

## 2020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（2020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・後期に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、1年または半年単位（後期は半年のみ）の実施となります。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、2020年度前期は28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/>

■ 2020年度 前期 採択課題

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 |                                                         |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | 内側円筒が回転する同心円筒間環状流路内の熱伝達と摩擦抵抗に Taylor 渦の移流が与える影響の LES 解析 |
| 代表者名（所属）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 大竹 啓太（東京農工大学大学院 工学府）                                    |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | Oakbridge-CX                                            |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 1 年                                                     |
| <p>近年、省エネルギーのために電気モータやガスタービンなどの回転機械では冷却効果向上・摩擦抵抗低減が求められており、それらの実現のためには、回転機械内の流れにおける熱伝達および周・軸方向の摩擦抵抗の理解が重要となる。本研究では、回転機械内の流れを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）に単純化し、軸方向の流れ（貫流）のある場合について熱および運動量輸送の Large EddySimulation（LES）解析を OpenFOAM により行う。そして、熱伝達および周・軸方向の摩擦抵抗に対し、先行研究が提案した、貫流がある場合の Taylor-Couette 流れの熱伝達および周・軸方向の摩擦抵抗に対する移流、分子拡散、乱流拡散の 3 項の寄与度を求める方法で評価を行う。内側円筒が回転する場合は Taylor 渦という渦が形成されるが、貫流がある場合の Taylor 渦の移流が流れ場に及ぼす影響を評価できていない。そこで、本研究では Taylor 渦を追跡し、Taylor 渦の移流の影響を評価する。</p> |                                                         |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                |                                        |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                            | ペアリング暗号に適した楕円曲線の探索                     |
| 代表者名（所属）                                                                                                                                                                                                                                                                       | 照屋 唯紀（産業技術総合研究所 サイバーフィジカルセキュリティ研究センター） |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                        | Oakbridge-CX                           |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                           | 1 年                                    |
| <p>ペアリング暗号とは、特別な性質を満たす楕円曲線の上に構成できるペアリングと呼ばれる演算を利用した暗号技術を指す。ペアリングを用いると、有用な機能と高い効率性を持った暗号方式を構成可能であることが理論上示されている。しかし、実際に安全かつ実用的な性能を持つ実装を行うためには、十分な安全性強度を持ち高速に計算可能な「ペアリング暗号に適した楕円曲線」を使用する必要がある。本課題では、ペアリング暗号に適した様々な楕円曲線を大規模に探索するプログラムを開発し、実際に探索を行う。これにより、最良の楕円曲線の選択に貢献する事を目指す。</p> |                                        |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | クライオ電子トモグラフィーによる in situ 構造生物学 |
| 代表者名 (所属)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 小田 賢幸 (山梨大学大学院 総合研究部医学域)       |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | Reedbush-L                     |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 1 年                            |
| <p>超解像光学顕微鏡とクライオ電子顕微鏡によるタンパク質の三次元構造解析は近年、目覚ましい発達をしている。しかし両者の境界領域である、解像度 1~10 nm 程度の構造情報は、未だ古典的な解析方法に依存している現状がある。本研究ではクライオ電子トモグラフィーによる構造解析を主軸とする“in situ クライオ構造生物学”の方法論を確立することで、この情報ギャップを補完し、タンパク質複合体や細胞小器官の構造をより生理的な条件下で明らかにすることを目的とする。クライオ電子トモグラフィーを用いて撮影した画像データは試料あたり 2TB 以上となり、大量の二次元画像から分子の三次元構造を再構成するためには、大きなマシンパワーが必要となる。本研究では GPU の活用により画像処理速度を大幅に向上させたオープンソフトウェア Relion を Reedbush-L システム上で走らせることにより、より多くの画像データからより高い解像度の再構成像を得ることを目指す。</p> |                                |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              |                       |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | 動的膜の分子動力学計算           |
