

■研究成果の発表実績(学会、論文、その他啓発活動等/2021～2023年度)

[2023年度]

課題名	研究成果の発表実績
課題2	<p>神戸大学との連携成果</p> <p>1. 窪田樹, 中嶋隆人, 枝和男, 大塚利行, "拡張型ポリオキソタングステートの生成経路についての研究", 日本コンピュータ化学会 2023 年春季年会, 東京, 2023 年 6 月 1 日.</p> <p>関西学院大学との連携成果</p> <p>2. 江口大地, 川嶋英佑, 中嶋隆人, 玉井尚登, "有機配位子保護金クラスターの励起状態とその緩和過程の調査", 第 10 回「富岳」を中核とする HPCI システム利用研究課題 成果報告会, 東京, 2023 年 10 月 26 日.</p> <p>大阪大学との連携成果</p> <p>3. K. Yamaguchi, K. Miyagawa, M. Shoji, T. Kawakami, H. Isobe, S. Yamanaka, T. Nakajima, "Theoretical elucidation of the structure, bonding, and reactivity of the CaMn_4O_x clusters in the whole Kok cycle for water oxidation embedded in the oxygen evolving center of photosystem II. New molecular and quantum insights into the mechanism of the O-O bond formation", <i>Photosynth. Res.</i> (2023). 10.1007/s11120-023-01053-7</p> <p>4. 山口兆, 庄司光男, 宮川晃一, 磯部寛, 川上貴資, 中嶋隆人, "化学反応における対称性の破れの理論(13): PSII の酸素発生サイトの分子システム構造と水挿入およびプロトン放出経路再訪", 豊田研究報告, 76, 87-95 (2023).</p> <p>5. E. Watanabe, T. Nakajima, A. Shinohara, Y. Kasamatsu, "Hydration structure of IO_2No_2^+: A DFT-MD study", submitted to <i>J. Phys. Chem.</i></p> <p>京都大学との連携成果</p> <p>6. J.-Q. Yin, T. Nakajima, S. Sakaki, "Catalysis of nickel-based gold single-atom alloy for NO-CO reaction: Theoretical insight into role of gold atom in enhancing catalytic activity and reason", submitted to <i>J. Catal.</i></p> <p>7. K. Hirao, T. Nakajima, B. Chan, H. Lee, "The core ionization energies calculated by delta SCF and Slater's transition state theory", <i>J. Chem. Phys.</i> 158, 064112 (2023). 10.1063/5.0140032</p> <p>8. K. Hirao, T. Nakajima, B. Chan, "Core-level 2s and 2p binding energies of third-period elements (P, S, and Cl) calculated by Hartree-Fock and Kohn-Sham SCF theory", <i>J. Phys. Chem. A</i>, 127, 7954-7963 (2023). 10.1021/acs.jpca.3c04783</p> <p>9. K. Hirao, T. Nakajima, B. Chan, H. Lee, "The verification of delta SCF and Slater's transition state theory for the calculation of core ionization energy", <i>J. Comput. Chem.</i> 45, 183-192 (2024). 10.1002/jcc.27228</p> <p>長崎大学との連携成果</p> <p>10. B. Chan, W. Dawson, T. Nakajima, "Sorting drug conformers in enzyme active sites: The XTB way", to be submitted.</p> <p>Jagiellonian 大学との連携成果</p> <p>11. M. Gurba, T. Nakajima, M. J. Wójcik, M. Z. Brela, "Elastic properties of crystalline Nylon-6, PET, and Kevlar: A theoretical approach", submitted to <i>Chem. Phys. Lett.</i></p> <p>12. M. J. Wójcik, M. Brela, Ł. Boda, M. Boczar, T. Nakajima, "Dynamic interactions shaping vibrational spectra of hydrogen-bonded systems", in <i>Spectroscopy and Computation of Hydrogen-Bonded Systems</i>, edited by M. J. Wójcik, Y. Ozaki (Willey), 39-</p>

	<p>66 (2023). その他 (県市 COE が謝辞に入っている成果のみ) *13. S. S. Khire, T. Nakajima, S. R. Gadre, "REALgo: Rapid and Efficient Algorithm for estimating MP2/CCSD energy gradients for large molecular clusters", J. Chem. Phys. 159, 184109 (2023). 10.1063/5.0174726</p>
<p>課題 3</p>	<p>●誌上发表</p> <ul style="list-style-type: none"> - Kawai, Y., Tomita, H. 2023: Numerical Accuracy Necessary for Large-Eddy Simulation of Planetary Boundary Layer Turbulence using Discontinuous Galerkin Method, Monthly Weather Review., 151, 6. - Okazaki, M., Oishi, S., Awata, Y., Yanase, T., & Takemi, T. (2023). An analytical representation of raindrop size distribution in a mixed convective and stratiform precipitating system as revealed by field observations. Atmospheric Science Letters, e1155. https://doi.org/10.1002/asl.1155 - Ng, P. Y., Tan, K. W., Oishi, S., & Huang, Y. F. (2023). Statistical downscaled local climate model for future rainfall changes analysis: A case study of hyogo prefecture, Japan. Global NEST Journal, 25(5). <p>●学会発表</p> <ul style="list-style-type: none"> - 足立幸穂, 佐賀真理子, 大石 哲, 富田浩文, 2023: SCALE を用いた神戸市の夏季熱環境評価. 2023 年日本気象学会春季大会, online (poster) - Adachi, S. A., Do Ngoc Khanh, Seiya Nishizawa, Alvin Christopher Galang Varquez, Manabu Kanda, Hirofumi Tomita, 2023: Urban Module and Dataset of SCALE for an Urban Climate Simulation. 11th International Conference on Urban Climate, Sydney, Australia, Sep.1, 2023. - 足立幸穂, 西澤誠也, 大石 哲, 富田浩文, 2023: SCALE を用いた神戸市の夏季熱環境評価 – その 2 : 神戸市沿岸域における局地循環-. 2023 年日本気象学会秋季大会, 仙台, 2023 年 10 月 26 日. - Kawai, Y., Tomita, H., 2024: Validation of a Global Nonhydrostatic Atmospheric Dynamical Core Using Discontinuous Galerkin Method, 104th AMS Annual Meeting, 30th January, 2024. - 河合佑太, 富田浩文, 2023: 不連続ガラキン法を用いた全球大気力学コアの妥当性の検証, 日本気象学会 2023 年度秋季大会, 2023 年 10 月 24 日 - Kawai, Y., Tomita, H., 2023: Development of a global atmospheric nonhydrostatic dynamical core using discontinuous Galerkin method, The 6th International Workshop on Nonhydrostatic Models (NHM-WS 2023), 31th August - 2nd September, 2023. - 河合佑太, 富田浩文, 2023: 不連続ガラキン法を用いた非静力学大気力学コアの開発: 地形の考慮, 日本地球惑星科学連合 2023 年大会, 2023 年 5 月 26 日 - 河合佑太, 富田浩文, 2023: 地形を考慮した不連続ガラキン法に基づく大気力学コアの開発, 日本気象学会 2023 年度春季大会, 2023 年 5 月 18 日 - Yamanoi, K., Shikakura, K., Kawaike, K., & Oishi, S. (2023) Probabilistic Prediction Method of Erosion Volume and Deposition Area from Rainfall Observation Data, 8th International Conference on Debris, Flow Hazard Mitigation (DFHM8), Torino. - Yamanoi, K., Oishi, S., Koshiba, T., & Kawaike, K. (2023) Optimization and probabilistic estimation of physical parameters in debris-flow simulation, 40th IAHR World Congress, Vienna. <p>●研究会での発表</p>

	<ul style="list-style-type: none"> - 足立幸穂, 2023: 神戸市における暑熱対策のための領域気候ダウンスケーリング研究の紹介. 気候変動適応の研究会, December 21, 2023. - 足立幸穂, 富田浩文, 2023: 適応策研究のための将来地域気候予測研究の紹介. 第2回キャッサバワークショップ, January 31, 2024. - Tung-Cheng Ho, 2023: Prediction of the Meteorological Tsunami in the Caribbean Sea, OIST-RIKEN Joint Workshop on Prediction Science, 2023 <p>●講演 足立幸穂, 2023: シミュレーションで未来を予測するとは?. 神戸みらい博士育成道場, August 18, 2023.</p>
課題 4	<p>【論文】</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. R.-Y. Sun, T. Shirakawa, and S. Yunoki, "Efficient variational quantum circuit structure for correlated topological phases", Phys. Rev. B 108, 075127 (2023). 2. R.-Y. Sun, T. Shirakawa, and S. Yunoki, "Improved real-space parallelizable matrix-product state compression and its application to unitary quantum dynamics simulation", arXiv:2312.02667 (2023). 3. T. Tohyama, K. Shinjo, S. Sota, S. Yunoki, "Anomalous suppression of photo-induced in-gap weight in the optical conductivity of a two-leg Hubbard ladder", Physical Review B 108, 035113 (2023). 4. K. Shinjo, S. Sota, S. Yunoki, T. Tohyama, "Spin loop-current textures in Hubbard models", Physical Review B 108, 195118 (2023). 5. R. Watanabe, K. Fujii, and H. Ueda, "Entangled embedding variational quantum eigensolver with tensor network ansatz", arXiv:2305.06536 (2023). 6. K. Miyamoto and H. Ueda, "Extracting a function encoded in amplitudes of a quantum state by tensor network and orthogonal function expansion", Quantum Inf. Process. 22, 239 (2023). 7. T. Ichikawa, et al., T. Sugimoto, et al., H. Ueda, R. Watanabe, Y. Yoshida, and K. Fujii, "A comprehensive survey on quantum computer usage: How many qubits are employed for what purposes?", arXiv: 2307.16130 (2023). 8. S. Miyakoshi, T. Sugimoto, T. Shirakawa, S. Yunoki, and H. Ueda, "Diamond-shaped quantum circuit for real-time quantum dynamics in one dimension", arXiv: 2311.05900 (2023). 9. T. Sugimoto, "Quantum-circuit algorithms for many-body topological invariant and Majorana zero mode", arXiv: 2304.13408 (2023). 10. T. Sakai, K. Okamoto, K. Okunishi, M. Hashimoto, T. Houda, R. Furuchi, and H. Nakano, "Translational symmetry broken magnetization plateau of the $S=1$ antiferromagnetic Heisenberg chain with competing anisotropies", Phys. Rev. B 108, 174435 (2023). 11. H. Yamaguchi, H. Takashashi, T. Kawakami, K. Okamoto, T. Sakai, T. Yajima, and Y. Iwasaki, "Spin-Peierls transition to a Haldane phase", Phys. Rev. B 107, L161111 (2023). 12. T. Sakai, R. Furuchi, H. Nakano, and K. Okamoto, "Quantum spin nematic liquid in the low-dimensional anisotropic magnets $-S=1/2$ delta spin chain with the anisotropic ferromagnetic interaction in magnetic field-", SciPost Physics Proceedings 11, 011 (2023). 13. T. Sakai, R. Furuchi, and H. Nakano, "Quantum Phase Transition of the Shastry-Sutherland System and ESR Forbidden Transition", JPS Conference Proceedings

38, 011156 (2023).

