

2020年度 インターン・後期 東京大学情報基盤センター「若手・女性利用者推薦」採択課題

スーパーコンピューティングチーム

東京大学情報基盤センター（以下、センター）では、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年度インターンは5件の課題を、後期は4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 インターン 採択課題

課題名	単眼カメラによる距離推定技術に関する研究
代表者名 (所属)	牛 昭峰 (奈良先端科学技術大学院大学 情報科学研究科)
利用システム名	Reedbush-H
実施期間	半年
<p>Depth estimation plays a significant role in 3D reconstruction and scene understanding. However, depth cameras or depth sensors have lots of limitations, such as high power consumption and restricted operating ranges. These limitations will be solved if depth estimation can be achieved based on RGB images only. The main purpose of my research is to improve the performance of depth estimation and obtain highly accurate depth information based on RGB images.</p>	

課題名	繰り込み群による冷却極性分子系での量子スピ液体実現可能性の探索
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	Oakforest-PACS Oakbridge-CX
実施期間	半年
<p>本課題は、光格子中に閉じ込めた冷却極性分子系において量子スピ液体状態が実現するか否かを汎関数繰り込み群の大規模並列計算により数値的に明らかにするものである。冷却分子系は分子間の双極子相互作用のために、最近接相互作用のみを考えた固体物理における量子スピ液体モデルから基底状態が大きく変わりうる。双極子型の相互作用をする量子スピ液体のモデル (Kitaev 模型) がスピ液体状態を取るのか否か調べることは、モデルの非可解性と相互作用の長距離性から困難であった。本課題は、汎関数繰り込み群法によりこの問題を解き明かし、実験の提案を目指すものである。</p>	

課題名	極低温推進薬の軌道上貯蔵・輸送に向けた減圧沸騰現象の解明と予測手法の開発
代表者名 (所属)	谷 和磨 (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	半年
<p>軌道上での極低温推進薬管理技術の確立に向けた、大型タンク内における沸騰凝縮を伴う気液二相熱流動現象を解明する。界面張力が重力を卓越する宇宙空間では相変化による液体挙動や圧力変動の経験的な予測が難しく、適切に流体機器を運用できない危険性がある。そのため、昨今計画されている長期の宇宙ミッションの実現には、こうした相変化現象を予測する必要がある。しかし、実機寸法の大型タンクでの沸騰試験データが不足している上、極低温推進薬の熱流動特性に基づいた定量的な大型タンク内現象予測手法は、沸騰現象 (小寸法) とタンク (大寸法) のスケールの違いから計算コストも高く未だ確立されていない。本利用課題では、VOF 法をベースにした自由表面流用数値流体解法である CIP-LSM を改良し、大型タンク内での相変化現象を予測する手法を開発する。地上での極低温流体用の大型タンクを用いた減圧沸騰試験の結果と比較することで予測手法を評価する。こうして構築された数値流体解法を用いて、微小重力環境での相変化を伴う熱流動現象を明らかにする。動の経験的な予測が難しく、適切に流体機器を運用できない危険性がある。そのため、昨今計画されている長期の宇宙ミッションの実現には、こうした相変化現象を予測する必要がある。しかし、実機寸法の大型タンクでの沸騰試験データが不足している上、極低温推進薬の熱流動特性に基づいた定量的な大型タンク内現象予測手法は、騰現象 (小寸法) とタンク (大寸法) のスケールの違いから計算コストも高く未だ確立されていない。本利用課題では、VOF 法をベースにした自由表面流用数値流体解法である CIP-LSM を改良し、大型タンク内での相変化現象を予測する手法を開発する。地上での極低温流体用の大型タンクを用いた減圧沸騰試験の結果と比較することで予測手法を評価する。こうして構築された数値流体解法を用いて、微小重力環境での相変化を伴う熱流動現象を明らかにする。</p>	

課題名	電氣的・熱的効果によるキャビティ音制御の数値解析
代表者名(所属)	大竹 克也(豊橋技術科学大学 大学院 工学研究科)
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	半年
<p>新幹線の台車部などはキャビティと呼ばれる窪み部を有し、窪み部入口より発生した渦により自励振動が発生し、強い騒音が発生する場合があります、低減手法の確立が課題となっている。近年、キャビティ音の制御にプラズマアクチュエータ(PA)が注目されている。また、PAのオン・オフを切り替える間欠制御により、キャビティ音の低減に加え消費電力の削減も期待できる。PAをオン・オフに切り替えた際の流れ場に注目し、発生音のメカニズムも説明出来る。また、騒音の低減に加え、キャビティ音の音響エネルギーを有効利用する方法の一つとしては、熱音響ヒートポンプ現象の利用が有益であると考えられる。熱音響ヒートポンプ現象の利用により、騒音低減と狭い流路を有する多孔体や平板列(スタック)に生じた温度差を用いた発電が可能であると考えられる。本課題では、空力音直接数値計算を用いて、PAによるキャビティ音のフィードバック制御を行い、PAの適切な制御条件を明らかにすることを目的とする。また、キャビティまわりの流体音響解析とスタックの熱伝導解析を連成した解析を実施し、キャビティ音により駆動される熱音響ヒートポンプ現象の解明を目的とする。</p>	

