

**平成 29 年度（インターン・後期）
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（インターン・後期）の課題を採択いたしました。

- 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、メニーコア、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。

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/>

■平成 29 年度（インターン）採択課題

| | |
|--|---|
| 課題名 | 第一原理電子状態計算による DNA のエネルギーバンドの塩基配列依存性と超伝導 |
| 代表者名(所属) | 関川 卓也（新潟大学 理学部） |
| <p>これまでの研究成果から、今回明らかにしたい事象、そのための実験内容、想定される成果についてまで明確に記述されている。DNA の塩基配列と電気伝導の関係を初めて明らかにするものであり、計算科学的に意義深く、採択に値する。</p> | |

| | |
|--|------------------------|
| 課題名 | 二温度磁気流計算によるジェット構造の構造解析 |
| 代表者名(所属) | 大村 匠（九州大学大学院 理学府） |
| <p>申請者の現在までの研究に基づき、宇宙ジェットが二温度プラズマで構成されているとの仮定の元、世界で初めての検証を行うという課題であり、計算科学的に重要かつ挑戦的な課題であるため、採択に値する。</p> | |

| | |
|---|---|
| 課題名 | エンジンノッキング現象における末端ガス圧力波発生メカニズムの解明：大規模詳細化学反応機構を用いた多次元流体解析 |
| 代表者名(所属) | 佐藤 伴音（北海道大学大学院 工学院） |
| <p>ノッキング現象の解明は自動車エンジンの燃焼効率の上昇に直結するため、計算科学的な観点から意義深く、また現在までに行ってきた世界最大規模一次元解析を多次元に拡張することは、計算機科学的観点からも挑戦的であるため、採択に値する。</p> | |

| | |
|--|--|
| 課題名 | PPDF-S 法による GOSAT 観測スペクトルデータからの温室効果ガス濃度の導出 |
| 代表者名(所属) | 岩崎 千沙（東京大学大学院 新領域創成科学研究科） |
| <p>温室効果ガス観測技術衛星 GOSAT が現在までに蓄積した観測データ全てを解析し、全球での温室効果ガスの発生・消失源を解明するという挑戦的な課題であり、計算科学的観点から意義深く、採択に値する。</p> | |

| | |
|--|------------------------------|
| 課題名 | ニューラルネットワークを用いた量子誤り訂正の復号器の開発 |
| 代表者名(所属) | 濱村 一航 (京都大学大学院 工学研究科) |
| <p>量子コンピュータの量子誤り訂正のプロトコルの一部である複合機を、畳み込みニューラルネットワークを用いて開発するという、挑戦的かつ萌芽的な課題であり、本制度の理念と合致するため、採択に値する。</p> | |

■平成 29 年度（後期）採択課題

| | |
|--|-----------------------|
| 課題名 | 陽解法を用いた軸受の流体構造連成解析 |
| 代表者名(所属) | 深川 宏樹 (九州大学大学院 工学研究院) |
| <p>自動車のエンジンの軸受解析を目的とし、新たに開発した完全陽解法を用いた流体構造連成解析のスキームを使い、数百億自由度のモデルを使った流体構造連成動解析を行う。工学的にも重要であり、数百億自由度の計算は計算科学にとっても価値があると判断し、採択とする。</p> | |

| | |
|---|---------------------------|
| 課題名 | brucite の積層不整様式の決定とその摩擦特性 |
| 代表者名(所属) | 奥田 花也 (東京大学理学部 地球惑星環境学) |
| <p>水酸化マグネシウムからなる層状鉱物 brucite の層と層の間に対応する(001)面においての摩擦特性を見積もることである。特に、(1)brucite の積層不整様式の決定、(2)積層不整面での摩擦特性を第一原理電子状態計算から求めること、(3)せん断面に接する層以外の層の影響を見積もること、の3点を目的とする。計算科学的な観点から価値があると判断し、また前回課題からの発展的内容であり、高く評価できる。</p> | |