14. H. Nakano, and T. Sakai, "Large-Scale Numerical-Diagonalization Study of the Shastry-Sutherland Model", JPS Conference Proceedings 38, 011166 (2023).
15. R. Furuch, H. Nakano, and T. Sakai, "Numerical Study of $S=1/2$ Heisenberg Antiferromagnet on the Floret Pentagonal Lattice", JPS Conference Proceedings 38, 011167 (2023).
16. R. Nakanishi, T. Yamada, R. Furuchi, H. Nakano, H. Kaneyasu, K. Okamoto, T. Tonegawa, and T. Sakai, "Field-Induced Spin Nematic Liquid of the $S = 1/2$ Bond-Alternating Chain with the Anisotropy", JPS Conference Proceedings 38, 011156 (2023).
17. T. Yamada, R. Nakanishi, R. Furuchi, H. Nakano, H. Kaneyasu, K. Okamoto, T. Tonegawa, and T. Sakai, "Translational Symmetry Broken Magnetization Plateau of the $S=2$ Antiferromagnetic Chain with Anisotropies", JPS Conference Proceedings 38, 011163 (2023).
18. T. Tonegawa, K. Okamoto, K. Nomura, and T. Sakai, "Nematic Tomonaga-Luttinger Liquid Phase in an $S = 1/2$ Ferromagnetic-Antiferromagnetic Bond-Alternating Chain", JPS Conference Proceedings 38, 011154 (2023).
19. M. Hashimoto, T. Houda, R. Furuchi, H. Nakano, K. Okamoto, and T. Sakai, "Field-Induced Spin Liquids in the $S=1/2$ Distorted Diamond Spin Chain with Anisotropic Ferromagnetic Interaction", New Physics: Sae Mulli. 73, 1127 (2023).
20. T. Sakai, M. Hashimoto, T. Houda, R. Furuchi, H. Nakano, K. Okamoto, and K. Okunishi, "Translational Symmetry Broken Magnetization Plateau of the Spin- $1/2$ Ferromagnetic and Antiferromagnetic Bond-Alternating Spin Chain with Competing Anisotropies", New Physics: Sae Mulli. 73, 1131 (2023).
21. F. Verstraete, T. Nishino, U. Schollwoeck, M.C. Banuuls, G.K. Chan, M.E. Stoudenmire, "Density matrix renormalization group, 30 years on", Nature Reviews Physics vol. 5, 273-276 (2023).
22. 西野友年, 「テンソルネットワーク入門」(講談社サイエンティフィック 2023) ISBN: 978-4-06-531653-5

【記事・総説・解説・論説等(商業誌、新聞、ウェブメディア)】

該当なし

【講演・口頭発表など】

1. 白川知功, 「量子計算機シミュレーション」, 富岳成果創出加速プログラム・キックオフミーティング, 2023年6月20日, 横浜.
2. 白川知功, 「テンソルネットワーク法を用いた量子計算のシミュレーション」, 第19回 High-Performance Computing Physics (HPC-Phys)勉強会, 2023年8月31日, 和光.
3. R.-Y. Sun, T. Shirakawa, and S. Yunoki, "Scalable quantum simulation for topological phases on NISQ devices", IEEE Quantum Week 2023, 2023/9/17-22, Bellevue, USA. [Poster]
4. T. Shirakawa and S. Yunoki, "Approximate state preparation using tensor network optimization techniques", IEEE Quantum Week 2023, 2023/9/17-22, Bellevue, USA. [Poster]
5. T. Shirakawa, "Quantum Monte Carlo for Quantum Many-Body Systems", 孫正義育英財団ウィンタープログラム 2023, 2023/12/11, 神戸.
6. S. Yunoki, "Quantum simulation for quantum many-body systems: variational quantum algorithms and beyond", CECAM Workshop: Quantum Algorithms for Chemistry and Materials Science Simulation: Bridging the Gap Between Classical and Quantum Approaches,

- 2023/12/12-14, Lausanne, Switzerland [invited].
7. T. Shirakawa, H. Ueda, and S. Yunoki, “Quantum-classical data conversion using tensor network optimization techniques”, CECAM Workshop: Quantum Algorithms for Chemistry and Material Science Simulation: Bridging the Gap Between Classical and Quantum Approach, 2023/12/12-14, Lausanne, Switzerland.
 8. 白川知功, 「量子系物質科学研究チーム: 研究紹介」, 京都大学 MACS 教育プログラム富岳見学, 2023/12/19, 神戸.
 9. 白川知功, 「テンソルネットワーク法を用いた量子計算のシミュレーション」, 第4回量子ソフトウェアワークショップ: NISQ 計算時代の量子シミュレーションと量子コンピュータシミュレータ, 2023/12/25, 東京 [招待]
 10. S. Sota, “Research and development for quantum dynamics simulation by quantum computer”, JST さきがけ「量子情報処理」領域第8回領域会議, 2023/5/22, 和歌山・オンライン.
 11. K. Tsutsui, K. Shinjo, S. Sota, T Tohyama, “Theoretical Study of Magnetic Excitations in a Photoexcited Two-dimensional Mott Insulator”, SCES 2023, 2023/7/5, Incheon (Korea).
 12. K. Shinjo, S. Sota, S. Yunoki, Takami Tohyama, “Subcycle Pulse-Induced Nonequilibrium Dynamics in One-Dimensional Strongly Correlated Electron Systems”, SCES 2023, 2023/7/6, Incheon (Korea).
 13. T. Tohyama, K. Shinjo, S. Sota, S. Yunoki, “In-Gap Spectral Weight of the Optical Conductivity Induced by a Strong Subcycle Pulse in Low-Dimensional Mott Insulators”, CCP2023, 2023/8/6, Kobe.
 14. 遠山貴巳, 新城一矢, 曾田繁利, 柚木清司, “光励起されたモット絶縁体の光学応答の数値シミュレーション”, 第10回「富岳」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会, 2023/10/27, 東京・オンライン.
 15. 新城一矢, 遠山貴巳, 曾田繁利, 柚木清司, “強い電子間相互作用に起因する電流・スピン流テクスチャを持つ新奇量子相の研究”, 第10回「富岳」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会, 2023/10/27, 東京・オンライン.
 16. 曾田繁利, “NISQ による量子ダイナミクス研究に向けた技術基盤の創出”, JST さきがけ研究領域「革新的な量子情報処理技術基盤の創出」領域セミナー, 2023/11/1, 東京・オンライン [招待].
 17. S. Sota, “Research and development for quantum dynamics simulation by quantum computer”, JST さきがけ「量子情報処理」領域2期生評価会・第9回領域会議, 2023/11/27, 東京・オンライン.
 18. 曾田繁利, “量子多体系研究を取り巻く最近の計算環境と量子計算”, 凝縮系物理のフロンティア-強相関電子系と量子計算-, 2023/12/26, 静岡・オンライン.
 19. 上田宏, 「量子回路シミュレータのためのテンソルネットワーク入門」, (株)デンソー AI 研究部基盤技術研究室セミナー, 2023年4月10日, オンライン [招待].
 20. H. Ueda, “The effect of diamond-type shaped multi-qubit decomposition for one-dimensional quantum state dynamics”, CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics, 2023/8/5, Kobe [Poster].
 21. T. Hikiyama, H. Ueda, K. Okunishi, K. Harada, and T. Nishino, “Visualization of Entanglement Geometry by Structural Optimization of Tree Tensor Network”, CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics, 2023/8/5, Kobe.
 22. T. Sugimoto, “Quantum-circuit algorithms: many-body topological invariant and Majorana zero mode”, CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics, 2023/8/5,

Kobe.

23. H. Ueda, M. Tomonari, T. Shimokawa, and D. Yamamoto, “Quantum spin solver QS3: Application to spin systems with fictitious symmetry-breaking field”, 28th International Conference on Statistical Physics, Statphys28, 2023/8/8, Bunkyo-ku.
24. 渡辺亮, 藤井啓祐, 上田宏, 「テンソルネットワークアンザッツを用いたエンタングル埋め込み変分量子固有値解法」, 日本物理学会 第 78 回年次大会 (2023 年), 2023 年 9 月 16 日, 仙台.
25. 宮腰祥平, 杉本貴則, 白川知功, 柚木清司, 上田宏, 「量子回路近似に基づく特異値分解の計算手法に関する研究」, 日本物理学会 第 78 回年次大会 (2023 年), 2023 年 9 月 17 日, 仙台.
26. 上田宏, 山本大輔, 下川統久朗, 「量子スピンスルバーQS3 の高度化開発」, 日本物理学会 第 78 回年次大会 (2023 年), 2023 年 9 月 17 日, 仙台 [ポスター].
27. S. Miyakoshi, T. Sugimoto, T. Shirakawa, S. Yunoki, and H. Ueda, “The effect of diamond-type shaped multi-qubit decomposition for one-dimensional quantum state dynamics”, ExU-YITP Workshop on Condensed Matter Physics and Quantum Information, 2023/9/28, Kyoto [Poster].
28. 宮腰祥平, 「実時間発展ダイナミクスと量子エンタングルメントの定量化への変分量子アルゴリズムの応用」, SQAI 量子埋め込みグループセミナー, 2023 年 10 月 26 日, オンライン [招待].
29. 上田宏, 「テンソルネットワーク法の量子計算への応用」, 第 26 回情報論的学習理論ワークショップ, 2023 年 10 月 31 日, 北九州 [招待].
30. 上田宏, 「量子計算に対するテンソルネットワーク法の応用」, Tensor Network 2023, 2023 年 11 月 15 日, つくば [招待].
31. S. Miyakoshi, T. Sugimoto, T. Shirakawa, S. Yunoki, and H. Ueda, “Diamond-type quantum circuit for real-time dynamics in one-dimensional system”, QUANTUM INNOVATION 2023, Tokyo Convention Hall, 2023/11/16, Chuo-ku [Poster].
32. 杉本貴則, 「トポロジカル状態と量子計算」, 凝縮系物理のフロンティア-強相関電子系と量子計算-, 2023 年 12 月 27 日, 伊東.
33. T. Sakai, “Field-Induced Spin Nematic Phase of a Magnet on the Shastry-Sutherland Lattice with the Anisotropic Ferromagnetic Interaction”, Intermag2023, May 15-19, Sendai, Japan.
34. 坂井徹, 「ジャロシンスキー守谷相互作用と ESR 禁制遷移」, 学術変革領域研究(A)「アシンメトリが彩る量子物質の可視化・設計・創出」キックオフミーティング, 2023 年 6 月 10-11 日, 岡山大学
35. T. Sakai, M. Hashimoto, T. Houda, R. Furuchi, H. Nakano, K. Okamoto, K. Okunishi, “Translational Symmetry Broken Magnetization Plateau of the Spin-1/2 Ferromagnetic and Antiferromagnetic Bond-Alternating Spin Chain with Competing Anisotropies”, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2023), July 2-7, Incheon, Korea.
36. M. Hashimoto, T. Houda, R. Furuchi, H. Nakano, K. Okamoto, and T. Sakai, “Field-Induced Spin Liquids in the S=1/2 Distorted Diamond Spin Chain with Anisotropic Ferromagnetic Interaction”, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2023), July 2-7, Incheon, Korea.
37. 坂井徹, 遠山貴己, 筒井健二, 中野博生, 「量子ビームと計算物質科学」, SPring-8 シンポジウム 2023, 2023 年 9 月 26-27 日, 大阪大学
38. 坂井徹, 岡本清美, 奥西巧一, 古内理人, 中野博生, 「競合する異方性のある S=1/2 ボンド交

- 代鎖の磁化プラトー」、日本物理学会第 78 回年次大会、2023 年 9 月 16-19 日、東北大学
39. 古内理人、中野博生、轟木義一、坂井徹、「五角形格子ハイゼンベルク反強磁性体のフェリ磁性基底状態の崩壊」、日本物理学会第 78 回年次大会、2023 年 9 月 16-19 日、東北大学
40. 中野博生、轟木義一、多田野寛人、坂井徹、「富岳における大規模並列化による量子スピン系シミュレーション」、日本物理学会第 78 回年次大会、2023 年 9 月 16-19 日、東北大学
41. 利根川孝、坂井徹、「異方的 $S=1/2$ 三本脚格子系の基底状態相図：トリアティック TLL 相とネマティック TLL 相」、日本物理学会第 78 回年次大会、2023 年 9 月 16-19 日、東北大学
42. 橋本理、古内理人、中野博生、岡本清美、坂井徹、「異方的強磁性相互作用のある歪んだダイヤモンドスピン鎖における磁場誘起スピンネマティック液体」、日本物理学会第 78 回年次大会、2023 年 9 月 16-19 日、東北大学
43. 岡本清美、坂井徹、奥西巧一、「異方的 $S=1$ 鎖における $1/2$ 飽和磁化プラトー-II」、日本物理学会第 78 回年次大会、2023 年 9 月 16-19 日、東北大学
44. 坂井徹、「歪んだダイヤモンド鎖の $3/4$ の磁化プラトーにおけるスピギャップの ESR 直接観測」、第 62 回電子スピンサイエンス学会、2023 年 11 月 2-4 日、神戸大学
45. T. Sakai, M. Hashimoto, T. Houda, R. Furuchi, H. Nakano, and K. Okamoto, “Spin Nematic Liquid of Low-Dimensional Quantum Spin Systems in Magnetic Field”, Asia-Pacific Conference on Condensed Matter Physics 2023, 2023 年 11 月 26-29 日、台湾・花蓮
46. T. Sakai, M. Hashimoto, T. Houda, R. Furuchi, H. Nakano, and K. Okamoto, “Quantum Spin Nematic Liquid of Low-Dimensional Spin Systems in Magnetic Field”, 新学術領域研究「量子液晶の物性科学」領域研究会、2023 年 12 月 26-28 日、東京大学物性研究所
47. 坂井徹、橋本理、古内理人、中野博生、岡本清美、利根川孝、「低次元量子スピン系の磁場誘起スピンネマティック相」、第 19 回量子スピン系研究会、2024 年 2 月 21-22 日、福井大学
48. T. Sakai, “Translational Symmetry Broken Magnetization Plateau of the One-Dimensional Quantum Spin Systems with Competing Anisotropies”, APS March Meeting, 2024 年 3 月 3-8 日、ミネアポリス、USA
49. 坂井徹、岡本清美、奥西巧一、橋本理、法田朋久、古内理人、中野博生、「競合する異方性のあるスピンラダー系の並進対称性の破れた磁化プラトー」、日本物理学会 2024 年春季大会、オンライン
50. 岡本清美、坂井徹、奥西巧一、橋本理、法田朋久、古内理人、中野博生、「競合する異方性のある反強磁性 $S=1$ 鎖における並進対称性破れプラトーと磁気相図」、日本物理学会 2024 年春季大会、オンライン
51. 利根川孝、古谷峻介、岡本清美、坂井徹、「強磁性桁対における四次のオンサイト異方性をもつ $S=1$ 梯子系の基底状態相図：数値計算」、日本物理学会 2024 年春季大会、オンライン
52. 古谷峻介、利根川孝、岡本清美、坂井徹、「強磁性桁対における四次のオンサイト異方性をもつ $S=1$ 梯子系の基底状態相図：有効場理論」、日本物理学会 2024 年春季大会、オンライン
53. 橋本理、法田朋久、古内理人、中野博生、岡本清美、坂井徹、「強磁性相互作用のある歪んだダイヤモンドスピン鎖の磁化プラトー」、日本物理学会 2024 年春季大会、オンライン
54. 西野友年、晶光流、「Bipartite Entanglement Entropy を再現するペア分布行列を用いた量子スピン系の基底状態解析 I」日本物理学会 2023 年春季大会 (online).
55. 晶光流、西野友年、「Bipartite Entanglement Entropy を再現するペア分布行列を用いた量子スピン系の基底状態解析 II」日本物理学会 2023 年春季大会 (online).
56. 西野友年、「How to study statistical lattice models by “adaptive” tensor network frameworks?」Workshop on Quantum Information, Quantum Matter, and Quantum Gravity (Sep. 4-Sep. 8, 2023 ExU-YITP School 基礎物理学研究所) [招待]
57. 西野友年、「波動関数を Tree Tensor Network で表してみなさい」研究会 Tensor Network2023 (11/14-11/16 筑波大学) [招待]

