

## 2021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（2021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、2021年度前期は10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、将来の先進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/>

■ 2021年度 前期 採択課題

|   |                           |
|---|---------------------------|
| 課題名   | シミュレーションを活用した原子力発電所のリスク評価 |
| 代表者名 (所属)   | 久保 光太郎 (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  | 一年                        |
| <p>東京電力福島第一原子力発電所事故後、原子力発電所では、安全性向上をさせるために、確率論的リスク評価を用いて有効な事故対策の検討がなされている。しかしながら、本手法の課題の一つとして、時間依存性を有する機器やシステムの信頼性モデルを取り扱うことが困難である点があげられる。我々の研究グループでは、確率モデルと複数のシミュレーションを組み合わせることにより、上記課題を解決する手法を提案しているが、計算負荷が膨大となるため詳細な評価は行えていなかった。本課題では、スーパーコンピュータを活用して、火災や溢水といった外部ハザードのシミュレーションとシビアアクシデントシミュレーションを組み合わせることにより、大規模かつ詳細なリスク評価を行う。</p> |                           |

|  |  |
|--|--|
| 課題名  | Numerical simulation of solutal Marangoni convection in a shallow rectangular cavity |
| 代表者名 (所属)  | ZHANG JIANGAO (大阪大学 基礎工学研究科)   |
| 利用システム名  | Reedbush-H   |
| 実施期間   | 一年   |
| <p>The Marangoni flow has been widely concerned for its rich dynamical features and its wide existence in nature and industrial processes, such as oceanography, droplet, thin-film coatings, and crystal growth. To the best of our knowledge, most studies only considered the situation of pure thermal Marangoni effect, and the solutal Marangoni case, which also occurs in some processes, hasnot been considered. Therefore, in this work, solutal Marangoni flow with LSA method would be investigated.</p> |  |

|   |                                |
|---|--------------------------------|
| 課題名   | 分子動力学計算で明らかにする金属結合タンパク質のダイナミクス |
| 代表者名 (所属)   | 森田 陸離 (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  | 一年                             |
| <p>微量金属は生体内に豊富に存在しており、タンパク質に配位結合することで活性を調節する。この時、タンパク質が金属を掴む過程においては、タンパク質の大きな構造変化が生じる。また、安定構造では複数のアミノ酸側鎖が金属を掴んでいるが、実際には一部のアミノ酸のみが配位した中間状態が多数存在する。これらの状態変化のダイナミクスは実験的手法による観察が困難であった。本課題では分子動力学シミュレーション (MD) を用いて金属結合タンパク質の状態変化を仔細に解析することを目的とする。これにより実験で得られた数値との比較検証が可能になる。また、それぞれの金属結合タンパク質には正しく機能する上で好ましい金属イオンが存在している。しかし、さまざまなシグナル伝達のメッセンジャーとして用いられる金属とタンパク質間の特異性はどのようにして生じたのかは明らかになっていない。本課題では金属パラメータの変化によって金属特異性の分子機構を明らかにすることを目的とする。タンパク質について金属特異性を明らかにすることで、有毒金属の毒性評価や有毒金属を吸着する生体材料の設計に必要な情報を提供することが期待される。</p> |                                |

|  |                                  |
|--|----------------------------------|
| 課題名  | PaCS-MD と異常検知を援用したタンパク質構造遷移経路の探索 |
| 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   | 一年                               |
| <p>本研究では、タンパク質の構造遷移探索法であるカスケード選択型分子動力学計算 (PaCSMD) と機械学習の1つである異常検知を援用することで、生体機能に重要なタンパク質の長時間ダイナミクス (レイイベント) を効率的に抽出する「異常検知型 PaCS-MD (ad-PaCS-MD)」を開発する。具体的には、「構造変化のし易さ」と「構造の異常さ」を異常検知により対応付け、異常度が高い構造を特定し、PaCS-MD の初期構造に採用する。PaCS-MD の各サイクルにおいて「異常度が高い構造 = 遷移確率が高い構造」から短時間 MD を繰り返すことで構造遷移を誘起し、構造変化 (遷移経路) を自動的に予測する ad-PaCS-MD を開発する。更に、ad-PaCSMD を複合体の解離プロセス抽出に適用した応用研究も実施する。</p> |                                  |

