

2019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（2019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。ただし、前期に課題が採択されている場合、それを継続する課題として後期に継続課題として応募することが可能で、採択された場合には、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。

一般枠で新規に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が審査の上、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、2019年度前期は17件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/>

■ 2019年度 前期 採択課題

課題名	LBM-LES を用いた市街地大気汚染拡散大規模非定常高速解析手法の開発
代表者名 (所属)	韓 夢涛 (東京大学 生産技術研究所)
利用システム名	Oakforest-PACS
<p>近年都市化及び経済と産業の発展に伴い、都市空気汚染事故が発生する可能性が高くなり (工業事故、テロ、火災爆発、化学品倉庫爆発など)、その結果も深刻になる。都市空間における空気汚染事故の解析と予測という研究テーマは国内外において盛んに検討が行われており、都市環境工学において最も重要な研究テーマの一つである。しかし、既存の手法で大規模実地都市の非定常解析が困難である。一方、最も有望な解析モデルの一つとなる格子ボルツマン法 (LBM) は物理学界の広い関心を集めているが、建築環境分野における注目が少ない。このような状況に対して、本研究は LBM による Large-eddy simulation (LBM-LES) 及び LBM-Lagrange 連成法を利用し、都市空間の多相、非定常現象などが混在する突発大気汚染の拡散過程という複雑な流れ現象を基にして、都市空間の非定常汚染物拡散の高速解析の実用方法の開発と検証を行う。本解析手法に基づいて今まで実現されていない大規模実地都市の非定常空気汚染に適用可能な高速高精度解析が期待される。研究成果は都市大気環境予測、都市安全管理と緊急時避難計画策定に大きく貢献する。</p>	

課題名	波形インバージョンによる地球マントル最下部における低速度異常の詳細推定
代表者名 (所属)	鈴木 裕輝 (東京大学大学院 理学系研究科)
利用システム名	Reedbush-U
<p>地球マントル (以下単にマントル) の最下部数 100 km は D'' 領域と呼ばれ、この領域は固体岩石のマントルと液体鉄合金の外核の境界 (CMB) 直上の熱的及び化学組成的境界領域である。地温勾配とマントル物質のソリダスが交わる可能性がある領域であるので、組成分化を起こすマグマが定常的に存在する可能性が高い。そのため D'' 領域は、マントルにおいて熱及び化学組成の不均質を生み出す主要な領域であると考えられている。従ってマントルのダイナミクスを観測情報から制約するためには、境界領域の一つである D'' の熱・化学組成不均質を地震学的不均質構造として定量的に推定することが重要である。しかし比較的強い低速度異常の詳細なサイズ及び低速度の程度は既存の構造推定手法では困難であった。また正確な理論地震波形の計算も必要であったが、短周期までの計算は計算資源の問題から困難であった。そこで本申請研究では地震波形に含まれる情報を余すことなく活用できる波形インバージョン手法と、スペクトル要素法による理論地震波形計算ソフトウェア SPECFEM3D_GLOBE を用いて D'' 領域の低速度異常の詳細な構造推定可能性を定量的に見積もる。</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)
利用システム名	Reedbush-U
<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、変異に伴う構造安定性やアミロイド繊維間の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	Gibbsite における空孔が摩擦特性へ与える影響の解明
代表者名 (所属)	奥田 花也 (東京大学大学院 理学系研究科)
利用システム名	Reedbush-U Reedbush-H Reedbush-L
<p>層状鉱物は天然断層に多く存在し、摩擦係数が一般的な岩石よりも低いいため、層状鉱物の摩擦特性は断層挙動を支配する。そのため層状鉱物の摩擦特性の理解は断層挙動の理解に重要である。一般に摩擦現象は見かけの接触面の 1% 程度の真実接触面の摩擦特性が支配するため、層状鉱物の摩擦特性の理解には、主要な剪断面の層間でのナノスケールの摩擦特性を調べる必要がある。本研究では $\text{Al}(\text{OH})_3$ の層状鉱物 gibbsite を対象に、第一原理電子状態計算により層間での剪断時の結晶構造変化とエネルギー変化を計算する。このエネルギー変化からナノスケールの摩擦特性を求める。Gibbsite は層の 1/3 が空孔であり、原子の可動性が高く準安定構造が複数存在するが、正確な摩擦特性の計算には剪断時の最安定構造とエネルギーを求める必要がある。そこで本研究では複数の初期構造から計算することで最安定構造とエネルギーを求め、gibbsite の摩擦特性を求める。Gibbsite のように空孔を持つ層状鉱物は他にも多く存在するため、本研究は層状鉱物の摩擦特性に空孔が与える影響を理解し、層状鉱物の摩擦特性のさらなる理解に貢献することが期待される。</p>	

