



Title	センター報告 サイバーメディアHPCジャーナル No. 11
Author(s)	
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2021, 11, p. 81-113
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/87680
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

センター報告

・ 2020 年度大規模計算機システム利用による研究成果・論文一覧	83
・ 第 26 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2020)報告および 第 27 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2021)告知	95
・ 大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	97
・ 2021 年度大規模計算機システム利用講習会	99
・ 2020 年度大規模計算機システム利用講習会アンケート集計結果	100
・ 2021 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況	108
・ 2021 年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	109
・ 2020 年度大規模計算機システム公募型利用制度（追加募集）の活動状況	110
・ 2021 年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況	111
・ 大規模計算機システム Q&A	112

2020 年度大規模計算機システム利用による研究成果・論文一覧

この一覧は、本センター大規模計算機システムを利用して 2020 年 4 月から 2021 年 3 月までに得られた研究成果について、利用者から報告されたものを掲載しています。

1. 学術雑誌掲載論文

- [1] Chun-Chieh Yu, Kuo-Yang Chiang, Masanari Okuno, Takakazu Seki, Tatsuhiko Ohto, Xiaqing Yu, Vitaly Korepanov, Hiro-o Hamaguchi, Mischa Bonn, Johannes Hunger, and Yuki Nagata, “Vibrational couplings and energy transfer pathways of water’s bending mode”, *Nat. Commun.*, 11, 5977, 2020.
- [2] Jingzhao Xia, Takahiro Hirai, Shoichiro Katayama, Haruki Nagae, Wanbin Zhang, and Kazushi Mashima, “Mechanistic Study on Bimetallic Dual Catalyst for Asymmetric C—C Bond Formation; Asymmetric Coupling of 1, 3-Dienes with C-nucleophiles to Construct Vicinal Stereocenters Mediated by Ni/Cu Dual Catalysis”.
- [3] Yasushi Nishida, Katsuhiro Honda, “Visualization of Potential Technical Solutions by SOM and Co-clustering and Its Extension to Multi-view Situation”, *Journal of Advanced Computational Intelligence and Intelligent Informatics (JACIII)*, Vol.24, No.1, pp.65-72, 2020.
- [4] Yasushi Nishida, Katsuhiro Honda, “SOM-Based Visualization of Potential Technical Solutions with Fuzzy Bag-of-Words Utilizing Multi-view Information”, *Proc. of 8th International Symposium on Integrated Uncertainty in Knowledge Modelling and Decision Making*, Phuket, Thailand, [online], pp.187-198, 2020.
- [5] Y. Ueki, H. Murashima, M. Shibahara, “Molecular dynamic study of evaporation in nanoslit: Influence of slit geometry and wettability”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 163, 2020.
- [6] Fujii, K. Fujiwara, Y. Ueki, M. Shibahara, “Molecular dynamics simulation on effects of nanostructure on interfacial thermal resistance during condensation”, *Journal of Thermal Science and Technology*, 15, 2020.
- [7] Sadataka Furui and Serge Dos Santos, “Application of Quaternion Neural Networks to Time Reversal Based Nonlinear Elastic Wave Spectroscopy”, *arXiv:2010.09487 (v5) [physics.gen-ph]*.
- [8] Yoshiyuki Miyamoto, “Selecting Carbon Nanotubes with Diameters of Less than 1 nm by Laser Pulses: An Ab Initio Exploration”, *Nano Letters*, 20, 4416-4421 (2020), March. 2021.
- [9] Yoshiyuki Miyamoto, “Polarization as a new parameter determining the laser-induced dynamics of carbon nanotubes studied by ab initio simulations”, *Carbon*, 172, 372-378 (2020), Oct. 2020.
- [10] Yoshiyuki Miyamoto, Hitomi Nakamura and Tomoko Akai, “Franck-Condon relaxation in photo-excited YAG:Ce studied using real-time time-dependent density functional theory”, *Journal of Luminescence*, Vol. 229, 117647 (2021), Jan. 2021.
- [11] Akio Ishii, “Energetics of heterogeneous Mg{10-12} deformation twinning migration using an atomistically informed phase-field model”, *Comput. Mater. Sci.*, 183, 109907, 2020.
- [12] Firdaus Mohamad, Takeo Kajishima, “Large-eddy simulation of unsteady pitching airfoil using a one-equation subgrid scale (SGS) model based on dynamic procedure”, *Journal of Mechanical Engineering*, Vol.18, No.1, pp.157-173, Jan. 2021.
- [13] D. Nakamura, R. Tasaki, M. Kawamoto, H. Oshima, M. Higashihara, H. Ikenoue, T. Wakayama, A. Sunahara, and T. Higashiguchi, “Silicon twisted cone structure produced by optical vortex pulse with structure evaluation by radiation hydrodynamic simulation”, *Scientific reports*, 10, (2020) 20512.
- [14] E. Miura, Y. Mori, K. Ishii, S. Sakata, Y. Abe, Y. Arikawa, N. Nakajima, R. Takizawa, H. Moerita, K. Matuso, S. R. Miffayzi, A. Sunahara, T. Ozaki, A. Iwamoto, O. Komeda, R. Hanayama, S. Okishara, Y. Sentoku, S. Fujioka, H. Sakagami, T. Johzaki, Y. Kitagawa, “Verification of fast heating of core plasmas produced by counter-illumination of implosion lasers”, *High Energy Density Physics of Physics*, D 37, 100890, 2020.

- [15] Kunichika Tsumoto, Takashi Ashihara, Narumi Naito, Takao Shimamoto, Akira Amano, Yasutaka Kurata, Yoshihisa Kurachi, “Specific decreasing of Na⁺ channel expression on the lateral membrane of cardiomyocytes causes fatal arrhythmias in Brugada syndrome”.Scientific Reports, 17;10(1):19964. doi: 10.1038/s41598-020-76681-3, 2020 Nov.
- [16] 山崎龍朗, 小田豊, 松本亮介, 香月正司, “脈動を伴う平行平板間乱流熱伝達のDNS”, 日本機械学会論文集, Vol. 86, No. 884, p. 19-00197, Apr. 2020.
- [17] T. Yamazaki, Y. Oda, R. Matsumoto and M. Katsuki, “Effect of thermal wall condition on the dissimilarity of momentum and heat transfer in pulsating channel flow”, Journal of Thermal Science and Technology, Vol. 15, No. 2, p. JTST0017, Aug. 2020.
- [18] Suzuki, S.; Yamaguchi, D.; Uchida, Y.; Naota, T, “Hysteretic Control of Near-infrared Transparency Using a Liquescent Radical Cation”, Angew. Chem., Int. Ed., 60, 8284-8288., (DOI: 10.1002/anie.202016930), 2021.
- [19] Takashi Ohta, Daiki Eguchi and Akihiro Hayashi, “Calibration and evaluation of a spatial scaling method for the near-wall turbulent flow of viscoelastic fluids”, Journal of Turbulence, Vol.21, No.11, pp.607-631, Sep. 2020.
- [20] Takashi Ohta, Takafumi Ichiyanagi and Taisei Tanaka, “Direct numerical simulation of solidifying liquid turbulence using the phase-field model”, Mechanical Engineering Letters, Vol.6, pp.20-00327, Nov. 2020.
- [21] T. Fujimaki, M. Suzuki, and S. Kakio, “Analysis of leaky surface acoustic waves on quartz thin plates bonded to similar-material substrate”, Jpn. J. Appl. Phys, vol. 60, no. SD, pp. SDDC04-1-6, 2021.
- [22] 西田修三, 山西悟志, 中谷祐介, 入江政安, “高閉鎖性海域の水質底質特性と発電所取放水の影響解析”, 土木学会論文集B2 (海岸工学, 76(2), I_913-I_918, 2020.
- [23] 中谷祐介, 戸村祐希, 西田修三, “非構造格子モデルを用いた瀬戸内海 - 太平洋領域における外洋水の挙動解析”, 土木学会論文集B2 (海岸工学) , 76(2), I_997-I_1002, 2020.
- [24] T. Hiejima, “Helicity effects on inviscid instability in Batchelor vortices”, Journal of Fluid Mechanics, 897 [8], A37, 28 pages, 2020.
- [25] T. Hiejima, “How the circulation and axial velocity deficit in Batchelor vortices affect their disturbance growth?”, Physics of Fluids, 32 [7], 76107, 8 pages, 2020.
- [26] K. Iwano, T. Yamaguchi, and H. Okamoto*, “Ultrabosonic behavior in photoexcited one-dimensional Mott insulators in the region of weak inter-site Coulombic interaction”, Physical Review B, 102, 245114, 2020.
- [27] T. Yamaguchi, K. Iwano, T. Miyamoto*, N. Takamura*, N. Kida*, Y. Takahashi**, T. Hasegawa*, and H. Okamoto*, “Excitonic optical spectra and energy structures in a one-dimensional Mott insulator demonstrated by applying a many-body Wannier functions method to a charge model”, Physical Review B, 103, 45124, 2021.
- [28] Ryu Ezaki, Yasuhiro Mizutani, Naoki Ura, Tsutomu Uenohara, Yoshihiko Makiura, Yasuhiro Takaya, “Fabrication of three-dimensional high-aspect-ratio structures by oblique-incidence Talbot lithography”, Optics Express, Vol.28, No.24, 36924-36935, 2020.
- [29] Hajime Yoshino, SciPost Phys. Core, 2, 005, 2020.
- [30] T. Yamamura, “Numerical analysis on a conical shaped target for laser fusion rocket”, High Energy Density Physics, 37, 100894, 2020.
- [31] Huan Li, Shohei Sakata, Tomoyuki Johzaki, Xiaobin Tang, Kazuki Matsuo, Seungho Lee, King Fai Farley Law, Yasunobu Arikawa, Yugo Ochiai, Chang Liu, Jo Nishibata, Ryunosuke Takizawa, Hiroki Morita, Hiroshi Azechi, Yasuhiko Sentoku, Shinsuke Fujioka, “Enhanced relativistic electron beams intensity with self-generated resistive magnetic field”, High Energy Density Physics, Volume 36, 2020.
- [32] S. Lee, D. Kawahito, N. Iwata, Y. Sentoku, K.F.F. Law, S. Sakata, H. Morita, K. Matsuo, Y. Arikawa, K. Shigemori, T. Sano, H. Nagatomo, K. Mima, H. Azechi, R. Kodama, S. Fujioka, “Two-color laser-plasma interactions for efficient production of non-thermal hot electrons”, High Energy Density Physics, Volume 36, 2020.
- [33] K. F. F. Law, Y. Abe, A. Morace, Y. Arikawa, S. Sakata, S. Lee, K. Matsuo, H. Morita, Y. Ochiai, C. Liu, A. Yogo, K. Okamoto, D. Golovin, M. Ehret, T. Ozaki, M. Nakai, Y. Sentoku, J. J. Santos, E.

- d'Humières, Ph. Korneev, and S. Fujioka, “Relativistic magnetic reconnection in laser laboratory for testing an emission mechanism of hard-state black hole system”, *Phys. Rev. E*, 102, 33202, 2020.
- [34] Hagita, K.; Murashima, “Hagita, K.; Murashima, T. Effect of Chain-Penetration on Ring Shape for Mixtures of Rings and Linear Polymers”, *Polymer* 2021, 218, 123493.
- [35] Hagita, K.; Murashima, “T. Multi-Ring Configurations and Penetration of Linear Chains into Rings on Bonded Ring Systems and Polycatenanes in Linear Chain Matrices”, *Polymer* 2021, 123705. (in press).
- [36] Y. Gao and S. Okada, “Edge Morphology effect on field emission properties of graphene thin films”, *Carbon*, 157, 33-39, 2020.
- [37] K. Hisama, S. Chiashi, S. Maruyama, and S. Okada, “Energetics and electronic structures of single walled carbon nanotubes encapsulated in boron nitride nanotubes”, *Applied Physics Express*, 13, 015004, 2020.
- [38] M. Maruyama and S. Okada, “Asymptotic behaviors of the energetics and electronic structures of graphene with pyridinic defects”, *Chemical Physics Letters*, 739, 136966, 2020.
- [39] K. Yoneyama, M. Maruyama, Y. Gao, and S. Okada, “Mechanical properties of carbon nanotube under uniaxial tensile strain”, *Japanese Journal of Applied Physics*, 59, SIID02, 2020.
- [40] Y. Gao and S. Okada, “Structural effects on carrier doping in carbon nanotube thin-film transistors”, *Journal of Applied Physics*, 127, 134301, 2020.
- [41] Y. Gao, M. Maruyama, and S. Okada, “Influence of interlayer stacking arrangements on carrier accumulation in bilayer graphene field effect transistors”, *Applied Physics Express*, 13, 65006, 2020.
- [42] M. Maruyama, K. Nagashio, and S. Okada, “Influence of interlayer stacking on gate-induced carrier accumulation in a bilayer MoS₂”, *ACS Applied Electronic Materials*, 2, 1352–1357, 2020.
- [43] S. Okada, M. Maruyama, and Y. Gao, “Asymmetric Carrier Penetration into Hexagonal Boron Nitride in Graphene Field Effect Transistor”, *Applied Physics Express*, 13, 75005, 2020.
- [44] H. Tomori, M. Maruyama, and S. Okada, “Electronic structure of graphene under uniaxial tensile strain”, *Japanese Journal of Applied Physics*, 59, 75002, 2020.
- [45] M. Maruyama, Kosuke Nagashio, and S. Okada, “Carrier distribution control in van der Waals heterostructures of MoS₂ and WS₂ by field-induced band-edge engineering”, *Physical Review Applied*, 14, 44028, 2020.
- [46] T. Kawata and T. Tsukahara, “Scale interactions in turbulent plane Couette flows in minimal domains”, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 911, A55, Feb. 2021.
- [47] H. Morimatsu and T. Tsukahara, “Laminar-turbulent intermittency in annular Couette-Poiseuille flow: Whether a puff splits or not”, *Entropy*, Vol. 22, Issue 12, 1353, Nov. 2020.
- [48] K. Takeda, Y. Duguet, and T. Tsukahara, “Intermittency and critical scaling in annular Couette flow”, *Entropy*, Vol. 22, Issue 9, 988, Sep. 2020.
- [49] S. Fujimura, K. Yamamoto, M. Motosuke, and T. Tsukahara, “Numerical study of thermocapillary-driven flow of a micro bubble on locally heated wall”, *Heat Transfer Research*, Vol. 51, No. 12, 1087-1104, Aug. 2020.
- [50] T. Shimazaki, A. Yamamoto, “t Hooft surface in lattice gauge theory”, *Phys. Rev. D*, 102, 34517, 2020.
- [51] K. Iwano, T. Yamaguchi, and H. Okamoto, “Ultrabosonic behavior in photoexcited one-dimensional Mott insulators in the region of weak intersite Coulombic interaction”, *Physical Review B*, 102, 245114, 2020.
- [52] T. Yamaguchi, K. Iwano, T. Miyamoto, N. Takamura, N. Kida, Y. Takahashi, T. Hasegawa, and H. Okamoto, “Excitonic optical spectra and energy structures in a one-dimensional Mott insulator demonstrated by applying a many-body Wannier functions method to a charge model”, *Physical Review B*, 103, 045124, 2021.
- [53] Etsuko Itou^{1, 2, 3} and Yuki Nagai^{4, 5}, “Sparse modeling approach to obtaining the shear viscosity from smeared correlation functions”, *Journal of High Energy Physics*, 07, 007, 2020.
- [54] Takuya Furusawa^{1, 2}, Yuya Tanizaki³, and Etsuko Itou^{4, 5, 6}, “Finite-density massless two-color QCD at the isospin Roberge-Weiss point and the t Hooft anomaly”, *Physical Review Research*, 2,

