

2022年度におけるRISTの動き

I まえがき

当財団は、情報科学技術の高度化、大規模高速計算機の利用技術の開発、原子力分野のコード、データベース等の調査収集・整備提供を総合的に推進してきた。近年においては、先端的スーパーコンピュータの進展に即応する科学技術研究用ソフトウェア等の高度化開発を通じて、先進的科学技術の発展に寄与している。

2022年度においては、特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律に基づく登録施設利用促進機関として、特定高速電子計算機施設の利用促進業務を引き続き推進するとともに、文部科学省科学技術試験研究委託事業「HPCIの運営」を代表機関として実施し、画期的な研究成果の創出及び科学技術の発展や産業競争力強化、並びにハイパフォーマンス・コンピュータ利用の裾野の拡大に貢献した。

情報科学技術の高度化では、国立研究開発法人日本原子力研究開発機構（以下「原子力機構」という。）が進める原子力研究開発に供する各種原子力コードの高度化開発を実施するとともに、民間企業、大学等と大規模シミュレーション技術の研究開発を実施した。また、文部科学省の民間委託事業「研究開発推進事業等の実施に係る運営管理業務（研究振興事業に関する課題の運営管理業務）」を実施した。

大規模高速計算機の利用技術の開発では、原子力機構及び国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構（以下「量研」という。）の大型計算機運用の技術支援を実施した。

原子力分野の解析コードに関する情報の調査収集・整備提供では、原子力コードの調査収集と産業界を含む国内ユーザへの提供を実

施した。

これらの事業の推進にあたっては、定款に基づき一般財団法人としての適正な法人運営を図ってきた。新型コロナウイルス感染症対策については、各事業所周辺の感染状況等に即応し、在宅勤務化、各種会議・講習会のオンライン開催等を適宜実施し、当初計画通り事業を進めた。また、特定高速電子計算機施設の利用促進業務及びHPCIの運営業務については、国及び特定高速電子計算機施設設置・運営主体者である国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究センター（以下「理研R-CCS」という。）並びに9大学の情報基盤センター、2大学共同利用機関法人及び3国立研究開発法人（以下「HPCIシステム構成機関」という。）等と緊密に連携協力し、利用者本位の業務運営に努めた。その際、業務をより効率的・効果的に実施する観点から、当財団内に外部有識者によるアドバイザー委員会を設置し、PDCAサイクルを回しながら業務を実施した。当財団の業務に係る情報資産の保存・管理体制については、情報セキュリティマネジメントシステム（ISO/IEC27001:2013（JIS Q 27001:2014））の考え方に基づき、その維持、改善を継続的に進めた。

2022年度事業計画に従い実施した個別事業は、以下のとおりである。

II 事業内容

1. 特定高速電子計算機施設の利用促進業務

(1) 利用者選定業務

選定委員会及び利用研究課題審査委員会を開催し、国が定める方針等を踏まえ、「富岳」の利用制度等の検討、設定を行ったほか、2022年度B期、2023年度A期の「富岳」定期課題及び「富岳」随時募集

課題の募集・選定等を行った。

- ①2022年度B期の「富岳」利用研究課題定期募集（年2回のうち2回目）を行い、レビュアー審査、利用研究課題審査委員会及び選定委員会の審議を経て、「富岳」のB期課題として申請51課題のうち28課題を選定した。なお、「富岳」一般課題においては、政府の方針等を踏まえて重点的に推進する研究分野を重点分野として募集し、採択に優位性を持たせつつ申請3課題のうち2課題（いずれも上記の内数。）を当該分野の課題として選定した。
- ②2023年度A期の「富岳」を中核とするHPCIシステム利用研究課題定期募集（「富岳」は年2回のうち1回目）を行い、レビュアー審査、利用研究課題審査委員会及び選定委員会の審議を経て、「富岳」のA期課題として申請99課題のうち68課題を選定した。「富岳」一般課題の重点分野については、申請15課題のうち12課題（いずれも上記の内数。）を当該分野の課題として選定した。
- ③2023年度B期の「富岳」利用研究課題定期募集を開始した。
- ④「富岳」において、定期募集と比較して小規模な計算資源を速やかに必要とする課題を対象に、随時募集課題のうち機動的課題（一般/若手/産業）及び試行課題（一般/産業）の募集を行うとともに、試行課題（一般/産業）において小規模な計算資源を使用する場合の手続きを簡素化した試行課題（ファーストタッチオプション）の募集を実施した。2022年度は、機動的課題については、申請19課題のうち11課題を採択した（残り8課題は審査中）。また、試行課題については、申請62課題のうち62課題を、試行課

