

2022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（2022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、データプラットフォーム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。

本制度では、前期と後期に一年または半年単位（後期は半年のみ）で実施する一名で行う研究課題を募集します。

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。

このたび、以下の基準による厳正な審査のうえ、2022年度前期は12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を歓迎します。
- 現状の環境にとどまらず、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。
- 特に、mdxについては、理工系・人文系にまたがる多様なデータの収集・整備、研究コミュニティにおけるデータの共有やプラットフォームの整備、そして機械学習等の先端的なデータサイエンス手法を用いたデータ解析など、多様なデータ科学・データ利活用研究を歓迎します。

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/>

■ 2022年度 前期 採択課題

課題名	濡れた粉体の変形・流動特性の理解
代表者名 (所属)	吉井 究 (大阪大学 基礎工学研究科)
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	一年
<p>粉や砂のような巨視的なサイズの粒子の集合体である粉体は、粒子の密度が閾値より高いと、剛性を有し固体的に振る舞う一方、その閾値より低い場合は剛性を示さず流体的に振る舞う。この力学的特性の変化はジャミング転移と呼ばれ、近年盛んに研究されている。特に、粒子間に接触による反発相互作用だけが働く乾いた粉体系の転移点近傍の振る舞いについては、多くのことが明らかになっている。ところが、現実の粉体は濡れを伴う場合が多く、そのような系で乾いた粉体の挙動がそのまま観測されるかは不明である。実際、粉体は少量の水を加えるだけで、応力ひずみ曲線などのレオロジー特性が大きく変化することが知られている。これは粒子間に入り込んだ液体が表面張力によって架橋を形成し、実行的な引力相互作用を与えることに起因する。しかし、従来の濡れた粉体の研究では、個別の視点に立脚した研究は行われているが、理論的な理解や濡れの影響を系統的に調べた研究はほとんど無く、十分な理解に至っていない。そこで本研究では、濡れた粉体系の大変形や流動状態に着目し、離散要素法を用いたシミュレーションを行い、乾いた粉体系との違いを明らかにする。</p>	

課題名	t6A 修飾を含むリボソーム翻訳開始複合体における開始コドン認識動態の分子動力学計算による解析
代表者名 (所属)	亀田 健 (立命館大学 生命科学部)
利用システム名	mdx
実施期間	一年
<p>申請者は、真核生物のリボソーム翻訳開始複合体における、翻訳開始コドン認識をとりまく分子動態の解明を行っている。これまでに、適切な翻訳開始コドン以外のミスマッチコドンや、修飾コドンなどを対象としてきた。本課題では、それらのミスマッチコドンや修飾コドンの翻訳開始を制御すると考えられている、アンチコドンの隣に位置する塩基に t6A 修飾が入った tRNA を含む、リボソーム翻訳開始複合体の動態に着目する。t6A は生体内での存在と疾患との関連可能性は調べられているものの、リボソーム内での動態や相互作用を含む、翻訳開始制御機構への具体的な作用メカニズムは不明である。本研究課題で行う分子動力学計算を用いた研究により、その作用メカニズムを考察するとともに、医薬研究の基盤技術へと発展させていくことを目指す。</p>	

課題名	擬スペクトル MHD コードで狙う磁気回転乱流における慣性領域の解像
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	Oakbridge-CX, Wisteria/BDEC-01 Odyssey
実施期間	一年
<p>ブラックホールは降着円盤と呼ばれるプラズマの乱流に取り囲まれている。この乱流は磁気回転不安定性 (MRI) によって駆動されている。MRI 乱流の直接数値シミュレーションは膨大な数が行われてきたが数値解像度が不十分であり、乱流の特性を捉えるに至っていない。そこで本研究では、我々が新しく開発した擬スペクトル法コードを用いて降着乱流の特性に迫る。このコードはこれまで用いられてきたコードに比べ、飛躍的に MRI 乱流の解像度を上げることができる。本課題では具体的に、これまで解像することができていなかった慣性領域に迫る。慣性領域の情報を得ることができれば、Event Horizon Telescope によるブラックホールシャドウ観測の物理的解釈に必要となる理論モデルを高精度化することに繋がる。</p>	