- 033253, 2020.
- [55] Toshiaki Fujimori¹, Etsuko Itou^{1, 2, 3}, Tatsuhiro Misumi^{1, 4}, Muneto Nitta¹, and Norisuke Sakai¹, “Lattice $\mathbb{C}PN-1$ model with $\mathbb{Z}N$ twisted boundary condition: bions, adiabatic continuity and pseudo-entropy”, *Journal of High Energy Physics*, 08, 011, 2020.
 - [56] Kei Iida¹, Etsuko Itou^{1, 2, 3}, and Tong-Gyu Lee^{1, 4}, “Relative scale setting for two-color QCD with $N_f=2$ Wilson fermions”, *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, 2021, 013B05, 2021.
 - [57] Hiroaki Kouno, Takehiro Hirakida, “The persistent homology analyses in particle and nuclear physics”, *Reports of the Faculty of Science and Engineering, Saga University*, Vol. 49, No.1, pp.1~5, 2020.
 - [58] Masayasu Hasegawa, “Monopole and instanton effects in QCD”, *J. High Energ. Phys.*, 2020, 113, 2020.
 - [59] Nodoka Yamanaka, Hideaki Iida, Atsushi Nakamura, Masayuki Wakayama, “Dark matter scattering cross section and dynamics in dark Yang-Mills theory”, *Physics Letters B*, 813, 136056, 2021.
 - [60] Nodoka Yamanaka, Hideaki Iida, Atsushi Nakamura, Masayuki Wakayama, “Glueball scattering cross section in lattice $SU(2)$ Yang-Mills theory”, *Physical Review D*, 102, 054507, 2020.
 - [61] Hiroki Ohata and Hideo Suganuma, “Gluonic-excitation energies and Abelian dominance in $SU(3)$ QCD”, *Physical Review D*.
 - [62] Hiroki Ohata and Hideo Suganuma, “Clear correlation between monopoles and the chiral condensate in $SU(3)$ QCD”, *Physical Review D*.
 - [63] Sibow Wang, Qiang Zhao, Peter Ring, and Jie Meng, “Nuclear matter in relativistic Brueckner-Hartree-Fock theory with Bonn potential in the full Dirac space”, *arXiv:2103.12960*, 2021.
 - [64] J. Hu, S. Bao, Y. Zhang, K. Nakazato, K. Sumiyoshi and H. Shen, “Effects of symmetry energy on the radius and tidal deformability of neutron stars”, *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, 043D01, 20 pages, 2020.
 - [65] C. Nagele, H. Umeda, K. Takahashi, T. Yoshida and K. Sumiyoshi, “The final fate of supermassive $M \sim 5 \times 10^4 M_{\odot}$ Pop III stars: explosion or collapse?” *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 296, 1224-1231, 2020.
 - [66] Harada, H. Nagakura, W. Iwakami, H. Okawa, S. Furusawa, K. Sumiyoshi, H. Matsufuru and S. Yamada, “The Boltzmann-radiation-hydrodynamics simulations of core-collapse supernovae with different equations of state: the role of the nuclear composition and the behavior of neutrinos”, *Astrophysical Journal*, 902, 150, 25 pages, 2020.
 - [67] W. Iwakami, H. Okawa, H. Nagakura, A. Harada, S. Furusawa, K. Sumiyoshi, H. Matsufuru and S. Yamada, “Simulations of the early post-bounce phase of core-collapse supernovae in three-dimensional space with full boltzmann neutrino transport”, *Astrophysical Journal*, 903, 82, 24 pages, 2020.
 - [68] Y. Suwa, A. Harada, K. Nakazato and K. Sumiyoshi, “Analytic solutions for neutrino-light curves of core-collapse supernovae”, *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, 2021, 013E01, 12 pages, 2020.
 - [69] K. Sumiyoshi, S. Fujibayashi, Y. Sekiguchi and M. Shibata, “Properties of neutrino transfer in a deformed remnant from neutron star merger”, *Astrophysical Journal*, 907, 92, 23 pages, 2021.
 - [70] M. Mori, Y. Suwa, K. Nakazato, K. Sumiyoshi, M. Harada, Y. Koshio, R. A. Wendell and A. Harada, “Developing an end-to-end simulation framework of supernova neutrino detection”, *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, 2021, 023E01, 21 pages, 2020.
 - [71] R. Akaho, A. Harada, H. Nagakura, K. Sumiyoshi, W. Iwakami, H. Okawa, S. Furusawa, H. Matsufuru and S. Yamada, “Multi-dimensional Boltzmann neutrino transport code in full general relativity for core-collapse simulations”, *Astrophysical Journal*, 909, 210, 17 pages, 2021.
 - [72] Hiraguchi, K. Ishiguro and T. Suzuki, “New Abelian-like monopoles and the dual Meissner effect”, *Phys. Rev. D*, 102, 114504-(1-9), 2020.
 - [73] Begun, A. Nakamura, V.G. Bornyakov, V.A. Goy, R.N. Rogalyov, “Study of two color QCD on large lattices”, *Phys. Rev. D*.
 - [74] M. Wakayama, S-i. Nam and A. Hosaka, “Use of the canonical approach in effective models of QCD”, *PHYSICAL REVIEW, D*, 102, 034035, 2020.

2. 国際会議会議録掲載論文

- [1] Haruka Taniguchi, Koichi Tsujimoto, Toshihiko Shakouchi, Toshitake Ando, Mamoru Takahashi, "DNS ANALYSIS OF MULTIPLE IMPINGING JETS UNDER OSCILLATION CONTROL", Proc. the 31th International Symposium on Transport Phenomena, 5p, Oct. 2020.
- [2] Kentaro Echigo, Koichi Tsujimoto, Toshihiko Shakouchi, Toshitake Ando, Mamoru Takahashi, "FLOW AND HEAT TRANSFER CHARACTERISTICS OF IMPINGING JETS EXCIED WITH BLOOMING CONTROL", Proc. the 31th International Symposium on Transport Phenomena, 5p, Oct. 2020.
- [3] K. Echigo, K. Tsujimoto, T. Shakouchi, T. Ando, M. Takahashi, "Direct numerical simulations of free jets emerging from a precessing nozzle", Proc. the 22nd Australasian Fluid Mechanics Conference, 4p.
- [4] Hiroki Kijima, Naitoh Ken, Tomotaka Kobayashi, Yuya Yamashita, "Spatial transition point from laminar flow to turbulence in a circular pipe with bellmouth inlet by solving a weakly-stochastic Navier-Stokes equation", AIAA Scitech 2021 Forum, Oct. 2020.
- [5] T. Fujimaki, M. Suzuki, and S. Kakio, "Analysis of leaky surface acoustic waves on quartz thin plates bonded to similar-material substrate", Proceedings of the 41st Symposium on Ultrasonics Electronics, 1Pa3-2, Nov. 2020.
- [6] Numerical simulation of intrusion behavior of oceanic water into the Seto Inland Sea, Japan, "Proc. the 30th Int. Ocean and Polar Eng. Conf", Vol.III, 2683-2688, 2020.
- [7] Y. Ogino, S. Nitta, S. Asai and T. Sano, "Development of weld quality monitoring technique by using a visual sensor and numerical simulation", Joint intermediate meeting of IIW Comm, I, IV, XII and SG212, Doc. XII-2467-2021 / 212-1691-2021 / IV-1477-2021 / I-1468-2021, March, 2021.
- [8] Tsutomu Uenohara, Yasuhiro Mizutani, Yasuhiro Takaya, "SUB-MICROMETER SCALE LASER MACHINING USING POSITION CONTROLLED PHOTONIC NANOJET", Leading Edge Manufacturing/Materials&Processing 2020, 8511, 2020.
- [9] Reza Aulia Rahman, Tsutomu Uenohara, Yasuhiro Mizutani, Yasuhiro Takaya, "IN-LIQUID LASER NANOMACHINING BY PHOTONIC NANOJET IN LASER TRAPPING SYSTEM", Leading Edge Manufacturing/Materials&Processing 2020, 8500, 2020.
- [10] T. Morita, "Experimental and numerical studies on the thrust generation for laser-fusion-powered spacecraft, AAPPS-DPP2020 as e-conference", 4th Asia Pacific Conference on Plasma Physics, 26-31, October, 2020.
- [11] R. Sakakibara, T. Nimura, T. Tsukahara, and T. Ishida, "Critical roughness heights of turbulent transition on a swept laminar-flow wing", In: Proc. of AIAA SciTech 2021 Forum, (Virtual Event), AIAA, 2021-1854, (11 pages), Jan. 2021.
- [12] R. Sakakibara, T. Nimura, T. Ishida, and T. Tsukahara, "DNS-NPSE analysis of turbulent transition on swept wing with roughness elements", In: Abstracts Proc. of the joint 14th World Congress in Comput. Mech. and ECCOMAS Congress (WCCM-ECCOMAS CONGRESS), Paris, France (virtual), 3673, Jan. 2021.
- [13] K. Takeda, Y. Duguet, and T. Tsukahara, "DNS study of annular Couette flow for low-high radius ratio in subcritical transition", In: Proc. of 17th Int. Conf. on Flow Dynamics (ICFD2020), Sendai, Japan (virtual), pp. 448-451, Oct. 2020.
- [14] H. Matsufuru and K. Sumiyoshi, "Acceleration of Boltzmann Equation for Core-Collapse Supernova Simulations on PEZY-SC Processors", Lecture Notes in Computer Science book series, Vol. 12251, 177-192, 2020.
- [15] M. Wakayama, Y. Murakami, A. Nakamura, M. Sekiguchi and H. Wada, "Spectroscopy of all mesons from lattice QCD with the truncated overlap fermions", World Scientific, Hadron2019, 104-108, 2020.

3. 国内研究会等発表論文

- [1] Haruki Nagae, Jingzhao Xia, Shoichiro Katayama, Takahiro Hirai, Wanbin Zhang, and Kazushi Mashima, "Mechanism of Asymmetric Coupling of 1, 3-Dienes and C-Nucleophiles by Ni/Cu Cooperative Catalysts by DFT Calculations", 日本化学会第 101 春季年会, オンライン開催, 2021 年 3 月 22 日.
- [2] Takahiro Hirai, Jingzhao Xia, Shoichiro Katayama,

- Haruki Nagae, Wanbin Zhang, Kazushi Mashima, “Asymmetric Coupling of 1, 3-Dienes and C-Nucleophiles by Ni/Cu Cooperative Catalysts Bearing Planer Chiral Diphosphine Ligand”, 日本化学会 第 101 春季年会, オンライン開催, 2021 年 3 月 22 日.
- [3] 原子シミュレーションに基づく結晶材料の塑性変形素過程の解析, “日本金属学会 2021 年春季講演大会・公募シンポジウム S6「プラストンの材料科学VIII」”, オンライン開催, 2021 年 3 月 16-19 日.
- [4] MAX相セラミックスおよび高分子ラメラ相におけるキンク形成過程の分子動力学解析, “日本物理学会第 76 回年次大会・共催シンポジウム「ミルフィーユ構造の材料科学」”, オンライン開催, 2021 年 3 月 12 日.
- [5] 第一原理に基づいたアルミニウム合金中のナノ析出物形成のマルチスケールモデリング, “日本材料学会マルチスケール材料力学部門 第 69 期第 2 回部門委員会”, オンライン開催, 2020 年 12 月 23 日.
- [6] 高分子系およびセラミックス系ミルフィーユ構造のキンク形成における変形素過程の微視的解析, “日本金属学会 2020 年秋期講演大会・公募シンポジウム S1「ミルフィーユ構造の材料科学III」”, オンライン開催, 2020 年 9 月 15-18 日.
- [7] 越後謙太郎, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “歳差運動するノズルから噴出する自由噴流のDNS”, 日本機械学会 2020 年度年次大会講演論文集, 5p, Sep. 2020.
- [8] 谷口晴香, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “振動制御した多重衝突噴流の流動・伝熱特性”, 日本機械学会 2020 年度年次大会講演論文集, 4p, Sep. 2020.
- [9] 谷口晴香, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “DMDを用いた振動制御した多重衝突噴流の解析”, 第 98 期日本機械学会流体工学部門講演会, 4p, Nov. 2020.
- [10] 越後謙太郎, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “歳差運動するノズルから噴出する自由噴流の構造解析”, 第 98 期日本機械学会流体工学部門講演会, 4p, Nov. 2020.
- [11] 越後謙太郎, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “DNSによる傾斜回転制御した自由噴流の初期条件の検討”, 日本機械学会東海支部第 70 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2021.
- [12] 谷口晴香, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “DNSによる振動制御した多重衝突噴流の流動・伝熱特性”, 日本機械学会東海支部第 70 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2021.
- [13] 磯部 佑磨, 植木 祥高, 芝原 正彦, “伝熱面における微細構造が蒸発に与える影響に関する分子動力学的研究”, 日本機械学会 関西支部 第 96 期定時総会講演会, 2021 年 3 月.
- [14] 本川 祐輝, 藤原 邦夫, 植木 祥高, 芝原 正彦, “界面固体構造接点における熱輸送機構に関する分子動力学的研究”, 日本機械学会 関西学生会 2020 年度学生員卒業研究発表講演会, 2021 年 3 月 1 日.
- [15] 堤祐太, 植木祥高, 藤原邦夫, 松本亮介, 芝原正彦, “様々な濡れ性の固体表面における水滴の冷却および結晶化についての分子動力学的研究”, 日本機械学会熱工学カンファレンス, 2020 年 10 月 1 日.
- [16] 西健太郎, 藤原邦夫, 芝原正彦, “固体表面構造が固液界面の局所熱輸送機構に及ぼす影響に関するスペクトル解析”, 日本機械学会熱工学カンファレンス, 2020 年 10 月.
- [17] 植木祥高, 村島秀明, 芝原正彦, “ナノスリット内の液体の蒸発に関する分子動力学的研究: 構造特性と濡れ性が与える影響”, 日本機械学会熱工学カンファレンス, 2020 年 10 月.
- [18] 内田翔太, 藤原邦夫, 芝原正彦, “SiO₂ 壁面構造が水の凝固現象に及ぼす影響に関する分子動力学解析”, 日本機械学会 2020 年度年次大会.
- [19] 藤原邦夫, 芝原正彦, “固液界面領域内の単原子スケール熱輸送場に関する古典分子動力学解析”, 第 57 回日本伝熱シンポジウム 2020 年 6 月, 2020 年 6 月.
- [20] 内田翔太, 藤原邦夫, 芝原正彦, “SiO₂ 壁面近傍の水の凝固状態に関する分子動力学的研究”, 第 57 回日本伝熱シンポジウム 2020 年 6 月, 2020 年 6 月.
- [21] 藤井彰人, 藤原邦夫, 植木祥高, 芝原正彦, “凝縮時のエネルギー輸送におけるナノ構造の影響に関する分子動力学的研究”, 第 57 回日本伝熱シンポジウム 2020 年 6 月, 2020 年 6 月.
- [22] 山本幸宏, 藤原邦夫, 植木祥高, 小原拓, 芝原正彦, “ナノ粒子懸濁液のエネルギー輸送機構に関する分子動力学的研究”, 第 57 回日本伝