題（ファーストタッチオプション）については、申請80課題のうち79課題を採択した（残り1課題は審査中）。なお、2022年度、「富岳」有償課題・試行有償課題（一般/産業）については、申請7課題があり、6課題を採択した（残り1課題は審査中）。

- ⑤「富岳」の大規模並列ジョブ実行性能を最大限活用するため、全系規模実行による革新的・先進的な研究に挑戦する課題募集を実施し、2022年度は、申請6課題のうち4課題を採択した。
- ⑥「富岳」を活用した2022年度成果創出加速課題22課題、政策対応利用課題3課題及びSociety5.0推進利用課題1課題に係る利用手続きの支援等を行った。
- ⑦シンガポールのNSCC（The National Supercomputing Centre Singapore, Science And Engineering Institute）との協定に基づき、11月にシンガポール在住の研究者向けに、2023年度の「富岳」利用プロジェクトを募集し、申請15課題のうち5課題を採択した。また、ASEAN-HPCを推進するA*CRC（A*STAR Computational Resource Centre）がASEAN-HPC参加国の研究者による研究課題を取りまとめて課題代表者として「富岳」随時募集課題に応募する取り組みを当財団は理研R-CCSと共に適宜支援し、その結果11課題が採択された。
- ⑧光熱費の高騰に伴う「富岳」の一部ノード停止の措置が、7月27日から11月8日になされたため、利用者への周知、計画的な利用の要請等の対応を行った。

(2) 利用支援業務

1) 情報支援

- ①「京」又は「富岳」を中核とするHPCI計算資源の利用成果の公開情

報を一元的にまとめた公開データベース（HPCI成果発表データベース）に登録された成果発表件数は、2022年度末で通算10,408件（うち、査読付き論文数は3,086件）に達した。

- ②2021年度末終了の「富岳」又はHPCIの一般課題や産業課題、「富岳」試行課題（ファーストタッチオプションを含む）等を中心に、これら課題の利用報告書374件（2022年度末で通算2,292件）をHPCIポータルで公開した。利用報告書のダウンロード数は、2022年度末で通算220,724件に達した（2022年度は28,413件）。利用報告書をダウンロードしている企業は1,400社あり、その業種は東京証券取引所の33業種中32業種に及ぶなど、成果の公表・普及が着実に進展した。
- ③HPCI利用研究成果集（当財団発行の査読付き電子ジャーナル）に通算91編の論文が掲載され、全体のダウンロード（DL）数は10,565回（参考：Botを含むと112,531回）、うちDL数トップ論文のDL数は586回（参考：同3,906回）に達した。
- ④広報サイト「富岳百景」上に、Webマガジン「富岳百景」のvol.8～11を公開し、「富岳」の利用に関心を持つ研究者、技術者に情報発信した。
- ⑤話題性のある研究や活動等についてのインタビューを10分程度のYouTube動画に編集して、2022年度においては計6本を一般に向けて情報発信した。
- ⑥HPCIポータルサイト利用者のアクセシビリティ向上、情報発信力の強化を図るため、当該サイトの構成・デザインの再構築を行った。

2) 技術支援

- ①利用支援のための一元的窓口として設置したヘルプデスクを活用し、利用者にワンストップ・サービスを提供することで効率的な利用を支援するとともに、プログラム移植等の技術支援、プログラム性能の分析評価等の高度化支援・利用前技術支援を合計23課題実施した。

- ②利用者の利便性向上等を目指して、オープンソースソフトウェアや国家プロジェクトとして開発されたプログラム（以下、「国プロアプリ」という。）の利用環境整備を進めた。