課題名	カスケード選択型分子動力学シミュレーションで実現する環状ペプチドの膜透過シミュレーション
代表者名 (所属)	原田 隆平 (筑波大学 計算科学研究センター)
利用システム名	Reedbush-H
<p>本研究では、タンパク質の構造遷移経路探索法である Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics (PaCS-MD) を中分子環状ペプチドの膜透過プロセスの抽出に適用し、実際に環状ペプチドが膜内部に侵入する際に、どのような構造変化をしているのかを解明することを目標とする。また、PaCSMD から得られる原子座標トラジェクトリを解析し、膜透過に伴いどの程度の自由エネルギー障壁を越える必要があるのかを定量的に見積もることを可能にする方法論も合わせて開発する。膜透過における環状ペプチドの構造変化の起こり易さを見積もることができれば、実際の中分子創薬において、どのようなペプチド構造、アミノ酸配列を設計すれば、より効率的に膜透過を実現するのかに関する極めて重要な設計指針を提供可能となる。具体的には、PaCS-MD より薬剤分子の膜透過プロセスの構造変化を解析し、マルコフ状態モデルを構築して自由エネルギー地形を計算する。</p>	

課題名	First cluster におけるブラックホール連星の形成
代表者名 (所属)	藤井 通子 (東京大学)
利用システム名	Reedbush-L
<p>アメリカと欧州の重力波検出装置 LIGO と Virgo によって、ブラックホール連星、中性子星連星の合体による重力波放出が検出されて以来、ブラックホール連星の研究が活発になった。ブラックホール連星の形成過程は、元々近接連星として生まれた恒星が、その進化過程で互いの質量をやりとりした結果、距離を縮めてできた「恒星進化説」と星団と呼ばれる星の集団の中で、ブラックホール同士の近接遭遇によって力学的に形成した「力学進化説」の二つが考えられている。それぞれの形成過程によって、ブラックホール連星の質量比、離心率、スピンの分布が異なると考えられ、今後の観測によってこれらの分布が与えられると、ブラックホール連星の形成過程は上記の二つのどちらが優勢なのかが明らかになると期待されている。本研究では、特に、first cluster と呼ばれる、宇宙の初期に生まれた星団でのブラックホール連星形成過程を明らかにする。First cluster では、重力波で観測されている比較的重い恒星質量ブラックホールが形成すると考えられており、今後の観測との比較で、ブラックホール連星の起源を明らかにできると期待される。</p>	