熱シンポジウム 2020 年 6 月, 2020 年 6 月.

- [23] 植木祥高, 村島秀明, 芝原正彦, “ナノスリット内の液体の蒸発に関する分子動力学的研究”, 第 57 回日本伝熱シンポジウム 2020 年 6 月, 2020 年 6 月.
- [24] Sadataka Furui and Serge Dos Santos, “Application of Quaternion Neural Networks to Time Reversal based Nonlinear Elastic Wave Spectroscopy”, 日本物理学会, 2020 年年会概要集, 3/19 発表.
- [25] Sadataka Furui, “Anomaly detection in materials by a convolution of nonlinear phonetic wave and its time reversed wave using deep neural network techniques”, 日本物理学会, 2021 年年会概要集, 3/15 発表予定.
- [26] Sadataka Furui, “The Atiyah-Patodi-Singer Index Theorem and Lattice Simulations”, American Physical Society, April Meeting 2021, Abstracts, "4/20 発表予定.
- [27] 宮本良之, “超短パルスレーザーを利用した炭素材料およびその周辺材料の反応誘起: 第一原理計算による提案”, レーザー学会第 41 回年次大会.
- [28] 宮本良之, “レーザー偏光に依存したカーボンナノチューブのフェムト秒ダイナミクス”, 日本物理学会第 76 回年次大会, March. 2021.
- [29] 折崎 真哉, 梶島 岳夫, “水中超音波により引き起こされる界面現象の数値シミュレーション”, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, D03-4, Dec. 2020.
- [30] 藤井 健博, 大森 健史, 梶島 岳夫, “すべり境界条件に対する埋め込み境界射影法の開発”, 日本機械学会第 98 期流体工学部門講演会講演論文集, OS06-13, Nov. 2020.
- [31] 岡林 希依, 古川 歩夢, 大津 雄, 梶島 岳夫, “キャビテーション乱流の非定常解析における翼性能再現性向上のための検討”, 混相流シンポジウム 2020 講演論文集, No. 0136, Aug. 2020.
- [32] 古川 歩夢, 岡林 希依, 梶島 岳夫, “シートキャビティ周りの流線に基づくキャビテーションモデルの検討”, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, B03-2, Dec. 2020.
- [33] 赤木 優太, 岡林 希依, 竹内 伸太郎, 梶島 岳夫, 安 炳辰, 能見 基彦, 大淵 真志, “円筒で囲まれた回転-静止円盤間流れの全体安定性解析におけるパラメータ収束性”, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, A06-4, Dec. 2020.
- [34] 三輪 敦俊, 大森 健史, 梶島 岳夫, “静電相互作用を考慮した気液二相流の数値解析”, 日本流体力学会第 34 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 2020.
- [35] 五十嵐大智, 山下雄也, 曾我部康浩, 内藤健, 小長谷礼美, “多重衝突パルス噴流圧縮原理に関する数値解析研究: 燃焼室内の 3 次元応力分布”, 第 64 回宇宙科学技術連合講演会, Oct. 2020.
- [36] 鈴木颯人, 木嶋洋貴, 内藤健, “多重衝突パルス噴流圧縮原理に関する数値解析: マルチグリッド化の検討”, 第 64 回宇宙科学技術連合講演会, Oct. 2020.
- [37] 砂原淳, “レーザーアブレーションの数値モデリング”, at 41th Annual Meeting of the Laser Society of Japan, 招待講演, January18– January 20, 2021.
- [38] Kunichika Tsumoto, Takashi Ashihara, Narumi Naito, Takao Shimamoto, Akira Amano, Yasutaka Kurata, Yoshihisa Kurachi, “Development of fatal arrhythmias mediating subcellular Na channel expression changes: in silico study”, The 96th Annual Meeting of the Physiological Society Japan, Beppu Convention Center B-CON PLAZA (Beppu), Japan., Mar 2020.
- [39] Yasutaka Kurata, Kunichika Tsumoto, Ichiro Hisatome, Yu-ichi Kuda, Mamoru Tanida, “Controlling phase-2 early afterdepolarizations in human ventricular myocytes: A theoretical study using bifurcation analyses of two mathematical models”, The 96th Annual Meeting of the Physiological Society Japan, Beppu Convention Center B-CON PLAZA (Beppu), Japan., Mar 2021.
- [40] Takao Shimamoto, Kunichika Tsumoto, Yasutaka Kurata, Akira Amano, “Coordinately early afterdepolarizations evoked in ventricular tissue trigger reentrant arrhythmias: in silico study”, The 96th Annual Meeting of the Physiological Society Japan, Beppu Convention Center B-CON PLAZA (Beppu), Japan., Mar 2021.
- [41] 倉田康孝, 津元国親, 九田裕一, 谷田守, “ヒト心室筋細胞における早期後脱分極の発生機序と合理的制御法の非線形力学的解析”, 第 67 回中部日本生理学会大会, web開催, 大会予稿集, p.27, Oct 16–20, 2020.

- [42] 津元国親, 島本貴生, 天野晃, 九田裕一, 谷田守, 倉田康孝, “ヒト心筋細胞の早期後脱分極応答に起因した不整脈トリガー: in silico研究. 第 67 回中部日本生理学会大会”, 第 67 回中部日本生理学会大会, web開催, 大会予稿集, p.55, Oct 16–20, 2020.
- [43] 山崎龍朗, 小田豊, 松本亮介, 香月正司, “ステップ状の流量変化に対するチャネル乱流熱伝達の過渡応答”, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2020, Paper No. E123, Nov. 2020.
- [44] 山崎龍朗, 小田豊, 松本亮介, 香月正司, “ステップ状の流量変化に伴う平行平板間乱流熱伝達の過渡応答に関するDNS”, 第 57 回日本伝熱シンポジウム, Paper No. B222, Jun. 2020.
- [45] 吉田拓矢, 大谷智仁, 遠藤俊輔, 和田 成生, “数値流体解析に基づく肺静脈切除が左房内の血流動態に与える影響の評価”, 日本機械学会 第 31 回バイオフロンティア講演会, 2020.
- [46] 阪井俊裕, 鈴木修一, 直田 健, “機械的刺激によるテトラチアフルバレンラジカルカチオン塩の光学特性制御”, 日本化学会 第 101 春季年会, A08-4pm-10, 2021 年 3 月 19–22 日.
- [47] 平田 椋大, 太田 貴士, “水素燃焼混合層における渦構造がNOx生成に与える影響”, 日本流体力学会 年会 2020, Sep. 2020.
- [48] 田中 大誠, 太田 貴士, “フェーズフィールド法を用いた液体乱流の凝固組織成長と乱流変調のメカニズム解明”, 日本流体力学会 年会 2020, Sep. 2020.
- [49] 林 晃弘, 太田 貴士, “DNS による粘弾性流体およびニュートン流体乱流のための時間スケールリング法の導出”, 流体力学シンポジウム (第 66 回北陸流体力学研究会), Dec. 2020.
- [50] 北川 雄太, 太田 貴士, 大坂 文哉, “乱流クエット流れにおいて渦キャビテーションが引き起こす乱流変調と壊食の予測”, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 2020.
- [51] 白畑 風太郎, 太田 貴士, “小径円柱周り軸方向流れで維持される乱流構造の観察”, 日本機械学会 北陸信越支部 第 58 講演会, Mar. 2021.
- [52] 河野拓真, 畑昌育, 長友英夫, “保存型スキームを用いたレーザーアブレーションに適した数値解析コードの開発”, 第 34 回数値流体力学シンポジウム, A11-4, (オンライン), 2020 年 12 月 23 日.
- [53] 松川敏徳, 長友英夫, “簡易フォッカー・プランク方程式モデルによる高速電子熱流束解法の開発”, 日本物理学会第 76 回年次大会, 15aB2-6, (オンライン), 2021 年 3 月 15 日.
- [54] 藤巻貴海, 鈴木雅視, 垣尾省司, “水晶を用いた同種材料接合構造におけるリーキーSAWの解析”, 2020 年電子情報通信学会ソサイエティ大会, A-4-3, Sep. 2020.
- [55] 藤巻貴海, 鈴木雅視, 垣尾省司, “同種・異種材料接合構造におけるリーキーSAWの伝搬・共振特性”, 電子情報通信学会・日本音響学会 2020 年度超音波研究会(US), US2020-33, Sep. 2020.
- [56] 藤巻貴海, 鈴木雅視, 垣尾省司, “同種・異種材料接合構造におけるリーキーSAWの伝搬・共振特性”, 第 49 回EMシンポジウム, EM49-1-11, Oct. 2020.
- [57] 藤巻貴海, 鈴木雅視, 垣尾省司, “同種材料接合構造におけるリーキーSAWの伝搬・共振特性”, 弾性波素子技術コンソーシアム第 1 回研究会, Nov. 2020.
- [58] 藤巻貴海, 鈴木雅視, 垣尾省司, “LiNbO₃ や水晶を用いた同種材料接合構造におけるリーキーSAWの伝搬・共振特性”, 圧電材料・デバイスシンポジウム 2021, F-2, Jan. 2021.
- [59] 石川和樹, 西田修三, 中谷祐介, “小川原湖の水環境管理に向けた塩水遡上シミュレーション”, 令和 2 年度土木学会関西支部年次学術講演会概要集, II-4, 2020.
- [60] 戸村祐希, 中谷祐介, 西田修三, “非構造格子を用いた瀬戸内海-太平洋領域の流動シミュレーション”, 令和 2 年度土木学会関西支部年次学術講演会概要集.
- [61] 中司智仁, 荒木天秀, 天野泰嗣, 坪井伸幸, 小澤晃平, 武藤大貴, 寺島洋史, “超臨界圧下における極低温水素噴流に関する数値解析: 噴射口数の影響”, 日本機械学会九州支部九州学生会第 52 回学生員卒業研究発表講演会, 2021, 3.
- [62] 吉富敬亮, 栗田暢皓, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, 川島秀人, “回転デトネーションエンジンの 2 次元数値解析-酸水素非予混合噴射口数の影響”, 2020 年度衝撃波シンポジウム, 104, 2A3-2, 2021, March.
- [63] 赤井優斗, 大島洋喜, 大森健史, 山口康隆, 梶島岳夫, “接触線近傍での流体界面の易動度”, 日本流体力学会年会, 2020.09.18.