3) その他の支援

①講習会等

「富岳」の利用技術の習得等を目的とした初級・中級講習会及び産業界で利用が多いLAMMPS、Quantum ESPRESSO、OpenFDTD、FDSの入門講習会を合計14回主催（共催を含む）した。これらの講習会等への参加者は、下記の②に示すワークショップ、チューニング技術検討会を含めて延べ1,114名で、そのうち産業界からの参加者は5割を超えるなど、産業利用の推進にも着実に貢献した。

②セミナー・シンポジウム等

HPCIシステム利用研究課題成果報告会（2022年10月）をオンラインで開催し、497名の参加を得た。また、材料系分野やCAE分野に特化したワークショップ（2022年10月（参加257名）、2023年2月（参加363名）、3月（参加117名））をオンラインで開催し、産業利用事例や利用技術に関する情報提供を行うとともに、利用者間の情報交流を図った。さらに、「富岳」の効率的な利用を

促すため、チューニング技術の普及を目的としたA64FX向けチューニング技術検討会(2022年4月(参加57名)、7月(参加23名)、11月(参加30名)、2023年2月(参加16名))を、理研R-CCSと共同でオンライン形式にて開催した。

2014年度から原則毎年開催している「大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム」について、公益財団法人高輝度光科学研究センター(JASRI)及び一般財団法人総合科学研究機構(CROSS)とともに、第8回のシンポジウム(2022年9月(参加71名))を東京秋葉原で開催した。

分野ごとの研究者の情報共有・交流の場として、スパコンコロキウムを計4回(2022年5月、7月、10月、2023年3月)開催した。

「富岳」成果創出加速プログラムの成果をわかりやすく発信するための公開シンポジウムを2022年12月に、本プログラムに関わる研究者間の情報交換・交流を深め、研究の発展と人材育成につなげるための研究交流会を2023年3月に開催した。

③展示会等

「富岳」及びHPCIの利用促進に向け、ISC2022にオンライン展示(2022年5～6月)、SC22にオンライン展示(11月)、SCAsia2023(2023年2～3月)に現地出展し、海外向けに情報提供、情報発信を行った。また、国際フロンティア産業メッセ2022(2022年9月)に出展し、産業界向けに情報提供、情報発信を行った。

④アウトリーチ活動

青少年の科学技術への理解増進、将

来のHPCI利用者となる研究技術者育成を目的に、高校生を対象にした「スパコン「富岳」体験塾」(2022年8月)を開催し、計14名が参加したほか、「はじめてのプログラミング」(2023年3月)を開催し、13名が受講した。その他、神戸市主催の「神戸医療産業都市一般公開」(2022年10月)において、計算機歴史博物館動画等を出展した。

⑤当財団、欧州のPRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe)、米国のXSEDE (eXtreme Science and Engineering Discovery Environment) との三者間の覚書に関し、XSEDEプロジェクトが2022年8月に終了したため、当該プロジェクトを継承したACCESS (Advanced Cyberinfrastructure Coordination Ecosystem: Services & Support) との連携、協力の検討を進めた。

⑥スーパーコンピュータの共用促進に係る情報交換に関するシンガポール国立スーパーコンピューティングセンター(NSCC)と当財団との覚書が有効期限を迎えるため、2022年6月に延長手続きを行った。

2. HPCIの運營業務

当財団は、文部科学省科学技術試験研究委託事業「HPCIの運営」の中核的役割を担う代表機関として、理研R-CCS、国立大学法人東京大学情報基盤センター(以下「東大情報基盤センター」という。)、国立大学法人筑波大学計算科学研究センター(以下「筑波大-CCS」という。)、大学共同利用機関法人情報・システム研究機構国立情報学研究所(以下「NII」という。)、及び公益財団法人計算科学振興財団(以下

「FOCUS」という。) からの分担機関に一部業務を再委託し、総合調整を図りつつこれら分担機関と緊密かつ一体的に連携した体制を構築して以下の業務を主体的に実施した。