| 代表者名 (所属)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 小山 志穂里 (株式会社 豊田中央研究所) |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | Oakbridge-CX          |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 1 年                   |
| <p>環境に対する関心が高まる中、省エネルギーな分離を達成する手段として分離膜が注目されている。通常、分離膜は海水の淡水化や気体分離などに利用されるが、これまでの研究で、分離膜の考え方を応用することにより空間の非対称に起因する歩行者の自己組織化現象が説明できることがわかった。これによりこれまで議論されてきた以外の分野でも分離膜とのアナロジーが考えられることが示唆され、分離のプロセスに影響する因子を詳細に調べることは膜工学のみでなく他の分野で見られる現象の理解にも寄与する可能性がある。分離特性に関する先行研究の一つに膜の特性が時間変動する動的分離膜の研究があり、この研究では臨界周波数の前後で膜を介した物質の浸透の速さが変化することがわかっている。しかし、先行研究は濃度に対する偏微分方程式を解いたものであり粒子系での解析は行われていない。また浸透の特性は対象となる粒子の特性、熱揺らぎの大きさ等、他の様々な要因にも影響を受けるため、これらのより詳細な研究が必要である。したがって、本研究では分子動力学のアプローチにより、粒子系でも同様の現象が見られるかどうか研究を行う。</p> |                       |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        |                          |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 南極海における棚氷融解のフィードバック現象の解明 |
| 代表者名（所属）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | 木村 仁（海洋研究開発機構）           |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | Oakforest-PACS           |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | 1 年                      |
| <p>地球温暖化に関連して氷床が注目されて久しいが、その動態は不明な部分が多い。その理由の一つに、棚氷・海洋の相互作用の理解が容易でないことが挙げられる。棚氷は氷床が陸から海洋へと突き出た部分で、海に浮いており、海洋との接触面で融解されるので、新しい水塊（融解水）が形成され、この融解水は既存の水塊と混合しながら外洋へ放出される。そして、棚氷の減少は上流部から流動してくる氷床の海洋流出を促進し、海面上昇を引き起こす。棚氷融解の増減は、全地球的な気候変動の重要な要因の一つである。本課題では、南極海のモデルを使い棚氷の下面に流入する海水の温度が融解水の動態に与える影響を解析するとともに、融解水の鉛直分布が次年度の棚氷融解に及ぼす役割を明らかにする。これらの知見を気候モデルに反映させることにより海面上昇及び海面上昇に伴う気候変動の予測精度向上が見込まれ、地球環境への適応政策の実現性の向上が期待される。</p> |                          |

|                                                                                                                                                                                                                                             |                                     |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                         | 分子動力学シミュレーションによる自己炎症性疾患に関わるタンパク質の研究 |
| 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-H                          |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                        | 1 年                                 |
| <p>自己炎症性疾患は主に自然免疫系の異常により発症し、周期的な発熱や関節・皮膚・骨・眼などの部位に炎症を伴う比較的新しい疾患群である。近年、原因遺伝子、炎症に関わる分子の構造や機能、炎症のメカニズムが少しずつ明らかにされてきたが、不明な点も多く残されている。本研究では、自己炎症性疾患について分子論的な知見を得ることを目的とし、自己炎症性疾患に関わるタンパク質について分子動力学計算を行う。野生型・変異型のモデルについて計算し、変異が疾患に及ぼす影響を調べる。</p> |                                     |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 構造ガラスにおける限界安定性の研究   |
| 代表者名（所属）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 島田 真成（東京大学 総合文化研究科） |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | Oakbridge-CX        |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 1 年                 |
| <p>液体を急冷すると、構成粒子の配置がランダムなまま固体のように固まり、ガラスとなる。ガラスは通常の固体（結晶）と異なり、微小な変形で破壊されてしまうという限界安定性と呼ばれる性質を持ち、その理解はガラス研究の最重要課題の一つである。近年の研究によって、限界安定性を特徴づける特異な力学応答がよく調べられてきているが、そもそもなぜガラスが限界安定なのかという問題はほとんど未解決である。本課題では、液体が急冷される過程を数値実験で直接追跡することによって、ガラスがいかにして限界安定性を獲得するかを調べる。そのためには、巨大なガラス配置を大量に用意し急冷過程を調べるという大規模シミュレーションが要求される。具体的には、急冷途中の粒子配置に対して振動モード解析を行い、配置の中でエネルギー的に不安定な場所、つまり壊れやすい場所の分布や構造を調べる。私はこれまで、凍結した後のガラス配置に対して振動モード解析を用いた数値的な研究を行ってきた。そこで培われた振動モードを調べる手法を本課題でも用いることによって、凍結した後のガラス配置とその直前の配置を比較し、それに基づいて液体がガラスとなる過程を理解する。</p> |                     |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                            |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | コミュニケーションにおける情報量と音声の余剰性の関係 |