	<p>58. Katsumasa Nakayama, Lena Funcke, Karl Jansen, Ying-Jer Kao, Stefan Kuhn, ”トポロジカル項を含む CP(1)模型に対するテンソル繰り込み群による数値計算”, 日本物理学会 2023 年春季大会, 2023/03/22-25 オンライン開催</p> <p>59. Katsumasa Nakayama, ”Application of the projective truncation and randomized singular value decomposition to a higher dimension.”, Lattice 2023, 2023/07/31-08/04 Illinois, Online</p> <p>60. 中山勝政, 場の理論の新しい計算方法 2023, “高次元におけるテンソル繰り込み群と乱拓特異値分解”, 2023/10/10-13 大阪</p> <p>61. Katsumasa Nakayama, Workshop on tensor networks and quantum computing in high-energy physics, “Randomized higher-order tensor renormalization group for higher dimension.”, 2023/12/14 Taiwan[Invited]</p>
課題 5	<p>Publications</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Structure determination using high-order spatial correlations in single-particle X-ray scattering. W Zhao, O Miyashita, M Nakano, F Tama, IUCrJ 11 (1), 2024 2) Advancing cryo-electron microscopy data analysis through accelerated simulation-based flexible fitting approaches. O Miyashita, F Tama, Current Opinion in Structural Biology 82, 102653, 2023 3) Composable Workflow for Accelerating Neural Architecture Search Using In Situ Analytics for Protein Classification. G Channing, R Patel, P Olaya, A Rorabaugh, O Miyashita, S Caino-Lores, C Schuman, F Tama, M Taufer, Proceedings of the 52nd International Conference on Parallel Processing, 1, 2023 4) MDSPACE: Extracting continuous conformational landscapes from cryo-EM single particle datasets using 3D-to-2D flexible fitting based on Molecular Dynamics simulation. R Vuillemot, A Mirzaei, M Harastani, I Hamitouche, L Fréchin, BP Klaholz, O Miyashita, F Tama, I Rouiller, S Jonic, Journal of Molecular Biology 435 (9), 167951, 2023 5) Molecular size dependence on achievable resolution from XFEL single-particle 3D reconstruction. M Nakano, O Miyashita, F Tama, Structural Dynamics 10 (2), 2023 <p>Presentations (Invited)</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) Tama F, “Hybrid modeling approaches to study structures and dynamics of biological systems” Computational Advances in Structural Biology Conference, King Abdullah University of Science and Technology’s, Saudi Arabia, 1- 3 May 2023 2) Tama F, “Hybrid modeling approaches to study structures and dynamics of biological systems” CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics, Kobe, 4-8 Aug 2023 3) Tama F, “Hybrid modeling approaches to study structures and dynamics of biological systems” Institute of Genetics and Molecular and Cellular Biology, University of Strasbourg, France, 13th Oct 2023 4) Tama F, “Hybrid modeling approaches to study structures and dynamics of biological systems” Sorbonne University, Paris, 19th Dec 2023 5) Tama F, “Hybrid modeling approaches to study structures and dynamics of biological systems” Telluride Workshop: The Role of Fluctuations and Dynamics in Biomolecular Function, Telluride, USA, 8-12 Jan 2024 6) Miyashita O, “Integrative/Hybrid Modeling Approaches for Dynamic Structural Biology”, “Molecular Movies” International Symposium 2023, November 2023, 淡路夢舞台国際会議場 7) Miyashita O, “Integrative/Hybrid Modeling Approaches for Dynamic Structural Biology”, Multi-scale Molecular Dynamics Simulation and Machine Learning of Biomolecular Systems,

	<p>RIKEN Wako, August 2023</p> <p>8) Miyashita O, “構造生物学へのハイブリッドアプローチ：シミュレーションと実験データの融合”, The 23rd Annual Meeting of the Protein Science Society of Japan, Nagoya, July 2023</p> <p>Presentations (Other Oral)</p> <p>1) Tama F, “Integrative Modeling to Characterize Structure and Dynamics of (Bio)molecules from Single-Molecule Experiments”, LEAPS Meets Life Sciences Conference, Elba Island, Italy, 14-19 May 2023</p> <p>2) Nakano M, Miyashita O, Tama F, “Molecular size dependence on the resolution of XFEL-SPA”, 34th IUPAP Conference on Computational Physics, Kobe, 4-8 Aug 2023</p> <p>3) Raghavan, Miyashita O, “Automated density extraction of isomorphous difference map and occupancy estimation for conformer fitting”, Time-resolved spectroscopy meets time-resolved crystallography, The future of dynamic photobiology – EMBO workshop, online, 17-19 Apr 2023</p> <p>4) Raghavan S, Miyashita, O, “Automated density extraction of isomorphous difference map and occupancy estimation for conformer fitting”, Molecular Movies International Symposium, Awaji, 30th Nov – 1st Dec 2023</p> <p>Outreach</p> <p>RIKEN Open Day 2023, Opened Promotion Booth, November 3, 2023.</p> <p>Presentation for the Masason Foundation at R-CCS, December 2023</p> <p>Presentation for UK Government Chief Scientific Advisor, Professor Dame Angela McLean, October 2023</p>
課題 6	<p>論文：</p> <p>1. Kanada, R., Tokuhisa, A., Nagasaka, Y., Okuno, S., Amemiya, K., Chiba, S., Gert-Jan Bekker, G., Kamiya, N., Kato, K., and Okuno, Y. , 2023. “Enhanced Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation with a Smoothed Hybrid Potential Using a Neural Network Model”. Journal of Chemical Theory and Computation.</p> <p>2. Yamazaki, K., Wada, Y., Tokuhisa, A., Wada, M., Katoh, T., Umeda, Y., Okuno, Y., and Nakagawa, A. (2023, October). “An Auto-Encoder to Reconstruct Structure with Cryo-EM Images via Theoretically Guaranteed Isometric Latent Space, and Its Application for Automatically Computing the Conformational Pathway.” In International Conference on Medical Image Computing and Computer-Assisted Intervention (pp. 394-404). Cham: Springer Nature Switzerland.</p> <p>3. Oyama, Y., Tabuchi, A., & Tokuhisa, A. (2023, August). “Accelerating AlphaFold2 Inference of Protein Three-Dimensional Structure on the Supercomputer Fugaku.” In Proceedings of the 13th Workshop on AI and Scientific Computing at Scale using Flexible Computing (pp. 1-9).</p> <p>4. 奥野恭史、徳久淳師、大山洋介、田淵晶大、タンパク質立体構造予測 AI 「富岳」版 OpenFold —スパコンの多ノード性を活かしたハイスループット解析の実現、実験医学 Vol42、No3 2024 年 2 月号</p>

2023 年度 FOCUS 事例集へ寄稿を予定:

スーパーコンピュータ「富岳」を活用した創薬 DX プラットフォーム開発(予定)

奥野、徳久、岩田、鎌田、中澤、千葉、井阪、大塚 (敬称略)

第 1 案提出済

学会:

1. 奥野恭史. AI・シミュレーションが拓く創薬の未来. 第 5 回 KBBM WEB セミナー, 2023 年 10 月 30 日, 国内, 口頭.
2. 奥野恭史. DX で目指す創薬イノベーション. 第 73 回日本薬学会関西支部 総会・大会, 神戸学院大学ポートアイランドキャンパス (兵庫県, 2023 年 10 月 14 日, 国内, 口頭)
3. 奥野恭史. 創薬科学副専攻「創薬科学特殊講義」「AI・シミュレーションが拓く創薬の未来」, 第 11 回 創薬科学研究所セミナー、第 133 回 生物科学フロンティアセミナー, 大阪公立大学 中百舌鳥キャンパス. 2023 年 9 月 22 日, 国内, 口頭
4. 奥野恭史. 「DX による創薬イノベーション」, 日本薬剤学会第 38 年会, ウィンクあいち (愛知県産業労働センター). 2023 年 5 月 16 日 2023/5/16
5. 奥野恭史. 「ビッグデータ医科学」, 第 31 回日本医学会総会 2023 東京 柱 1: ビッグデータがもたらす医学・医療の変革 顕微鏡ビッグデータは医学に何をもたらすか?, 2023/4/21, 東京国際フォーラム
6. 奥野恭史. “DX drives the innovation in drug development”, 第 110 回日本泌尿器科学会総会, 神戸コンベンションセンター. 2023 年 4 月 20 日, 国内, 口頭
7. 奥野恭史. 「富岳」NOW 「富岳」を活用した研究の現在と今後の展望, シンポジウム「富岳」EXPANDS ~可能性を拡張する~, TKP 東京駅大手町カンファレンスセンター/オンライン開催. 2023 年 1 月 24 日, 国内, 口頭
8. 徳久淳師「テンプレートマッチング法による生体分子構造多形解析統合ワークフローの富岳における検証」, 第 10 回「富岳」を中核とする HPCI 利用研究課題 成果報告会, THE GRAND HALL 品川/オンライン開催. 2023 年 10 月 25 日, 26 日, 国内, ポスター

プレス発表:

1. 「富岳」実装版「OpenFold」の提供開始
ータンパク質構造の大規模高速推論でゲノム医療や創薬に貢献ー
2023 年 6 月 21 日
https://www.riken.jp/press/2023/20230621_1/index.html
- 2 富士通と理化学研究所、独自の生成 AI に基づく創薬技術を開発
ー電子顕微鏡画像からタンパク質の広範囲な構造変化の予測を実現ー
2023 年 10 月 10 日
https://www.riken.jp/pr/news/2023/20231010_2/index.html

特許出願:

1. 発明の名称: 原子構造推定装置、原子構造推定方法、および原子構造推定プログラム
出願人: 国立研究開発法人理化学研究所
出願番号: 2023-141079
出願日: 2023 年 8 月 31 日
2. 発明の名称: 分子動力学計算プログラム、方法、及び装置
出願人: 国立研究開発法人理化学研究所、富士通株式会社

