回りに形成される降着円盤におけるエネルギー解放によって説明することができる。降着円盤全体を計算領域に含む大局的な数値計算において、高空間分解能シミュレーションを実施し、MRI の最大成長波長を空間分解した上で、乱流スケールと大局構造を世界で初めて同時に解く事を目指す。</p> <p>計算科学的に挑戦的課題であり、採択に値する。</p>	

課題名	将来の大規模メニーコアプロセッサ環境に向けたビッグデータ基盤処理の性能評価
代表者名(所属)	佐藤 仁 (産業技術総合研究所 人工知能研究センター)
<p>スループットプロセッサなどの先進的なデバイスを活用した超高速ビッグデータ処理の大規模環境下でのスケーラビリティやボトルネックの解析など、その有効性に関する検証を行い、将来のビッグデータ処理を志向したスーパーコンピュータの設計のための基礎データの収集を目的とする。</p> <p>先進的なスーパーコンピュータである Oakforest-PACS を用いた、計算機科学的に挑戦的な課題であり、採択に値する。</p>	

課題名	酵素反応機構の理解に向けた効率的にタンパク質の揺らぎを取り込む計算手法の開発
代表者名(所属)	山田 健太 (理化学研究所)
<p>生体内におけるタンパク質が有する揺らぎから活性中心が受ける影響を考慮できる平均的な場を分子動力学法を用いて作成し、その場の存在下において反応機構を QM 法によって求める手法の開発を目的とする。</p> <p>酵素タンパク質の活性中心における触媒反応メカニズムの解明につながる事が期待され、計算科学の観点から価値があると判断するため、採択に値する。</p>	

課題名	問題分割と対称性検知を用いた、高速なプランニングアルゴリズムの開発
代表者名(所属)	浅井 政太郎 (東京大学 総合文化研究科)
<p>大量のオブジェクトが存在するプランニング問題を効率よく探索するための手法の開発、GPUによるディープラーニング技術を用いた、制約充足探索系の人工知能であるプランニングと、機械学習系の人工知能であるディープラーニングという異なる種類のAI技術を組み合わせたシステムの開発を目的とする。</p> <p>人工知能分野の発展に寄与する萌芽的な課題で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