|   |                                      |
|---|--------------------------------------|
| 課題名   | 分子動力学計算で解明する維持メチル化酵素 DNMT1 の活性化メカニズム |
| 代表者名 (所属)   | 保田 拓範 (筑波大学 理工情報生命学術院)               |
| 利用システム名   | Reedbush-H                           |
| 実施期間  | 一年                                   |
| <p>細胞は原則として同じ塩基配列を有するにも関わらず、異なる性質を持つ。この理由は、細胞ごとに DNA 修飾が異なるためである。例えば、DNA のメチル化は遺伝子の発現を制御するため、メチル化のパターンが異なれば発現する遺伝子は異なる。つまり、メチル化パターンは細胞固有の性質を決定する要因の一つである。一方で、DNA は半保存的に複製されるため、ヘミメチル化 DNA を 2 本鎖ともメチル化する必要がある。この過程を維持メチル化と呼び、メチル化パターンを娘細胞に引き継ぐ役割を担う。DNMT1 (維持メチル化酵素 1) は、維持メチル化の中心として働く酵素である。DNMT1 の活性は DNA 複製時にのみ要求されるため、高度に制御される必要がある。具体的には、DNA 複製時以外は DNMT1 の DNA 結合部位が露出しておらず活性がない。近年、ユビキチン化されたヒストンが DNMT1 を活性化することが明らかになった。しかし、ユビキチンとヒストンの複合体が DNMT1 の構造変化を誘起する活性化メカニズムは不明であった。本研究は、分子動力学シミュレーションを用いて DNMT1 の活性化におけるユビキチンとヒストンの機能解明を目的とした。</p> |                                      |

|  |                                |
|--|--------------------------------|
| 課題名  | 降着円盤乱流における Alfvén 的揺動と圧縮的揺動の配分 |
| 代表者名 (所属)  | 川面 洋平 (東北大学 学際科学フロンティア研究所)     |
| 利用システム名  | Oakforest-PACS                 |
| 実施期間   | 一年                             |
| <p>Event Horizon Telescope(EHT) は、人類史上初となるブラックホール周辺からの放射分布の画像を公開したが、観測結果を解釈するためには、粒子輸送や粒子加熱など、降着円盤で起こる様々な物理現象の鍵となるプラズマ乱流をより深く理解する必要がある。しかし数値計算コストの制限から、これまで降着円盤における乱流の微小スケールの特性は十分に理解されていなかった。そこで本研究では、乱流計算に特化した超高並列性能を持つシミュレーションコードを用いて、降着円盤乱流の詳細な性質を調べ、EHT の観測結果を解釈するために必要な情報を明らかにする。具体的には申請者が開発した超高並列性能を持つ電磁流体力学 (MHD) コードを用いて、圧縮的 (縦波的) 揺動と Alfvén 的 (横波的) 揺動の比を求める。この値を申請者らのこれまでの研究と組み合わせることで、これまででない精度で降着円盤の放射分布を予測することが可能となる。</p> |                                |

