

Title	センター報告 サイバーメディアHPCジャーナル No.12
Author(s)	
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2022, 12, p. 41-73
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/89346
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

センター報告

・ 2021 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	43
・ 第 27 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2021)報告および 第 28 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2022)告知	55
・ 大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	57
・ 2022 年度大規模計算機システム利用講習会	59
・ 2021 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	60
・ 2022 年度「HPCI(High Performance Computing Infrastructure)利用」の活動状況	68
・ 2022 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	69
・ 2021 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	70
・ 2022 年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況	71
・ 大規模計算機システム Q&A	72

2021 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2021年4月から2022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] Samuel Jeong, Tatsuhiko Ohto, Tomohiko Nishiuchi, Yuki Nagata, Jun-ichi Fujita, and Yoshikazu Ito, “Development of catalysts for carbon dioxide reduction”, *ACS Catal*, 11, 9962, 2021.
- [2] Kengo Takemoto, Yoshiki Ishii, Hitoshi Washizu, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi, “Simulating the nematic-isotropic phase transition of liquid crystal model via generalized replica-exchange method”, *The Journal of Chemical Physics*, Vol.156, No.014901, Jan. 2022.
- [3] Shota Goto, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi, “Effects of chain length on Rouse modes and non-Gaussianity in linear and ring polymer melts”, *Journal of Chemical Physics*, Vol.155, No.124901, Sep.2021.
- [4] Daiki Kato, Tomoya Murase, Jalindar Talode, Haruki Nagae, Hayato Tsurugi, Masahiko Seki, Kazushi Mashima, “Diarylcuprates for Selective Syntheses of Multi-Functionalized Ketones from Thioesters under Mild Conditions”, *chemistry a european journal*, Volume28, Issue26, May 2022.
- [5] Naoto Harada, Shingo Hirano, Masahiro N Machida, Takashi Hosokawa, “Impact of magnetic braking on high-mass close binary formation”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 508, 3730–3747, 2021.
- [6] Akio Ishii, “Spatial and temporal heterogeneity of Kohlrausch–Williams–Watts stress relaxations in metallic glasses”, *Comput. Mater. Sci.*, 198, 110673, 2021.
- [7] M. Imai, I. Tanabe, T. Sato and K. Fukui, “Local Structures and Dynamics of Interfacial Imidazolium-Based Ionic Liquid depending on the Electrode Potential using Electrochemical Attenuated Total Reflectance Ultraviolet Spectroscopy”, *Spectrochim. Acta, Part A*, 273, 121040, 2022.
- [8] Sayaka Kira, Takayuki Miyamae, Kohei Yoshida, Yuki Kanzaki, Kenji Sugisaki, Daisuke Shiomi, Kazunobu Sato, Takeji Takui, Shuichi Suzuki, Masatoshi Kozaki, Keiji Okada “Aurophilic Interactions in Multi-radical Species: Electronic-Spin and Redox Properties of Bis- and Tris-[(Nitronyl Nitroxide)-Gold(I)] Complexes with Phosphine-Ligand Scaffolds”, *Chem. -Eur. J.*, 27, 11450-11457, 2021.
- [9] Ryu Tanimoto, Tomoyuki Wada, Keiji Okada, Daisuke Shiomi, Kazunobu Sato, Takeji Takui, Shuichi Suzuki, Takeshi Naota, Masatoshi Kozaki, “A Molecule Having 13 Unpaired Electrons: Magnetic Property of a Gadolinium(III) Complex Coordinated with Six Nitronyl Nitroxide Radicals”, *Inorg. Chem*, 61, 3018-3023, 2022.
- [10] 中谷祐介, 鹿島千尋, 宮西杏奈, 西田修三, “人口減少による淀川流域の水・物質動態の変化”, *土木学会論文集G(環境)*, Vol.77, No.3, pp.83-102, 2021.
- [11] 鹿島千尋, 中谷祐介, “琵琶湖の底層溶存酸素の回復過程に関する三次元流動水質シミュレーション”, *土木学会論文集B1(水工学)*, Vol.77, No.2, pp.I_1057-I_1062, 2021.
- [12] K. Sugimoto, N. Iwata, A. Sunahara, T. Sano, and Y. Sentoku, “Dynamics of ultrafast heated radiative plasmas driven by petawatt laser light”.
- [13] A. Sunahara, and T. Morita, “Numerical Analysis on Propellant Performance”, *J. Plasma Fusion Res.*, Vol.97, No.11, 634-640, 2021.
- [14] Y. Mori, K. Ishii, R. Hanayama, S. Okihara, Y. Kitagawa, Y. Nishimura, O. Komeda, T. Hioki, T. Motohiro, A. Sunahara, Y. Sentoku, A. Iwamoto, H. Sakagami, E. Miura, and T. Johzaki, “10-Hz Beads pellet injection and laser engagement”, *Nucl. Fusion*, 62, 36028, 2021.
- [15] T. Ozaki, Y. Abe, Y. Arikawa, S. Okihara, E. Miura, A. Sunahara, K. Ishii, R. Hanayama, O. Komeda, Y. Sentoku, A. Iwamoto, H. Sakagami, T. Johzaki, J. Kawanaka, S. Tokita, N. Miyanaga, T. Jitsuno, Y. Nakata, K. Tsubakimoto, Y. Mori and Y. Kitagawa, “Hot Electron and Ion Spectra in Axial and Transverse Laser Irradiation in the GXII-LFEX

- Direct Fast Ignition Experiment”, *Plasma and Fusion Research*, 16, 2402076, 2021.
- [16] K. Ohno, Y. Ohta, S. Kawamoto, S. Abe, R. Hino, S. Koshimura, A. Musa, and H. Kobayashi, “Real-time automatic uncertainty estimation of coseismic single rectangular fault model using GNSS data”, *Earth Planets Space*, 73, 127, 2021.
- [17] K. Ohno, Y. Ohta, R. Hino, S. Koshimura, A. Musa, T. Abe and H. Kobayashi, “Rapid and quantitative uncertainty estimation of coseismic slip distribution for large interplate earthquakes using real-time GNSS data and its application to tsunami inundation prediction”, *Earth Planets Space*, 74, 24, 2022.
- [18] Z. Shen, J.-P. Du, S. Shinzato, Y. Sato, P. Yu, S. Ogata, “Kinetic Monte Carlo simulation framework for chemical short-range order formation kinetics in a multi-principal element alloy”, *Computational Materials Science*, 198, 110670, 2021.
- [19] Fan-Shun Meng, Jun-Ping Du, Shuhei Shinzato, Hideki Mori, Peijun Yu, Kazuki Matsubara, Nobuyuki Ishikawa, and Shigenobu Ogata, “General-purpose neural network interatomic potential for the α -iron and hydrogen binary system: Toward atomic-scale understanding of hydrogen embrittlement”, *Physical Review Materials*, Vol.5, No.11, pp.113606(1)-113606(16), Nov. 2021.
- [20] Peijun Yu, Jun-Ping Du, Shuhei Shinzato, “Fan-Shun Meng, Shigenobu Ogata”, *Theory of history dependent multi-layer generalized stacking fault energy—A modeling of the micro-substructure evolution kinetics in chemically ordered medium-entropy-alloys*, *Acta Materialia*, 117504-1-12, 224, 2022.
- [21] T. Hiejima and K. Nishimura, “Effects of fuel injection speed on supersonic combustion using separation-resistant struts”, *AIP Advances*, 11 [6], No.065123, 13 pages, 2021.
- [22] T. Hiejima, “A high-order weighted compact nonlinear scheme for compressible flows”, *Computers and Fluids*, 232 [10], 105199, 11 pages, 2022.
- [23] J. Guan, T. Pal, K. Kamiya, N. Fukui, H. Maeda, T. Sato, H. Suzuki, O. Tomita, H. Nishihara, R. Abe, R. Sakamoto, “wo-Dimensional Metal–Organic Framework Acts as a Hydrogen Evolution Cocatalyst for Overall Photocatalytic Water Splitting”, *ACS Catal*, Vol.12, No.014317, pp3881–3889, 2020.
- [24] Takayuki Myo, Mengjiao Lyu, Hiroshi Toki, Hisashi Horiuchi, Qing Zhao, Masahiro Isaka, Hiroki Takemoto, Niu Wan, “New many-body method using cluster expansion diagrams with tensor-optimized antisymmetrized molecular dynamics”, *Physical Review C* 105 (2022), No.044306.
- [25] Takayuki Myo, Myagmarjav Odsuren, Kiyoshi Kato, “Five-body resonances in ^8He and ^8C using the complex scaling method”, *Physical Review C* 104 (2021).
- [26] Tsuboi, N., Hayashi, A. K., Tamauchi, Y., Kodama, T., “Numerical Simulation of the Deflagration to Detonation Transition in a Tube with Repeated Obstacles”, *Experimental Scale Simulation Using the Artificial Thickened Flame Method*, *Transactions on Aerospace Research*, 4(265), pp.41-52, 2021.
- [27] Reza Aulia Rahman, Tsutomu Uenohara, Yasuhiro Mizutani, Yasuhiro Takaya, “First Step Toward Laser Micromachining Realization by Photonic Nanojet in Water Medium”, *International Journal of Automation Technology*, Vol.15, No.4, pp. 492-502, 2021.
- [28] 岡林希依, “ミウラ折り型ジグザグリブレットによる摩擦抵抗低減の試み”, *ながれ*, (日本流体力学会誌; 特集「境界層の摩擦抵抗低減技術」), Vol.40, No.4, pp.264-270, Aug. 2021.
- [29] 岡林希依, “キャビテーション流れに特化した乱流解析法”, *ターボ機械*, Vol.49, No.11, pp. 656-666, Nov.2021.
- [30] Takashi Ohta and Keisuke Nakatsuji, “Spatial-scaling method and modified large eddy simulation to examine rough-wall turbulence”, *Journal of Turbulence*, Vol.22, No.7(2021), pp.413-433, 2021.
- [31] Takashi Ohta, Tatsuya Yonemura, and Yasuyuki Sakai, “Numerical investigation of the effect of rotation on non-premixed hydrogen combustion in developing turbulent mixing layers”, *Journal of Turbulence*, Vol.22, No.10(2021), pp.597-622, 2021.
- [32] Takashi Ohta, Fumiya Osaka, and Yuta Kitagawa, “Modulation of turbulent Couette flow with vortex cavitation in a minimal flow unit”, *Journal of*

- Turbulence, Vol.23, No.3(2022), pp.152-172, 2022.
- [33] Takashi Ohta, Yuta Onishi, and Yasuyuki Sakai, “Modulation of wall turbulence by propagating flame of premixed hydrogen-air combustion”, *Combustion and Flame*, Mar 2022.
- [34] Nakamura T, Kiuchi K, Fukuzawa K, Takami M, Watanabe Y, Izawa Y, Suehiro H, Akita T, Takemoto M, Sakai J, Yatomi A, Sonoda Y, Takahara H, Nakasone K, Yamamoto K, Negi N, Kono A, Ashihara T, Hirata K, “Late-gadolinium enhancement properties associated with atrial fibrillation rotors in patients with persistent atrial fibrillation”, *Cardiovasc Electrophysiol*, 32, 1005-1013, 2021.
- [35] Haraguchi R, Ashihara T, Yoshimoto J, Matsuyama T, “High accessory pathway conductivity blocks antegrade conduction in Wolff-Parkinson-White syndrome”, *Arrhythm*, 37, 683-689, 2021.
- [36] Tomii N, Yamazaki M, Ashihara T, Nakazawa K, Shibata N, Honjo H, Sakuma I, “Spatial phase discontinuity at the center of moving cardiac spiral waves”, *Comput Biol Med*, 130, 2021.
- [37] K. Hagita, T. Murashima, H. Shiba, N. Iwaoka, T. Kawakatsu, “Role of chain crossing prohibition on chain penetration in ring-linear blends through dissipative particle dynamics simulations”, *Computational Materials Science*, 203, 111104, Feb. 2022.
- [38] K. Hagita, T. Murashima, H. Jinnai, “Demonstration of reinforcement in polymer composite with rings penetrating the diamond-lattice network”, *Polymer*, 243, 124637, Mar. 2022.
- [39] K. Hagita, T. Murashima, M. Ebe, T. Isono, T. Satoh, “Trapping probabilities of multiple rings in end-linked gels”, *Polymer*, 245, 124683, Apr. 2022.
- [40] Yamaguchi Y, Kim B, Kitamura T, Akizawa K, Chen H, Shimoda Y, “Building stock energy modeling considering building system composition and long-term change for climate change mitigation of commercial building stocks”, *Applied Energy*, 117907, 306, 2022.
- [41] Tomoya Hayata, Yoshimasa Hidaka, Arata Yamamoto, “Lattice Lindblad simulation”, *PTEP*, 053, 2022.
- [42] Hideo Suganuma and Hiroki Ohata, “Local Correlation among the Chiral Condensate, Monopoles, and Color Magnetic Fields in Abelian Projected QCD”, *Universe*, 7, 9, 318, 2021.
- [43] Y. Murakami, M. Sekiguchi, H. Wada and M. Wakayama, “Properties of the five dimensions for the truncated overlap fermions”, *Journal of Physics Communications* 5, 85009, 2021.
- [44] 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”, *Physical Review*, C 103, 054319, 2021.
- [45] Hiroaki Kouno, “Number density in Z3-symmetric lattice QCD at finite chemical potential under the phase quenched approximation”, *Reports of the Faculty of Science and Engineering, Saga University*, Vol. 50, No.1, pp1-5, 2021.
- [46] K. Nakazato, H. Togashi and K. Sumiyoshi, “Numerical study of stellar core collapse and neutrino emission with the nuclear equation of state obtained by the variational method”, *Publications of the Astronomical Society of Japan*, 73, 639-651, 2021.
- [47] M. Arimoto et al, “Gravitational wave physics and astronomy in the nascent era”, 39th in the alphabetical list of 53 authors, 83, 2021.
- [48] H. Sotani and K. Sumiyoshi, “Stability of the protoneutron stars toward black hole formation”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 507, 2766-2776, 2021.
- [49] C. Nagele, H. Umeda, K. Takahashi, T. Yoshida, and K. Sumiyoshi, “Neutrino emission from the collapse of $\sim 104 M_{\text{sun}}$ population III supermassive stars”, *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, 508, 898-841, 2021.
- [50] K. Nakazato, F. Nakanishi, M. Harada, Y. Koshio, Y. Suwa, K. Sumiyoshi, A. Harada, M. Mori, and R. A. Wendell, “Observing supernova neutrino light curves with Super-Kamiokande: II. impact of nuclear equation of state”, *Astrophysical Journal*, 925, 98, 98, 2022.
- [51] K. Yoshida, “Cranked Skyrme-Hartree-Fock-Bogoliubov approach for a mean-field description of nuclear rotations near the drip line”, *Phys. Rev. C*, 105, 024313, 2022.
- [52] K. Yoshida, “Super- and hyperdeformation in ^{60}Zn , ^{62}Zn , and ^{64}Ge at high spins”, *Phys. Rev. C*, 105, 024318, 2022.

