

平成30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、若手研究者（平成30年4月1日時点において40歳以下、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、年間で数十件の優れた研究提案課題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。

前期・後期の半年単位で募集を行う一般枠と、学部学生・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（前期・後期）では、1人で行う研究課題を募集します。一般枠の課題は半年単位の実施となりますが、次の半期に継続課題として申請し採択された場合は、最長で1年間の課題実施が可能です。インターン制度では、1人で行う研究課題または2人以上のメンバーで構成された研究グループで行う研究課題を募集します。

一般枠で採択された課題のうち、特に優れた課題で「学際大規模情報基盤共同利用・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、本センターより同拠点萌芽型共同研究課題として推薦する予定です。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た場合、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。なお、インターン制度で採択された課題はJHPCN萌芽型共同研究課題としての推薦は行いません。

このたび、以下の基準による厳正な審査のうえ、平成30年度 前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。

<https://www.cc.u-tokyo.ac.jp/guide/young/>

■ 平成30年度 前期 採択課題

課題名	カスケード型分子動力学シミュレーションに基づくタンパク質構造の精密化アルゴリズムの開発と応用
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>本研究では、応募者が独自に開発した「カスケード型分子動力学シミュレーション」を用いて、X線小角散乱 (SAXS) や電子顕微鏡 (EM) が生成する低次元実験データから、タンパク質の高解像度構造を復元するアルゴリズムを構築する。具体的には、カスケード型分子動力学シミュレーションを改良することで、低解像度実験構造を精密化する。本来、カスケード型分子動力学シミュレーションは、ターゲット構造に類似した分子構造を初期構造に選択し、短時間分子動力学シミュレーション (MD) をリスタートすることで遷移経路を探索したが、低解像度実験構造の細密化にあたり、SAXS や EM が生成する低次元実験データを再現するように初期構造選択を繰り返し、短時間 MD をリスタートする。例えば SAXS の場合には散乱データと誤差が小さい分子構造を初期構造に選択し、EM の場合には電子密度マップと相関が高い分子構造を初期構造に選択し、実験データを再現する可能性が高い分子構造から短時間 MD をリスタートする構造探索のサイクルを繰り返す。最終的に、サイクルを重ねるにつれて、低次元実験データを良く再現する高解像度タンパク質構造が復元可能となる。</p>	

課題名	深層学習による乱流燃焼モデル構築に向けた基礎解析
代表者名 (所属)	源 勇氣 (東京工業大学 工学院)
<p>今後数 10 年、化石燃料の燃焼によるエネルギー供給は、総エネルギー供給量の 8 割前後を推移すると予測されている。従って、自動車・航空機エンジンや、発電用ガスタービンエンジンなどの燃焼機器の低環境負荷化や高効率化が必要であるが、それには、高精度の熱流体数値解析を活用する必要がある。産業用熱流体数値解析では、時間平均や空間フィルタを施した各種の輸送方程式を解くが、これらの方程式を解くために、乱流燃焼モデルと呼ばれるモデルを用いる必要がある。乱流燃焼モデルとは、乱流場と化学反応の相互作用を記述するモデルであるが、この相互作用は非線形性が非常に強く、高精度のモデル化が困難である。一方、そのようなモデルを必要としない高コストの数値計算手法として直接数値計算 (DNS) がある。DNS では、全ての考慮する輸送方程式をモデルを用いず高精度数値計算手法を用いて解くが、コストの観点から実用燃焼器の数値解析には用いることができない。本研究では、直接数値計算によって得られたモデル燃焼器の高精度燃焼解析結果と深層学習を用い、実用燃焼器数値解析に必要な高精度乱流燃焼モデルを構築するための基礎解析を行うことを目的とする。</p>	

課題名	Brucite のナノスケール摩擦における水平方向非一様性に関する研究
代表者名 (所属)	奥田 花也 (東京大学大学院 理学系研究科)
<p>層状鉱物は天然断層に多く見られ、一般的な岩石より低い摩擦係数を持つため、断層の挙動を支配すると考えられており、層状鉱物の摩擦特性を調べることは断層の挙動の理解に重要である。岩石の摩擦特性は接触部でのナノスケールの摩擦特性によって記述可能であると考えられており、ナノスケールの摩擦特性は剪断時の結晶構造の変化に伴うエネルギー変化から記述出来る。これまではスーパーセルに単位格子を用い周期境界条件を仮定し、剪断時の結晶構造を変化させながら第一原理電子状態計算によるエネルギー計算を行うことで、無限平面でのナノスケールの摩擦特性を計算してきた。この条件では全てのスーパーセルで原子が全く同一の挙動を示すが、実際の状況では原子毎に異なる挙動を起こすと考えられる。そこで本申請課題では複数の単位格子を含んだ大きいスーパーセルを用いて計算を行うことで、まず剪断時の水平方向の原子の挙動の非一様性が存在するかを調べ、この非一様性が摩擦特性に与える影響を定量的に評価することを目的とする。そのため、本課題によってより現実的な層状鉱物のナノスケールでの摩擦特性を理解することが可能となることが期待される。</p>	