	<p>出願番号： 2023-177805 出願日：2023 年 10 月 13 日</p> <p>3. 発明の名称：情報出力プログラム、情報出力方法及び情報出力装置 出願人：国立研究開発法人理化学研究所、富士通株式会社 出願番号：2023-012525 出願日：2023 年 1 月 31 日</p> <p>4. 発明の名称：経路選択プログラム、経路選択方法及び経路選択装置 出願人：国立研究開発法人理化学研究所、富士通株式会社 出願番号：2023-012524 出願日：2023 年 1 月 31 日</p>
課題 7	<p>ジャーナル論文</p> <p>[1] C.Y.Chen, K. Nakajima, A Cascadic Parareal Method for Parallel-in-Time Simulation of Compressible Supersonic Flow, IPSJ Transactions on Advanced Computing Systems (ACS), 2024 (in press) 査読付き国際会議</p> <p>[2] M. Kawai, A. Ida, T. Hanawa, K. Nakajima, Masatoshi Kawai, Akihiro Ida, Toshihiro Hanawa, Kengo Nakajima, Dynamic Core Binding for Load Balancing of Applications Parallelized with MPI/OpenMP, Proceedings of ICCS 2023 (23rd International Conference on Computational Science), Lecture Notes in Computer Science 14075, 378-394, 2023</p> <p>[3] S. Sumimoto, T. Hanawa, K. Nakajima, MPI-Adapter2: An Automatic ABI Translation Library Builder for MPI Application Binary Portability, IXPUG Workshop in conjunction with HPC Asia 2024, 2024</p> <p>[4] Daichi Mukunoki, Satoshi Kawai, Toshiyuki Imamura, Sparse Matrix-Vector Multiplication with Reduced-Precision Memory Accessor, 2023 IEEE 16th International Symposium on Embedded Multicore/Many-core Systems-on-Chip (MCSoc), Singapore, Singapore, 18-21 December 2023 (Best Paper Award) 招待講演</p> <p>[5] Nakajima, K., Furumura, T., Tsuruoka, H., Yashiro, H., Sumimoto, S., Arakawa, T., Integration of 3D simulation of long-period strong ground motion and real-time data assimilation on the Wisteria/BDEC-01 system with h3-Open-BDEC, HPC Workshop for Nuclear Explosion Monitoring 2023, CTBT0 (Preparatory Commission for the Comprehensive Nuclear-Test-Ban Treaty Organization), Vienna, Austria, 2023 【Keynote Talk】</p> <p>[6] 中島研吾, 「計算・データ・学習」融合が切り拓く革新的スーパーコンピューティング, 日本地球惑星連合 2023 年大会, 千葉, 2023</p> <p>[7] Nakajima, K., Innovative Supercomputing by Integration of Simulation/Data/Learning at the Information Technology Center, The University of Tokyo, The 6th International Workshop on Nonhydrostatic Models (NHM-WS 2023), Sapporo, 2023</p> <p>[8] Nakajima, K., Long but “Straight” Road towards Integrations of Simulations/Data/Learning on Oakforest-PACS II, Open Accelerated Computing Summit 2023 (OACS), 2023 【Keynote Talk】</p> <p>[9] 中島研吾, いまさら聞けないスパコンの常識, 構想設計コンソーシアム, 産業技術総合研究所, 2023</p> <p>[10] Nakajima, K., Innovative Supercomputing by Integrations of Simulations/Data/Learning on Oakforest-PACS II, 14th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-</p>

	<p>Scale Heterogeneous Systems (ScalAH23) in conjunction with SC23, Denver, CO, USA, November 13, 2023</p> <p>[11] Nakajima, K., Innovative Supercomputing in the Exascale Era by Integration of Simulation/Data/Learning, Northeast Asia Symposium 2023 (The International Conference of New Generation Database and Data-Empowering Technologies), Guangzhou, China, November 21-22, 2023</p> <p>[12] Nakajima, K., Integration of 3D Earthquake Simulation & Real-time Data Assimilation, EU-ASEAN High-Performance Computing (HPC) School 2023, Research Organization for Electronics and Informatics (BRIN), Indonesia, December 11-15, 2023</p> <p>口頭発表等</p> <p>[13] 荒川隆, 住元真司, 八代尚, 中島研吾, h3-Open-UTIL/MP カプラを用いた NICAM アンサンブル連成計算, 日本地球惑星連合 2023 年大会, 千葉, 2023</p> <p>[14] Arakawa, T., Sumimoto, S., Yashiro, H., Nakajima, K., Development of a Heterogeneous Coupling Library h3-Open-UTIL/MP, 20th Annual Meeting of Asia Oceania Geosciences Society (AOGS2023), Singapore, 2023</p> <p>[15] Nakajima, K., Innovative Supercomputing in the Exascale Era by Integration of Simulation/Data/Learning, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2023), Tokyo, 2023</p> <p>[16] Arakawa, T., Sumimoto, S., Yashiro, H., Nakajima, K., h3-Open-UTIL/MP: A coupling library for heterogeneous computing, 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics (ICIAM 2023), Tokyo, 2023</p> <p>[17] 中島研吾, (計算・データ・学習) 融合による革新的スーパーコンピューティングとその先にあるもの, 第 15 回 自動チューニング技術の現状と応用に関するシンポジウム (ATTA2023), 2023</p>
課題 8	<p>[1] Isita Talukdar, Amarjit Singh, Robert Underwood, Kento Sato, Weikuan Yu, "Integrating TEZIP into LibPressio: A Case Study of Integrating a Dynamic Application into a Static C Environment", In Proceedings of the International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis 2023 (SC23), Research Poster, Denver, USA, Nov, 2023 (Poster).</p> <p>[2] Amarjit Singh and Kento Sato, "TEZip Integration in LibPressio: Bridging Dynamic Application Capabilities with a Static C Environment", the 6th R-CCS International Symposium (RCCS-IS6), Kobe, Japan, Feb. 2024 (Poster)</p> <p>[3] Satoru Hamamoto, Masaki Oura, Atsuomi Shundo, Daisuke Kawaguchi, Satoru Yamamoto, Hidekazu Takano, Masayuki Uesugi, Akihisa Takeuchi, Takahiro Iwai, Yasuo Seto, Yasumasa Joti, Kento Sato, Keiji Tanaka & Takaki Hatsui (2023) Demonstration of efficient transfer learning in segmentation problem in synchrotron radiation X-ray CT data for epoxy resin, Science and Technology of Advanced Materials: Methods, DOI: 10.1080/27660400.2023.2270529, 2023 (Selected as Editor's Choice Collection)</p>
課題 9	<p>・ Daigo Umemoto, Maiko Kikuchi, Ayako Terui, Koutarou Abe, Nanako Doi, Miki Kobayashi, Nobuyasu Ito and Itsuki Noda, "Urban scale pedestrian evacuation scenario in Kobe City center", 29th International Symposium on Artificial Life and Robotics (AROB 28th 2024), 9th International Symposium on BioComplexity (ISBC9), and 7th International Symposium on Swarm Behavior and Bio-Inspired Robotics (SWARM7) (Beppu, Japan, January 24-26, 2024) (GSI-3)</p> <p>・ 榎本大悟, 菊池麻衣子, 照井彩子, 安倍孝太郎, 土居菜々子, 小林実季, 伊藤伸泰, 野田五十樹「神戸市中心部における徒歩帰宅シミュレーション」第 29 回交通流と自己駆動粒子系のシン</p>

	<p>ポジウム (2023 年 12 月 1 日、オンライン) (一般 1-1)</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ 榎本大悟, 菊池麻衣子, 照井彩子, 小林実季, 土居奈々子, 安部孝太郎, 伊藤伸泰, 野田五十樹 「神戸市中心部における帰宅困難者シミュレーション」 日本物理学会第 78 回年次大会 (東北大学川内キャンパス、仙台市、2023 年 9 月 16 日-20 日) (17pC206-1) ・ Daigo Umemoto, Maiko Kikuchi, Ayako Terui, Koutarou Abe, Ryuushi Shimizu, Katsuki Hirashige, Nobuyasu Ito and Itsuki Noda, "Urban scale pedestrian simulation and analysis around Kobe City center", 10th International Congress on Industrial and Applied Mathematics(ICIAM2023 Tokyo) (23/8/20-25, Tokyo) (01202 4E, 23/8/24) ・ Daigo Umemoto, Maiko Kikuchi, Ayako Terui, Koutarou Abe, Ryuushi Shimizu, Katsuki Hirashige, Nobuyasu Ito and Itsuki Noda, "Urban scale pedestrian simulation in Kobe City center based on mobile phone data", 34th IUPAP Conference of Computational Physics(CCP2023) (23/8/4-8, Kobe) (C07-1-05)
--	--

[2022 年度]

課題名	研究成果の発表実績
課題 2	<p>神戸大学との連携成果</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. 石上快, 大塚利行, 中嶋隆人, 枝和男, "Keggin 型ポリオキソタングステートの合成経路に関する研究", Journal of Computer Chemistry, Japan 秋季年会 2022 精選論文特集号 (出版予定). 2. 石上快, 大塚利行, 中嶋隆人, 枝和男, "Keggin 型ポリオキソタングステートの合成経路に関する研究", 日本コンピュータ化学会 2022 年秋季年会, 長野, 2022 年 11 月 26 日. 3. 窪田樹, 大塚利行, 中嶋隆人, 枝和男, "新規の拡張型 (W18) ポリオキソタングステートの合成経路に関する研究", 第 68 回ポーラログラフィーおよび電気分析化学討論会, 京都, 2022 年 11 月 10 日. (体調不良のため講演中止) <p>関西学院大学との連携成果</p> <ol style="list-style-type: none"> 4. 江口大地, 川嶋英佑, 中嶋隆人, 玉井尚登, "ホスフィン保護 Au11 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", 2022 年光化学討論会, 京都, 2022 年 9 月 14 日. <p>大阪大学との連携成果</p> <ol style="list-style-type: none"> 5. 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. 793, 139439 (2022). 10.1016/j.cplett.2022.139439 6. K. Miyagawa, M. Shoji, H. Isobe, T. Kawakami, T. Nakajima, K. Yamaguchi, "Relative energies among proton-shifted S2 isomers in the photosystem II revealed by DLPNO coupled cluster and hybrid DFT calculations. Proton transfer coupled spin transitions of the CaMn4Ox cluster in OEC of PSII", Chem. Phys. Lett. 790, 139357 (2022). 10.1016/j.cplett.2022.139357 7. 山口兆, 宮川晃一, 庄司光男, 磯部寛, 川上貴資, 中嶋隆人, "化学反応における対称性の破れの理論(12): 光合成水分解反応中間体の結合クラスター (DLPNO Coupled-Cluster(CC)SD(T0)) 計算", 豊田研究報告, 75, 107-128 (2022). <p>京都大学との連携成果</p>

8. K. Hirao, T. Nakajima, B. Chan, H. Lee, "The core ionization energies calculated by delta SCF and Slater's transition state theory", J. Chem. Phys. 158, 064112 (2023). 10.1063/5.0140032 8, 9,

9. T. Nakajima, K. Hirao, B. Chan, "Higher-order transition state approximation", J. Chem. Phys. 156, 114112 (2022). 10.1063/5.0086173

長崎大学との連携成果

10. B. Chan, W. Dawson, T. Nakajima, "Searching for a reliable density functional for molecule-environment interactions, Found B97M-V/def2-mTZVP", J. Phys. Chem. A 126, 2397-2406 (2022). 10.1021/acs.jpca.2c02032

11. B. Chan, W. Dawson, T. Nakajima, "Modeling the conformational preference of the lignocellulose interface and its interaction with weak acids", J. Phys. Chem. A 126, 2119-2126 (2022). 10.1021/acs.jpca.2c00308

華中科技大学との連携成果

12. Z. Zhang, Q. Sun, T. Nakajima, H. Ban, Z. Liu, H. Yu, Y. Wang, Z. Xiao, Y. Shen, M. Wang, "Achieving efficient and stable inorganic CsSnI₃ mesoporous perovskite solar cells via galvanic displacement reaction", J. Mat. Chem. A 10, 23204-23211 (2022). 10.1039/d2ta07017k

13. 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 10, 3642-3649 (2022). 10.1039/D1TA09811J

その他 (県市 COE が謝辞に入っている成果のみ)

*14. N. Inoue, T. Nakajima, "Douglas-Kroll and infinite order two-component transformations of Dirac-Fock operator", J. Chem. Phys. 10.1063/5.0131926

*15. N. Inoue, T. Nakajima, "Realistic nuclear charge distribution model function for analytic nuclear attraction integrals in Gaussian basis functions", J. Comput. Chem. in press. 10.1002/jcc.27072

*16. T. Nakajima, "Materials design with materials informatics and simulation", EU-Japan virtual Workshop on High Performance Computing, online, 25 Jan. 2023.

*17. 中嶋隆人, "シミュレーションとインフォマティクスによる新材料設計・探索", 「富岳」EXPANDS ~可能性を拡張する~, 東京, 2023年1月24日.

*18. 中嶋隆人, "量子化学シミュレーションと材料インフォマティクス", 新領域開拓課題研究会, 神戸, 2022年10月15日.

*19. 中嶋隆人, "シミュレーションとインフォマティクスの融合活用による新材料設計", スーパーコンピューティング技術産業応用協議会 第51回産協セミナー, オンライン, 2022年8月29日.