| 代表者名（所属）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 橋本 大樹（東京大学 教養学部）           |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | Oakbridge-CX               |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | 1 年                        |
| <p>語の音声実現は様々に変化する。同じ単語であっても丁寧に発音され、その持続時間が長くなることがあれば、粗雑に発音されて持続時間が短く発音されることもある。こうした音声実現の変化は、語の持つ情報量に影響されることが知られている。具体的には“情報量の高い語は丁寧に発音される一方で、情報量の低い語は粗雑に発音される”ということが示されてきた。語の持つ情報量と発音の丁寧さは、多くの場合持続時間の長短を議論することが多かった。本研究では語の持つピッチ値とフォルマント値が、情報量にどのような影響を受けるかを明らかにする。これにより Information Theory の仮説を検証し、話者が言語産出においてどのように情報を処理しているかを明らかにすることができる。</p> |                            |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          |                           |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 第一原理計算と機械学習を用いた新物質の合成条件予測 |
| 代表者名（所属）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 倉田 伊織（東京大学 工学系研究科）        |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | Reedbush-H Reedbush-L     |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 半年                        |
| <p>本研究では、計算による物質設計を実現するために、化学式と合成条件から熱力学的に安定な結晶構造を予測する。このことは物性研究における長年の目標であったが、<math>O(N^3)</math> 程度の第一原理計算によるエネルギー及び力の評価が多数回必要であるため、これまで実現してこなかった。しかし近年、機械学習による第一原理計算結果の高精度高速な予測が可能になったため、効率よく安定構造を探索できると期待される。本課題では GPU を活用し、第一原理計算自体も高速に行いつつ、アクティブラーニングにより上記事項を実現する。また、遷移金属ペロブスカイト AMO3 系列を対象とすることで、既知物質で手法の正当性を確認しつつ、新物質の開拓も行う。</p> |                           |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                       |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 磁気単極子秩序形成の有限温度解析      |
| 代表者名（所属）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 奥村 駿（東京大学 工学系研究科）     |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | Reedbush-H Reedbush-L |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | 半年                    |
| <p>近年、ある種の金属磁性体において、有効的に磁気単極子の規則配列と見做すことができる特異な磁気テクスチャが実験的に観測され注目を集めている。磁気単極子の持つ粒子的な性質から、不揮発性メモリなど次世代型デバイスへの応用が期待されているが、その安定性についてはいまだ明らかにされていない。申請者はこれまで、金属中を電子が運動する効果を取り入れた理論模型を数値的なアプローチによって解析することで、磁気単極子を伴う磁気秩序を得ることに成功している。本研究課題では、この研究を発展させ、有限温度における磁気単極子の安定性を調べることを目的として、十分に大きなシステムサイズをもった系に対して GPU を活用した大規模並列計算を行う。特に、磁場下において磁気単極子の数がどのように変化するかを定量的に解析し、単極子と反単極子の対消滅によるトポロジカルな相転移現象を含めた詳細な有限温度相図を解明する。また、磁気異方性や反対称交換相互作用を取り入れた、より現実的な模型に対してもシミュレーションを行うことで、磁気単極子の変形や安定性の変化などについて明らかにする。</p> |                       |



|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  |                                          |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | 実機単段遠心ブロワで生じるサージ点近傍非定常失速現象の大規模圧縮性 LES 解析 |
| 代表者名（所属）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 塚本 和寛（日立製作所 研究開発グループ機械イノベーションセンタ）        |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | Oakbridge-CX                             |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | 1 年                                      |
