



Title	センター報告 サイバーメディアHPCジャーナル No.15
Author(s)	
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2025, 15, p. 118-165
Version Type	VoR
URL	<a href="https://hdl.handle.net/11094/102570">https://hdl.handle.net/11094/102570</a>
rights	
Note	

*The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA*

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

The University of Osaka

# センター報告

---

# 2024 年度大規模計算機システム利用による研究成果・論文一覧

この一覧は、本センター大規模計算機システムを利用して 2024 年 4 月から 2025 年 3 月までに得られた研究成果について、利用者から報告されたものを掲載しています。

## 1 学術雑誌掲載論文

- [1] Kunichika Tsumoto, Takao Shimamoto, Yuma Aojo, Yukiko Himeno, Yuhichi Kuda, Mamoru Tanida, Akira Amano, Yasutaka Kurata., "Chained occurrences of early afterdepolarizations may create a directional triggered activity to initiate reentrant ventricular tachyarrhythmias.", Computer Methods and Programs in Biomedicine, 261,108587, Jan.2025.
- [2] Zhiwen Jiang, Masahiko Shibahara, "Application of a thermal circuit model for the prediction of interfacial thermal resistance between water and a nanostructure surface using molecular dynamics simulations", International Journal of Thermal Science, 208, 109441, Feb. 2025.
- [3] Akio Ishii, "Energetical effects of the edges and vertices of face-centered-cubic Pd and Au nanoparticles: a density functional theory study", computational materials scienece, Vol.243 page 113122, 2024.
- [4] Akio Ishii, "Edge-and vertex-originated differences between nanoparticles and nanovoids: A density functional theory study of face-centered-cubic Al", computational materials scienece, Vol 246, page 113342, 2025.
- [5] Nanako Ishihara, Genta Chikatani, Hiroaki Nishijima, Hiro Tabata, Yoko Hase, Yoshiharu Mukouyama, Shuji Nakanishi, Shiho Mukaida, "Developing a design guideline of boronic acid derivatives to scavenge targeted sugars in the formose reaction products using DFT-based machine learning", Chemistry Letters, Vol.53, No.6, upae087, May. 2024.
- [6] Keitaro Ohashi, Kosei Nishimura, Kaito Nagita, Takuya Hashimoto, Shoko Nakahata, Takashi Harada, Toshiaki Ina, Shuji Nakanishi, Kazuhide Kamiya, "Size-Dependency of Electrochemically Grown Copper Nanoclusters Derived from Single Copper Atoms for the CO Reduction Reaction", ChemSusChem, e202402576, 2025.
- [7] 高木秀蔵, 鹿島千尋, 中谷祐介, 角田成美, 小川健太, 秋山諭, 妹背秀和, 朝田健斗, "降雨出水に伴う Chattonella 属赤潮の播磨灘内湾部から備讃瀬戸への広域輸送", 土木学会論文集, Vol.80, No.17, 24-17226, Nov. 2024.
- [8] 出口博之, 鹿島千尋, 中谷祐介, "地形改変による波浪場の変化が閉鎖性内湾の流動・水質に及ぼす影響", 土木学会論文集, Vol.80, No.17, 24-17233, Nov. 2024.
- [9] 鹿島千尋, 中谷祐介, "瀬戸内海における陸域・内部生産・外洋起源 COD の分布", 土木学会論文集, Vol.80, No.17, 24-17232, Nov. 2024.
- [10] 鹿島千尋, 中谷祐介, "瀬戸内海における湾灘別 L-Q 式の提案", 土木学会論文集, Vol.81, No.16, 24-16119, 2025/2/1.
- [11] Takuya Akiyama, Tetsuro Kusamoto, Kazushi Mashima, Hayato Tsurugi, "Synthesis of Multisubstituted Cyclopentadiene Derivatives from 3,3-Disubstituted Cyclopropenes and Internal Alkynes Catalyzed by Low-Valent Niobium Complexes", Journal of the American Chemical Society, vol.146, p.33338, Nov. 2024.
- [12] Takashi Matsubara, Takehiro Aoshima, Ai Ishikawa, and Takaharu Yaguchi, "Deep Energy-Based Discrete-Time Physical Model for Reproducing Energetic Behavior", IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2025.

- [13] Takahito Yoshida, Takaharu Yaguchi, and Takashi Matsubara, "Loss Function for Deep Learning to Model Dynamical Systems", IEICE Transactions on Information and Systems, vol. E107-D, no. 11, pp. 1458-1462, 2024.
- [14] Takashi Matsubara, Yuto Miyatake, and Takaharu Yaguchi, "The Symplectic Adjoint Method: Memory-Efficient Backpropagation of Neural-Network-Based Differential Equations", IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, vol. 35, no. 8, pp. 10526-10538, 2024.
- [15] Yasuya Nakayama, Yuki Matsuoka, Toshihisa Kajiwara, "Simulating Brownian motion in thermally fluctuating viscoelastic fluids by using the smoothed profile method", Journal of Computational Physics, Vol.509, 113035, 2024.
- [16] Tomohiro Tokunaga, Toshihisa Kajiwara, and Yasuya Nakayama, "Prediction of parison formation using process data in extrusion blow molding", Manufacturing Review, Vol.12, 2, 2025.
- [17] Yasuya Nakayama, "Brownian motion and microrheology in complex fluids under periodic boundary conditions", Seikei-Kakou, Vol.37, No.7, 2025.
- [18] Shuichi Suzuki, Ritsuki Tanaka, Ruifeng Shu, Takeshi Naota, "Stimuli - Induced Controls of Magnetic and Photophysical Properties Using Liquescent Open - Shell Ionic Molecular Systems", ChemPlusChem, vol. 89, e202400132, July/2024.
- [19] Ruifeng Shu, Takeshi Naota, Shuichi Suzuki, "Needlestick - Stimulation - Induced Conversion of Short - Wave Infrared - Light Transparency Using a Liquescent Radical Anion ", Small, vol. 20, 2311557, Aug/2024.
- [20] Sett Aung Naing, Takeshi Naota, Daisuke Shiomi, Kentaro Matsuda, Kazunobu Sato, Shuichi Suzuki, "Magnetic properties of N-nonylphenothiazine radical cations depending on counter anions ", Chemistry Letters, vol. 53, upae135, July/2024.
- [21] H. Matsuyama, T. Fujii, S. Miyauchi, S. Takeuchi, "Numerical study of pressure response to action potential by water permeation with ion transports", ASME Journal of Heat and Mass Transfer, Vol.146, No.101202, Jun.2024.
- [22] 日野 航生, 岡林 希依, "超解像機械学習による疎な疑似圧力センサ点データからの二次元圧力場推定とキャビテーション場の予測", 日本機械学会論文集, Vol. 90, No. 937, p. 24-00115, Sep.2024.
- [23] Taku Sakamoto, Kie Okabayashi, "Optimization of fluid control laws through deep reinforcement learning using dynamic mode decomposition as the environment", AIP Advances, Vol. 14, No. 11, p. 115204, Nov.2024.
- [24] Shota Akita, Kie Okabayashi, Shintaro Takeuchi, "Envelope boundary conditions for the upper surface of two-dimensional canopy interacting with fluid flow", Microfluidics and Nanofluidics, Vol. 29, No. 7, pp. 1-23, 2024/12/1.
- [25] Shungo Okamura, Kie Okabayashi, "Twin experiments for data assimilation of cavitating flow around a hydrofoil", International Journal of Multiphase Flow, Vol. 188 p. 105201, 2025/3/1.
- [26] 岡林希依, "データ駆動型キャビテーションモデルとその学習データセットの構築", ターボ機械, Vol. 53, No. 1, pp. 19-25, 2025/1/1.
- [27] S. Iwamoto, T. Shimura, H. Watanabe, T. Kobayashi, "Oxygen-related defects in 4H-SiC from first principles", Applied Physics Express, Vol.17, No.5, pp. 051008-1-051008-5, May 2024.
- [28] Zixu Xu, Kazuma Aoki, Shingo Tamaki, Sachie Kusaka, Yuuki Chimura, Isao Murata, "Design of Moderator Assemblies for Fast, Epithermal, or Thermal Neutron-Dominated n-  $\gamma$  Mixed Fields Using a D-D Neutron Source", Nuclear Technology, 1-13, Oct 2024.
- [29] Kazuaki Yamanaka, Ryusei Oketani, Yuya Mori, Takashi Sato, Seiji Tsuzuki, Hiroki Takahashi, Hirohito Tsue, "Thermal fluctuation-induced selective CO<sub>2</sub> uptake of seemingly nonporous N,C-protected dipeptide crystals as

elucidated by in situ X-ray crystallographic analysis", CrystEngComm, 26, March 2024.

- [30] Hiroki Yoshimura, Ryusei Oketani, Miki Naruoka, Norimitsu Tohnai, Ichiro Hisaki, "A Hydrogen-Bonded, Hexagonally-Networked, Layered Framework with Large Aperture Designed by Structural Synchronization of a Macrocycle and Supramolecular Synthon", Precis. Chem., 2, April 2024.
- [31] Koki Kasuya, Ryusei Oketani, Souta Matsuda, Hiroyasu Sato, Fumitaka Ishiwari, Akinori Saeki, Ichiro Hisaki, "Photo-responsive Hydrogen-Bonded Molecular Networks Capable of Retaining Crystalline Periodicity after Isomerization", Angew. Chem. Int. Ed., 62, June 2024.
- [32] Haruka Kubo, Shunsuke Konishi, Ryusei Oketani, Takashi Hayashi, Ichiro Hisaki, "Transition Behaviors of Isostructural Hydrogen-Bonded Frameworks Composed of Naphthalene, Quinoxaline, and Pyrazinopyrazine Derivatives", Chem. Eur. J., 30, 2024/8/1.
- [33] Taito Hashimoto, Mario de la Hoz Tomás, Ryusei Oketani, Boiko Cohen, Miki Naruoka, Norimitsu Tohnai, Abderrazzak Douhal, Ichiro Hisaki, "Single crystalline, Non-stoichiometric Hydrogen-bonded Organic Frameworks Showing Versatile Fluorescence Depending on Composition Ratios and Distributions", Angew. Chem. Int. Ed., 64, 2025/1/1.
- [34] Nichole Marcela Rojas-Chaverra, Ryu Imamura, Hiroki Sato, Toby Passioura, Emiko Mihara, Tatsunori Nishimura, Junichi Takagi, Hiroaki Suga, Kunio Matsumoto, Katsuya Sakai, "A cyclic peptide-grafted Fc with hepatocyte growth factor functionality ameliorates hepatic fibrosis in a non-alcoholic steatohepatitis mouse model", iScience, 27(8):110426, Jul. 2024.
- [35] Takashi Ohta, Futaro Shirahata, "Friction drag model for axial turbulent flow along the surface of a circular cylinder based on the universal characteristics of wall turbulence", Journal of Fluid Mechanics, Vol.1000, pp.A35, Dec. 2024.
- [36] Kohama, S., Ito, T., Tsuboi, N., Ozawa, K., Hayashi, A.K., "Two-dimensional detailed numerical simulation of ammonia/hydrogen/air detonation: hydrogen concentration effects and transverse detonation wave structure", Shock Waves, 34(2), pp.139-154, 2024.
- [37] Yohei Yamaguchi, Xukang Zhang, Takumi Nishijima, Yu Hayashi, Hideaki Uchida, Yoshiyuki Shimodama, "Building stock energy modeling to assess annual progress in stock energy efficiency and carbon emission reduction of commercial buildings", Energy & Buildings, 324 (2024) 114909, 2024.
- [38] M. Liu, H. Matsui, D. S. Hamilton, S. D. Rathod, K. D. Lamb, N. M. Mahowald, "Representation of iron aerosol size distributions of anthropogenic emissions is critical in evaluating atmospheric soluble iron input to the ocean", Atmospheric Chemistry and Physics, 24, 13115-13127, Nov.2024.
- [39] H. Matsui, K. Kawai, Y. Tobe, Y. Iizuka, S. Matoba, "Increasing Arctic dust suppresses the reduction of ice nucleation in the Arctic lower troposphere by warming", npj Climate and Atmospheric Science, 7, 266, Nov 2024.
- [40] Shinya Mizuno, Yuki Komiyama, Haruka Ohba, "Proposal for optimizing number of servers in closed BCMP queueing network", International Journal of Data Science and Analytics, <https://doi.org/10.1007/s41060-024-00621-x>, August, 2024.
- [41] Shinya Mizuno, Haruka Ohba, "Limitations of calculating theoretical solutions for closed BCMP queueing networks and verification of alternative theoretical values by parallel simulation", PLOS One, 19(12) , December, 2024.
- [42] K. Amano, K. Mizuno, T. Hiejima, "Suppression of flow separation in a scramjet inlet using Görtler vortices", Physics of Fluids, 37 [4], 046105, (14 pages), 2025.