課題名	次世代気象ライブラリによる、台風内部の雷にエアロゾルが与える影響評価
代表者名 (所属)	佐藤 陽祐 (名古屋大学 工学研究科)
利用システム名	Oakforest-PACS
<p>雷モデルを結合した次世代の数値気象気候ライブラリを用いて、台風内部の雷構造、電気的特性、微物理特性にエアロゾルが与える影響を評価することを目指す。雷は、積乱雲を構成する雲粒がもつ電荷や大気中の電荷を中和する現象として発生する。雲粒の電荷分離は雲粒同士の衝突によって引き起こされると考えられているため、数値気象モデルで雷現象を再現するには、雲粒の衝突を特徴付ける雲の微物理過程と雷の特性を決定づける雲の電気的特性 (電荷)、さらには電場を直接計算する必要である。また雲粒微物理特性に影響与えるエアロゾルの影響を考慮する必要がある。しかしながら、エアロゾルと雷を直接計算する物理コンポーネントは計算コストが非常に高く大規模な計算は困難である。本研究では平成 30 年度までに開発したエアロゾルの影響を考慮できる、次世代の数値気象気候ライブラリ (SCALE) に雷モデルを実装した、数値気象雷モデルを用いて台風を対象とした数値実験を行い、台風内部の雷構造にエアロゾルが与える影響を調べる。</p>	

課題名	高速化データ駆動科学を用いた陽電子回折実験のデータ解析
代表者名 (所属)	田中 和幸 (鳥取大学大学院 持続性社会創生科学研究科)
利用システム名	Oakforest-PACS
<p>超並列高速計算をデータ駆動科学と融合させることで (高速化データ駆動科学)、新規測定手法である陽電子回折実験向けに、データ解析ソフトウェアを開発・応用する。クライオ電子顕微鏡 (2017 年ノーベル賞) など、データ解析を高速処理することで革新的測定技術が生まれている。本課題では、物質科学とその産業展開に欠かせない、2 次元表面構造 (物質表面の一〜数原子層程度の原子座標) の特定に着目した。従来は決定的実験手法がなかったが、近年、KEK 物構研で初めて実用化された陽電子回折が大きく注目されている。実験装置の潜在的な能力をフルに開花させるため、大域探索型逆問題解析を実現する超並列ソフトが必要であり、本課題で取り組む。具体的大域探索手法として、(I) アダプティブ・メッシュ・リファインメントを用いたグリッド型探索、および、(II) 並列化モンテカルロ法 (レプリカ交換型マルコフ連鎖モンテカルロ法など) を用いた確率型探索 (ベイズ推定) を開発・応用する。本課題では (I) を実験系研究者とともに実問題に応用し、(II) は手法開発とテスト計算を行う。展望として、数値手法は汎用であるため、他実験にも応用できる。</p>	

課題名	超音波キャビテーション気泡の分裂、崩壊、合一メカニズムの解明
代表者名 (所属)	山本 卓也 (東北大学大学院 環境科学研究科)
利用システム名	Reedbush-U
<p>液体中へ超音波を照射するプロセスは金属生産分野、化学分野、食品分野等の幅広い分野で見られる。これらは、エマルジョン化、粒子の微細化、有機物分解、化学合成等に利用できるため将来性の大きい技術である。一方で、超音波を液体中へ照射した際に生じる現象はかなり複雑であり、メカニズムの解明がなされていないものが多い。キャビテーション気泡の発生、超音波に起因する気泡の圧縮、膨張、分裂、合一、崩壊、局所高温場やラジカル種の発生と複雑に現象が絡み合う。これまでは、特に単一気泡の振動現象に着目されて研究が行われてきたが、多くの近似が導入されており、現実と異なるものも多い。そこで本研究では、3次元圧縮性混相流シミュレーションを利用することで超音波環境下に存在するキャビテーション気泡の運動を解明する。特にキャビテーション気泡の膨張、圧縮、分裂、合一、崩壊現象を数値シミュレーションで解明し、超音波照射時に発生する複雑現象を紐解き、応用プロセスでの効率向上方法を提案する。</p>	