| <p>遠心圧縮機やブロワは、石油精製プラントなどの各種プラントの心臓部として、プロセスガスの圧縮や過給機として用いられており、工業上極めて重要なターボ機械のひとつである。一般的にターボ機械を含むシステムでは、システムの作動流量が減少すると、流れの不安定現象である旋回失速やサーGINGと呼ばれる非定常脈動現象が生じる。非定常脈動現象が生じると、システム内を流れる流速や圧力が非定常的に大きく変動するため、圧縮機を構成する羽根車やその周囲の配管に流体力が作用し、ターボ機械の運転が不可能となる。そのため、これらの脈動現象は回避することが不可欠である。しかし、これらの現象は非定常な複雑な流れ場において生じる現象であり、未だに数値解析によるその予測精度は低く、モデル機による実験計測での評価が主である。そこで本研究では、実機の単段遠心ブロワを対象に大規模非定常圧縮性 LES（Large Eddy Simulation）解析を行い、旋回失速に起因する圧力脈動が発生した場合においてブロワ内で生じる羽根車逆流の非定常流動メカニズムを解明し、圧縮機空力設計の高度化を実現することを目的とする。</p> |                                          |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                                              |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | 全ゲノム配列情報と画像クラスタリング技術の融合による希少難治性疾患の層別・分類手法の開発 |
| 代表者名（所属）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | 川口 修治（京都大学大学院 医学研究科附属ゲノム医学センター）              |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | Reedbush-H                                   |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 1 年                                          |
| <p>希少難治性疾患の多くは遺伝的要因がその発症に起因することが知られている。しかしながらゲノム情報のみを用いた解析では発症要因となる遺伝子やその変異を同定できないことが多い。その原因の一つに症例数の少なさから十分な研究が進まず、明確な診断基準が確立せず、疾患分類や定義が不明瞭なままの疾患が多いことにある。これらの問題に対して、ゲノム情報に、診断に用いる画像情報等を加味して解析することで疾患をより詳細に分析することが期待できる。そこで、本課題では deep learning による画像クラスタリングとゲノム解析手法を組み合わせることで、原因遺伝子やその変異を基準とした疾患の再層別・再分類を可能とする手法の開発を目指す。指定難病の一つである網膜色素変性をモデル疾患に、眼底画像とその全ゲノム解析情報を用いて開発を遂行する。開発モデルは汎用的に設計することで、多くの難治性疾患への適用を広げ、得られた結果を通じて遺伝子診断率の向上や疾患発症機序の解明に繋げる。</p> |                                              |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    |                                                                                      |
|--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 革新的抗血小板薬創製に向けた第 XI 因子・トロンビンと血小板膜糖蛋白 GPIb $\alpha$ および von Willebrand 因子複合体の結合エネルギー計算 |
| 代表者名 (所属)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                          | 中山 正光 (東海大学 内科学系)                                                                    |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | Oakforest-PACS                                                                       |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | 1 年                                                                                  |
| <p>抗血小板薬は、血栓イベントを抑制するため血小板の機能を阻害するが、その効果が強すぎるため出血の副作用が問題となっている。申請者は、実証実験にて血小板接着に必須な血小板膜糖蛋白 GPI b <math>\alpha</math> と von Willebrand 因子 (VWF) の相互作用に血液凝固因子の第 XI 因子 (FXI) とトロンビンが影響を与え、血栓形成に寄与するという知見を得た。本研究では、GPIb <math>\alpha</math>-VWF の MD モデルに FXI、トロンビンをそれぞれ組み込み、その結合エネルギーを分子動力学シミュレーションで予測することを目的とする。すでにそれぞれの再安定構造の計算は完了しており、本課題では Potential Mean of Force (PMF) の計算を行なう。PMF のピーク位置や各拘束点における安定構造から抗血小板薬の創薬標的モデルを決定する。本課題を通じて設定した創薬標的モデルは、低分子化合物の in silico スクリーニングに使用する。申請者が実証実験を行い、低分子化合物を探索する予定である。</p> |                                                                                      |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             |                             |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         | 汎関数繰り込み群による量子スピン液体候補物質の物性解明 |
| 代表者名 (所属)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | 福井 毅勇 (東京大学大学院 理学系研究科)      |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | Reedbush-H Oakbridge-CX     |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 1 年                         |
