

2023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、本センター）では、若手研究者（2023年4月1日時点において40歳以下）、女性研究者（年齢は問わない）または学生による、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。

前期・後期に募集を行う一般枠（最長で1年間の利用が可能）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。各制度では、一名で行う研究課題を募集します。

一般枠で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、2023年度前期は23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/>

■ 2023年度 前期 採択課題

課題名	3次元ハイパーハニカム物質の基底状態相図とスピン液体実現可能
代表者名(所属)	福井 毅勇(東京大学 工学系研究科)
利用システム名	Oakbridge-CX Wisteria/BDEC-01 Odyssey
実施期間	一般枠前期(一年)
<p>本研究は、3次元のキタエフ量子スピン液体候補物質の物性、とりわけ、量子スピン液体の実現可能性とその性質を汎関数繰り込み群と呼ばれる手法を用いて数値的に解明するものである。対象とする候補物質のモデルは、3次元格子を形成している強くフラストレートした量子スピン系である。これまでは、これらの系で精度の高い数値計算は一般に困難であった。この計算を実行するための手法として、汎関数繰り込み群法を用いることが本研究課題の大きな特徴である。汎関数繰り込み群法により、候補物質の有効モデルの基底状態相図を広いパラメータ領域について具に明らかにすることで、候補物質におけるキタエフ量子スピン液体実現可能性を解明する。また、有限温度における相関関数や熱力学量の温度依存性を明らかにすることで、候補物質についての実験結果と照らし合わせることで、理論と実験結果の直接的な比較も行う。本研究は、3次元キタエフ量子スピン液体物質設計および候補物質探索の指針を与える。</p>	

課題名	RANS と LES を用いたチャンネル内乱流熱伝達における脈動条件とディンプル壁面形状の多目的最適化
代表者名(所属)	山本 翼(東京農工大学 機械システム工学専攻)
利用システム名	Oakbridge-CX Wisteria/BDEC-01 Odyssey
実施期間	一般枠前期(一年)
<p>近年、省エネルギーのために低圧力損失、高熱伝達性能を有する冷却技術が求められている。著者所属研究室の過去の研究では、ティアドロップディンプルをチャンネル壁片面に敷設し、冷却流に脈動を付与することにより、熱伝達性能が向上することが確認された。しかし、最適なディンプル壁面形状・配列、脈動条件は未だ明らかではない。本研究では、ディンプル形状・配列、脈動条件の多目的最適化を非定常 RANS で行う。ディンプル配列の設計変数は面回転角度、ディンプル配列条件(Staggered, Inline, その中間)とする。ディンプル形状の設計変数は、ディンプル前縁傾斜角度、ディンプル深さとする。目的関数は、ディンプル面平均熱伝達率、圧力損失に加えて、対向平滑面の熱伝達率と壁面せん断応力とする。対向平滑面での値を目的関数に加えることで、ディンプル面が対向平滑面に与える影響が最小となるような最適化が可能となる。最適化後 LES による検証を行い、最適条件に対して位相平均や POD 解析を行うことで流れ場の考察を行う。</p>	

課題名	A Python Deep Learning Toolkit for Healthcare Data Analysis
代表者名 (所属)	Li Zihui (Information Technology Center, The University of Tokyo)
利用システム名	Wisteria/BDEC-01 Aquarius
実施期間	一般枠前期 (一年)
<p>AI is already being used in various areas such as diagnosing, clinical decision support, drug discovery, predictive modeling, and patient monitoring. We aim to address the lack of open-source systems that implement deep learning algorithms for healthcare data, especially in languages other than English. We propose the development of a Python toolkit that can process and analyze large amounts of healthcare data in a timely and cost-effective manner using parallel computing.</p>	