課題名	着陸探査プローブのクラッシュブル材とレゴリスの衝突・干渉作用に関する数値解析
代表者名 (所属)	徳永 賢太郎 (東京大学 工学系研究科)
利用システム名	Wisteria/BDEC-01 Odyssey
実施期間	一年
<p>近年重力天体への着陸探査において、着陸時に必要な逆噴射装置やパラシュートといった減速装置を用いる代わりに、発泡金属やプラスチック発泡体といった、クラッシュブルなポーラス材料を着陸機構の一部に使用し着陸時のエネルギーを吸収する技術が着目されている。天体の微小重力や真空環境を地上で完全に模擬できないことも踏まえ、ミッションに用いる着陸機構の最適設計のためには、数値解析モデルを構築し各種パラメータが着陸機構に与える影響を評価する必要がある。本課題は、圧縮変形しながらエネルギーを吸収するポーラス材料とレゴリス (粒状体) との衝突・干渉による相互作用を DEM (Discrete Element Method) により数値モデル化し、ポーラス材料の各種パラメータが着陸メカニズムに与える影響を調査するものである。</p>	

課題名	磁気ノズルスラスタにおける中性粒子流れとエネルギー輸送の数値解析
代表者名 (所属)	江本 一磨 (横浜国立大学 理工学府)
利用システム名	Oakbridge-CX, Wisteria/BDEC-01 Odyssey
実施期間	一年
<p>宇宙機の主推進として利用されることが期待される磁気ノズルスラスタを研究対象とし、particle-in cell / Monte Carlo collisions / direct simulation Monte Carlo (PIC-MCC-DSMC) コードを用いて、スラスタ内部の中性粒子流れとエネルギー輸送を明らかにすることを目的とする。PIC-MCC-DSMC コードは Boltzmann 方程式で構成されるプラズマと中性粒子を確率的に解く手法であり、磁気ノズルスラスタなどの低温プラズマの解析を行う上で強力な手法として知られている。PIC-MCC-DSMC コードを用いることで磁気ノズルスラスタ内部のプラズマ・中性粒子流れを再現し、実験では測定することが困難な中性粒子とエネルギーの輸送現象を解明することが期待される。また、中性粒子とエネルギーの損失過程を理解することで、磁気ノズルスラスタの性能向上を目指す上で必要な指針を得ることができる。</p>	

課題名	次世代銀河分光観測に向けたフィールドレベル解析の確立
代表者名 (所属)	大里 健 (京都大学 基礎物理学研究所)
利用システム名	Wisteria/BDEC-01 Aquarius
実施期間	一年
<p>宇宙物理学における根源的な問題であるダークマター・ダークエネルギーの正体、そして加速膨張の物理的な機構を探るため、大規模な銀河分光観測計画が予定されている。これらの計画では、銀河の三次元位置を測定し背景にある物質分布を描き出すことが主たる観測目的である。従来の解析では、観測された銀河分布から、その情報を要約する統計量を用いてダークマターの存在量に代表される宇宙論パラメータを推定する。しかしながら、統計量は銀河分布の持つ情報の一部しか取り入れられず、統計量で表現できない高次の情報は失われてしまう。そこで、本研究では観測された銀河分布の場が持つ情報の全てを考慮するフィールドレベル解析に着目し、高速で実用的な統計解析基盤を構築する。近年開発された物質密度場の重力進化理論モデル GridSPT を基礎に GPU による高速化を実装することで、ダークマター・ダークエネルギーのモデル決定に最大限迫ることを目標とする。</p>	