課題名	機械学習ポテンシャルを用いた金属-固体酸化物の界面構造とイオン伝導特性の大規模解析
代表者名 (所属)	清水 康司 (東京大学大学院 工学系研究科)
<p>全固体リチウムイオン電池や原子スイッチ型抵抗変化メモリの動作原理の解明には、原子スケールでの金属-固体酸化物界面の安定構造およびイオン伝導特性の理解が必要となる。本課題では、Au/Li₃PO₄ モデルに対して機械学習法の一つであるニューラルネットワークポテンシャルを作成し、界面近傍での物性の解析を行う。さらに、ネットワークを拡張し、界面垂直方向への電場の効果を取り入れたポテンシャルの作成に取り込む。計算精度と速度の両立が可能であると期待される本手法により、大規模構造での分子動力学シミュレーションを行い、界面の安定構造や存在しうる欠陥種を明らかにする。また、界面近傍でのイオン伝導特性を理解することにより、上記デバイスの開発に資することを目指す。</p>	

課題名	JAXA 内製 MPS 法プログラム P-Flow による大規模流体解析
代表者名 (所属)	宮島 敬明 (宇宙航空研究開発機構 航空技術部門)
<p>我々は、次期国産旅客機の開発に資する大規模流体解析プログラム P-Flow の研究開発を行っている。P-Flow は Moving Particle Semi-Implicit (MPS) 法をベースに、水などの大変形を伴う非圧縮性流体を解析対象にしている。MPS 法は粒子系シミュレーションに分類され、計算対象を多数の仮想粒子として分割し、各粒子と近傍粒子との相互作用から物理量の計算を行う。P-Flow は大規模解析に対応すべく、近傍粒子の探索処理をスレッド並列化し、計算領域を複数プロセスに動的に分割して処理時間の短縮を図っている。これまでの研究で、GPU 化により近傍粒子探索はある程度高速化されたが、動的領域分割とそれに伴う通信がボトルネックとなることがわかった。今年度は、実際の航空機への応用を念頭に、多数ノードや複雑形状に対する P-Flow の適用可能性を検証する。</p>	

課題名	人物同一性を考慮した深層学習によるメディアコンテンツの変換生成
代表者名 (所属)	鈴木 惇 (東京大学大学院 情報理工学系研究科)
<p>本研究は、人物同一性を考慮して、イラストや楽曲・小説といったメディアコンテンツの変換生成に深層学習を適用する。近年、大規模掲示板や画像・動画投稿サイトの発展に伴って、メディアコンテンツの非特定多数による制作がより盛んになり、メディアコンテンツの制作を補助するツールの需要が高まっている。メディアコンテンツの制作においては、データドメインを問わず、歌手を変えずに歌を変える、人物を変えずにイラストの姿勢を変える、特定のキャラクターの性格・口調を会話に反映するといった、人物同一性を考慮した変換生成が求められる。本研究は、複数データの生成で優れた性能を示す深層学習を用い、人物同一性を考慮したデータ変換生成問題に対する、画像・音声・自然言語といったデータドメインにとらわれない一般的な手法を提案する。</p>	