課題名	形態記述子の導入による細胞プロファイリングの高度化
代表者名 (所属)	野下 浩司 (九州大学 理学研究院)
利用システム名	mdx
実施期間	一般枠前期 (一年)
<p>本利用課題では、細胞プロファイリングにおける特徴量として細胞と細胞小器官の形態記述子を導入すること、距離学習に基づき特徴量空間を推定することにより網羅的 1 細胞表現型計測の高度化を目指す。細胞、組織、器官などの「かたち」は機能や疾患に深く結びつく重要な形質である。マルチオミクスデータの活用は今後も進むと予想されるが、フェノーム（表現型の総体）データの蓄積は進んでいない。本研究により、細胞と細胞小器官スケールでの複雑な「かたち」の定量化ワークフローを構築することで汎用的な「かたち」定量化手法の利用を促進しデータの蓄積を進める。さらに、距離学習による細胞表現型空間の推定により作用機序が未知の化合物や遺伝的なパータバージョンに対する概観を得ることを目指す。作用機序が未知の因子に対応した細胞表現型やその一部に共通する特徴を記述する特徴量（記述子）を開発することで、汎用手法ではカバーできない「かたち」のクラス向けのテーラーメイド数理モデル開発を実施することで疾患表現型に関連したあらゆる「かたち」の定量化に取り組み、計測データと表現型値のギャップを埋めることが期待される。</p>	

課題名	アンチサイト欠陥を導入した Y2Ti2O7/bcc-Fe の界面エネルギーの評価
代表者名 (所属)	大野 直子 (横浜国立大学)
利用システム名	Wisteria/BDEC-01 Odyssey
実施期間	一般枠前期 (一年)
<p>酸化物分散強化 (ODS) 合金中の照射環境における酸化物粒子安定性を理論的に説明するためのボトルネック解決に向けて、アンチサイト欠陥を導入した Y2Ti2O7/bcc-Fe の界面エネルギーを評価する。従来の照射下における酸化物粒子の成長/縮小は、オストワルド成長式を基本として、合金母相への過剰空孔導入による拡散係数の変化を中心に論じられてきた。しかし、この手法では同じ温度において成長/縮小という相反する実験結果が得られている理由を説明できない。本研究ではこれまでの申請者の研究に基づき、照射下における酸化物粒子側の変化に着目する。Y2Ti2O7 のアモルファス変態温度域 (600K~800K) において酸化物にアンチサイト欠陥が導入された場合に bcc-Fe との界面エネルギーに生じる変化を、第一原理分子動力学計算によって明らかにする。</p>	

課題名	感度解析を用いた台風急速強化のメカニズム解明
代表者名 (所属)	平野 創一朗 (琉球大学)
利用システム名	Wisteria/BDEC-01 Odyssey
実施期間	一般枠前期 (一年)
<p>猛烈もしくは非常に強い台風のほとんどは、弱い勢力から徐々に発達するのではなく、わずか数日で急発達することで生まれる。このプロセスは急速強化と呼ばれる。しかし、台風の急速強化のメカニズムはいまだはっきりしていない。本課題では、台風の急速強化の要因を明らかにするために感度解析を行う。感度解析により、台風の中心気圧や最大風速といった台風強度の、気象モデル初期値に対する依存性を定量的に見積もることができる。解析対象は、航空による台風直接観測が行われた 2022 年台風第 14 号とする。</p>	

課題名	The direction of mantle flow beneath Thailand inferred from shear wave splitting measurements
代表者名 (所属)	Autaijaratrasmee Tarudee (The University of Tokyo)
利用システム名	Wisteria/BDEC-01 Odyssey
実施期間	一般枠前期 (一年)
<p>We infer the anisotropic properties of the mantle beneath Thailand based on shear wave splitting analyses. The magnitude of anisotropy is quantified by the travel time difference (dt) between the fast and slow shear waves. The fast axis orientation of anisotropic minerals is related to the angle (ϕ) between the P-wave and the fast shear wave. We made the code based on the transverse energy minimization method to infer the dt and ϕ. To validate the code, we applied it to the data from Incorporate.</p>	

課題名	3成分を使用した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速度構造推定
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	Wisteria/BDEC-01 Odyssey
実施期間	一般枠前期(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。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、南大西洋下のアフリカ LLSVP 西側境界域から内部にかけての詳細な地震波速度構造を推定する。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	星一つ一つを分解した矮小銀河シミュレーション
代表者名(所属)	藤井 通子(東京大学 理学系研究科)
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	一般枠前期(半年)
<p>矮小銀河は天の川銀河よりも三桁程度軽い銀河であり、天の川銀河周りに複数個観測されている。これらの銀河の銀河中心部のダークマターハローの密度分布のべきが平ら(コア)なのか、冪乗(カスプ)なのか、観測とこれまでのシミュレーションにはずれがある。本研究では、新規開発のコードで銀河の星一つ一つまで分解した世界最高分解能のシミュレーションを行い、この問題に答えを出す。</p>	