(1) HPCIの運営企画・調整

1) 分担機関の総合調整等

HPCIの運営に係る代表機関として、受託再委託業務を効率的に統括し、分担機関等との連絡窓口を設けて、文部科学省等との連絡体制の下、調整を行った。特に、HPCI共用ストレージ等(東拠点)の運用、保守(再委託先: 東大情報基盤センター)において、電子機材の供給不足による設備整備の年度繰越が必要となったため、再委託先及び文部科学省と綿密に調整を行い、契約期間を2024年1月31日まで延長するとともに進捗状況管理を継続して実施した。

2) 今後の運営の在り方に関する調査検討
HPCIシステムの今後の運営の在り方に関する調査検討ワーキンググループを設置して、一般社団法人HPCIコンソーシアムの協力の下、「次世代計算基盤に係る調査研究(FS)で調査・検討が必要と思われる課題」、「HPCIの成果最大化に向けて来年度WGで検討すべき課題」をテーマに5回にわたり議論を行うとともに、当該テーマについての意見交換会を行った。

3) 技術企画・調整

HPCIシステム構成機関等から構成されるHPCI連携サービス委員会及びHPCI連携サービス運営・作業部会等を開催し、HPCIシステムの運用に際して生じる技術的不具合の原因究明・対応策の検討、HPCIシステム全体の運用に係るソフトウェアの改良に関する検討等を実施し、多様なニーズに応

えるHPCIシステムの運用環境維持を実施するとともに、一部のHPCIシステム構成機関が運用するサーバへの不正侵入事案への対応、次期認証基盤システムの検討や共用ストレージの新たな利用に関する議論を進めるなど、分担機関と密接に連携して検討を行った。

(2) HPCIの利用促進

1) 課題選定及び共通窓口の運用

①HPCI共用計算資源を利用する2023年度研究課題として、申請94課題(「富岳」との同時利用として申請のあった課題を含む)の中から63課題を選定した。選定に際しては、光熱費高騰に伴う利用負担金の上昇による採択率の低下をできるだけ回避するよう考慮した。また、2022年度の随時募集課題については、HPCI産業試行課題に2課題、HPCI産業有償課題に1課題、HPCI共用ストレージ(共有型)利用研究課題に6課題の申請があり、いずれも選定した。

②HPCI共用計算機資源を活用した新型コロナウイルス(COVID-19)を含む感染症対応HPCI臨時公募(随時受付)を2022年度は、12月まで募集を行い、1課題の申請を受け付け、1課題を選定した。

③HPCI計算資源及びJHPCN計算資源の利用に伴う利用負担金の支払いについては、HPCIシステム構成機関及びJHPCN(JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点事業)参加機関からの請求に基づき、適宜支払い事務を実施した。

2) 産業利用促進

①産業界における利用拡大・人材育成を目的とした伴走型利用支援では、

2022年度上期に2件、下期に2件の支援を行った。2023年度上期の支援依頼の募集を行い、1件を採択した。また、2023年度からは2か月以内の短期の支援依頼を常時受け付ける随時型を新設し、支援依頼の募集を開始した。

- ②産業利用促進のための利用環境として当財団の東京事務所内に設置した「富岳」及びHPCIシステムへのアクセスポイント（アクセスポイント東京）を運用し、HPCIシステムの利用前相談や利用相談、高並列計算の指導・助言、対面認証などの目的でリモートを含めた2022年度の利用者数は106名で延べ227名に利用された。また、第3回HPCIフォーラム～産業利用の広場～（2022年11月）を始め、セミナーやシンポジウム等をオンラインで開催し、HPCIの産業利用に関するPR活動を実施するとともに、その都度、産業利用相談会を開催して新規利用者の開拓を行い、課題応募につながる成果を得た。なお、神戸のアクセスポイントの設置及び運用は、FOCUSに再委託して、代表機関との調整のもと実施した。

- ③従来、新規利用企業の応募拡大のために発行していた「はじめてのHPCI」の後継として、新規利用企業へのインタビューに限らず産業利用全般の情報を発信する「Hello! 「富岳」～産業利用の広場～」を創刊し、2刊発行した。