*20. 中嶋隆人, "シミュレーションとインフォマティクスによる材料設計", 兵庫県マテリアルズ・インフォマティクス講演会 (第8回), 2022年8月19日.

*21. 中嶋隆人, "マテリアルズ・インフォマティクスによるペロブスカイト太陽電池の正孔輸送材料設計", 応用物理学会インフォマティクス応用研究会 第5回研究会「太陽光発電インフォマティクス」, オンライン, 2022年6月15日.

*22. 中嶋隆人, "スパコン「富岳」による新材料設計・探索", 第10回 理研イノベーションセミナー, オンライン, 2022年4月13日.

	<p>*23. 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 & 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.</p> <p>*24. 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", 第13回材料系ワークショップ, オンライン, 2022年2月9日.</p> <p>*25. T. Nakajima, "Realization of Innovative Light Energy Conversion Materials utilizing the Supercomputer Fugaku", 4th R-CCS International Symposium, 7 Feb. 2022.</p> <p>*26. 中嶋隆人, "量子化学シミュレーションと材料インフォマティクス", 奈良先端科学技術大学院大学 データサイエンス特別講義, オンライン, 2023年1月30日.</p> <p>*27. 中嶋隆人, "シミュレーションとインフォマティクスによる新材料設計・探索", 早稲田大学 各務記念材料技術研究所 計算材料科学連続セミナー 電子材料第2シリーズ, オンライン, 2022年11月28日, 11月29日, 11月30日.</p> <p>*28. 中嶋隆人, "電子状態理論:大規模化・多様化", 理論化学会 理論化学レクチャーシリーズ#2, オンライン, 2022年6月23日, 6月30日.</p>
課題3	<p>●誌上发表</p> <p>Sueki, K., S. Nishizawa, T. Yamaura, and H. Tomita (2022): Precision and convergence speed of the ensemble Kalman filter-based parameter estimation: setting parameter uncertainty for reliable and efficient estimation. <i>Progress in Earth and Planetary Science</i>, 9, 47.</p> <p>* Yamanoi, K., Oishi, S., Kawaike, K. (2022): Prediction of spatial distribution of debris-flow hit probability considering the source-location uncertainty. arXiv:2211.06837</p> <p>* Yamanoi, K., Oishi, S., Kawaike, K., & Nakagawa, H. (2022): Predictive simulation of concurrent debris flows: How slope failure locations affect predicted damage. <i>Journal of Flood Risk Management</i>, 15(2), e12776. https://doi.org/10.1111/jfr3.12776</p> <p>* Kawai, Y. & Tomita, H. (2023): Numerical Accuracy Necessary for Large-Eddy Simulation of Planetary Boundary Layer Turbulence Using the Discontinuous Galerkin Method. <i>Monthly Weather Review</i>, 151(6), 1479-1508. (https://doi.org/10.1175/MWR-D-22-0245.1)</p> <p>●学会発表</p> <p>末木健太, 梶川義幸, 足立幸穂, 富田浩文, 大石 哲 (2022): 西日本全域 500m 解像度の H30.7 豪雨アンサンブル予報実験. 日本気象学会 2022 年度春季大会, オンライン, 2022 年 5 月 20 日, Oral</p> <p>末木健太 (2022): 豪雨事例の領域ネスティング計算において子モデルの境界付近で偽の降水帯が生じる問題の検討. 日本気象学会 2022 年度春季大会, オンライン, 2022 年 5 月 17 日, Poster</p> <p>Sueki, K., Y. Kajikawa, S. Adachi, H. Tomita, S. Oishi (2022): An Ensemble Prediction Experiment for the Extreme Rainfall Event in July 2018 with 500-m Resolution Throughout Western Japan. 日本地球惑星科学連合 2022 大会, 千葉, 2022 年 5 月 22 日-6 月 3 日, 口頭発表 (オンライン)</p> <p>Yamanoi, K., Oishi, S., Kawaike, K. (2023): Development of probabilistic debris-flow hazard map considering the uncertainty of initiation points. 9th International Conference on Flood Management (ICFM9), つくば市, 2023/2/19-20, 口頭発表</p>

	<p>Adachi, S. A., (2022): Dynamical Downscaling Methods for Regional Climate Studies. Asian Conference on Meteorology 2022, Online. Nov. 24, 2022 (招待公演)</p> <p>河合佑太, 富田浩文, (2022): 不連続ガラーキン法を用いた大気ラージエディシミュレーション: 数値誤差に関する指標の導出, 日本気象学会 2022 年度春季大会, 2022 年 5 月 18 日</p> <p>河合佑太, 富田浩文, (2022): 大気ラージエディシミュレーションにおける不連続ガラーキン法の数値誤差の影響に関する研究, 日本地球惑星科学連合 2022 年大会, 2022 年 5 月 23 日</p> <p>河合佑太, 富田浩文, (2022): 不連続ガラーキン法を用いた大気モデルの開発: 湿潤過程の導入, 日本気象学会 2022 年度秋季大会, 2022 年 10 月 26 日</p> <p>Kawai, Yuta and Hirofumi Tomita, (2023): A study on Numerical Accuracy of Dynamical Core Necessary for Large-Eddy Simulation of Planetary Boundary Layer Turbulence, AMS 103rd Annual Meeting, 9th January, 2023.</p> <p>Kong, K., Amemiya, A., Sueki, K., Tomita, H. (2022): Sensitive experiments of data assimilation localization scales for the pre-preparation of cumulus parameter estimation. Meteorology Society of Japan 2022 Fall Meeting, Sapporo.</p>
課題 4	<p>【論文】(本課題参加者に下線)</p> <p>*1.K. Seki, Y. Otsuka, and S. Yunoki, “Gutzwiller wave function on a quantum computer using a discrete Hubbard–Stratonovich transformation”, Phys. Rev. B 105, 155119 (2022).</p> <p>*2.T. Shirakawa and S. Yunoki, “Local multiplet formation around a single vacancy in graphene: An effective Anderson model analysis based on the block–Lanczos DMRG method”, Phys. Rev. B 105, 184110 (2022).</p> <p>*3.K. Seki and S. Yunoki, “Spatial, spin, and charge symmetry projections for a Fermi–Hubbard model on a quantum computer”, Phys. Rev. A 105, 032419 (2022).</p> <p>4.T. Sakai, R. Nakanishi, T. Yamada, R. Furuchi, H. Nakano, H. Kaneyasu, K. Okamoto and T. Tonegawa: Field-induced spin nematic Tomonaga–Luttinger liquid of the $S=1/2$ spin ladder system with anisotropic ferromagnetic rung interaction, Phys. Rev. B 106, 064433/1–9 (2022).</p> <p>5.K. Shinjo, S. Sota, T. Tohyama, “Glassy dynamics of the one-dimensional Mott insulator excited by a strong terahertz pulse”, Physical Review Research 4, L032019 (2022).</p> <p>*6.K. Seki and S. Yunoki, “Energy-filtered random-phase states as microcanonical thermal pure quantum states”, Phys. Rev. B 106, 155111 (2022).</p> <p>*7.Q. Xie, K. Seki, and S. Yunoki, “Variational counterdiabatic driving of the Hubbard model for ground-state preparation”, Phys. Rev. B 106, 155153 (2022).</p> <p>*8.H. Ueda, S. Yunoki, and T. Shimokawa, “Quantum spin solver near saturation: QS3”, Comput. Phys. Commun. 277, 108369 (2022).</p> <p>*9.K. Okunishi, T. Nishino, and H. Ueda, “Developments in the Tensor Network — from Statistical Mechanics to Quantum Entanglement”, J. Phys. Soc. Jpn. 91, 062001 (2022) [Invited Review].</p> <p>10.H. Nakano, H. Tadano, N. Todoroki and T. Sakai: The Haldane Gap of the $S=1$ Heisenberg Antiferromagnetic Chain, J. Phys. Soc. Jpn. 91, 074701/1–5 (2022).</p> <p>11.T. Sakai, T. Yamada, R. Nakanishi, R. Furuchi, H. Nakano, H. Kaneyasu, K. Okamoto and</p>

- T. Tonegawa: S=2 Quantum Spin Chain with the Biquadratic Exchange Interaction, J. Phys. Soc. Jpn. 91, 074702/1-5 (2022).
- 12.T. Tohyama, K. Shinjo, S. Sota, and K. Tsutsui, “Numerical simulations of spectroscopic properties in two-dimensional Mott insulator”, Journal of Physics: Conference Series 2207, 012028 (2022).
- 13.Y. Otsuka, K. Seki, S. Sorella, and S. Yunoki, “QMC study of the chiral Heisenberg Gross-Neveu universality class”, Journal of Physics: Conference Series 2207, 012030 (2022).
- 14.T. Sakai, H. Nakano, R. Furuchi and K. Okamoto: Field-Induced Quantum Spin Nematic Liquid Phase in the S=1 Antiferromagnetic Heisenberg Chain with Additional Interaction, J. Phys.: Conf. Ser. 2164, 012030/1-4 (2022).
- 15.T. Sakai, K. Okamoto, H. Nakano and R. Furuchi: Magnetization plateau of the distorted diamond spin chain with anisotropic ferromagnetic interaction, AIP Advances 12, 035030/1-4 (2022).
- 16.K. Tsutsui, K. Shinjo, S. Sota, and T. Tohyama, “Exciton-assisted low-energy magnetic excitations in a photoexcited Mott insulator on the square lattice”, arXiv:2207.03141 (2022).
- *17.K. Miyamoto and H. Ueda, “Extracting a function encoded in amplitudes of a quantum state by tensor network and orthogonal function expansion”, Commun. Phys.6,41(2023).
- 18.T. Yamada, R. Nakanishi, R. Furuchi, H. Nakano, H. Kaneyasu, K. Okamoto, T. Tonegawa and T. Sakai: Translational Symmetry Broken Magnetization Plateau of the S=2 Antiferromagnetic Chain with Anisotropies, arXiv:2208.10983 (2022), to appear in JPS Conf. Proc.
- 19.T. Tonegawa, K. Okamoto, K. Nomura and T. Sakai: Nematic Tomonaga-Luttinger Liquid Phase in an S=1/2 Ferromagnetic-Antiferromagnetic Bond-Alternating Chain, arXiv:2208.10988 (2022), to appear in JPS Conf. Proc.
- 20.H. Watanabe, T. Shirakawa, K. Seki, H. Sakakibara, T. Kotani, H. Ikeda, and S. Yunoki, “Monte Carlo study of cuprate superconductors in a four-band d-p model: Role of orbital degrees of freedom”, J. Phys.: Condens. Matter 35, 195601 (2023).
- 21.R. Nakanish, T. Yamada, R. Furuchi, H. Nakano, H. Kaneyasu, K. Okamoto, T. Tonegawa and T. Sakai: Field-Induced Spin Nematic Liquid of the S=1/2 Bond-Alternating Chain with the Anisotropy, arXiv:2209.09740 (2022), to appear in JPS Conf. Proc.
- 22.H. Nakano and T. Sakai: Large-Scale Numerical-Diagonalization Study of the Shastry-Sutherland Model, JPS Conf. Proc. 38, 011166 (2023).
- 23.R. Furuchi, H. Nakano and T. Sakai: Numerical Study of S=1/2 Heisenberg Antiferromagnet on the Floret Pentagonal Lattice, JPS Conf. Proc. 38, 011167 (2023)
- *24.K. Okunishi, H. Ueda, and T. Nishino, “Entanglement bipartitioning and tree tensor networks”, Prog. Theor. Exp. Phys. 023A02 (2023).
- 25.K. Shinjo, S. Sota, S. Yunoki, and T. Tohyama, “Controlling inversion and time-reversal symmetries by subcycle pulses in the one-dimensional extended Hubbard model”, Phys. Rev. B 107, 195103 (2023).
- 26.T. Sakai, H. Nakano, R. Furuchi and K. Okamoto: Spin Nematic Liquid of the S=1/2 Distorted Diamond Spin Chain in Magnetic Field, AIP Advances 13, 015313/1-4 (2023).
- *27.T. Hikiyama, H. Ueda, K. Okunishi, K. Harada, and T. Nishino, “Automatic structural optimization of tree tensor networks”, Phys. Rev. Research 5, 013031 (2023).
- *28.R.-Y. Sun, T. Shirakawa, and S. Yunoki, “Parametrized quantum circuit for weight-

adjustable quantum loop gas”, Phys. Rev. B 107, L041109 (2023).