| <p>本研究課題では、2006 年に提案された Kitaev 模型で予言された量子スピン液体状態が実現している候補物質の物性や、候補物質の実験結果を、汎関数繰り込み群法を用いることで解き明かす。Kitaev 模型は可解模型であり、厳密に基底状態が量子スピン液体であり、Majorana 粒子的な励起があることが示されている。2018 年に Kitaev 模型の候補物質で、Majorana 粒子的励起の痕跡が実験で明確に捉えられた。候補物質では Kitaev 模型で予言されたような量子スピン液体が実現している期待が大きく高まり、研究は次の段階を迎えている。今までは Kitaev 模型の可解性を利用した計算法や実験結果の解釈がなされてきたが、Kitaev 模型の候補物質には、実際は Kitaev 模型に含まれない非可解な効果が存在する。それらの効果により Kitaev 模型で予言された量子スピン液体状態の形成が阻まれていないか、また、どのような物質なら量子スピン液体状態が安定であるかを明らかにし、物質合成・物質探索の指針を明らかにする必要がある。本利用課題では、汎関数繰り込み群計算を大規模並列実行することで上述の問題に取り組む。</p> |                             |



|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                              |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | FDPS を用いた土/水連成数理モデルの開発に関する研究 |
| 代表者名（所属）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 平田 紗椰（神戸大学大学院 工学研究科）         |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                             | Oakforest-PACS               |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 1 年                          |
| <p>近年、豪雨や大雨による土砂災害が頻発している。土砂災害は生活に大きな被害をもたらす災害であるが、その被害を減らすために事前に危険箇所を特定するだけでなく、被害がどの程度起こるのかをシミュレーションできるようにすることが重要である。そのためには実斜面での規模でシミュレーションを行う必要があるが、実斜面を想定すると非常に大きなシミュレーションコストが掛かってしまい、従前では実験室模型の再現が限界であった。しかし大型計算機を使って並列計算を行うことで実スケールの大規模計算を図ることが可能となる。本研究では連続体を有限個の粒子によって表し、連続体の挙動を粒子の運動によって計算する粒子法を用いて、粒子数約 1000 万個の斜面崩壊シミュレーションを行う。さらに既往研究では土骨格と間隙水を完全に 2 つに分ける二相混合体で考えていたものを、二相を有する粒子群で考える土/水連成解析という手法を用いて斜面崩壊シミュレーションを行う。実地盤規模での土水連成シミュレーションを行うことで、これから起きるであろう土砂災害の被害想定を行うことができると見込まれる。</p> |                              |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |                                   |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 微視的界面構造に基づくナノコンポジットの機械的特性の発現メカニズム |
| 代表者名（所属）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 屋山 巴（工学院大学 先進工学部）                 |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | Oakforest-PACS                    |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 1 年                               |
| <p>本研究の目的は、CNT/樹脂からなるナノコンポジットの機械的特性の発現機構を界面の原子配置および電子状態に基づいて解明することである。このために、①第一原理電子状態計算 (DFT)、②分子動力学手法 (MD)、③機械学習の、複数の理論計算手法を効果的に融合させた独自の研究を展開する。具体的には、CNT の引き抜きに必要な最大応力を MD で定量的に評価する。同時に、界面近傍の応力分布を可視化し、応力に大きく寄与する界面構造要素の微視的な構造を抽出する。この微視的構造に基づいて DFT による電子状態計算を行うことで、界面の化学結合状態を明らかにできる。機械学習は、DFT と MD を連携する役割に用いられる。以上のように、材料全体の強度が生じる機構を、微視的な構造と電子状態に基づいて明らかにすることによって、最終的にナノコンポジットの機械的特性の評価指針を確立、提案する。</p> |                                   |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       |                       |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | 大質量星団形成シミュレーション       |
| 代表者名（所属）                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | 藤井 通子（東京大学大学院 理学系研究科） |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | Oakbridge-CX          |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | 1 年                   |
| <p>星は分子雲と呼ばれる低温の星間ガスから生まれる。星の多くは星団（数千から数百万個の星の集まり）として集団で生まれるため、分子雲からの星団形成過程を明らかにすることは、星形成過程の解明に繋がる重要な研究テーマである。特に、大質量星団は、星の進化を経て、ブラックホール連星を形成し、これらが合体することで重力波を出すため、現在、非常に注目されている。これまでの星団の形成・進化のシミュレーションは、高分解能かつ、様々な物理現象（星間磁場や大質量星による輻射や質量損失によるフィードバックなど）をより精密に扱う方向に進んでいた。しかし、このような超高分解能シミュレーションでは、<math>10^3</math> 太陽質量程度の比較的小さな星団しか扱うことができない。その一方、<math>10^4</math> 太陽質量を超えるような大質量星団がブラックホール連星形成においては重要であり、さらに、そのような大質量星団の形成過程は、未だ謎が多い。本研究課題では、新規開発の流体+重力多体計算コードを用い、これまでより大質量の星団形成シミュレーションを星同士の近接遭遇を分解して行い、大質量星団の形成・進化過程を明らかにする。</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の詳細構造推定 |
| 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                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | Oakforest-PACS               |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 1 年                          |
