

2021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（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年度インターンは1件の課題を、後期は8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/>

■ 2021年度 インターン 採択課題

課題名	階層型直交格子と再帰的なフィッティングによる回転翼の非定常空力予測
代表者名 (所属)	菅谷 圭祐 (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、環境負荷を低減することが可能な電動・ハイブリッド航空機が注目されている。また都市部での新しい乗り物として、垂直離着陸な小型の航空機が注目されている。これらの革新的な航空機の空力設計では、数値流体力学 (CFD) を用い、機体周りの複雑な流れを予測することが重要である。しかし、航空機や回転翼は形状が複雑であり、CFD を用いた流れの予測に必要な計算格子を生成することが解析のボトルネックになる。そこで、複雑な形状に対し自動で格子を生成可能な直交格子法が注目されている。本研究の目的は、回転翼の非定常乱流解析に向けた、自動格子生成が可能な新しい手法を開発することである。計算には、三次元複雑形状周りに自動で物体適合格子を生成可能で、支配方程式である保存則が厳密に満足される、直交格子法のひとつである RecursiveFitting 法を用いる。また物体の回転を再現するため、移動格子法を組み合わせる。加えて、壁面近傍の乱流境界層を精度良く予測するため、壁関数を組み合わせる解析を行う。</p>	

■ 2021年度 後期 採択課題

課題名	Feedforward 型の NeuralNetwork を用いた多体電子系波動関数の基底状態の解法
代表者名 (所属)	乾 幸地 (東京大学大学院 工学系研究科)
利用システム名	Reedbush-H Reedbush-L Wisteria-A
実施期間	半年
<p>近年、深層学習に代表されるニューラルネットを用いて量子多体系の波動関数を近似良く求めようという研究が盛んに行われている。フェルミオン系におけるこれまでの研究の多くは、反交換関係を表現するために行列式やパフィアンなどによる一体の波動関数と、相互作用効果を記述するニューラルネットを組み合わせて用いている。これまでの研究では、一体の波動関数部分に対する研究はそこまで盛んに行われてこなかった。そこで我々は畳み込み型ニューラルネットと行列式を組み合わせることで、精度を向上させることを目的に、系統的な計算を実行する。</p>	

課題名	ダイマー粒子を用いたガラスの Johari-Goldstein beta 緩和の理解
代表者名 (所属)	白石 薫平 (東京大学 大学院総合文化研究科)
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	半年
<p>液体を急冷すると、融点で結晶化を避けて過冷却液体状態になる。この状態では、僅かな温度低下によって系の緩和時間が急激に増大し、仕舞には実験の時間スケールを越え、分子の構造が乱雑なまま凍結したガラスが生じる。この過冷却液体が示す遅い動力学は、統計力学の通常理解が適用できない現象である。様々な過程から成る緩和動力学を理解することは、ガラス転移の理解に直結する重要な問題である。本研究では、Johari-Goldstein (JG) beta 緩和過程に着目する。これは、他の主要過程である alpha 緩和よりも短時間に現れる過程であり、分子性ガラスの実験で普遍的に観測されているが、数値的な研究は限定的である。それは、多くのシミュレーションが依拠してきた等方的な球によるモデルガラス系には、JGbeta 緩和過程が出現しないからである。この研究では、近年 JG beta 緩和を示すことが報告されたダイマー粒子系の分子動力学シミュレーションを行う。そして、レプリカ交換法や isoconfigurational アンサンブルといった計算物理学の手法を駆使し、JGbeta 緩和の微視的な運動と発生メカニズムに迫る。</p>	

課題名	グラフ構造を入力として応力分布を出力とする GAN ベースの有限要素法の Surrogate モデルの研究
代表者名 (所属)	中井 優 (東京大学 工学部)
利用システム名	Wisteria-A
実施期間	半年
<p>有限要素法の深層学習による Surrogate モデルとして、メッシュを入力データとして、メッシュの各ノードにおける応力分布を出力とするような、GAN をベースとした、有限要素法による応力分布の生成過程をニューラルネットワークによってモデル化した生成モデルを提案する。提案手法は、深層学習の持つモデルの表現力と計算量のトレードオフの選択の自由度が大きいという特徴を利用して、有限要素法による解析よりも高速な応力分布の推論が可能にする。さらに、グラフのような大きさ (ノード数) の変化する入力に適用することが困難であるという問題に対して、GNN と呼ばれるネットワーク構造を採用してグラフ構造の扱いを可能にすることで、また入出力のパターンを学習する識別モデルではなくデータの生成過程そのものを学習する生成モデルを利用することで、従来の識別モデルを利用した深層学習による Surrogate モデルを上回る性能を持ち、それらのモデルでは達成できなかった応力分布そのものの生成を可能にするような、新たな Surrogate モデルを構築する。</p>	