- [64] 大島洋喜, 大森健史, 梶島岳夫, “Cahn-Hilliard 方程式を用いた二相流解析における OpenMPI/OpenACC Hybrid Computing”, 数値流体力学シンポジウム, 2020.12.21.
- [65] 三輪敦俊, 大森健史, 梶島岳夫, “静電相互作用を考慮した気液二相流の数値解析”, 数値流体力学シンポジウム, 2020.12.22.
- [66] 浦直樹, 水谷康弘, 江崎隆, 上野原努, 牧浦良彦, 高谷裕浩, “タルボット効果を用いた広範囲 3 次元リソグラフィ (第 6 報) -ディープラーニングを用いた露光光波の振幅位相制御-, 2021 年度精密工学会春季大会学術講演会, D0234, 2021.
- [67] 江崎隆, 浦直樹, 上野原努, 水谷康弘, 高谷裕浩, 牧浦良彦, “タルボット効果を用いた広範囲 3 次元リソグラフィ (第 5 報)-斜め入射光を利用した多重露光によるナノピラー構造の作製-, 2021 年度精密工学会春季大会学術講演会, D0114, 2021.
- [68] 並河峻佑, 上野原努, 水谷康弘, 高谷裕浩, “光後方散乱パターンの空間周波数解析に基づくガラス加工表面のマイクロクラック深さ計測の高精度化”, 2020 年度砥粒加工学会学術講演会, 2020.
- [69] 上野原努, ラーマンレザアウリア, 水谷康弘, 高谷裕浩, “フォトニックナノジェットを利用した液中レーザナノ加工に関する研究(第 3 報) 長焦点深度特性による加工特性”, 2020 年度精密工学会秋季大会, D0203, オンライン, 2020 年 9 月.
- [70] 榛葉 将規, 大場 春佳, 鈴木 祐介, and 水野信也, “Wi-Fi ログからマルコフ連鎖を利用した利用者行動取得”, 経営情報学会 全国研究発表大会要旨集 2020 年全国研究発表大会. 一般社団法人 経営情報学会., 2020.
- [71] 梶拓真, 大場春佳, and 水野信也, “密集度検出システムの構築と運用”, インターネットと運用技術シンポジウム論文集 2020., 2020.
- [72] 大塚高弘, 阿久津泰弘, “テンソルネットワークを用いた Monomer-dimer モデルの臨界現象の解析”, 第 76 回年次大会, 2021 年 3 月 12 日.
- [73] 森田太智, “レーザー核融合推進に向けたパルス駆動磁気ノズルにおけるエネルギー依存性の検証実験”, 第 64 回宇宙科学技術連合講演会.
- [74] 町田 貴大, “レーザー生成プラズマを用いた磁気スラストチャンバ実験との比較による数値解析コードの検証”, 第 64 回宇宙科学技術連合講演会.
- [75] 上原 弘之, 坪井 和也, 富田 栄二, “計算境界の影響のない水素/空気予混合火炎の固有不安定性の DNS の構築”, 日本機械学会 中国四国支部第 59 期総会・講演会講演論文集, 08b2, 2021 年 3 月.
- [76] 根村英克, “格子 QCD による一般化核力研究のための高速アルゴリズムの活用”, 日本物理学会 2020 年秋季大会, オンライン開催, 2020 年 9 月 14-17 日.
- [77] 根村英克, “格子 QCD による一般化核力研究と $\lambda N, \Sigma N$ ポテンシャル”, 日本物理学会第 76 回年次大会, オンライン開催, 2021 年 3 月 12-15 日.
- [78] 萩田克美, 本田隆, 村島隆浩, 川勝年洋, “環状／線状混合系のブロックコポリマー相分離構造に対する複合的分子シミュレーション解析”, 日本物理学会 2020 年秋季大会, 2020 年 9 月 10 日.
- [79] 高分子系のシミュレーション画像に対する深層学習判別性能の検討, “高分子学会 高分子討論会”, 2020 年 9 月 18 日.
- [80] 森松 浩隆, 塚原 隆裕, “低円筒比環状流路の亜臨界遷移に生じる間欠構造に関する調査”, 第 34 回数値流体力学シンポジウム 講演論文集, オンライン開催, A05-1, 3 pages, Dec. 2020.
- [81] 竹田 一貴, 塚原 隆裕, “仮想周長拡張した環状クエット流の亜臨界遷移における乱流間欠性と DP 普遍性”, 第 34 回数値流体力学シンポジウム 講演論文集, オンライン開催, A04-4, 4 pages, Dec. 2020.
- [82] 榊原 諒太, “非線形放物型安定方程式と直接数値解析を用いた NLF(2)-0415 における表面粗さ誘起の遷移予測”, 第 58 回飛行機シンポジウム 講演集, オンライン開催, JSASS-2020-5126, (5 pages), Nov. 2020.
- [83] 中川 皓介, “主流乱れと円柱粗さの相互作用による後退平板境界層乱流遷移の直接数値解析”, 第 58 回飛行機シンポジウム 講演集, オンライン開催, JSASS-2020-5127, 7 pages, Nov. 2020.
- [84] 藤村 俊介, 山本 憲, 元祐 昌廣, 塚原 隆裕, “局所加熱条件下マイクロスケールバブルにおける温度差マランゴニ対流の 3 次元数値解

析”, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2020 講演論文集, (オンライン開催), 札幌, 5 pages, Oct. 2020.

- [85] 川津 晃貴, 本間 貴大, 上野 一郎, 塚原 隆裕, “矩形自由液膜内温度差マランゴニ対流における多様な基本定常流”, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2020 講演論文集, (オンライン開催), 札幌, 3 pages, Oct. 2020.
- [86] 松川 裕樹, 塚原 隆裕, “高円筒比 Taylor-Couette-Poiseuille 流における重臨界遷移の局在乱流パターン”, 日本流体力学会年会 2020 講演論文集, (オンライン開催), 山口, 2 pages, Sep. 2020.
- [87] 仁村 友洋, 徐 之霊, 河田 卓也, 塚原 隆裕, “低Re回転平面クエット流れにおける粘弾性不安定性”.
- [88] 竹田 一貴, 塚原 隆裕, “環状クエット流の重臨界遷移における局在乱流構造とDP 普遍性の円筒比依存性”.
- [89] 塚原 隆裕, 福田 雄大, “環状流の重臨界遷移における螺旋型局在乱流と縦渦群の伝熱寄与”.
- [90] 川津 晃貴, 本間 貴大, 和田 亮平, 塚原 隆裕, 上野 一郎, “数値解析による自由液膜内温度差マランゴニ対流場におけるSingle-Layered Flowの液膜アスペクト比依存性”.
- [91] 正田悠人, 山口容平, 芳澤信哉, 陳何苗, 岡田健志, 杉山みなみ, 下田吉之, 林泰弘, “住宅・業務施設を統合化した地域エネルギー需給シミュレーション: 東京 4 区市を対象とするケーススタディ”, 第 38 回エネルギー・資源学会研究発表会講演論文集, pp. 23 – 28, 2020.
- [92] 山口容平, 秋沢琴音, 北村拓也, 金範埃, 下田吉之, “ボトムアップモデルによる 2050 年における日本の業務部門エネルギー需要の推計”, 第 38 回エネルギー・資源学会研究発表会講演論文集, pp. 85 – 90, 2021.
- [93] 秋沢琴音, 山口容平, 金範埃, 鳴川公彬, 下田吉之, “日本全国の業務施設ストック経年変化を考慮したエネルギー需要推計”, 第 37 回エネルギーシステム・経済・環境コンファレンス講演論文集, pp. 85 – 90, 2021.

4. 著書

- [1] Sadataka Furui, “Understanding Quaternions from

Modern Algebra and Theoretical Physics”, Chapter 2 of “Understanding Quaternions”, Ed. By Peng Du et al.”, Nova Science Publishers Inc, New York, New York (2020).

- [2] Sadataka Furui, “A Closer Look at Gluons”, Chapter 6 of “Horizon in World Physics”, vol 302, Ed. by Albert Reimer”, Nova Science Publishers Inc, New York (2021).

5. その他

- [1] A. Musa, T. Soga, T. Abe, M. Sato, K. Komatsu, S. Koshimura, H. Kobayashi, “Evaluation of Tsunami Inundation Simulation using Vector-Scalar Hybrid MPI on SX-Aurora TSUBASA”, The poster presentation at The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC20), Nov-20.
- [2] 撫佐昭裕, “読売新聞”, 津波被害推計エリア 1.6 倍 北海道から鹿児島 地震後 20 分～30 分 東北大など, 2021 年 2 月 22 日 (朝刊).
- [3] 撫佐昭裕, “日刊工業新聞”, 3.11 メッセージ 東日本大震災 10 年 AI・スパコン 災害に挑む 想定外のないリスク管理へ, 2021 年 3 月 10 日.
- [4] 撫佐昭裕, “電波新聞”, 東日本大震災 10 年 電機 進化する津波の浸水予測 ITサービス 大手が存在感, 2021 年 3 月 24 日 (朝刊).
- [5] 長谷川航大, 三木望夢, 馬場吉弘, 長岡直人, “導電率テンソルを適用したFDTD法によるCFRPパネルの電流分布解析”, 令和 2 年電気学会B大会, オンライン (2020-9).
- [6] K. Hasegawa, “FDTD Analysis of Lightning Current and Temperature Distributions in a CFRP Panel with Conductivity Tensor Technique”, International Symposium on EMC and Transients in Infrastructures and International Student Session (ISET-ISS2020), Online (2020-12) .
- [7] 船迫昌平, 宮澤弘法, 古澤卓, 山本悟, 梅沢修一, 米澤宏一, 大森修一, 鈴木武志, “エロージョンにより変形した静翼列を伴う蒸気タービン中圧段の非定常流動シミュレーション”, 第 3 4 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 2020.
- [8] 河野宏明, 開田丈寛, 柏浩司, 高橋純一, 八尋正信, “QCDの有効模型とパーシステント・ホモロジー解析”, 日本物理学会 2020 年秋季大会 (オンライン開催), 2020 年 9 月 14 日.

- [9] 吉野元, “深層ニューラルネットワークによる学習の統計力学: レプリカ理論とシミュレーション”, 日本物理学会, 秋季大会 オンライン開催, 2020 年 9 月 10 日.
- [10] 吉田惇輝, “多結晶Si太陽電池中の鉄不純物の電圧印加オペランド観察での時系列シミュレーション”, 株式会社NTTデータ数理システム, Jan-21.
- [11] 仁村友洋, 徐之靈, 河田卓也, 塚原隆裕, “低 Re 回転平面クエット流れにおける粘弾性不安定性”, 日本流体力学会年会 2020, 山口, 2020 年 9 月.
- [12] 塚原 隆裕, “粘弾性流体や乱流拡散を対象としたデータ同化と深層学習”, 第 7 回複雑熱流体工学シンポジア (7th COFTEC Symposia), 神戸, Oct. 2020.
- [13] 平岡慎一郎, “口腔粘膜疾患診断における AI ～口腔外科臨床医が行う AI 開発～”, 第 65 回 日本口腔外科学会総会・学術大会 口腔三学会合同シンポジウム, 2020 年 11 月 14 日.
- [14] 平岡慎一郎, “口腔粘膜疾患診断支援AIの開発について ～口内炎と口腔がんの診断AI～”, GPU Technology Conference 2020, 2020 年 10 月 7 日.
- [15] 平岡慎一郎, 川村晃平, 鶴澤成一, 古郷幹彦, “口腔がん医療の未来へ向けたAIの活用・臨床診断 ～口腔粘膜疾患診断支援AIの研究開発～”, 第 38 回日本口腔腫瘍学会総会・学術大会・シンポジウム, 2020 年 1 月 23 日.
- [16] 平岡慎一郎, “大阪大学歯学研究科とNVIDIAがディープラーニングの共同研究を開始, 口腔がん早期発見AIの診断精度向上を目指す”, インターネットメディア (<https://www.nvidia.com/ja-jp/about-nvidia/press-releases/2020/nvidia-osaka-university-begin-deep-learning-research-improve-accuracy-ai-oral-cancer-detection/>).
- [17] 生口幹也, “非球面ミラーの非接触ナノ形状測定及び走査型白色干渉顕微鏡との比較”, 精密工学会春季大会, 2021 年 3 月.
- [18] 生口幹也, “Measurement of aspheric mirror by non-contact three dimensional nano-profiler using normal vector tracing method”, euspen 21st International Conference & Exhibition, 2021 年 6 月.

第 26 回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2020) 報告および 第 27 回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2021) 告知

大阪大学サイバーメディアセンター准教授 吉野 元

1. SuperCon2020

昨年 2020 年 8 月 17 日から 21 日までの 5 日間に高校生・高専生を対象とする「スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2020)」が予定されました。これに向けて予選が行われ、東日本から 8 チーム、西日本から 11 チームが予選を通過しました。その結果は下記 HP に掲載されております。残念ながら新型コロナウイルス感染拡大のため、本戦は中止となりました。しかし後述しますように 9 月に理研のスーパーコンピュータ「富岳」を用いた臨時イベントがオンライン開催されました。

ここでは例年開催されていた本戦について説明いたします。このコンテストは、2 名又は 3 名を 1 チームとする高校生・高専生の参加者たちが、与えられた課題を解くプログラムを 3 日間に渡って作成し、最終日にスーパーコンピュータで実行して、解答の正確さや計算の速さを競うもので、そのレベルの高さから、別名「電脳甲子園」とも呼ばれています。過去の出場者が大学進学後に国際大学対抗プログラミングコンテストで活躍するなど、次世代の情報科学を担う若手育成にも貢献しており、2008 年度の文部科学大臣賞も受賞しています。

1995 年の第 1 回から 2005 年の第 11 回までは東京工業大学（東工大）学術国際情報センター(Global Scientific Information and Computing Center:GSIC)の単独主催でしたが、2006 年の第 12 回からは大阪大学（阪大）(Cybermedia Center:CMC)も共同主催しています。予選に参加したチームの中から、富士川以東 50Hz 地域からは 10 チームが、60Hz 地域からはやはり 10 チームが参加します。東工大と阪大の二つの会場で同時に開催した年は、wiki やポリコムなどで相互に交流し、開会式・表彰式などもポリコムを使って二元中継で行ってきました。このコンテストは 5 日間にも渡る合宿型で、実際にスーパーコンピュ

ータを高校生・高専生が使うことができるという、世界的にも大変ユニークなものです。原則として毎年交互に両大学のスーパーコンピュータを使います。

2007、2011 年は阪大 CMC の SX-8R が、2009 年は SX-9 が、2015 年、2017 年は SX-ACE が使われました。2020 年の本戦では SQUID が用いられる予定でした。

2. 予選

2020 年の予選課題は 6 月 3 日に下記の SuperCon web に公表されました。この予選課題を解くプログラムを作成し、6 月 19 日正午までにプログラムを含む必要書類を添付してメールで申し込んでもらいました。予選問題は、スーパーコンピュータを使わなくても学校や家庭にある普通のパソコンでも解けるような課題が出題されます。2020 年の予選課題は、東工大の作成チームによる「文字列書き換え問題」というものでした。これは与えられた 2 つの文字列の一方から他方に、指定された基本操作の繰り返しで変換するという問題です。この変換が可能かどうかを判定し、可能な場合にはできるだけ少ない「計算コスト」で行う手続きを示すことが課題となります。これを含め、過去の予選課題、本選課題は SuperCon web に全て掲載されています。また、参加者が 2 名以上集まらない人のために、希望者には「認定証」も発行しています。予選課題を正確に解くプログラムが書けたら、「SuperCon 1 級」が認定されます。問題のレベルに応じて 2 級と 3 級もあります。

3. 本選の中止、富岳チャレンジの開催

新型コロナウイルス感染拡大予防のため残念ながら本戦は急遽中止となりました。しかし、9 月 13 日から 22 日の期間に理化学研究所のスーパーコンピュータ「富岳」を用いた「富岳チャレンジ」という臨時