【講演・口頭発表など】

1. H. Ueda, “Quantum Computing for Condensed matter physics and Tensor network”, PRESTO [Quantum Software] Seminar, 2022/4/11, online [Invited].
2. 坂井徹、古内理人、中野博生, 「五角形を含む二次元格子ハイゼンベルグ反強磁性体の数値的研究」、新学術領域研究「ハイパーマテリアル」第8回領域会議、2022年4月18-20日、オンライン。
3. 坂井徹, 「異方的一次元量子スピン系の磁場誘起スピンネマティック液体」、第17回量子スピン系研究会、2022年4月23日、那覇(ハイブリッド)。
4. T. Sakai, “Quantum Spin Nematic Liquid of Low-Dimensional Anisotropic Magnets in a Magnetic Field”, Trends in Quantum Magnetism, 2022年4月24-27日, Ascona Switzerland (ハイブリッド)。
5. 上田宏, 「深層変分量子固有値ソルバーの開発と量子スピン系への応用」、第17回量子スピン系研究会、2022年4月22日、那覇市(ハイブリッド)。
6. 上田宏, 「テンソルネットワークによる量子状態圧縮技術の高度化」、さきがけ「革新的な量子情報処理技術基盤の創出」研究領域第6回領域会議、2022年5月27日、オンライン。
7. 曾田繁利, “Research and development for quantum dynamics simulation by quantum computer”, さきがけ「革新的な量子情報処理技術基盤の創出」研究領域第6回領域会議、2022年5月27日、オンライン。
8. T. Shimokawa, H. Ueda, S. Yunoki, M. Gohlke, J. Sonnenschein, and N. Shannon, “High-field exact diagonalization package QS3 and its application to the quantum spin nematic study in the $S=1/2$ J1-K square-lattice frustrated”, HFM22, 2022/6/22-25, Paris (France), Hybrid [Poster].
9. 中嶋隆人, “電子状態理論:大規模化・多様化”, 理論化学会 理論化学レクチャーシリーズ#2, オンライン, 2022年6月23日, 6月30日。
10. 上田宏, 講義「テンソルネットワークと量子計算アルゴリズム」、新潟大学「先端科学技術総論」、2022年6月29日-7月1日、オンライン。
11. 上田宏, 講義「テンソルネットワーク法の基礎」、第2回 極限宇宙スクール [学術変革領域研究A「極限宇宙」], 2022年7月5・7・11日、オンライン。
12. T. Sakai, “Quantum spin nematic liquid in the low-dimensional anisotropic magnets”, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, 2022年7月24-29日, Amsterdam.
13. K. Shinjo, S. Sota, T. Tohyama, “Glassy states of the one-dimensional Mott insulator excited by a strong terahertz pulse”, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2022 (SCES2022), 2022年7月24-29日, Amsterdam.
14. 中山勝政, 「ハミルトニアン形式のテンソルネットワーク」、場の理論の新しい計算方法 2022 量子計算とテンソルネットワークに関するサマースクール, 2022年12日-16日, 京都大学 基礎物理学研究所。
15. K. Shinjo, S. Sota, T. Tohyama, “Glassy states of the one-dimensional Mott insulator excited by a strong terahertz pulse”, 29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29), 2022年8月18-24日, 札幌(ハイブリッド)。
16. T. Sakai, R. Furuchi and H. Nakano, “Quantum Phase Transition of the Shastry-Sutherland System and ESR Forbidden Transition”, International Conference on Low Temperature Physics, 2022年8月18-24日, 札幌(ハイブリッド)。
17. T. Yamada, R. Nakanishi, R. Furuchi, H. Nakano, H. Kaneyasu, K. Okamoto, T. Tonegawa

- and T. Sakai, “Translational Symmetry Broken Magnetization Plateau of the $S=2$ Antiferromagnetic Chain with Anisotropies”, International Conference on Low Temperature Physics, (LT29), 2022 年 8 月 18-24 日, 札幌 (ハイブリッド) .
- 18.R. Nakanish, T. Yamada, R. Furuchi, H. Nakano, H. Kaneyasu, K. Okamoto, T. Tonegawa and T. Sakai, “Field-Induced Spin Nematic Liquid of the $S=1/2$ Bond-Alternating Chain with the Anisotropy”, International Conference on Low Temperature Physics, 2022 年 8 月 18-24 日, 札幌 (ハイブリッド) .
- 19.T. Tonegawa, K. Okamoto, K. Nomura and T. Sakai, “Nematic Tomonaga-Luttinger Liquid Phase in an $S=1/2$ Ferromagnetic-Antiferromagnetic Bond-Alternating Chain”, International Conference on Low Temperature Physics, 2022 年 8 月 18-24 日, 札幌 (ハイブリッド) .
- 20.H. Nakano and T. Sakai, “Large-Scale Numerical-Diagonalization Study of the Shastry-Sutherland Model”, International Conference on Low Temperature Physics, 2022 年 8 月 18-24 日, 札幌 (ハイブリッド) .
- 21.R. Furuchi, H. Nakano and T. Sakai, “Numerical Study of $S=1/2$ Heisenberg Antiferromagnet on the Floret Pentagonal Lattice”, International Conference on Low Temperature Physics, 2022 年 8 月 18-24 日, 札幌 (ハイブリッド) .
- 22.筒井健二, 新城一矢, 曾田繁利, 遠山貴巳, 「光励起されたモット絶縁体の 2 マグノン励起スペクトル」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 2022 年 9 月 12-15 日, 東京工業大学 (ハイブリッド) .
- 23.新城一矢, 曾田繁利, 柚木清司, 遠山貴巳, 「一次元拡張ハバード模型におけるサブサイクルパルスを用いた空間反転・時間反転対称性の制御」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 2022 年 9 月 12-15 日, 東京工業大学 (ハイブリッド) .
- 24.古内理人, 中野博生, 坂井徹, 轟木義一, 「フローレット五角形格子ハイゼンベルク反強磁性体が示す磁化ジャンプの理論的研究」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 2022 年 9 月 12-15 日, 東京工業大学 (ハイブリッド) .
- 25.利根川孝, 岡本清美, 野村清英, 坂井徹, 「次近接相互作用をもつ $S=1/2$ 強磁性-反強磁性ボンド交代鎖におけるネマティック TLL 相: 数値計算」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 2022 年 9 月 12-15 日, 東京工業大学 (ハイブリッド) .
- 26.岡本清美, 利根川孝, 野村清英, 坂井徹, 「次近接相互作用をもつ $S=1/2$ 強磁性-反強磁性ボンド交代鎖におけるネマティック TLL 相: 解析的考察」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 2022 年 9 月 12-15 日, 東京工業大学 (ハイブリッド) .
- 27.坂井徹, 古内理人, 中野博生, 岡本清美, 「強磁性相互作用のある異方的デルタ鎖の磁場誘起スピンネマティック液体」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 2022 年 9 月 12-15 日, 東京工業大学 (ハイブリッド) .
- 28.山田尊生, 坂井徹, 中西亮介, 古内理人, 中野博生, 兼安洋乃, 岡本清美, 利根川孝. 「異方的 $S=3/2$ 反強磁性鎖の磁化プラトー」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 2022 年 9 月 12-15 日, 東京工業大学 (ハイブリッド) .
- 29.中西亮介, 古内理人, 中野博生, 兼安洋乃, 岡本清美, 利根川孝, 坂井徹, 「異方性のある強磁性桁相互作用を持つスピンラダー系の量子相転移」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 2022 年 9 月 12-15 日, 東京工業大学 (ハイブリッド) .
- 30.中野博生, 轟木義一, 多田野寛人, 坂井徹, 「富岳を用いた量子スピン系の大規模並列数値対角化計算の現状」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 2022 年 9 月 12-15 日, 東京工業大学 (ハイブリッド) .
- 31.上田宏, 友成未久, 山本大輔, 下川統久朗, 「量子スピンソルバー-QS3 の高度化 II : 粒子数非保存系への応用」, 日本物理学会 2022 年秋季大会, 2022 年 9 月 12-15 日, 東京工業大学 (ハイブリッド) .

イブリッド)。

32. 引原俊哉, 上田宏, 奥西巧一, 原田健自, 西野友年, 「ネットワーク構造最適化を含んだツリーテンソルネットワーク法の開発」, 日本物理学会 2022 年秋季大会 2022 年 9 月 12-15 日, 東京工業大学 (ハイブリッド)。
33. S. Yunoki, “Digital quantum simulations of quantum many-body systems: Variational quantum algorithms and beyond”, International Conference on Recent Progress in Many-Body Theories XXI, Chapel Hill, USA (September 12-16, 2022).
34. 渡辺亮, 藤井啓佑, 上田宏, 「テンソルネットワーク法を活用した量子アルゴリズム開発」, QED summer school 2022, 2022 年 9 月 26 日, 恩納村 [Poster].
35. 曾田繁利, 遠山貴巳, 柚木清司, 松枝宏明, 「大規模並列密度行列繰り込み群法による量子計算シミュレーション」, 第 9 回「富岳」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会, 2022 年 10 月 13 日, オンライン。
36. 遠山貴巳, 曾田繁利, 柚木清司, 「光励起されたモット絶縁体の時間分解スピン構造因子の数値シミュレーション」, 第 9 回「富岳」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会, 2022 年 10 月 13 日, オンライン。
37. Yuichi Otsuka, “Universal critical behavior in Hubbard models with Dirac dispersion: Gross-Neveu-Heisenberg class”, 2nd Global Summit on Condensed Matter Physics, 2022 年 10 月 17 日-19 日, Dubai (ハイブリッド)。
38. S. Yunoki, “Quantum simulations of strongly correlated electrons”, RIKEN-Tsinghua-Kavli One-day Workshop on Condensed Matter Physics, Online (October 21, 2022).
39. 上田宏, 山本大輔, 下川統久朗, 「量子計算ソフトウェア QS3 の開発」, 第 7 回量子ソフトウェア研究発表会, 2022 年 10 月 27 日, 豊中市 (ハイブリッド)。
40. 宮本 幸一, 上田 宏, “Extracting a function encoded in amplitudes of a quantum state by tensor network and orthogonal function expansion”, 第 7 回量子ソフトウェア研究発表会, 2022 年 10 月 27 日, 豊中市 (ハイブリッド)。
41. T. Sakai: Spin Nematic Liquid of the $S=1/2$ Distorted Diamond Spin Chain in Magnetic Field, The 67th Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials (MMM2022), 2022 年 10 月 31-11 月 4 日, ミネアポリス (ハイブリッド)。
42. T. Sakai: Field-Induced Spin Nematic Liquid of Low-Dimensional Quantum Pin Systems, 第 6 回 QST 国際シンポジウム, 2022 年 11 月 14-15 日, 東京 (ハイブリッド)。
43. 坂井徹: 低次元量子スピン系の磁場誘起スピンネマティック液体, 強磁場科学研究会 マルチプローブ強磁場測定が解き明かす強相関物性, 2022 年 11 月 24-25 日, 東北大金研、東大物性研、阪大南部陽一郎ホール (ハイブリッド)。
44. S. Yunoki, “Quantum simulation for quantum many-body systems: variational quantum algorithms and beyond”, Quantum Innovation 2022, Online (November 28-30, 2022).
45. 中嶋隆人, “シミュレーションとインフォマティクスによる新材料設計・探索”, 早稲田大学 各務記念材料技術研究所 計算材料科学連続セミナー 電子材料第 2 シリーズ, オンライン, 2022 年 11 月 28 日, 11 月 29 日, 11 月 30 日。
46. S. Yunoki, “Photo-induced superconductivity by η pairs in a Mott insulator”, 11th Nonequilibrium Quantum Workshop, Krvavec, Slovenia (December 11-15, 2022).
47. 上田宏, 「テンソルネットワークによる量子状態圧縮技術の高度化」, さきがけ「革新的な量子情報 処理技術基盤の創出」研究領域 第 7 回領域会議, 2022 年 12 月 12 日, 千代田区 (ハイブリッド)。
48. S. Yunoki, “Encoding a quantum state by a quantum circuit for quantum-classical data transformation”, Quantum + Classical: Exploring new technological opportunities of the next-gen computing with Quantum, Tokyo, Japan (December 16, 2022).