課題名	階層型直交格子法と壁面モデルを用いたLBMによる航空機高揚力装置の空力音響解析
代表者名(所属)	前山 大貴(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	半年
<p>近年の環境問題に対する意識の高まりから、より低騒音・低燃費な航空機の実現が望まれている。航空機の空力設計では、主翼コード長ベースで10の7乗から10の8乗にもなる高レイノルズ数条件での空力解析が必要となり、流れ場から発生する空力騒音の予測には、非定常な境界層剥離や再付着現象が支配的な流れ場を高精度に解析することが要求される。音の直接計算が可能な非定常流体解析手法として、格子ボルツマン法(LBM)が注目されている。LBMは計算アルゴリズムが単純で、大規模並列計算に適しているという特徴をもつ一方で、直交格子法を用いた数値解析手法であるため、壁面近傍に発達する乱流境界層の解像が困難である。航空機実機レベルの高レイノルズ数乱流境界層流れを高精度に解析するためには、境界層内層域の乱流をモデル化することが必須である。本研究では、任意形状に対して適用可能なLBMの壁面モデルを新たに開発・実装し、航空機機体空力騒音の主要な発生源である高揚力装置の空力音響解析を行う。複雑な形状に対しても完全自動で格子を生成可能な階層型直交格子法と組み合わせることで、LBMを用いた航空機空力騒音の予測手法の確立を目指す。</p>	

■ 2020年度 後期 採択課題

課題名	PaCS-MD に基づく効率的リガンド結合経路探索法の開発
代表者名 (所属)	原田 隆平 (筑波大学 計算科学研究センター)
利用システム名	Reedbush-H
実施期間	半年
<p>本研究では、リガンドと標的タンパク質の結合過程を効率的に抽出する計算手法を開発する。具体的には、タンパク質の遷移経路をレアイベントとして効率的に抽出する目的で開発した「Parallel Cascade Selection Molecular Dynamics (PaCS-MD)」をリガンド結合経路探索に拡張する。PaCS-MD は、遷移確率が高い分子構造を選択し、短時間 MD により構造リサンプリングを繰り返すことで、効率的に遷移経路を探索するレアイベントサンプリング法である。PaCSMD を標的タンパク質とリガンドの複合系に適用可能なように拡張する。拡張にあたり、熱揺らぎの範囲において結合経路探索を加速するため、リガンドが複数存在する高密度環境下で PaCSMD を実行する。最終的に、リガンド結合経路を効率的に探索する計算手法として PaCS-MD を拡張し、Ligand-Docking-PaCS-MD (ld-PaCS-MD) を開発する。</p>	

課題名	Coarse-graining Model for Monte Carlo Simulation of Spin Configurations in Ferromagnets
代表者名 (所属)	李 其放 (東京大学 新領域創成科学研究科)
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	半年
<p>Spin configuration affects the the magnetic moment and related physical properties in solid-state devices. Markov chain Monte Carlo (MCMC) simulation is a common approach to study the dynamic behaviors of spins. In this research, long-ranged interactions are simplified by stochastic cutoff algorithm. A new algorithm of coarse-graining will be developed to reduce the degree of freedoms of spins in the entire system. This algorithm will also be applied for design of ferromagnet devices.</p>	

課題名	降着円盤における微小スケール乱流の特性解明
代表者名 (所属)	川面 洋平 (東北大学 学際フロンティア研究所)
利用システム名	Oakforest-PACS
実施期間	半年
<p>降着円盤は天体の周りを回転しながら落下するプラズマの流れである。特にブラックホールにおける降着円盤は、直接観測することが困難なブラックホールの情報を間接的に教えてくれる重要な存在である。降着円盤は磁気回転不安定性 (MRI) によって駆動される乱流状態になっていると考えられているが、この乱流の持つ特性にはまだ未解明な点が多く存在する。我々の最近の研究によって、降着円盤の観測結果を解釈するためには、乱流における圧縮的な揺動と非圧縮的な揺動の比を知る必要があることが明らかになっている。本研究の目標はこの比を数値計算によって求めることである。しかし圧縮的な揺動と非圧縮的な揺動の比を求めるためには、これまで行われてきた MRI 乱流のシミュレーションを遥かに上回る解像度のシミュレーションが必要となる。そこで本研究では、我々が開発した超高並列性能を持つ電磁流体力学コードを用いて圧縮的な揺動と非圧縮的な揺動の比を得ることに挑戦する。</p>	

課題名	Large-eddy simulations of nearshore offshore wind farms and their interactions with atmospheric boundary layer
代表者名 (所属)	Goit Jay Prakash (近畿大学 工学部)
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	半年
<p>Offshore wind energy has received larger interest, motivated by the fact that offshore sites are generally characterized by higher and uniform wind speeds, thus, leading to higher capacity factors and lower fatigue loads experienced by turbines. The current study employs large-eddy simulations to investigate the effect of onshore terrain on the evolution of ABL—when it transitions from land to sea—and evaluate how that influence the performance of offshore wind farms in the nearshore region.</p>	

以上