2. 国際会議会議録掲載論文

- [1] Haruka Taniguchi, Koichi Tsujimoto, Toshihiko Shakouchi, Toshitake Ando, Mamoru Takahashi, “Analysis of oscillation-controlled multiple impinging jets with varying impinging distance using DNS”, Proceedings of the 7th International Conference On Jets, Wakes and Separated Flows, 5p, Mar. 2022.
- [2] Yuichi Banno, Koichi Tsujimoto, Toshihiko. Shakouchi, Toshitake Ando, Mamoru Takahashi, “Flow and heat transfer characteristics of inclined rotating impinging jets using DNS”, Proceedings of the 7th International Conference On Jets, Wakes and Separated Flows, 5p, Mar. 2022.
- [3] Yuki Kato, Kengo Sato, Jakob Hull Havgaard and Yukio Kawahara, “Deep learning-based prediction of potential RNA G-quadruplexes with D-Quartet”, 29th Conference on Intelligent Systems for Molecular Biology and the 20th European Conference on Computational Biology (ISMB/ECCB2021), Poster, 784, Virtual, Jul. 2021.
- [4] Daiki Okada, Hiroki Kijima, Tomotaka Konayashi, Ken Naitoh, “Computation of Compressive Flow in Pulsed Focusing Engine(Fugine) Set in Shock Tube”, JSST2021, Sep 2021.
- [5] Yuhan Chen, Takashi Matsubara, and Takaharu Yaguchi, “Neural Symplectic Form: Learning Hamiltonian Equations on General Coordinate Systems”, Advances in Neural Information Processing Systems 34 (NeurIPS2021), 2021.
- [6] Keisuke Yoshidomi, Nobuhiro Kurita, Kohei Ozawa, Nobuyuki Tsuboi, A Koichi Hayashi, Hideto Kawashima, “Numerical Simulation on Rotating Detonation Engine: Effect of Number of Injection Ports in Non-Premixed H₂-O₂ Gases”, AIAA SciTech2022, AIAA 2022-1112, San Diego, CA & Virtual, Jan 2022.
- [7] Tomohito Nakatsukasa, Taishi Amano, Takahide Araki, Hiroshi Terashima, Nobuyuki Tsuboi, Kohei Ozawa, “Numerical Study of Cryogenic Hydrogen Jet in Crossflow under Supercritical Pressure: Effects of the Number of Injector holes”, 33rd International Symposium on Space Technology and Science, 2022-a-27, Beppu, Japan, March 2022.
- [8] Kalash Dixit, Kohei Ozawa, Nobuyuki Tsuboi, “Three-dimensional Numerical simulation of Hypersonic flow over a Ramp : Effects of angle of attack on shock wave structure”, 3rd International Symposium on Space Technology and Science, 2022-e-14, Beppu, Japan, March 2022.
- [9] Tsutomu Uenohara, Makoto Yasuda, Yasuhiro Mizutani, Yasuhiro Takaya, “DETECTION OF SHOCK WAVE IN LASER ABLATION USING A PHOTONIC NANOJET”, XXIII IMEKO World Congress, Aug. 2021.
- [10] Tsutomu Uenohara, Reza Aulia Rahman, Yasuhiro Mizutani, Yasuhiro Takaya, “LASER MICRO MACHINING USING A PHOTONIC NANOJET IN WATER MEDIUM”, Proceedings of the ASME 2021 16th International Manufacturing Science and Engineering Conference, 60045, Jun. 2021.
- [11] Takehiro Fujii, Takeshi Omori, Takeo Kajishima, “Immersed Boundary Projection Method for the Incompressible Navier-Stokes Equation with Arbitrarily Shaped Navier Slip Boundaries”, 25th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics, Aug.2021.
- [12] Toshikazu Noda, Kie Okabayashi, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “Application of Deep Reinforcement Learning and Transfer Learning for Optimization of Geometry Parameters of Corrugated Wing”, Proc. of AIAA SciTech Forum 2022, AIAA-2022-0458, Jan. 2022.
- [13] Tatsuro Yamazaki, Yutaka Oda, Ryosuke Matsumoto, Masashi Katsuki, “Momentum and Heat Transfer Associated with Vortex Structure in Pulsating Turbulent Channel Flow”, The 15th International Symposium in Science and Technology 2021, In: Ext. Abstracts of 2nd Asian Conf. on Thermal Sci. (2nd ACTS), ME-O05, Aug. 2021.
- [14] K. Sumikawa, K. Ushijima, and T. Tsukahara, “Numerical simulation of solid-gas-liquid three-phase flow in SLM processing”, In: Ext. Abstracts of 2nd Asian Conf. on Thermal Sci. (2nd ACTS), Virtual, 50414, Oct. 2021.
- [15] K. Kawazu, T. Homma, I. Ueno, and T. Tsukahara, “Numerical study on basic-flow patterns of thermal Marangoni convection in rectangular free liquid film”, In: Ext. Abstracts of 2nd Asian Conf. on Thermal Sci. (2nd ACTS), Virtual.
- [16] T. Kurihara, T. Ishigami, and T. Tsukahara, “Regression-type inverse estimation by CNN to identify a scalar source in turbulent channel flow”, In: Proc. of the 8th Asian Symp. on Computational

- Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT2021), Qingdao, China (hybrid), ASCHT2021-266, 6 pages, Sep. 2021.
- [17] K. Takeda, M. Sano, and T. Tsukahara, “Side-wall effect of high-aspect-ratio duct flow on turbulent bands in subcritical transition”, In: Proc. of the 8th Asian Symp. on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT2021), Qingdao, China (hybrid), ASCHT2021-256, 10 pages, Sep. 2021.
- [18] Y. Matsukawa and T. Tsukahara, “Subcritical transition of Taylor-Couette-Poiseuille flow”, In: Proc. of the 8th Asian Symp. on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT2021), Qingdao, China (hybrid), ASCHT2021-241, 6 pages, Sep. 2021.
- [19] K. Nakagawa, T. Tsukahara, and T. Ishida, “Turbulent transition induced by an interaction between freestream turbulence and discrete roughness in swept-flat-plate boundary layer”, In: Proc. of the 8th Asian Symp. on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT2021), Qingdao, China (hybrid), ASCHT2021-077, 7 pages, Sep. 2021.
- [20] T. Tsukahara, C. Izumi, Y. Matsukawa, and K. Takeda, “Patterning of turbulent natural convection in vertical channel”, In: Proc. of the 8th Asian Symp. on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT2021), Qingdao, China (hybrid), ASCHT2021-041, 2 pages, Sep. 2021.
- [21] K. Takeda and T. Tsukahara, “Intermittent turbulent structures in subcritical transition of annular Couette flow with/without imaginary domain”, In: Abst. 25th Int. Congress of Theor. Appl. Mech. (ICTAM2020+1), Milan, Italy (virtual), pp. 98-99, Aug. 2021.
- [22] H. Morimatsu and T. Tsukahara, “Study of intermittent structure in annular Couette-Poiseuille flow from turbulent puff to turbulent stripe”, In: Abst. 25th Int. Congress of Theor. Appl. Mech. (ICTAM2020+1), Milano, Italy (virtual), pp. 114-115, Aug. 2021.
- [23] Peter Ring, Sibowang, Qiang Zhao, and Jie Meng, “Relativistic Brueckner-Hartree-Fock Theory in Infinite Nuclear Matter”, EPJ Web of Conferences, 252, 02001, 2021.
- [24] K. Sumiyoshi, “Equation of state and neutrino transfer in supernovae and neutron stars”, European Physical Journal A, 57, 331, 12 pages, 2021.
- [25] Masayasu Hasegawa, “Instanton effects on chiral symmetry breaking and hadron spectroscopy”, PoS/The 38th International Symposium on Lattice Field Theory, LATTICE2021, 397.

3. 国内研究会等発表論文

- [1] Mai Mizukami, Mariko Inoue, Tokiya Teraishi, Hayato Tsurugi, Kazushi Mashima, “Hydroaminoalkylation of Styrenes Catalyzed by Cationic Half-titanocene”, 日本化学会第102春季年会, オンライン開催, 2022年3月26日.
- [2] Mariko Inoue, Tokiya Teraishi, Mai Mizukami, Hayato Tsurugi, and Kazushi Mashima, “Mechanistic Study on Branch-selective Hydroaminoalkylation of Styrenes Catalyzed by Cp*TiMe3/AlMe3”, 日本化学会第102春季年会, オンライン開催, 2022年3月26日.
- [3] Koichi Shinohara, Hayato Tsurugi, and Kazushi Mashima, “N-Methylation of Amines via Reductive Carbon Dioxide Fixation Catalyzed by Lanthanum Complexes bearing a Nitrogen Tridentate LigandHydridotriarylborate”, 日本化学会第101春季年会, オンライン開催, 2021年3月20日.
- [4] Koichi Shinohara, Hayato Tsurugi, and Kazushi Mashima, “希土類アミド錯体とトリアリールボランを触媒に用いた二酸化炭素をC1源とするアミン化合物のN-メチル化反応”, 第37回希土類討論会, オンライン開催, 2021年5月20日.
- [5] Koichi Shinohara, Hayato Tsurugi, and Kazushi Mashima, “CO2 Fixation into Amine via Hydrosilylation of CO2 Catalyzed by Lanthanum Hydridotriarylborate Complexes with an N,N'-Bis(pentafluorophenyl)diethylenetriamine Ligand”, 第67回有機金属化学討論会, オンライン開催, 2021年9月7日.
- [6] 村瀬智哉、加藤大樹、長江春樹、劔隼人、関雅彦、真島和志, “有機銅試薬によるチオエステル選択的なケトン合成法の開発”, 第47回反応と合成の進歩シンポジウム, オンライン開催, ポスター発表, 2021年10月2-4日.
- [7] 加藤大樹、村瀬智哉、長江春樹、劔隼人, “関雅彦、真島和志、有機銅アート試薬によるチオエステルのケトン合成反応の反応機構解析”, 日本化学会第102春季年会, オンライン

- 開催, 口頭発表, 2022年3月23日.
- [8] 長谷川航大, 馬場吉弘, 長岡直人, 津端裕之, 西孝祐樹, “雷撃を受けたCFRPの導電率温度依存性を考慮した電磁界と熱の FDTD 解析”, 電気学会放電・プラズマ・パルスパワー/開閉保護/高電圧合同研究会, オンライン, 2021年11月.
- [9] 清水口裕樹, 芝原正彦, “全固体電池におけるLiイオンの拡散に関する分子動力学シミュレーション”, 日本機械学会 関西学生会 2021年度学生員卒業研究発表講演会, 2022年3月.
- [10] 藤井祐作, 藤原邦夫, 津島将司, 芝原正彦, “界面付着触媒ナノ粒子の反応性に関する分子シミュレーション”, 日本機械学会熱工学カンファレンス, 2021年10月.
- [11] Kunichika Tsumoto, Takao Shimamoto, Akira Amano, Yasutaka Kurata., “Relations between early afterdepolarizations and ventricular lethal arrhythmias in long QT syndrome: a simulation study.”, 第67回日本不整脈心電学会学術集会, 福岡国際会議場/福岡サンパレス, 福岡市, July 2021.
- [12] 津元国親, 島本貴生, 青地悠馬, 天野晃, 九田裕一, 谷田守, 倉田康孝, “心室不整脈トリガーの発生機序:シミュレーション研究”, 第68回中部日本生理学会, 金沢医科大学, 内灘町, Oct-21.
- [13] 津元国親, 島本貴生, 青地悠馬, 九田裕一, 谷田守, 天野晃, 倉田康孝, “Mechanisms of early afterdepolarization-mediated lethal arrhythmias in patients with long QT syndrome type II: an in silico study.”, 第95回日本薬理学会年会, 福岡, 福岡市, Mar 2022.
- [14] 津元国親, 島本貴生, 青地悠馬, 九田裕一, 谷田守, 天野晃, 倉田康孝, “Onset mechanisms of spiral wave reentry occurring in a long QT syndrome type 2 model: insights from a simulation study.”, 第99回日本生理学会大会, 仙台, 仙台市, Mar 2022.
- [15] 津元国親, “Breakups of excitation propagation in the heart: cardiac arrhythmias. 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99回日本生理学会大会, 仙台, 仙台市, Mar 2022.
- [16] 鹿島千尋, 戸村祐希, 山根成陽, 中谷祐介, “高解像非構造格子モデルを用いた瀬戸内海の埋め立てによる流動影響解析”, 第56回日本水環境学会年会, 3-A-10-2, 2022.
- [17] 稲垣翔太, 中谷祐介, 秋山諭, 木村祐貴, “底曳網漁業が大阪湾の水質構造に及ぼす影響の数値解析”, 第56回日本水環境学会年会, 2-A-09-4, 2022.
- [18] 山根成陽, 鹿島千尋, 中谷祐介, “分布型流出モデルを用いた瀬戸内海の過去30年の淡水流入特性の解析”, 第56回日本水環境学会年会, 3-A-10-1, 2022.
- [19] Kashima, C., Nakatani, Y., and Tomura, Y., “Y.: Regional-scale changes in flow due to coastal land reclamation in the Seto Inland Sea”, Coastal and Estuarine Research Federation (CERF) 26th Biennial Conference, 16th Estuarine Coastal Modeling Session (ECM16), 2021.
- [20] Tomura, Y. and Nakatani, Y., “Y.: Dynamics analysis of refractory organic matter from the Pacific Ocean in the Seto Inland Sea”, Coastal and Estuarine Research Federation (CERF) 26th Biennial Conference, 16th Estuarine Coastal Modeling Session (ECM16), Online, 2021.
- [21] Huang, R., Nakatani, Y., and Irie, “M.: Evaluating impacts of the Yangtze River water transfer on water quality in Lake Taihu”, The Water and Environment Technology Conference (WET2021), China, 1A-3-d, 2021.
- [22] 井上真吾, 稲垣翔太, 中谷祐介, 西田修三, “発電所取放水が高閉鎖性海域の流動水質に及ぼす影響”, 2021年度土木学会関西支部年次学術講演会概要集, II-38, 2021.
- [23] 谷口 晴香, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “近距離における振動制御した多重衝突噴流の解析”.
- [24] 坂野 友一, 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”.
- [25] 谷口晴香, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “衝突距離を変更した振動制御下における多重衝突噴流のDMD解析”.
- [26] 藤森 航紀, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “間欠制御された多重衝突噴流のDNS”, 第99期日本機械学会流体工学部門講演会, 4p, Nov. 2021.
- [27] 坂野 友一, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “DNSを用いた傾斜回転させた衝突噴流の流動・伝熱特性”, 第99期日本機械学

会流体工学部門講演会, 4p, Nov. 2021.

- [28] 坂野 友一, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “周波数比を変化させた傾斜・回転制御させた衝突噴流のDNS” .
- [29] 谷口晴香, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, 高橋護, “振動制御下における多重衝突噴流の伝熱性能の均一化”, 日本機械学会東海支部第 71 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2021.
- [30] 藤森航紀, 辻本公一, “DNSによる間欠制御された多重衝突噴流の周波数特性”, 日本機械学会東海支部第 53 回学生会卒業研究発表講演会講演論文集, 2p, Mar. 2022.
- [31] 糸田智洋 他, “レーザープラズマから放出される水の窓領域X線のレーザー強度依存性”, 日本物理学会, 2022 年春季大会, 2022 年 3 月 16 日.
- [32] 加藤 有己, 佐藤 健吾, Jakob Hull Havgaard, 河原 行郎, “畳み込みニューラルネットワークによるRNAグアニン 4 重鎖領域予測”, 第 21 回日本RNA学会年会, 東京都文京区, P-29, Jul. 2019.
- [33] 加藤 有己, 佐藤 健吾, Jakob Hull Havgaard, 河原 行郎, “深層学習に基づくRNAグアニン 4 重鎖構造識別法の検討”, 第 20 回日本RNA学会年会, 大阪府大阪市, P-40, Jul. 2018.
- [34] 前田陽生, 比江島俊彦, “高マッハ数における衝撃波捕獲の精度改善に関する研究”, 第 35 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, C08-4, p1-2, 2021.
- [35] 水野賢吾, 比江島俊彦, “スクラムジェットエンジンのインレットにおけるゲルトラー渦の生成について”, 第 35 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, D02-3, p1-2, 2021.
- [36] 村岡亮太, 比江島俊彦, “不足膨張ジェット流におけるマッハディスクの発生に関する研究”, 第 35 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, A06-3, p1-2, 2021.
- [37] 松山 力生, 土岐 紘大, 比江島 俊彦, “超音速ジェット流におけるマッハ波の発生に関する数値計算”, 日本機械学会関西支部 2021 年度関西学生会卒業研究発表講演会論文集, 10736, p1-1, 2022.
- [38] 松山 力生, 土岐 紘大, 比江島 俊彦, “超音速ジェット流によるマッハ波発生の要因について”, 2021 年度衝撃波シンポジウム講演論文集, 3A1-1, p1-1, 2022.
- [39] 加藤慎太郎, 橋本啄哉, 原田隆史, 中西周次, 神谷和秀, “金属担持有機構造体による高速CO₂ 電解還元とその第一原理解析”, 電気化学学会第 89 回大会, オンライン開催, Mar 2022.
- [40] 山本泰暉, 原田隆史, 中西周次, 神谷和秀, “亜鉛イオンを活性中心に有する人工炭酸脱水酵素の開発: 理論計算化学からのアプローチ”, 日本化学会 第 102 春季年会(2022), オンライン, Mar 2022.
- [41] 大橋圭太郎, 原田隆史, 神谷和秀, 中西周次, “単一銅原子触媒による一酸化炭素の選択電解還元とその第一原理解析”, 電気化学学会第 89 回大会, オンライン開催, Mar 2022.
- [42] 藤田友輝, 河原伸幸, “ガスパーセル法を用いた天然ガス噴流挙動の数値解析”, 第 32 回内燃機関シンポジウム, 講演番号 57, 2021 年 12 月 8 日.
- [43] 戸上稔基, 河原伸幸, “軽油着火式二元燃料ガスエンジンにおけるPREMIER燃焼一圧縮性を考慮したエンドガス部における天然ガス自着火の数値解析”, 第 32 回内燃機関シンポジウム, 講演番号 68, 2021 年 12 月 9 日.
- [44] 陳鈺涵, 徐百歌, 松原崇, 谷口隆晴, “ニューラルシンプレクティブ形式とその応用”, 日本応用数理学会第 18 回研究部会連合発表会, オンライン, 2021.
- [45] 陳鈺涵, 松原崇, 谷口隆晴, “シンプレクティブ形式の学習による一般座標系での深層物理モデル”, 日本応用数理学会環瀬戸内応用数理研究部会第 25 回シンポジウム, 岡山, 2021.
- [46] 陳鈺涵, 松原崇, 谷口隆晴, “ニューラルシンプレクティブ形式とそれによる一般座標系でのハミルトン方程式の学習”, 第 24 回情報論的学習理論ワークショップ(IBIS2021), オンライン, 2021.
- [47] 二宮雅輝, 林佑介, 藤平哲也, 酒井朗, “第一原理計算手法に基づく外部電場下におけるルチル型TiO₂ 中の酸素空孔挙動の解析”, 第 82 回応用物理学会秋季学術講演会, オンライン, 10p-S203-3, 2021 年 9 月.
- [48] 藤井 健博, 大森 健史, 梶島 岳夫, “滑り速度を有する境界に対する埋め込み境界射影法: 境界力の分配演算子が満たすべき条件”, 数値流体力学シンポジウム, 2021.12.16.

- [49] 河野宏明, 柏浩司, 開田丈寛, “量子色力学の有効モデルの複素化学ポテンシャル領域における解析”, 日本物理学会 2021 年秋季大会, オンライン開催, 2021 年 9 月 15 日.
- [50] 河野宏明, 柏浩司, 開田丈寛, “低温極限における有効ポリヤコフラインモデル”, 第 127 回日本物理学会九州支部例会, オンライン開催, 2021 年 12 月 4 日.
- [51] 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 モデルにおける臨界現象の格子依存性の解析”, 日本物理学会 2021 年秋季大会 (9 月).
- [52] 井上 豪, 坪井 伸幸, 小澤 晃平, 林 光一, “詳細化学反応モデルを用いたアンモニア/空気予混合気の爆轟に関する二次元数値解析-水素混焼による影響の評価-”, C224, 2021.
- [53] 中司智仁, 荒木天秀, 寺島洋史, 小澤晃平, 坪井伸幸, “主流と混合する複数噴射口からの極低温水素噴流に関する数値解析: 主流方向に 2 つの噴射口を設けた場合”, 日本航空宇宙学会西部支部講演会(2021), JSASS-2021-S015, 2021.
- [54] 大倉毅士, 坪井伸幸, 小澤晃平, 野中聡, 伊藤隆, “再使用ロケット実験機 RV-X の空力特性における数値解析”, 第 65 回宇宙科学技術連合講演会, 3F10, 2021.
- [55] 大倉毅士, 坪井伸幸, 小澤晃平, 野中聡, 伊藤隆, “再使用ロケット実験機 RV-X の空力特性における数値解析”, 令和 3 年度 宇宙航行の力学シンポジウム, 2021.
- [56] 高田泰成, 上野原努, 水谷康弘, 高谷裕浩, “フォトリックナノジェットを利用した微細加工に関する研究(第 9 報) —空間光変調器を用いたフォトリックナノジェットの強度分布制御—”, 2022 年度精密工学会春季大会学術講演会, C07, Mar. 2022.
- [57] 野田 隼司, 岡林 希依, 竹内伸太郎, 梶島 岳夫, “深層強化学習を用いた折れ曲がり翼の形状パラメータ最適化の試み”, 第 53 回流体力学講演会/第 39 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 1B05, Jun.2021.
- [58] 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による翼周り流れの非定常解析”, 日本混相流学会 混相流シンポジウム 2021 講演論文集, E0115, Aug.2021.
- [59] 岡林 希依, 梶島 岳夫, “乱流要素渦を考慮した翼回りキャビテーション乱流の非定常解析に関する研究”, 第 20 回キャビテーションに関するシンポジウム, T1-7, Dec. 2021.
- [60] 藤井 健博, 大森 健史, 梶島 岳夫, “滑り速度を有する境界に対する埋め込み境界射影法: 境界力の分配演算子が満たすべき条件”, 第 35 回数値流体力学シンポジウム, B12-3, Dec. 2021.
- [61] 長友英夫, “放射流体としてのレーザープラズマ”, 日本物理学会 2021 年秋季大会シンポジウム「原子・分子過程で繋ぐマルチスケールプラズマの科学», オンライン, 21pB1-6, 2021 年 9 月 21 日.
- [62] 永井 優河, 太田 貴士, 酒井 康行, “DNS による天然ガス予混合燃焼を伴う壁乱流の観察”, 第 19 回日本流体力学学会中部支部講演会, Nov. 2021.
- [63] 北川 雄太, 太田 貴士, “渦キャビテーションを伴うクエット乱流で乱流構造の変化を予測するための DNS の実現”, 流体工学シンポジウム(第 68 回北陸流体工学研究会), Dec. 2021.
- [64] 白畑 風太郎, 太田 貴士, “円柱周り軸方向流れの乱流構造の特徴と半径レイノルズ数の関係”, 流体工学シンポジウム(第 68 回北陸流体工学研究会), Dec. 2021.
- [65] 永井 優河, 太田 貴士, 酒井 康行, “天然ガス予混合燃焼を伴う壁乱流における乱流構造と火炎構造の変調”, 第 35 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 2021.
- [66] 都築 昇悟, 太田 貴士, “DNS に基づく粘弾性流体乱流のための LES モデルの提案と検証”, 日本機械学会 北陸信越支部 2022 年合同講演会, Mar. 2022.
- [67] 藤野潤, 本告遊太郎, 後藤晋, “円柱背後の乱流中における渦の階層とその生成機構”, 日本物理学会第 77 回年次大会, M17pB12-4, Mar. 2022.
- [68] 本告遊太郎, 後藤晋, “壁乱流中の秩序構造の階層による粒子の輸送”, 第 37 回生研 TSFD シンポジウム, No. 3, Mar. 2022.
- [69] 増田颯人, 小井手祐介, 本告遊太郎, 後藤晋, “高分子溶液のレオロジー特性の解明に向けた 2 つの異なるスケールの連成シミュレーション”, 日本機械学会関西学生会 2021 年度学生員卒業研究発表講演会, No. 10836, Mar. 2022.

- [70] 村端秀基, 本告遊太郎, 後藤晋イルカの背びれ周りの流れの解明に向けた数値シミュレーション日本機械学会関西学生会 2021 年度学生員卒業研究発表講演会No. 10639Mar. 2022.
- [71] 江田駿介, 藤嶋歩里, 中谷謙介, 本告遊太郎, 後藤晋, “強化学習による流れの能動制御の実験と数値シミュレーション”, 日本機械学会関西学生会 2021 年度学生員卒業研究発表講演会, No. 10711, Mar. 2022.
- [72] 森脇渉太, 本告遊太郎, 後藤晋, “リザーバーコンピューティングを用いた壁乱流の秩序構造の推定”, 日本機械学会関西学生会 2021 年度学生員卒業研究発表講演会, No. 10712, Mar. 2022.
- [73] 安房井, 本告遊太郎, 後藤晋, “非球形粒子の乱流輸送現象の解明に向けた直接数値シミュレーション”, 日本機械学会関西学生会 2021 年度学生員卒業研究発表講演会, No. 10832, Mar. 2022.
- [74] 山崎龍朗, 小田豊, 松本亮介, 香月正司, “脈動乱流における乱れの再分配機構に基づく運動量・熱輸送の局時的非相似性の検討”, 第 58 回日本伝熱シンポジウム, Paper No. F124, May-21.
- [75] 柳 尚紀, 坪井 和也, “インジェクタの内部流動がキャビテーション生成に及ぼす影響に関する数値的研究”, 日本機械学会 中国四国支部第 60 期総会・講演会講演論文集, 07a1, 2022 年 3 月.
- [76] 岸田優作, 浦田智和, 大星直樹, 宮崎晃, 芦原貴司, 坂田憲祐, 柴田仁太郎, 井尻敬, 高山健志, 信太宗也, 原良昭, 稲田慎, 中沢一雄, “ヒト心房の 3 次元モデルに基づく心房細動興奮伝播様式の再現を目指した電気生理学的シミュレーションと可視化”, 第 41 回医療情報学連合大会(第 22 回日本医療情報学大会), 2021 年 11 月 18-21 日.
- [77] Sakata K, Okuyama Y, Ozawa T, Fujii Y, Kato K, Haraguchi R, Inada S, Nakazawa K, Sugimoto Y, Yamashiro K, Nakagawa Y, Ashihara T, “The strategy of ExTRa Mapping-guided minimal ablation should be determined by the size of left atrium”, 第 67 回日本不整脈心電学会学術大会(JHRS), 2021 年 07 月 1-4 日.
- [78] Inada S, Aiba T, Shibata N, Haraguchi R, Ashihara T, Kusano K, Shimizu W, Ikeda T, Sakuma I, Nakazawa K, “A simulation study for investigating mechanisms of ventricular arrhythmia induced from conduction delay zone in right ventricular outflow tract.”, 第 67 回日本不整脈心電学会学術大会(JHRS), 2021 年 7 月 1-4 日.
- [79] Inada S, Shibata N, Haraguchi R, Ashihara T, Ohkubo S, Mitsui K, Nakazawa K, “Theoretical study for comparing vectorcardiogram in normal and abnormal excitation in the heart”, 第 60 回日本生体医工学会大会・第 36 回日本生体磁気学会大会, 2021 年 6 月 15-17 日.
- [80] 岸田優作, 浦田智和, 宮崎晃, 大星直樹, 芦原貴司, 坂田憲祐, 柴田仁太郎, 井尻敬, 高山健志, 信太宗也, 原良昭, 稲田慎, 中沢一雄, “ヒト心房の 3 次元モデルに基づく洞調律興奮伝播シミュレーションと可視化”, 第 60 回日本生体医工学会大会・第 36 回日本生体磁気学会大会, 2021 年 06 月 15-17 日.
- [81] 鳴川公彬, 山口容平, 西島拓海, 下田吉之, “ストックの経年変化を考慮した業務部門地球温暖化対策計画評価”, 第 38 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. 135-140, 2022.
- [82] 山下皓太郎, 山口容平, 大塚敦, 西島拓海, 鳴川公彬, 下田吉之, “業務部門における温室効果ガス排出量削減効果の評価: 省エネルギー技術普及シナリオによる検討”, 第 38 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. 141-146, 2022.
- [83] 山口容平, 西本隆哉, 藤原みさき, 鳴川公彬, 山下皓太郎, 西島拓海, 大塚敦, 榎原史哉, 内田英明, 下田吉之, 荻本和彦, 岩船由美子, 井上智弘, 黒沢厚志, 加藤悦史, “ソフトリンクによる 2050 年のエネルギー需給分析 その 2 (1) 民生部門エネルギー需要”, 第 38 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. 729-734, 2022.
- [84] 松川 裕樹, 塚原 隆裕, “対向回転する Taylor-Couette-Poiseuille 流の圧力勾配増加に伴う層流化”, 第 35 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, A11-1, 4 pages, Dec. 2021.
- [85] 中川 皓介, 石田 貴大, 塚原 隆裕, “後退平板境界層における乱流遷移の DNS: 横流れ渦に生じる二次不安定機構の主流乱れ非依存性”, 第 35 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, A10-2, 6 pages, Dec. 2021.
- [86] 竹田 一貴, 塚原 隆裕, “乱流パフの時空間欠性に関する Domany-Kinzel モデルによる再現

- の試み”, 第 35 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, A07-5, 5 papers, Dec. 2021.
- [87] 平賀 惇之輔, “主流乱れの強度および波長が後退平板境界層乱流遷移に与える影響”, 第 59 回飛行機シンポジウム講演集, オンライン会場, JSASS-2021-5059, 5 papers, Nov. 2021.
- [88] 澄川 一夫, 塚原 隆裕, 牛島 邦晴, “Selective Laser Melting (SLM) の熔融凝固過程における固気液三相流の数値シミュレーション”, 日本機械学会 第 99 期 流体力学部門講演会講演論文集, オンライン, OS12-01, 1 papers, Nov. 2021.
- [89] 川津 晃貴, 本間 貴大, 黒瀬 築, 上野 一郎, 塚原 隆裕, “数値解析による矩形型自由液膜内温度差マランゴニ対流における基本定常流の $Ma \cdot Ca$ 依存性”, 日本機械学会 第 99 期 流体力学部門講演会講演論文集, オンライン, OS06-23, 1 papers, Nov. 2021.
- [90] 本間 貴大, 川津 晃貴, 和田 亮平, 塚原 隆裕, 黒瀬 築, 上野 一郎, “矩形自由液膜内温度差マランゴニ対流における single-layered flow 構造とアスペクト比の関係性”, 日本機械学会 第 99 期 流体力学部門講演会講演論文集, オンライン, OS06-22, 4 papers, Nov. 2021.
- [91] 竹田 一貴, 佐野 雅己, 塚原 隆裕, “亜臨界遷移の高アスペクト比ダクト流で形成される大規模乱流間欠構造に関する研究—側壁における乱流挙動に着目して—”, 日本機械学会 第 99 期 流体力学部門講演会講演論文集, オンライン, OS04-17, 4 pages, Nov. 2021.
- [92] 松川 裕樹, 塚原 隆裕, “Taylor-Couette-Poiseuille 流における局在乱流の層流化”, 日本機械学会 第 99 期 流体力学部門講演会講演論文集, オンライン, OS04-13, 4 pages, Nov. 2022.
- [93] 田代 雅哉, 塚原 隆裕, “粘弾性流体乱流における U-Net を用いた構成方程式の代理モデル構築”, 日本機械学会 第 99 期 流体力学部門講演会講演論文集, オンライン, OS01-14, 4 pages, Nov. 2022.
- [94] 本間 貴大, 和田 亮平, 川津 晃貴, 塚原 隆裕, 黒瀬 築, 上野 一郎, “自由液膜内温度差マランゴニ対流におけるアスペクト比依存性—Single layered flow 対流場構造—”, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2021 講演論文集, 佐賀 (オンライン開催), 1 page, Oct. 2021.
- [95] 細井 理央, 石田 貴大, 大平 啓介, 徳川 直子, 塚原 隆裕, “後退平板境界層での円柱孤立粗さによる遷移点位置の変化に関する実験的研究”, 日本流体力学会年会 2021 講演論文集, 東京 (オンライン開催), 3 pages, Sep. 2021.
- [96] 中川 皓介, 石田 貴大, 塚原 隆裕, “後退平板境界層における定在波と主流乱れの相互作用による乱流遷移の直接数値解析”, 日本流体力学会年会 2021 講演論文集, 東京 (オンライン開催), 4 pages, Sep. 2021.
- [97] 塚原 隆裕, 泉 千種, 松川 裕樹, 竹田 一貴, “鉛直平行平板間自然対流における亜臨界乱流遷移過程”, 第 58 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, オンライン, F211, 5 pages, May-21.
- [98] 加藤 悠宇汰, 大場 春佳, 水野 信也, “実社会における施設内密集度評価のためのシミュレーション構築”, 情報処理学会第 55 回インターネットと運用技術研究発表会.
- [99] 水野信也, “連続時間型マルコフ連鎖を利用した施設密集度最適化手法の提案”, 日本オペレーションズ・リサーチ学会 2021 年秋季研究発表会.
- [100] 鈴木 彰, 大場 春佳, 水野 信也, “BCMP 待ち行列ネットワークの実社会応用に対する技術的課題の検討”, スケジューリング学会スケジューリング・シンポジウム 2021.

4. 著書

- [1] 梶島岳夫, “流体力学の基礎”, 森北出版, Apr. 2022.

5. その他

- [1] Kotaro Tomiyoshi, Tokiya Inoue, Fumiaki Kamisaki, Shingo Tamaki, Sachie Kusaka, Fuminobu Sato, Isao Murata, “ γ -Ray Dose Measurement Using Radio-Photoluminescence Glass Dosimeter (RPLGD) in Neutron/ γ -Ray Mixed Field for BNCT ~ Examination of the response of RPLGD in low-energy region ~”, 19th International Congress on Neutron Capture Therapy (Online), Sep-21.
- [2] 井手坂朋幸, “衝撃波点火方式における高速電子の特性評価”, 大阪大学工学部環境エネルギー工学科, Feb. 2022.
- [3] 大野誠之, “大規模オミクス解析に基づく病原レンサ球菌侵襲性感染症の発症機構の解

- 明”, 岩垂育英会奨学金授与式・講演会. 受賞講演. , 2022年3月19日.
- [4] M.SATO, N.BELMILOUD, Y.OKUNO, “LARGE SCALE EDDY SIMULATION OF A LIQUID FILM FLOWING OVER A ROTATING DISK: WAVES PATTERNS AND DYNAMICS.”, Cambridge, United Kingdom, The 17th OpenFOAM Workshop, 11-14 July 2022.
- [5] 明孝之, “テンソル最適化AMD法における3重相関関数の導入”, 日本物理学会 2021年秋季大会, September, 2021(オンライン開催).
- [6] Takayuki Myo, “Structure of neutron-rich Λ hypernuclei in He isotopes”, 4th international workshop on strangeness nuclear physics, December, 2021(オンライン開催).
- [7] 岡田和記, 和田隆宏, “5次元Langevin方程式を用いたアクチノイド領域における核分裂動力学の研究”, 一般社団法人 日本物理学会, 2022年3月17日.
- [8] 岡田和記, 和田隆宏, “5次元Cassiniパラメータを用いたアクチノイド領域における核分裂動力学の研究”, 一般社団法人 日本原子力学会, 2022年3月17日.
- [9] 岡田和記, 和田隆宏, “Cassiniパラメータにおける輸送係数の核分裂動力学への寄与”, 一般社団法人 日本物理学会, 2021年9月16日.
- [10] 岡田和記, 和田隆宏, “4次元Cassiniパラメータを用いたアクチノイド領域における核分裂動力学の研究”, 一般社団法人 日本原子力学会, 2021年9月10日.
- [11] Kazuki Okada and Takahiro Wada, “Langevin approach to fission dynamics with Cassini shape parameterization”, The 15th International Symposium in Science and Technology 2021, August 5, 2021, Osaka, Japan.
- [12] Kie Okabayashi, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, “DNS on Effectiveness of Miura-fold-type Zigzag Riblet”, 2021 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT2021), Oral presentation, Nov.2021.
- [13] T. Tsukahara, “Scalar-source estimation of turbulent mass diffusion using machine learning”, The 8th Int. Workshop on Fluid Flow, Heat Transfer & Turbulent Drag Reduction (IWFHT2021), Qingdao, China, Sep. 2021.
- [14] T. Tsukahara, “Scalar-source estimation of turbulent mass diffusion using machine learning”, IISc-TUS Joint Workshop in Data Sciences, Online, May. 2021.

第 27 回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2021) 報告および 第 28 回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2022) 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. SuperCon2021

昨年 2021 年 8 月 23 日から 27 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(SuperCon2021)」が行われました。一昨年は新型コロナ感染拡大のもと、本選そのものが中止されましたが昨年は引き続きコロナ禍にありながらもオンラインにて本選を開催することができました。これに向けて予選が行われ、20 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。通常は西日本の上位 10 チーム、東日本の上位 10 チームを選抜し、それぞれ大阪大学(阪大)と東京工業大学(東工大)の会場に集まって本選が開催されていまして。しかし、オンライン開催であるため東西区別なく上位 20 チームが本選に参加する、ということになりました。

ここでは本選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来ました。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 年の本選では SQUID が用いられる予定でしたが中止されました。その代わりに理化学研究所のスーパーコンピュータ富嶽を使った臨時イベント(富嶽チャレンジ)が開催されました。これを機に、理研もスーパーコンピューティングコンテストに参画することになり、2021 年本戦では富嶽が用いられました。これまでの wiki、ポリコムに代わって discord、slack が相互交流に使われ、開会式・表彰式、問題説明、チュートリアルなどでは zoom が用いられました。

2. 予選

2021 年の予選課題は 6 月 2 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 18 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。2021 年の予選課題は、東工大の作成チームによる「マス目と到達可能性判定問題」というものでした。これは障害物の置かれた碁盤目の上を幾つかの基本動作の組み合わせで移動してゆくロボットの設計に関する問題です。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

本選の初日は開会式で参加チームの紹介、本選課題の発表、攻略法の解説がありました。本選課題は阪大の作成チームによる「感染症流行のネットワーク解析」に関する問題でした。感染症の流行予測や解析によく用いられる SIR 模型を使って、ランダムネットワーク上の感染症の流行についてある種の予測立て、その精度を競うというものです。実際の本選では、課題に取り組む前に、富嶽スーパーコンピュータ、また OpenMP/MPI を用いた並列プログラミングに関するオリエンテーションと講義が行われ、チームごとに本選課題を解くためのプログラム設計に入りました。そして、本選 2 日目から 4 日目の午前中まではチームごとにプログラムを作成しました。大学生・大学院生、スタッフがチューターとしてバグ取りなどを手伝いましたが、課題そのものに関する助言はしません。最終日の成果発表会、表彰式の後にはオンライン懇親会も行われました。本高校生・高専生の参加者たちと、両大学の教員、学生チューターたちが、プログラミングや大学について語らう大切な時間となっています。

4. SuperCon 2022 の告知

2022 年は 8 月 22 日（月）から 26 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 6/1 日に公表、課題提出〆切は 6 月 17 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、理化学研究所の富嶽の予定です。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

SuperCon2022 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 SuperCon2023 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。

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, OpenACCなどの並列計算通信プロトコルの概要からこれらやGPU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、昨今のデータ志向型研究へ対応可能な大阪大学のストレージシステムONIONの利用の仕方、スーパーコンピュータ上のコンテナ利用講習会、バッチシステムの講習会、そして汎用第一原理計算プログラムOpenMX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(2021

年度は19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。これを受けて、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~12月頃に開催しています。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2021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、OpenMX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、われわれは高度情報科学技術研究機構と協力して講師を確保するなどして、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、2021年の19回の講習会のうち、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おうべく、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SQUIDとOCTOPUSを利用した講習会、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、GPUプログラミングに必要なOpenACCの講習会やSQUIDに搭載されているベクトルプロセッサSX-Aurora TSUBASAの講習会、CPUノードにおける高速化技法の講習会、近代型データストレージシステムONIONの講習会、そして、汎用第一原理計算プログラムOpenMXの講習会も行っています。また、一部の講習会は、無料配

布アカウントを用いて大規模計算機システムそのものを実際に使って行う実習形式をとっており、微細な部分に至るまで具体的な体験を得られ、現実的な議論を行うことが出来る機会としてもユーザ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。

2022 年度 大規模計算機システム利用講習会

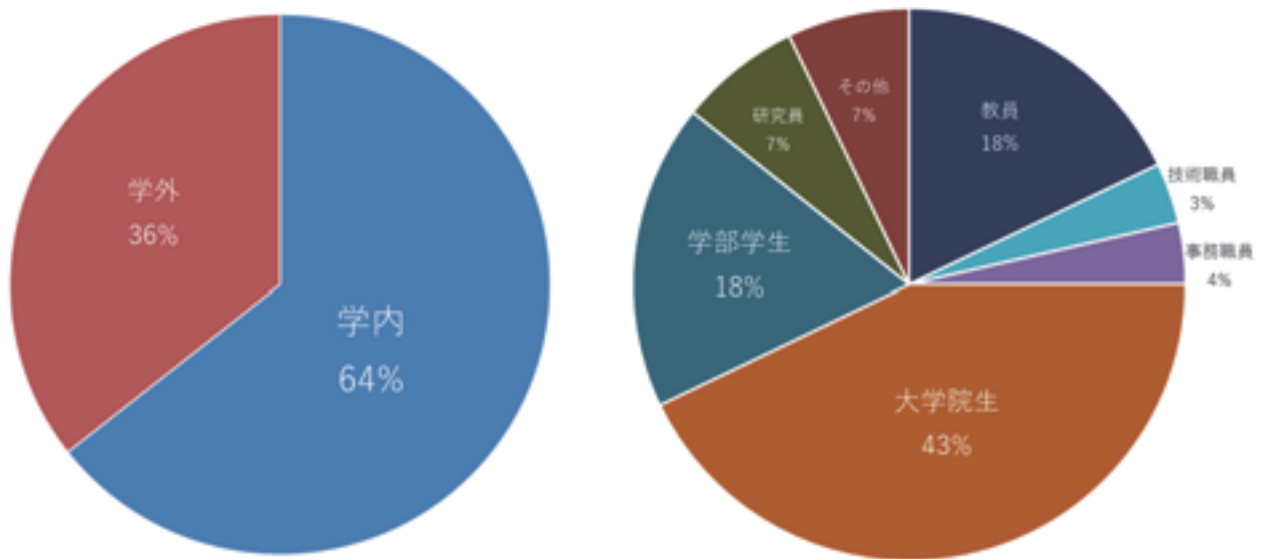
	講習会名	開催日時	講師	開催場所
1	初めてのスパコン	5月23日 9月7日	サイバーメディアセンター 木戸 善之 招へい教授 情報基盤課 技術職員	オンライン開催
2	スパコンに通じる 並列プログラミングの基礎	5月30日 8月29日	サイバーメディアセンター 宮武 勇登 准教授	オンライン開催
3	OpenMP 入門	6月1日	サイバーメディアセンター 吉野 元 准教授	オンライン開催
4	並列プログラミング入門 (OpenMP/MPI)	6月16日 9月開催予定	日本電気(株)	オンライン開催
5	スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用	6月22日 9月開催予定	日本電気(株)	オンライン開催
6	ONION 活用講習会	6月23日	日本電気(株)	オンライン開催
7	SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎	6月27日 9月開催予定	日本電気(株)	オンライン開催
8	汎用 CPU ノード 高速化技法の 基礎 (Intel コンパイラ)	7月22日 9月開催予定	エクセルソフト(株)	オンライン開催
9	GPU プログラミング入門 (OpenACC)	8月30日 9月開催予定	プロメテック・ ソフトウェア(株)	オンライン開催
10	コンテナ入門	9月開催予定	日本電気(株)	オンライン開催
11	GPU プログラミング実践	9月開催予定	プロメテック・ ソフトウェア(株)	オンライン開催
12	ONION-object 入門	9月開催予定	クラウドファン(株)	オンライン開催

2021 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

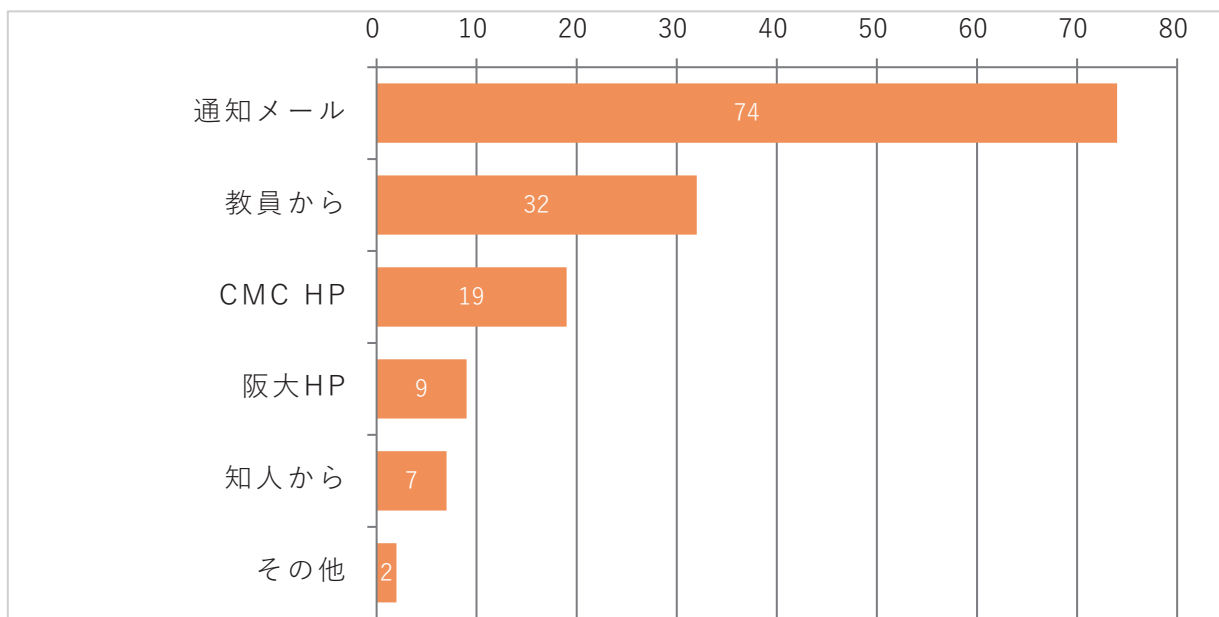
◆受講者数（すべてオンラインで開催）

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(6/14)	56	46
初めてのスパコン(6/18)	42	37
OpenMP 入門(7/19)	23	13
スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用(9/16)	17	17
GPU プログラミング入門 (OpenACC) (10/6)	13	12
ベクトルプロセッサ 高速化技法の基礎(10/7)	4	3
並列プログラミング入門 (OpenMP/MPI) (10/15)	9	7
コンテナ入門 (10/21)	19	14
ONION 活用講習会 (11/9)	20	20
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎 (11/19)	46	41
初めてのスパコン (11/26)	27	26
ONION-object 入門 (12/2)	9	9
スーパーコンピュータ バッチシステム入門 (12/3)	14	10
GPU プログラミング入門 (OpenACC) (12/8)	23	17
SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎 (12/9)	5	5
並列プログラミング入門 (OpenMP/MPI) (12/10)	11	7
GPU プログラミング実践 (OpenACC) (12/20)	16	10
汎用 CPU ノード 高速化技法の基礎 (Intel コンパイラ) (1/14)	15	15
合計	369	309

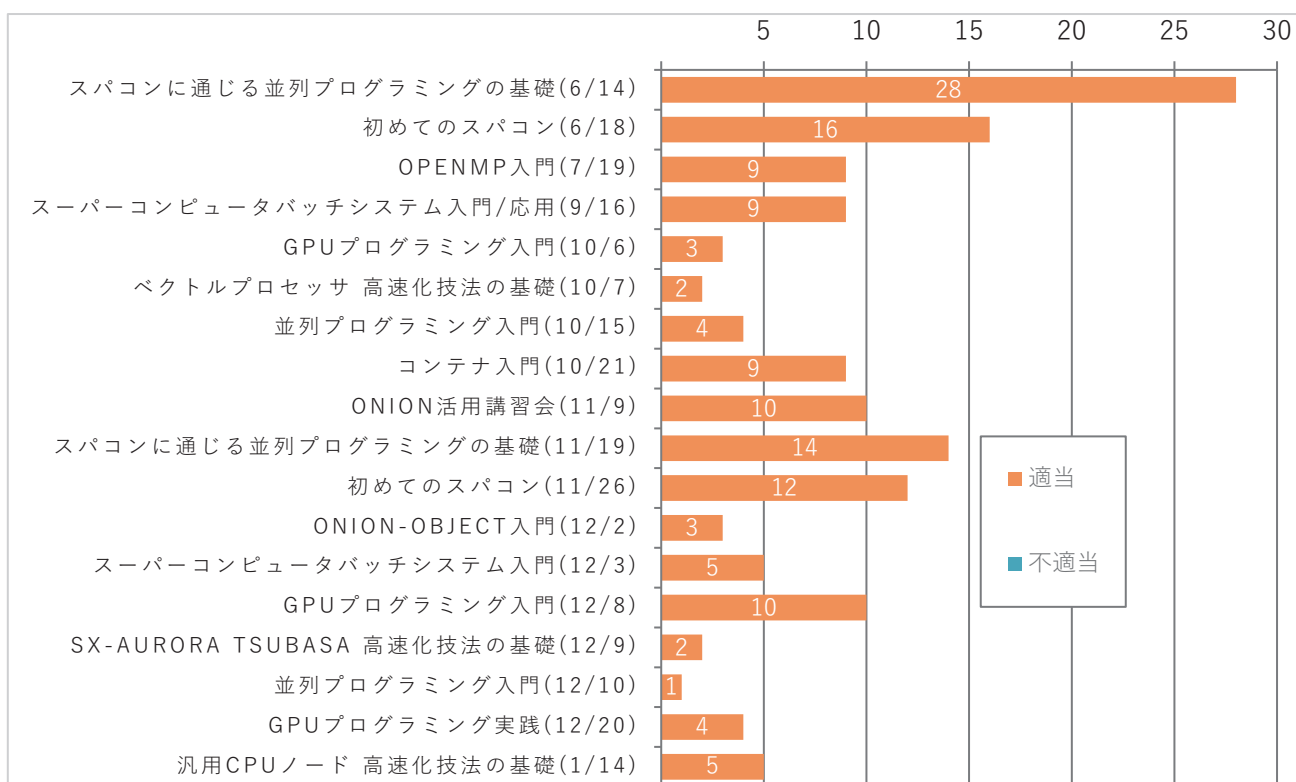
◆受講者の内訳



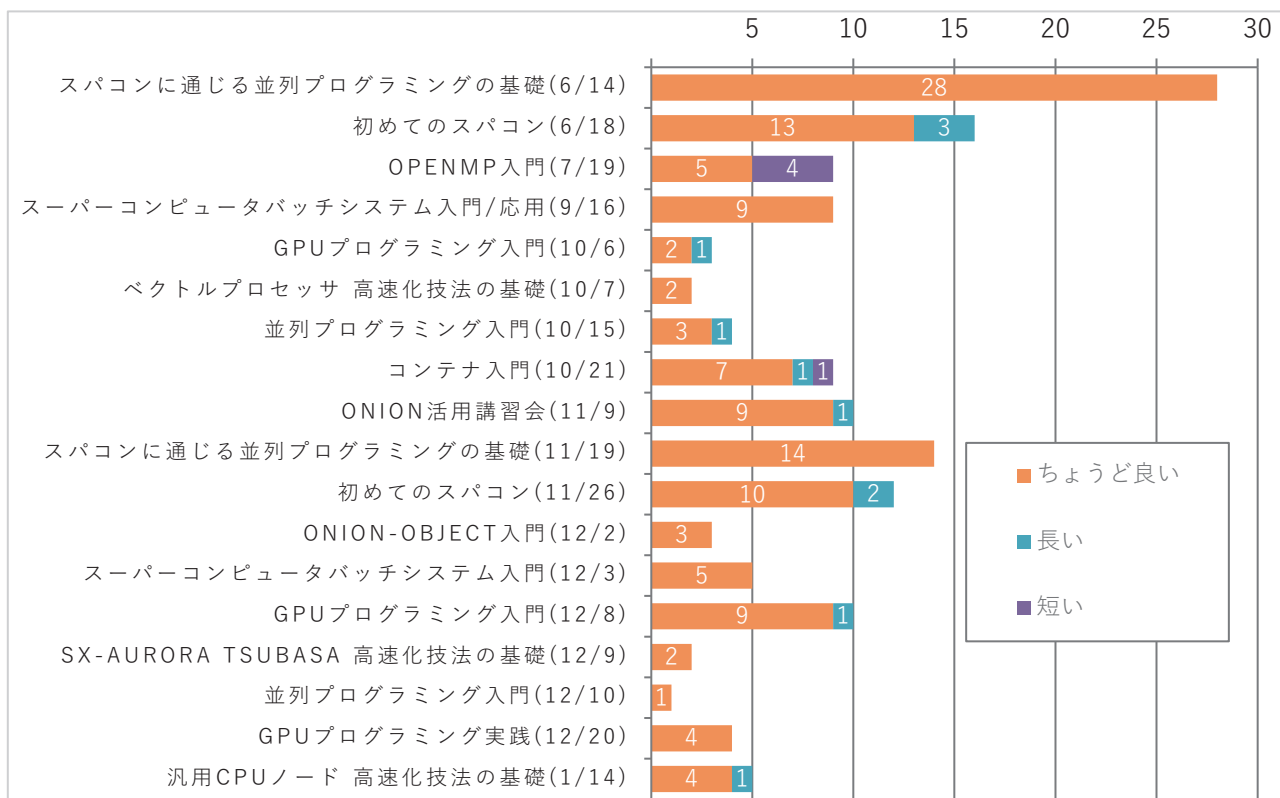
◆講習会についてどのようにお知りになりましたか。(複数回答可)



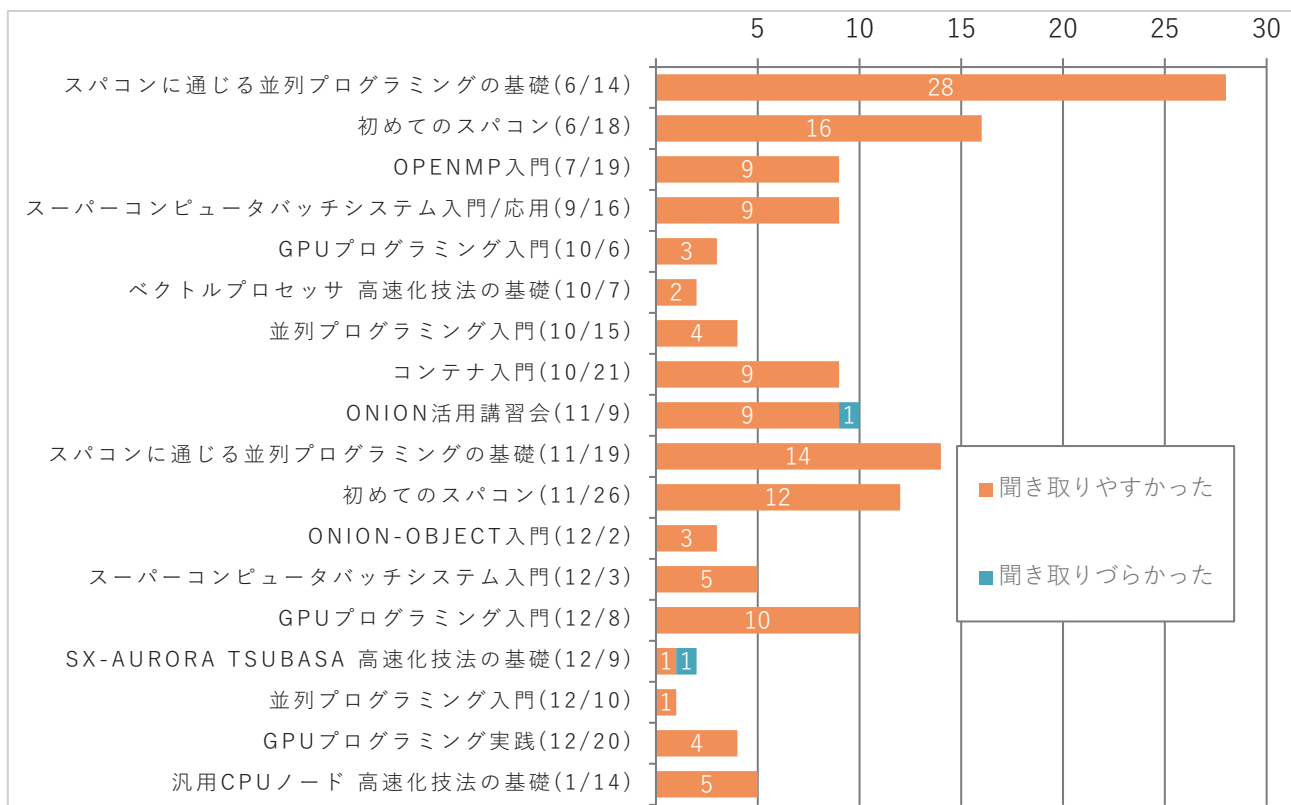
◆開催日は適当でしたか。



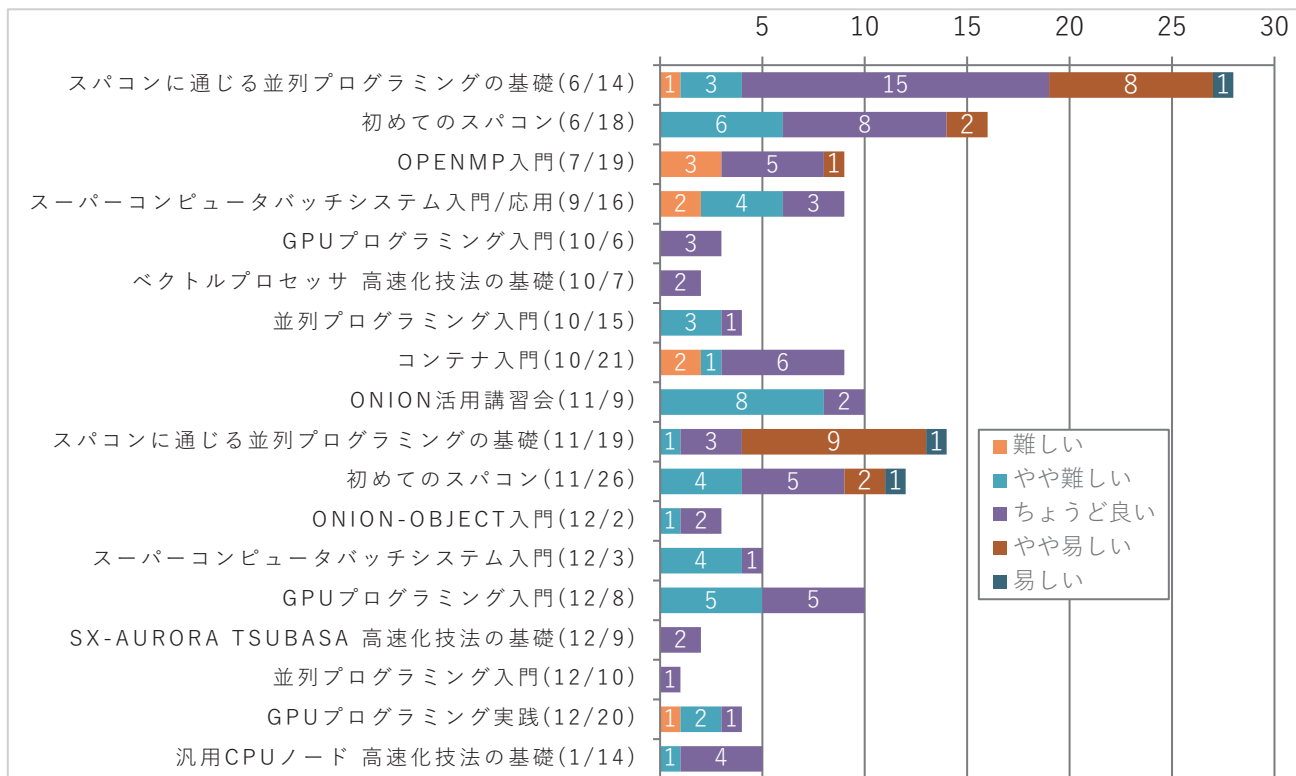
◆講習会の時間は適当でしたか。



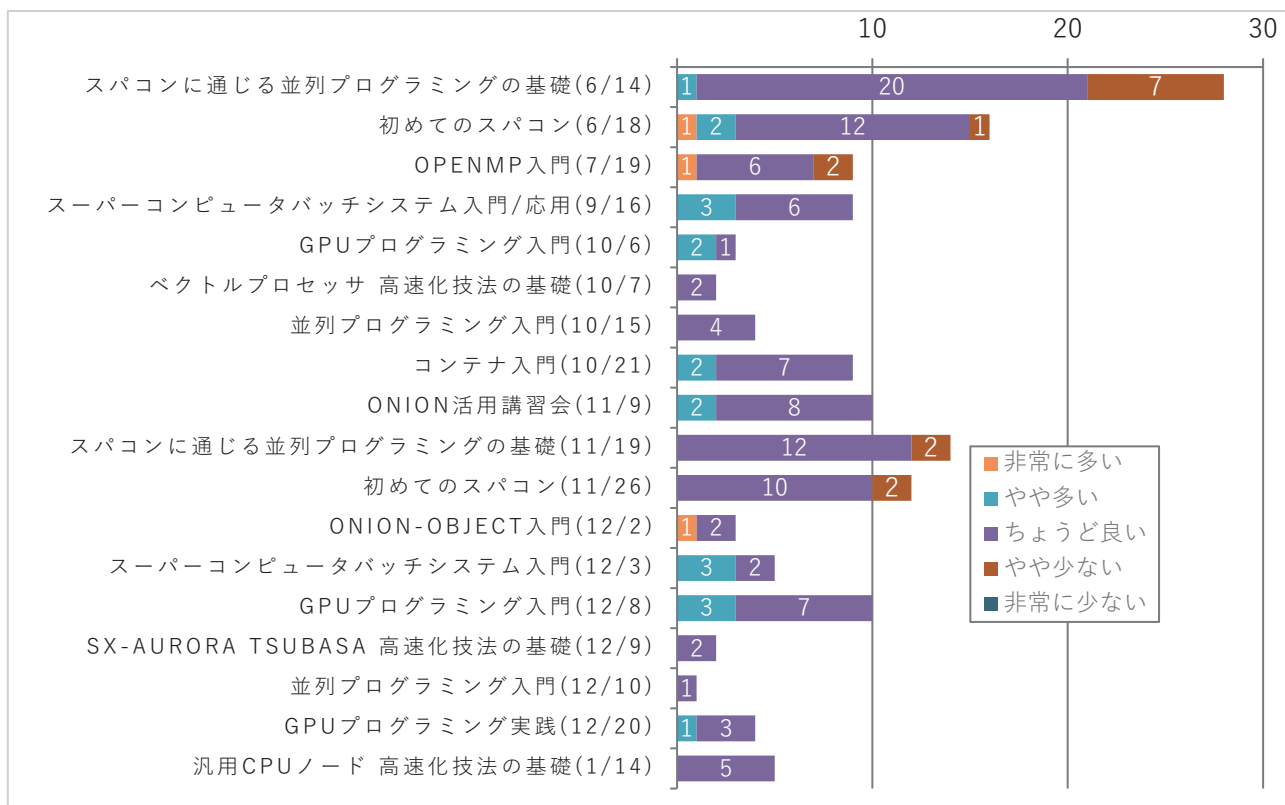
◆今回の講習会の音声はいいかでしたか。



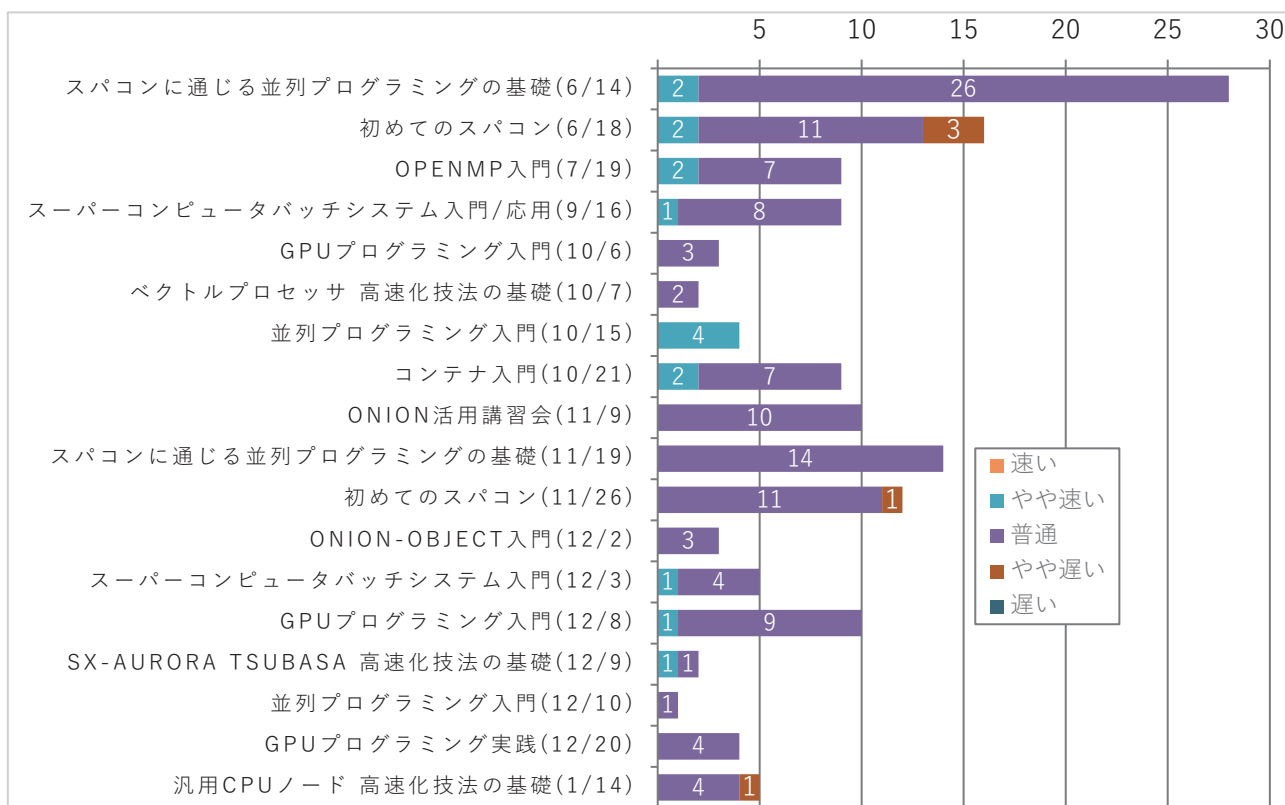
◆講習会の内容はどうでしたか。



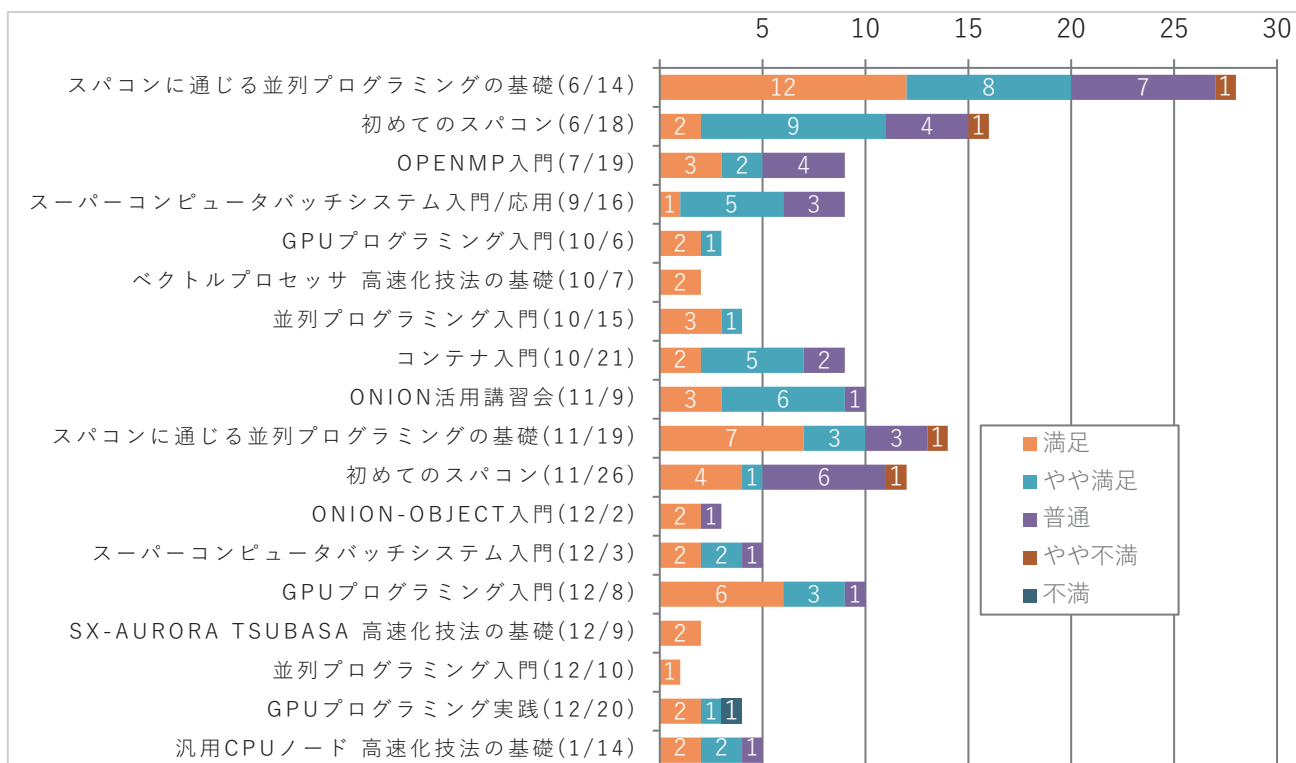
◆講習会で取り扱った内容量はどうか。



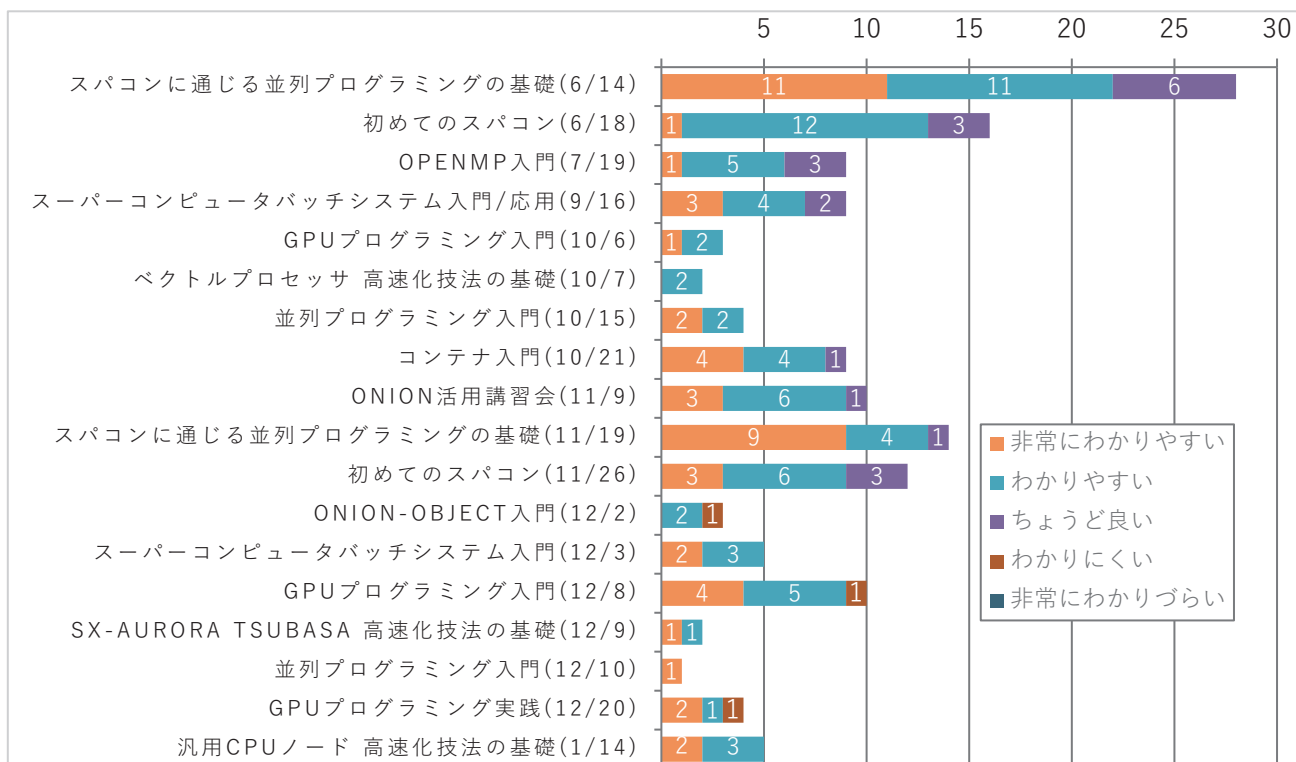
◆講師の進め方はどうか。



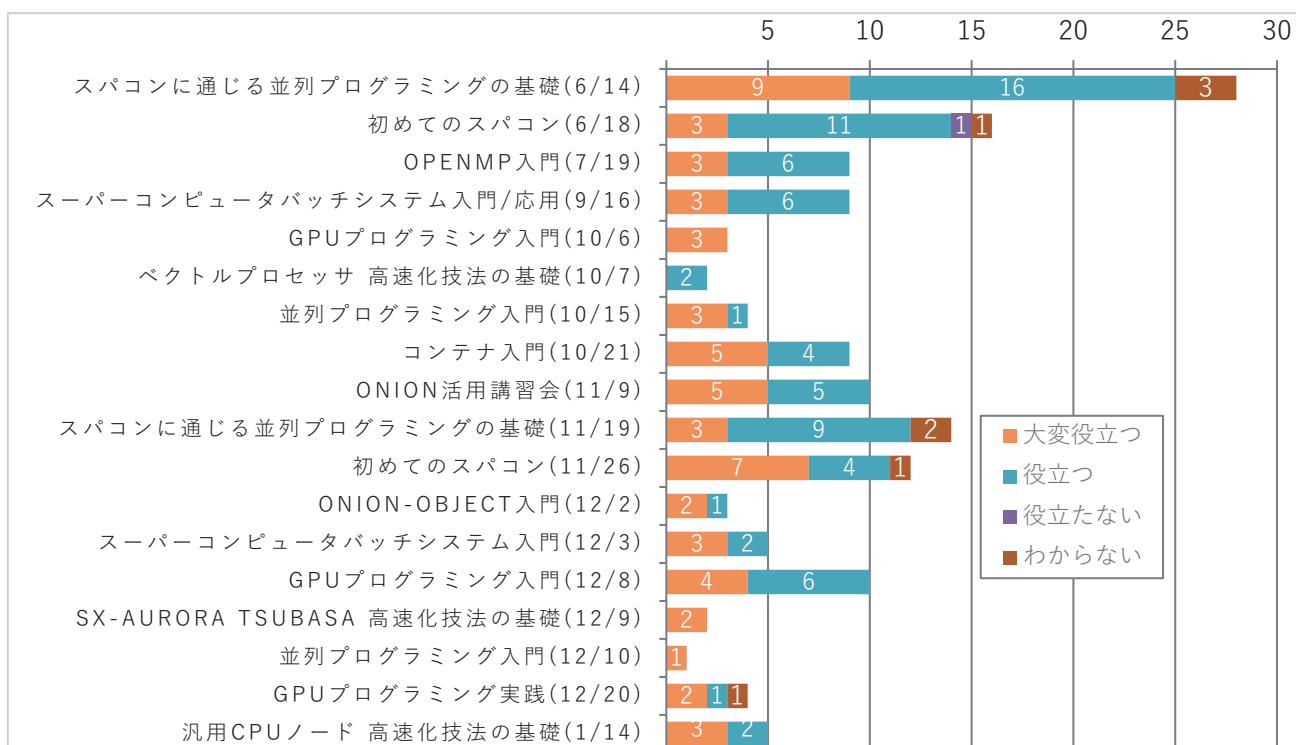
◆満足度は？



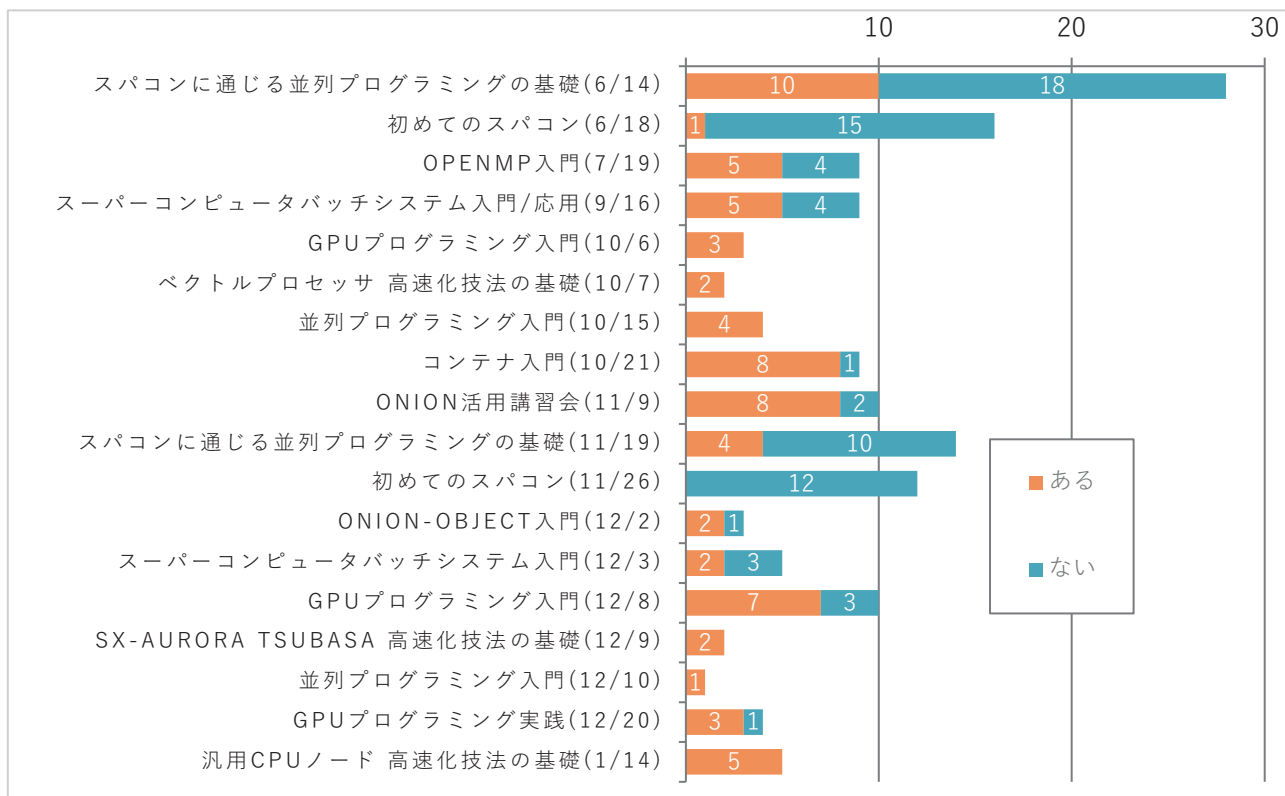
◆講習会の資料はどうでしたか。



◆皆さんの今後の研究・業務・勉学に役立つと思いますか。



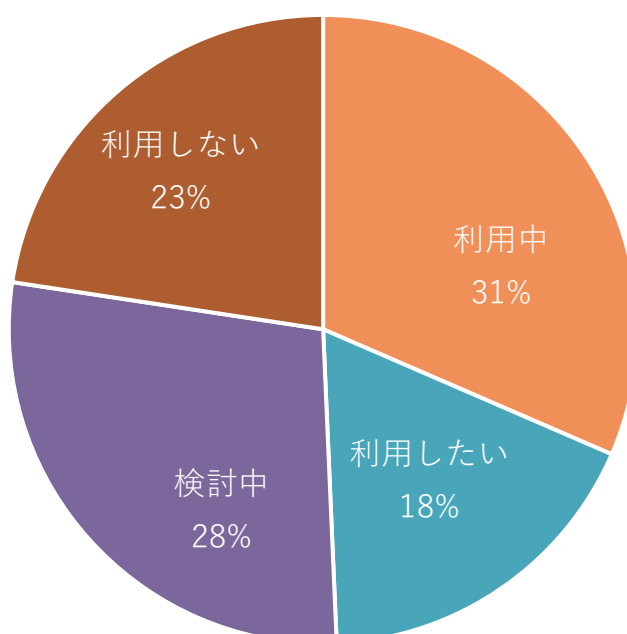
◆他の情報基盤センター等も含め、これまでにスーパーコンピュータを利用したことがありますか。



◆「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。



2022 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 2022 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	星形成と惑星形成分野を横断する大規模数値シミュレーション
一般課題	OCTOPUS	安全・安心を目指した大型観光バスの換気設計とウィルスの高効率排除
一般課題	SQUID	航空機用エンジン燃焼器流れラージ・エディ・シミュレーションの実証
一般課題	SQUID	Gradient flow による物理点 QCD の熱力学
一般課題	SQUID	活動銀河核フィードバックと宇宙の化学汚染
一般課題	SQUID	水中 Tetra-PEG ゲルの負のエネルギー弾性と粘弾性の分子論的解明
一般課題	OCTOPUS	シクロデキストリン系架橋高分子がもつ分子吸収特性の網羅的探索と材料設計への展開
若手課題	SQUID	添加分子の官能基に着目したインスリン解離の共溶媒自由エネルギー解析
若手課題	SQUID	Direct numerical simulations of turbulence of non-Newtonian fluids
産業課題	SQUID	分子動力学計算によるイオン液体/電極界面近傍の CO ₂ 溶解特性評価
産業課題	SQUID	うつ病の診断・治療に向けた 4D 脳機能画像 Deep Learning 解析
「富岳」 一般課題	SQUID	局所シュレーディンガー方程式法に基づく原子・分子の精密量子化学計算
「富岳」 一般課題	SQUID	メソスケールの境界潤滑摩擦における焼付きシミュレーションモデル開発とその高速化、およびマルチスケール化
「富岳」 若手課題	SQUID	OpenFOAM を用いた高ウェーバー数の大型気泡群流れの大規模数値計算
「富岳」 産業課題	SQUID	3 段多孔穴を用いた調節弁のエロージョン抑制に関する研究

2022 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。

2022 年度の課題募集には合計 63 課題が採択されました。このうち以下の 12 課題が本センターと共同研究することになっています。

課題代表者	研究課題名
鈴木 恒雄 (大阪大学)	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
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 (国士舘大学)	格子 QCD によるカイラル対称性とスカラー中間子質量生成機構の研究
滝沢 寛之 (東北大学)	センター間連携による柔軟な計算資源提供に関する研究
岩崎 昌子 (大阪市立大学)	素粒子物理学実験への機械学習の適用研究
下川 隆史 (東京大学)	大規模アプリケーションの高性能な実用的アクセラレータ対応手法
萩田 克美 (防衛大学校)	GPU 並列計算による高分子材料系シミュレーションの高速化技法の検討
村田 健史 (情報通信研究機構)	HPC と高速通信技術の融合による大規模データの拠点間転送技術開発と実データを用いたシステム実証試験
村田忠彦 (関西大学)	合成人口プロジェクト : mdx による合成人口データベースの構築
森田 堯 (大阪大学)	CT 画像と深層学習を用いた骨格標本上の形態学的変異の可視化と発見
杉木 章義 (北海道大学)	次世代学術情報基盤に向けた基盤ソフトウェアの実践的な研究・開発・評価

2021 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ス・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。2021 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
兼安 洋乃 様 (兵庫県立大学 理学研究科)	Ginzburg-Landau 理論に基づいた数値シミュレーションによる 超伝導の磁場依存性の研究
大塚 高弘 様 (大阪大学 理学研究科)	テンソルネットワークを用いた多体系の統計力学的研究
森田 堯 様 (大阪大学 産業科学研究所)	画像と深層学習を用いた骨格標本上の 形態学的変異の可視化と発見

2022 年度 大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況

2022 年度も引き続き研究課題の公募を行い、以下の 10 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
山口 雅也 様 (大阪大学 歯学研究科)	レンサ球菌の大規模ゲノム情報解析による病原因子の探索
吉田 賢市 様 (京都大学 理学研究科)	原子核密度汎関数法によるエキゾチック原子核の 集団励起モードの系統的記述：中性子ドリップ線近傍核から 超重核の統一的理解へ向けて
齋川 賢一 様 (金沢大学 理工研究域)	ストリングから生成されるアクシオン暗黒物質の スペクトルの解析
肥喜里 志門 様 (大阪大学 基礎工学研究科)	薬用低分子構造に着目したインスリン解離における 共溶媒和自由エネルギー解析
周 靖得 様 (京都大学 情報学研究科)	異なる並列計算機システム間において連成計算可能な フレームワークの研究開発
高棹 真介 様 (大阪大学 理学研究科)	磁気流体シミュレーションによる原始星への 質量・磁場降着過程の研究
中谷 祐介 様 (大阪大学 工学研究科)	瀬戸内海における外洋起源有機物の動態解析
Anas Santria 様 (大阪大学 理学研究科)	Interaction between the Photo-excited π System and the f System in Rare-earth-based Macrocyclic Ligand Complexes

大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
村上 匡且 様 (大阪大学 レーザー科学研究所)	メガテスラ磁気再結合による極超高エネルギー粒子加速の 3次元シミュレーション

人工知能研究特設支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
白川 岳 様 (吹田徳洲会病院)	心臓大血管手術における術前評価や術者トレーニングに 応用可能な3次元臓器形状を得るためのディープラーニングを 用いた医療画像セグメンテーションの可能性

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 -

Q. 機種変更/紛失/何らかの問題で SQUID の 2 段階認証ができなくなった

A. 2 段階認証のリセットには管理者の操作が必要となりますので、お問い合わせフォームからお知らせください。その際、氏名、利用者番号、メールアドレスは登録時のものを記入してください。2 段階認証のリセット時にパスワードもあわせて初期化いたしますので、予めご了承ください。

お問い合わせフォーム

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/support/contact/auto_form/