課題名	Microscopic thermal transport properties in protein-based materials
代表者名(所属)	WANG TINGTING (Graduate School of Science, Nagoya University)
利用システム名	Wisteria/BDEC-01 Odyssey Wisteria/BDEC-01 Aquarius
実施期間	一般枠前期(一年)
<p>Thermal transport is among essential biophysical properties of proteins and not fully understood yet. Its relationship with protein structures, dynamics, and functions, will be investigated based on Green-Kubo relation and linear response theory using MD simulations at atomic and residue level to help the design of protein-based materials, specifically, thermal transport within each residue fragment and that through native contacts in proteins, the role of secondary structure.</p>	

課題名	機械学習を利用した高解像度銀河形成シミュレーションの高速化
代表者名 (所属)	平島 敬也 (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	一般枠前期 (一年)
<p>我々は、スーパーコンピュータ「富岳」を用いて、個々の星まで分解した高解像度銀河形成シミュレーションの達成を目指している。しかし、一部のタイムスケールの短い現象 (超新星爆発など) が、他の全ての粒子の時間積分に必要な演算・通信回数を数百倍に増大させ、現実的な時間内でのシミュレーション実行を不可能にしている。本研究では、ロードバランスを改善することを目的として、銀河内の時間刻みが短くなる領域 (超新星爆発など) を孤立系で計算する手法を試みている。そのためには、超新星爆発によるシェルが膨張し時間刻みが短くなる領域の物理量 (密度・熱エネルギー・3次元速度) の分布の変化を、実際には計算せずに事前に予測する必要がある。これまでは、将来の映像を予測する深層学習モデル Memory-In-Memory Network (Wang et al. 2018) を元に、シェル膨張に伴うガス密度変化を予測する深層学習モデルを開発した。本研究では、さらなる高速化と複数の物理量の予測の実現のために、3D-U-net (Ronneberger et al. 2015) をベースにモデルの拡張を試みる。</p>	

課題名	リンドープ非晶質炭素体に関する第一原理分子動力学計算
代表者名 (所属)	榎本 奨 (岡山大学 環境生命自然科学研究科)
利用システム名	Wisteria/BDEC-01 Aquarius
実施期間	一般枠前期 (一年)
<p>リンドープ非晶質炭素体 (DLC) の物性に関する実験上の研究はまだ少ない。リンドープしたその物性 (sp^3量、密度など) の変化について一貫した結論もまだない。Ab initio Molecular Dynamics (AIMD) 計算として知られる密度汎関数理論に基づく分子動力学計算では、実験パラメータを使用せずに電子レベルで理想的な条件下で材料物性を研究できる。液体急冷法は非晶質系の生成多く使用され、これに基づいて得られた結果は実験上の結果とよく一致していることが相関研究によって分かった。それ故、本研究は液体急冷法を使用して、リンドープ DLC の物性をよく調べたい。</p>	

課題名	MD シミュレーションによる HDM2 N 末端ドメイン Disordered Lid の構造ダイナミクスの探索
代表者名 (所属)	渡邊 一樹 (千葉大学 薬学研究院)
利用システム名	Wisteria/BDEC-01 Odyssey
実施期間	一般枠前期 (一年)
<p>HDM2 はがん抑制遺伝子 p53 の働きを制御し、細胞内環境保持に重要な役割を担うタンパク質である。この機能に重要な HDM2 の N 末端ドメインは高い運動性 (ダイナミクス) を有する末端の Lid と p53 結合サイトを含む Core の二つの領域からなる。これらの領域の相対的な位置関係の変化に伴って、HDM2 は p53 結合サイトが Lid で閉塞された “Closed state” と結合サイトが開放された “Open state” の二状態間で構造平衡を取ることが示唆されている。一方で最近 HDM2 の N 末端アミノ基と共有結合を形成し、p53 を不可逆的に阻害する化合物の中で、希薄溶液中と細胞内とで異なる反応性を示すものが報告された。このことから、HDM2 N 末端ドメインの構造平衡は希薄溶液中と細胞内では異なることが示唆される。希薄溶液中とは異なり、細胞内環境は分子が高密度に存在する “分子混雑環境” であり、着目分子の動態が変化することが知られている。そこで本研究では、生体分子の動態の詳細な解析ができる分子動力学計算により、分子混雑環境における HDM2 N 末端ドメインの Lid のダイナミクスや構造平衡を明らかにする。</p>	