|   |                                      |
|---|--------------------------------------|
| 課題名   | 異なるガラス系における降伏臨界性・限界安定性の普遍性について       |
| 代表者名 (所属)   | 大山 倫弘 (東京大学 総合文化研究科)                 |
| 利用システム名   | Reedbush-H , Wisteria-O , Wisteria-A |
| 実施期間  | 一年                                   |
| <p>液体を急冷するとランダムな構造のまま固化しガラス状態となることがある。ガラス転移と呼ばれるこの現象は物性物理における最難問の一つと言われており、長年にわたり多くの研究の対象とされてきた。しかし、これまで多くの知見が蓄積されてはいるもののいまだ完全な理解からは程遠い。そんななか近年、ガラスの普遍的かつ本質的性質の候補として、無限小の擾乱に対して塑性変形を示しうるとい性質、限界安定性が注目を集めている。申請者は最近、せん断外場により誘起される降伏臨界性に注目することで限界安定性を定量評価することが可能になることを見出した。特に臨界指数の比較を行えば異なる系の間の普遍性についての検討が可能になる。本研究ではこの降伏臨界性を足がかりに異なるガラス系が持つ限界安定性が普遍性を示すかどうかを分子動力学法により調べる。特に臨界指数の正確な測定には大規模系も含む複数のシステムサイズで準静的外場に対する応答を高精度で測定する必要があるため、GPUによる大規模並列計算を実行する。</p> |                                      |

|   |  |
|---|--|
| 課題名   | ディンプルの敷設および脈動冷却流によるガスタービン翼後縁部カットバック面上フィルム冷却の高性能化 |
| 代表者名 (所属)   | 徳武 太郎 (東京農工大学 工学府)                               |
| 利用システム名   | Oakforest-PACS                                   |
| 実施期間  | 一年   |
| <p>航空用・産業用ガスタービンの熱効率向上のためには、より少量の空気量でタービン翼等の構造部材を所定温度まで冷却することが重要である。ガスタービン翼後縁部は形状が薄いうえに、翼表裏面からの入熱が存在するため、冷却が最も困難な部位の一つである。本課題では翼後縁部のカットバック面フィルム冷却技術(冷却空気をカットバック面上に吹き出し、熱遮蔽と対流冷却を同時に行う手法)を対象に、冷却効率の高性能化を目的とする。先行研究では伝熱実験と可視化試験により、カットバック面上にディンプル(凹み形状)を敷設することでカットバック面上の対流熱伝達性能を上昇させ、高性能な冷却が行えることが示されている。また、冷却空気に適切な周波数、振幅をもつ脈動を付与することでフィルム冷却効率が向上することが示されている。本課題では、(1)複数のカットバック面形状(平滑及びディンプル面)がフィルム冷却場を与える影響、および(2)脈動付与がフィルム冷却場を与える影響について大規模非定常数値解析を実施し、それぞれがフィルム冷却における対流熱伝達と熱遮蔽性能に与える影響を調査する。</p> |  |

|   |                                    |
|---|------------------------------------|
| 課題名   | 物理法則に基づいた深層学習による多孔質弾性変形の解析         |
| 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   | Reedbush-H, Wisteria-O ,Wisteria-A |
| 実施期間  | 一年                                 |
| <p>The coupled PDEs in hydro-mechanical problems are usually difficult to solve by numerical modeling methods and have a high computational cost. The cost could further affect the efficiency of inverse modeling when using measurement data to estimate hydraulic and mechanical parameters. We aim to solve such hydro-mechanical problems using the physics-informed neural networks method to alleviate this cost. We will evaluate the accuracy of results obtained by deep learning and numerical modeling.</p> |                                    |

|  |                                       |
|--|---------------------------------------|
| 課題名  | キャリアドーピングされた Kitaev 模型候補物質の繰り込み群による研究 |
| 代表者名 (所属)  | 福井 毅勇 (東京大学 理学系研究科)                   |
| 利用システム名  | Oakforest-PACS, Oakbridge-CX          |
| 実施期間   | 一年                                    |
| <p>本研究は、Kitaev 模型候補物質へのキャリアドーピングの効果を汎関数繰り込み群により明らかにするものである。汎関数繰り込み群により、ドーピング量や Heisenberg 項や非対角相互作用の効果をパラメータとして振りながら、基底状態相図を計算する。自己エネルギーのフィードバックにより、フラストレーションの効果を適切に取り入れる点が独創的な点である。</p> |                                       |

以上