- [43] Yoshinori Tomiyoshi, Takashi Honda, Toshihiro Kawakatsu, Takahiro Murashima, Erica Uehara, Tetsuo Deguchi, "Density Functional Theory for Cyclic Block Copolymer Melts", *Macromolecules*, Vol.57, no.22, p.10704-10716, Nov. 2024.
- [44] Yangen Li, Jun-Ping Du, Shuhei Shinzato, Shigenobu Ogata, "Tunable interstitial and vacancy diffusivity by chemical ordering control in CrCoNi medium-entropy alloy", *npj Computational Materials*, Vol.10, 134, June 2024.
- [45] Fan-Shun Meng, Shuhei Shinzato, Shihao Zhang, Kazuki Matsubara, Jun-Ping Du, Peijun Yu, Wen-Tong Geng, Shigenobu Ogata, "A highly transferable and efficient machine learning interatomic potentials study of  $\alpha$ -Fe-C binary system", *Acta Materialia*, Vol. 284, 120408, December 2024.
- [46] Fan-Shun Meng, Jiu-Hui Li, Shuhei Shinzato, Kazuki Matsubara, Wen-Tong Geng, Shigenobu Ogata, "Formation of three-dimensional dislocation networks in  $\alpha$ -iron twist grain boundaries: Insights from first-principles neural network interatomic potentials", *Computational Materials Science*, Vol. 253, 113812, May 2025.
- [47] Takeshi Omori, Yasutaka Yamaguchi, "Molecular anatomy of the pressure anisotropy in the interface of one and two component fluids: Local thermodynamic description of the interfacial tension", *The Journal of Chemical Physics*, 161(20), 204704, 2024.
- [48] Yinan Yang, Tsukasa Hori, Shinya Sawada, Fumiteru Akamatsu, "Accurate and rapid reactive flow simulations using dynamic load balancing and sparse analytical Jacobian approach", *Physics of Fluids*, 36(8), Aug.2024.
- [49] Yinan Yang, Tsukasa Hori, Shinya Sawada, Fumiteru Akamatsu, "Numerical investigation on the effects of air-staged strategy and ammonia co-firing ratios on NO emission characteristics using the Conjugate heat transfer method", *Fuel*, 368,131591-131591, May.2024.
- [50] Yinan Yang, Tsukasa Hori, Shinya Sawada, Fumiteru Akamatsu, "Toward the Development of Low-NO Ammonia Cofiring Furnaces: Numerical Investigation into the Secondary Injection System Using the Conjugate Heat Transfer Method", *Energy & Fuels*, 38(11), May. 2024.
- [51] 青木睦, 井戸敬, 山口豪, 富井直輝, 高山健志, 稲田慎, 中沢一雄, 芦原貴司, "臨床応用に向けた非発作性心房細動の興奮動態と興奮旋回中心分布の 3 次元可視化インターフェースの開発", *生体医工学*, Vol.63, No.1, pp.25-32, Mar. 2025.
- [52] M. Ohnishi, T. Yamamoto, K. Fujimura, H. Shimizu, K. Yamamoto, and J. Shiomi, "Enhancing thermoelectric performance of Si-based clathrates via carrier optimization considering finite temperature effects", *ACS Chemistry of Materials*, Vol.36, p.10595–10604, 2024.
- [53] Ken Murakami, Keita Iida, Mariko Okada, "An Attention-Based Deep Neural Network Model to Detect Cis-Regulatory Elements at the Single-Cell Level From Multi-Omics Data.", *Genes to cells*, Vol. 30, No. 2, e70000, Mar. 2025.
- [54] C. Kaewnuratchadasorn, J. Wang, C.W. Kim, "Neural operator for structural simulation and bridge health monitoring", *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering*, Vol.39, pp.872-890, 2024.
- [55] C. Kaewnuratchadasorn, J. Wang, C.W. Kim, "Physics-informed neural operator solver and super-resolution for solid mechanics", *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering*, Vol.39, pp.3435-3451, 2024.
- [56] C. Kaewnuratchadasorn, J. Wang, C.W. Kim, X. Deng, "Geometry physics neural operator solver for solid mechanics", *Computer-Aided Civil and Infrastructure Engineering*, Vol.40, pp.1388-1404, 2025.
- [57] 山口栄治, 福田朝生, "固体群と流体の三次元連成数値解析による混合粒径土砂流の分級運動に及ぼす速度勾配と粒度分布の効果", *土木学会論文集特集号(水工学)*, 第 81 卷, 16 号, ID 24-16041, Feb. 2025.
- [58] 前田憲紀, 福田朝生, "粘性土河床の表面侵食および塊状侵食に費やされるエネルギー", *土木学会論文*

集特集号(水工学), 第 81 卷, 16 号, ID 24-16128, Feb. 2025.

- [59] Xiangrui Li, Wentao Chen, Gyoko Nagayama, "Phonon heat transfer across an SiC-SiC nanogap under an external uniform electric field", International Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 244, P. 126945, Mar. 2025.
- [60] Wentao Chen, Gyoko Nagayama, "Kapitza Length at Solid-Liquid Interface: From Nanoscale to Microscale", Small Science, Vol. 5, P. 2400626, Mar. 2025.
- [61] Gaurav Kumar, Gyoko Nagayama, "Enhanced capillary-driven flow in closed hierarchical microchannels", Physics of Fluids, Vol. 37, No. 2, P. 022151, Feb. 2025.
- [62] Yan-Jun Gu, Zhan Jin, Zhen-Zhe Lei, Shingo Sato, Kai Huang, Nobuhiko Nakanii, Izuru Daito, Masaki Kando, & Tomonao Hosokai, "Generation of highly stable electron beam via the control of hydrodynamic instability", Scientific Reports, 14,31162, 2024.
- [63] K. Kato, N. Nagatsuka, and K. Fukutani, "H<sub>2</sub> Molecule Generation from Dissociatively Adsorbed Water on TiO<sub>2</sub> through Photoexcitation", Journal of Physical Chemistry C, 28,8188, 2024/4.
- [64] Yukihiko Okumura, Tomohiro Tsubota, Kenta Kikuchi, Noritoshi Yagawa, Tomohiro Matsunami, "Premixed combustion characteristics of offgas during ammonia cracking process", Fuel, Vol.381, 11 pages, 133331, 2025.9 (IF=7.0).
- [65] Yukihiko Okumura, Tomohiro Tsubota, Naoya Matsuda, Tsukasa Hori, Fumiteru Akamatsu, "Flame structure and reaction diagnostics for ammonia diffusion flame with hydrogen flame stabilizer", Proceedings of the Combustion Institute, Vol.40, 8 pages, 105765, 2024.8 (IF=5.3).
- [66] M. Sumita, K. Terayama, S. Ishida, K. Suga, S. Saito, K. Tsuda, "QCforever2: Advanced Automation of Quantum Chemistry Computations", Journal of Computational Chemistry, 45 • e70017, 2025.
- [67] Shunsuke Someya, Ryo Araki, Takahiro Tsukahara, "CNN for scalar-source distance estimation in grid-generated turbulence", Applied Thermal Engineering, Vol. 258, 124516, Jan. 2025.
- [68] Yuki Matsukawa, Takahiro Tsukahara, "Switching between supercritical and subcritical turbulent transitions in inner cylinder rotating Taylor-Couette-Poiseuille flow", International Journal of Heat and Fluid Flow, Vol. 112, 109667, Mar. 2025.
- [69] Kosuke Nakagawa, Takahiro Ishida, Takahiro Tsukahara, "Changes in the transition process of roughness-induced crossflow vortices due to freestream turbulence", Flow Turbulence and Combustion, Vol.114, pp. 827-855, Mar. 2025.
- [70] Tomoya Shiota, Kenji Ishihara, and Wataru Mizukami, "Universal neural network potentials as descriptors: towards scalable chemical property prediction using quantum and classical computers", Digital Discovery, Vol. 3, pp.1714-1728, Jul. 2024.
- [71] Tomoya Shiota, Kenji Ishihara, and Wataru Mizukami, "Lowering the exponential wall: accelerating high-entropy alloy catalysts screening using local surface energy descriptors from neural network potentials", Digital Discovery, Vol. 4, pp.738–751, Jan. 2025.
- [72] Viktor Khinevich, Wataru Mizukami, "Enhancing quantum computations with the synergy of auxiliary field quantum Monte Carlo and computational basis tomography", arXiv, arXiv:2502.20066, Feb. 2025.
- [73] Yusuke Teranishi, Shoma Hiraoka, Wataru Mizukami, Masao Okita, Fumihiko Ino, "Lazy Qubit Reordering for Accelerating Parallel State-Vector-based Quantum Circuit Simulation", arXiv, arXiv:2410.04252, 2024/10/1.
- [74] Tomoya Shiota, Kenji Ishihara, Tuan Minh Do, Toshio Mori, Wataru Mizukami, "Taming Multi-Domain, -Fidelity Data: Towards Foundation Models for Atomistic Scale Simulations", arXiv, arXiv:2412.13088, 2024/12/1.

## 2. 国際会議会議録掲載論文

- [1] Keitaro Ohashi, Kaito Nagita, Takashi Harada, Shuji Nakanishi, Kazuhide Kamiya, "A DFT Study on Single Metal Modified Covalent Organic Frameworks as Electrocatalysts", Electrosynthesis: Light, Life and Materials Perspective, Seoul, Korea, Jun. 2024.
- [2] N. Ishihara, G. Chikatani, H. Nishijima, H. Tabata, Y. Hase, Y. Mukouyama, S. Nakanishi, S. Mukaida, "Developing a Design Guideline of Boronic Acid Derivatives to Scavenge Targeted Sugars in the Formose Reaction Products using DFT-based Machine Learning", Electrosynthesis: Light, Life and Materials Perspective, Seoul, Korea, Jun. 2024.
- [3] K. Nagita, K. Kamiya, S. Nakanishi, Y. Hamamoto, Y. Morikawa, "CO Hydrogenation Promoted by Oxygen Atoms Adsorbed onto Cu(100)", Electrosynthesis: Light, Life and Materials Perspective, Seoul, Korea, Jun. 2024.
- [4] Keitaro Ohashi, Kaito Nagita, Takashi Harada, Shuji Nakanishi, Kazuhide Kamiya, "DFT Studies on C-C bond formation mechanism in electrochemical CO<sub>2</sub> reduction on single Cu - Modified Covalent Triazine Frameworks", PRiME 2024, Honolulu, Hawaii, 2024/10/1.
- [5] K. Nagita, K. Kamiya, S. Nakanishi, Y. Hamamoto, Y. Morikawa, "CO Hydrogenation Promoted by Oxygen Atoms Adsorbed onto Cu(100)", PRiME 2024, Honolulu, Hawaii, 2024/10/1.
- [6] Keitaro Ohashi, Kosei Nishimura, Kaito Nagita, Takashi Harada, Shoko Nakahata, Toshiaki Ina, Shuji Nakanishi, Kazuhide Kamiya, "Size-Dependency of Electrochemically Grown Copper Nanoclusters Derived from Single Copper Atoms in the CO Reduction Reaction", 8th International Conference on Multifunctional, Hybrid and Nanomaterials, Montpellier, France, 2025/3/1.
- [7] Shunya Tanaka, Yudai Kotani, Hiori Kino, Satoshi Hamaguchi, "Machine-learning-based force fields for molecular dynamics simulation of silicon and silicon dioxide ion beam etching", AVS70, November 2024.
- [8] Razmik Arman Khosrovian, Takaharu Yaguchi, Hiroaki Yoshimura, and Takashi Matsubara, "Poisson-Dirac Neural Networks for Modeling Coupled Dynamical Systems across Domains", The Thirteenth International Conference on Learning Representations (ICLR2025), Apr. 2025.
- [9] Takashi Matsubara and Takaharu Yaguchi, "Number Theoretic Accelerated Learning of Physics-Informed Neural Networks", The Thirty-Ninth AAAI Conference on Artificial Intelligence (AAAI2025), Feb. 2025.
- [10] Shinnosuke Saito and Takashi Matsubara, "Image Interpolation with Score-based Riemannian Metrics of Diffusion Models", ICLR 2025 Workshop on Deep Generative Model in Machine Learning: Theory, Principle and Efficacy (DeLTa), Apr. 2025.
- [11] Razmik Khosrovian, Takaharu Yaguchi, Hiroaki Yoshimura, and Takashi Matsubara, "Modeling Coupled Systems by Neural Networks with Poisson Structures and Ports", International Conference on Scientific Computing and Machine Learning 2025 (SCML2025), 2025/3/1.
- [12] Razmik Arman Khosrovian, Takaharu Yaguchi, and Takashi Matsubara, "Port-Hamiltonian Neural Networks for Learning Coupled Systems and Their Interactions", NeurIPS 2024 Workshop on Machine Learning and the Physical Sciences, 2024/12/1.
- [13] Yosuke Nishimoto and Takashi Matsubara, "Transformer-based Imagination with Slot Attention", NeurIPS 2024 Workshop on Compositional Learning, 2024/12/1.
- [14] Keigo Tsutsui, Phuoc Thanh Tran-Ngoc, Hirotaka Sato, and Takashi Matsubara, "Deep Dynamics Modeling of