課題名	医療応用を見据えた電磁界-熱伝導連成解析システムの包括的な高速化・高度化
代表者名 (所属)	杉本 振一郎 (八戸工業大学)
利用システム名	Oakforest-PACS
<p>並列電磁界解析ソルバ ADVENTURE_Magnetic (AdvMag) のターゲットアプリの一つとして、数値人体モデルを用いた癌の温熱療法の効果を定量的に評価することを目指している。その一環として、2016年度のFX10スーパーコンピュータシステム「大規模 HPC チャレンジ」にて160億自由度の数値人体モデル(解像度 0.5 mm)を10分で解析することに成功した。さらに、2017年度の若手・女性利用後期課題を経て、2018年度のOakforest-PACSスーパーコンピュータシステム「大規模 HPC チャレンジ」にて1,280億自由度の数値人体モデル(解像度 0.25 mm)を15分で解析することに成功した。本課題では、これまでの癌の温熱療法の効果を定量的に評価するための取り組みをさらに進め、熱伝導解析も対象とする。AdvMagと並列熱伝導解析ソルバADVENTURE_Theramlを用いた電磁界-熱伝導連成解析システムの高速化・高度化を包括的に行うことで、スーパーコンピュータ上で1億自由度以上の電磁界-熱伝導連成解析を効率的に行うことができるシステムの研究開発を行う。</p>	

課題名	Numerical simulation of deepwater oil blowout: turbulent jets and droplet size distribution
代表者名 (所属)	Daniel Cardoso Cordeiro (大阪大学大学院 基礎工学研究科)
利用システム名	Oakforest-PACS
<p>In 2010, the largest offshore oil spill in history happened in the Gulf of Mexico. The sub-sea injection of chemical dispersants was used to treat deepwater oil spills. The overall effectiveness of this method is still questioned as appropriate measures of the oil droplets were not performed in situ. Our study uses a hybrid VOF-Multiphase Euler model to investigate this phenomenon. Our goal is to design a reliable numerical model that can predict the droplet size distribution more accurately.</p>	

課題名	複雑ネットワークに基づく熱硬化性樹脂の構造物性研究
代表者名 (所属)	天本 義史 (九州大学 先導物質化学研究所)
利用システム名	Reedbush-U Reedbush-L
<p>本研究では、ネットワークポリマーの繋がりに関する不均一性を考慮し、熱硬化性樹脂のネットワーク構造と力学物性の関係を明らかにする。ネットワークポリマーは、ゴムやタイヤなど身の回りの様々な所に使われている材料の基本要素であり、その力学物性の記述は重要である。ネットワークポリマーの物性は、様々な力学モデルが提唱されているが、ネットワークの複雑な繋がりに着目した研究例は、ほとんど報告されていない。これは、ネットワークの不均一性を評価する手法が限られているためである。これまで、申請者は、エラストマーの力学物性に関し、ネットワークの複雑性を取り入れて、力学物性を明らかにした。しかし、熱硬化性樹脂は、調査しておらず、エラストマーとは異なる機構で、力学物性が記述できると期待される。本手法では、不均一なネットワーク構造をそのまま解析し、それぞれの架橋点の役割を求める事ができる点に特色がある。</p>	

課題名	ミニマルスパン・チャネル乱流の直接数値計算による乱流伝熱解析
代表者名 (所属)	関本 敦 (大阪大学 基礎工学研究科)
利用システム名	Oakforest-PACS
<p>化学プロセスの混合攪拌などの単位操作にみられる高プラントル数 Pr (もしくは高シュミット数 Sc) 流体においては、乱流中の最小スケール渦よりも $Pr^{-1/2}$ 倍小さなスケールの運動が生じ、非常に多くの格子点数を必要とするためその直接数値計算 (DNS) は非常に困難である。既往の高プラントル数流れの DNS では、速度場は微小乱流渦までを解像し、温度場についてのみ高解像度で解くが、浮力がある場合には乱流の微細渦にまで変動が加わる。本研究では、全変数に対して全スケールを解像したシミュレーションを高精度 DNS コードによって実現する。また、ミニマルスパン・チャネル乱流を用いることで、大規模スケールの影響をスパン方向の計算領域幅に制限し、計算コストを抑えつつ、レイノルズ数やプラントル数を上げる。異なる浮力の強さでスカラー場の変動が微細秩序渦に及ぼす影響を調べることができる。</p>	