イベントがオンライン開催され、SuperCon2020 の予選を通過したチームが参加しました。詳しくは下記 HP をご覧ください。

4. SuperCon 2021 の告知

2021 年は 8 月 23 日（月）から 27 日（金）までの 5 日間での開催を予定しています。新型コロナウイルス感染拡大予防のため、オンライン開催となります。予選課題は 6 月 2 日に公表、課題提出〆切は 6 月 18 日正午です。理化学研究所も主催者に加わり、使用するスーパーコンピュータは、理化学研究所の富岳が使われる予定です。本年もチャレンジする高校生・高専生、引率の先生方など参加者の皆さんに喜んでいただけるよう様々な工夫を凝らそうと関係者一同考えています。本稿が皆様のお目に触れるときには既にスケジュールが進行しているかもしれませんが、もしも可能ならば皆様もお知り合いの高校生に SuperCon2021 というものがあり、大変に楽しい行事であることを呼びかけてください。また、来年以降、すなわち SuperCon2022 以降への参加、お申し込みをご検討頂ければ幸いです。

5. Web

<http://www.gsic.titech.ac.jp/supercon/> がコンテストページです。ぜひ一度御覧ください。また 2020 年度臨時開催されました富岳チャレンジについてはこちらをご覧ください。

<https://www.r-ccs.riken.jp/outreach/events/supercon-fuga-ku/>

大規模計算機システム利用者講習会等の紹介

大阪大学サイバーメディアセンター教授 降旗 大介

1. 概要

サイバーメディアセンターの教職員をはじめ、大阪大学の大規模計算機システムの運営、開発、支援に関わっている関係者は、システムをユーザにより有効に活用していただくために何が出来るかを日々考えています。たとえばその一端として、マニュアル・ドキュメント類を充実させること、ユーザからの質問をメールなどで受け付け適切に返答するための仕組みの構築と維持、それらを明文化するためのFAQの整備などの活動を行っています。

そうした活動の中でもわれわれが重要と考えているのが、ここで紹介する利用者講習会です。利用者講習会は計算機ユーザへ知識を伝える場だというだけでなく、その場での質問などを通じてユーザと直接やりとり出来る場でもあり、大変貴重な機会です。そのためしばしば、大規模計算機システムの運営・開発・管理・支援などを行っている関係者が立ち会います。

これら講習会の内容は、OSであるUnix環境、スーパーコンピュータのハードウェアについての概要説明といった入門的内容から、大規模計算を行う近年のユーザにとって重要なOpenMP, MPIなどの並列計算通信プロトコルの概要からこれらを上手に使いこなすための各種プログラミング技法の詳細、AVS/ExpressやSALMONといった各方面の専門家用の特殊なソフトウェア等々、多岐にわたります。こうした内容はユーザの要望に沿って、計画されています。詳しくは次ページに掲載しております表に掲載しておりますが、大規模計算機の利用者だけではなく、学生、教員、研究者を幅広く対象とし、年に13~14回開催しております(2020年度は14回開催いたしました)。また、より詳細な情報をサイバーメディアセンター大規模計算機システムのwebにおいて掲載しておりますので、ぜひご参照ください。

2. 多忙な方も参加しやすく

近年、学生も研究者も大変に多忙です。これをうけて、サイバーメディアセンターの講習会は原則として年に2回、ほぼ同じ内容の講習会を時期をずらして開催するように工夫しています。実際には、6月後半と9月頭~10月頃に集中的に開催しています。これは、「学期始まりや学期末の時期は外して欲しい」「あまり遅い時期では、学生の研究開始に間に合わない」などのユーザの声を反映したもので、なるべく多くのユーザが参加できるように、また、講習会の受講が意義あるものになるようにと配慮した結果です。また、これまで現場での開催のみだった講習会にも2019年よりその一部についてオンライン配信を開始し、ユーザがより参加しやすいような形へと拡張しています。このようにオンライン配信を導入していたため、コロナ禍の中ながら2020年も無事にすべての利用者講習会をオンラインにて実施することができました。

また、AVS/ExpressやSALMONなどの研究者用専門ソフトウェアの講習会では講師を確保しにくいという問題がありますが、われわれは筑波大学、高度情報科学技術研究機構と協力して講師を確保したり、当該ソフトウェアの関連会社に講師を依頼するなどして、こうした専門家向けソフトウェアの講習会を開催しています。こうした努力の甲斐あってか、これまでに各講習会ともに一定数のユーザの参加をいただいております。講習会をユーザの皆様に役立てていただいていると考えています。

3. 初学者にも優しく

未参加の方にとって、こうした講習会は敷居が高いと思われがちです。しかし、先に述べたように初学者も講習会の対象で、1年間のおおよそ14回程度の講習会のうちおおよそ1/4は初学者が対象の内容のものです。

具体的には、OS である Unix の簡単な操作方法の解説や、スーパーコンピュータのハードウェアの概要説明、細かい技法の説明の前に必要となる並列計算の概念の説明などからなります。スーパーコンピュータを使うユーザというと、こうした知識やプログラミング技法について通じた大変なプロフェッショナルばかりと想像されることもありますが、もちろんそれは違います。どなたも「最初は初心者」です。そして、細かい技術についてのマニュアルは豊富に見つかっても基礎的な概念や手法についてはなかなか良い資料・ドキュメント類が見つからないということは珍しくないのです。

われわれサイバーメディアセンターでは、こうした点を補い、より広い分野・方面の方にユーザとしてシステムを使ってもらべく、常に初学者に優しくありたいと考え、講習会をこのような構成にしています。

4. プロフェッショナルな方も

もちろん、われわれは初学者ばかりでなくプロフェッショナルなユーザへの支援も怠っておりません。各種の専門的な内容について、多くの講習会を計画し、そして実施しています。

大阪大学の誇る大規模計算機である SX-ACE と OCTOPUS を利用しての講習会、近年の並列計算プログラミングに必須である OpenMP や MPI についての講習会はもちろんのこと、スーパーコンピュータや大規模並列計算機が活躍の場である言語 HPF (High Performance Fortran) についての専門家による講習会、そして、電子ダイナミクスに対する第一原理計算を行う SALMON、各種専門分野で用いられる可視化ソフトウェアである AVS/Express の講習会も行っています。また、一部の講習会は、大規模計算機システムの開発そのものを行っている会社から技術者を講師として招いて講習会に加えて特別相談会も実施しており、技術の非常に微細な部分に至るまで専門的な議論を行うことが出来る機会としてユーザーの皆様にご利用いただいております。

5. ぜひご参加され、そしてフィードバックを

講習会の情報については、われわれサイバーメディアセンターの web

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/lecture_event/lecture/にて常に公開しております。情報は随時更新しておりますので、ぜひ頻繁にご覧になり、ご興味のある講習会に積極的にご参加ください。皆様のご参加を常に歓迎いたします。

また、大規模計算機のハードウェア、ソフトウェア、そしてユーザの使い方といったものは日々変化していくものです。上記に述べたように様々な工夫や努力を通じて開催している講習会ではありますが、こうした変化に合わせ、講習会のありかたも変化、進歩していく必要があります。そして、それにはユーザの方々からいただく意見がなにより重要です。そのフィードバックの先により良い講習会の実現があるのです。ユーザの皆様におかれましては、遠慮をせずに、いつでも構いませんので、講習会についての要望をぜひサイバーメディアセンターまでお聞かせください。

2021 年度 大規模計算機システム利用講習会

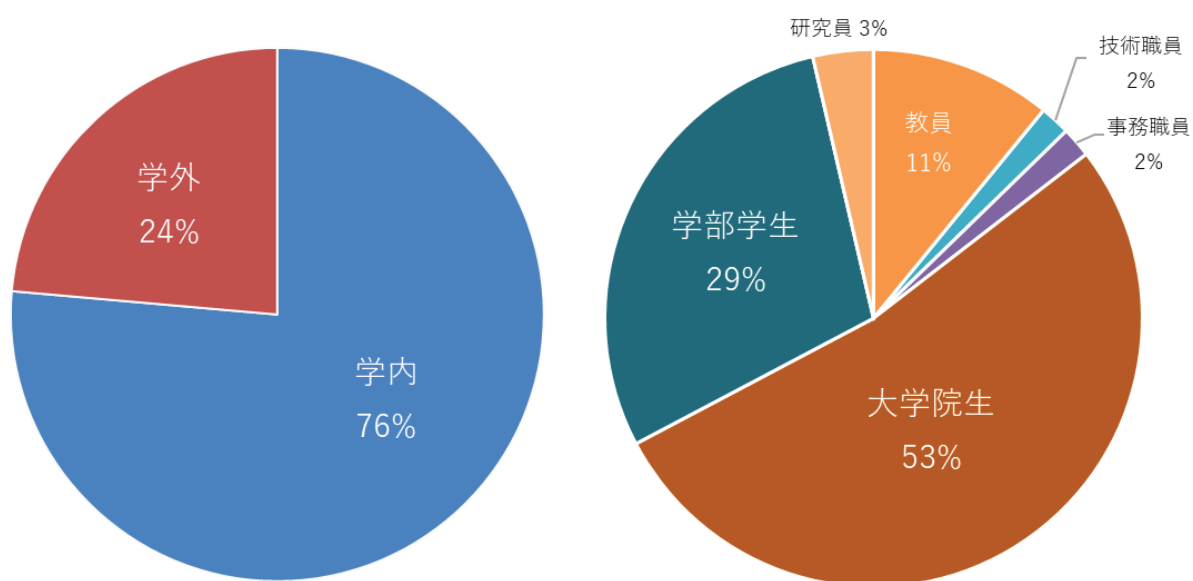
	講習会名	開催 日時	講師	開催場所
1	スパコンに通じる 並列プログラミングの基礎	6 月 14 日	サイバーメディアセンター 宮武 勇登 准教授	オンライン開催
2	初めてのスパコン	6 月 18 日	サイバーメディアセンター 木戸 善之 講師 情報基盤課 技術職員	オンライン開催
3	OpenMP 入門	7 月 19 日	サイバーメディアセンター 吉野 元 准教授	オンライン開催
4	スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用	9 月 16 日 12 月 3 日	日本電気 (株)	オンライン開催
5	GPU プログラミング入門 (OpenACC)	10 月 6 日 12 月 8 日	プロメテック・ ソフトウェア (株)	オンライン開催
6	ベクトルプロセッサ 高速化技法の基礎	10 月 7 日 12 月 9 日	日本電気 (株)	オンライン開催
7	並列プログラミング入門 (OpenMP/MPI)	10 月 15 日 12 月 10 日	日本電気 (株)	オンライン開催
8	コンテナ入門	10 月 21 日	日本電気 (株)	オンライン開催
9	ONION 活用講習会	11 月 9 日	日本電気 (株)	オンライン開催
10	GPU プログラミング実践	12 月 20 日	プロメテック・ ソフトウェア (株)	オンライン開催
11	デバッグ・チューニングの基礎	開催時期未定	未定	オンライン開催予定

2020 年度 大規模計算機システム利用講習会 アンケート集計結果

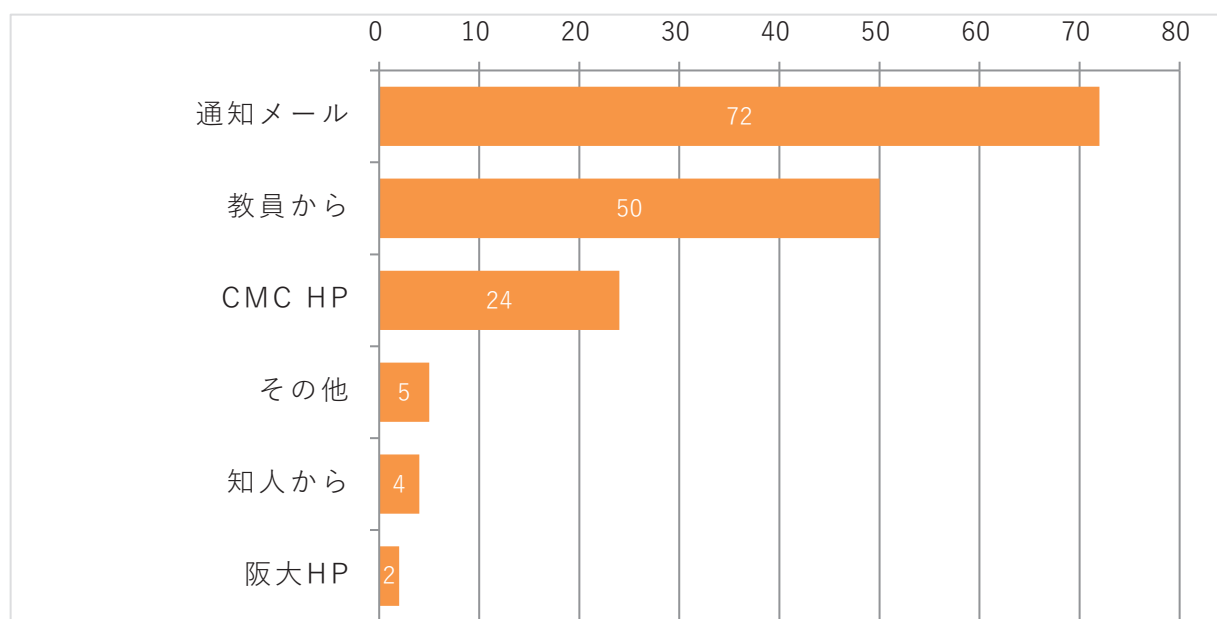
◆受講者数（すべてオンラインで開催）

講習会名	申込者数	受講者数
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(6/22)	110	87
スパコン概要とスパコン利用入門(6/26)	30	27
SX-ACE 高速化技法の基礎(6/29)	13	13
並列プログラミング入門(MPI)(6/30)	27	17
並列コンピュータ高速化技法の基礎(7/3)	20	15
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(9/2)	73	38
スパコン利用入門(9/10)	20	17
SX-ACE 高速化技法の基礎(9/16)	12	10
並列コンピュータ高速化技法の基礎(9/17)	12	7
並列プログラミング入門(MPI)(9/24)	9	9
OpenMP 入門(9/30)	12	10
AVS 可視化処理入門(10/28)	9	6
AVS 可視化処理応用/ 特別相談会(10/29)	2	3
合計	349	259