Interactions in Collective Behaviors of Insects", 2024 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2024), 2024/12/1.

- [15] Razmik Arman Khosrovian, Takaharu Yaguchi, and Takashi Matsubara, "Learning Coupled Systems and their Connectivity Using Port-Hamiltonian Neural Networks", CAI2024 Workshop on Scientific Machine Learning and Its Industrial Applications (SMLIA2024), 2024/6/1.
- [16] Keigo Tsutsui, Phuoc Thanh Tran-Ngoc, Hirotaka Sato, and Takashi Matsubara, "Deep Dynamics Modeling of Interactions in Insect Group Behavior", CAI2024 Workshop on Scientific Machine Learning and Its Industrial Applications (SMLIA2024), 2024/6/1.
- [17] Masako Sugihara-Seki, Hiroshi Yamashita, Naoto Yokoyama, "Inertial focusing patterns of spherical particles in a viscoelastic flow through square channels", ICMF2025, May, 2025.
- [18] Shota Akita, Kie Okabayashi, Shintaro Takeuchi, "Boundary conditions for the envelope of canopy interacting with two dimensional laminar flow", 77th APS Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, No. R06.00003, Nov.2024.
- [19] Kie Okabayashi, "Twin Experiments for Data Assimilation of Cavitating Flow around a Clark-Y11.7% Hydrofoil", 4th Asian Workshop on Hydraulic Machinery , pp. 34-35, Jan. 2025.
- [20] Kie Okabayashi, "Optimization of fluid control laws through deep reinforcement learning using dynamic mode decomposition as the environment", 3rd Workshop on Data-Driven Fluid Dynamics, Vol. 1, Mar.2025.
- [21] Keichi Takahashi, Takashi Abe, Akihiro Musa, Yoshihiko Sato, Yoichi Shimomura, Hiroyuki Takizawa, Shunichi Koshimura, "Modernizing an Operational Real-time Tsunami Simulator to Support Diverse Hardware Platforms", IEEE Cluster 2024, Sep. 2024.
- [22] Xinpeng Liu, Hiroaki Santo, Yosuke Toda, Fumio Okura, "TreeFormer: Single-view plant skeleton estimation via tree-constrained graph generation", Proc. IEEE/CVF Winter Conference on Applications of Computer Vision (WACV'25, Feb. 2025.
- [23] Zixu Xu, Masaya Matsuki, Kazuma Aoki, Yoshihiro Aritomo, Shingo Tamaki, Sachie Kusaka, Isao Murata, "Development of n- $\gamma$  mixed fields by using a D-D neutron source for dosimetry studies of BNCT", The 37th Workshop on Radiation Detectors and Their Uses, KEK Proceedings 2023-1, pp. 30-42, 2024.
- [24] Nobuyuki TSUBOI, Daiki KUBOTA, A. Koichi HAYASHI, "Two-dimensional Numerical Simulation on Dimethyl Ether / Oxygen Premixture Detonation in a Narrow Channel Using Reduced Chemical Reaction Model: Effects of Numerical Accuracy on Formation of Cellular Sub-Structure", 19th International Conference on Numerical Combustion, ICNC2024-1538, May, 2024.
- [25] Takumi Ito, Nobuyuki Tsuboi, Kouhei Ozawa, Koichi A Hayashi, "3D Evaluation of H2-Air Premixed Gas Injection Ports Number on Flow Field in Disk RDE", 19th International Conference on Numerical Combustion, ICNC2024-1577, May, 2024.
- [26] Nobuyuki TSUBOI, A. Koichi HAYASHI, "Three-dimensional Numerical Simulation on Hydrogen/Air Spinning Detonation in Square Tube Using Higher-order Scheme with Entropy Limiter", International Workshop on Detonation for Propulsion 2024, June, 2024.
- [27] Hyunseo Park, Shui Kohama, Nobuyuki Tsuboi, A. Koichi Hayashi, "Numerical Simulation on Two-Phase Detonation at Various Equivalence Ratios Using Eulerian-Eulerian Model for n-Heptane Fuel", The 8th International Symposium on Energetic Materials and their Applications, A1-1, 2024/11/1.
- [28] Takumi Ito, Nobuyuki Tsuboi, Kohei Ozawa, Koichi Hayashi, "3D Numerical Simulation on Disk Type RDE

used Hydrogen-Air Premixed Gas and Non-premixed Gas with Multi-Ports Injection", AIAA SciTech2025, AIAA 2025-1974, 2025/1/1.

- [29] Haruka Ohba, Shingo Sadakuni, Takashi Matsuda, Shinya Mizuno, "Constructing Ergodic Networks using Discrete Markov Chains ", The 51st International Conference on Computers and Industrial Engineering (CIE51).
- [30] Masakatsu Murakami, Diya Pan, "Generation of giga-electron-volt proton beams by micronozzle acceleration", 45th International Workshop on High- Energy-Density Physics with Intense Ion and Laser Beams.
- [31] Shunsuke Nishimura, Yoshihiro Baba, Toshihiro Tsuboi, "Influences of the Ground Conductivity on Electromagnetic Fields Associated with Lightning Strikes to Tall Structures", International Workshop on High Voltage Engineering, HV-24-086,p.5, Nov.2024.
- [32] Noguchi Renta, Sakuma Asahi, Kakazu Yuko, Iwata Hiroshi, Asano Yosuke, Itoh Yuichi, Sapkota Achyut, Shiraki Atsushi, Kurimoto Ikusaburo, "Relationship between VPD, Transpiration Rate and Vapor Conductance for Plants of Different Growth Levels", Proceedings of the SICE Annual Conference 2024, Aug.2024.
- [33] Fukuda Essei, Ito Masahide, Asano Yosuke, Kurimoto Ikusaburo, "Static-Quantized Control of Sunlight-Type Plant Factory with Input Saturation Including Discrete-Valued Section", Proceedings of the SICE Annual Conference 2024, Aug.2024.
- [34] T. Masuda, K. Tsujimoto, T. Ando1, M. Takahashi, "EFFECT OF CONTROL PARAMETERS ON OSCILLATION-CONTROLLED IMPINGING JETS BY DNS", The 34th International Symposium on Transport Phenomena, 5 pages, Nov. 2024.
- [35] S. Murai, T. Tanoue, K. Tsujimoto, T. Ando, M. Takahashi, "DNS of multiple intermittent jets with different frequency", The 34th International Symposium on Transport Phenomena, 5 pages, Nov. 2024.
- [36] T. Tanoue, S. Murai, K. Tsujimoto, T. Ando, M. Takahashi, "Study of the Effect of Control Frequency and Phase Difference on the low Characteristics in Multiple Intermittent Jets using DNS", The 34th International Symposium on Transport Phenomena, 5 pages, Nov. 2024.
- [37] Takayuki Aoki, "Innovative Simulation for Multiphase Flows and Fluid-structure Interactions", The 12th international conference on computational fluid dynamics (ICCFD12), 2024/7/15.
- [38] Masato Ohnishi, Terumasa Tadano, Shinji Tsuneyuki, and Junichiro Shiomi, "Enhancement of Thermoelectric Performance for Clathrate Compounds Considering Finite Temperature Effects", The 1st A3 Nano & Thermal Energy Engineering Workshop, Jan. 13-15th, 2024.
- [39] Masato Ohnishi, "Development of anharmonic phonon property database using first-principles calculations", The International Symposium on Multiscale Simulations of Thermophysics (MSTP)-2024, May 24-26, 2024.
- [40] Yukihiko Okumura, Tomohiro Tsubota, Naoya Matsuda, Tsukasa Hori, Fumiteru Akamatsu, "Flame structure and reaction diagnostics for ammonia diffusion flame with hydrogen flame stabilizer", CI's 40th International Symposium (Milano, Italy), 4H02: PROCI-D-23-00516, 8 pages, July 22-26, 2024.
- [41] Soma Yokoyama, Kosuke Hoshika, Shota Tsujimura, Naoya Kusunoki, Hiroyuki Inoue, Atsuki Yoshimoto, Yukihiko Okumura, "High intensity combustion of NH<sub>3</sub> by a burner with a swirl-throttle structure", International Joint Conferences Post-IWHT2024 and International Heat Transfer Seminar IHTS 2024, No. P1-26, 2 pages, October 10-12, 2024.
- [42] Shuto Eritate, Kei Kambara, Kazuyuki Uenoyama, Kazuhiro Maki, Shinji Kambara, Yukihiko Okumura, "Effect of equivalence ratio on emission characteristics in H<sub>2</sub>/NH<sub>3</sub> engine", International Joint Conferences Post-IWHT2024 and International Heat Transfer Seminar IHTS 2024, No.P1-27, 2 pages, October 10-12, 2024.

- [43] Tomonori Kouya, "Performance Evaluation of Accelerated Complex Multiple-Precision LU Decomposition", ICCSA2024, Vol.14818, pp.3-19, Aug.2024.
- [44] Tomonori Kouya, "Performance Evaluation of Accelerated Real and Complex Multiple-Precision Sparse Matrix-Vector Multiplication", ICEET2024, pp.1-6, Dec.2024.
- [45] Haruno Fusa, Chonho Lee, Sakuei Onishi, Hiromitsu Shiina, "Metric for Evaluating Stable Diffusion Models Using Attention Maps", Proc. of the International Conference on Foundation and Large Language Models (FLLM2024) , pp. 535-541, 2024, November.
- [46] Yuki Matsukawa, Ryo Araki, Takahiro Tsukahara, "Flow state transition of mixed convection in vertical channel with horizontal pressure gradient", 13th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, June 2024.
- [47] Kosuke Nakagawa, Shotaro Okazaki, Takahiro Ishida, Takahiro Tsukahara, "Effects of crossflow instability on the development process of a turbulent spot", Twelfth International Conference on Computational Fluid Dynamics, 6-B-02, July 2024.
- [48] E. Dzieminska, A. Kusanobu, A.K. Hayashi, N. Tuboi, M. Hiyama, T. Kodama, I. Nakamori, "Detonation initiation and propagation in detonation channel with a pool for an equivalence ratio of 0.8 to 1.2", 13th Mediterranean Combustion Symposium, June 2025.