課題名	MD 計算による血小板細胞膜蛋白とリガンド結合の立体構造および結合の力学特性の解明 (loss of function 型変異体に関して)
代表者名 (所属)	後藤 信一 (東海大学 医学部)
<p>血小板膜糖蛋白 Glycoprotein (GP)Ib α とリガンド蛋白 von Willebrand 因子 (VWF) は生体での止血・血栓形成の初期に必須の役割を演じる。当研究室ではこの分子同士の接着構造を分子動力学計算で再現し、1分子の結合エネルギーを解明した。生物学的実験により GPIb α 233 位のアミノ酸変異で血小板の接着特性が変化することが知られている。G233V は gain of function、G233A は equalfunction、G233D は loss of function として知られる。これらの変異により結合構造や結合力がどのように変化するかを解明できれば、この分子の結合力を規定する構造を明らかにできる。これにより、新たな血栓症治療薬開発につながる可能性がある。当研究室で野生型の蛋白接着を計算した方法はそのまま変異型にも応用できる。すでに G233V、G233A 変異において結合構造と結合エネルギーを計算した。安定結合構造の変化はごく軽微であったが、結合エネルギーはアミノ酸変異により大きく変化した。今回の利用では G233D のデータを取得し、3 変異全ての構造を比較する。</p>	

課題名	応力テンソルを用いたクォーク間相互作用の数値解析
代表者名 (所属)	北澤 正清 (大阪大学大学院 理学研究科)
<p>宇宙を構成する物質を分解していくと、原子、原子核、核子を経て「クォーク」と呼ばれる素粒子に行き着く。クォークは、現在の宇宙では核子の内部に閉じ込められており単独で観測されることはないが、ビッグバン開闢直後の超高温の宇宙では熱遮蔽効果で相互作用が弱まることにより、閉じ込めから解放された単独の粒子状態として存在していたと考えられている。本研究では、格子ゲージ理論に基づく第一原理数値計算により、超高温物質中におけるクォーク間相互作用の研究を行う。一般に力は、空間に遍在する「場」の歪みによって伝達されるが、この歪みは応力テンソルと呼ばれる量で特徴づけられる。本研究では、複数のクォークが置かれた系の応力テンソルの空間分布を第一原理数値計算によって定量的に測定することで、クォーク間相互作用を場の歪みという近接相互作用的な視点から理解することを実現し、その温度依存性を詳細に調べる。これにより、超高温物質中におけるクォーク間相互作用の伝達機構を微視的に解明し、初期宇宙を理解する鍵となる重要な情報を得る。</p>	

課題名	溶融金属への気泡吹き込みを伴う大規模機械攪拌時の流動と微細気泡ダイナミクスの解明
代表者名 (所属)	山本 卓也 (東北大学大学院 環境科学研究科)
<p>金属材料プロセスにおける溶融金属内不純物除去処理は品質管理に重要なプロセスとなり、様々な操作により溶融金属の清浄化が行われる。特に溶融アルミニウムや溶鉄の場合、組成調整や不純物除去のために油滴や気泡、粒子を吹き込み、不純物を吸着、反応、浮上分離する。このようなプロセス操作では数トンから数百トンの溶融金属を高速に処理する必要があるが、これらの気泡や粒子挙動を実験的に可視化する手法はない。このため、数値シミュレーションが非常に重要となるが、プロセスが大規模で計算機負荷が莫大であり、詳細なメカニズム解明は難しい。本研究では、このような大規模金属生産プロセス中での現象解明を目的とし、溶融金属への気泡吹き込みを伴う機械攪拌時の溶融金属の流動と微細気泡の挙動解明を行う。気液界面挙動までを追跡するため、界面形状を直接追跡する Volume of Fluid 法を用いた大規模流体計算を行う。攪拌翼下から放出された気体が攪拌翼によって生じたせん断力によって破断、微細化される挙動、攪拌翼から離れた位置での気泡の合一、粗大化までを直接計算し、気泡のダイナミクスを詳細に追う。</p>	

課題名	日本沿岸域の高解像度潮流分布とその季節変化の解明
代表者名 (所属)	小平 翼 (東京大学大学院 新領域創成科学研究科)
<p>潮汐は海面変動の主要因であり、付随する潮流は沿岸域の船舶航行や漁業等の海洋活動に大きく影響する。潮汐による海面変動に関しては、衛星海面高度計による全球観測が1990年代初頭から行われ、観測結果と高解像度の二次元数値モデルをデータ同化により融合させることで、潮位と潮流の全球マップが提供されている。最新の潮汐プロダクト (TPX08) は解像度 $1/30^\circ$ (中緯度で約 3km) で提供されているが、沿岸域の詳細な分布を知り、海洋活動に活かすには少なくとも 1km の解像度が必要と考えられる。また、最近の研究では海洋の温度・塩分構造の季節変化によって潮流の分布に変化が生じることが指摘されている。そこで、本研究ではこれらの季節変化を含むことができる三次元海洋数値モデルを用いて潮流の高解像度マッピングを行うと共に季節変化について考察する。考察対象は日本沿岸域全体とする。季節変化が激しい温度成層構造と、黒潮という強流帯がどのように潮汐に影響するかを考察する。</p>	