課題名	階層性が内在するガラスのエネルギー地形における低周波数振動の緩和予言能の起源
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	一年
<p>液体を急冷すると生じるガラスは、複雑なエネルギー地形を持つ。構成粒子がダイマーという「形」を持った粒子のとき、過冷却液体は alpha 緩和と Johari-Goldstein beta 緩和という 2 種類の緩和過程を持つ。この緩和過程の分離は、エネルギー地形からはベイスンとメタベイスンという階層構造の現れとして解釈できる。ベイスンにおける低周波数振動は結晶とは異なる性質を示し、振動粒子は熱緩和の発生位置と相関する。ダイマー系での階層的エネルギー地形という理解を踏まえると、緩和と振動の相関は非自明であり、その起源も明らかではない。本研究では、ダイマー系の大規模分子動力学シミュレーションにより、振動状態の特徴付けと緩和予言能の起源の解明を行う。レプリカ交換法を用いて広範な温度領域の平衡液体配置を生成し、振動特性の温度依存性を調べる。そして、各ベイスンにおけるモード・モード相関という新規な量を導入し、緩和予言能を生み出すエネルギー地形的な起源を明らかにする。</p>	

課題名	Constructing deep learning models of biological fitness landscapes from sequencing data
代表者名 (所属)	Adam Beattie (東京大学 理学系研究科)
利用システム名	Wisteria/BDEC-01 Aquarius
実施期間	一年
<p>Deep learning has made breakthroughs in biology but requires substantial training data. With a novel high throughput system, over 10^{12} peptides can be screened for activity with post translational modification enzymes. We will use the sequencing data output to train substrate fitness landscape models. We will test our method on a biosynthetic enzyme, then build a general platform for modelling fitness landscapes for the study of uncharacterised enzymes and the design of selective therapeutics.</p>	

課題名	波形インバージョンによる南大西洋下のマントル最下部領域の地震波異方性構造推定
代表者名 (所属)	大鶴 啓介 (東京大学 理学系研究科)
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	一年
<p>地球マントルの最下部数百 km の領域は核-マントル境界 (CMB) 直上の熱境界層をなしており、外核による加熱を受けて上昇流を発生させることでマントル対流を駆動している。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 S 波低速領域 (LLSVP) が存在することが知られており、これが高温の上昇流に対応するとされている。しかし、最下部マントルでの物質の詳しい流動様式が解明されていないためにこの LLSVP の成因や性質についてもよくわかっていない。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ソフトを使用して、アフリカ LLSVP の西側境界域にあたる南大西洋下のマントル最下部の地震波異方性構造を推定する。そしてその結果から、マントル最下部での物質の流動に関する制約を得ることを目指す。</p>	

課題名	地震波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 理学系研究科)
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	一年
<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解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と考えられている。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 SPEC-FEM3D.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	臨界レイノルズ数付近における矩形ダクト乱流中の二次流れと熱的制御
代表者名 (所属)	関本 敦 (岡山大学 学術研究院)
利用システム名	Wisteria/BDEC-01 Odyssey
実施期間	一年
<p>矩形ダクトなどの角を有する乱流中は、角へと向かう主流に垂直方向の平均二次流れが生じる。この二次流れによって、主流の平均的な分布だけでなく乱流熱伝達率に影響を及ぼすことが知られている。臨界レイノルズ数付近では、乱流渦と管路幅が同程度のスケールになるため、乱流渦の出現位置が側壁によって拘束される。さらに、壁面加熱して、浮力効果を加えることで、乱流渦の挙動をある程度コントロールできると考えられる。本研究では、矩形ダクト乱流の直接数値シミュレーションを行い、浮力効果が乱流効果と同程度となるような浮力パラメータにおいて、二次流れの安定化効果や乱流パフへの影響を調べ、壁面加熱による乱流制御の新たな指針へとつなげる。</p>	

課題名	Inversion modeling of aquifer deformation for permeability estimation using Automatic Differential and adjoint methods
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, Wisteria/BDEC-01 Aquarius
実施期間	一年
<p>Recently, distributed fiber-optic strain sensing tool has been successfully deployed for the acquisition of aquifer strain along the optical fiber-installed well. To estimate aquifer permeability using the strain array data, inversely solving the coupled fluid flow and mechanical (poroelastic) equations is required. In this study, we aim to develop an Automatic Differential (AD) and adjoint state combination method to accelerate the Jacobian matrix calculation and the inverse modeling</p>	

以上