### 3. 国内研究会等発表論文

- [1] 津元国親, 倉田康孝, "Inhibition of transient outward K<sup>+</sup> current might prevent the development of early afterdepolarization-mediated triggered activity that triggers reentrant tachyarrhythmias in long QT syndrome type2", 第70回日本不整脈心電学会学術大会, Jul.2024.
- [2] 津元国親, 倉田康孝, "一過性外向きK<sup>+</sup>チャネル電流の撃発活動ならびに早期後脱分極形成における役割:数理解析とシミュレーション研究からの予測", 2024年度 生理学研究所心血管研究会, Oct.2024.
- [3] 津元国親, 倉田康孝, "心室性不整脈における一過性外向きK<sup>+</sup>チャネル電流の役割:in silico解析研究", 第71回中部日本生理学会大会, Nov.2024.
- [4] 津元国親, 倉田康孝, "QT延長症候群における一過性外向きK<sup>+</sup>チャネル電流抑制の抗不整脈作用:in silico解析研究", 第34回日本循環薬理学会学術集会, Dec.2024.
- [5] 津元国親, 倉田康孝, "Prevention of triggered activity formation in ventricular arrhythmias by transient outward K<sup>+</sup> channel current inhibition: a simulation study and mathematical analysis", APPW2025, Mar.2025.
- [6] 大橋圭太郎, 神谷和秀, "共有結合性トリアジン構造体を担体に用いた単原子電極触媒", 触媒(Catalysts and Catalysis) , 触媒学会, Vol.66, No.5, p248-253, Oct. 2024.
- [7] 入江葉月, 栗原諒, 中曾根空, 中畑祥子, 原田隆史, 中西周次, 神谷和秀, "異種金属ドープ銅ナノ粒子触媒を用いた固体高分子型CO<sub>2</sub>電解還元", 第14回CSJ化学フェスタ 2024, Oct. 2024.
- [8] 入江葉月, 名木田海都, 大橋圭太郎, 中西周次, 神谷和秀, "異種金属ドープ銅ナノ粒子におけるCO<sub>2</sub>電解還元でのC-C結合生成メカニズムの第一原理解析", 電気化学会第92回大会, Mar. 2025.
- [9] 栗原諒, 名木田海都, 原田隆史, 中西周次, 神谷和秀, "テトラアルキルアンモニウムカチオン水溶液中のCO<sub>2</sub>電解によるC<sub>2</sub><sup>+</sup>生成とその反応メカニズム解析", 電気化学会第92回大会, Mar. 2025.
- [10] 鹿島千尋, 中谷祐介, "瀬戸内海における湾灘別・季節別CODの起源解析", 第59回日本水環境学会年会, 3-D-11-1, Mar. 2025.
- [11] 鹿島千尋, 中谷祐介, "瀬戸内海における起源別CODの定量評価", 第31回瀬戸内海研究フォーラムin

大阪, Aug. 2024.

- [12] 中谷祐介, “非構造格子モデルを用いた瀬戸内海の流動水質に及ぼす外洋影響の数値解析”, 日本海洋学会秋季大会 数値海洋モデリングセッション, 24F-07-06, Sep. 2024.
- [13] コスロービアン ラズミックアルマン, 谷口 隆晴, 吉村浩明, 松原 崇, “深層学習による連成系のモデル化と相互作用の学習”, 第 27 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2024), 11 月, 2024.
- [14] 吉岡朋哉, 松原崇, “深層学習による画像ベースのダイナミクス同定と最適制御”, 第 27 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2024), 11 月, 2024.
- [15] 西本遙裕, 松原崇, “強化学習のための物体中心表現を用いた世界モデル”, 第 27 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2024), 11 月, 2024.
- [16] コスロービアン ラズミックアルマン, 谷口隆晴, 松原崇, “Port-Hamiltonian Neural Network を用いた連成系のモデル化”, 2023 年度 第 37 回 人工知能学会全国大会 (JSAC2023), 5 月, 2024.
- [17] 吉岡朋哉, 賈昊暉, 松原崇, “ポート・ハミルトン系の深層学習によるモデル化と制御”, 2023 年度 第 37 回 人工知能学会全国大会 (JSAC2023), 5 月, 2024.
- [18] 西本遙裕, 松原崇, “物体中心表現を用いたTransformerベースの世界モデル”, 2023 年度 第 37 回 人工知能学会全国大会 (JSAC2023), 5 月, 2024.
- [19] 末吉耕大, 松原崇, “テキストと述語論理を用いた拡散モデル”, 2023 年度 第 37 回 人工知能学会全国大会 (JSAC2023), 5 月, 2024.
- [20] 筒井奎剛, Phuoc Thanh Tran-Ngoc, 佐藤裕崇, 松原崇, “深層学習による昆虫の行動モデリング”, 2023 年度 第 37 回 人工知能学会全国大会 (JSAC2023), 5 月, 2024.
- [21] 小池信昭、朱家佑弥、宇治田元彦, “逐次型データ同化津波予測におけるアンサンブルメンバーと観測点の同時制御に関する研究”, 第 14 回巨大津波災害に関する合同研究集会.
- [22] 朱家佑弥、小池信昭, “逐次型データ同化による津波予測における観測点制御に関する研究”, 第 14 回巨大津波災害に関する合同研究集会.
- [23] 秋田翔太, 岡林希依, 竹内伸太郎, “流れと相互作用する 2 次元キャノピー上端面の運動を模擬した境界条件”, 日本流体力学会年会 2024, No. 2FH205-09-01, Sep. 2024.
- [24] 小島 涼誠, 岡林 希依, “質量保存則を拘束条件とする超解像機械学習による翼周り二次元キャビテーション流れの三次元流れへの拡張”, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, No. OS4-2-1-01, Dec. 2024.
- [25] 富田隼平, 竹内 伸太郎, “透過性壁面を有する流路におけるカプセル状膜構造物の流下に伴う溶媒・溶質透過の数値解析と数理モデリング”, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, No. OS3-2-1-05, Dec. 2024.
- [26] 山澤晟嘉, 祝峻太郎, 竹内伸太郎, “粒子を含む流れにおいて粒子間狭隘部の潤滑解を援用する数値解法の研究”, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, No. OS2-2-2-01, Dec. 2024.
- [27] 日野 航生, 岡林 希依, “超解像機械学習を用いたキャビテーション流れ場の疑似圧力センサ点データからの二次元圧力場推定”, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, No. OS4-2-4-02, Dec. 2024.
- [28] 畠昌育, “量子メス用レーザー駆動イオン入射器の数値シミュレーション”, ビーム物理研究会 2024.
- [29] 上野原 努, 才門 祐太, 松本 梨佳子, 水谷 康弘, 高谷 裕浩, “高調波を用いたフォトニックナノジェットによるアブレーション加工”, 2024 年度精密工学会秋季大会学術講演会, L10, Sep. 2024.
- [30] 上野原 努, 山崎 拓海, 水谷 康弘, 高谷 裕浩, “非線形光学現象を用いたフォトニックナノジェットの強度分布制御 FDTDシミュレーションによる強度分布制御方法の検討”, 2025 年度精密工学会春季大会学術講演会, G107, Mar. 2025.
- [31] 上野原 努, Reza Aulia Rahman, 才門 祐太, 水谷 康弘, 高谷 裕浩, “空気中と水中におけるフォトニ

ックナノジェットを用いたアブレーション加工の比較", 2025 年度精密工学会春季大会学術講演会, G105, Mar. 2025.

- [32] 杉原 礼一, 加藤 有己, 河原 行郎, "グラフ埋め込みと最適輸送を用いた空間的遺伝子発現情報のアランメント", 第 77 回情報処理学会バイオ情報学研究会, Mar. 2024.
- [33] Reiichi Sugihara, Yuki Kato, and Yukio Kawahara, "A random walk approach to cluster and integrate spatial transcriptomics data", 第 25 回日本RNA学会年会, Jun. 2024.
- [34] Reiichi Sugihara, Yuki Kato, and Yukio Kawahara, "A graph embedding approach to spatial omics analysis", 第 4 回関西RNAクラブ, Aug. 2024.
- [35] 杉原 礼一, 加藤 有己, 河原 行郎, "グラフ埋め込みに基づく空間オミクス解析手法の開発", NGS EXPO 2024, Sep. 2024.
- [36] Zixu XU, Masaya MATSUKI, Kazuma AOKI, Yoshihiro ARITOMO, Shingo TAMAKI, Sachie KUSAKA, and Isao MURATA, "Characterization of various types of n- $\gamma$  mixed fields by using a D-D neutron source", 2022 Symposium on Nuclear Data, JAEA-Conf 2023-001, pp. 103-108, 2024.
- [37] 木原 瑞希、佐藤 雅伸, "転基板上の液膜流れにおける動的接触角モデルの数値的および実験的評価", 日本流体力学会 年会 2024.
- [38] 本告遊太郎, 村端秀基, 後藤晋, "イルカによる乱流の発生機構とそれにに基づく遊泳機構".
- [39] 野呂 覚, 太田 貴士, 永井 優河, 酒井 康行, "異なる条件の予混合燃焼における火炎伝播を伴う壁乱流の層流化プロセスの解明", 日本流体力学会 年会 2024, Sep. 2024.
- [40] 皆本 慧, 太田 貴士, "過冷却条件の液体乱流で形成される凝固組織構造の特徴の予測", 日本流体力学会 年会 2024, Sep. 2024.
- [41] 浪井 稔羽, 太田 貴士, "キャビテーションの影響による乱流せん断層の特徴", 流体工学シンポジウム (第 74 回北陸流体工学研究会) , Dec. 2024.
- [42] 増山 遼大, 太田 貴士, 皆本 慧, "異なる粗さモデルで再現した粗面乱流の統計的特徴の比較", 流体工学シンポジウム (第 74 回北陸流体工学研究会) , Dec. 2024.
- [43] 法邑 拓真, 太田 貴士, "壁乱流の流れ場と固体壁内部の直接数値シミュレーションの実現", 流体工学シンポジウム (第 74 回北陸流体工学研究会) , Dec. 2024.
- [44] 井野口 亮太, 太田 貴士, 浅野 柚, "高解像度DNSによるクエット乱流における渦キャビテーションの発生メカニズムの解明", 日本機械学会 北陸信越支部 2025 年合同講演会, Mar. 2025.
- [45] 本田 悠一郎, 寺島洋史, 坪井伸幸, "多成分超臨界・遷臨界流体に対するハイブリッド法の検証～二次元噴流問題に対する従来型手法との比較～", 第 38 回数値流体力学シンポジウム, OS1-2-4-04, Dec. 2024.
- [46] 戸島佑太, 坪井伸幸, 丸祐介, 藤田和央, "ウェーブライダー形状の空力特性評価: ISAS/JAXA超音速及び遷音速風洞を用いた 6 分力計測と再現性について", 令和 6 年度宇宙航行の力学シンポジウム, ISAS2024-SFMA-025, Dec. 2024.
- [47] 木下楓大, 坪井伸幸, 小澤晃平, 丸祐介, 藤田和央, "簡易ウェーブライダー形状の空力特性における乱流モデルの影響評価", 日本機械学会 九州支部九州学生会第 56 回学生員卒業研究発表講演会, 515, Mar. 2025.
- [48] 帆足真尋, 永島浩樹, 寺島洋史, 坪井 伸幸, "ロケットエンジン内部を想定した水素酸素混合の検証: 分子動力学シミュレーションと混合則の比較", 日本機械学会 九州支部 第 78 期総会・講演会, 426, Mar. 2025.
- [49] 檜山 瑞樹, 坪井 伸幸, 林 光一, 中森 一郎, 富塚 孝之, 高橋淳郎, 大西 史倫, 小玉貴司, 玉内 義一,

“Artificial Thickening Flame 法を用いた障害物を有する管内での爆轟遷移に関する数値解析:MINIRUT 形状について”, 第 56 回流体力学講演会／第 42 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 3C04, July, 2024.