	<p>49. 坂井徹：歪んだダイヤモンドスピン鎖の磁場誘起スピンネマティック液体，第18回量子スピン系研究会、2022年12月16-17日、浜坂（ハイブリッド）。</p> <p>50. 杉本貴則，上田宏，竹森那由多，「強制強磁性準結晶におけるスピン励起とフラストレーション効果」，新学術領域ハイパーマテリアル第9回領域会議，2022年12月20日，神戸市。</p> <p>51. 曾田繁利，「Research and development for quantum dynamics simulation by quantum computer」，さきがけ「革新的な量子情報処理技術基盤の創出」研究領域 第7回領域会議，2022年12月21日，千代田区（ハイブリッド）。</p> <p>52. H. Ueda, “Search for tree tensor networks matching the entanglement structure of quantum many-body states”, Transformative Research Areas A “Extreme Universe” Second Annual Meeting, 2022/ 12/ 28, Kobe (Hybrid).</p> <p>53. Katsumasa Nakayama, “Gapped or gapless, case of 2d CPl at $\theta=\pi$”, ISSP/IPMU/KEK informal meeting on “$\theta=\pi$”, 2023年1月25日，東大柏キャンパス。</p> <p>54. 中嶋隆人，”量子化学シミュレーションと材料インフォマティクス”，奈良先端科学技術大学院大学 データサイエンス特別講義，オンライン，2023年1月30日。</p> <p>55. S. Yunoki, “Quantum simulation for quantum many-body systems: variational quantum algorithms and beyond”，Quantum many-body systems in and out of equilibrium, Ljubljana, Slovenia (February 13-16, 2023).</p> <p>56. T. Tohyama, K. Tsutsui, K. Shinjo, and S. Sota, “Exciton-assisted low-energy magnetic excitations in a photoexcited Mott insulator on a square lattice”，APS march meeting 2023, 2023年3月6日-10日，Las Vegas, USA.</p> <p>57. 渡辺亮，藤井啓祐，上田宏，「ランダムスピン系の解析における1次元 Branching MERA の有用性検証と最適化手法の高度化」，計算物理春の学校 2023, 2023年3月13-15日，沖縄市（ハイブリッド） [Poster].</p> <p>58. 新城一矢，曾田繁利，柚木清司，遠山貴巳，「ハバード模型におけるスピン流テクスチャの研究」，日本物理学会 2023年春季大会，2023年3月23日，オンライン。</p> <p>59. 遠山貴巳，新城一矢，曾田繁利，柚木清司，「ダイマー相関が強いモット絶縁体の光誘起吸収スペクトル」，日本物理学会 2023年春季大会，2023年3月23日，オンライン。</p> <p>60. 宮腰祥平，杉本貴則，白川知功，上田宏，「量子回路エンコード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年3月23日，オンライン。</p> <p>61. 白川知功，上田宏，柚木清司，「テンソルネットワーク法に基づく量子多体状態の量子回路化」，日本物理学会 2023年春季大会，2023年3月23日，オンライン。</p> <p>62. 引原俊哉，上田宏，奥西巧一，原田健自，西野友年，「ネットワーク構造最適化を含んだツリーテンソルネットワーク法の開発 II」，日本物理学会 2023年春季大会，2023年3月23日，オンライン。</p> <p>63. 奥西巧一，上田宏，西野友年，「エンタングルメント分割と樹状テンソルネットワークの変分最適化」，日本物理学会 2023年春季大会，2023年3月23日，オンライン。</p> <p>64. 渡辺亮，藤井啓祐，上田宏，「ランダムスピン系の解析における1次元 Branching MERA の有用性検証と最適化手法の高度化」，日本物理学会 2023年春季大会，2023年3月23日，オンライン。</p> <p>65. 友成未久，上田宏，下川統久朗，山本大輔，「数値対角化による自発的対称性の破れの解析：量子スピンソルバーQS3」，日本物理学会 2023年春季大会，2023年3月24日，オンライン。</p> <p>66. 上田宏，「サブラティスコーディングによる量子スピンソルバーQS3の高速化」，日本物理学会 2023年春季大会，2023年3月25日，オンライン。</p>
課題5	<p>(Publications)</p> <p>*P. Olaya, S. Caino-Lores, V. Lama, R. Patel, A. Rorabaugh, O. Miyashita, F. Tama & M. Tauber, “Identifying Structural Properties of Proteins from X-ray Free Electron Laser</p>

Diffraction Patterns”, Proceedings of the 2022 IEEE 18th International Conference on e-Science (eScience), 21-31, 2022

R. Patel, A. Keller Rorabaugh, P. Olaya, S. Caino-Lores, G. Channing, C. Schuman, O. Miyashita, F. Tama & M. Taufer, “A Methodology to Generate Efficient Neural Networks for Classification of Scientific Datasets”, Proceedings of 2022 IEEE 18th International Conference on e-Science (eScience), 389-390, 2022

*M. Nakano, O. Miyashita Y. Joti, A. Suzuki, H. Mitomo, Y. Niida, Y. Yang, H. Yumoto, T. Koyama, K. Tono, H. Ohashi, M. Yabash, T. Ishikawa, Y. Bessho, K. Ijio, Y. Nishino & F. Tama, “Three-dimensional structure determination of gold nano triangles in solution using X-ray free-electron laser single-particle analysis”, *Optica*, 9, 776-784, 2022

*H. Asi, B. Dasgupta, T. Nagai, O. Miyashita & F. Tama, “A hybrid approach to study large conformational transitions of biomolecules from single particle XFEL diffraction data”, *Frontiers Mol. BioSci.*, 9i:913860, 2022

K. Nakata, N. Miyazaki, H. Yamaguchi, M. Hirose, T. Kashiwagi, N. H. V. Kutumbarao, O. Miyashita, F. Tama, H. Miyano, T. Mizukoshi & K. Iwasaki, “High-resolution structure of phosphoketolase from *Bifidobacterium longum* determined by cryo-EM single-particle analysis”, *J. Struct. Biol.*, 214, 107842, 2022

*R. Vuillemot, O. Miyashita, F. Tama, I. Rouiller & S. Jonic, “NMMD: Efficient cryo-EM flexible fitting based on simultaneous Normal Mode and Molecular Dynamics atomic displacements”, *J. Mol. Biol.*, 434, 167483, 2022

(Presentations / Invited)

Tama F, “Molecular mechanisms involved in the regulation of the Circadian Clock”, American Chemical Society National Meeting, San Diego, March, 2022

Tama F, “Integrative modeling to characterize structure and dynamics of (bio)molecules from single-molecule experiments”, Biophysics at the Dawn of Exascale Computers Hamburg, Germany, May, 2022

Tama F, “Hybrid modeling approaches to study structures and dynamics of biological systems”, Coarse-Grained Modeling of Structure and Dynamics of Biomacromolecules Workshop, Telluride, USA, July, 2022

Miyashita O, “構造生物学へのハイブリッドアプローチ：シミュレーションと実験データの融合”, 物性研短期研究会：理論と実験との密な協働, The University of Tokyo, July, 2022

Tama F, “Integrative modeling approaches to characterize dynamics of biomolecules: application to Atomic Force Microscopy”, AFM BioMed conference, Okazaki Conference Center, August, 2022

Tama F, “Integrative modeling to characterize the structure and dynamics of biomolecules”,

	<p>IUPAB Workshop on the Computational Biophysics of Atomic Force Microscopy, Kanazawa University, September, 2022</p> <p>Tama F, "Elucidating conformational states of biomolecules embedded within 2 dimensional experimental images", Frontier of Dynamic Structural Biology, Protein Research Institute, Osaka, October, 2022</p> <p>Tama F, "Integrative modeling to characterize structure and dynamics of (bio)molecules from single-molecule experiments", International Symposium: Research Clusters for Materials Science, Tohoku University, October, 2022</p> <p>Miyashita O, "構造生物学へのハイブリッドアプローチ: シミュレーションと実験データの融合", The 95th Annual Meeting of the Japanese Biochemical Society, Nagoya Congress Center, November, 2022</p> <p>(Presentations / Other Oral)</p> <p>Miyashita O, "Reconstruction algorithm of low-resolution three-dimensional conformations of biomolecules from atomic force microscopy images", American Chemical Society National Meeting, San Diego (online), March, 2022</p> <p>Zhao W, Miyashita O, Tama F, "3D structural determination of proteins from fluctuation X-ray scattering data", The 60th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Hakodate Arena, September, 2022 (selected for oral presentation)</p> <p>Raghavan SR, Tama F, Miyashita O, "Automated density extraction of isomorphous difference map and occupancy-estimation for conformer fitting", The 60th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Hakodate Arena, September, 2022 (selected for oral presentation)</p> <p>(Press release)</p> <p>溶液中ナノ粒子を3次元観察できるデータ処理手法-X線レーザーを用いた生体内に近い環境での構造観察に期待-, July 15, 2022 (https://www.riken.jp/press/2022/20220715_2/index.html)</p> <p>(Outreach)</p> <p>RIKEN Open Day 2022, Public lecture, 計算科学で探る生体分子の働き, October 29, 2022</p>
課題 6	<p>論文:</p> <ul style="list-style-type: none"> ・ Tokuhisa A, Akinaga Y, Terayama K, and Okuno Y, "Single-Image Super-Resolution Improvement of X-Ray Single-Particle Diffraction Images Using Convolutional Neural Network.", Journal of chemical information and modeling, 62.14, 3352-3364, 2022. ・ Kanada R, Terayama K, Tokuhisa A, Matsumoto S, and Okuno Y, "Enhanced conformational sampling with Adaptive coarse-grained elastic-network-model using short-time All-atom molecular dynamics." Journal of chemical theory and computation, 18.4, 2062-2074, 2022. ・ Takaba K, Watanabe C, Tokuhisa A, Akinaga Y, Ma B, Kanada R, Araki M, Okuno Y, Kawashima Y, Moriwaki H, Kawashita N, Honma T, Fukuzawa K, Tanaka S, "Protein-Ligand Binding

	<p>Affinity Prediction of Cyclin-Dependent Kinase-2 Inhibitors by Dynamically Averaged Fragment Molecular Orbital-Based Interaction Energy.” <i>Journal of Computational Chemistry</i>, 43 (20), 1362–1371, 2022.</p> <p>学会：</p> <ul style="list-style-type: none"> ・奥野恭史. スーパーコンピュータ・AIによるデータ駆動型創薬の実現を目指して, 第119回 未来医療セミナー, 2022年7月11日, オンライン開催, 口頭 ・奥野恭史. 「富岳」創薬DXプラットフォーム構想の実現に向けて, 第4回理研DMP創薬セミナー, 2022年7月26日, オンライン開催, 口頭 ・奥野恭史. 創薬デジタルトランスフォーメーションに向けて, 第72回日本薬学会関西支部総会・大会, 2022年10月8日, 摂南大学薬学部枚方キャンパス(大阪府枚方市), 口頭 ・奥野恭史. DXによる創薬イノベーション, 創薬薬理フォーラム第30回シンポジウム, 2022年9月13日, 長井記念ホール(東京都渋谷区), 国内、口頭 ・奥野恭史. 「富岳」を基軸としたライフサイエンスDXに向けて, 科技ハブ共同研究プログラム2022年度合同ワークショップ, 2022年11月4日, 理化学研究所(兵庫県神戸市), 国内、口頭 ・奥野恭史. AIが拓くデータ駆動型ヘルスケアの未来, 医療・創薬・ヘルスケアにおけるDXーLINCの紹介と兵庫県、神戸市企業との連携に向けてー, 2022年11月14日, 三井住友銀行 神戸本部ビル(兵庫県神戸市), 国内、口頭 ・奥野恭史. AIとシミュレーションの融合で目指す創薬DX, 第39回メディシナルケミストリーシンポジウム, 2022年11月24日, オンライン開催, 口頭 ・徳久淳師. Multi-conformational analysis of biomolecule by the template-matching method using the supercomputer Fugaku. 第60回日本生物物理学会年会 2022年9月28日-30日. 函館アリーナ(北海道函館市) 国内、口頭(招待講演) ・徳久淳師 「スーパーコンピュータ「富岳」を用いたプレートマッチング法による生体分子構造多形解析」第26回FMO研究会 2022年3月8日 オンライン開催, 口頭(招待講演) ・Kanada R, Terayama K and Tokuhisa A, “Efficient Parameter Search for Coarse Grained Simulation by Machine Learning Methods”, The 4th R-CCS international Symposium, February, 2022., https://www.r-ccs.riken.jp/R-CCS-Symposium/2022/ <p>プレス発表：</p> <ul style="list-style-type: none"> ・“Fujitsu and RIKEN start joint research on next-generation IT drug discovery technology using the supercomputer Fugaku and simulation integrated AI”, May 17, 2022, (https://www.fujitsu.com/global/about/resources/news/press-releases/2022/0517-01.html) <p>本：</p> <ul style="list-style-type: none"> ・Book Chapter ”Handbook of Cryo-Electron Microscopy”, NTSinc., ISBN 978-4-86043-804-3 C3047, 2023.
課題7	<p>査読付き国際会議</p> <p>[1]R. Yoda, M. Bolten, K. Nakajima, A. Fujii, Acceleration of Optimized Coarse-Grid Operators by Spatial Redistribution for Multigrid Reduction in Time, <i>Proceedings of ICCS 2022</i>, 2022</p> <p>[2]S. Sumimoto, T. Arakawa, Y. Sakaguchi, H. Matsuba, H. Yashiro, T. Hanawa, K. Nakajima, A System-Wide Communication to Couple Multiple MPI Programs for Heterogeneous Computing, <i>Research Poster, EuroMPI/USA 2022</i>, 2022</p> <p>[3]S. Sumimoto, T. Arakawa, Y. Sakaguchi, H. Matsuba, H. Yashiro, T. Hanawa, K. Nakajima, A System-Wide Communication to Couple Multiple MPI Programs for Heterogeneous</p>