| <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                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | Weather Forecasting: Physical Model Acceleration using Machine Learning and High-Performance Computing |
| 代表者名 (所属)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | Maha Mdini (RIKEN RCCS)                                                                                |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | Reedbush-L                                                                                             |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           | 半年                                                                                                     |
| Weather forecasting relies on complex physical models allowing to simulate the evolution of climate variables. These models, however accurate they may be, have a high computational cost. To alleviate this cost, we apply simple physical models to predict low resolution data. Then, we use neural networks to map low resolution predictions to high resolution ones. In our implementation, we take advantage of the super-computing capabilities. We aim to apply this approach to QG and SCALE models. |                                                                                                        |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |                            |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 半古典輸送理論に基づいた電子・光融合シミュレーション |
| 代表者名 (所属)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 谷 水城 (東京大学大学院 工学系研究科)      |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   | Oakbridge-CX               |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 1 年                        |
| 2018 年度のノーベル物理学賞を受賞した「高強度超短パルスが発生する方法」すなわちチャープパルス増幅の発明をきっかけとして、近年、高強度超短パルスレーザーの技術が進歩し、高強度場物理・アト秒科学・レーザー加工などの、物質と高強度レーザーの相互作用の解明および産業応用が進められている。しかしながらレーザー加工のプロセスなどの物質と高強度レーザーの相互作用は学理構築が未だ 途上であり、完全なシミュレーションを行うことはできない。これは、レーザー加工に伴う諸現象が、固体物理とプラズマ物理、流体力学等にまたがる非線形・非平衡の複雑なもので時空間的にもマルチスケールな現象だからである。本研究課題では、レーザー加工学理に基づいた新奇シミュレーション手法の開発により加工パラメータ予測を行う学理 CPS 型レーザー加工シミュレータのプロトタイプ開発を目指す。 |                            |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      |                         |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | 機械学習による時系列データの学習過程の解明   |
| 代表者名 (所属)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            | 中井 拳吾 (東京大学大学院 数理科学研究科) |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | Reedbush-H              |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                 | 1 年                     |
| 時系列データからモデリングを行い、未来の時系列データを予想することは科学的にも実用上も重要である。例えば、ある期間の気象データから機械学習によりモデリングを行い、将来の天気を予想しようというものである。しかし、一般に深層学習などの機械学習ではその構造の複雑さゆえに学習そのものの考察が困難である。このため、機械学習では何を学習しているのか、また、どのように学習しているのかということの多くはいまだに明らかにされていない。一方で、申請者が用いる学習手法は内部構造がシンプルな構造であり、学習過程を考察することが容易である。そこで、本研究の目的は、機械学習ではどのようなことが学習可能で、どのように学習しているかという学習過程を調べることであり、特に、力学系構造に注目して考察を行う。 |                         |

|                                                                                                                                                                                                                                                      |                             |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                  | 流動及び岩盤力学の逆解析により地層水理パラメータの推定 |