- [50] 久保田 大輝, 坪井 伸幸, 小澤 晃平, 林 光一, “ジメチルエーテル/酸素予混合気を用いた爆轟の数値解析～燃焼反応の詳細機構及び爆轟特性に与える空間精度の影響～”, 第 62 回燃焼シンポジウム, C215, Nov. 2024.
- [51] 奥田響, 坪井伸幸, 伊藤拓海, 林光一, “水素/空気詳細化学反応モデルを用いた 3 次元非定常デトネーションに関する波面構造解析－衝撃波面近傍の高次精度の影響－”, 2024 年度衝撃波シンポジウム, 1C2-1, Mar. 2025.
- [52] 笠友介, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, 小原哲郎, 松本弦太, “水素酸素予混合気における解適合格子を用いた衝撃波と火炎の干渉によるDDT過程に関する数値解析～入射衝撃波のマッハ数の違いがもたらす影響の調査～”, 2024 年度衝撃波シンポジウム, 1C2-2, Mar. 2025.
- [53] 五味大地, 伊藤拓海, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林 光一, “水素/空気非予混合噴射条件下における回転デトネーションエンジンの 2 次元数値解析を用いた燃料/酸化剤質量流量と推進パラメータに関する調査”, 日本機械学会 九州支部九州学生会第 56 回学生員卒業研究発表講演会, 622, Mar. 2025.
- [54] 葛城千速, 小濱朱生, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, “詳細化学反応モデルを用いたアンモニア/亜酸化窒素デトネーションの数値解析—当量比が爆轟特性に与える影響について—”, 日本機械学会 九州支部九州学生会第 56 回学生員卒業研究発表講演会, 426, Mar. 2025.
- [55] 須田悠太, 須田悠太, 坪井伸幸, 林光一, Edyta Dzieminska, 富塚孝之, 高橋淳郎, 大西史倫, 中森一郎, 小玉貴司, 佐藤直弥, “障害物を有する管内におけるデフラグレーションからデトネーションへの遷移に関する数値解析: H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> 予混合気における水蒸気の影響について”, 日本機械学会 九州支部九州学生会第 56 回学生員卒業研究発表講演会, 544, Mar. 2025.
- [56] 重松 朋生, 山口 容平, 芳澤 信哉, 内田 英明, 太田 豊, 下田 吉之 (大阪大学), 池本 佳史, 南 雅弘, 竹田 圭一 (関西電力送配電), “自治体脱炭素支援のための地域エネルギー需要推計モデルの開発”, 第 43 回エネルギー・資源学会研究発表会, 2024 年 8 月 6~7 日.
- [57] 小井川 奈々, 達本 紘斗, 山口 容平, 正野 景大, Andrew Marian Zajch, 重松 朋生, 内田 英明, 下田 吉之 (大阪大学), “業務施設関連都市データに基づく自治体規模エネルギー需要モデリング”, 第 41 回エネルギー・システム・経済・環境コンファレンス, 2025 年 1 月 28 日.
- [58] 正野 景大, 山口 容平, 小井川 奈々, 達本 紘斗, 重松 朋生, Andrew Zajch, 内田 英明, 下田 吉之 (大阪大学), “ボトムアップ型アプローチによる自治体エネルギー需要のモデリングと精度検証”, 第 41 回エネルギー・システム・経済・環境コンファレンス, 2025 年 1 月 28 日.
- [59] 守山宗和, 比江島俊彦, “超音速ジェット流におけるマッハ波のSPOD解析”, 日本流体力学会年会 2024, 3M101-04-01, Sep. 2024.
- [60] 比江島俊彦, “超音速流におけるスパイラル渦崩壊の発生について”, 第 38 回数値流体力学シンポジウム, OS1-1-2-05, Dec. 2024.
- [61] 藤山 敬太, 大森 健史, “気泡核生成に与える非凝縮性ガス影響の分子動力学解析”, 日本伝熱シンポジウム, May 2024.
- [62] 大森健史, “界面における圧力の非等方性と界面張力”, 日本流体力学会年会, Sep 2024.
- [63] 大森健史, “拡散界面法における界面応力モデル”, 数値流体力学シンポジウム, Dec 2024.
- [64] 曽我 隆, 細見 岳生, 山下 晃弘, 伊達 進, “ヤコビ法ループにおけるスレッドオーバーラップの評価”,

- [65] 曽我 隆, 細見 岳生, 山下 晃弘, 伊達 進, “ヤコビ法ループにおけるスレッドオーバーラップの評価”, 第 195 回HPC研究会, 2024-HPC-195(24) 1-7 , Aug.2024.
- [66] 庄野竜生, 畠中健太, Sato Yohei, 矢吹智英, “数値計算で観察したプール沸騰における対流熱伝達特性”, 第 61 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, E311, May.2024.
- [67] 庄野竜生, 畠中健太, Sato Yohei, 矢吹智英, “沸騰気泡表面での蒸発と壁面熱輸送の関係を調べる数値計算”, 热工学コンファレンス 2024 予稿集, C13, Oct.2024.
- [68] 今津朗, 村田龍生, 佐藤陽平, 矢吹智英, 富岡孝太, 小泉祐輔, 池田響子, 山口正聰, 持田則彦, “微小重力環境における強制対流沸騰の数値計算”, 第 68 回宇宙科学技術連合講演会予稿集, 3J13, Nov.2024.
- [69] 増田竜海, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “噴出角度を周期的に変化させた衝突噴流に対する制御パラメータの影響”, 日本機械学会 2024 年度年次大会講演論文集, 5 pages, Sep. 2024.
- [70] 村井詳悟, 田ノ上飛翔, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “間欠周波数及び位相差が多重噴流に及ぼす影響”, 日本機械学会 2024 年度年次大会講演論文集, 5 pages, Sep. 2024.
- [71] 柴田一平, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “個別に制御された多重衝突噴流の伝熱性能の改善”, 第 102 期日本機械学会流体工学部門講演会講演論文集, 4 pages, Nov. 2024.
- [72] 増田竜海, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “スウェーブ制御された衝突噴流の流動構造および伝熱特性のDNS解析”, 第 38 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, 5 pages, Dec. 2024.
- [73] 柴田一平, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “個別に制御された多重衝突噴流の流動構造及び伝熱特性”, 東海支部第 74 期総会・講演会講演論文集, 1 page, Mar. 2025.
- [74] 村井詳悟, 田ノ上飛翔, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “異なる周波数を持つ多重間欠噴流のDNS”, 東海支部第 74 期総会・講演会講演論文集, 1 page, Mar. 2025.
- [75] 増田竜海, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, “スウェーブ制御による衝突噴流の伝熱特性の均一化”, 東海支部第 74 期総会・講演会講演論文集, 1 page, Mar. 2025.
- [76] 坪井 和也, 松家 隆雄, “DNSデータを用いた乱流予混合火炎面形状と流れ場並びに火炎特性との関係に関する検討”, 第 62 回燃焼シンポジウム講演論文集, B224, 2024 年 11 月.
- [77] 中沢一雄, 稲田慎, 岸田優作, 富井直輝, 高山健志, 井尻敬, 青木睦, 山口豪, 原口亮, 柴田仁太郎, 鈴木亨, 芦原貴司, “心房細動患者を想定した 3 次元心房モデルにおける興奮伝播ダイナミクスのin silico研究”, 第 44 回医療情報学連合大会, Nov. 2024.
- [78] 青木睦, 井尻敬, 山口豪, 富井直輝, 高山健志, 稲田慎, 中沢一雄, 芦原貴司, “3 次元心房モデル上における非発作性心房細動の興奮動態と興奮旋回中心分布の可視化手法”, 第 63 回日本生体医工学会大会, May 2025.
- [79] 稲田慎, 高山健志, 富井直輝, 井尻敬, 山口豪, 芦原貴司, 鈴木亨, 佐久間一郎, 柴田仁太郎, 中沢一雄, “コンピュータシミュレーションによる肺静脈起源心房細動の検討”, 第 63 回日本生体医工学会大会, May 2025.
- [80] 瀧 優太、青木 尊之、渡辺 勢也、Tan Hong Guan、北川 翔, “スピードスケート・パシュート競技の空力解析”, 日本計算工学会・第 29 回計算工学講演会, 2024/6/11.
- [81] 瀧 優太、青木 尊之、渡辺 勢也、Tan Hong Guan 、木村 裕也、山辺 芳, “スピードスケートのダイナミックな空力解析 一 パシュートのプッシュ姿勢 一”, 日本流体力学会年会 2024, 2024/9/25.
- [82] 瀧 優太、青木 尊之、渡辺 勢也、Tan Hong Guan、木村 裕也、山辺 芳, “AMR-LBM法によるスピードスケート・パシュート隊列の空力解析”, 日本流体力学会・第 38 回数値流体力学シンポジウム,

2024/12/13.

- [83] 大西正人, 塩見淳一郎, “非調和フォノン特性の自動計算とデータベース構築”, 第 8 回フォノンエンジニアリング研究会, 2024 年 5 月 17-18 日.
- [84] 加藤弘一 福谷克之, “ルチルTiO<sub>2</sub> の表面下に存在する酸素空孔の凝集可能性”, 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会, 2024/9/16.
- [85] 加藤弘一, “水素・電子トンネルによる光触媒TiO<sub>2</sub> 上水素ガス生成と酸素欠陥による光触媒”, NIMS ノシミュレーションワークショップ, 2024/12/2.
- [86] 加藤弘一 福谷克之, “太陽光下ルチルTiO<sub>2</sub> の酸素空孔準位を介した 2 光子吸収の理論予想”, 第 71 回応用物理学会春季学術講演会, 2025/3/14.
- [87] 辻村翔太, 星加浩輔, 横山綜馬, 楠 直哉, 奥村幸彦, “旋回-絞り構造バーナーによるアンモニアの高負荷燃焼”, 第 34 回環境工学総合シンポジウム 2024 (日本機械学会主催, 高野山大学), 講演番号: 307, 講演論文No.24-9, pp.268-271, 2024. 7.
- [88] 岡本惇生, 藤井睦月, 有馬景一郎, 遠藤修, 嶋田孝一, 佐藤哲也, 奥村幸彦, “濃淡燃焼によるNH<sub>3</sub>/H<sub>2</sub>燃焼限界の広域化と低NO<sub>x</sub>化に及ぼす影響”, 第 33 回日本エネルギー学会大会講演論文集(日本エネルギー学会主催, 東京, 早稲田大学), セッション燃焼・熱利用 1, 講演No.5-1-3, pp.144-145, 2024. 8.
- [89] 奥村幸彦, “脱炭素社会の実現へ向けたCO<sub>2</sub> フリー バーナーの開発”, 日本機械学会 2024 年度年次大会(日本機械学会主催, 愛媛大学), No.J091-12, 5 pages, 2024.9.
- [90] 奥村幸彦, “アンモニアの燃焼利用とNH<sub>3</sub>/H<sub>2</sub> 火炎の反応解析”, 第 61 回 石炭科学会議講演論文集(日本エネルギー学会主催, 高松), 【招待講演】 10 page, 2024. 10.
- [91] 奥村幸彦, “粗悪なガス燃料の燃焼安定化及び高負荷燃焼”, 2024 年度 日本工業炉協会 “いい炉の日 (11 月 6 日)” 記念講演会(日本工業炉協会主催, 東京都・機械振興会館), 【基調講演】, pp.1-7, 2024.11.
- [92] 岡本惇生, 有馬景一郎, 遠藤修, 嶋田孝一, 佐藤哲也, 奥村幸彦, “NH<sub>3</sub>/H<sub>2</sub> 濃淡燃焼における火炎構造”, 第 62 回 燃焼シンポジウム講演論文集(日本燃焼学会主催, 大阪国際会議場), 燃焼排出物-II, 講演No.E332, 4 pages, 2024. 11.
- [93] 横山綜馬, 楠 直哉, 辻村翔太, 星加浩輔, 吉本篤規, 井上博之, 奥村幸彦, “アンモニア専焼バーナーにおける絞り-旋回構造の最適化”, 第 62 回 燃焼シンポジウム講演論文集(日本燃焼学会主催, 大阪国際会議場), 講演No.P124, 2 pages, 2024. 11.25.
- [94] 保田侑亮, 森田裕史, “粗視化分子動力学法による動的架橋点の異方性とダイナミクス・力学物性の相関解析”, 第 51 回レオロジー学会年会, 2024 年 05 月 16 日.
- [95] 保田侑亮, 森田裕史, “粗視化MD法による動的架橋エラストマーにおける 一次元配列と構造変化・力学物性の相関解析”, 第 73 回高分子討論会, 2024 年 09 月 27 日.
- [96] 幸谷智紀, “マルチコンポーネント型多倍長精度SpMVの高速化とその応用”, 第 50 回数値解析シンポジウム, Jun.2024.
- [97] 幸谷智紀, “可変長精度浮動小数点計算に対応した疎行列ベクトル乗算の性能評価”, 2024 年並列／分散／協調処理に関するサマー・ワークショップ (SWoPP 2024) , Aug.2024.
- [98] 幸谷智紀, “Python 環境における多倍長精度基本線形計算モジュールの実装と性能評価”, 日本応用数理学会 2024 年度年会 OS, Sep.2024.
- [99] 幸谷智紀, “混合精度演算を用いた前処理付き多倍長精度複素Krylov 部分空間法の性能評価”, 環瀬戸内応用数理研究部会 第 28 回シンポジウム, Dec.2024.
- [100] 幸谷智紀, “多倍長精度代数方程式ソルバー高速化の試み”, 第 198 回HPC研究発表会, Mar.2025.