3) 技術支援

- ①プログラム移植等の技術支援、プログラム性能の分析評価等の高度化支援・利用前技術支援等を合計1課題について実施した。

- ②国プロアプリの利用環境整備を進めるとともに、国プロアプリの普及を目指して、開発グループや整備先のHPCIシステム構成機関と連携してプログラムのハンズオン講習会を7回（2022年6月、9月、11月（2回）、2023年1月、2月、3月）開催し、延べ73名が参加した。また、HPCI利用者の裾野を広げるHPCプログラミングセミナーを16回（2022年5月（4回）、6月（2回）、7月（2回）、10月（4回）、12月（4回））開催し、合計252名が参加した。

(3) HPCIシステムの運用

- 1) HPCI共用ストレージ等の運用・保守・機能整備
本事業は、東大情報基盤センター、理研R-CCS及び筑波大-CCSに再委託して、代表機関との調整のもと実施した。
- 2) HPCI認証局の運用、保守
本事業は、NIIに再委託して、代表機関との調整のもと実施した。
- 3) 課題選定及び共通窓口に関する基盤システムの機能整備、保守
HPCIヘルプデスクシステム、HPCI情報共有コンテンツマネジメントシステム（CMS）等の機能整備、保守を実施した。

3. 大型計算機システム及びネットワークシステムの運用支援

原子力機構の大型計算機システム、ネットワークシステム、情報セキュリティ対策システム、及びIT化を推進するための各種情報システムの運用に係る技術支援を実施した。

量研の大型計算機システム及びネットワークシステムの運用に係る技術支援を実施した。

これらにより、各システムの利用者に対

する円滑かつ継続的な利用支援サービスの提供に大きく貢献した。

4. 情報科学技術の高度化に関する研究開発・調査

(1) 原子力研究開発コードの高度化に関する研究・調査

- ①原子力機構と協力して開発を進めている粒子・重イオン輸送コードシステムPHITSを使用して、福島第一原子力発電所事故によって拡散した放射性物質の放射線量からその周辺の地域における核種分布を推定するシステムの開発、画像データから構造物を認識し空間線量率を評価するシステムの開発、原子炉建屋内で観測される放射線量から機械学習を用いて高線量線源を逆推定するシステムの開発、核燃料輸送物、使用済燃料貯蔵容器及び使用済燃料貯蔵施設の許認可におけるPHITSコードに係るコード検証及び分散低減機能の高度化、自発核分裂中性子線源のRI線源への組み込み、核データライブラリの断面積出力等の新機能開発を実施した。
- ②PHITSの原子力分野以外への応用として、粒子線がん治療施設の遮蔽設計や放射化評価、宇宙放射線の遮蔽評価等を実施した。
- ③原子力機構のスーパーコンピュータで利用される原子力研究開発コードの開発・改良、計算結果の評価手法の開発及び可視化ソフトウェアの開発・改良を実施した。また、原子力機構の研究者等が開発・整備した各種の原子力研究開発コードのチューニング及び並列化による高速化を実施した。
- ④量研が進める核融合研究に対して、原型炉開発に求められる第一原理系シミュレーションコードや設計に応用さ

れるシステム系シミュレーションコードの計算モデル拡張や新機能実装、インターフェースソフトウェア開発を実施した。

(2) 大規模シミュレーション技術の開発・研究

ナノ材料の分野で、新アルゴリズム・計算手法のシミュレーションソフトウェアへの実装、次世代材料開発を目的としたシミュレーションの産業応用など、ソフトウェア開発から実用化研究までスーパーコンピュータを活用して以下のとおり実施した。

- ①防衛装備庁「安全保障技術研究推進制度」で採択された「高強度CNTを母材とした耐衝撃緩和機構の解明と超耐衝撃材の創出」に筑波大学、住友電気工業株式会社と取り組み、衝撃緩和現象に関するシミュレーション研究を実施し、高強度CNTを衝撃緩和溶液に分散させる手法を分子動力学シミュレーションで明らかにし、その成果を論文発表した。
- ②産業界との実践的なシミュレーションとして、総合電機メーカーと非線形光学材料の特性評価のための研究開発を、また食品・アミノ酸メーカーとタンパク質の精製効率化のための研究開発、薬剤メーカーと分子シミュレーションによる創薬研究を進めるとともに、大学等と量子化学計算ソフトウェア向けに計算アルゴリズムの開発と実装を実施した。

