

令和3(2021)年度 研究成果の発表実績 (学会、論文、その他啓発活動等)

<p>課題1</p>	<p><b>■著書出版</b> Principles of High-Performance Processor Design For High Performance Computing, Deep Neural Networks and Data Science, Junichoro Makino, Springer, 2021, Print ISBN: 978-3-030-76870-6 Electronic ISBN: 978-3-030-76871-3</p>
<p>課題2</p>	<p><b>■神戸大学との連携成果</b> S. Tominaka, I. Karimata, T. Matsuoka, M. Sakamoto, T. Nakajima, K. Ohara, T. Tachikawa, “Dynamic symmetry conversion in mixed-halide hybrid perovskite upon illumination”, ACS Energy Lett. <b>6</b>, 3858-3863 (2021). 10.1021/acsenerylett.1c01798 他2件</p> <p><b>■京都大学との連携成果</b> T. Nakajima, K. Hirao, B. Chan, “Higher-order transition state approximation”, J. Chem. Phys. <b>156</b>, 114112 (2022). 10.1063/5.0086173 他3件</p> <p><b>■大阪大学との連携成果</b> K. Miyagawa, M. Shoji, H. Isobe, T. Kawakami, T. Nakajima, K. Yamaguchi, “Relative energies among S3 intermediates in the photosystem II revealed by DLPNO coupled cluster and hybrid DFT calculations. Possible pathways of water insertion in the S2 to S3 transition”, Chem. Phys. Lett. <b>793</b>, 139439 (2022). 10.1016/j.cplett.2022.139439 他2件</p> <p><b>■華中科技大学との連携成果</b> H. Ban, T. Nakajima, Z. Liu, H. Yu, Q. Sun, L. Dai, Y. Shen, X. L. Zhang, J. Zhu, P. Chen, M. Wang, “Over 8% efficient CsSnI3-based mesoporous perovskite solar cells enabled by two-step thermal annealing and surface cationic coordination dual treatment”, J. Mat. Chem. A in press (2022). 10.1039/D1TA09811J 他1件</p> <p><b>■関西学院大学との連携成果</b> 江口大地, 川嶋英佑, 中嶋隆人, 玉井尚登, ”精密合成された金クラスターの超高速キャリアダイ ナミクスにおける配位子効果”, 日本化学会第102春季年会, 2022年3月23-26日. 他1件</p> <p><b>■その他 (*県市 COE が謝辞に入っている成果のみ)</b> 中嶋隆人, ”「富岳」を活用した革新的光エネルギー変換材料の実現”, PCoMS シンポジウム &amp; 計算 物質科学スーパーコンピュータ共用事業報告会, オンライン, 2022年2月15日. 他3件</p>
<p>課題3</p>	<p><b>■論文発表</b> Yamanoi, K., Oishi, S., Kawaike, K., Nakagawa, H., (2021), Predictive simulation of concurrent debris flows: How slope failure locations affect predicted damage, Journal of Flood Risk Management, doi.org/10.1111/jfr3.1277618. 他9件</p> <p><b>■学会発表</b> Yamanoi, K., Oishi, S., Kawaike, K., (2021), Numerical Simulation for Evaluating the Effect of Source Locations in Concurrent Debris-flow Disaster, AOGS Annual Meeting. 他14件</p>