- [101] 稲垣耕司, “作機械学習ポテンシャルを用いたシミュレーションによるSi(100)2x1 水素終端表面上の過剰吸着水素の拡散過程の解析”, 2025年第72回応用物理学会春季学術講演会, 14p-K507-9, 2025/3.
- [102] Haruno Fusa, Chonho Lee, Sakuei Onishi, Hiromitsu Shiina, “Text-to-Image モデルにおける多属性に対応したテンプレートベース評価手法”, 人工知能学会 JSAI2025 大会.
- [103] 三上京介, 加藤英人, 宮川泰明, 芹澤直樹, 寺岡達弘, 城田農, “CFDを用いたエアスプレーガンノズル近傍における液体微粒化解析”, 第33回微粒化シンポジウム, Dec. 2024.
- [104] Hiroaki Tatsumi, Shunya Nitta, Atsushi M Ito, Arimichi Takayama, Hiroshi Nishikawa, “Interfacial energy assessment of Cu/Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> joints for power electronics substrate”, IIW 2024.
- [105] 中島英哲, 荒木亮, 塚原隆裕, “高抵抗低減領域での粘弾性チャネル乱流における3D U-Netの構成応力予測性能調査”, 日本流体力学会年会2024 講演論文集, 2FH101-04-03, Sep. 2024.
- [106] 菊池紘太, 岩本直樹, 塚原隆裕, 荒木亮, 加藤晋介, 川口晋也, “サイクロンセパレータの各種ホッパ形状による粒子挙動の変化”, 日本機械学会2024年度年次大会 講演論文集, Sep. 2024.
- [107] 中島哲, 荒木亮, 塚原隆裕, “3D U-Netを用いた粘弾性チャネル乱流の構成方程式に対する代理モデルの妥当性検証”, 日本機械学会関東支部第31期総会・講演会 予稿集, 04E11, Mar. 2025.
- [108] 垣内習作, 塚原隆裕, 上野一郎, “矩形型自由液膜内温度差マランゴニ対流における基本定常流で異なるPr依存性”, 日本機械学会関東支部第31期総会・講演会 予稿集, Mar. 2025.

#### 4. その他

- [1] 秋山拓弥、山本晶、笠原汰央、草本哲郎、剣隼人, “タンクステン錯体を触媒とするアルキンとシクロプロパンの[2+2+1]-環化付加反応によるシクロペントジエン誘導体の合成”, 日本化学会第105回春季年会, 2025年3月.
- [2] 笠原汰央、秋山拓弥、草本哲郎、剣隼人, “タンクステン錯体を触媒とするアズベンゼンと二種のアルキンの三成分カップリング反応”, 日本化学会第105回春季年会, 2025年3月.
- [3] 黒田悠、草本哲郎、剣隼人, “可視光が促進するアルキルチタン錯体によるアルケンのヒドロアミノアルキル化反応”, 日本化学会第105回春季年会, 2025年3月.
- [4] 上田瑛太郎、草本哲郎、剣隼人, “レドックス活性配位子を有するビス(イミド)モリブデン錯体の酸化還元特性と光応答性”, 日本化学会第105回春季年会, 2025年3月.
- [5] 秋山拓弥、草本哲郎、真島和志、剣隼人, “Mechanistic Insight for Synthesizing Multi-substituted Cyclopentadiene Derivatives from 3,3-Disubstituted Cyclopropenes and Internal Alkynes Catalyzed by Low-valent Niobium Species”, 第70回有機金属化学討論会, 2024年9月.
- [6] 撫佐昭裕, “安全安心なスマートシティ実現にむけた津波災害デジタルツインシステムの開発”, マルチメディア、分散、協調とモバイル(DICOMO2024)シンポジウム(招待講演), 花巻, 6月26日から28日, 2024.
- [7] 鍾守直樹、撫佐昭裕, “都市計画案作成システム、方法、及びプログラム”, 日本電気株式会社, 特願2025-046575, 2025年3月21日出願.
- [8] S. Iwamoto, H. Watanabe, and T. Kobayashi, “Investigation of oxygen-related defects in 4H-SiC from ab initio calculations”, oral, International Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ICSCRM 2024), Raleigh, USA, Oct. 2024.
- [9] T. Kobayashi, S. Iwamoto, and H. Watanabe, “Impurity-vacancy complexes in 4H-SiC: stability and properties”, poster, International Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ICSCRM 2024), Raleigh, USA, Oct.

2024.

- [10] 岩本 蒼典, 渡部 平司, 小林 拓真, “第一原理計算を用いた 4H-SiC 中不純物-空孔ペアに関する包括的調査”, 口頭発表, 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会, 新潟, 日本, 2024 年 9 月.
- [11] 本田隆・富吉良徳・川勝年洋, “ループ構造を含むポリマーの自己無撞着場理論”, 第 73 回高分子討論会, 新潟大学五十嵐キャンパス, 2024 年 9 月 26 日.
- [12] 富吉良徳・本田隆・川勝年洋, “絡み目をもたない環状ブロック共重合体のミクロ相分離の密度汎関数法”, 第 73 回高分子討論会, 新潟大学五十嵐キャンパス, 2024 年 9 月 26 日.
- [13] 衣笠 美怜, 帆足 英二, 沖田 隆文, “核融合中性子源 Li ターゲットの安定性に関する研究 (1)流路形状と噴流厚さが内部流動構造に与える影響”, 日本原子力学会 2024 秋の大会, 3B04, 東北大学, 2024.
- [14] 福永 大輝, 帆足 英二, 沖田 隆文, “核融合中性子源 Li ターゲットの安定性に関する研究 (2)ビーム熱負荷除去における乱流構造の寄与”, 日本原子力学会 2024 秋の大会, 3B05, 東北大学, 2024.
- [15] 渡辺海人, “遺伝子発現推定アプリケーション SiGN-BN の GPGPU 移植”, 岡山理科大学, 学部卒業論文 (国内研究会あるいは国際会議に投稿予定), 2025 年.
- [16] 加藤 英人, 三上 京介, 宮川 泰明, 城田 農, 三木 舜太, 第 33 回微粒化シンポジウム 第 24 回写真コンテスト, 最優秀賞.

# SC24 出展報告

伊達 進<sup>1,2,3</sup> 高橋 慧智<sup>1,3</sup> 速水 智教<sup>1</sup> Wassapon Watanakeesuntorn<sup>1</sup> 谷口 昂平<sup>1,3</sup> 曽我 隆<sup>2</sup>

田主 英之<sup>2</sup> 並木 悠太<sup>2,4</sup> 向園 悠<sup>5</sup> 山本 隼矢<sup>1,3</sup> 野口 祥生<sup>1,3</sup> 村田 忠彦<sup>3,6</sup>

<sup>1</sup>先進高性能計算基盤システム研究部門 <sup>2</sup>高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所

<sup>3</sup>大学院情報科学研究科 <sup>4</sup>日本電気株式会社 <sup>5</sup>情報推進部情報基盤課 <sup>6</sup>データ生成工学研究部門

2024 年 11 月に米国ジョージア州アトランタ市にて開催された国際会議／展示会 SC（通称 SC24）において、当センターの概要、研究内容、および事業内容を紹介するための展示ブースの出展を行った。本稿ではその展示内容や当日の様子等について報告する。

## 1. はじめに

大阪大学 D3 センター（旧称：サイバーメディアセンター）では、例年、米国で開催される国際会議 SC において展示ブースを出展する活動を継続している。SC とは、*The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis* という正式名称を持つ、IEEE Computer Society および ACM SIGARCH によって開催されている国際会議であり、ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) 分野におけるトップレベル会議の一つである。それと同時に、SC は HPC に関する最新機器や最先端技術の国際見本市でもある。そのため、北米を中心とした研究者や技術者に限らず、欧州、アジアの研究者や技術者が集う最大級の

国際会議／展示会となっている。新型コロナウイルス感染症の拡大以前において登録者数は 1 万人を超える数字が記録されていたが、コロナ禍で減少した参加者数は近年回復し、今年は昨年より 4,000 人近く増加、過去最高の 18,104 人が参加したと発表されている。当センターによる展示ブースの出展は、新型コロナウイルス感染症の拡大のため 2020 年度、2021 年度の展示は叶わなかったが、2000 年の初出展から数え、今回で 23 回目となる。

2024 年の SC（通称 SC24）は、米国ジョージア州アトランタ市にあるジョージアワールドコングレスセンター（図 1）にて、11 月 17 日から 22 日までの期間で開催された。なお、アトランタでの SC の開催は初めてとなる。アトランタはジョージア州の州都であり、同州の北西部に位置する。昨年開催されたデンバーよりも南に位置し、北緯 33 度付近で気温も大阪に近かった。しかし、乾燥が激しく期間中に気温が低下したこともあって体調を崩すものもいた。また、昨年急速に進行した円安(1USD ≈ 150JPY)の状況は今年も継続し、さらには現地での物価・人件費の高騰によりブース設営に関する費用はドル建てで 10%以上の値上がりとなった。その他物品の購入にあたっても、クレジットカードの決済手数料が引き上げられたこと也有って、昨年以上の割高感があった。

そのような中でも、当センターの展示に携わった皆全てが責任感を持って展示を行い、結果として 600 名近い来訪者を獲得した。D3 センターの概要・ミッション・事業・研究活動、およびそれらの成果について説明を行い、当センターの国際的なプレゼンス向上、研究開発成果の紹介、大規模計算機システム事業の広報という点でのよきアウトリーチ活動となったと考えている。



図 1: Georgia World Congress Center.

## 2. 展示内容



図 2: 参加スタッフ記念撮影.

SC24 では、14 名の教職員(2 名の招へい教員含む)、1 名の高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所所属の NEC 研究員、1 名の大学院生の合計 16 名(表 1)が大阪大学 D3 センターの出展する展示ブースにおいて、下記 6 テーマでのポスター展示を中心に本センターの概要、事業概要、および、当センターを中心とした研究紹介、成果報告・発表を行なった(図 2)。

- (1) *Large-scale Computing Systems at the D3 Center*
- (2) *Towards On-Time Network and Container Management in Cloud-Edge Continuum*
- (3) *Provenance Recording System / Metadata Management for Experimental Data*
- (4) *MPI Overlapping using Threads Operation / Reinforcement Learning in Job Scheduler*
- (5) *Advanced High-Performance Computing Infrastructure Systems Research Division*
- (6) *Synthetic Population for Real-Scale Social Simulations*

ブース展示は、11 月 18 日から 21 日までの 4 日間行われた。以下、ID バッジの読み取りデータをもとにブース来訪者の統計情報の一部をまとめた。ブース展示期間中の当ブースへの来訪者数は 597 名であった。訪問者数は昨年の 431 名から大幅に増加した。

表 1: 参加スタッフ一覧

先進高性能計算基盤システム研究部門	
スタッフ	伊達 進
	高橋 慧智
	速水 智教
	Wassapon Watanakesuntorn
	谷口 昂平
	吉田 薫史
	山本 隼矢
	渡場 康弘
	阿部 洋丈(招へい准教授)
大学院生	野口 祥生
高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所	
スタッフ	曾我 隆
	田主 英之
	細見 岳生(招へい准教授)
	並木 悠太(NEC 研究員)
データ生成工学研究部門	
スタッフ	村田 忠彦
情報推進部情報基盤課	
技術職員	向園 悠

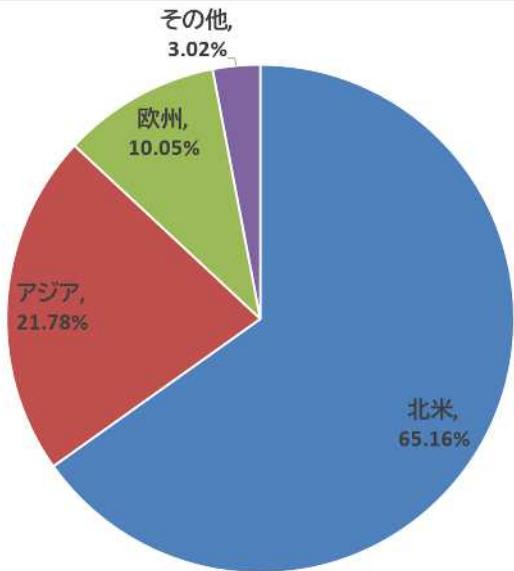


図 3: ブース来訪者 - 地域分類.