| 代表者名（所属）                                                                                                                                                                                                                                             | 張 毅（地球環境産業技術研究機構）           |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                              | Oakbridge-CX                |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                 | 1 年                         |
| <p>浸透率（または透水係数）は、地下水の挙動を制御する、または地下水をモデリングする際の最も重要な係数の一つである。帯水層テストの地層の変形には、多孔質弾性体中の流動・変形連成過程による浸透率の情報が含まれる。本研究では帯水層の揚水試験において分布型光ファイバーひずみ検知（DFOSS）ツールによって測定したデータを使用し、多孔質弾性変形連成モデルを使用して、帯水層におけるファインスケールの浸透率を逆解析する。得られた浸透率情報は、地下水のモデリング、管理において有益である。</p> |                             |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                           |                                                                 |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | Numerical simulation of deepwater oil blowout: crossflow effect |
| 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                                                  |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                      | 1 年                                                             |
| <p>Although ten years have passed since the Gulf of Mexico oil blowout, there is still a lack of consolidated information regarding deepwater blowouts due to the lack of experimental data. In order to further understand this flow and uncover the physics behind it, we will use numerical simulations to study the droplet size distribution in the case of an oil jet under water crossflow. Our objective is to develop a faster and accurate method to predict the oil droplet sizes and its fate underwater.</p> |                                                                 |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                   |                       |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                               | 散開星団起源ブラックホール連星の形成と特徴 |
| 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            |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | 1 年                   |
| <p>LIGO による初の重力波直接検出以降、連星ブラックホール合体による重力波検出が続いている。我々はこれまでの研究において、散開星団特有の連星ブラックホール形成過程として、星団内で重い主系列星の連星が形成され、連星ブラックホールに進化する過程を発見した。さらに 2019 年度までの我々の計算では、近傍での散開星団起源の連星ブラックホール合体の合体率を求めるために、金属量が異なる星団について、重力 N 体シミュレーションコード NBODY6++GPU を用いて星団の進化を計算した。また、各金属量の星団が形成される典型的な宇宙年齢における星形成率密度を考慮することで、近傍での連星ブラックホールの合体率を推定した。その結果、散開星団起源の連星ブラックホールの合体率は重力波観測の結果とよく一致していることを発見した。そこで、我々は次の課題として連星ブラックホールのスピンについて調べる。低質量星団起源の連星ブラックホールは観測で得られるブラックホール連星のスピン分布を説明できるかどうかについて、シミュレーションを行い、議論することを計画している。</p> |                       |

|                                                                                                                                                                                                                                                                               |                                   |
|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                           | GPU 加速 DNS コードを用いた正方形ダクト乱流の直接数値計算 |
| 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                        |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                          | 1 年                               |