| | |
|---|---------------------------------------|
| 課題名 | カスケード型超並列シミュレーションで探る FtsZ の細胞分裂ダイナミクス |
| 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>タンパク質 “FtsZ” は、細胞分裂時にグアノシン三リン酸(GTP)依存的に重合して細胞中央部にリング状のポリマーを形成し、集合・離散を繰り返しながら細胞膜の陥入を引き起こす。この FtsZ の膜陥入メカニズムについては FtsZ の動的秩序が関係していることは自明であるが、その分子メカニズムは不明である。前期課題で開発した「カスケード型超並列シミュレーション」を FtsZ に適用することで、細胞分裂において重要な役割を担う“FtsZ のモノマー”、及び“FtsZ ポリマー”の構遷移を計算科学的に再現し、細胞分裂機構を解明する。計算科学に価値があり、継続課題として妥当であると判断し、採択とする。</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。前期からの継続課題で、前期で得られた成果を発展させるもので高く評価できる。採択とする。</p> | |

| | |
|--|-------------------------|
| 課題名 | 壁面流における持続乱流の発生過程 |
| 代表者名(所属) | 清水 雅樹 (大阪大学大学院 基礎工学研究科) |
| <p>乱流が空間的に拡大や縮小する過程の解明は、近年における流体力学の重要問題であり、乱流制御による壁面の摩擦抵抗低減方法に繋がる。平行平板の相対運動により流れが駆動される平面クエット流において、数値計算を用いて乱流が永続できる臨界レイノルズ数近傍の乱流遷移の性質を調べる。科学的に価値が高いと考え、採択とする。</p> | |

| | |
|---|--|
| 課題名 | 分子動力学シミュレーションによる多剤排出トランスポーターAcrBと基質間の反応機構の解明 |
| 代表者名(所属) | 篠田 恵子(東京大学 先端科学技術研究センター) |
| <p>多剤排出トランスポーターの一つである AcrB の多基質の認識機構を明らかにし、新規の阻害剤の開発へ結びつける。分子レベルの詳細を調べるため分子動力学(MD)シミュレーションを行う。本課題は科学的にも計算科学的にも高く評価できると考え、採択とする。</p> | |

| | |
|--|---|
| 課題名 | 遷音速失速領域における航空エンジンファン翼列の Large Eddy Simulation |
| 代表者名(所属) | 立石 敦(東京大学大学院 工学系研究科) |
| <p>鋭い前縁をもつ航空用エンジンファン翼列が失速点付近で作動する条件において、亜音速・前縁剥離流れと剥離・衝撃波を伴う遷音速流れの切り替わり過程にみられる流体現象を明らかにするため、Large Eddy Simulation (LES)を用いた解析を行う。大型計算機を必要とする研究課題で、高く評価できるため、採択とする。</p> | |

| | |
|---|------------------------------|
| 課題名 | 全原子 MD を用いた高分子混合系の相溶性評価手法の開発 |
| 代表者名(所属) | 山田 一雄(大阪大学 基礎工学研究科) |
| <p>chemical reality を考慮した計算モデル上で、混合ギブス自由エネルギーを解析することで二成分高分子混合系の溶解度を評価する新規な手法の確立を目指すもので、高分子の chemical reality を考慮するために分子間相互作用をあらわに取り入れる分子動力学(MD)シミュレーションを実施する。研究課題は高く評価でき、採択とする。</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 理学研究院物理学部門) |
| <p>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、磁気回転不安定性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的とする。研究課題は高く評価でき、継続課題としても妥当であると判断し、採択とする。</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タイルQR 分解実装 |
| 代表者名(所属) | 高柳 雅俊 (山梨大学大学院 総合研究部工学域) |
| <p>行列分解の一つであるQR分解をCPU/GPUハイブリッド型クラスタシステム上で、タイルアルゴリズムと通信回数削減を行うQR分解アルゴリズム Communication Avoiding QR (CAQR) を併用したタイル CAQR アルゴリズムを開発を行う。前期からの継続課題で、後期では前期で開発した実装を改良し高速化する。前期で得られた成果を発展させるもので高く評価できる。採択とする。</p> | |