課題名	深層強化学習を用いた矩形ダクト内二次流れの熱的制御
代表者名 (所属)	三谷 崇志 (岡山大学 環境生命科学研究科)
利用システム名	Wisteria/BDEC-01 Odyssey
実施期間	一般枠前期 (一年)
<p>流体が矩形ダクトなどの角を有する真っ直ぐな流路を流れるとき、主流と垂直な面内に角へと向かう二次流れが生じる。この二次流れは、主流と比較して数%の大きさではあるが、主流の平均的な分布や熱や物質の輸送に大きな影響を与える。また、臨界レイノルズ数付近における矩形ダクト内乱流において、下壁面を加熱、上壁面を冷却することで、平均二次流れのパターンが 8 つ渦パターンから 4 つ渦パターンへと変化する。しかし、4 つ渦パターンで安定化できる浮力パラメータの範囲は狭く、乱流制御には高度な制御手法が必要である。そこで本研究では、加熱量の制御に強化学習 (DQN) を取り入れる。強化学習を用いて加熱量を逐次的にフィードバック調節し、二次流れの熱的制御を自動で行うことを目指す。</p>	

課題名	発散磁場中のプラズマ膨張現象を対象とした PIC-MCC-DSMC コードの構築
代表者名 (所属)	江本 一磨 (横浜国立大学)
利用システム名	Oakbridge-CX Wisteria/BDEC-01 Odyssey Wisteria/BDEC-01 Aquarius
実施期間	一般枠前期 (一年)
<p>発散磁場中を膨張するプラズマを対象とし、PIC-MCC-DSMC 法による運動論シミュレーションで数値的に解析する。本研究課題では、人工衛星の主推進として期待される磁気ノズル推進機、また核融合プラズマにおけるダイバータ周辺を模擬する GAMMA 10/PDX を計算対象とする。異なる大きさ・密度・温度となる 2つのプラズマを解析することで、発散磁場中のプラズマ膨張の理論や相似則を確立することを目指す。計算対象はいずれも無衝突のプラズマであり、流体力学で記述される中性ガスの膨張過程とは異なる。無衝突プラズマ中でどのようにエネルギーが伝達されているかを明らかにし、プラズマ装置におけるエネルギー効率の向上を目指す。</p>	

課題名	磁気回転乱流における慣性領域を持つ特性のパラメータ依存性
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	Wisteria/BDEC-01 Odyssey Wisteria/BDEC-01 Aquarius
実施期間	一般枠前期 (一年)
<p>本研究の目的は、「2次元分割擬スペクトル法」というこれまで高エネルギー天体物理学で用いられたことのない高精度数値スキームを用いて、ブラックホール降着流におけるプラズマ乱流の特性を明らかにすることである。これにより、活動銀河核や X 線連星における降着流の理解が飛躍的に進むと期待できる。本研究で得られる結果は将来的に、国際プロジェクト Event Horizon Telescope によるブラックホールシャドウの観測に必要とされる理論モデルの構築や、高エネルギー宇宙線の起源を明らかにすることに繋がる。2022 年度に史上最高解像度のシミュレーションに成功したが、1 パラメータケースであったため、本年度は複数のパラメータについて調査をし、2022 年度に得られた結果の普遍性を検討する。</p>	

課題名	Acceleration of hydrogen/air turbulent non-premixed flame large eddy simulation using physics-informed neural network
代表者名 (所属)	Rahmat Waluyo (Institute of Industrial Sciences, The University of Tokyo)
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	一般枠前期 (半年)
<p>Numerical simulation has been used as a tool for designing combustion devices. Accurate simulation of reacting flows can be achieved by using large eddy simulation (LES) coupled with detailed chemical mechanism which requires large computational cost. Recent developments on physics-informed neural networks (PINN) offer a new approach to shorten computational time. Viability of PINN in accelerating turbulent non-premixed flame (TNF) LES is investigated.</p>	