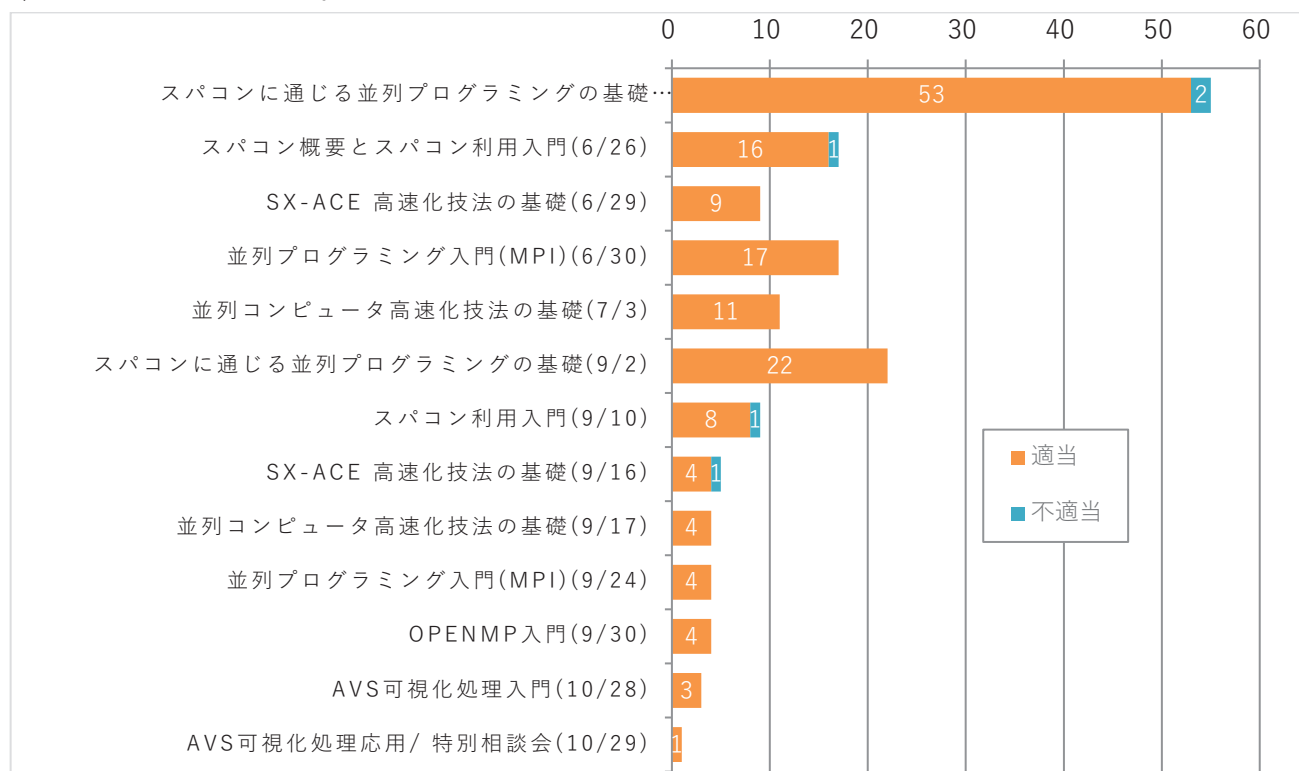
◆受講者の内訳



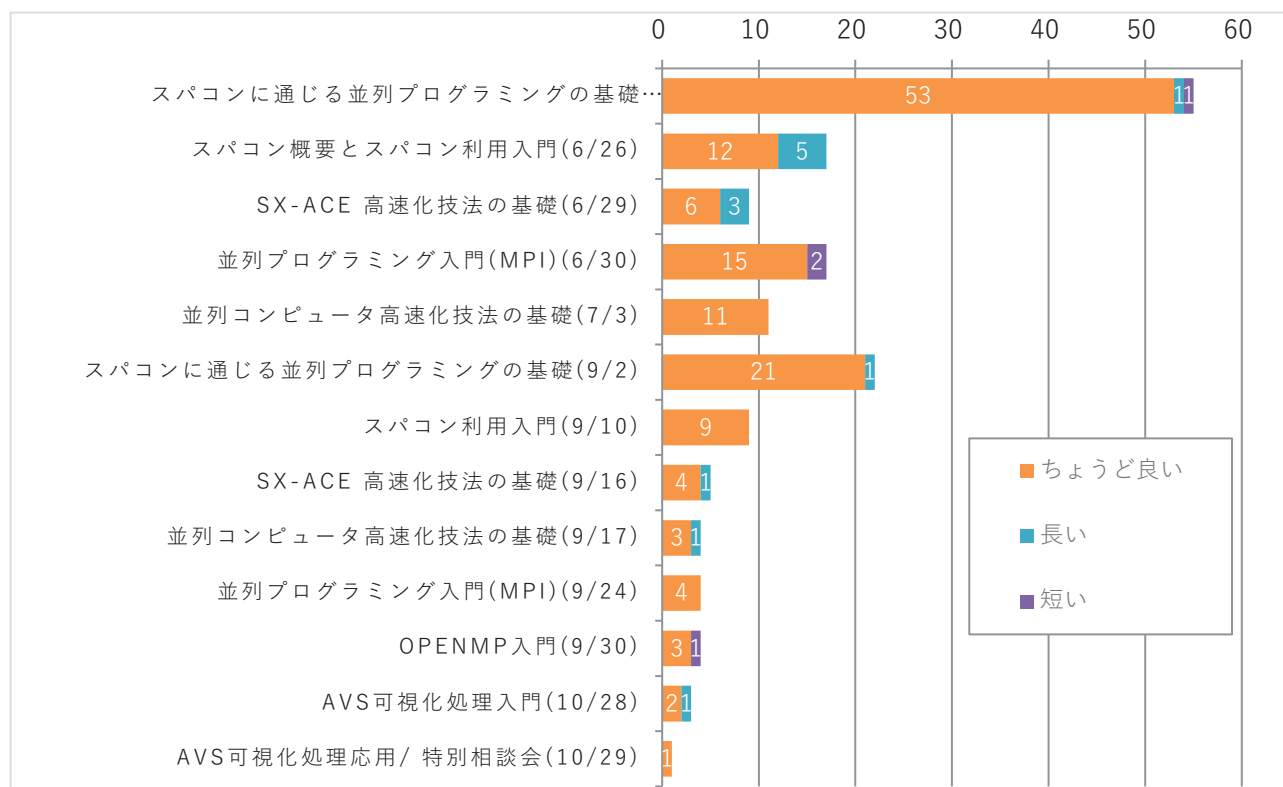
◆講習会についてどのようにお知りになりましたか。(複数回答可)