(3) 情報科学技術分野の研究振興に関する課題の運営管理

文部科学省の民間委託事業「研究開発推進事業等の実施に係る運営管理業務(研究振興事業に関する課題の運営管理業務)」として、スーパーコンピュータを用いた研究開発(以下「公募事業」と

いう。)を実施するために必要とされる以下の業務を継続して実施した。

- ①文部科学省と採択課題実施機関との間での交付決定に係る諸事務手続き、補助金交付要綱・取扱要領に基づく事務処理について、文部科学省業務を支援するとともに、公募事業の推進に必要な情報の把握等を行った。
- ②公募事業について、2021年度からの継続21課題に対して、2022年度の交付申請手続きの支援、各課題の事業面・経理面での進捗管理を実施した。また、2021年度に実施された補助事業23課題の補助金額の確認調査等を実施した。
- ③「富岳」成果創出加速プログラムの4領域の進捗管理を効率的・効果的に進めるためプログラムディレクター(PD)4名から構成される「領域総括会議」を設置し、当該会議の事務局業務、PD業務の支援を行った。
- ④文部科学省による2023年度「富岳」成果創出加速プログラムの公募において、公募事務局として、申請書類の作成・申請に関する問合せ等の対応を行った。
- ⑤上記の業務を通じて、公募事業のあり方や問題点等の調査・考察を行い、公募事業の今後に向けた提案を行った。

5. 原子力分野の解析コードに関する情報の調査収集・整備提供

わが国の原子力コードセンターとして、原子力機構等の国内機関から収集した3件の原子力コードを新規登録した。産業界を含む国内機関への原子力コードの提供は56件であった。

米国オークリッジ国立研究所・放射線安全情報計算センター(ORNL/RSICC)との契約の下で、新規に3件の原子力コード

を収集・整備するとともに、「RSICCユーザ会」加盟機関に180件の原子力コードを配付した。また、原子力コード利用の促進に資するため、「RSICCユーザ会」加盟機関向けに「自動分散低減法を用いたモンテカルロ法中性子・ガンマ線遮へい解析」に関する講習会(2022年10月)をオンラインで開催し、12加盟機関から20名が参加した。なお、当財団が運営している「RSICCユーザ会」の加盟機関は、2022年度末で67機関である。

6. 事業の成果の普及等

計算科学技術研究の成果の普及を目的として、最新の研究開発成果の紹介、関連研究の解説、事業動向の報告、トピックス等を内容とする「RISTニュースNo.68」を2022年9月に刊行し、関連機関に配付するとともに当財団の公開ホームページに掲載し、成果の普及を図った。また、当財団における研究開発の成果を国内外の学術論文誌、学会等で発表するとともに、スーパーコンピューティングに関する国際会議(ISC2022,SC22,SCAsia2023)や、産業向け展示会(国際フロンティア産業メッセ2022)に出展するなど、海外や産業界に向けても事業成果の普及活動を行った。

Ⅲ その他

1. 研究成果等の発表

2022年度の主な研究成果等の発表は以下の通り。

- (1) T. Otsuka, T. Abe, T. Yoshida, T. Tsunoda, N. Shimizu, N. Itagaki, Y. Utsuno, J. Vary, P. Maris, and H. Ueno, α -Clustering in Atomic Nuclei from First Principles with Statistical Learning and the Hoyle State Character, Nat. Commun., 13, 2234 (2022)