課題名	公共データを活用した転写因子結合ダイナミクスの解析
代表者名 (所属)	植野 和子 (国立国際医療研究センター)
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	半年
<p>本研究課題では申請者らが過去の研究で発見した、RNA ポリメラーゼ II と共役してゲノム DNA 上を「動く」転写因子と同じ性質を持つ分子が他にどれくらい存在するのかを明らかにするため、公共データベースに登録された大量の次世代シーケンズ解析データを用いて、各々の転写因子の結合動態を網羅的に解析する。具体的には、米国のポストゲノム解析プロジェクトである ENCODE(ENCyclopedia Of DNA Elements) において収集されたマウスおよびヒトの転写因子の ChIP-seq データを収集し、遺伝子配列上における分布を解析することで、その挙動を明らかにしていく。またその際に、同サンプルから得られた遺伝子発現データを併用して解析することで、転写制御機能と分子運動を関連づけた解析を行う。以上の解析から、遺伝子配列上を動く新規の転写因子を同定すると共に、転写因子の構造と分子運動、機能を関連づける普遍性のある法則を見出すための基盤的データを創出する。</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地震波速度構造推定
代表者名 (所属)	大鶴 啓介 (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	半年
<p>地球マントルの最下部数百 km の領域は、固体岩石で構成されるマントルと高温の液体鉄合金である外核が接する核-マントル境界 (CMB) の直上に位置し、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る。これまでに行われた地震波による構造推定からは、アフリカ下と太平洋下の 2 箇所に巨大な低速度異常域 (LLSVP) が存在することが知られている。しかし、これが複数の熱的な上昇流の束なのか、化学組成の異なる物質の塊なのかかわかっておらず、その判別にはより高い解像度の構造推定が必要である。詳細な構造推定を行う際に必要となる正確な理論波形についても、短周期までの計算には多くの計算資源が必要となる。そこで本課題では、地震波形に含まれる情報を余すことなく活用することでより詳細な構造推定を可能にする波形インバージョン手法と、スペクトル要素法により理論波形を計算する SPECFEM3D.GLOBE というソフトを使用して、LLSVP 内部の詳細な地震波速度構造を推定することを目指す。</p>	

課題名	地震波形インバージョンによるマントル最下部の S・P 波速度構造同時推定—地球深部の熱・化学進化の理解に向けて—
代表者名 (所属)	佐藤 嶺 (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	半年
<p>地球の核-マントル境界 (CMB) は、固体岩石のマントルと液体鉄合金の外核が接する地球内部の最も主要な熱・化学組成境界であるため、CMB 直上数 100km(D'' 領域) は地球の熱・化学進化の理解に重要な領域である。D'' 領域では地温勾配とマントル組成のソリダスが近いために部分溶融に伴う化学分化を起こすマグマが定常的に発生する可能性が高く、また典型的な沈み込み領域下においては海洋プレートの沈み込みに伴う化学組成不均質が形成されることが考えられている。従って観測情報から化学組成異常のサイズと度合いを制約することが重要である。しかし、地震波速度不均質を温度・化学組成効果に定量的に分離するには S・P 波速度構造を同程度の解像度で同時に推定する必要があったが、データセットの質や種類が異なる等課題があった。また正確な理論地震波形の計算も必要であるが、短周期までの計算は計算資源の問題から困難であった。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 S・P 波速度構造を同時推定する。</p>	

課題名	分子動力学計算を用いた DNA 分解酵素の失活メカニズムの解明
代表者名 (所属)	大滝 大樹 (長崎大学 生命医科学域 (医学系))
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	半年
<p>酵素は生物が生きていく上で必要な消化・分解・吸収・代謝などのあらゆる過程に関係する。酵素における変異の多くは酵素作用を失活させることが分かっているが、その分子的なメカニズムについては不明な点が多い。本研究では、免疫系疾患に関係する DNA 分解酵素に着目し、分子動力学シミュレーションにより多くの変異型を調べる。相互作用などの解析から、「変異の影響がどのような経路をたどり、最終的にどこに影響を及ぼすか」を分子論的に明らかにすることを目的とする。</p>	

課題名	ディープラーニングによる高精度マルウェア分析
代表者名 (所属)	三橋 力麻 (東京大学大学院 情報理工学系研究科)
利用システム名	Wisteria-A
実施期間	半年
<p>サイバーセキュリティの現場では、セキュリティアナリストとマルウェアの戦いが続いている。マルウェアの構造や動作は従来よりも複雑さを増しているため、セキュリティアナリストは、新しいマルウェアを入手すると、その一つ一つを丁寧に解析せざるを得ない状況にあり、その作業負担は膨大になっている。その一方で、マルウェアの攻撃はますます高度になっており、日々発見される新しい脆弱性や、検知動作の検知を回避する仕組みを取り込みながら、次々に新しいマルウェアが量産されている。ただし、マルウェアは一度開発されると、検知を回避するためプログラムの構造の一部を変更した「亜種」が数多く生産される特徴がある。そこで、未知のデータセットの中から、マルウェア亜種を自動的に既知の仲間に分類できれば、セキュリティアナリストによるマルウェア解析の負担を大きく減らすことができる。本課題では、ディープラーニングを活用した高精度なマルウェア分析を実現し、セキュリティアナリストによるマルウェア解析作業の補助や新たなマルウェア亜種の速やかな検出などマルウェアによる被害を早期に防止するためのシステムを実現する。</p>	

以上