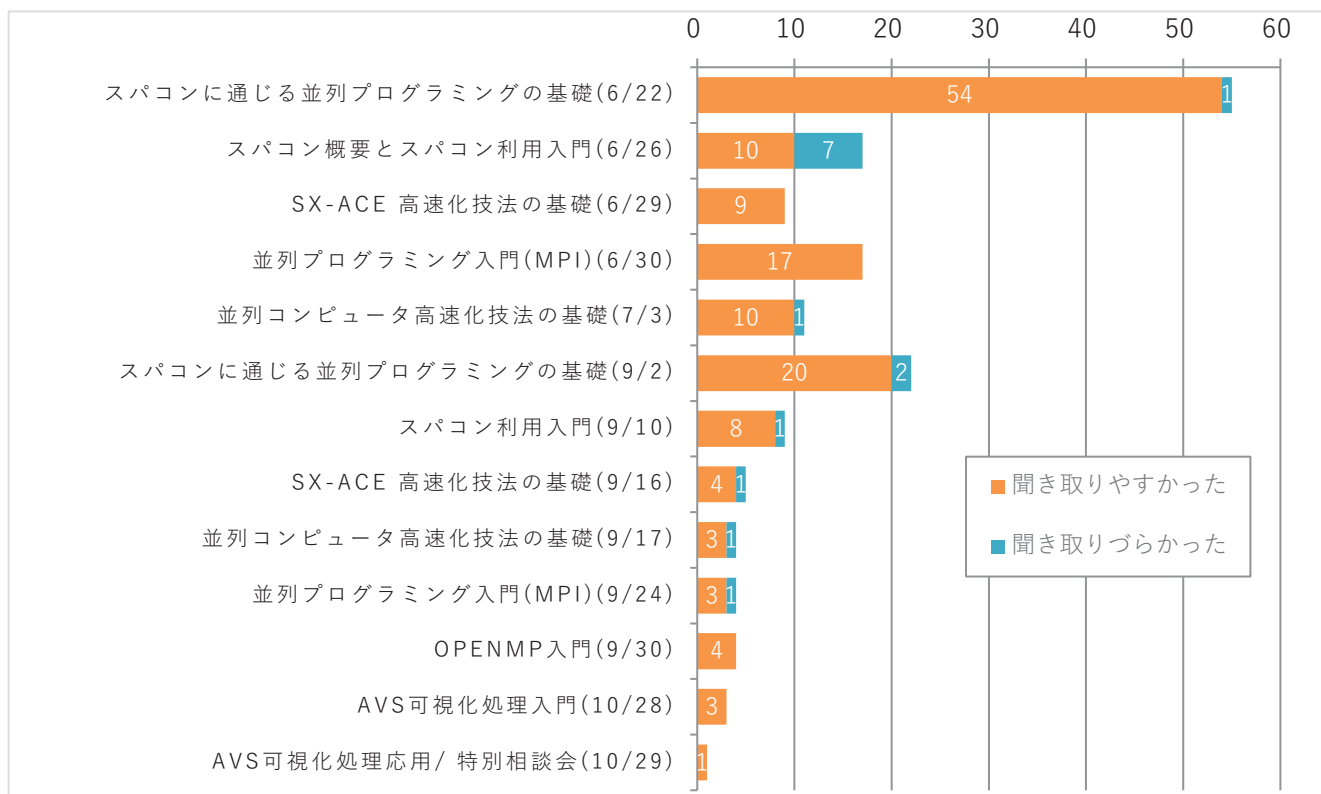
◆開催日は適当でしたか。



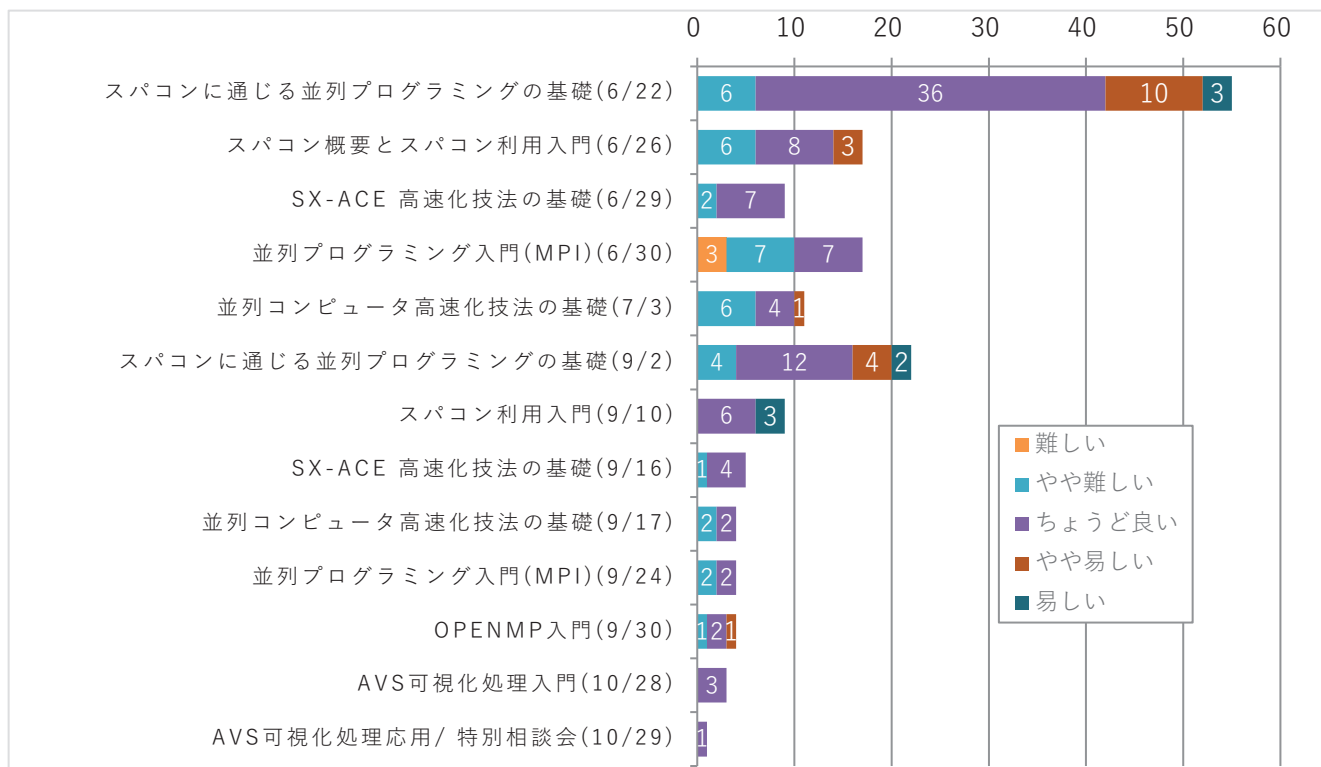
◆講習会の時間は適当でしたか。



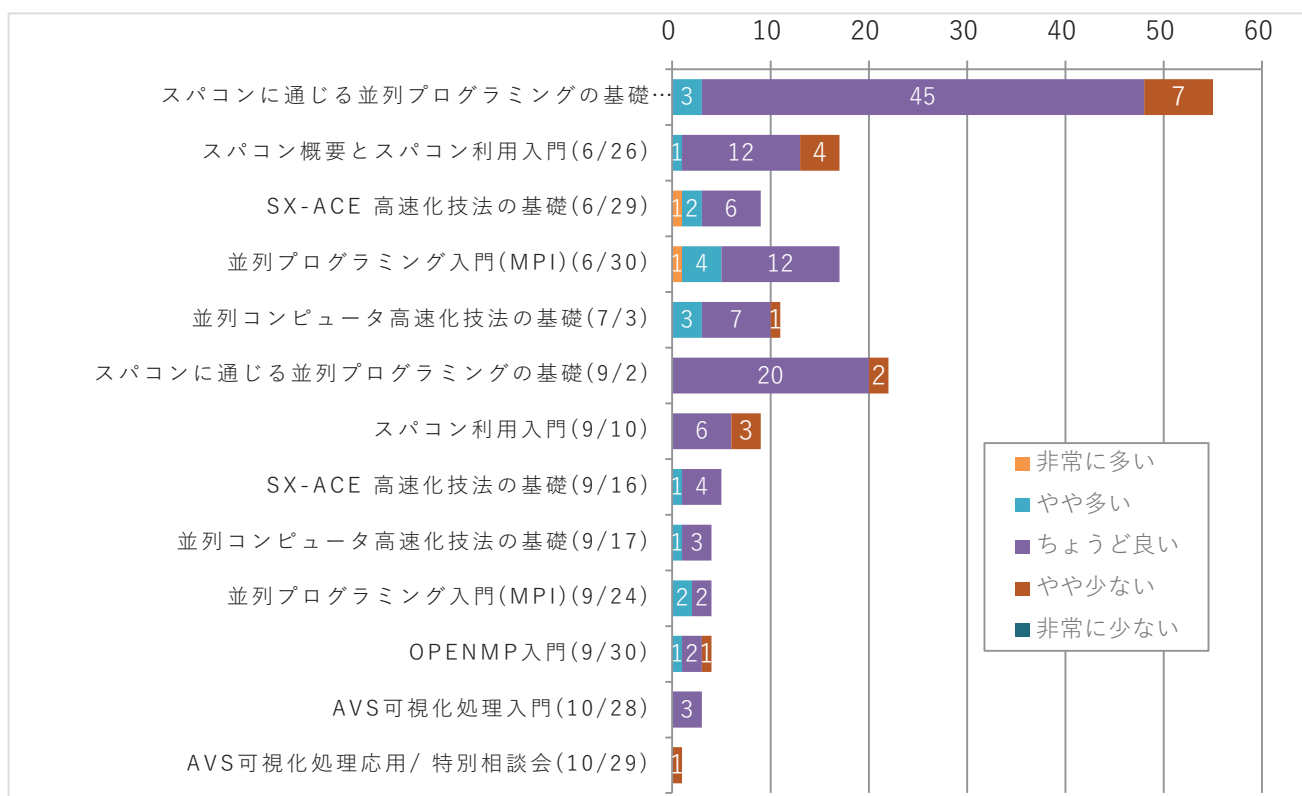
◆今回の講習会の音声はいいかがでしたか。



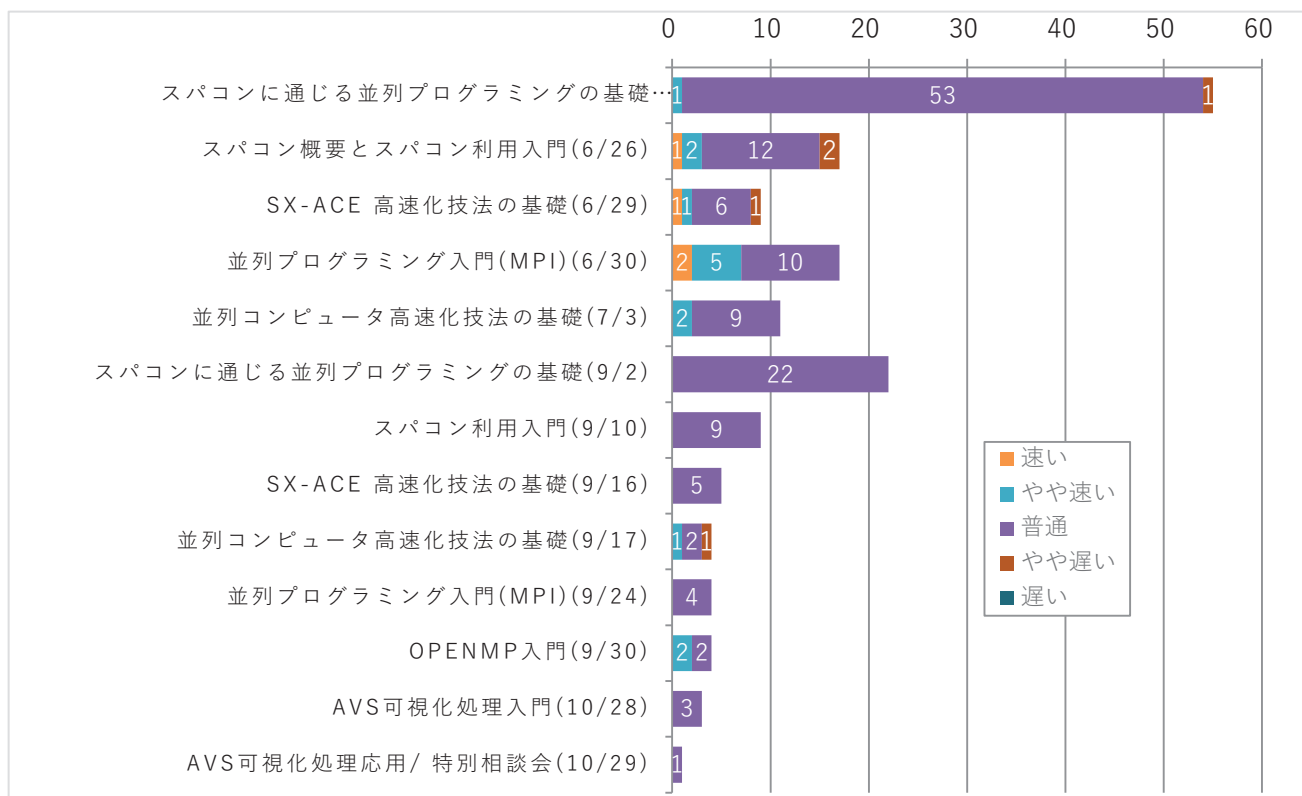
◆講習会の内容はどうでしたか。



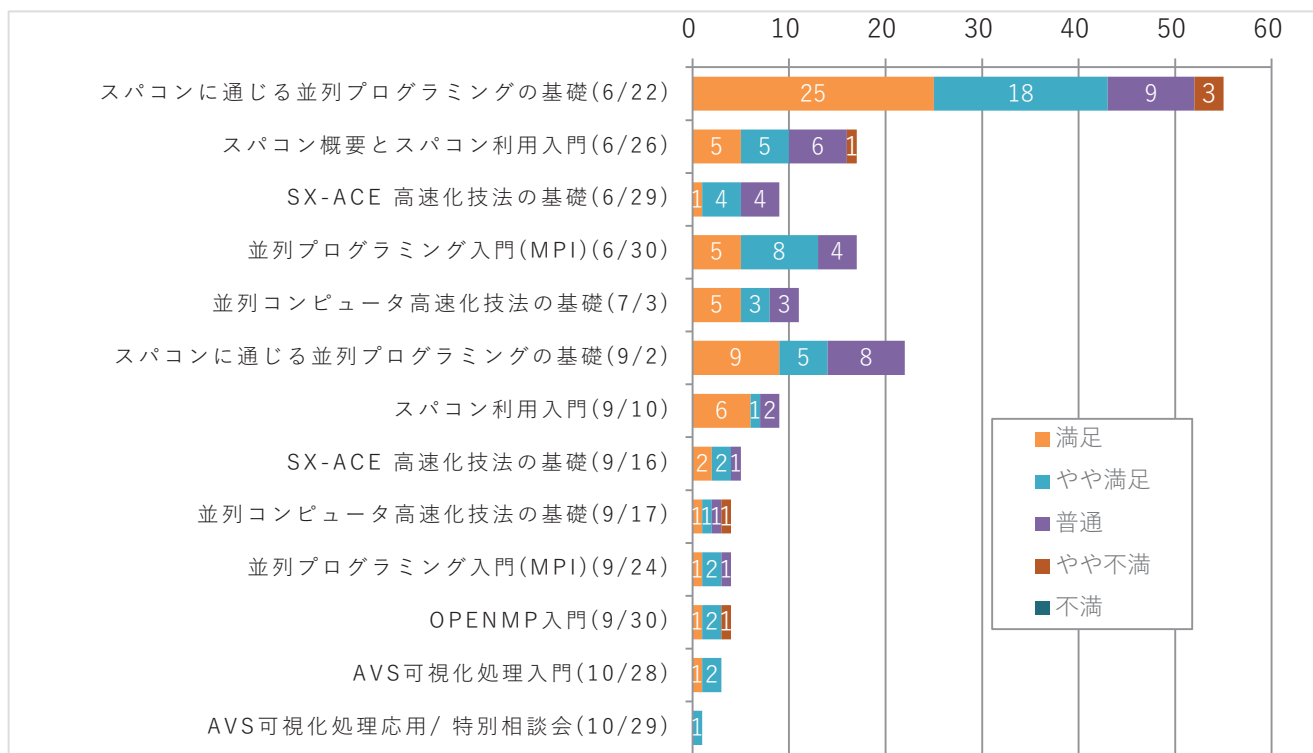
◆講習会で取り扱った内容量はどうでしたか。



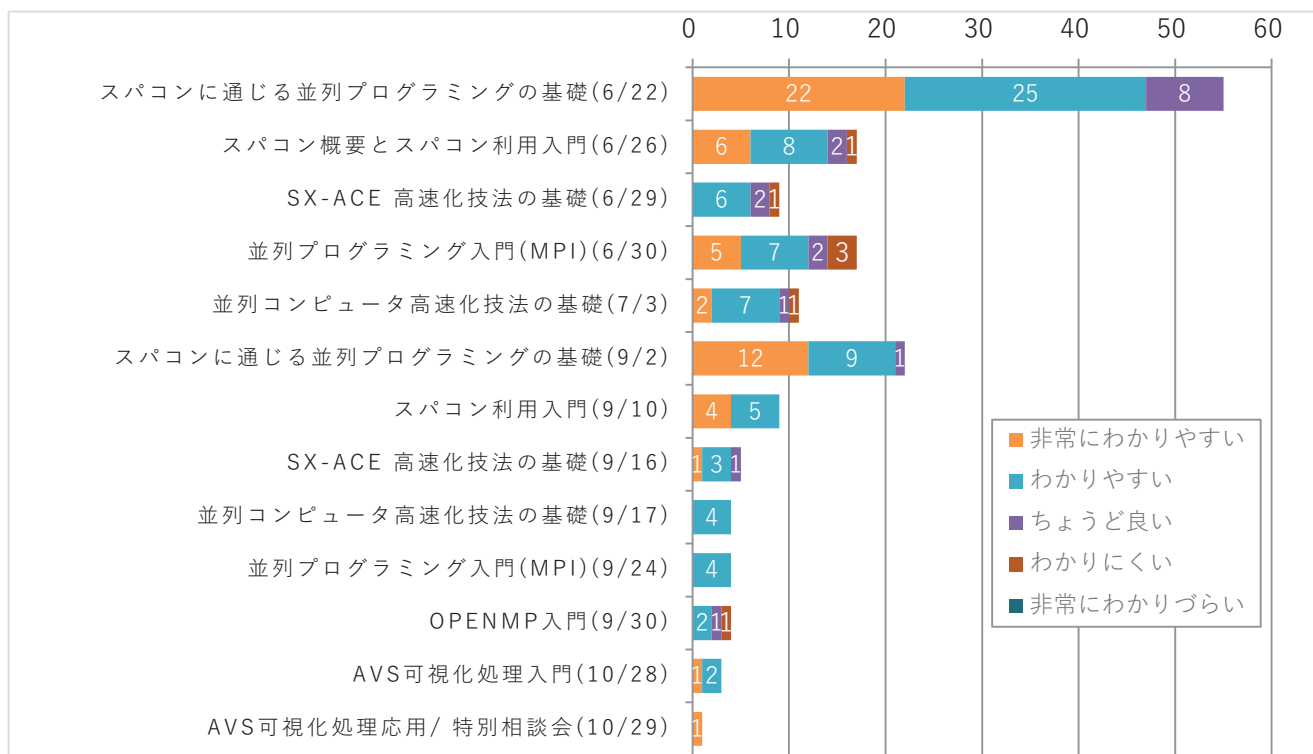
◆講師の進め方はどうでしたか。



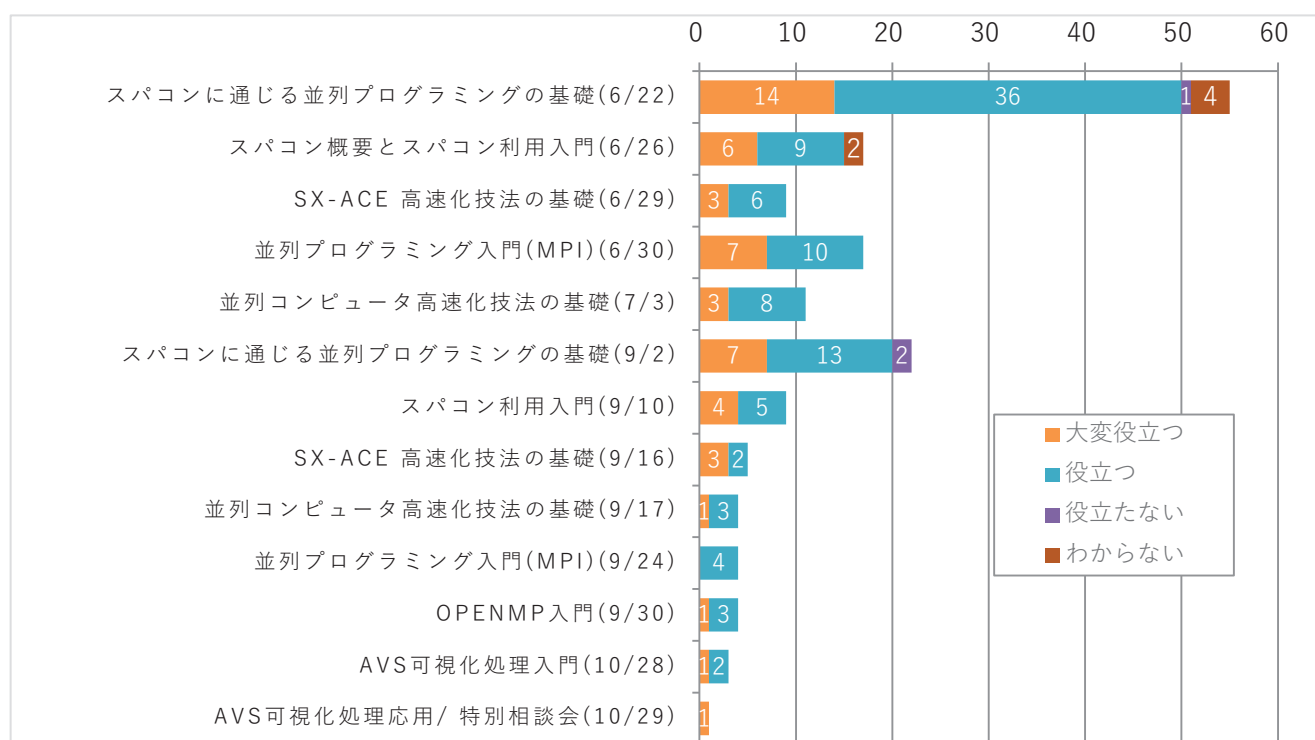
◆満足度は？



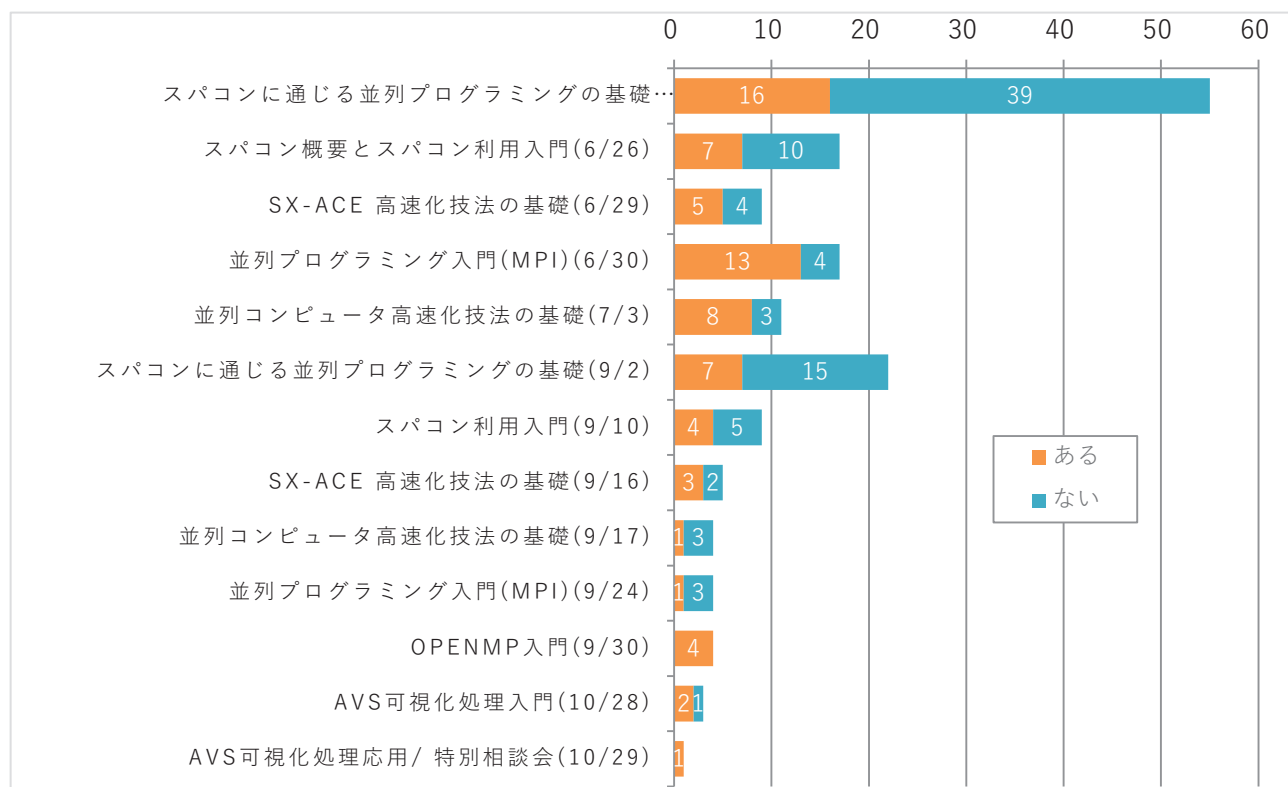
◆講習会の資料はどうでしたか。



◆皆さんの今後の研究・業務・勉学に役立つかと思いますか。



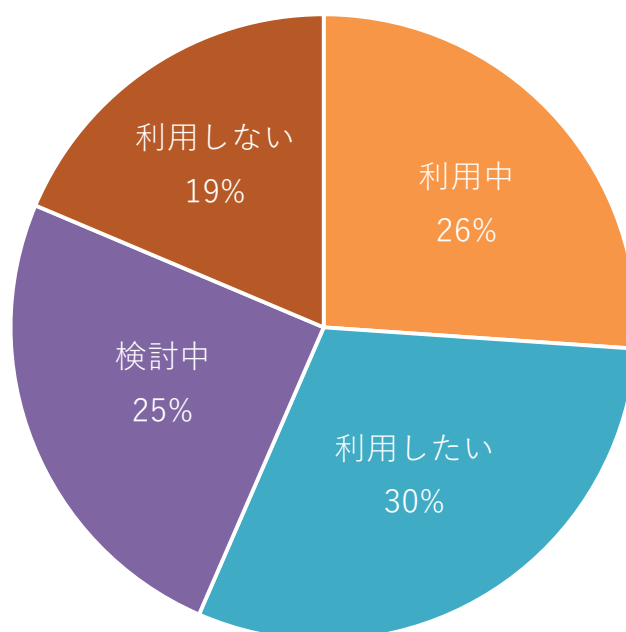
◆他の情報基盤センター等も含め、これまでにスーパーコンピュータを利用したことがありますか。



◆「ある」と回答された方の利用方法



◆サイバーメディアセンターの大規模計算機システムの利用を希望されますか。



2021 年度「HPCI (High Performance Computing Infrastructure) 利用」の活動状況

HPCI(High Performance Computing Infrastructure)システムは、個別の計算資源提供機関ごとに分断されがちな全国の幅広いハイパフォーマンスコンピューティング（HPC）ユーザ層が全国の HPC リソースを効率よく利用できる体制と仕組みを整備し提供することを目的として構築され、2012 年 10 月より運用開始しました。北海道大学、東北大学、筑波大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学の各情報基盤センター、及び理化学研究所、海洋研究開発機構、統計数理研究所が資源提供機関となり、計算機資源や、共有ストレージ、ネットワーク、認証基盤、可視化装置等といったシステムを、中立・公正で科学的・技術的・社会的根拠に基づき配分・提供しています。

本センターの計算機資源を利用する 2021 年度 HPCI 採択課題一覧

利用枠	利用資源	研究課題名
一般課題	SQUID	Dirac 流モノポールによる QCD のカラー閉じ込め機構のモンテ・カルロ研究
一般課題	SQUID	Gradient flow による物理点 QCD の熱力学
一般課題	OCTOPUS	活動銀河核フィードバックと宇宙の化学汚染
一般課題	OCTOPUS	シクロデキストリン系高分子包接化合物による水圏機能材料の分子シミュレーション
一般課題	SQUID	水中 Tetra-PEG ゲルの負のエネルギー弾性の分子論的解明
一般課題	SQUID	格子 QCD を用いた光・光散乱ダイアグラムの間接的計算
若手課題	SQUID	インスリン解離における共溶媒添加効果の自由エネルギー解析
産業課題	OCTOPUS	全原子型分子動力学計算によるゴム系粘着剤と粘着付与剤のバルク及び界面における親和性評価
「富岳」産業課題	SQUID	ランダムコポリマーを用いた環状高分子の相溶構造の検証

2021 年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況

「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」は、北海道大学、東北大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学にそれぞれ附置するスーパーコンピュータを持つ 8 つの共同利用の施設を構成拠点とし、東京大学情報基盤センターがその中核拠点として機能する「ネットワーク型」共同利用・共同研究拠点として、文部科学省の認可を受け、平成 22 年 4 月より本格的に活動を開始しました。

本ネットワーク型拠点の目的は、超大規模計算機と大容量のストレージおよびネットワークなどの情報基盤を用いて、地球環境、エネルギー、物質材料、ゲノム情報、Web データ、学術情報、センサーネットワークからの時系列データ、映像データ、プログラム解析、その他情報処理一般の分野における、これまでに解決や解明が極めて困難とされてきたいわゆるグランドチャレンジ的な問題について、学際的な共同利用・共同研究を実施することにより、我が国の学術・研究基盤の更なる高度化と恒常的な発展に資することにあります。本ネットワーク型拠点には上記の分野における多数の先導的研究者が在籍しており、これらの研究者との共同研究によって、研究テーマの一層の発展が期待できます。

2021 年度の課題募集には合計 49 課題が採択されました。このうち以下の 6 課題が本センターと共同研究することとなっています。

課題代表者	研究課題名
横田理央 (東京工業大学)	Hierarchical low-rank approximation methods on distributed memory and GPUs
飯田圭 (高知大学)	高密度領域まで適用可能なモンテカルロ法の開発と 有限密度 2 カラー QCD の相図の決定
関口宗男 (国土舘大学)	格子 QCD によるスカラー中間子の質量生成機構の研究
萩田克美 (防衛大学校)	GPU の高速並列計算で実現する交差禁止制御可能な 高分子シミュレータの開発
村田忠彦 (関西大学)	合成人口プロジェクト：従業地・通学地属性の確率的割当てと 深層学習による空中写真からの住宅判別
谷川千尋 (大阪大学)	矯正歯科診断・治療計画立案を行う人工知能システムの開発

2020 年度 大規模計算機システム公募型利用制度 (追加募集) の活動状況

大阪大学サイバーメディアセンターでは、大規模計算機システムを活用する研究開発の育成・高度化支援の観点から、本センターが参画する「ネットワーク型」学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点 (JHPCN) や革新的ハイパフォーマンズ・コンピューティング・インフラ (HPCI) の目的を踏まえつつ、今後の発展が見込まれる萌芽的な研究課題や本センターの大規模計算機システムを最大限活用することで成果が見込まれる研究課題を公募しています。2020 年度は通常の募集に加えて追加募集を行い、以下の 3 課題を採択しました。