課題名	世界最高レイノルズ数乱流データベース構築のための GPU-DNS コードの作成
代表者名 (所属)	関本 敦 (大阪大学 基礎工学研究科)
利用システム名	Reedbush-L
<p>近年は機械学習研究の後押しによって、GPU を搭載した計算機がスーパーコンピューティングセンターで導入されることが多くなっており、現在の最高性能計算機 Summit も GPU を搭載している。計算機の性能向上がヘテロジーニアス環境によって実現されており、研究で用いるプログラムもそれに追従する必要に迫られている。これまでの乱流のスペクトル法による直接数値計算はベクトル計算機で高性能に実施されていたものが、スカラーコンピュータで並列数を上げて計算するものへと変遷してきた。今後は、GPU を用いた DNS 計算コードによって、乱流データベースの最高レイノルズ数が更新されると予想できる。そこで、本研究では、申請者がこれまでに行ってきた DNS コード群を GPU 化してその性能評価を行う。</p>	

課題名	科学技術計算の効率的超並列化に向けた静的負荷分散を行う DSL の開発
代表者名 (所属)	西田 秀之 (東京大学大学院 情報理工学系研究科)
利用システム名	Reedbush-L Oakforest-PACS
<p>大規模計算を行う際には、効率的に並列計算を行うことが望ましい。しかし、科学技術計算で頻出するイレギュラーなデータ構造では、効率的な並列化は難しい。例えば、計算量が array of array の要素数に依存する場合、配列の次元に対する単純な並列化ではプロセッサ毎の計算量が不均一となることが予想される。本研究では、イレギュラーなデータ構造の効率的超並列プログラムを簡便に記述できるプラットフォームの創出を目指す。開発はイレギュラーなデータ構造を対象とした領域特化言語 (Domain Specific Language, DSL) の形で行う。本 DSL では、用いるデータ構造に対するユーザの知見を並列化スケジューリングに取り入れ、プログラム実行時に並列化コードを生成する。これにより、静的に負荷分散された効率的な超並列計算を可能とする。</p>	

課題名	低質量星団におけるブラックホール連星形成とその金属量依存性
代表者名 (所属)	熊本 淳 (東京大学 理学系研究科)
利用システム名	Reedbush-L
<p>2016 年 LIGO による初の重力波直接検出が発表された。この検出結果は、約 30 太陽質量のブラックホール連星が多数存在することを示唆するものであり、なぜこのような大質量のブラックホール連星が多く存在するのかという疑問を引き起こした。そこで、我々は重力波源天体であるブラックホール連星の起源として高密度星団内でのブラックホール連星の形成に着目し、重力多体シミュレーションを用いて、ブラックホール連星の特徴を解明するための研究を行っている。重力 N 体シミュレーションコード NBODY6 を用いて、主系列星からなる星団の進化を計算し、ブラックホール連星形成について調査を行ってきた。これまでの研究において、低質量星団内において、大質量星団とは異なったメカニズムでブラックホール連星が形成されることを発見した。そこで、本研究では低質量星団に着目し、異なる初期条件 (金属量等) を用いてシミュレーションを行うことで時々刻々と変化する宇宙の進化の中でどれだけのブラックホール連星が形成されるか、また、その形成確率と観測検出率は矛盾しないだろうか、等の検証を行う。</p>	

課題名	CENP T 天然変性領域の翻訳後修飾が結合機構へ及ぼす影響の研究
代表者名 (所属)	山守 優 (産業技術総合研究所 人工知能研究センター)
利用システム名	Reedbush-U
本研究課題では, 細胞分裂時の有糸分裂期において, インナーキネトコアとアウターキネトコアの結合に重要な役割を果たす Ndc80 複合体と Centromere Protein T の結合様式を分子動力学シミュレーションと自由エネルギー計算を用いて明らかにすることを目的とする.	

以上