ブース来訪者の地域別分類(図 3)を見ると、開催地の北米エリアからの来訪者が最大で全体の 65.16 %を占めている。続いて、日本を含むアジアからの来訪者が 21.78 %、欧州からの来訪者が 10.05 %であった。北米、アジア、欧州で全体の 97 %近くを占め、その他には中東、オセアニア、アフリカ、中南米の来訪者が含まれている。結果として、

多くの地域からの来訪者に対してアウトリーチ活動を行うことができた。

1日平均では、149.25人の来訪者があった。展示初日の11月18日はGrand Opening Gala Receptionで、午後7時から9時までの2時間の開催であったが、123人の来訪者があった。学生らが中心となって呼び込みを行った結果、最終日である4日目の11月21日に最多となる192人の来訪者があった。

また、昨年同様に、高度情報科学技術研究機構(RIST)が中心となって企画した連携企画で、来場者がHPCI構成機関のブースを周回してステッカーを集め、集めたステッカーに応じて景品がもらえる「HPCI Sticker Hunt」にも協力した。この連携企画も当センターのブースの集客に一役買ったといえる。

以下、SC24にて大阪大学D3センターで行ったポスター展示の概要について説明する（括弧内は担当者名）。

(1) *“Large-scale Computing Systems at the D3 Center”* (向園、吉田、速水)

本ポスターでは、D3センターで運用するシステムとして、スーパーコンピュータ「SQUID」、プライベートクラウド「mdx II」、ストレージシステム「ONION」について、それぞれのシステム構成や特徴について紹介した（図4、5）。

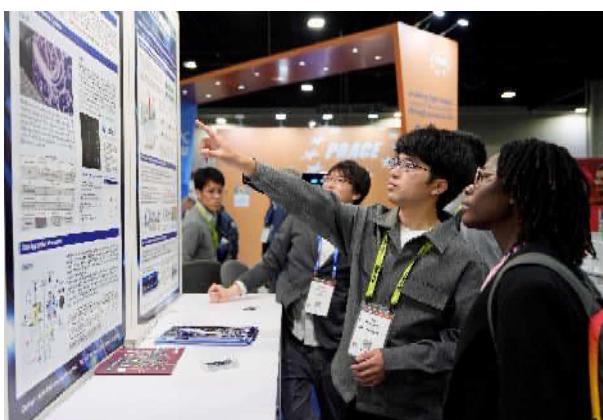


図4: ポスター説明を行う向園。

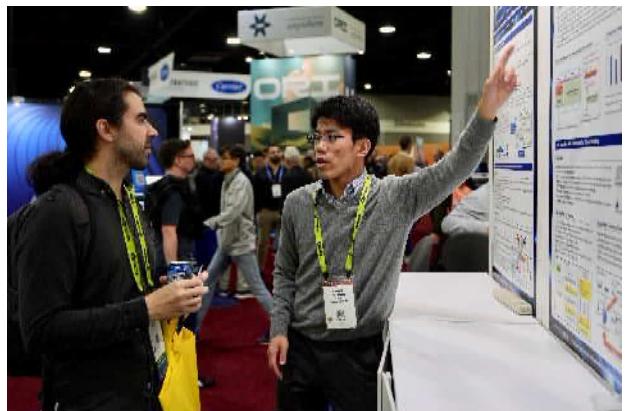


図5: ポスター説明を行う吉田。

ブースに来訪された方々からは、「各ノードの利用状況はどうなっているか?」「OSはなぜRocky Linuxなのか?」「海外からでも利用可能なのか?」といった質問があった。特にGPUの利用率については国内外を問わず高いようで、GPUへの需要の高さを改めて実感する機会となった。また「SQUID」や「ONION」といったユニークな名称が印象的だったようで、本学を知らない来訪者にも興味を持っていただき、そこからシステムの説明につなげることができた。前年度以前にも来訪されたと思われる方からは、「OCTOPUSはどうなったのか?」という質問もあり、サービスが終了したことや、次期システムの導入が予定されていることなどを説明した。

(2) *“Towards On-Time Network and Container Management in Cloud-Edge Continuum”* (谷口、Watanakeesuntorn、山本)



図6: ポスター説明を行う谷口。

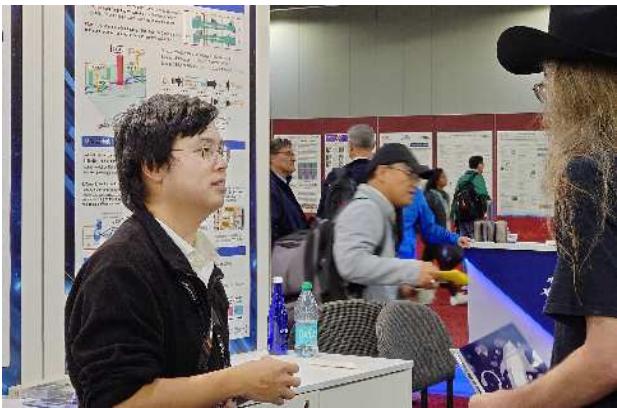


図 7: ポスター説明を行う Watanakesuntorn.

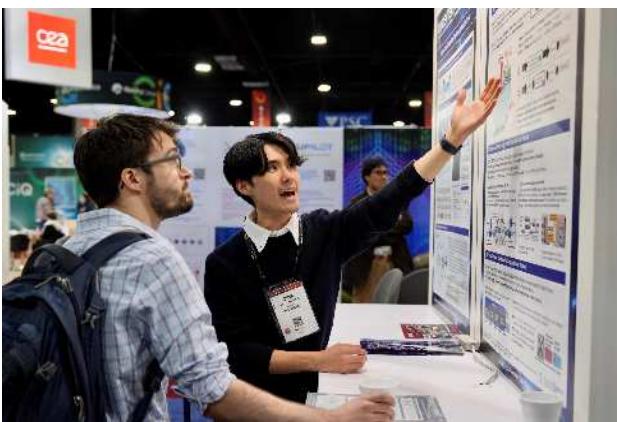


図 8: ポスター説明を行う山本.

本ポスターでは、「ポスト 5G 情報通信システム基盤強化研究開発事業」の一環として取り組んでいる、Cloud-Edge Continuum Computing (CECC) Platform に関する研究成果を報告した（図 6、7、8）。CECC Platform は、クラウド、エッジ、およびデバイスを統合的に活用可能な計算機システムである。本研究では、広域ネットワーク上でデータ転送の遅延を保証する通信プロトコルやネットワーク資源管理手法についての成果を紹介した。また、クラウドやエッジにおける計算資源の即時確保と、迅速なコンテナ起動を実現するためのコンテナチェックポイントシステムの構想についても発表した。

発表では、CECC Platform のアーキテクチャやミュレーション手法、特に Kubernetes の活用方法や、チェックポイント機能のランタイム実装に関する質問が多く寄せられた。また、交通ミュレーションを行う研究者から共同研究の提案も得られ、本プロジェクトの研究の方向性に共感を得られた。

(3) “*Provenance Recording System / Metadata Management for Experimental Data*” (並木、田主)

本ポスターでは、高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所が研究開発を進めている、計算機システムにおいて既存のプログラムなどの資産に変更を加えることなく、自動的に結果データを得るために実行すべきプログラムとそれに与える入力ファイルを記述した来歴を記録するための手法、および非ネットワーク環境の小規模分析室に設置されてある共用分析装置から生み出される計測結果データにデータ利活用に不可欠なメタデータ、固有識別子を付与し、メタデータサーバへ収集、管理するまでのメタデータ管理システムに関する展示を行なった（図 9、10）。

来訪者のうち、来歴に対しては、特に大学、国立研究所の研究者から関心を持たれ、来歴が今後重要なメタデータとなりうることが確認できた。また、Python やコンテナ、オンラインから動的にデータを取得するような比較的新しい使い方に対する対応状況について質問を受け、るべき姿の議論を行うことができた。日本国内と比較して多くの方の具体的な議論を行うことができ、特に米国において研究現場における研究データ管理への関心が高まっていることが窺えた。メタデータ管理システムに対しては、実験系データに関する展示内容であったためか、情報系がメインの来訪者からの関心度は低かった。一方で、オープンリサーチデータのデータ利活用の観点からのメタデータ付与の重要性の説明に対しては、分野を問わずその必要性への理解、および関心が窺えた。

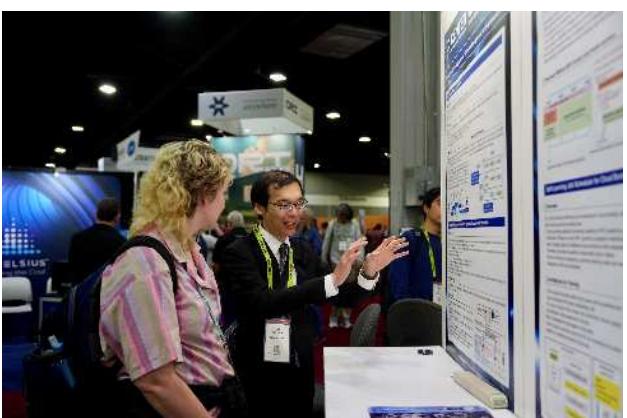


図 9: ポスター説明を行う並木.

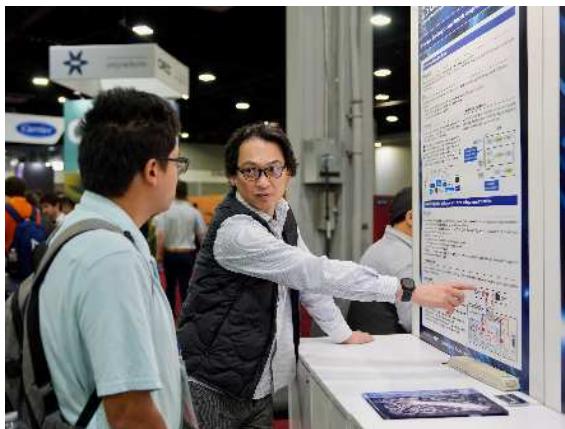


図 10: ポスター説明を行う田主.

- (4) “*MPI Overlapping using Threads Operation / Reinforcement Learning in Job Scheduler*”  
(曾我、野口)



図 11 : ポスター説明を行う曾我.