| | |
|---|---|
| 課題名 | 全球雲解像モデル NICAM を用いた水惑星実験による海面水温変動と熱帯湿潤対流活動の共鳴時定数の決定 |
| 代表者名(所属) | 末松 環 (東京大学大学院 理学系研究科) |
| <p>全球雲解像モデル NICAM を用いた水惑星実験を行うことで、海面水温変動と熱帯域の湿潤対流活動度の変動が共鳴する時定数を決定し、活発な湿潤対流を伴う熱帯大気の最も顕著な季節内振動であるマッデン・ジュリアン振動の理解を深めることを目的とする。計算科学にとっても価値があると判断し、採択とする。</p> | |

| | |
|---|--|
| 課題名 | 1,000億自由度規模の電磁界解析を可能とするための、階層分割型数値計算フレームワーク ADVENTURE_Magnetic の高並列化・高速化研究 |
| 代表者名(所属) | 杉本 振一郎 (諏訪東京理科大学) |
| <p>数万ノード規模の超並列計算機環境において 1,000 億自由度規模の大規模電磁界解析を行うことを目的に、並列電磁界解析ソルバ ADVENTURE_Magnetic (AdvMag) の高速化を行う。AdvMag の並列性能を評価するとともに大規模電磁界解析における課題を抽出、チューニングを施す。Oakforest-PACS という先進的なシステムで大規模計算を行う挑戦的な課題であり、採択に値する。</p> | |

| | |
|--|-------------------------------------|
| 課題名 | 耐 CO アノード用錯体触媒の機構解明と設計に向けた第一原理計算 |
| 代表者名(所属) | 多田 幸平 (産業技術総合研究所エネルギー・環境領域電池技術研究部門) |
| <p>耐 CO アノード用錯体触媒の機構解明と設計に向け、配位子の影響、中心金属の影響、電極担体の影響に関して密度汎関数理論に基づく第一原理計算から検討を加え、錯体系アノード触媒の設計指針確立を目指すことを目的とする。申請者のこれまでの研究テーマを発展させるものであり、計画も明確であり、高く評価できる。採択とする。</p> | |

| | |
|--|----------------------------------|
| 課題名 | 密度汎関数法を用いた凝縮系の電荷分布とその溶媒和構造依存性の解明 |
| 代表者名(所属) | 石井 良樹 (大阪大学大学院 基礎工学研究科) |
| <p>イミダゾリウム系イオン液体を対象として、密度汎関数法に基づく第一原理計算得られるバルク中の分子の電荷分布とその溶媒和環境依存性の解明とそれを基にした分極力場の構築手法の検討を目的とする。大規模計算を必要とする MD 計算を長時間実行するもので、本制度の提供する計算資源を大いに活用できる課題であり、高く評価できる。採択とする。</p> | |

| | |
|---|--|
| 課題名 | Taylor-Couette 流れと Taylor-Couette-Poiseuille 流れにおける熱伝達とトルク性能の LES 解析 |
| 代表者名(所属) | 藤本 慶 (東京農工大学大学院 工学府) |
| <p>内壁が回転する同心二円筒間環状流路内の流れ(Taylor-Couette 流れ)と軸方向貫流がある Taylor-Couette-Poiseuille 流れについて、その熱と運動量輸送の Large Eddy Simulation(LES)解析を OpenFOAM で行う。本課題は大規模計算を必要とする LES 解析を行うもので、工学的に重要な課題であると考えられ、採択とする。</p> | |

| | |
|--|--|
| 課題名 | 南極大型大気レーダー-PANSY で観測された大気重力波の数値モデル再現実験による力学特性の解明 |
| 代表者名(所属) | 佐藤 薫 (東京大学大学院 理学系研究科) |
| <p>南極大型大気レーダー-PANSY で観測された大気重力波を高解像モデルによりシミュレーションすることで、PANSY では捉えられない大気重力波の空間構造や広がり、発生源の特定を行うとともに、南極大気重力波が地球の大気大循環に及ぼす作用について定量的に明確化することを目的とする。本課題は先進的な Oakforest-PACS で大規模な解析を行う挑戦的な課題である。採択とする。</p> | |

以上