- (2) W. Shi, M. Machida, S. Yamada, T. Yoshida, Y. Hasegawa, K. Okamoto, LASSO reconstruction scheme for radioactive source distributions inside reactor building rooms with spectral information and multi-radionuclide contaminated situations, *Ann. Nucl. Energy*, 184, 109686 (2023)
- (3) R. Jono, S. Tejima, and J. Fujita, Dispersion Free Energy of Carbon Nanotubes in Water Systems, *Chem. Lett.* 3, 156-159 (2023)
- (4) K. Akada, S. Okubo, T. Yamada, K. Tokuda, K. Yamaguchi, S. Uemura, T. Onoki, S. Tejima, M. Kobayashi, and J. Fujita, Anisotropic flocculation in shear thickening colloid-polymer suspension via simultaneous observation of rheology and X-ray scattering, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 658, 130727 (2023)
- (5) J.L. Fajardo-Diaz, A. Morelos-Gomez, R. Cruz-Silva, K. Ishii, T. Yasuike, T. Kawakatsu, A. Yamanaka, S. Tejima, K. Izu, S. Saito, J. Maeda, K. Takeuchi, and M. Endo, Low-pressure reverse osmosis membrane made of cellulose nanofiber and carbon nanotube polyamide nanocomposite for high purity water production, *Chemical Engineering Journal*, 448, 137359 (2022)
- (6) Y. Sakae, T. Kawasaki, Y. Okamoto, Distribution and Structure Analysis of Fibril-Forming Peptides Focusing on Concentration Dependency, *ACS Omega*, 7, 12, 10012-10021 (2022)
- (7) 松岳 大輔、酸性リン脂質を含む膜中の膜貫通一膜近傍ペプチド二量体のMDシミュレーション (hp170329)、HPCI 利用研究成果集 Volume7 No.1 (2022年4月)
- (8) 山田篤志、山田俊介、矢花一浩、高強度パルス光の伝搬に対する第一原理計算、*フォトニクスニュース* 第8巻 第2号 (2022年)
- (9) T. Hayashi, Y. Sakae, and Y. Okamoto, Chapter 5 - Combination of genetic algorithm and generalised-ensemble algorithms for biomolecular simulations, in *Energy Landscapes of Nanoscale Systems*, *Frontiers of Nanoscience Vol. 21*, edited by D.J. Wales 93-109 (Elsevier, Amsterdam, 2022)
- (10) A. Yamada, Combined light and force-field based molecular dynamics simulation, *Asia Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists* (Feb. 2023, Vietnam)
- (11) 赤田 圭史、大久保 総一郎、徳田 一弥、山口 浩司、小野木 伯薫、山田 達矢、城野 亮太、手島 正吾、藤田 淳一、シアシクニング現象におけるシリカコロイド溶液の構造変化、*日本レオロジー学会 第49年会* (2022年5月12日-13日、オンライン)
- (12) 赤田 圭史、大久保 総一郎、徳田 一弥、山口 浩司、小野木 伯薫、山田 達矢、手島 正吾、藤田 淳一、小角X線散乱によるシアシクニング流体のリアルタイム構造観察、*第73回 コロイド及び界面化学討論会* (2022年9月20日-22日、広島大学 東広島キャンパス)
- (13) Y. Harashima, H. Koga, Z. Ni, T. Yonehara, M. Katouda, A. Notake, H. Matsui, T. Moriya, M. K. Si, R. Hasunuma, A. Uedono, and Y. Shigeta, Analysis of structural