Computing, PDCAT2022 (Best Paper Award)

招待講演

- [4]中島研吾, HPC+AI 融合最前線: 新興 AI 勢力の HPC 戦略, HPCwire Japan セミナー, 2022
- [5]K. Nakajima, Innovative Scientific Computing by Integration of (Simulation + Data + Learning) in Information Technology Center, The University of Tokyo, NHR PerfLab Seminar, 2022
- [6]中島研吾, 「計算・データ・学習」融合とポストコロナ時代のスーパーコンピューティング, PC クラスタワークショップ in 神戸 2022 「クラウドと HPC」, 2022
- [7]K. Nakajima, T. Iwashita, H. Yashiro, H. Nagao, T. Shimokawabe, T. Ogita, T. Katagiri, H. Matsuba, h3-Open-BDEC: Innovative Software Infrastructure for Scientific Computing in the Exascale Era by Integrations of (Simulation + Data + Learning), MSI404: Progress & Challenges in Extreme Scale Computing & Big Data, WCCM-APCOM Yokohama 2022 (online), 2022
- [8]中島研吾, 住元真司, 八代尚, 荒川隆, 松葉浩也, h3-Open-BDEC: 「計算・データ・学習」融合による革新的スーパーコンピューティング, RIMS 共同研究: 数値解析が拓く次世代情報社会～エッジから富岳まで～, 2022
- [9]寺尾 剛史, 固有値分解に対する混合精度計算と精度保証法, RIMS 共同研究 (公開型) 数値解析が拓く次世代情報社会～エッジから富岳まで～, 2022
- [10]K. Nakajima, T. Iwashita, H. Yashiro, H. Nagao, T. Shimokawabe, H. Matsuba, T. Ogita, T. Katagiri, h3-Open-BDEC: Innovative Software Infrastructure for Scientific Computing in the Exascale Era by Integrations of (Simulation + Data + Learning), The 31st International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (ITC31), 2022

口頭発表等

- [11]依田凌, M. Bolten, 中島研吾, 藤井昭宏, MGRIT の粗格子演算子に対する Runge-Kutta 法の係数最適化とその高速化, 情報処理学会研究報告 2022-HPC-185 (8), 2022
- [12]A.T. Magro, K.Nakajima, An Optimization Method for Solving Sparse Linear Systems using Lower Dimension Estimators, 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 (MEPA), 2022
- [13]寺尾剛史, 荻田武史, 悪条件連立 1 次方程式に対する混合精度直接法の高速化日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 (MEPA), 2022
- [14]中島研吾, Wisteria/BDEC-01 (Odyssey) における前処理付き反復法の高速化, 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 (MEPA), 2022
- [15]河合直聡, 中島研吾, ILUT 前処理への低・任意精度の適用可能性の検討, 日本応用数学会「行列・固有値問題の解法とその応用」研究部会 (MEPA), 2022
- [16]住元真司, 荒川隆, 坂口吉生, 松葉浩也, 八代尚, 塙敏博, 中島研吾, Wisteria/BDEC-01 における異種システム間連成計算実行環境, 情報処理学会研究報告 2022-HPC-185 (21), 2022
- [17]Y.C. Chen, K. Nakajima, A Parallel-in-Time Method for Compressible Fluid Explicit Simulation, IPSJ SIG Technical Report, 2022-HPC-185-27, 2022
- [18]寺尾剛史, 尾崎克久, 今村俊幸, 固有値分解に対する 2 ステップ型反復改良法, 日本応用数学会 2022 年度年会
- [19]寺尾剛史, 今村俊幸, 縦長行列に対する混合精度 Cholesky QR アルゴリズム, 日本応用数学会 2022 年度年会
- [20]中島研吾, 通信・計算オーバーラップによる並列多重格子法並列化, 日本応用数学会 2022 年度年会
- [21]住元真司, 荒川隆, 坂口吉生, 松葉浩也, 八代尚, 塙敏博, 中島研吾, WaitIO-Hybrid: 共有

	<p>ファイルシステムと Socket を併用可能なシステム間通信ライブラリ, 情報処理学会研究報告 2022-HPC-187 (6), 2022</p> <p>[22]中島研吾, 通信・計算オーバーラップによる並列多重格子法, 情報処理学会研究報告 2022-HPC-187 (13), 2022</p> <p>[23]A. Naruse, J.D. Trotter, J. Langguth, X. Cai, K. Nakajima, High resolution simulation of cardiac electrophysiology on realistic whole-heart geometries on Wisteria/BDEC-01 (Aquarius), 情報処理学会研究報告 2022-HPC-187 (15), 2022</p> <p>[24]中島研吾, 東大情報基盤センターの目指す『計算・データ・学習』の融合による革新的スーパーコンピューティング, PCCC22 「HPC システム技術の最前線」, 2022</p> <p>[25]K. Nakajima, Integration of 3D Earthquake Simulation & Real-time Data Assimilation, EU-ASEAN High-Performance Computing (HPC) School 2022, 2022</p> <p>[26]中島研吾, 「計算・データ・学習」融合を推進する 革新的基盤ソフトウェア「h3-Open-BDEC」, 第14回自動チューニング技術の現状と応用に関するシンポジウム (ATTA2022), 2022</p>
課題 8	<p>[1] Feiyuan Liang, Qinglin Yang, Ruiqi Liu, Junbo Wang, Kento Sato, Jian Guo, "Semi-Synchronous Federated Learning Protocol with Dynamic Aggregation in Internet of Vehicles," in IEEE Transactions on Vehicular Technology, doi: 10.1109/TVT.2022.3148872, Feb., 2022</p> <p>[2] Kento Sato, "The Supercomputer Fugaku - AI and Big Data", A Workshop on Modeling Materials at Realistic time Scales via Optimal Exploitation of Exascale Computers and Artificial Intelligence, July 25, 2022</p> <p>[3] Kento Sato, "Project Talks 4: Compression for instruments - TEZip: A Data Compression Tool for Time Evolutionary Data", September 30, 2022</p> <p>[4] Takaaki Fukai, Kento Sato and Takahiro Hirofuchi, "Analyzing I/O Performance of a Hierarchical HPC Storage System for Distributed Deep Learning", The 23rd International Conference on Parallel and Distributed Computing, Applications and Technologies (PDCAT'22), December, 2022, Sendai, Japan</p> <p>[5] Xi Zhu, Junbo Wang, Wuhui Chen, Kento Sato, "Model compression and privacy preserving framework for federated learning", Future Generation Computer Systems, 2022, ISSN 0167-739X., March 2023</p>
課題 9	<p>・論文</p> <p>(1)Y. Kimura, T. Seki, S. Miyata, Y. Arai, T. Murata, H. Inoue, and N. Ito, "Hot-spot analysis of Covid-19 infection using mobile-phone location data", Artificial Life and Robotics 誌掲載予定。</p> <p>・学会発表</p> <p>(2)Keisuke Chujo, Tatsunori Seki, Toshiki Murata, Yu Kimura, Tomoaki Sakurai, Satoshi Miyata, Hiroyasu Inoue and Nobuyasu Ito, "Regional trends in the number of COVID-19 cases", 28th International Symposium on Artificial Life and Robotics(AROB 28th 2023), 8th International Symposium on BioComplexity(ISBC8), and 6th International Symposium on Swarm Behavior and Bio-Inspired Robotics(SWARM5) (Beppu, Japan, January 25-27, 2023)</p> <p>(3)Tatsunori Seki, Keisuke Chujo, Yu Kimura, Toshiki Murata, Tomoaki Sakurai, Satoshi Miyata, Hiroyasu Inoue and Nobuyasu Ito, "Prediction of COVID-19 Using SIR and AR models: Tokyo and nation-wide cases", 28th International Symposium on Artificial Life and Robotics(AROB 28th 2023), 8th International Symposium on BioComplexity(ISBC8), and 6th International Symposium on Swarm Behavior and Bio-Inspired Robotics(SWARM5)</p>

	<p>(Beppu, Japan, January 25-27, 2023)</p> <p>(4) Daigo Umemoto, Maiko Kikuchi, Ayako Terui, Koutarou Abe, Ryuushi Shimizu, Katsuki Hirashige, Nobuyasu Ito and Itsuki Noda, "Urban scale pedestrian simulation in Kobe City center", 28th International Symposium on Artificial Life and Robotics (AROB 28th 2023), 8th International Symposium on BioComplexity (ISBC8), and 6th International Symposium on Swarm Behavior and Bio-Inspired Robotics (SWARM5) (Beppu, Japan, January 25-27, 2023)</p> <p>・その他</p> <p>(5) 伊藤伸泰「感染予防と創薬に光明をもたらす世界最高速のスーパーコンピュータ「富岳」、聖路加国際大学看護学研究科総合科目「いのちを健康で彩る智慧 (Health Humanities への招待)」(2021年8月3日)</p> <p>(6) 理化学研究所・ドコモ・神戸市「都市計画や防災計画に資する、「富岳」を活用したデジタルツインシミュレーション」(2023年1月17日)</p> <p>(7) 神戸市・ドコモ・理研「デジタルツインシミュレーション」取り組み紹介動画 https://www.youtube.com/watch?v=8PsnLxF0tMw</p>
--	--

[2021年度]

課題1	<p>■著書出版 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>
課題2	<p>■神戸大学との連携成果 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. 6, 3858-3863 (2021). 10.1021/acsenerylett.1c01798 他2件</p> <p>■京都大学との連携成果 T. Nakajima, K. Hirao, B. Chan, "Higher-order transition state approximation", J. Chem. Phys. 156, 114112 (2022). 10.1063/5.0086173 他3件</p> <p>■大阪大学との連携成果 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. 793, 139439 (2022). 10.1016/j.cplett.2022.139439 他2件</p> <p>■华中科技大学との連携成果 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>■関西学院大学との連携成果</p>

	<p>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>■その他 (*県市 COE が謝辞に入っている成果のみ) 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 & 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>
課題 3	<p>■論文発表 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>■学会発表 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>■その他出版物 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) 他 2 件</p>
課題 4	<p>【論文】 (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. 126, 157202/1-6 (2021). 他 23 件</p> <p>【記事・総説・解説・論説等 (商業誌、新聞、ウェブメディア)】 (課題参加者に下線) <u>西野友年</u>, 「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). 他 3 件</p> <p>【講演・口頭発表など】 (課題参加者に下線) <u>中村宜文</u>, 講義 “Computational fundamental physics 1・2”, 神戸大学大学院システム情報学研究所・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. 他 27 件</p>
課題 5	<p>■Publications 2021</p> <p>Accepted 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. High-resolution structure of phosphoketolase from Bifidobacterium longum determined by cryo-EM single-particle analysis. <i>J. Struct. Biol.</i> 他 1 件</p> <p>Published M. Kuzuya, H. Hirano, K. Hayashida, M. Watanabe, K. Kobayashi, T. Terada, Md. I. Mahmood, F. Tama, K. Tani, Y. Fujiyoshi and A. Oshima. Structures of human pannexin-1 in nanodiscs</p>

	<p>reveal gating mediated by dynamic movement of the N-terminus and phospholipids <i>Science Signaling</i> 2022 他 5 件</p> <p>■Presentations Biophysics at the Dawn of Exascale Computers, Hamburg Germany May 24 -28, 2021 (invited talk, cancelled) 他 9 件</p> <p>■Lectures Intensive Lecture [Life Science Special Lecture] Aug 8-9 (Hyogo University) 他 1 件</p>
課題 6	<p>Artificial Intelligence in Medicine. 1-9, 2021 他 11 件</p>
課題 7	<p>■原著論文 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 他 2 件</p> <p>■査読付き国際会議 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>■招待講演 Nakajima K., Iwashita T., Yashiro H., Shimokawabe T., Nagao H., Matsuba H., Ogita T., Katagiri T., Wisteria/BDEC-01 & 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>■口頭発表等 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, http://xfel.riken.jp/users/bml09-1.html (2021 年 5 月 14 日) 他 14 件</p>
課題 9	<p>榎本大悟・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>