課題 3	<p><b>■その他出版物</b>  Takayabu, I., R. Rasmussen, E. Nakakita, A. Prein, H. Kawase, S.-I. Watanabe, S. A. Adachi, T. Takemi, K. Yamaguchi, Y. Osakada, Y.-H. Wu, 2021: Convection-Permitting Models for Climate Research, BAMS, doi:10.1175/BAMS-D-21-0043.1 (Accepted)</p> <p style="text-align: right;">他 2 件</p>
課題 4	<p><b>【論文】</b> (課題参加者に下線)  F. Lange, S. Ejima, J. Fujimoto, <u>T. Shirakawa</u>, H. Fehske, <u>S. Yunoki</u>, and S. Maekawa, “Generation of current vortex by spin current in Rashba systems”, Phys. Rev. Lett. <b>126</b>, 157202/1-6 (2021).</p> <p style="text-align: right;">他 23 件</p> <p><b>【記事・総説・解説・論説等 (商業誌、新聞、ウェブメディア)】</b> (課題参加者に下線)  西野友年, 「テンソルネットワークの基礎と応用－統計物理・量子情報・機械学習」(サイエンス社) (2021).</p> <p style="text-align: right;">他 3 件</p> <p><b>【講演・口頭発表など】</b> (課題参加者に下線)  中村宜文, 講義 “Computational fundamental physics I・2”, 神戸大学大学院システム情報学研究科・大規模シミュレーション総論 II, 2021 年 5 月 6・13 日, オンライン.</p> <p style="text-align: right;">他 27 件</p>
課題 5	<p><b>■Publications 2021</b></p> <p><b>Accepted</b>  K. Nakata, N. Miyazaki, H. Yamaguchi, M. Hirose, T. Kashiwagi, N. H. V. Kutumbarao, O. Miyashita, F. Tama, H. Miyano, T. Mizukoshi, and K. Iwasaki. <b>High-resolution structure of phosphoketolase from Bifidobacterium longum determined by cryo-EM single-particle analysis.</b> <i>J. Struct. Biol.</i></p> <p style="text-align: right;">他 1 件</p> <p><b>Published</b>  M. Kuzuya, H. Hirano, K. Hayashida, M. Watanabe, K. Kobayashi, T. Terada, Md. I. Mahmood, F. Tama, K. Tani, Y. Fujiyoshi and A. Oshima. <b>Structures of human pannexin-1 in nanodiscs reveal gating mediated by dynamic movement of the N-terminus and phospholipids</b> <i>Science Signaling</i> <b>2022</b></p> <p style="text-align: right;">他 5 件</p> <p><b>■Presentations</b>  Biophysics at the Dawn of Exascale Computers, Hamburg Germany May 24 -28, 2021 (invited talk, cancelled)</p> <p style="text-align: right;">他 9 件</p> <p><b>■Lectures</b>  Intensive Lecture [Life Science Special Lecture] Aug 8-9 (Hyogo University)</p> <p style="text-align: right;">他 1 件</p>
課題 6	<p>Artificial Intelligence in Medicine. 1-9, 2021</p> <p style="text-align: right;">他 11 件</p>
課題 7	<p><b>■原著論文</b>  Takeshi Terao, Katsuhisa Ozaki, Takeshi Ogita, Toshiyuki Imamura, Verified numerical computation for eigenvalues of areal symmetric matrix without directed rounding, Japan Society for Simulation Technology</p> <p style="text-align: right;">他 2 件</p>

課題 7	<p><b>■査読付き国際会議</b>  Nakajima K., Ogita T., Masatoshi K., Efficient Parallel Multigrid Methods on Manycore Clusters with Double/Single Precision Computing, IEEE Proceedings of iWAPT 2021 in conjunction with IPDPS 2021, May 2021  他 8 件</p> <p><b>■招待講演</b>  Nakajima K., Iwashita T., Yashiro H., Shimokawabe T., Nagao H., Matsuba H., Ogita T., Katagiri T., Wisteria/BDEC-01 &amp; h3-Open-BDEC: Innovative Scientific Computing in the Exascale Era, ARM SVE for HPC, 18th ACM International Conference on Computing Frontiers (CF' 21), May 2021  他 3 件</p> <p><b>■口頭発表等</b>  中島研吾, 塙敏博, 下川辺隆史, 伊田明弘, 芝隼人, 三木洋平, 星野哲也, 有間英志, 河合直聡, 坂本龍一, 近藤正章, 岩下武史, 八代尚, 長尾大道, 松葉浩也, 荻田武史, 片桐孝洋, 古村孝志, 鶴岡弘, 市村強, 藤田航平, 「計算・データ・学習」融合スーパーコンピュータシステム「Wisteria/BDEC- 01」の概要, 情報処理学会研究報告 (2021-HPC-179-1), 2021  他 12 件</p>
課題 8	<p>SACLA HPC - HPCI 共用ストレージへのデータ転送サービスについて,  <a href="http://xfel.riken.jp/users/bml09-1.html">http://xfel.riken.jp/users/bml09-1.html</a> (2021 年 5 月 14 日)  他 14 件</p>
課題 9	<p>楳本大悟・伊藤伸泰「都市交通シミュレーションの幂分布と道路ネットワークの階層性」Special Issue of Institute of Electric Engineers of Japan Journal C vol.141 No.12 p.1388-1396  他 4 件</p>