- stability of HfO₂ with impurities and vibrational free energy, The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba (Oct. 2022, Tsukuba, Japan)
- (14) Tatsuya Yamada, Syogo Tejima, Computer Simulation of Shear Thinning of Imidazolium-based Ionic Liquids, 第14回筑波大学計算科学研究センター創立30周年記念シンポジウム (2022年10月13日-14日、つくば国際会議場)
- (15) 星野小百合、石田祥一、河東田道夫、隅田真人、奥野恭史、寺山慧、短時間MDシミュレーションによるリガンド-タンパク質間結合親和性推定手法の検討、第50回構造活性相関シンポジウム (2022年11月10日、オンライン)
- (16) K. Akada, S. Okubo, K. Tokuda, K. Yamaguchi, T. Onoki, T. Yamada, S. Tejima, Ju. Fujita, Rheo-SAXS observation of structural change in shear thickening polymer gel, MRS Fall Meeting (Nov.27 - Dec. 2, 2022, Boston, Massachusetts)
- (17) Y. Harashima, H. Koga, Z. Ni, T. Yonehara, M. Katouda, A. Notake, H. Matsui, T. Moriya, M. K. Si, R. Hasunuma, A. Uedono, and Y. Shigeta, Systematic search for stabilizing dopants in ZrO₂ and HfO₂ using first-principles calculations, International Symposium on Semiconductor Manufacturing (Dec. 2021, Tokyo, Japan)
- (18) 齊藤 哲; 「富岳」をはじめとするHPCIの利用制度と利用支援の説明」京都工業会R&D問題懇話会 (2022年6月、計算科学振興財団)
- (19) 太田 幸宏、小久保 達信、松岳 大輔、富山 栄治、Examples of serial-code optimization for A64FX processor cores, The 9th Meeting for application code tuning on A64FX computer systems (2022年7月、オンライン)
- (20) Eiji Tomiyama, Ryoichi Katsukawa, Takeshi Iwasaki, Hitoshi Washizu, Molecular Dynamics Simulation and Structural Analysis of Traction Fluid, WTC(World Tribology Congress) 2022 (2022年7月、オンライン)
- (21) 須永 泰弘、「富岳」の利用方法と利用支援—利用しやすくなった「富岳」、第11回SPring-8データ科学研究会/第78回SPring-8先端利用技術ワークショップ (2022年8月、ニチイ学館 神戸ポートアイランドセンター)
- (22) 浅見 暁、RISTのOpenFOAMへの取り組み、計算工学ナビニュースレター Vol.23 (2022年9月)
- (23) 吉澤 香奈子、施設と登録機関の紹介、第8回大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム (2022年9月、秋葉原UDX)
- (24) 寺澤 麻子、ネオジム永久磁石のアモルファス粒界相及び主相副相界面における磁気結合の第一原理計算による解析、RIST NEWS No.68 (2022年9月)
- (25) 吉澤 香奈子、「富岳」を中核としたHPCIにおける材料系アプリケーションの整備状況、第14回材料系ワークショップ (2022年10月、秋葉原UDX)
- (26) 齊藤 哲、「富岳」を含むHPCI利用研究課題の募集と利用支援、第14回材料系ワークショップ (2022年10月、秋葉原UDX)
- (27) 齊藤 哲、「富岳」をはじめとするHPCIの利用制度と利用支援の説明、パナソニックCAE研究会 (2022年10月、計算

科学振興財団)

- (28) 松村 義正、黒木 聖夫、山岸 孝輝他、GPU クラスタを用いたマルチスケール海洋モデリングプラットフォームの構築、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、オンライン)
- (29) 齊藤 哲、「富岳」の産業利用の制度紹介、LINC SHOWCASE (2022年11月)
- (30) 齊藤 哲、産業利用の制度紹介、第3回HPCIフォーラム～産業利用の広場～ (2022年11月)
- (31) 峯尾 真一、野口 孝明、草間 義紀、量子アニーリングを用いたレビューア割当最適化の検討、大学ICT推進協議会 (AXIES) 2022年度年次大会 (2022年12月、仙台国際センター)
- (32) 深谷 剛、清水 陽平、富山 栄治、鷺津 仁志、機械学習を用いたトラクションフルードの性能予測、トライボロジー会議2022 秋 福井 (2022年12月)
- (33) 須永 泰弘、DXの基礎とバイオDXの発展、近畿本部生物工学部会 (2023年1月講演会 & 座談会)
- (34) 齊藤 哲、「富岳」を含むHPCIの課題募集と利用支援、第15回材料系ワークショップ (2023年2月、秋葉原UDX)
- (35) 吉澤 香奈子、「富岳」を中核としたHPCIにおける材料系アプリケーションの整備状況、第15回材料系ワークショップ (2023年2月、秋葉原UDX)
- (36) 齊藤 哲、「富岳」・HPCIの課題募集と利用支援～「富岳」ファーストタッチオプション・クイックスタートガイドから～、FOCUS賛助会員交流会 (2023年3月)
- (37) 齊藤 哲、「富岳」を含むHPCIの利用と支援、CAEワークショップ (2023年3月)
- (38) 浅見 暁、アクセスポイント東京概要説明、HPCIアクセスポイント解説セミナー (2023年3月)
- (39) 丸茂 彩、アクセスポイント東京概要説明、HPCIアクセスポイント解説セミナー (2023年3月)