課題名	シンクロトロン放射を取り入れた二温度磁気流体計算による3次元ジェット伝搬シミュレーション
代表者名 (所属)	大村 匠 (九州大学大学院 理学府)
<p>X線連星や活動銀河核からジェットと呼ばれる細く絞られた超音速なプラズマ流が噴出し、系の大きさの1万倍以上のスケールで伝搬していることが知られている。また、ジェットは星間(銀河間)ガスと相互作用することで宇宙環境に大きな影響を与えることがわかっている。ジェットのような希薄なプラズマでは、電子とイオンのクーロン衝突による緩和時間が運動のタイムスケールよりも長くなるため電子温度とイオン温度の異なる二温度状態が形成される。そこで、申請者は世界で初めて電子ガスとイオンガスはともに同じ速度で運動するが独立したエネルギー方程式を持つ一流体二温度磁気流体計算コードを用いてジェット伝搬計算を行う。二温度計算によってジェット内部の電子温度が明らかになることで、観測でわかる輻射をより正確取り扱うことができる。そこで、本課題ではジェットの温度構造や輻射によるダイナミクスなどに一温度の計算との違いがあるかを調べる。さらには、得られた物理量を用いて観測量を導出し、観測結果との比較・解析を行う。</p>	

課題名	分子動力学計算によるアミロイド凝集様態の理論的解析
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>タンパク質の機能発現には固有の立体構造形成 (フォールディング) が必須である。しかし、近年、タンパク質が誤って折りたたまれ (ミスフォールディング)、凝集体を形成することが明らかになった。この凝集体はアミロイドと呼ばれ繊維状の構造をなす。これが身体の器官に異常蓄積すると、アルツハイマー病、パーキンソン病、プリオン病など、神経変性疾患を主とする様々な病を引き起こす。これまでの研究により、疾患とアミロイドの関係が明らかになったものの、その凝集様態 (構造、プロセスなど) については未だに分かっていない部分が多い。本課題では、アミロイドについて長時間の分子動力学シミュレーションを行う。部分変異を導入したアミロイドについて計算を行い野生型の計算結果と比較することで、変異に伴う構造安定性やアミロイド繊維間相互作用の変化など、凝集様態の差異について詳細に調べる。これにより、アミロイドの凝集に大きく寄与するアミノ酸残基と、特徴的な相互作用を明らかにする。</p>	

課題名	第一原理計算でひも解く合金が示す長周期積層欠陥構造の形成メカニズム
代表者名 (所属)	圓谷 貴夫 (熊本大学大学院 先端機構)
<p>本研究では、高層ビルの制震ダンパー材として用いられている鉄系形状記憶合金、および、次世代の輸送機材料として注目されている高強度マグネシウム合金が示す長周期積層欠陥 (LPSO: Long Period Stacking Ordered) 構造の形成メカニズムを第一原理計算に基づき解明することを目的とする。積層欠陥を含む構造の安定性は、部分転位や積層欠陥などの組織因子と結合して機能・力学特性に影響するため、磁性が絡む複雑な相転移の素過程を理解する上で重要な研究課題となっている。本研究では、第一原理計算手法に基づき、a) 広い組成空間及び構造の安定性 (有限温度での相安定性を含む)、その相安定性の起源を解明するための電子構造の解析を並行して行う。</p>	

課題名	プラズマアクチュエータを用いた振動翼周りの流れの制御
代表者名 (所属)	佐藤 沙耶 (豊橋技術科学大学 機械工学系)
<p>トンボや蝶は自然界の中で自由に飛翔し、蝶の中には大陸間を移動するものもいる。昆虫の飛翔は、運動性能に優れ、効率が良く、大気乱流中でも安定しているという特徴がある。これらの特徴は、超小型飛翔体 (MAV: Micro Air Vehicle) や今後需要の増加が見込まれる小型航空機において重要な課題である。特に小型航空機は離着陸時の安定性は、飛行の安全性を確保するうえで非常に重要となる。昆虫の飛翔は、羽ばたきながら翼をひねることで発生した渦を利用し揚力を増加させている。従来はトンボの飛翔を模擬することに注力してきたが、MAVにおいて羽ばたき運動とひねり運動を同時に行う場合は機構が複雑になり、装置の重量増加につながる。そこで、ひねり運動に相当するはく離制御効果を得るために、能動的なはく離の制御が求められている。したがって、本課題では流れを誘起する制御デバイスの1つであるプラズマアクチュエータを用いることではく離の能動制御を行い、より揚力が増加する条件を検討する。</p>	