| <p>正方形ダクト内乱流の平均流には、主流に垂直方向の二次流れが生成する。これは、乱流中のさまざまなスケールの渦が側壁の影響を受け、それらの統計的振る舞いに異方性が生まれるためである。ナビエ・ストークス方程式をモデルを使わずに解く直接数値計算 (DNS) によって精度の良い検証データベースを作成することは、乱流の統計法則の基礎的研究、及びより高精度な乱流モデルの開発のために重要である。本研究では、GPU デバイスを利用して、高レイノルズ数のダクト乱流の高精度数値計算を行い、乱流渦の階層構造と二次流れの関連性について着目する。</p> |                                   |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                   |
|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | Couette-Poiseuille 流れにおける大規模構造の解析 |
| 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                    |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 1 年                               |
| <p>逆圧力勾配のある壁面乱流は、飛行機やガスタービンなどの翼形上において見られ、その乱流統計法則に及ぼす圧力勾配の影響については未解明であり、乱流モデルの精度も良くない。本研究では、逆圧力勾配がある壁面乱流モデルとして、Couette-Poiseuille 流れに着目する。この流れは、壁面駆動の Couette 流れに圧力勾配をかけることで、一方の壁面で逆圧力勾配がかかり、流れが剥離する。これによって、剥離点付近での乱流構造と流れの剥離機構について詳細な知見が得られるものと考えられる。本研究では、Couette-Poiseuille 流れの直接数値計算 (DNS) を行い、様々な圧力勾配下での壁面乱流における大規模構造について解析する。</p> |                                   |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                            |                                                                       |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                        | 随伴変数法とベイズ最適化による Top-Seeded Solution Growth 法を用いた SiC 結晶成長における断熱材分布最適化 |
| 代表者名 (所属)                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                  | 竹原 悠人 (大阪大学大学院 基礎工学研究科)                                               |
| 利用システム名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | Reedbush-H                                                            |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                       | 1 年                                                                   |
| <p>シリコンカーバイド (SiC) 結晶は高い熱伝導率、幅広いバンドギャップといった優れた性能から注目を集めるパワー半導体である。パワー半導体としての性能を保証するために、欠陥の少ない高品質 SiC 結晶を作製する必要がある。高品質 SiC 結晶の作製方法として Si と C から成る溶液から作製する Top-Seeded Solution Growth (TSSG) 法がある。我々のグループは TSSG 法において溶液表面における温度差より駆動されるマランゴニ対流が結晶近傍で支配的となり、結晶成長速度を不均一化させることを解明した。このマランゴニ対流を抑制するために溶液内温度分布を最適化する必要がある。温度分布を最適化するためのパラメータとしてはるつぼ周りに配置された断熱材の熱伝導率を選択した。しかし、熱伝導率の分布は無限自由度を持つパラメータであり最適化が困難である。そこで本研究では随伴変数法とベイズ最適化を組み合わせることで、無限自由度を持つパラメータの実現可能な大域的最適化に取り組む。</p> |                                                                       |

|                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                         |                                |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|--------------------------------|
| 課題名                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 渦電流-熱伝導連成解析システムの構築と包括的な高速化・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                 |
| 実施期間                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                                    | 1 年                            |
| <p>並列電磁界解析ソルバ ADVENTURE_Magnetic (AdvMag) の高周波電磁界解析機能において医療応用を見据えた高速化・高度化に取り組み、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。しかし、高周波電磁界解析に比べて収束性が非常に悪い渦電流解析ではいまだ 10 億自由度程度の解析実績しかなく、大規模な電磁界-熱伝導連成解析の応用範囲が狭かった。本課題では、渦電流解析に高周波電磁界解析で蓄積したノウハウを導入することで収束性の改善、および高速化に取り組み、計算時間の短縮と、扱える自由度を増やすことを目指す。また、AdvMag の渦電流解析機能と並列熱伝導解析ソルバ ADVENTURE_Thermal を用いた連成解析システムを構築してその高速化・高度化に取り組むことで、医療分野だけでなく工業分野などへも 1 億自由度規模の電磁界-熱伝導連成解析システムの応用分野を広げる。</p> |                                |

以上