課題名	Enhancing Japanese News Recommendation with Pre-trained Language Models and Graph-based Models
代表者名 (所属)	Boming YANG (東京大学 情報理工学系研究科)
利用システム名	mdx
実施期間	一般枠前期 (半年)
<p>The project aims to design and develop an advanced news recommendation system for Japanese news articles, which provides more accurate and personalized recommendations to users. The system will leverage pre-trained language models such as BERT to extract high-level features from news articles, which will be used to make more informed recommendations. In addition, graph neural networks such as GCN will be used to model the relationships between news articles, users, and their reading history.</p>	

課題名	Forest type classification and carbon stock estimation based on multi-source remote sensing datasets and deep learning method
代表者名 (所属)	裴慧卿 (東京大学 農学部国際森林環境学研究室)
利用システム名	Wisteria/BDEC-01 Aquarius
実施期間	一般枠前期 (半年)
<p>The project focuses on enhancing multidisciplinary research on forest society, remote sensing images, and deep-learning techniques to achieve carbon peaking and neutrality. Prerequisites for the purpose are the accurate classification of forest types and identifying forest type based carbon stock prediction. We will address the purpose through two research topic. Forest type classification and carbon stock estimation through multi-source remote sensing datasets and novel deep learning method.</p>	

課題名	クラックを含む資料の荷重への応答の分子動力学法を用いた解析
代表者名 (所属)	船橋 郁地 (東京大学 理学系研究科)
利用システム名	Oakbridge-CX
実施期間	一般枠前期 (半年)
<p>試料に含まれるクラックの表面は、試料への荷重に対する応答として運動し、試料の示す弾性波減衰やアコースティックエミッションなどの現象を引き起こしていると考えられるが、その運動を直接観察することは困難である。そこで、原子レベルの過程を可視化できる分子動力学法によって、クラックを含む資料への荷重をシミュレーションし、クラックの運動と荷重の関係や、クラックの運動が励起する弾性波についての知見を得る。サンプルサイズを調整することによって、境界条件の影響を取り除くとともに、結果のクラックの大きさに対する依存性を調べる。これによって、分子動力学法と実験の時間・長さスケールのギャップを埋め、結果を比較できるようにすることを目指す。</p>	

課題名	Geomechanical modeling of fault stability and fluid leakage with distributed strain measurement
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	Wisteria/BDEC-01 Aquarius
実施期間	一般枠前期 (一年)
<p>Geological CO₂ storage is an essential technology for mitigating greenhouse gas emissions. However, potential CO₂ leakage from storage reservoirs is a major concern due to the risk of environmental and safety hazards. In this study, we are trying to develop a geomechanical model for fault stability and fluid leakage that incorporates distributed strain measurement. The model will be applied to the analysis of CO₂ storage in geological formations to assess the risk of CO₂ leakage through faults.</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 理学系研究科)
利用システム名	Wisteria/BDEC-01 Odyssey
実施期間	一般枠前期 (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。マントルの下部熱境界層である D" 領域では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の形成が予想されている。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の課題があった。また短周期までの正確な理論地震波形の計算は計算資源の問題から困難であった。それに加え、マントル最下部と外核最上部には構造推定においてトレードオフが存在している。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 を用いて外核最上部の影響を考慮した D" 領域の S・P 波速度構造を同時推定する。</p>	

課題名	Intelligent traffic QA system for large-scale traffic data
代表者名 (所属)	Chen Linyao (Center of Spatial Information Science, The University of Tokyo)
利用システム名	Wisteria/BDEC-01 Aquarius
実施期間	一般枠前期 (半年)
<p>This research focus on traffic QA(Query and answer), which involves answering questions related tottraffic conditions, such as road closures, traffic incidents, and trajectory information, includingdistance traveled or traffic times. we propose a new paradigm for building traffic QA systems,solving the lack of a traffic system for various queries in natural language format, which is the firstwork, to the best of our knowledge.</p>	

以上