若手・女性研究者支援萌芽枠 採択課題

代表者名	研究課題名
谷川 千尋 様 (大阪大学 歯学部附属病院)	自動矯正歯科診断 A I システムの開発
上原 恵理香 様 (お茶の水女子大学 ソフトマター教育研究センター)	環状鎖メルトへの線状鎖の少量添加の粗視化 MD シミュレーション

人工知能研究特設支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
本田 崇人 様 (大阪大学 産業科学研究所)	IoT ビッグデータからのイベント予測による 異常検知ソフトウェアの開発

2021 年度 大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況

2021 年度も引き続き研究課題の公募を行い、以下の 4 課題を採択しました。

若手・女性研究者支援萌芽枠 採択課題

代表者名	研究課題名
岩崎 昌子 様 (大阪市立大学 理学研究科)	素粒子物理学実験への機械学習の適用研究

大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
伊藤 悦子 様 (京都大学 基礎物理学研究所)	勾配流法とスパースモデリング法による QCD 粘性の決定
鈴木 恒雄 様 (大阪大学 核物理研究センター)	Dirac 流モノポール凝縮による QCD の カラー閉じ込め機構のモンテ・カルロ法研究

人工知能研究特設支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
小山 恭平 様 (大阪大学 生命機能研究科)	ニューラルネットワークによる蛋白質機能予測の 解釈性に関する研究

大規模計算機システム Q&A

当センターに寄せられた質問を掲載しております。
同じ内容を以下の Web ページでも閲覧いただけます。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/faq/>

Q. 年度途中で計算資源やストレージ容量の追加は可能でしょうか？

A. はい。可能です。資源追加の申請につきましては、以下の利用者管理 WEB システムから申請頂いております。

利用者管理システム（要認証）

<https://manage.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/saibed/>

申請手順につきましては、以下のページにまとめておりますので、ご参照ください。

一般利用（学術利用）資源追加申請

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/service/basic_resourceadd/

Q. 年度途中で利用負担金の支払い費目や支払い時期を変更できますか？

A. WEB システムからは変更できませんので、下記までご連絡ください。

大阪大学 情報推進部 情報基盤課 研究系システム班

Mail: system@cmc.osaka-u.ac.jp

TEL: 06-6879-8808

Q. ディスク容量を追加した場合、利用期限はいつまでですか？

A. 年度途中で申し込まれた場合でも、利用期限は年度末までとなります。翌年度にディスク容量を追加しない場合は、データの整理を3月中にお願いいたします。やむを得ない事情がある場合や、間に合わない場合は、ご連絡くださいませ。原則として、事前連絡無しにこちらでデータを削除することはありません。

Q. ユーザ間でファイルを転送することは可能でしょうか？

A. scp コマンドを使用することで可能です。

例えば、カレントディレクトリ下の abc ディレクトリの中のファイル sample.c を、b61234 のホームディレクトリに転送する場合は以下のようなコマンドとなります。

```
scp ./abc/sample.c b61234@localhost:
```

Q. 一度に大量のジョブを投入し、ジョブごとに入力ファイル/実行ファイルを変更したい

A. ファイル名に連続した数値が含まれている場合、パラメトリックジョブという投入方法で、一度に大量のジョブを投入できます。

パラメトリックジョブでは、ジョブスクリプト内の"\$PBS_SUBREQNO"環境変数に、-t で指定した数値(下記の例では 1 から 5 までの数値)が格納されます。qsub すると同時に 5 本のジョブが投入され、a.out に対してそれぞれ異なる入力ファイル（下記の例では input1 から input5）が設定されます。

ジョブスクリプト例(jobscript.sh)

```
#PBS -q OCTOPUS
#PBS -l elapstim_req=0:30:00,cpunum_job=24
cd $PBS_O_WORKDIR
./a.out input$PBS_SUBREQNO
```

投入方法

```
qsub -t 1-5 jobscript.sh
```

qstat の表示例:パラメトリックジョブの場合、1 回の qsub につき 1 件分の表示となります

RequestID	ReqName	UserName	Queue	Pri	STT	S	Memory	CPU	Elapse	R	H	M	Jobs
123456[.].oct	nqs	username	OC1C	0	QUE	-	-	-	-	Y	Y	Y	1

sstat の表示例:-t で指定した数値分だけ表示されます

RequestID	ReqName	UserName	Queue	Pri	STT	PlannedStartTime
123456[1].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[2].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[3].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[4].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[5].oct	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -