



Title	センター報告 サイバーメディアHPCジャーナル No.13
Author(s)	
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2023, 13, p. 87-133
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/92767
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

2022 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 2022 年 4 月から 2023 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] 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.
- [2] Akio Ishii, “Activation energy of homogeneous nucleation of Zr hydride: Density functional theory calculation”, *Comput. Mater. Sci.*, 215, 111769, 2022.
- [3] Liu, T.; Ohashi, K.; Nagita, K.; Harada, T.; Nakanishi, S.; Kamiya, K., “A Tin Oxide-Coated Copper Foam Hybridized with a Gas Diffusion Electrode for Efficient CO (2) Reduction to Formate with a Current Density Exceeding 1 A cm⁻²”, *Small*, Vol.18, No.50, December. 2022.
- [4] Shintaro Kato, Takuya Hashimoto, Kazuyuki Iwase, Takashi Harada, Shuji Nakanishi, Kazuhide Kamiya, “Selective and high-rate CO₂ electroreduction by metal-doped covalent triazine frameworks: a computational and experimental hybrid approach”, *Chemical Science*, Vol.14, 613-620, Dec. 2022.
- [5] Aimi A. H. Tajuddin, Mitsuru Wakisaka, Tatsuhiko Ohto, Yue Yu, Haruki Fukushima, Hisanori Tanimoto, Xiaoguang Li, Yoshitatsu Misu, Samuel Jeong, Jun-ichi Fujita, Hirokazu Tada, Takeshi Fujita, Masaki Takeguchi, Kaori Takano, Koji Matsuoka, Yasushi Sato, and Yoshikazu Ito, “Corrosion-resistant and high-entropic non-noble-metal electrodes for oxygen evolution in acidic media”, *Adv. Mater*, 35, 2207466, 2023.
- [6] Li, Y., Du, J. P., Yu, P., Li, R., Shinzato, S., Peng, Q., & Ogata, S., “Chemical ordering effect on the radiation resistance of a CoNiCrFeMn high-entropy alloy”, *Computational Materials Science*, 214, 111764, 2022.
- [7] Heting Liao, Hajime Kimizuka, Hiroshi Miyoshi, Shigenobu Ogata, “Origin of the nucleation preference of coherent and semicoherent nanoprecipitates in Al-Cu alloys based on atomistically informed classical nucleation theory”, *Journal of Alloys and Compounds*, Vol. 938, 168559, Mar. 2023.
- [8] Takayuki Myo, Kiyoshi Kato, “Modeling the electric dipole strength of neutron-rich ⁸He: Prediction of multineutron collective excitations”, *Physical Review , C* 106, L021302, 2022.
- [9] Takayuki Myo, Myagmarjav Odsuren, Kiyoshi Kato, “Soft dipole resonance in neutron-rich ⁸He”, *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, Volume 2022, 103D01, 2022.
- [10] Takayuki Myo, Kiyoshi Kato, “Possible interpretation of the complex expectation values associated with resonances”, *Physical Review , C* 107, 14301, 2023.

- [11] Takayuki Myo, Kiyoshi Kato, “Soft dipole resonance in ^8C and its isospin symmetry with ^8He ”, *Physical Review*, C 107, 34305, 2023.
- [12] Kunichika Tsumoto, Takao Shimamoto, Yuma Aoji, Yuhichi Kuda, Mamoru Tanida, Akira Amano, Yasutaka Kurata, “Linking the early afterdepolarization in cardiomyocyte models of long QT syndrome type 2 to reentrant arrhythmia”, *Proceedings of the 39th Congress of The International Union of Physiological Sciences (IUPS2022)*, 436-436, May 2022.
- [13] Takuma Kikutsuji, Yusuke Mori, Kei-ichi Okazaki, Toshifumi Mori, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi, “Explaining reaction coordinates of alanine dipeptide isomerization obtained from deep neural networks using Explainable Artificial Intelligence (XAI)”, *The Journal of Chemical Physics*, Vol.156, No.154108, Apr. 2022.
- [14] Z. Jiang, M. Shibahara, “Molecular Dynamics Study on the Relationship between Density Depletion Length and Interfacial Thermal Resistance at Nanostructured Surface”, *Heat Transf. Res*, 54, 77, 2023.
- [15] Y. Fujii, K. Fujiwara, S. Tsushima, M. Shibahara, “Molecular dynamics simulation of energy transfer in reaction process near supported nanoparticle catalyst”, *J. Therm. Sci. Tech*, 18-1, 22-00384, 2023.
- [16] Y. Maeda, T. Hiejima, “An improved shock wave capturing method in high Mach numbers”, *Physics of Fluids*, 34, 9, 096107(14 pages), 2022.
- [17] R. Muraoka, T. Hiejima, “Onset conditions for Mach disk formation in underexpanded jet flows”, *Physics of Fluids*, 34, 11, 116125, (13 pages), 2022.
- [18] Tomomi Kawakami, Sota Tamaki, Satoru Shirase, Hayato Tsurugi, Kazushi Mashima, “Syntheses and Redox Properties of Carboxylate-ligated Hexanuclear Ce (IV) Clusters and Their Photo-induced Homolysis of the Ce (IV)-ligand Covalent Bond”, *Inorganic Chemistry*, Vol. 61, No. 50, pp. 20461-20471, Dec. 2022.
- [19] Reiichi Sugihara, Yuki Kato, Tomoya Mori, and Yukio Kawahara, “Alignment of single-cell trajectory trees with CAPITAL”, *Nature Communications*, vol. 13, 5972, Oct. 2022.
- [20] H. Morita and S. Fujioka, “"Generation, measurement, and modeling of strong magnetic fields generated by laser-driven micro coils"”, *Rev. Mod. Plasma Phys*, vol. 7, no. 1, p. 13, 2023.
- [21] R. Takizawa, H. Morita, K. Matsuo, K. F. F. Law, C. Liu, Y. Arikawa, and S. Fujioka, “Experimental Investigation of Voltage Generation Mechanism of Laser-Driven Coil”, *J.Phys. Soc. Japan*, 91, 064501, 2022.
- [22] "T. Johzaki, K. Yoshitake, T. Endo, W. Kim, S. Fujioka, H. Nagatomo, H. Morita, R. Takizawa, and M. Takemura", “Dependence of resistivity gradient guiding of laser-driven relativistic electron beams on laser intensity and duration”, *Phys. Plasmas*, 29, 112707, 2022.
- [23] "T. Tamagawa, Y. Hironaka, K. Kawasaki, D. Tanaka, T. Idesaka, N. Ozaki, R. Kodama, R. Takizawa, S. Fujioka, A. Yogo, D. Batani, P. Nicolai, G. Cristoforetti, P. Koester, L. A. Gizzi, and K. Shigemori", “Development of an experimental platform for the investigation of laser-plasma interaction in conditions relevant to shock ignition regime”, *"Rev.Sci.Instrum."*, 93, 932022.

- [24] Takashi Matsubara, Yuto Miyatake, and Takaharu Yaguchi, “The Symplectic Adjoint Method: Memory-Efficient Backpropagation of Neural-Network-Based Differential Equations”, IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2023.
- [25] Yamaguchi Y, Shoda Y, Yoshizawa S, Imai T, Perwez U, Shimoda Y, Hayashi Y., “Feasibility assessment of net zero-energy transformation of building stock using integrated synthetic population, building stock, and power distribution network framework”, Applied Energy, 333, 120568, 2023.
- [26] K. Shitara, K. Yokota, M. Yoshiya, J. Umeda, K. Kondoh, “First-principles design and experimental validation of β -Ti alloys with high solid-solution strengthening and low elasticities”, Mater. Sci. Eng. A, 843, 143053., 2022.
- [27] Takashi Ohta, Yuta Onishi, and Yasuyuki Sakai, “Modulation of wall turbulence by propagating flame of premixed hydrogen-air combustion”, Combustion and Flame, Vol.241, pp.112132, 2022.
- [28] Takashi Ohta, Akihiro Hayashi, and Shogo Tsuzuki, “A novel LES method for predicting drag reduction in viscoelastic fluid based on the time period of turbulence structures”, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics, Vol.309, pp.104924, 2022.
- [29] Takashi Ohta, Ryota Hirata, and Yasuyuki Sakai, “DNS predictions of NO_x production in developing turbulent mixing layers with non-premixed hydrogen–air combustion”, Journal of Turbulence, Vol.23, No.11-12, pp.636-654, 2022.
- [30] Nicolas Jourdain, Nobuyuki Tsuboi, A.Koichi Hayashi, “Investigation of liquid n-heptane/air spray detonation with an Eulerian-Eulerian model”, Combustion and Flame, 112278, 2022.
- [31] T. Ozaki, Y. Abe, Y. Arikawa, Y. Sentoku, J. Kawanaka, S. Tokita, N. Miyanaga, T. Jitsuno, Y. Nakata, K. Tsubakimoto, A. Sunahara, T. Johzaki, E. Miura, O. Komeda, A. Iwamoto, H. Sakagami, S. Okihara, K. Ishii, R. Hanayama, Y. Mori, and Y. Kitagawa, “Hot electron and ion spectra on blow-off plasma free target in GXII-LFEX direct fast ignition experiment”, Nuclear Fusion 63, 036009, 2023.
- [32] Jiahao Wang, Maki Kishimoto, Tomoyuki Johzaki, Tomohiro Kumeda, Takeshi Higashiguchi, Atsushi Sunahara, Hikari Ohiro, Kotaaro Yamasaki, and Shinichi Namba, “Water-window X-ray emission from laser-produced Au-plasma under the optimal target thickness and focus conditions”, Atoms 10, 150, 2022.
- [33] Yiming Pan, Kentaro Tomita, Yukihiro Yamagata, Atsushi Sunahara, and Katsunobu Nishihara, “Investigation of dynamics of laser-produced carbon plasma during the laser irradiation using Thomson scattering”, Journal of Physics D , 56, 25201, 15pp, 2022.
- [34] K. Hagita, T. Murashima, T. Ohkuma, H. Jinnai, “Ring-Filling Effect on Stress–Strain Curves of Randomly End-Linked Tetra-Arm Prepolymers”, Macromolecules 2022, 55, 6547-6571., 2022.
- [35] K. Hagita, T. Murashima, T. Kawakatsu, “Lamellar Domain Spacing of Symmetric Linear, Ring, and Four-Arm-Star Block Copolymer Blends”, Macromolecules 2022, 55, 8021-8031., 2022.
- [36] K. Hagita, T. Murashima, N. Sakata, K. Shimokawa, T. Deguchi, E. Uehara, S. Fujiwara, “Molecular Dynamics of Topological Barriers on the Crystallization Behavior of Ring Polyethylene Melts with Trefoil Knots”, Macromolecules 2023, 56, 15-27, 2023.

- [37] K. Hagita, T. Murashima, “Practical compatibility between self-consistent field theory and dissipative particle dynamics”, *Polymer* 2023, 269, 125733, 2023.
- [38] Ryusei Oketani, Hiroki Takahashi, Simon Clevers, Akira Oyamada, Ichiro Hisaki, Gérard Coquerel, Kazuaki Yamanaka, Hirohito Tsue, “Order – Disorder Phase Transition between High- and Low-Z' Crystal Structures of the P1 Space Group”, *Cryst. Growth Des.*, 22, 2230-2238, 2022.
- [39] Mayu Kobayashi, Haruka Kubo, Ryusei Oketani, Ichiro Hisaki, “Quinoxaline-annelated Hexadehydro[12]annulene: Use of A New Building Block to Construct a Hydrogen-bonded Hexagonal Molecular Network”, *CrystEngComm*, 24, 5036-5040, 2022.
- [40] Taito Hashimoto, Ryusei Oketani, Masaki Nobuoka, Shu Seki, Ichiro Hisaki, “Single Crystalline, Non-stoichiometric Cocrystals of Hydrogen-Bonded Organic Frameworks”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 62, e202215836, 2023.
- [41] Yuto Suzuki, Mao Yamaguchi, Ryusei Oketani, Ichiro Hisaki, “Isomeric Effect of Naphthyl Spacers on Structures and Properties of Isostructural Porous Crystalline Frameworks”, *Mater. Chem. Front.*, 7, 106-116, 2023.
- [42] Y Lin, R Suyama, S Kawaguchi, T Iki, T Kai, “Tejas functions as a core component of nuage assembly and precursor processing in Drosophila piRNA biogenesis”, *bioRxiv* 2022, 07, 12, 499660, 2022 年.
- [43] Hiroyuki Nakashima and Hiroshi Nakatsuji, “Solving the Schrödinger equation of a planar model H4 molecule”, *Chem. Phys. Lett.*, 815, 140359, 2023.
- [44] T. Homma, T. Yamashita, R. Wada, K. Kawazu, K. Kurose, T. Tsukahara, and I. Ueno, “Multicellular structures in thin free liquid films induced by thermocapillary effect”, *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 641, 187-196, 2023.
- [45] K. Nakagawa, T. Tsukahara, and T. Ishida, “DNS study on turbulent transition induced by an interaction between freestream turbulence and cylindrical roughness in swept flat-plate boundary layer”, *Aerospace*, Vol. 10, Issue 2, 128, 2023.
- [46] K. Kohyama, M. Sano, and T. Tsukahara, “Sidewall effect on turbulent band in subcritical transition of high-aspect-ratio duct flow”, *Physics of Fluids*, Vol. 34, 084112, 2022.
- [47] T. Kawata and T. Tsukahara, “Spectral analysis on dissimilarity between turbulent momentum and heat transfers in plane Couette turbulence”, *Physics of Fluids*, Vol. 34, 075135, 2022.
- [48] Y. Matsukawa and T. Tsukahara, “Subcritical transition of Taylor-Couette-Poiseuille flow at high radius ratio”, *Physics of Fluids*, Vol. 34, 074109, 2022.
- [49] T. Kawata and T. Tsukahara, “Spectral analysis on transport budgets of turbulent heat fluxes in plane Couette turbulence”, *Energies*, Vol. 15, Issue 14, 5258, 2022.
- [50] T. Nimura and T. Tsukahara, “Viscoelasticity-induced instability in plane Couette flow at very low Reynolds number”, *Fluids*, Vol. 7, Issue 7, 241, 2022.
- [51] Nitaro Shibata, Shin Inada, Kazuo Nakazawa, Takashi Ashihara, Naoki Tomii, Masatoshi Yamazaki, Haruo Honjo, Hiroshi Seno, Ichiro Sakuma, “Mechanism of ventricular fibrillation: Current status and problems”, *Advanced Biomedical Engineering*, Vol. 11, pp 117-135, 2022.

- [52] H. Yoshino, “From complex to simple: hierarchical free-energy landscape renormalized in deep neural networks”, *SciPost Phys, Core* 5, 2, 2020.
- [53] H. Yoshino, “Spatially heterogeneous learning by a deep student machine”, *arXiv:2302.07419*, 2023.
- [54] 中谷祐介, 稲垣翔太, 鹿島千尋, 秋山諭, 木村祐貴, “底曳網漁業による海底擾乱が大阪湾の水質と一次生産に及ぼす影響”, *土木学会論文集B2 (海岸工学)*, Vol.78, No.2, pp.I_775-I_780, 2022.
- [55] 山根成陽, 鹿島千尋, 中谷祐介, “過去 30 年の降雨パターンと土地利用の変化が瀬戸内海への淡水流入量に及ぼす影響”, *土木学会論文集G (環境)*, Vol.78, No.6, pp.II_89-II_97, 2022.
- [56] Yutaro Motoori, ChiKuen Wong, Susumu Goto, “Role of the hierarchy of coherent structures in the transport of heavy small particles in turbulent channel flow”, *J. Fluid Mech.*, 942, A3, 2022.
- [57] Takahiro Otsuka and Yasuhiro Akutsu, “Residual Entropy of the Cubic Dimer Model: The Higher Order Tensor Renormalization Group Approach”, *J. Phys. Soc., Jpn.* 91, 055003, 2022.
- [58] S. Sugiki, T. Niide, Y. Toya, S. Shimizu, “Logistic Regression-Guided Identification of Cofactor Specificity-Contributing Residues in Enzyme with Sequence Datasets Partitioned by Catalytic Properties”, *ACS Synthetic Biology*, 11, 12, 3973–3985, 2022.

2. 国際会議会議録掲載論文

- [1] Xiang Li, Ryo Matsumoto and Hiroshi Utsunomiya, “Molecular Dynamic Study on Conversion of Plastic Work of Materials into Heat”, the 17th Asia-Pacific Conference on Fracture and Strength and the 13th Conference on Structural Integrity and Failure, Adelaide, South Australia, Australia, Dec. 2022.
- [2] Arata Endo, Shinji Yoshida, Shuichi Gojuki, Hiroaki Kataoka, Yoshihiko Sato, Akihiro Musa, Susumu Date, “Consideration of a Supercomputing System with Cloud Bursting Functionality from an Operational Perspective”, The 13th IEEE International Conference on Cloud Computing Technology and ScienceBangkok, Thailand, December 2022.
- [3] Satoshi Ikeda, Kie Okabayashi, Shintaro Takeuchi, “Direct numerical simulation of turbulent flow above riblets under adverse pressure gradient”, Proc. 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12) Osaka, Japan, No. 355, Jul. 2022.
- [4] Riku Sato, Hiroki Kijima, Tomotaka Konayashi, Ken Naitoh, “Computation of laminar-turbulent flow transitions in a circular pipe with a bellmouth inlet”, JSST2022, Sep,2022.
- [5] T. Itasaka and M. Okuda, “Effects of incorporating a deep-unfolding framework into a deep neural network: implications for image restoration”, 2022 Asia-Pacific Signal and Information Processing Association Annual Summit and Conference (APSIPA ASC), pp. 649–652, Nov. 2022.
- [6] Takehiro Aoshima and Takashi Matsubara, “Deep Curvilinear Editing: Commutative and Nonlinear Image Manipulation for Pretrained Deep Generative Model”, Proc. of The IEEE/CVF Computer Vision and Pattern Recognition Conference 2023 (CVPR2023), Jun. 2023.
- [7] Takashi Matsubara and Takaharu Yaguchi, “FINDE: Neural Differential Equations for Finding and Preserving Invariant Quantities”, Proc. of The Eleventh International Conference on Learning Representations (ICLR2023) Kigali, May 2023.
- [8] Yu Kashihara and Takashi Matsubara, “Inverse Heat Dissipation Model for Image Segmentation”, RISP International Workshop on Nonlinear Circuits, Communications and Signal Processing (NCSP2023) Honolulu, Feb. 2023.
- [9] Takehiro Aoshima and Takashi Matsubara, “Learning Attribute Curvilinear Coordinates for Pre-trained Deep Generative Model”, RISP International Workshop on Nonlinear Circuits, Communications and Signal Processing (NCSP2023) Honolulu, Feb. 2023.
- [10] Takehiro Aoshima and Takashi Matsubara, “Nonlinear and Commutative Editing in Pretrained GAN Latent Space”, NeurIPS 2022 Workshop on NeurRepsNew Orleans, Nov. 2022.
- [11] Yu Kashihara, and Takashi Matsubara, “Application of Denoising Image Restoration to Anomaly Detection”, Proc. of 2022 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2022) Online, B2L-B-01, Dec. 2022.
- [12] Rousslan Fernand Julien Dossa, Takashi Matsubara, “Toward Human Cognition-inspired High-Level Decision Making For Hierarchical Reinforcement Learning Agents”, ICML2022 Workshop on the Decision Awareness in Reinforcement LearningVirtual /Maryland, Jul. 2022.

- [13] R. Sakurai, T. Suzuki, S. Tsushima, “Numerical study of evaporation behavior of fluid in a porous medium by two-phase lattice Boltzmann method”, The 12th TSME International Conference on Mechanical Engineering, 44896.
- [14] S. Okada, Y. Baba, H. Tsubata, T. Nishi, H. Miyaki, S. Kamiyama, and T. Okada, “Analysis of electric field on an aircraft model under a thundercloud using the FDTD method with triangular-prism cells”, International Workshop on High Voltage Engineering (IWHV) Naha, Okinawa, no. EPP-22-100/SP-22-035/HV-22-081, 2022.
- [15] Takagi Y, Nishimoto S, “High-resolution image reconstruction with latent diffusion models from human brain activity”, The IEEE/CVF Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR), 2023.
- [16] Takumi Ito, Nobuyuki Tsuboi, Kohei Ozawa, “3D Evaluation of Premixed Gas Injection Ports Number on Flow Field in Disk RDE”, AIAA-2023-0577, AIAA SciTech 2023, 23-27 January 2023.
- [17] Tsutomu Uenohara, Makoto Yasuda, Kosei Yamamoto, Yasuhiro Mizutani, Yasuhiro Takaya, “LASER MICRO MACHINING USING AN OBLIQUE PHOTONIC NANOJET WITH FOCUSED LASER BEAM IRRADIATION”, MSEC2022-82356, Jun. 2022.
- [18] Yutaka Oda, Masaharu Shimoda, Tomohiro Kasahara, Tatsuro Yamazaki, Ryosuke Matsumoto, “Measurements of Turbulent Wall Heat Transfer Using Temperature Sensitive Paint with Image Denoising by a Machine Learning Method”, Proceedings of Twelfth International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12), Paper No. 394, Jul. 2022.
- [19] Atsushi Sunahara, “Pre-pulse-shape control for efficient laser ion acceleration”, 6th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (Topical invited talk)on-line e-Conference, October 9-14, 2022.
- [20] Ken Murakami, Mariko Okada, “Detection of enhancer activity at the single-cell level by deep learning”, Keystone symposia: Chromatin Architecture in Development and Human HealthPoster presentation, 2023.3.
- [21] Ken Murakami, Mariko Okada, “Enhancer detection at the single-cell level using the deep learning method”, MBSJ2022 Poster presentation, 2022.12.
- [22] Ken Murakami, Mariko Okada, “Development of a super-enhancer-based cell clustering method for leukemia”, The 81st Annual Meeting of the Japanese Cancer Association, 2022.9.
- [23] M. Ninomiya, Y. Hayashi, T. Tohei, A. Sakai, “First-Principles Analysis of Oxygen Vacancy Behavior in Rutile TiO₂ under External Electric Fields”, 9th International Symposium on Control of Semiconductor Interfaces (ISCSI-IX) TuP2-5, Online, Sep. 5-8, 2022.
- [24] K. Fujimori, K. Tsujimoto, T. Shakouchi, T. Ando and M. Takahashi, “DNS Analysis of the Effect of Control Parameters on the Heat Transfer Performance of Intermittently Controlled Multiple Impinging Jets”, Proc. 23rd Australasian Fluid Mechanics Conference, 8p, Dec. 2022.
- [25] 北井 孝紀, 吉崎 達, 水谷 晟吾, 崔 杺圭, 林 慶浩, 吉本 勇太, 塩見 淳一郎, “分子動力学シミュレーションを用いた高分子材料の誘電特性に関するデータセットの構築”, 第 71 回高分子討論会札幌, Sep. 2022.

- [26] S. Okazaki, K. Nakagawa, T. Ishida, and T. Tsukahara, “Numerical study on development of a turbulent spot in the swept-flat-plate three-dimensional boundary layer”, In: Proceedings of the 2022 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT2022), Niigata, Japan, (Hybrid Event), S46-5, 5 pages, Oct. 12-14 (2022).
- [27] J. Hiraga, K. Nakagawa, T. Ishida, and T. Tsukahara, “Effect of distributed roughness on turbulent transition in the three-dimensional boundary layer”, In: Proceedings of the 2022 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT2022), Niigata, Japan, (Hybrid Event), S46-4, 4 pages, Oct. 12-14 (2022).
- [28] S. Shinkai, K. Nakagawa, T. Ishida, and T. Tsukahara, “Direct numerical simulation of turbulent transition in swept-flat-plate boundary layer over a cavity”, In: Proceedings of the 2022 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT2022), Niigata, Japan, (Hybrid Event), S46-3, 6 pages, Oct. 12-14 (2022).
- [29] K. Nakagawa, T. Ishida, and T. Tsukahara, “Transition process of crossflow vortices due to the cylindrical roughness and cavity in the three-dimensional boundary layer”, In: Proceedings of the 2022 Asia-Pacific International Symposium on Aerospace Technology (APISAT2022), Niigata, Japan, (Hybrid Event), S46-1, 6 pages, Oct. 12-14 (2022).
- [30] T. Kurihara, T. Ishigami, and T. Tsukahara, “Inter- and extra-polations of source estimation by CNN to identify a scalar point source in turbulent channel flow”, In: Proceedings of 9th Asian Joint Workshop on Thermophysics and Fluid Science (AJWTF2022), Utsunomiya, Japan, 4119, 7 pages, Nov. 27-30 (2022).
- [31] T. Takahashi, T. Nimura, and T. Tsukahara, “Flow pattern of rotating plane Couette flow at low Reynolds number with viscoelastic fluid”, In: Proceedings of 9th Asian Joint Workshop on Thermophysics and Fluid Science (AJWTF2022), Utsunomiya, Japan, 4065, 6 pages, Nov. 27-30 (2022).
- [32] S. Someya, T. Ishigami, and T. Tsukahara, “CNN-based estimation of scalar diffusion source distance under grid-generated turbulence”, In: Proceedings of 9th Asian Joint Workshop on Thermophysics and Fluid Science (AJWTF2022), Utsunomiya, Japan, 4054, 7 pages, Nov. 27-30 (2022).
- [33] Y. Matsukawa and T. Tsukahara, “Different transition processes of Taylor-Couette-Poiseuille flow based on modulated wavy Taylor vortex”, In: Proceedings of 9th Asian Joint Workshop on Thermophysics and Fluid Science (AJWTF2022), Utsunomiya, Japan, 4028, 5 pages, Nov. 27-30 (2022).
- [34] M. Tashiro and T. Tsukahara, “Prediction of constitutive stress for viscoelastic fluid turbulence with LSTM”, In: Proceedings of 9th Asian Joint Workshop on Thermophysics and Fluid Science (AJWTF2022), Utsunomiya, Japan, 4023, 5 pages, Nov. 27-30 (2022).
- [35] Y. Matsukawa, and T. Tsukahara, “Laminarization in subcritical Taylor-Couette-Poiseuille flow with increasing pressure gradient”, In: Proceedings of Nineteenth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2022), Sendai, Japan, pp. 732-735, Nov. 9-11 (2022).
- [36] M. Tashiro and T. Tsukahara, “DNS-CNN simulation of viscoelastic turbulent flow using U-Net”, The 15th World Congress in Computational Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM-APCOM 2022, Yokohama, Japan (Online), 1348, July 31 - Aug. 5 (2022).

- [37] K. Nakagawa, T. Ishida, and T. Tsukahara, “Freestream-turbulence independence of secondary instability of cross-flow vortices in swept-flat-plate boundary layer”, In: Proceedings of the 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12), Osaka, Japan (Online), 186, 6 pages, Jul. 19-22 (2022).
- [38] K. Kohyama, M. Sano, K. Tamai, and T. Tsukahara, “Directed percolation phenomena in subcritical transition of high-aspect-ratio duct flow”, In: Proceedings of the 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12), Osaka, Japan (Online), 312, 6 pages, Jul. 19-22 (2022).
- [39] Yutaro Motoori, Susumu Goto, “Role of the hierarchy of coherent structures in the transport of solid particles in turbulent channel flow at high Reynolds numbers”, 12th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP12), 340, 2022.

3. 国内研究会等発表論文

- [1] Yoshiaki Matsumoto, Ichiro Tanabe, Yoshitaka Morikawa, Ken-ichi Fukui, “Analysis of local structure of interfacial IL for Electric Double Layer Organic FET by MD calculation”, THE 22ND INTERNATIONAL VACUUM CONGRESS IVC-22, Sapporo, Japan, 2022.9.11-16 .
- [2] Tomonori Kakinoki, Ichiro Tanabe, Ken-ichi Oyaizu, Ken-ichi Fukui, “Spectroscopic Analysis of a Hydrogen Storing Polymer / Electrode Interface During the Electrochemical Storing by Attenuated Total Reflection Spectroscopy”, THE 22ND INTERNATIONAL VACUUM CONGRESS IVC-22, Sapporo, Japan, 2022.9.11-16.
- [3] Xiang Li, Ryo Matsumoto, Hiroshi Utsunomiya and Shigenobu Ogata, “Molecular Dynamic Study on Temperature Rise of FCC Metals by Plastic Deformation”, the Japan Institute of Metals and Materials Spring Meeting 2023, Tokyo, Japan, Mar. 2023.
- [4] 大橋圭太郎, 原田隆史, 中西周次, 神谷和秀, “Electrocatalytic reduction of carbon monoxide to multicarbon products on copper-single atom catalysts”, 日本化学会第 103 回春季年会, 東京理科大学野田キャンパス, Mar 2023.
- [5] 名木田海都, 濱本 雄治, 神谷 和秀, 中西 周次, 森川 良忠, “Cu100 面におけるCO水素化反応とO₂還元反応の競合反応に対する理論的研究”, 2022 年 電気化学秋季大会, 神奈川大学 みなとみらいキャンパス, Sep. 2022.
- [6] 山本泰暉, 栗原諒, 原田隆史, 中西周次, 神谷和秀, “金属銅電極上でのCO₂電解におけるCO二量化反応の第一原理分子動力学解析”, 2022 年 電気化学秋季大会, 神奈川大学 みなとみらいキャンパス, Sep. 2022.
- [7] 小松和暉, 小島駿, 松村武, “ハール・プリコーティングを用いる大規模スペクトル有効周波数分割多重と期待値伝播法に基づく並列干渉除去復調法の性能評価”, 信学技報, vol. 122 no. 235, RCS2022-141, 59-64, Oct.2022.

- [8] 南部 正裕, 奥野 充一, 仙北屋 圭, 大慶 則之, 小林 志保, “豪雨時における閉鎖性海域への淡水流入量の推定: 石川県七尾湾におけるケーススタディ”, 日本地球惑星科学連合 2022 年大会, 幕張メッセ, 2022 年 5 月 25 日, 2022 年 6 月 2 日.
- [9] 津元国親, 島本貴生, 青地悠馬, 天野晃, 倉田康孝, “How early afterdepolarization triggers lethal arrhythmias in long QT syndrome type 2: a computational study”, 第 68 回日本不整脈心電学会学術集会, パシフィコ横浜 横浜市, Jun.2022.
- [10] 津元国親, 島本貴生, 青地悠馬, 九田裕一, 谷田守, 姫野友紀子, 天野晃, 倉田康孝, “不整脈トリガーは如何にして発生するのか: 数理モデル解析からの予測”, 生理学研究所 心血管研究会 2022 「比較統合生理学的観点からの循環生理の解析」, 信州大学 松本市, Oct.2022.
- [11] 津元国親, 島本貴生, 青地悠馬, 九田裕一, 谷田守, 姫野友紀子, 天野晃, 倉田康孝, “EADの発生を契機とする心室性不整脈の発生機序: in silico研究”, 第 69 回中部日本生理学会, 藤田医科大学 豊明市, Oct.2022.
- [12] 津元国親, 島本貴生, 青地悠馬, 九田裕一, 谷田守, 姫野友紀子, 天野晃, 倉田康孝, “Inhibition of transient outward K⁺ current: potential prevention of reentrant arrhythmia developments in long QT syndromes.”, 第 96 回日本薬理学会年会, パシフィコ横浜 横浜市, Dec.2022.
- [13] 津元国親, 青地悠馬, 島本貴生, 姫野友紀子, 天野晃, 九田裕一, 谷田守, 倉田康孝, “Mechanisms of ventricular arrhythmias triggered by the development of EAD: an in silico study.”, 日本生理学会 第 100 回記念大会, 国立京都国際会館 京都市, March.2023.
- [14] Tianyi Wei, Zhicheng Yuan, Abhishek L. Pillai, Ryoichi Kurose, “Numerical investigation of droplet splash on flat surfaces: Influence of surface wettability”, 第 59 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, May.2022.
- [15] Tianyi Wei, Abhishek L. Pillai, Ryoichi Kurose, “Numerical Investigation Regarding Influence of Wettability on Inertia Dominated Droplet Splash”, 日本流体力学会 年会 2022 講演論文集, Sep. 2022.
- [16] Tianyi Wei, Abhishek L. Pillai, Ryoichi Kurose, “Influence of Ambient Pressure on Droplet Splash Behavior”, 日本機械学会第 100 期流体力学部門講演会 講演論文集, Nov. 2022.
- [17] 地内秀太, 河原伸幸, 小橋好充, ほか 3 名, “副室火花点火ガスエンジンにおける着火特性—副室ジェット点火のLES解析—”, 第 33 回内燃機関シンポジウム 講演番号 87, KFC Hall & Rooms 東京都, 2022 年 11 月 24 日.
- [18] 島 嘉輝, 小橋好充, 河原伸幸, “ノズル内キャビテーションを考慮したディーゼル噴霧のLES解析”, 第 31 回微粒化シンポジウム 講演番号B123, 2022 年 12 月 15 日.
- [19] 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近傍の反応過程におけるエネルギー分配に関する分子シミュレーション”, 第 59 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, H123, 2022.
- [20] 秋田翔太, 藤井健博, 岡林希依, 竹内伸太郎, “繊維群と流れの相互作用による集団的変形挙動の伝達機構”, 第 36 回数値流体力学シンポジウム, No. D03-5, Dec. 2022.
- [21] 橋本健人, 竹内伸太郎, “二次元正方形キャビティ内の熱伝導性固体粒子を含む自然対流における輻射伝熱の影響”, 第 36 回数値流体力学シンポジウム, No. D03-4, Dec. 2022.

- [22] 祝峻太郎, 竹内伸太郎, “界面垂直方向圧力分布を考慮した潤滑モデルを埋め込む粒子流れ解法”, 第 36 回数値流体力学シンポジウム, No. D04-4, Dec. 2022.
- [23] 嘉瀬 文哉, 内藤 健, 松野 龍生, 佐波 賢, 谷島 理来, 河野 慧大, “多重衝突パルス噴流圧縮に基づくダブルピストンエンジンの実験研究: 圧縮比が耐ノック性に与える影響”, 第 33 回内燃機関シンポジウム 予稿集, Nov.2022.
- [24] 河野 慧大, 内藤 健, 谷島 理来, 佐波 賢, 嘉瀬 文哉, 松野 龍生, 木嶋 洋貴, “多重衝突パルス噴流圧縮原理に基づくエンジの軸対称過給機の数値計算”, 第 33 回内燃機関シンポジウム 予稿集, Nov.2022.
- [25] 谷島 理来, 内藤 健, 小林 知嵩, 佐波 賢, 河野 慧大, 嘉瀬 文哉, 松野 龍生, “多重衝突パルス噴流圧縮に基づくシングルピストンエンジンの 3 次元数値解析研究”, 第 33 回内燃機関シンポジウム 予稿集, Nov.2022.
- [26] 岩林菜々香, 岡田祥吾, 比江島俊彦, “SR ストラットによる縦渦循環値が超音速燃焼に与える効果について”, 第 36 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, D01-4, 1-2, 2022.
- [27] 天野開, 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による剥離抑制”, 第 36 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, C03-3, 1-2, 2022.
- [28] Tomomi Kawakami, Sota Tamaki, Hayato Tsurugi, Kazushi Mashima, “Blue-light Induced Reduction of Oxo-bridged Hexanuclear Cerium(IV) Clusters via Homolysis of a Cerium-Ligand Covalent Bond”, 第 72 回錯体化学討論会, 九州大学, 2022 年 9 月 26 日.
- [29] Takuya Akiyama, Yuya Kakiuchi, Ian A. Tonks, Hayato Tsurugi, Kazushi Mashima, “タングステン錯体を触媒とするペンタアリアル化ピロールの短段階合成”, 第 51 回複素環化学討論会, 大阪大学, 2022 年 9 月 15 日.
- [30] Akira Yamamoto, Takuya Akiyama, Hayato Tsurugi, Kazushi Mashima, “タングステンビニルカルベン錯体と内部アルキンの反応による多置換シクロペンタジエンの合成”, 日本化学会第 103 回春季年会, 東京理科大, 2023 年 3 月 22 日.
- [31] Takuya Akiyama, Yuya Kakiuchi, Ian A. Tonks, Hayato Tsurugi, Kazushi Mashima, “[2+2+1]-Cycloaddition Reaction of Azobenzene and Diarylacetylenes Catalyzed by Early Transition Metal Imido Complexes”, 日本化学会第 103 回春季年会, 東京理科大, 2023 年 3 月 24 日.
- [32] 加藤 有己, “シングルセルデータを用いた細胞動態解析アルゴリズムの開発”, NGS EXPO 2022, 大阪府大阪市, Oct. 2022.
- [33] 杉原 礼一, 加藤 有己, 森 智弥, 河原 行郎, “1 細胞RNA-seqデータを用いた細胞状態遷移経路アラインメント法の開発”, RNA Frontier Meeting 2022 oral/poster, 大阪府吹田市, Oct. 2022.
- [34] King Fai Farley Law, 藤岡慎介, 大平豊, “無衝突衝撃波フット領域における不安定性のシミュレーション研究”, 日本物理学会 2022 年秋季大会 12pW621-3, 2022.
- [35] 前川珠貴, 澤田寛, 森田大樹, 瀧澤龍之介, Jinyuan Dun, Yubo Wang, 城崎知至, 岩田夏弥, 千徳靖彦, 有川安信, 藤岡慎介, ““捕捉電子のエネルギー分布計測によるレーザー照射ターゲット表面での電場強度の推定””, 日本物理学会 2022 年秋季大会 15aW621-9, 2022.

- [36] 瀧澤龍之介, 長友英夫, 有川安信, 森田大樹, 敦近原, 前川珠, 片桐健登, 尾崎典雅, 弘中陽一郎, 重森啓介, 藤域淳平, 安部勇輝, 羽原英明, 蔵満康浩, 城崎知至, 坂上仁志, 中井光男, 白神宏之, 兒玉了祐, 千徳靖彦, 藤岡慎介, “波形整形ビームを用いた中実球圧縮における流体不安定性の影響”, 日本物理学会 2022 年秋季大会 15aW621-3, 2022.
- [37] King Fai Farley Law, Jinyuan Dun, 安部勇輝, Alessio Morace, 有川安信, 尾崎哲, Philipp Korneev, Joao Jorge Santos, 藤岡慎介, “高強度レーザー駆動キロテスラ磁気リコネクションによる粒子加速”, 日本物理学会 2022 年次大会 23aB1-11, 2022.
- [38] 前川珠貴, 澤田寛, 城崎知至, 千徳靖彦, 瀧澤龍之介, DUN Jinyuan, 築道拓実, LAW Farley King Fai, 藤岡慎介, “硬X 線分光計測への機械学習の適用と妥当性の評価”, 日本物理学会 2022 年次大会 25aB1-7, 2022.
- [39] 築道拓実, 瀧澤龍之介, 森田大樹, 前川珠貴, LAW King Fai Farley, 敦近原, MORACE Alessio, 有川安信, 千徳靖彦, 城崎知至, 藤岡慎介, “高強度レーザーによるプラズマ加熱のレーザーパルス幅依存性”, 日本物理学会 2022 年次大会 25pB1-4, 2022.
- [40] 柏原悠, 松原崇, “逆熱拡散モデルによる医療画像セグメンテーション”, 電子情報通信学会技術研究報告 複雑コミュニケーションサイエンス研究会(CCS), 留寿都, vol. 122 no. 453 CCS2022-82, pp. 107-112, 2023 3 月.
- [41] 青嶋雄大, 松原崇, “深層生成モデルの潜在空間における可換な属性ベクトル場の学習”, 電子情報通信学会技術研究報告 複雑コミュニケーションサイエンス研究会(CCS), 留寿都, vol. 122 no. 453 CCS2022-83, pp. 113-116, 2023 3 月.
- [42] 青嶋雄大, 松原崇, “GANの潜在空間における非線形な属性座標系の学習”, 第 25 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2022), つくば, 1-090, 2022 11 月.
- [43] 松原崇, 谷口隆晴, “深層学習を用いてデータから力学系の第一積分を発見し保存するモデル化法”, 日本応用数理学会 2022 年度年会C1-5-3, 北海道, 2022 9 月.
- [44] 青嶋雄大, 松原崇, “GANの意味空間における属性ベクトル場の学習”, 電子情報通信学会 情報論的学習理論と機械学習研究会(IBISML)沖縄, vol. 122, no. 90, pp. 94-99, 2022 6 月.
- [45] 松原崇, 谷口隆晴, “射影法を用いて系の第一積分を発見し保存するNeural ODE”, 電子情報通信学会 情報論的学習理論と機械学習研究会(IBISML)沖縄, vol.122, no.90, pp.47-5, 2022 6 月.
- [46] 丸茂英敬, 松原崇, “LiDAR点群のセグメンテーションのための距離同変畳み込み”, 2022 年度 第 36 回人工知能学会全国大会(JSIAI2022)京都, 4C1-GS-7-01, 2022 6 月.
- [47] 吉田崇人, 谷口隆晴, 松原崇, “アンバランスを考慮した深層学習による物理系の学習, "2022 年度 第 36 回人工知能学会全国大会(JSIAI2022), 京都, 6 月, 2022.", 2022 年度 第 36 回人工知能学会全国大会(JSIAI2022)京都, 2D5-GS-2, 2022 6 月.
- [48] 柏原悠, 松原崇, “拡散モデルによる拡散を使用しない異常検知”, 2022 年度 第 36 回人工知能学会全国大会(JSIAI2022)京都, 1F5-GS-10-01, 2022 6 月.
- [49] 柏原悠, 松原崇, “拡散を使用しない拡散モデルによる異常検知”, 電子情報通信学会 NOLTAソサイエティ大会 大阪, B-16, 2022 6 月.
- [50] 吉田崇人, 谷口隆晴, 松原崇, “Imbalance-aware lossを用いた深層学習による物理系の学習”, 電子情報通信学会 NOLTAソサイエティ大会 大阪, B-13, 2022 6 月.

- [51] 丸茂英敬, 松原崇, “球面投射されたLiDAR点群のための距離同変畳み込み”, 電子情報通信学会 NOLTAソサイエティ大会 大阪, B-3, 2022 6 月.
- [52] 櫻井亮太, 鈴木崇弘, 津島将司, “格子ボルツマン法を用いた多孔質内液相蒸発挙動の基礎的検討”, 熱工学コンファレンス 2022 講演論文集, E135, Oct. 2022.
- [53] 都築 昇悟, 太田 貴士, “粘弾性流体乱流のためのミニマルフローユニットにおける時間スケールリングに基づくLESモデル”, 日本流体力学会 年会 2022, Sep. 2022.
- [54] 中澤 勇亮, 太田 貴士, “壁乱流の遷移時および遷移後に発生する空力騒音の観察”, 日本流体力学会 年会 2022, Sep. 2022.
- [55] 白畑 風太郎, 太田 貴士, “円柱に沿う流れの DNS による乱流構造の普遍的性質の検証”, 第 20 回日本流体力学会中部支部講演会, Dec. 2022.
- [56] 浅野 柚, 太田 貴士, “高解像度DNSによる渦キャビテーションの発生と乱流渦の変化の観察”, 流体工学シンポジウム 2022 (第 70 回北陸流体工学研究会), Dec. 2022.
- [57] 上野 玄稀, 永井 優河, 太田 貴士, “壁乱流のDNSにおける水素予混合燃焼火炎伝播とNO_x生成の予測”, 流体工学シンポジウム 2022 (第 70 回北陸流体工学研究会), Dec. 2022.
- [58] 道坂 大介, 太田 貴士, “粘塑性流体乱流のDNSの実現と乱流構造の観察”, 日本機械学会 北陸信越支部 2023 年合同講演会, Mar. 2023.
- [59] 皆本 慧, 太田 貴士, “過冷却凝固しつつある液体における乱流構造と凝固要素の関係の解明”, 日本機械学会 北陸信越支部 2023 年合同講演会, Mar. 2023.
- [60] 黒田 陸真, 太田 貴士, “回転する円柱に沿う流れにおける乱流変調の予測”, 日本機械学会 北陸信越支部 2023 年合同講演会, Mar. 2023.
- [61] 中司智仁, 寺島洋史, 坪井伸幸, “超臨界圧直交極低温水素噴流の軌跡スケールリングについて”, 日本機械学会第 100 期流体工学部門講演会, OS03-47, 2022.
- [62] チャンジチン, アンシアンチン, 坪井伸幸, 小澤晃平, 丸祐介, 藤田和央, “数値解析によるウェーブライダー形状の空力特性評価: Inverse Parabolic設計法による形状設計及びポートテールの効果”, 第 66 回宇宙科学技術連合講演会, 2022.
- [63] Muhammad Fakhruddin Hadi Bin Abdull Rahman, 坪井伸幸, 小澤晃平, “NACA0012 翼型周りの流れ場の数値解析: 乱流モデルの評価”, 日本機械学会九州支部九州学生会第 54 回学生員卒業研究発表講演会, 2023.
- [64] 井福剛司, 大倉毅, 坪井伸幸, 小澤晃平, 伊藤隆, 野中聡, “再使用型ロケット実験機RV-Xの空力特性における乱流モデルの影響に関する数値解析”, 第 66 回宇宙科学技術連合講演会, 2022.
- [65] 伊藤 拓海, 坪井 伸幸, 小澤 晃平, “3 次元数値解析による予混合噴射口数がDisk Rotating Detonation Engine内部流れ場に与える影響の評価”, 第 54 流体力学講演会, 1D01, 2022,6.
- [66] 植村 文哉, Jourdain Nicolas, 坪井 伸幸, 唐 新猛, 小澤 晃平, 林 光一, “ブロックAMR法を用いた 2 次元水素酸素デトネーションの数値解析: 計算領域の拡大と計算時間・格子点数への影響”, 日本航空宇宙学会西部支部講演会 (2022), JSASS-2022-S025, 2022,11.
- [67] 檜山瑞樹, 坪井伸幸, 林光一, 中森一郎, 富塚孝之, 高橋淳郎, 大西史倫, 小玉貴司, 玉内義一, “水素/空気予混合気における爆燃から爆轟への遷移過程の数値解析”, 日本機械学会九州学生会第 54 回学生員卒業研究発表講演会, 2023.3.

- [68] 小濱朱生, 坪井伸幸, 小澤幸平, 林光一, “詳細化学反応モデルを使用した爆轟の 2 次元非粘性詳細数値解析—アンモニア/水素/空気予混合気における爆轟特性—”, 2022 年度衝撃波シンポジウム, 2023 年 3 月.
- [69] 久保田大輝, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, “準詳細化学反応モデルを使用したジメチルエーテル/酸素予混合気の爆轟の詳細数値解析 -爆轟伝播特性における反応モデルの影響について-”, 2022 年度衝撃波シンポジウム, 2023.3.
- [70] Ryo Ueda, Harry H. Halim, Yoshitada Morikawa, “機械学習分子動力学法によるCO吸着したCuステップ表面の再構成の解析”, Spring Conference of JPS (The Physical Society of Japan), Mar. 2023.
- [71] Harry H. Halim, Yoshitada Morikawa, “Machine Learning Molecular Dynamics Simulation of CO₂ Hydrogenation to Formate on Cu (111) Surface”, Spring Conference of JPS (The Physical Society of Japan), Mar. 2023.
- [72] 山本紘生, 大森健史, “微視的な幾何学的不均一性のある固体面における流体力学的境界条件”, 数値流体力学シンポジウム, 2022.12.14.
- [73] 坂和洋一, 花野正浩, Alessio Morace, 佐野孝好, “臨界密度近傍の多成分プラズマ中のレーザー駆動無衝突静電衝撃波”, 日本物理学会 2023 年春季大会, 23aB1-10, 2023 年 3 月.
- [74] 小田豊, 下田将治, 笠原友宙, 山崎龍朗, 松本亮介, “感温塗料による乱流熱伝達場の画像計測における機械学習を用いたノイズ低減”, 第 59 回日本伝熱シンポジウム, Paper No. F133, May 2022.
- [75] 河川 真一, 甲斐 歳恵, “AlphaFold2 プログラムを用いて, 生殖細胞特異的なヌアージュ構造体のタンパク質間相互作用を予測する”, 第 3 回有性生殖研究会, Mar. 2023.
- [76] 二宮雅輝, 林佑介, 藤平哲也, 酒井朗, “第一原理計算によるルチル型TiO₂中の剪断面構造及び酸素空孔挙動の解析”, 第 83 回応用物理学会秋季学術講演会(講演奨励賞受賞), 20a-B204-1, ハイブリッド開催, 2022 年 9 月 20-23 日 .
- [77] 二宮雅輝, 林佑介, 藤平哲也, 酒井朗, “ルチル型TiO₂中の剪断面構造及び酸素空孔挙動に関する第一原理計算”, 第 70 回応用物理学会春季学術講演会(奨励賞受賞記念講演), 17p-A408-1, ハイブリッド開催, 2023 年 3 月 15-18 日.
- [78] 藤森 航紀, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, “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 2022 年度年次大会講演論文集, 5p, Sep. 2022.
- [79] 坂野 友一, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, “DNSによる傾斜・回転制御の周波数比が衝突噴流の流動特性に与える影響”, 日本機械学会 2022 年度年次大会講演論文集, 4p, Sep. 2022.
- [80] 藤森 航紀, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, “傾斜角度を時間変化させた回転衝突噴流のDNS”, 第 99 期日本機械学会流体力学部門講演会講演論文集, 4p, Nov. 2022.
- [81] 岡田 陸, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, “フェーズフィールド法による平面液体噴流の微粒化における密度比の影響”, 第 36 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, 5p, Dec. 2022.
- [82] 坂野 友一, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, “DNS による傾斜・回転制御の制御パラメータが伝熱特性に与える影響”, 日本機械学会東海支部第 72 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2023.

- [83] 岡田 陸, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, “液体噴流の微粒化における密度比が流動特性に与える影響の解析”, 日本機械学会東海支部第 72 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2023.
- [84] 藤森 航紀, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, “DNS による傾斜角度を時間変化させた回転衝突噴流の流動解析”, 日本機械学会東海支部第 72 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2023.
- [85] 増田 竜海, 辻本 公一, “振動制御された多重衝突噴流の流動構造・伝熱特性”, 日本機械学会東海支部第 54 回学生会卒業研究発表講演会講演論文集, 2p, Mar. 2023.
- [86] 仁村 友洋, 河田 卓也, 塚原 隆裕, “平面クエット流れにおける粘弾性に起因する渦変調と不安定性に関する研究”, 第 38 回生研TSFDシンポジウム, 東京, 2 pages, 3 月 9 日 (2023).
- [87] 栗原 稔幸, 石神 隆寛, 塚原 隆裕, “チャンネル乱流中のスカラー拡散源位置に関するCNNを用いた回帰推定のDNS検証”, 日本機械学会 第 100 期 流体工学部門講演会 講演論文集, 熊本, OS04-15, 1 page, 11 月 12 日-13 日 (2022).
- [88] 田代 雅哉, 塚原 隆裕, “LSTMを用いた粘弾性チャンネル乱流における構成応力の予測”, 日本流体力学会年会 2022 講演論文集, 京都, 3 pages, 9 月 27 日-29 日 (2022).
- [89] 高橋 拓海, 仁村 友洋, 塚原 隆裕, “低レイノルズ数回転平面クエット流れにおける粘弾性流体の不安定性”, 日本流体力学会年会 2022 講演論文集, 京都, 4 pages, 9 月 27 日-29 日 (2022).
- [90] 松川 裕樹, 塚原 隆裕, “Taylor-Couette-Poiseuille流における変調波状Taylor渦流から間欠乱流への亜臨界遷移現象”, 日本流体力学会年会 2022 講演論文集, 京都, 3 pages, 9 月 27 日-29 日 (2022).
- [91] 河田 卓也, 塚原 隆裕, “平面クエット乱流における多重スケール相互作用による乱流エネルギー輸送”, 日本流体力学会年会 2022 講演論文集, 京都, 6 pages, 9 月 27 日-29 日 (2022).
- [92] 松川 裕樹, 小野寺 駿, 塚原 隆裕, “水平圧力勾配を付加した鉛直平行平板間共存対流の亜臨界遷移パターン”, 第 59 回日本伝熱シンポジウム 講演論文集, 岐阜, BPA1432, 6 pages, 5 月 18 日-20 日 (2022).
- [93] 稲田慎, 岸田優作, 高山健志, 井尻敬, 芦原貴司, 大星直樹, 柴田仁太郎, 中沢一雄, “新たな心房細動治療法の開発を目的とした心房モデルの構築”, 第 61 回日本生体医工学会大会 口頭発表, 朱鷺メッセ (新潟コンベンションセンター), 2022/6/28-30.
- [94] 岸田優作, 浦田智和, 橋本陸, 大星直樹, 芦原貴司, 井尻敬, 高山健志, 柴田仁太郎, 原良昭, 信太宗也, 稲田慎, 中沢一雄, “ヒトの 3 次元心房モデルに基づく心房細動興奮伝播シミュレーションと拡張現実での可視化”, 第 61 回日本生体医工学会大会 口頭発表, 朱鷺メッセ (新潟コンベンションセンター), 2022/6/28-30.
- [95] 原口亮, 芦原貴司, 松山高明, 芳本潤, “WPW症候群副伝導路の順伝導と逆伝導における不応期の違いについて:シミュレーションによる検討”, 日本不整脈心電学会心電学関連春季大会 2022 口述(遠隔), ハイブリッド (パシフィコ横浜ノース), 2022/4/9.
- [96] 中谷祐介, 鶴田脩, 出口博之, 鹿島千尋, 山根成陽, “栄養塩類増加措置による瀬戸内海東部の水質管理に関する数値シミュレーション”, 第 57 回日本水環境学会年会, 松山, 3-A-13-3, 2023 年.

- [97] 秋山諭, 木村祐貴, 中谷祐介, 稲垣翔太, 鹿島千尋, 新井励, 山本龍悠, “大阪湾における底曳網漁業による水柱への栄養塩供給機能評価”, 令和4年度漁場環境保全関係研究開発推進会議 瀬戸内海栄養塩環境研究会, 広島, 2023.
- [98] 中谷祐介, 出口博之, 鹿島千尋, “防波堤の開口が大阪湾北部港湾域の静穏性と水質に及ぼす影響”, 第69回海岸工学講演会, 横須賀, 2022.
- [99] 本告遊太郎, 後藤晋, “壁乱流中における固体粒子分布の秩序構造による記述”, 日本機械学会 2022年度年次大会, 2022.9.11-14.
- [100] 本告遊太郎, 後藤晋, “乱流中の渦の階層とスケール間エネルギー輸送”, 日本流体力学会年会 2022, 2022.9.27-29.
- [101] 本告遊太郎, 後藤晋, “粒子の添加による壁乱流の変調現象”, 日本機械学会第100期流体力学部門講演会, 2022.11.12-13.
- [102] 濱本雄治, T. N. Pham, 森川良忠, “機械学習によるAg (111)表面上シリセンの大域的構造探索”, 日本物理学会 2023年春季大会, 24aJ1-6, 2023年3月.

4. その他

- [1] 明孝之, 加藤幾芳, “ ^8He におけるソフトダイポールモードの可能性”, 日本物理学会 2022年秋季大会, Sep, 2022.
- [2] Takayuki Myo, “Soft dipole resonance in ^8He ”, 3rd Japan-France Workshop "Few-body problems in Physics - from atoms to quarks, Mar, 2023.
- [3] 明孝之, 加藤幾芳, “ ^8C におけるソフトダイポール共鳴の可能性”, 日本物理学会 2023年春季大会, Mar, 2023.
- [4] 小宮山佑樹, 大場春佳, 水野信也, “大規模閉鎖型 BCMP 待ち行列ネットワークの複数窓口への対応”, 日本ソーシャルデータサイエンスシンポジウム 2023, Feb, 2023.
- [5] 南部 恵理子, 野崎 一徳, 福岡 基彦, 横野 遼太郎, 開発 巳智子, 古々本 一馬, 秋山 茂久, 村上 秀明, 花本 博, 村上 旬平, 中村 昇太, 阪本 敬, 関根 伸一, 山田 朋美, 林 美加子, “歯科診療室の個室における実データを用いた汚染空気の滞留シミュレーション”, 第42回医療情報学連合大会 (第23回日本医療情報学会学術大会), 2022年11月.
- [6] 河野宏明, 柏浩司, 開田丈寛, “量子色力学におけるパーシステントホモロジーの応用”, 第128回日本物理学会九州支部例会 (熊本大学), 2022年12月3日.
- [7] M.SATO, N.BELMILOUD, Y.OKUNO, “LARGE SCALE EDDY SIMULATION OF A LIQUID FILM FLOWING OVER A ROTATING DISK: WAVES PATTERNS AND DYNAMICS”, The 17th OpenFOAM Workshop (Cambridge United Kingdom), July. 13, 2022.
- [8] 佐藤雅伸, “回転基板上の液膜の LES を使用した流体シミュレーション”, 応用物理学会 界面ナノ電子化学研究会第7回ポスター展招待講演 (Tokyo Japan), Sep. 29, 2022.
- [9] Takuma Hattori, Pawel Krukowski, Ye Changqing, Yuji Hamamoto, Akira Saito, Yoshitada Morikawa, Hideji Osuga, Yuji Kuwahara, “Chiral recognition of thiaheterohelicene molecules studied by STM and TERS”, ギリシャにおける国際会議(ハイブリット開催), 2022年10月中嶋

- [10] S. Miyakoshi, T. Sugimoto, T. Shirakawa, S. Yunoki, H. Ueda, “Diamond-type quantum circuit for real-time dynamics in one-dimensional system”, The 1st young researcher's workshop of the Extreme Universe Collaboration (Nagoya), 2023/2/13-17 .
- [11] 宮腰祥平, 杉本貴則, 白川知功, 柚木清司, 上田宏, “量子回路エンコーダによる時間発展ダイナミクスと量子回路構造の研究”, 日本物理学会 2023 年春季大会, 2023/3/22-25.
- [12] 宮腰祥平, “ダイヤモンド型量子回路を用いた一次元非平衡量子状態の研究”, 研究会：物性研究のための量子アルゴリズム最前線, 2023/3/28-29.
- [13] 竹本宏輝, 明孝之, 堀川昶, 土岐博, 井坂政裕, M. Lyu, Q. Zhao, N. Wan, “ ^{12}C における α 凝縮状態 (Hoyle 状態とその振動モード)”, 一般社団法人 日本物理学会(オンライン), 2023 年 3 月 23 日.
- [14] 竹本宏輝, 明孝之, 堀川昶, 土岐博, 井坂政裕, M. Lyu, Q. Zhao, N. Wan, “核力の強い斥力芯を考慮しても ^{12}C の Hoyle 状態は存在するのか?”, 一般社団法人 日本物理学会 岡山理科大学岡山キャンパス, 2022 年 9 月 6 日.
- [15] 秋田健太, 森本有紀, 鶴野玲治, “キャラクタイラスト線画の顔を対象としたテクスチャ詳細が反映可能な自動着色”, VC + VCC 2022, 2022.
- [16] Hiroyuki Nakashima, “Solving the Schrödinger equations of small atoms and molecules with the free complement theory”, The 10th Asia-Pacific Conference of Theoretical and Computational Chemistry (APCTCC-10), Quy Nhon, Vietnam. (Plenary lecture of Pople Medal)., February 19-23, 2023.
- [17] 塚原 隆裕, “乱流×機械学習”, 日本機械学会熱工学部門・流体工学部門・計算力学部門合同講習会 機械学習×熱・流体工学の最先端 (No.23-20) オンライン, 3 月 24 日 (2023).
- [18] 塚原 隆裕, “粘弾性流体や乱流拡散を対象とした深層学習”, 日本機械学会 2022 年度年次大会 EFD ワークショップ：流体工学と AI (富山) W52-03, 9 月 11-14 日 (2022).
- [19] T. Tsukahara, “Subcritical transitions of channel flows: Patterning of localized turbulence”, IISc-TUS Joint Webinar (Online), Jun. 9 (2022) .
- [20] 塚原 隆裕, “粘弾性流体乱流に対する機械学習代理モデル”, 電子情報通信学会 情報論的学習理論と機械学習研究会 (IBISML) 第 45 回 IBISML 研究会 Zoom (online 開催), 3 月 9 日 (2022).
- [21] 中谷祐介, “瀬戸内海の栄養塩類管理に資する新たな低次生態系モデルの開発”, FOCUS スパコンと計算科学利用事例集 第 13 号 pp.14-15, 2023.
- [22] 中谷祐介, “瀬戸内海の栄養塩類はどこまで管理できるのか?”, 兵庫県漁協青壮年部連合会 研修会 [依頼講演] 明石, 2023 年 1 月 31 日.
- [23] 中谷祐介, “瀬戸内海の栄養塩類はどこまで管理できるのか?”, ひょうご豊かで美しい里海再生シンポジウム [依頼講演] 神戸, 2022 年 10 月 29 日.

SC22 出展報告

伊達 進^{1,2} 田主 英之² 原口 直大³

吉田 薪史^{4,1} 谷口 昂平^{4,1} 安田 成寿^{4,1} 阿部 洋丈¹ 下條 真司¹

応用情報システム研究部門¹ 高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所²

情報推進部情報基盤課³ 大学院情報科学研究科⁴

2022 年 11 月に米国テキサス州 Dallas にて開催された国際会議／展示会 SC (通称 SC22) において、当センターの概要、研究内容、および事業内容を紹介するための展示ブースの出展を行った。本稿ではその展示内容や当日の様子等について報告する。

1. はじめに

大阪大学サイバーメディアセンターでは、例年、米国で開催される国際会議 SC において展示ブースを出展する活動を継続している。SC とは、*The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis* という正式名称を持つ、IEEE Computer Society および ACM SIGARCH によって開催されている国際会議であり、ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) 分野におけるトップレベル会議の一つである。それと同時に、SC は HPC に関する最新機器や最先端技術の国際見本市でもある。そのため、北米を中心とした研究者や技術者に限らず、欧州、アジアの研究者や技術者が集う最大級の国際会議／展示会となっており、新型コロナウイルス感染症の拡大以前において登録者数は 1 万人を超える数字が記録されており、今年は 11,830 人 (対面 10,530 人、オンラインのみ 1,300 人) が参加したと発表されている。当センターによる展示ブースの出展は、新型コロナウイルス感染症の拡大のため 2020 年度、2021 年度の展示は叶わなかったが、2000 年の初出展から数え、今回で 21 回目となる。

SC22 は、米国テキサス州ダラス市にある Kay Bailey Hutchison Convention Center Dallas (以下、ダラスコンベンションセンター: 図 1) にて、11 月 13 日から 18 日までの期間に開催された。なお、ダラスでの SC の開催は 2000 年度、2018 年度に続いて 3 度目であり、本センターのダラスでの展示は 3 度目となる。ダラスはテキサス州の北部にあり、アメリカ合衆国南部で有数の大都市である。11 月のダラスの気候は平均 20℃程度と比較的温暖で乾燥しているといわれている。しかし、展示員は展示ブースの準備のため現地時間 11 月 11 日に現地入りしたが、当日は日本よりも寒さが感じられる気候であり、SC の開催される週を通してコートが手放せなかった。



図 1: ダラスコンベンションセンター

初日こそ雨天で乾燥は感じられなかったが、その週を通じて乾燥は激しく、喉をやられたり、肌の乾燥に悩まされたりという状況となった。そのため、展示終了の段階では皆疲労困憊の状況であり、終わって良かったという思いと達成感が入り混じっていた。

SC22 の展示が行われたダラスコンベンションセンターはダラスのダウンタウンに位置しており、敷地面積は 2,000,000 平方フィートと米国でも有数の大規模なコンベンションセンターである。1,000,000 平方フィートある展示スペースには、3 つの ballroom、88 室の会議室、1,750 席のシアター、9,816 席のアリーナを備える。このような大規模な展示会場にて、391 もの企業、大学、研究所等がブースにて展示を行った。



図 2: 展示終了、片付け直前に撮影した記念撮影

2. 展示内容

本年は、以下に紹介する当センターおよび情報推進部の教職員 5 名（招へい教員 1 名含む）、関連研究部門に配属されている大学院生 3 名の合計 8 名という構成で展示ブースの運営に臨んだ。展示者および周辺ブース関係者らとの記念撮影風景を図 3 に示す。



図 3: SC22 での記念撮影

応用情報システム研究部門	
スタッフ	下條 真司 伊達 進 阿部 洋丈（招へい准教授）
大学院生	吉田 薪史 谷口 昂平 安田 成寿
高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所	
スタッフ	田主 英之
情報推進部情報基盤課	
技術職員	原口 直大

ブース展示は、11 月 14 日から 17 日までの 4 日間行われた。その間の当ブースへの来訪者数は、ID バッジの読み取り数で数えて 268 名であった。訪問者数は 2018 年度のダラス開催の 436 名を大きく下回った。この最大理由の 1 つとして、今年度コロナ以前の状態にむけ再開した SC ではあったものの、やはり新型コロナウイルスの拡大の影響を受け、現地での出席を見合わせた方の影響があると考えられる。しかし、コロナ禍においても、268 名程度の方の対面にて本センターの概要、事業内容、研究活動について紹介・報告ができたことは良かったと思う。これまでオンラインでの機会しか与えられず、対面で行いたくてもできなかった 2 年超を思い返せば、その思いも大きい。なお、ブース来訪者によっては 10 分以上もブースに滞在され、ブース展示要員と話をしている方もおられたので、来訪者数だけでブース展示の効果・意義を図れるものではないが、全体を振り返り、今年度も SC でのアウトリーチ活動として良い結果を残せたと考えている。

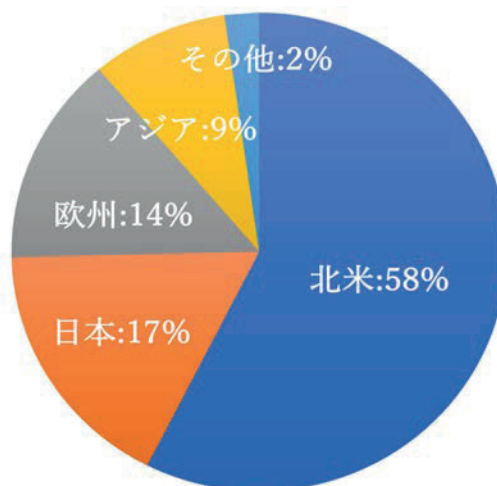


図 4: ブース来訪者 - 地域別分類

ブース来訪者の地域別分類 (図 4) を見ると、開催地の北米エリアからの来訪者が最大で全体の 58% (154 名) を占めている。続いて、日本からの来訪者が 17% (46 名)、欧州からの来訪者が 14% (38 名)、アジアからの来訪者が 9% (24 名) であった。その他 (6 名) の内訳には、南米、アフリカなどが含まれていた。残念ながら今回はオセアニア諸国からの来訪者が見られなかった。

その他注目する点は、ブース来訪者に中国からの来訪者が記録されていなかった事である。これまでの傾向から考えると中国からの来場者は大幅減であったのではないかとと思われる。

新型コロナの影響からか全体的なブース会場への来場者の減少が見られた中で、今回はオセアニア、南極以外の大陸からの来訪者に対して、アウトリーチ活動を行うことができたと考えている。

以下、SC22 にて大阪大学サイバーメディアセンターで行ったポスター展示の概要について説明する。(括弧内は担当者名。順不同、敬称略)。

(1) *About Us: Cybermedia Center, Osaka University*
(原口、阿部)

本ポスターでは、サイバーメディアセンターに関する紹介と IT コア棟について紹介を行った。ブース来訪者からは、IT コア棟の冷却設備について、空冷であるか水冷であるかといったスーパーコンピュータに関連した内容が多かったが、キャンパス内の図書館はどのような方が使えるのか、電子ジャーナルは利用できるか、学外からアクセス可能か、といった、情報へのアクセスに関する質問を多くいただいた。また、キャンパスネットワークの回線速度についても興味を持つ方もおり、データ通信を伴う施設利用に興味を持つ方が多い印象であった。

(2) *Large-scale Computing Systems at the Cybermedia Center* (原口、阿部)

本ポスターでは、大規模計算機システムの構成や利用状況についての紹介を行った。今回は SC19 以来の出展となるため、SQUID 及び ONION を新サービスとして紹介した。

ブース来訪者からは、プロセッサ、ファイルシス

テム、アクセラレータ、利用可能なアプリケーションに関する質問に加え、ONION を経由した情報連携について多くの興味をいただいた。AWS S3 の API 互換を持つ CLOUDIAN を利用していることや、Web インタフェースとして NextCloud を利用していることを伝えると、SQUID や ONION はどのような方が使えるか、と、利用に関する質問も多くいただいた。しかしながら、現状は直接的な利用は難しく、日本の研究機関の共同研究としての連携により、ONION を介した利活用が可能であることを伝えると、残念そうな姿を見せた。そのほか、データ転送速度やネットワークの速度に関する質問も多くいただき、About Us でいただいた質問も含め、情報通信基盤整備と大規模計算機システムとの連携の重要度を再認識した。



図 5: ポスター説明を行う原口

(3) *AI Assisted job scheduler/ Profile guided vector optimization* (安田、田主)

(4) *Provenance Recording System for Research Data Management* (安田、田主)

ポスター(3)(4)では、日本電気株式会社 (NEC) との協働研究所で取り組んでいる次世代のクラウド連動型高性能計算と高性能データ分析の融合基盤の実現に向けた 3 つの研究テーマを紹介した。

ポスター (3) ではその内 2 つの研究について取り扱った。まず AI Assisted job scheduler では、強化学

習を用いたジョブスケジューラを紹介した。提案システムの動作の詳細や、将来課題である Slurm との統合について興味を持たれる方が多かった。また、ソースコードを公開しているかどうかや、実装に用いたフレームワークについての質問も多く頂き、実装面での関心も寄せていただいた。研究として面白いというコメントも多く頂いたので、実用化に向けて拡張を進める必要があると強く感じた。

次に Profile guided vector optimization では、ソースコードをベクトルプロセッサでの計算に最適化したソースコードに自動変換するツールを紹介した。ベクトル化を知らない来訪者もいらっしゃり、そのような方にベクトル化について知っていただくきっかけにもなった。このツールによってベクトル化が容易になれば、ベクトルプロセッサの認知を広めることにも繋がるかもしれないと感じた。

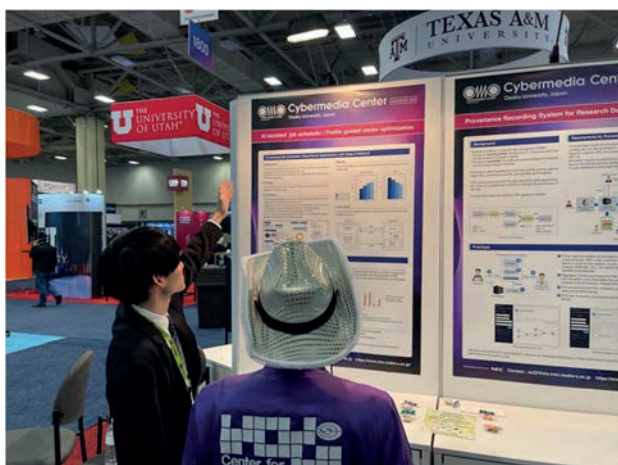


図 6: ポスター説明を行う大学院生 (安田君)

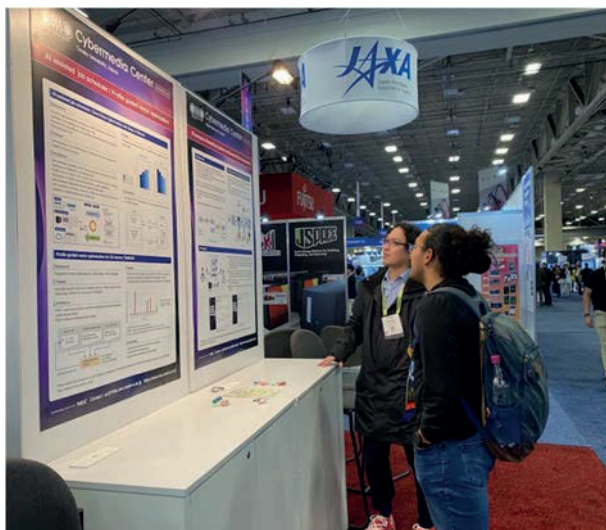


図 7: ポスター説明を行う田主

ポスター (4) では高性能計算機システムにおける来歴自動記録システム実現への取り組みを紹介した。研究データ管理における研究データの再現性向上、利活用促進のための来歴記録システムの重要性を説明し、ユースケースとプロトタイプを使い我々が目指す来歴記録システムの大まかな流れを紹介した。シミュレーションなどで大量のデータを生み出す高性能計算機システムで自動的に来歴を記録する必要性、そして低負荷でユーザが行うジョブの背後で来歴が自動的に記録される点、来歴データをユーザが直接編集できない事で研究データの透明性を確保する点には多くの来訪者が大きく頷いて関心を持って頂いた。また多くの来訪者からこの来歴システム及びプロトタイプがオープンソースとして提供されるのかどうか、という質問を頂いた。この点も踏まえて今後の来歴記録システム実現に向けて取り組んでいきたい。

(5) *ns-3-based Interconnect Simulator for Network Simulation with Job Scheduling* (谷口)

本ポスターでは、HPC システムのインターコネクットのシミュレーションに向けた、ジョブスケジューリング対応ネットワークシミュレータを紹介した。来訪者にジョブスケジューリングの必要性は理解していただけた。しかし、Infiniband への対応の有無や MPI のモデル化の方法など実際にインターコネク設計に使う観点からの質問を多くいただいた。質問を受けてインターコネク設計に用いるには更なる機能拡張を行う必要があると実感した。



図 8: ポスター説明を行う大学院生 (谷口君)

(6) *Toward Practical Cloud Bursting Operation on SQUID* (吉田)

本センターでは、クラウドバースティング機能を備えたスーパーコンピュータ SQUID を構築した。しかし、スーパーコンピュータとクラウド間の性能差やコスト差が利用者のクラウド利用を妨げる恐れがある。本ポスターでは、性能、コスト、利用方法の3点から利用者にクラウド利用を促進する運用方針の研究を紹介した。

ポスター発表には、大学の研究者や学生、クラウドに関する企業の方など様々な方が来訪された。オンプレミスとクラウドの併用が注目される中、多くの来訪者はスーパーコンピュータ内のストレージをNFSでクラウドにマウントする点や課金方式が異なる2つのキューを用意した点に興味を持っていた。また、クラウドサービスの選択理由やスーパーコンピュータとクラウド間の通信遅延への対応について質問をいただいた。

本ブースでの展示では、クラウド事業者の方と議論するとともに、激励の言葉をいただいた。今回の経験を自身の研究活動に活かしていきたい。

る研究成果について欧米を中心とした268名強の来訪者にアウトリーチすることができた。来年度のSCの開催は米国コロラド州デンバー市で同時期に開催されるが、大阪大学サイバーメディアセンターのプレゼンス向上とともに、情報公開、アウトリーチ活動にも引き続き尽力していきたいと考える。

関係各位には更なるご支援とご協力をお願いしたい。

当日展示したポスターのPDFや、その他の写真など、ここで紹介しきれなかった内容については下記ウェブページに掲載されています。こちらもぜひご覧ください：

<http://sc.cmc.osaka-u.ac.jp/>

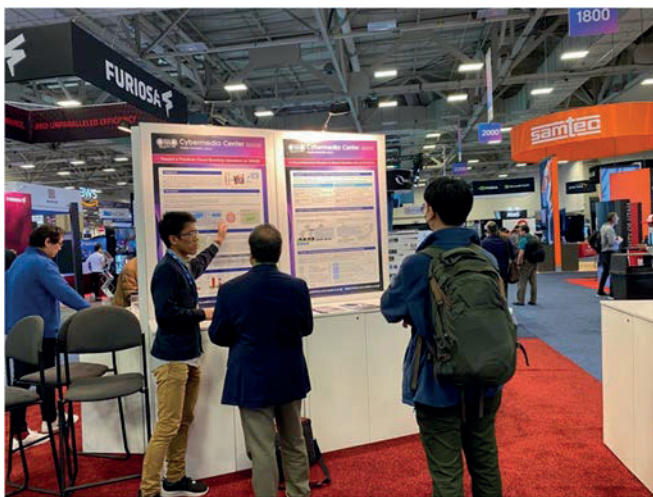


図9: ポスター説明を行う大学院生(吉田君)

3. おわりに

今年度の展示においても、大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機および可視化事業をはじめとし、高性能計算・ネットワーキングに関す

第 28 回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2022) 報告および 第 29 回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2023) 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. SuperCon2022

昨年 2021 年 8 月 22 日から 26 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(SuperCon2022)」が行われました。本年も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きました。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 年また 2022 年も本選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

2022 年の予選課題は 6 月 1 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 17 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。2022 年の予選課題は、阪大の作成チームによる「ロボット追跡問題」というものでした。これは様々な色のタイルを敷き詰めた床の上を進むロボットが随時報告する色の情報からロボットの軌跡を推定するという問題です。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。本選課題は東工大の作成チームによる「オートマトンで文字列を区別しよう」という問題でした。計算機科学分野のオートマトン理論におけるある有名な未解決問題にヒントを得た問題です。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 2023 の告知

2023 年は 8 月 21 日（月）から 25 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 5 月 31 日に公表、課題提出〆切は 6 月 16 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 SuperCon2023 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 SuperCon2024 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並列計算の基礎、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、intelコンパイラに関する詳しい解説、阪大の誇るスーパーコンピュータSQUIDに搭載されているベクトルプロセッサSX-Aurora TSUBASAを用いての高速計算についての解説、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KKRグリーン関数法を用いた第一原理計算プログラムAkaiKKR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20回弱開催しております(2022年度は20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～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2022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、AkaiKKR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、われわれは一般財団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、2022年の20回の講習会のうちおよそ1/4ほど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、バッチシステムの解説、そしてコンパイラ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SQUID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、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、第一原理計算プログラムAkaiKKR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。

2023 年度 大規模計算機システム利用講習会

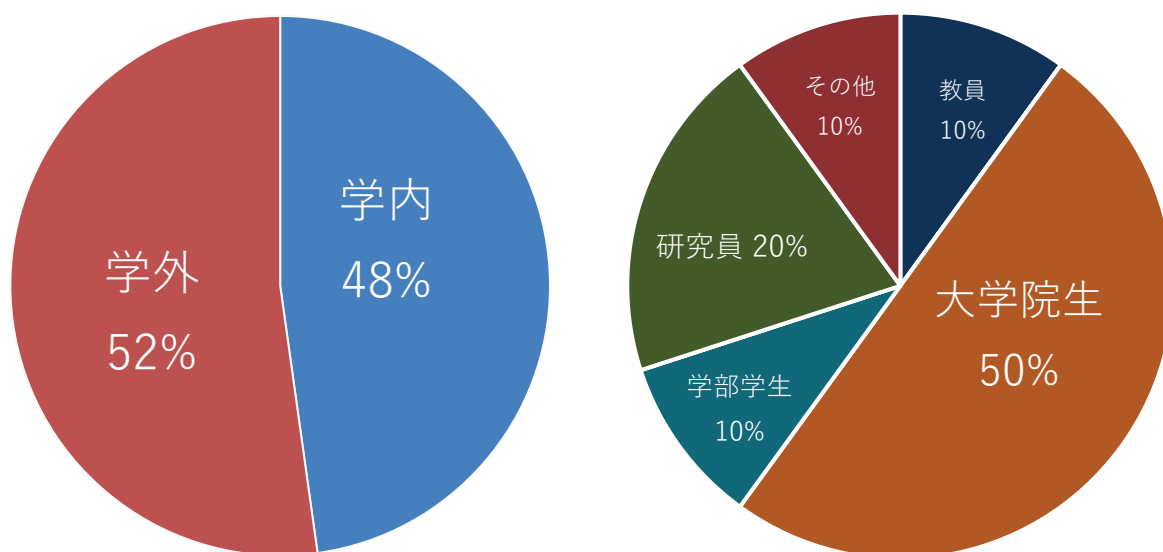
	講習会名	開催 日時	講師	開催場所
1	スパコンに通じる 並列プログラミングの基礎	5 月 31 日 9 月 4 日	サイバーメディアセンター 宮武 勇登 准教授	オンライン開催
2	初めてのスパコン	6 月 5 日 9 月 1 日	サイバーメディアセンター 木戸 善之 招へい教授 情報基盤課 技術職員	オンライン開催
3	OpenMP 入門	6 月 8 日	サイバーメディアセンター 吉野 元 准教授	オンライン開催
4	スーパーコンピュータ パッチシステム入門 / 応用	6 月 14 日 9 月 29 日	日本電気(株)	オンライン開催
5	ONION 活用講習会	6 月 16 日	日本電気(株)	オンライン開催
6	SX-Aurora Tsubasa 高速化技法の基礎	6 月 20 日 9 月 19 日	日本電気(株)	オンライン開催
7	汎用 CPU ノード 高速化技法の 基礎 (Intel コンパイラ)	6 月 22 日 9 月 27 日	エクセルソフト(株)	オンライン開催
8	並列プログラミング入門 (OpenMP/MPI)	6 月 23 日 9 月 25 日	日本電気(株)	オンライン開催
9	GPU プログラミング入門 (OpenACC)	6 月 27 日 10 月 3 日	プロメテック・ ソフトウェア(株)	オンライン開催
10	GPU プログラミング実践 (OpenACC)	10 月 13 日	プロメテック・ ソフトウェア(株)	オンライン開催
11	ONION-object 入門	9 月 20 日	株式会社 科学情報システムズ	オンライン開催
12	コンテナ入門	9 月 22 日	日本電気(株)	オンライン開催

2022 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

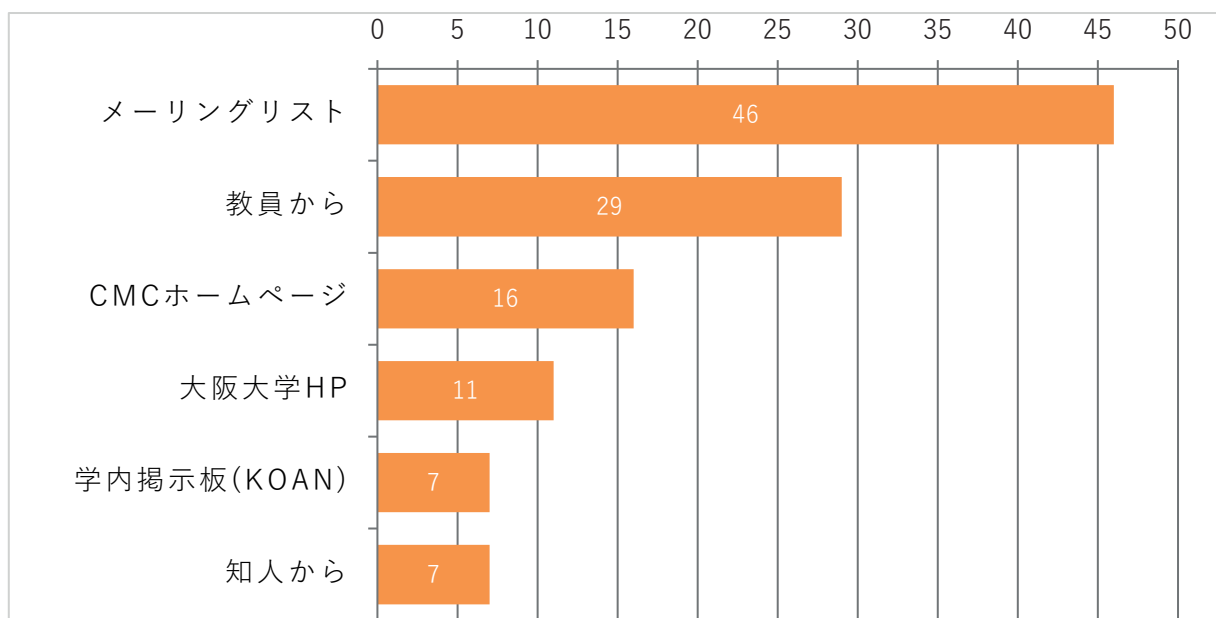
◆受講者数（すべてオンラインで開催）

講習会名	申込者数	受講者数
初めてのスパコン（5/23）	31	22
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎（5/30）	47	35
OpenMP 入門（6/1）	18	12
並列プログラミング入門(OpenMP/MPI)（6/16）	15	13
スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用（6/22）	8	6
ONION 活用講習会（6/23）	9	8
SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎（6/27）	8	4
汎用 CPU ノード 高速化技法の基礎（Intel コンパイラ）（7/22）	23	23
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎（8/29）	14	12
GPU プログラミング入門（OpenACC）（8/30）	13	9
初めてのスパコン（9/7）	27	26
SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎（9/22）	6	3
汎用 CPU ノード 高速化技法の基礎（Intel コンパイラ）（10/4）	2	0
並列プログラミング入門(OpenMP/MPI)（10/12）	7	2
スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用（10/19）	26	12
GPU プログラミング入門（OpenACC）（12/5）	13	9
GPU プログラミング実践（OpenACC）（12/8）	6	4
コンテナ入門（1/26）	16	10
ONION-object 入門（3/17）	5	2
合計	294	212

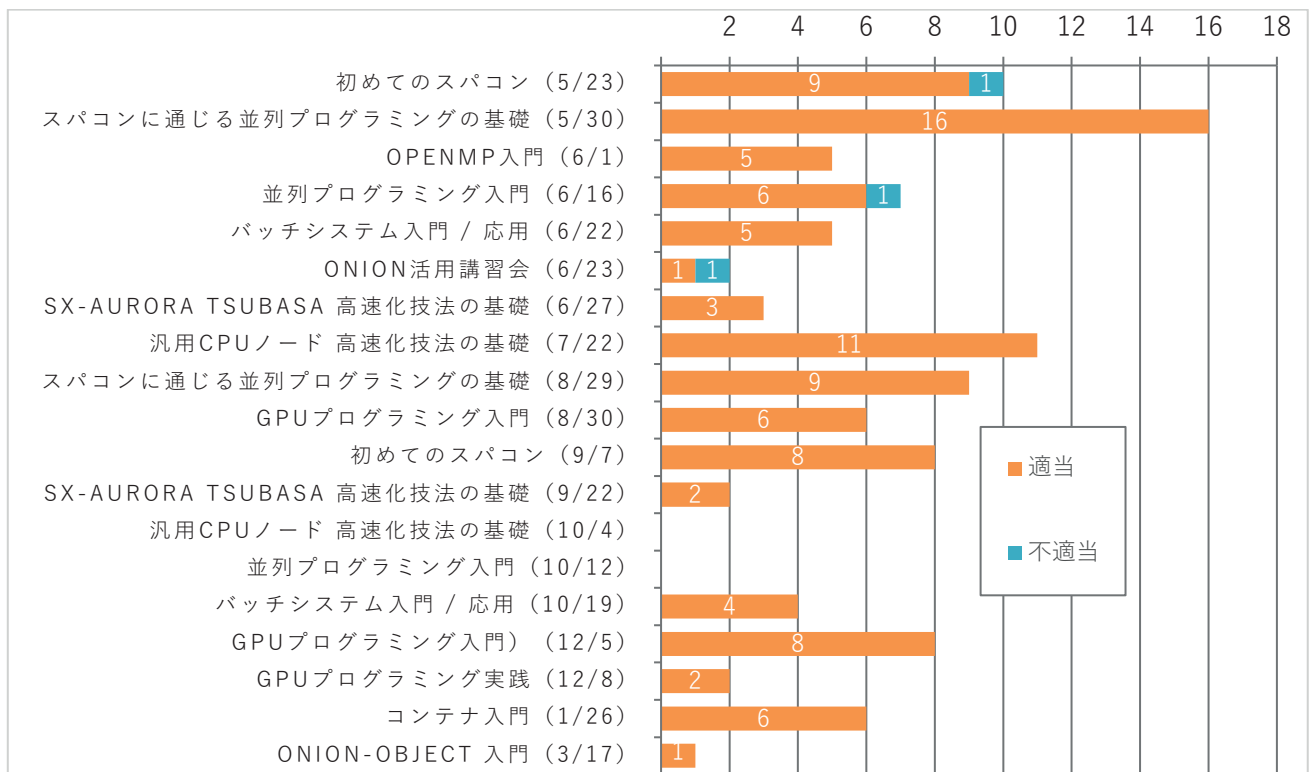
◆受講者の内訳



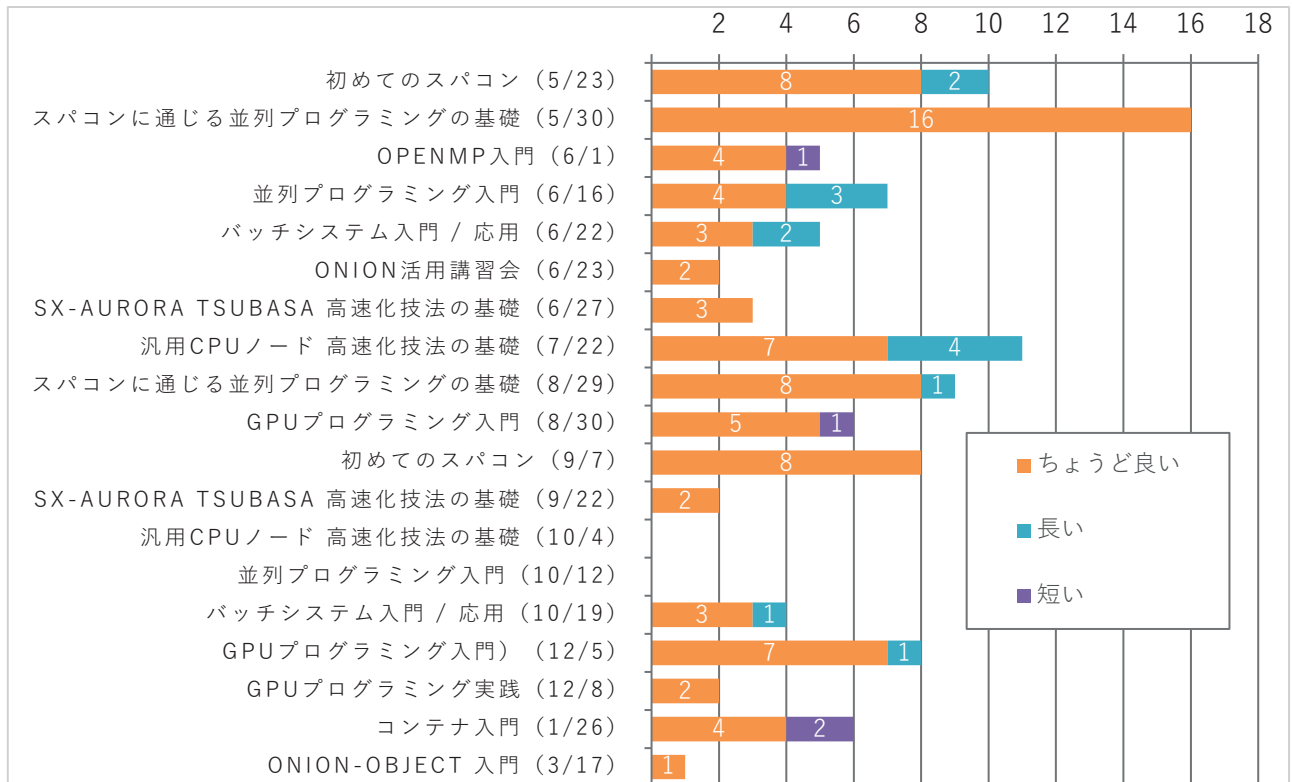
◆講習会についてどのようにお知りになりましたか。(複数回答可)



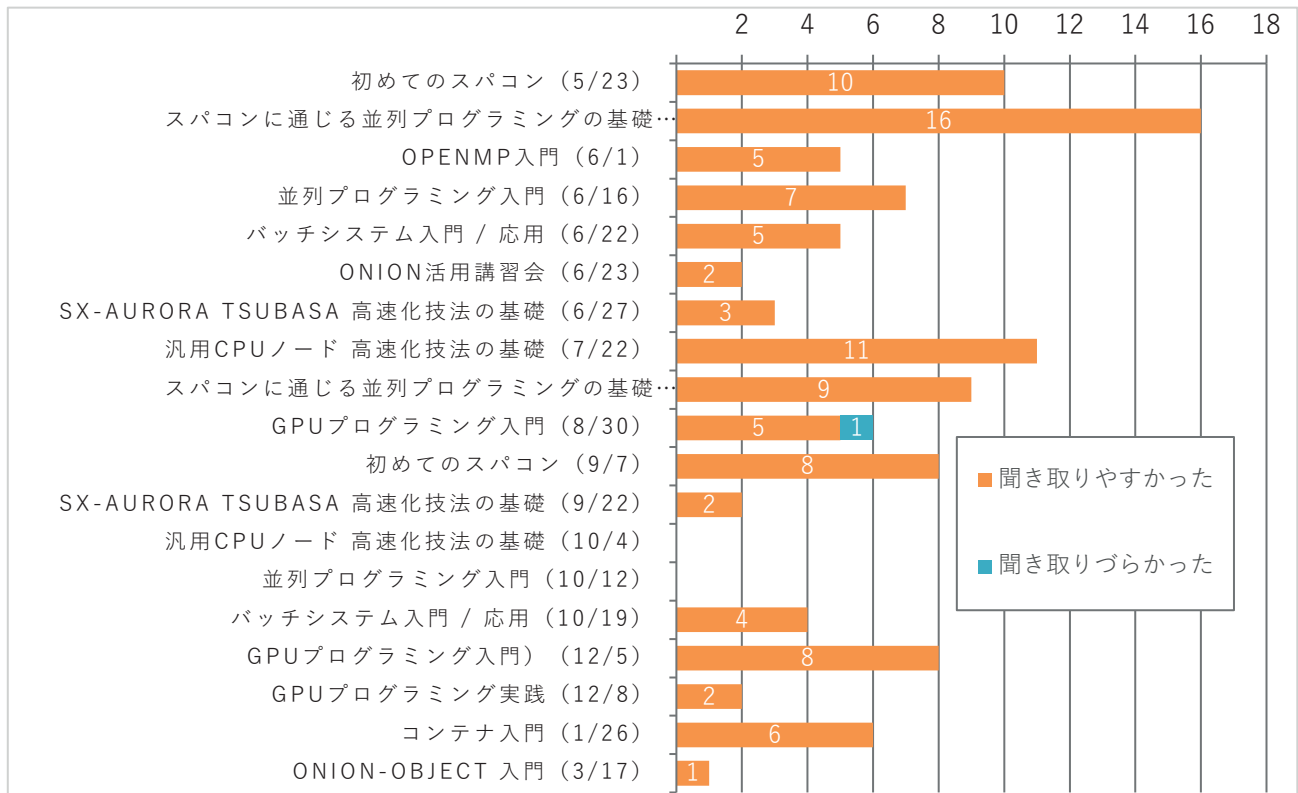
◆開催日は適当でしたか。



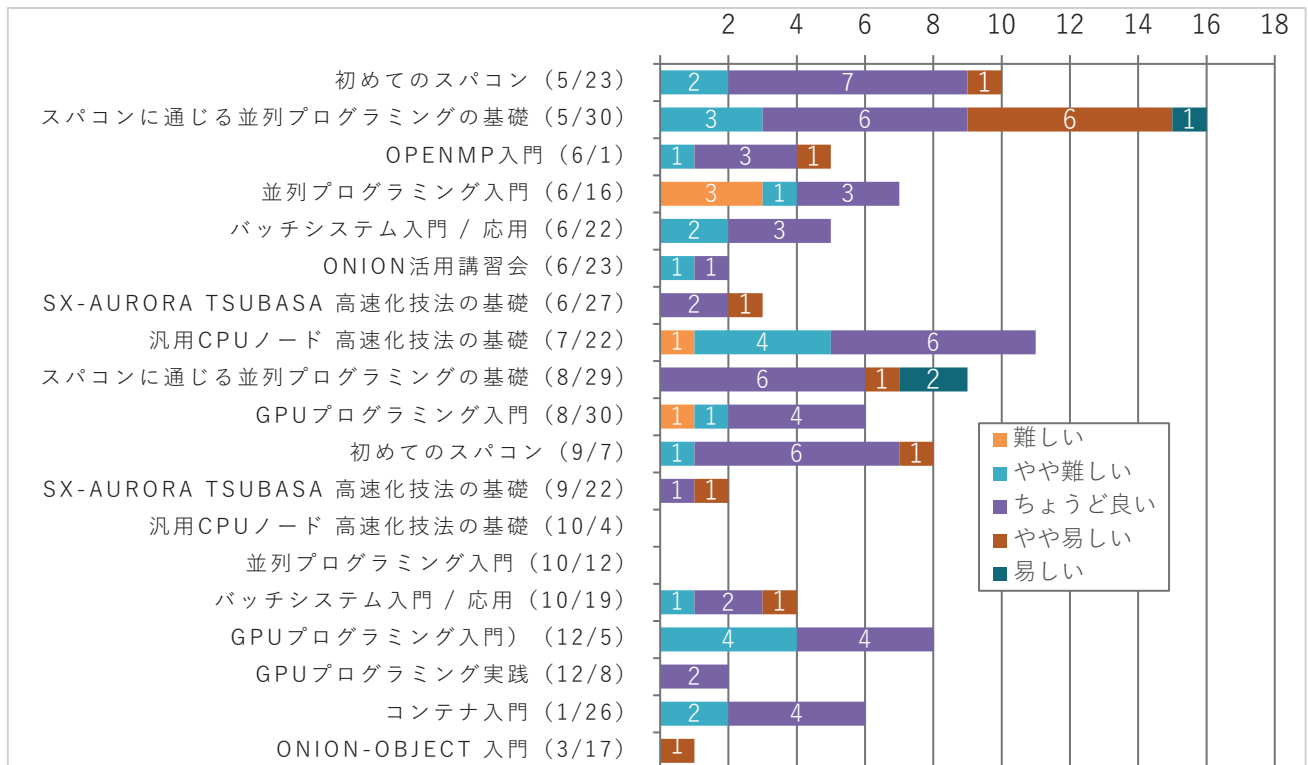
◆講習会の時間は適当でしたか。



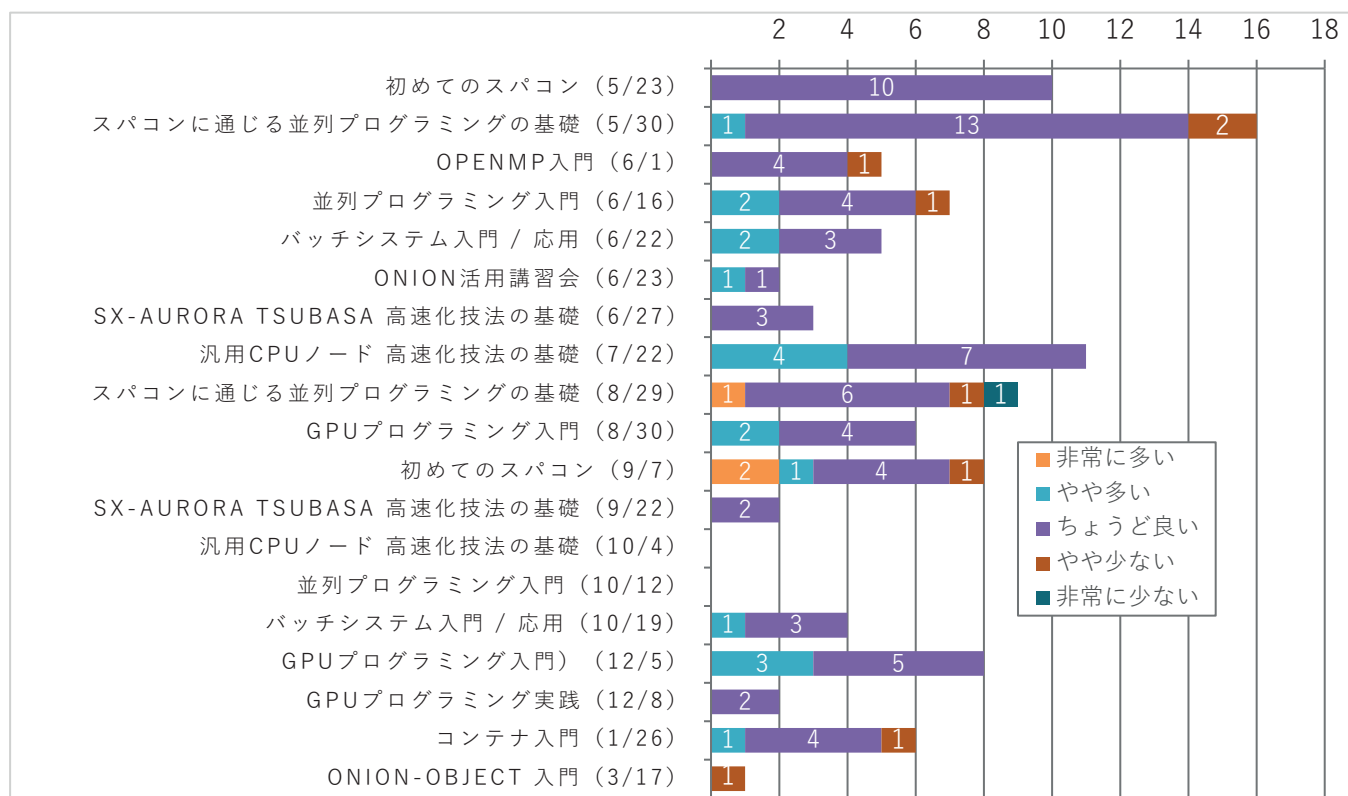
◆今回の講習会の音声はいいかでしたか。



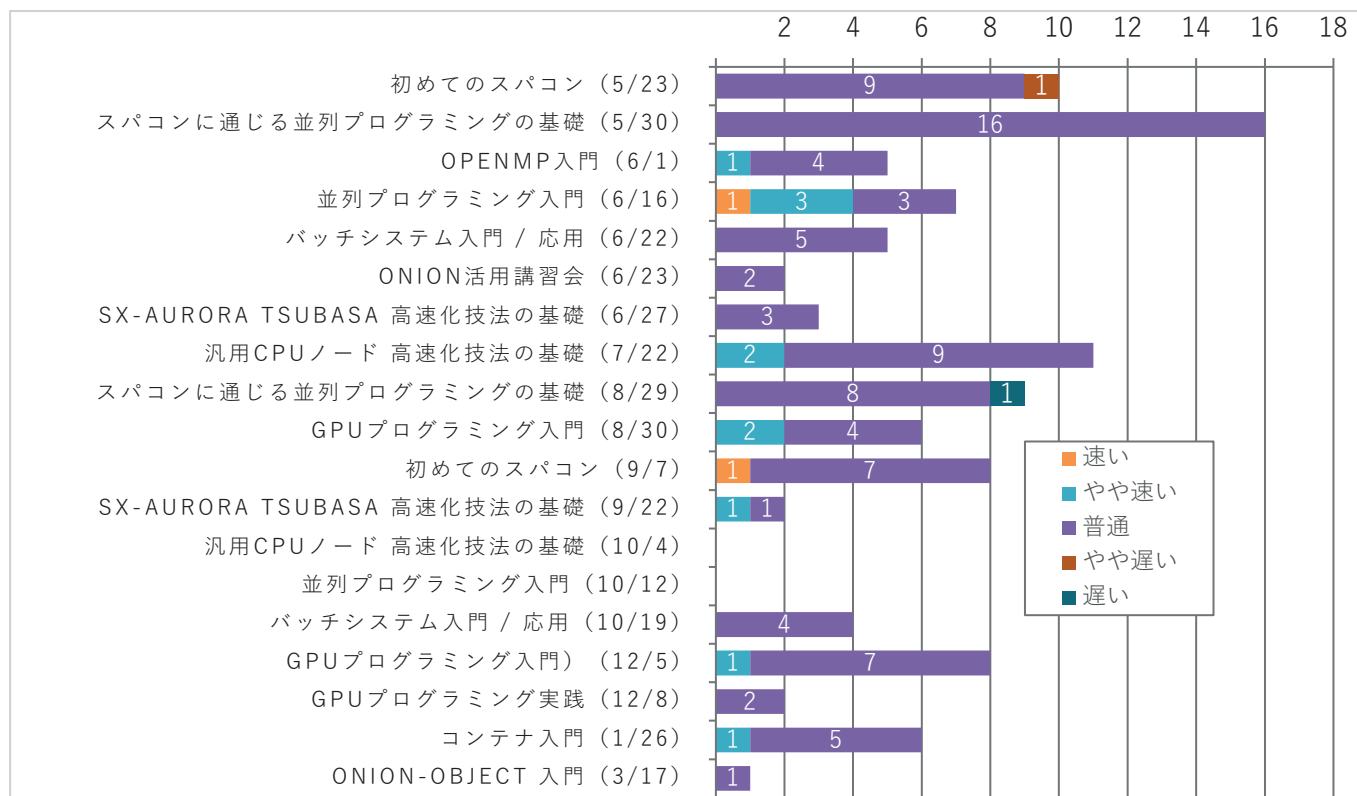
◆講習会の内容はどうでしたか。



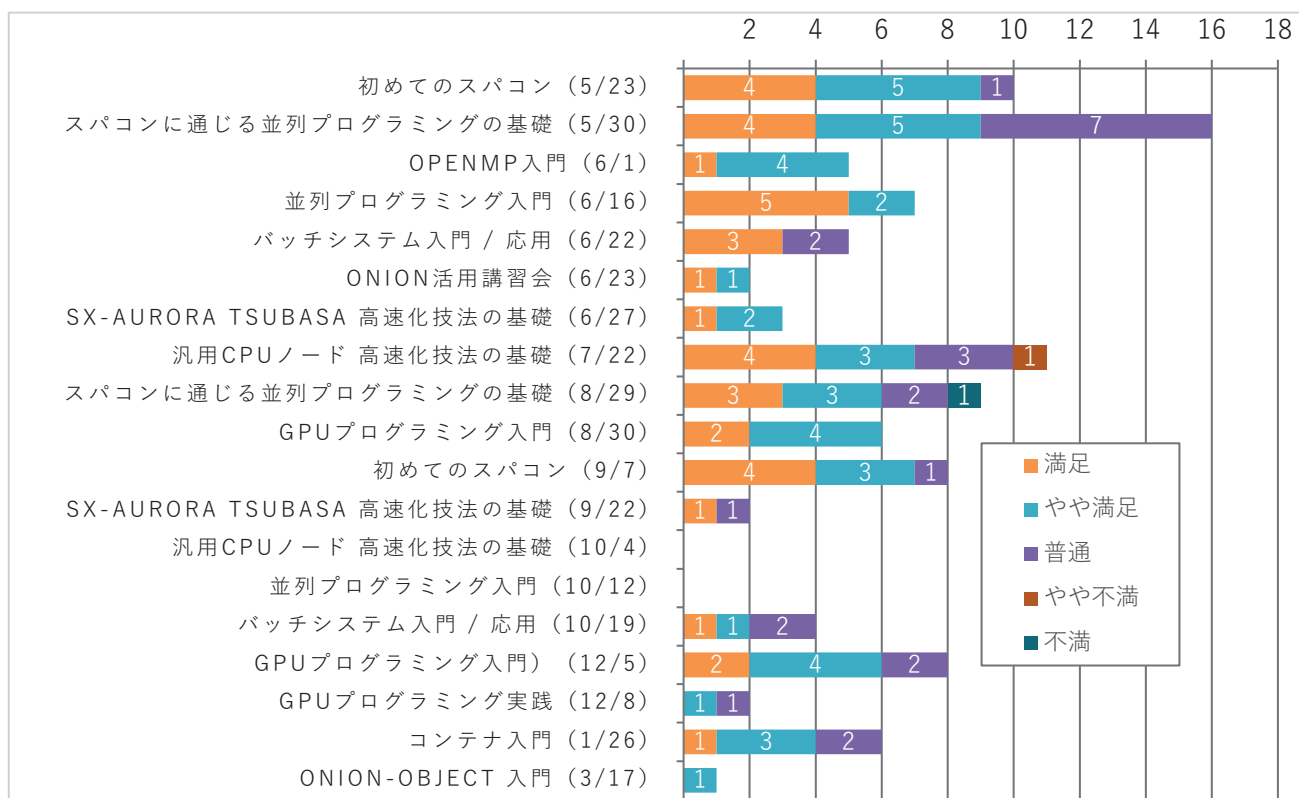
◆講習会で取り扱った内容量はどうでしたか。



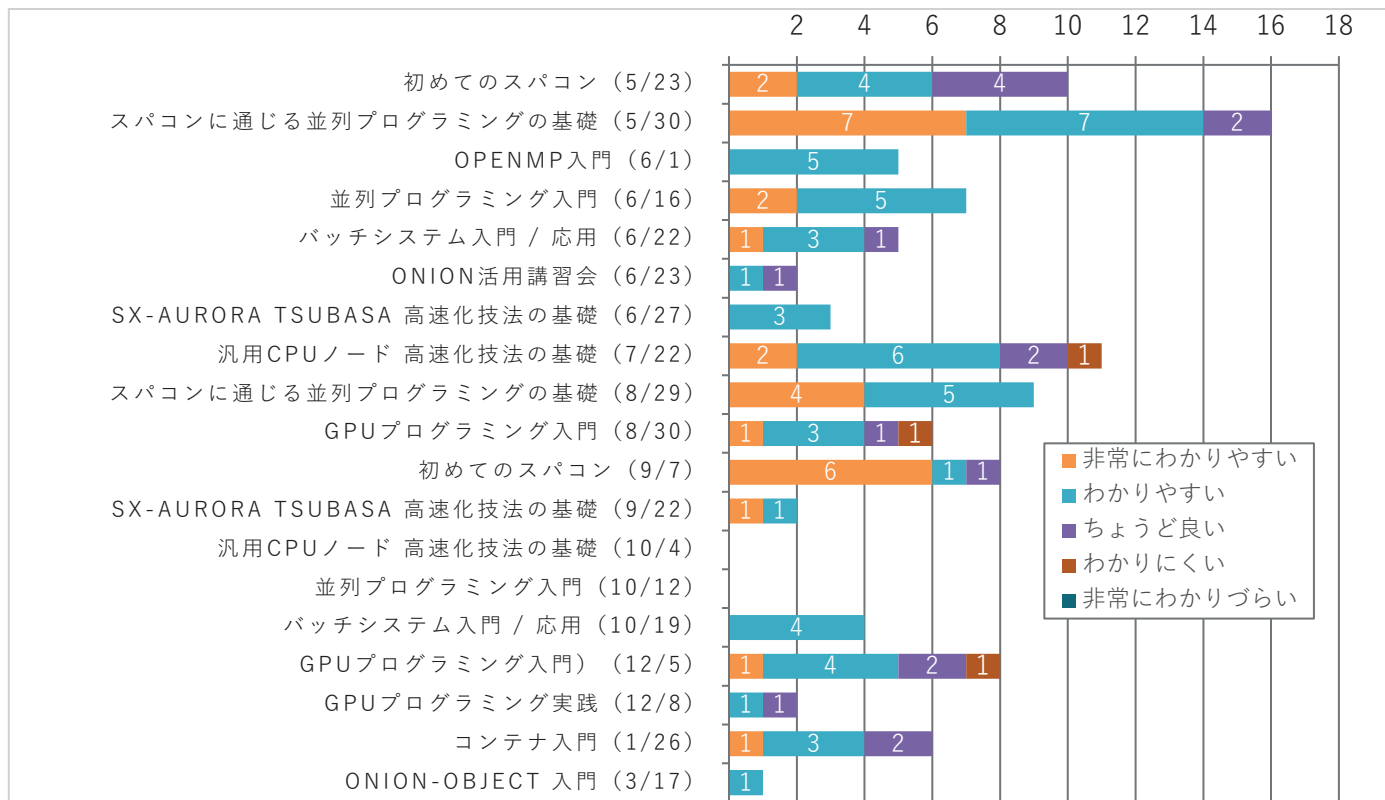
◆講師の進め方はどうでしたか。



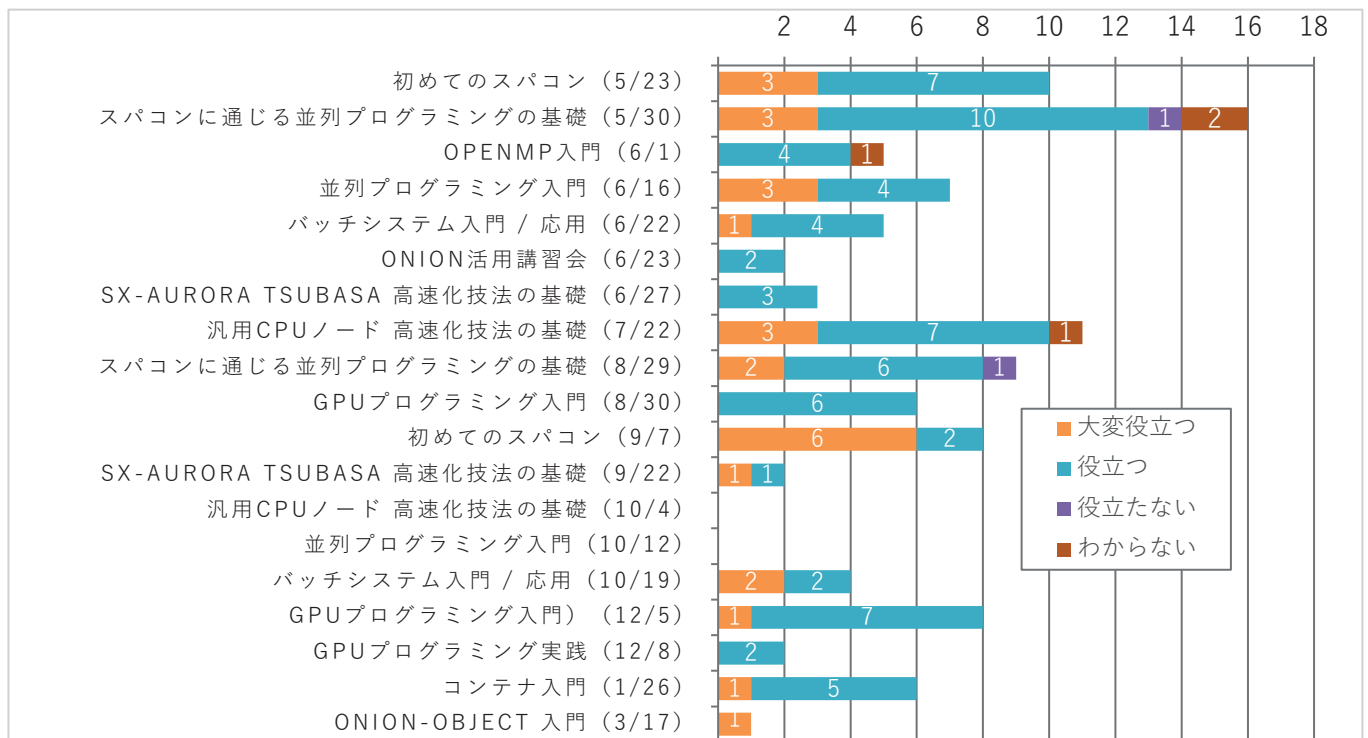
◆満足度は？



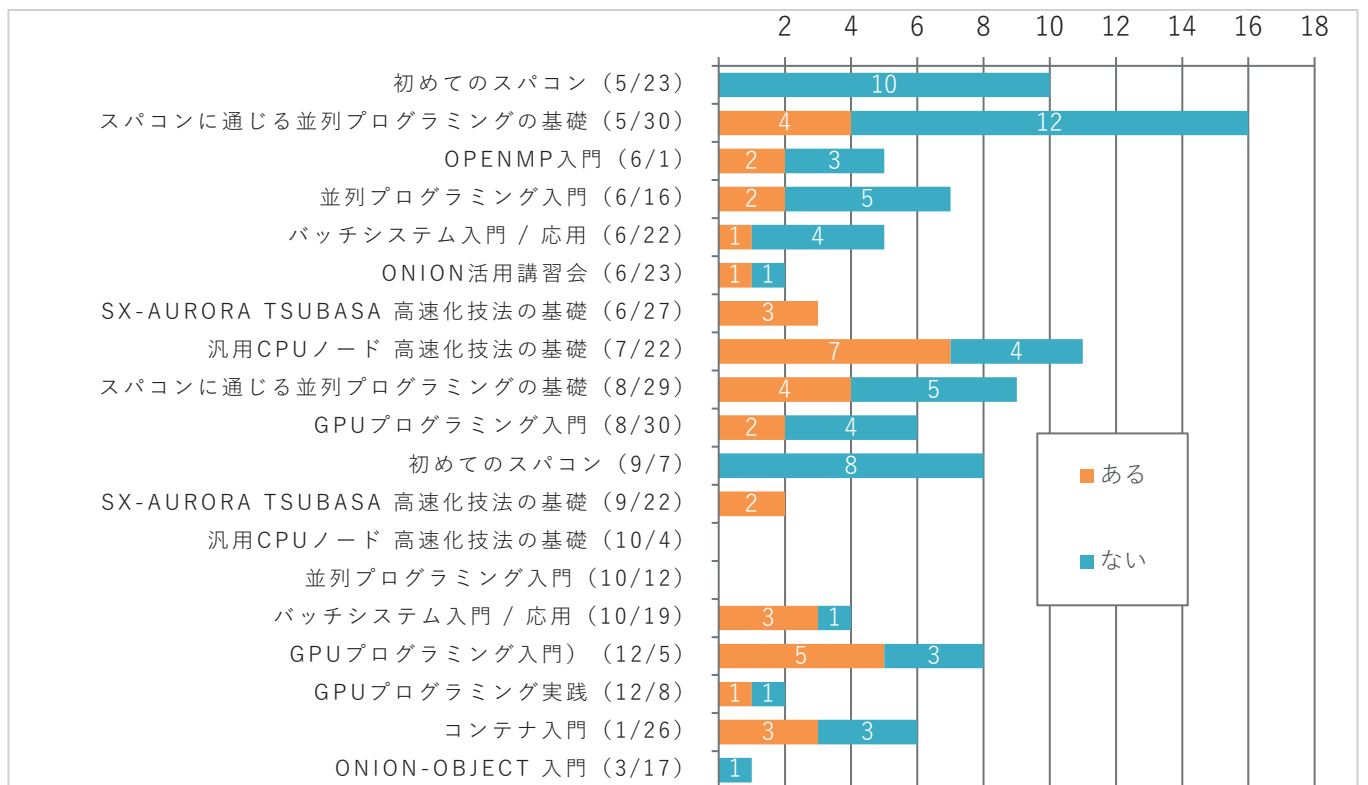
◆講習会の資料はどうでしたか。



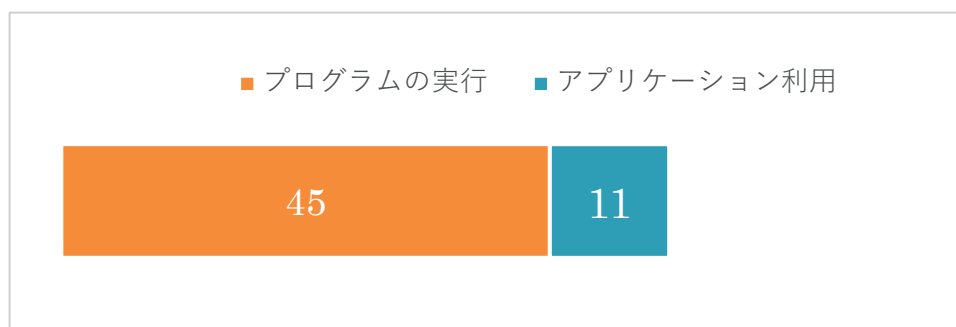
◆皆さんの今後の研究・業務・勉学に役立つと思いますか。



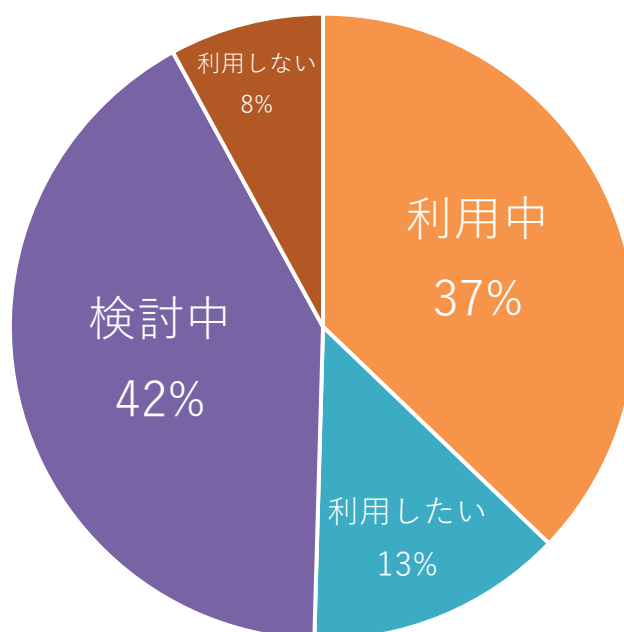
◆他の情報基盤センター等も含め、これまでにスーパーコンピュータを利用したことがありますか。



◆「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。



2023 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 2023 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	OCTOPUS	包接化合物系ソフトマテリアルの網羅的探索と材料設計への展開
一般課題	OCTOPUS	低摩擦材料・条件探索に向けたジルコニアおよび DLC におけるトライボ化学反応と摩擦特性の分子論的メカニズムの解明
一般課題	SQUID	可搬小型水素ガスタービン開発のための燃焼器シミュレーション
一般課題	SQUID	行列模型を用いたラージ N ゲージ理論の数値的研究
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	SQUID	大規模 QM/MM 分子動力学計算に基づく酵素反応機構の解明
一般課題	SQUID	タンパク質の機能改良の「省データ」化にむけた機械学習と分子シミュレーションの融合
一般課題	SQUID	原子核密度汎関数法によるエキゾチック原子核の集団振動・回転励起モードの系統的記述
一般課題	SQUID	すばる PFS 時代の宇宙論的流体シミュレーション
一般課題	SQUID	高圧水素噴流の浮き上がり火炎現象の大規模数値解析
「富岳」一般課題	SQUID	シュレーディンガー厳密解法による原子・分子の精密量子化学計算
若手課題	OCTOPUS	機械学習を導入した新規自由エネルギー計算手法の構築
若手課題	SQUID	船舶抵抗低減を目的とした高ウェーバー数の大型気泡群流れの直接数値解析
若手課題	SQUID	Direct numerical simulations of elastoviscoplastic jets
若手課題	SQUID	大規模多施設 CT データ及び読影所見文を用いた疾患検出モデル構築
若手課題	SQUID	アクションモデルにおけるドメインウォールの大規模数値シミュレーション
若手課題	SQUID	溶液成分調整によるポリマー表面へのペプチド吸着抑制
産業課題	SQUID	複数精神疾患の診断・治療に向けた 4D 脳機能画像 Deep Learning 解析

2023 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。

2023 年度の課題募集には合計 68 課題が採択されました。このうち以下の 15 課題が本センターの計算機資源を利用することになっています。

課題代表者	研究課題名
村田 忠彦 様 (関西大学)	合成人口プロジェクト：2020 年度国勢調査に基づく 合成人口データの合成
松崎 義孝 様 (海上・港湾・航空技術研究所)	水環境総合評価システムによる水環境評価のための 標準化プラットフォーム構築
森田 堯 様 (大阪大学 産業科学研究所)	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
萩田 克美 様 (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
埴 敏博 様 (東京大学)	次世代演算加速装置とそのファイル IO に関する研究
関口 宗男 様 (国士舘大学)	格子 QCD による複合スカラー粒子の質量生成機構の研究
Anas Santria 様 (大阪大学 理学研究科)	Investigation of intramolecular magnetic interaction in rare-earth-based molecular magnets
山口 雅也 様 (大阪大学 歯学研究科)	大規模比較ゲノム解析による病原細菌の進化と病態発症機構の解明
下川辺 隆史 様 (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
三宅 洋平 様 (神戸大学)	マルチスケール宇宙プラズマ連成シミュレーションの研究
下川辺 隆史 様 (東京大学)	時間発展する流体シミュレーションを予測する代理モデルの開発
高棹 真介 様 (大阪大学 理学研究科)	現実的な原始惑星系円盤のガス散逸シナリオ構築に向けた 多角的アプローチ

佐藤 正寛 様 (東京大学)	環境循環型社会の実現に向けたポリマーインフォマティクスの データ基盤構築
John Molina 様 (京都大学)	Machine Learning for Soft-Matter Flows
塩見 淳一郎 様 (東京大学)	非調和フォノンデータベースの構築とデータ駆動型熱機能材料開発

2022 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・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。2022 年度は通常の募集に加えて追加募集を行い、以下の 8 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
嶋川 肇 様 (東京大学 工学系研究科)	深層学習を用いたスーパーコンポジット電気絶縁材料の創成
眞弓 皓一 様 (東京大学 物性研究所)	ポリロタキサンにおける環状分子のスライドダイナミクス解析
岡林 希依 様 (大阪大学 工学研究科)	キャビテーション乱流の CFD データベースを用いたデータ駆動型キャビテーションモデルの開発に関する研究
甲斐 洋行 様 (東京理科大学)	表面濡れ性パターンを駆動力とするフラクタル開放型マイクロ流路における、液滴輸送・収集の構造機能相関の系統的理解

人工知能研究特設支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
佐藤 淳哉 様 (大阪大学 医学系研究科)	大規模胸部 CT データセット及び読影レポートを用いた Radiomics 解析
Harry Handoko Halim 様 (大阪大学 工学研究科)	The Elucidation of Non-equilibrium States of Heterogenous Catalysis by Data-driven Multiscale Simulation: A Case Study of Methanol Synthesis
谷口 隆晴 様 (神戸大学 システム情報学研究科)	深層学習による物理モデリング・シミュレーションフレームワークの展開
濱本 雄治 様 (大阪大学 工学研究科)	進化的アルゴリズムとガウス過程回帰

2023 年度 大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況

2023 年度も引き続き研究課題の公募を行い、以下の 22 課題を採択しました。2023 年度はこれまで特設枠となっていた人工知能研究支援枠を常設枠として設置しました。また、わが国の学術研究を担う次世代の研究者育成の観点から、本センター大規模計算機システムの利用資格を有する、一人又は比較的少数の学生が学位取得（修士、博士）を目標として行う研究課題を対象とする「世界と伍する学生育成特設枠」を設置しました。

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
湯川 龍 様 (大阪大学 工学研究科)	原子吸着に伴うトポロジカル絶縁体表面に於けるスピン構造転移の研究
高木 優 様 (大阪大学 生命機能研究科)	深層拡散生成モデルを用いたヒト脳活動からの動画再構成
Anas Santria 様 (大阪大学 理学研究科)	Exploring the ground and excited states structure of rare-earth-based molecular magnets
岡林 希依 様 (大阪大学 工学研究科)	データ駆動型キャビテーション乱流モデルの開発とデータ同化を用いた学習データセットの構築に関する研究
Tiwari Sandhya Premnath 様 (大阪大学 蛋白質研究所)	Uncovering the role of protein-protein interactions on allostery and stability in oligomeric assembly via molecular dynamics simulations

大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
金谷 和至 様 (筑波大学 宇宙史研究センター)	クォークが重い領域の QCD における臨界点探査
岩下 航 様 (大阪大学 基礎工学研究科)	マクロ系の摩擦則の包括的な解明
河口 真一 様 (大阪大学 生命機能研究科)	AI を用いたタンパク質間複合体予測から、機能未知遺伝子の機能を推察する
塩見 淳一郎 様 (東京大学 工学系研究科)	第一原理計算に基づくフォノン非調和物性データベースの構築
村上 匡且 様 (大阪大学 レーザー科学研究所)	相対論的電子渦流による極超高磁場生成と超コンパクト粒子加速器の理論的研究
Beatriz Andrea Choi Tan 様 (大阪大学 工学研究科)	Machine learning study of single-atom platinum supported on graphene nanostructures for oxygen reduction reaction catalysis
Enriquez John Isaac Guinto 様 (大阪大学 工学研究科)	Development of Graph Neural Network Interatomic Potential to Investigate Diamond Oxidation, Graphitization, and Wear

人工知能研究支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
松原 崇 様 (大阪大学 基礎工学研究科)	深層力学系による高効率シミュレーションの開発
金 鋼 様 (大阪大学 基礎工学研究科)	深層学習を活用したガラスの構造緩和を決定する特徴量を抽出する技術の開発
藤平 哲也 様 (大阪大学 基礎工学研究科)	酸化物系人工シナプス素子におけるドナー欠陥挙動の第一原理理論解析

世界と伍する学生育成特設枠 採択課題

代表者名	研究課題名
村上 賢 様 (大阪大学 蛋白質研究所)	ディープラーニング手法を用いた一細胞エンハンサー検出法の開発
後藤 頌太 様 (大阪大学 基礎工学研究科)	高分子のトポロジーに由来する特異な動的相関に関する理論・シミュレーション研究
安水 良明 様 (大阪大学 免疫学フロンティア研究センター)	BERT を用いた T 細胞受容体の機能解明
三宅 冬馬 様 (北海道大学)	超臨界翼におけるダブル遷音速ディップ発生メカニズムの解明：移動エントロピー法による流れ場の因果解析
南條 舜 様 (総合研究大学院大学 複合科学研究科)	データ駆動型高分子材料研究における統計的機械学習と分子シミュレーションの融合
Rizka Nur Fadilla 様 (大阪大学 工学研究科)	Multiscale Modeling of Phosphoramidate-based Antibody-drug Conjugates Hydrolysis in Cancer Treatment Case
ROJAS Kurt Irvin Medina 様 (大阪大学 工学研究科)	Theoretical design of catalytic reaction process for hydrogen storage using hydrogen boride sheets: a density functional theory study with machine learning global optimization algorithm

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/