課題名	ADVENTURE_Magnetic による、移動体を含む回転機の大規模並列有限要素解析
代表者名 (所属)	杉本 振一郎 (諏訪東京理科大学)
<p>ADVENTURE プロジェクトでは、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) の開発を進めている。AdvMag の新たなターゲットアプリの一つとして、回転機の大規模並列解析に 2016 年度より取り組んでいる。回転子という移動体を含む回転機の変位有限要素解析は並列環境での効率的な取り扱いが難しく、スーパーコンピュータを有効に活用できていない分野の一つである。そこで階層型領域分割法に新たな領域分割技術を導入し、並列数に応じて計算時間を短縮することのできるソルバを開発した。しかし、AdvMag はこれまで複素数演算に特化してチューニングを行っていたため非定常解析で必要となる実数演算にまだ弱点がある、効率的な解析に必要な領域分割後の並列処理にかかる時間が並列数の 2 乗に比例して増えるなど、回転機の解析全体を効率よく行うにはまだ問題を抱えている。本課題では、数億～数十億自由度の回転機の変位有限要素解析を効率よく行えるようになることを目指し、これらの問題を解決する。</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の湿潤対流活動の共鳴時空間スケールの決定
代表者名 (所属)	末松 環 (東京大学大学院 理学系研究科)
<p>本研究では全球雲解像モデル NICAM を用いた水惑星実験を行うことで、海面水温 (Sea Surface Temperature; SST) 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と空間スケールを決定し、活発な湿潤対流を伴う熱帯大気のもっとも顕著な季節内振動であるマッデン・ジュリアン振動 (Madden-Julian Oscillation; MJO) の理解を深めることを目的とする。具体的には、様々な振幅と時間変化の周期をもつ暖水域を置いた水惑星でどのような対流活動が励起されるかを調べ、MJO のような対流活動に寄与する海面水温の時空間パターンを調べる。また、時期的には MJO が最も活発なのが北半球冬季、次いで北半球夏季となっていることを踏まえ、熱的赤道を赤道からずらし、片半球の大気大循環が強化される実験も行う。この実験を行うことで大気大循環の南北非対称性が大規模な対流活動を維持することにどのような影響を与えるかについて調べる。</p>	

課題名	ハイブリッドクラスタシステムにおけるタイル QR 分解のタイルサイズチューニング
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>タイルアルゴリズムによる密行列の行列分解は、並列実行可能な細粒度のタスクを多数生成することで並列計算資源への負荷不均衡を減らすことが可能なため、近年のマルチコア CPU に適している。また、高い性能対消費電力比から GPU を汎用計算に用いる GPGPU が近年非常に盛んである。申請者はこれまでに、OpenMP 4.0 による動的タスクスケジューリングを用いて CPU/GPU クラスタシステムにタイル QR 分解を実装し、大規模行列に対して効率化を行った。タイルアルゴリズムにおいてタイルサイズは重要なパラメータであり、計算速度に大きく影響を及ぼす。しかし、タイルサイズはシステム環境、使用する演算装置によって最適値が異なるため、異なる環境で実験を行う度に、ある程度の範囲を網羅的に探索せねばならず、性能実験の大部分の時間がタイルサイズチューニングに費やされている。現在は、経験則からいくつかのタイルサイズについて測定し、最適値を探索している。本研究では各タスクの実行時間から、動的タスクスケジューリングによるタイル QR 分解の性能モデルを構築し、実験環境における性能予測および、タイルサイズチューニングの実装を行う。</p>	

課題名	シェールガス資源量評価を目的としたケロジェンナノ孔隙内のメタン吸着挙動に関する分子動力学シミュレーション
代表者名 (所属)	曹 金榮 (東京大学大学院 工学系研究科)
<p>在来型のガス貯留層と比較してシェールガス貯留層は、非常に微細な孔隙径 (1~100nm オーダー) を有している。そのような微細孔隙内の貯留現象においては、在来型ガスにおいては重要視されてなかった吸着現象などの物理現象に大きな影響を及ぼす。従って、シェールガスの可採資源量や生産挙動を適切に予測するためには、これらの物理現象を解明してモデル化を行う必要がある。この目標達成のためには、シェール岩石試料を用いた吸着試験などの実験的なアプローチを進めることは当然のことながら、実験結果の再現が可能な数値計算モデルを構築しなくてはならない。シェール岩石の孔隙径分布の情報からメタンガスの吸着等温曲線を構築する手法を開発し、その手法を適用して、実際のフィールドにおけるシェール岩石のメタン吸着等温曲線モデルを構築した。本研究では、微細孔隙内の吸着現象・相挙動の解明とモデル化を目標として、分子スケールの数値計算手法を適用した、分子シミュレーションによる吸着現象の数値計算研究を実施します。</p>	

課題名	シミュレーションで探る天の川銀河の運動と構造
代表者名 (所属)	藤井 通子 (東京大学大学院 理学系研究科)
<p>我々の住む太陽系のある天の川銀河は、形成から約 100 億年が経過していると考えられている。天の川銀河の進化過程を知るために、数値シミュレーションは非常に有効な手段である。さらに、太陽系は天の川銀河の銀河円盤の中にあるため、銀河円盤内の星間ガスが邪魔をして、銀河円盤内の星の分布を観測でくまなく調べることは不可能である。そのため、シミュレーションの結果と観測で得られる一部の星の位置や運動を比較することによって、天の川銀河のモデルを構築することが、天の川銀河の理解への重要なステップとなる。2018 年 4 月 25 日に、Gaia という位置天文衛星によって調べられた、天の川銀河の星の位置と運動の詳細なデータが公開される予定である。このデータは、これまで太陽近傍の星のみ入手可能であった位置と速度の正確な情報を、銀河の広範囲において利用可能にする革新的なデータである。本研究では、データ公開に向けて、天の川銀河のモデル構築、シミュレーション、疑似観測を行い、データ公開後は、観測データと比較してモデルを検討し直すことで、天の川銀河の現在の構造や運動、そしてシミュレーションによって過去の進化を明らかにする。</p>	

課題名	Deep Learning を用いたタンパク質のコンタクト残基予測
代表者名 (所属)	福田 宏幸 (東京大学大学院 新領域創成科学研究科)
<p>本研究は、アミノ酸配列からのタンパク質立体構造予測に、機械学習を応用する研究である。より具体的には、立体構造予測の中間ステップとしてのコンタクト残基（立体構造上近い距離にある残基ペア）の予測に、Deep Learning を用いるものである。これまで、実験の分野では X 線結晶解析や NMR を用いて立体構造の解析が行われているが、膨大な時間とコストがかかる為、明らかになっているアミノ酸配列のデータ数に比べて立体構造のデータ数はケタ違いに少ない。一方で近年では、次世代型シーケンサーによって大量のアミノ酸配列が解析されており、計算機による立体構造予測手法の開発が急務となってきている。コンタクト残基の予測においては、近縁のアミノ酸配列のマルチプルアライメントを入力とした予測が行われているが、我々は、全結合層と畳み込みニューラルネットを組み合わせたモデルにより、マルチプルアライメントの重み付けからコンタクト確率の出力までをトータルで最適化するネットワークを提案している（'17 蛋白質学会年会）。本研究では、スパコンの並列 GPU 環境を用いることで、このネットワークを大規模化し、state of the art の精度を狙うものである。</p>	

課題名	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) はジャーナル軸受など多くの回転機械に見られ、それらの冷却および損失低減技術の開発は重要である。本研究では、軸方向貫流のある Taylor-Couette-Poiseuille 流れについて、OpenFOAM を用いた熱と運動量輸送の Large Eddy Simulation (LES) 解析を、テイラー数 Ta (内壁回転数の無次元数) および貫流強度を表すレイノルズ数 Re を変化させて行う。本利用課題では、実際の回転機械を念頭に乱流域の解析を研究例の少ない高レイノルズ域 (10000 以上) で行う。そして、Taylor-Couette-Poiseuille 流れで形成される軸方向の周期的なリング構造や螺旋構造と熱伝達およびトルク性能の関係の解明を目的に、貫流の平均流で移動する座標系または螺旋状に移動する座標系において熱伝達およびトルク性能を評価する。評価には、先行研究が提案した Taylor-Couette 流れにおける熱伝達およびトルク性能への流れ場の移流、拡散、乱流の 3 項の寄与度を定量的に評価する方法を用いる。</p>	

以上