高性能計算機を用いた大規模シミュレーションの実行時間を短縮する手法としてプロセス間の通信時間を隠蔽（オーバーラップ）するものがある。本研究が提案する演算処理と通信処理のオーバーラップ手法は、MPI ライブラリを用いる分散メモリ並列と OpenMP を用いる共有メモリ並列（スレッド並列）を共用する並列モデルを対象としており、スレッド操作により通信処理（スレッド 0 番が担当）と演算処理（0 番以外のスレッドが担当）を並列に実行することで通信時間の隠蔽を図る。提案手法では各スレッドに対する演算量を従来手法の動的割り当てから静的割り当てに変更することにより、OpenMP のオーバーヘッドを削減する。姫野ベンチマークプロ

グラムや数値流体力学（CFD）解析の実プログラムを用いて評価を行い、MPI の非同期通信を用いるオーバーラップ手法や動的割り当てスレッド操作を用いるオーバーラップ手法より、多くの通信時間を隠蔽することを示した（図 11）。

本ポスター後半では、深層強化学習を用いてオンプレミスとクラウドの計算資源を柔軟に活用するジョブスケジューリング手法について紹介した（図 12）。本研究は、学術機関で提供される HPC システムにおいて、クラウドバースティングによるユーザの待ち時間短縮を目指しつつ、クラウド計算資源の利用コストは最小化するという相反する目的を同時に達成するための機械学習モデルを提案した。提案手法では、Slurm プラグインを用いてジョブキー情報とリソース状態をニューラルネットワークに入力し、その状況において適した資源割当を推論することを説明した。アルゴリズムの面では、選択されなかった行動との比較に基づく差分報酬を設計し、学習の安定性を高めている点を説明した。

質疑応答では、具体的なクラウド計算資源の事例としてどのようなプロバイダやインスタンスを想定しているのかについて質問があった。また、本手法がオンプレミスとクラウドの融合だけでなく、オンプレミス同士の複数 HPC システム間の連携にも適用可能ではないかという指摘があった。



図 12 : ポスター説明を行う野口.

- (5) “*Advanced High-Performance Computing Infrastructure Systems Research Division*”（速水、高橋）



図 13: ポスター説明を行う速水.



図 14: ポスター説明を行う高橋.

本ポスターでは、当センターの先進高性能計算基盤システム研究部門において実施している研究テーマの一部について紹介した（図 13、14）。「歯科パノラマ X 線画像解析のための AI モデル開発」では、歯科診断の補助のため、パノラマ X 線画像から様々な歯の情報（歯番号、歯齶の状態、修復の種類等）を自動的に抽出する AI モデルの研究開発について紹介した。最新の物体検出モデルである YOLOv8 を用い歯を検出した後、個々の歯の画像を分類器に入力するという全体構成を説明し、計算量削減や精度向上に向けた今後の展望についても述べた。来訪者からは、歯科に限らず医療関連データの収集や取扱いに関する質問があった。

「探索的データ解析のための広域科学データ流通基盤」では、広域ネットワークを介して遠隔データの探索的・対話的なデータ解析するためのデータ基盤について紹介した。既存のデータ基盤の多くは、

データの一部のみに興味がある場合や、精度の低下を許容して応答性を優先したい場合など、探索的データ解析の要件を十分に満たしていない。そこで、本研究では、広域拠点に分散した大容量配列データを細粒度・オンデマンド・適応品質で転送する、探索的データ分析のためのデータ流通基盤を目指している。来訪者からは、仮想メモリやファイルシステムのレイヤで実装しないのはなぜか、という質問があり、本基盤の設計について有益な議論ができた。

#### (6) “*Synthetic Population for Real-Scale Social Simulations*” (村田)

本ポスターでは、2019 年度から継続的に実施している JHPCN の合成人口プロジェクトと HPCI 共用ストレージ、2020 年度から 2027 年度まで実施する JST 未来社会創造事業における合成人口データを用いた社会シミュレーション事例に関する報告を行った（図 15）。合成人口プロジェクトでは、大阪大学 D3 センターのスーパーコンピュータを用いて、日本の全世帯の仮想個票を合成するとともに、北海道大学情報基盤センターのハイパフォーマンスインタークラウドを用いてデータベースを構築し、東京大学情報基盤センターと理化学研究所計算科学研究中心の HPCI 共用ストレージを用いてバックアップを確保している。今年度は、合成人口データの仮想実社会データへの拡張に関する報告を加えた。

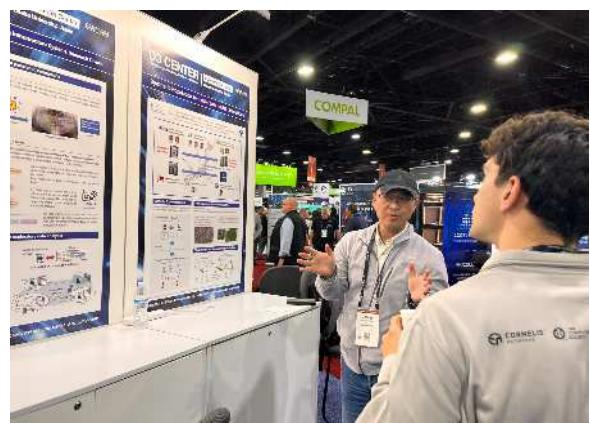


図 15: ポスター説明を行う村田.

展示ブース訪問者からは、仮想個票の合成手法に関する質問が寄せられ、総務省統計局の e-Stat により、全ての自治体で同じフォーマットの統計データ

が利用可能であり、それに基づいて、統計データと仮想世帯集合の合成統計との差異を最小化する形で合成を行っていることを解説した。また、合成人口データを用いたシミュレーションとして震災や感染などの非常時のシミュレーションと共に、少子高齢化社会への対応など平常時のシミュレーションも展開されていることを紹介した。質疑を通して、仮想的な個票データの必要性やそれを用いたシミュレーションの意義についてディスカッションすることができた。

### 情報通信機構 NICT での展示

D3 センターのブース展示と並行して、先進高性能計算基盤システム研究部門と高性能計算・データ分析融合基盤協働研究所で研究開発中の RED-ONION (Research EnhanceD ONION) 技術について、高速データ転送技術の技術検証・性能評価を目的とした実演を、情報通信機構 NICT の研究展示ブースにて行なった（図 16）。

展示は、日米間の回線を用いて巨大研究データを 100 Gbps の回線を用いてサーバ間で転送を行うもので、一方のサーバのストレージに蓄積された 1 ファイルの巨大研究データをもう一方のサーバに高速に転送する。1 TB のデータの転送が 94 秒（実効 85.1 Gbps）で完了することを確認した。

本展示については、SC24 に先立って 2024 年 11 月 11 日に「大阪大学 D3 センターと NEC、国際会議・展示会 SC24 にて 100Gbps のファイル転送実験デモを展示」というタイトルでプレスリリース（<https://www.d3c.osaka-u.ac.jp/2024/11/pre-d3c-nec-sc2-4/>）を行なっている。



図 16: NICT ブースで展示内容を説明する細見。

### 3. おわりに

今年度の展示においても、大阪大学 D3 センターの大規模計算機事業をはじめとし、高性能計算・AI・ネットワーキングに関する研究成果について欧米を中心とした 597 名の来訪者にアウトリーチすることができた。来年度の SC は米国ミズーリ州セントルイス市で同時期に開催されるが、当センターのプレゼンス向上とともに、情報公開、アウトリーチ活動にも引き続き尽力していきたい。

関係各位には更なるご支援とご協力をお願いしたい。

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

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



# 第30回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2024)報告および 第31回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2025)告知

大阪大学 D3 センター教授 吉野 元

## 1. SuperCon2024

昨年 2024 年 8 月 19 日から 23 日までの 5 日間に高校生・高専生を対象とする「スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2024)」の本選を本年もオンラインにて開催しました。これに向けて予選が行われ、20 チームが予選を通過しました。(その結果は 5.Web に掲載されております。) オンライン開催であるため地域に関係なく、上位 20 チームが本選に参加する、ということになりました。

ここでは本選について説明いたします。このコンテストは、2 名又は 3 名を 1 チームとする高校生・高専生の参加者たちが、与えられた課題を解くプログラムを 3 日間に渡って作成し、最終日にスーパーコンピュータで実行して、解答の正確さや計算の速さを競うもので、そのレベルの高さから、別名「電脳甲子園」とも呼ばれています。過去の出場者が大学進学後に国際大学対抗プログラミングコンテストで活躍するなど、次世代の情報科学を担う若手育成にも貢献しており、2008 年度の文部科学大臣賞も受賞しています。

1995 年の第 1 回から 2005 年の第 11 回までは東京工業大学（東工大）学術国際情報センター(Global Scientific Information and Computing Center:GSIC)の単独主催でしたが、2006 年の第 12 回からは大阪大学（阪大）(Cybermedia Center:CMC)も共同主催しています。予選に参加したチームの中から、富士川以東 50Hz 地域からは 10 チームが、60Hz 地域からはやはり 10 チームが参加していました。東工大と阪大の二つの会場で同時に開催した年は、wiki やポリコムなどで相互に交流し、開会式・表彰式などもポリコムを使って二元中継で行ってきました。このコンテストは 5 日間にも渡る長期戦で、実際にスーパーコンピュータを高校生・高専生が使うことができるという、世界的にも大変ユニークなものです。原則として毎

年交互に両大学のスーパーコンピュータを使います。2007、2011 年は阪大 CMC の SX-8R が、2009 年は SX-9 が、2015 年、2017 年は SX-ACE が使われました。2020 年の本選では SQUID が用いられる予定でしたが中止されました。その代わりに理化学研究所のスーパーコンピュータ富嶽を使った臨時イベント（富嶽チャレンジ）が開催されました。これを機に、理研もスーパーコンピューティングコンテストに参画することになり、2021 年、2022 年また 2023 年も本選では理研のスーパーコンピュータ富嶽が用いられました。2024 年は阪大のスーパーコンピュータ SQUID が初めて用いられました。前回同様、これまでの wiki、ポリコムに代わって discord、slack が相互交流に使われ、開会式・表彰式、問題説明、チュートリアルなどでは zoom が用いられています。

## 2. 予選

2024 年の予選課題は 6 月 5 日に下記 (5.Web) の SuperCon web に公表されました。この予選課題を解くプログラムを作成し、6 月 21 日正午までにプログラムを含む必要書類を添付してメールで申し込んでもらいました。予選問題は、スーパーコンピュータを使わなくても学校や家庭にある普通のパソコンでも解けるような課題が出題されます。2024 年の予選課題は、東工大の作成チームによる「格子状の街の移動」というものでした。起伏の激しい碁盤目状の町の中の 2 点間の最短時間移動経路探索を高速に行うというものです。これを含め、過去の予選課題、本選課題は SuperCon web に全て掲載されています。また、参加者が 2 名以上集まらない人のために、希望者には「認定証」も発行しています。予選課題を正確に解くプログラムが書けたら、「SuperCon 1 級」が認定されます。問題のレベルに応じて 2 級と 3 級もあります。

### 3. 本選

本選の初日は開会式で参加チームの紹介、本選課題の発表、攻略法の解説がありました。本選課題は阪大の作成チームによる「森林火災の消火」という問題でした。これはある森林火災の数理モデルを用いて大規模な数値シミュレーションを行い、森林火災による森林の延焼を最小限に食い止める消火活動を立案するプログラムを作成するというものです。用いられた数理モデルは、感染症の伝搬のモデルとして有名な SIR モデルに類似したもので SQUID のベクトルノードでの高速並列計算が生かせるように設定したものです。実際の本選では、課題に取り組む前に、阪大のスーパーコンピュータ SQUID、また OpenMP/MPI を用いた並列プログラミングに関するオリエンテーションと講義が行われ、チームごとに本選課題を解くためのプログラム設計に入りました。そして、本選 2 日目から 4 日目の午前中まではチームごとにプログラムを作成しました。大学生・大学院生、スタッフがチューターとしてバグ取りなどを手伝いましたが、課題そのものに関する助言はしません。最終日の成果発表会、表彰式の後にはオンライン懇親会も行われました。本高校生・高専生の参加者たちと、両大学の教員、学生チューターたちが、プログラミングや大学について語らう大切な時間となっています。

### 4. SuperCon 2025 の告知

2025 年は 8 月 18 日（月）から 22 日（金）までの 5 日間での開催を予定しています。今年度もオンライン開催となります。新型コロナなどのパンデミックは現時点では起こっておりませんが、オンライン開催の方が全国の高校生にとって参加しやすいなどのメリットが大きいことが昨年度までの実施経験からわかり、オンライン開催とした次第です。予選課題は 5 月 28 日に公表、課題提出〆切は 6 月 13 日正午です。今回は、東京科学大のスパコン、TSUBAME を使用する予定です。本年もチャレンジする高校生・高専生、引率の先生方など参加者の皆さんに喜んでいただけるよう様々な工夫を凝らそうと関係者一同

考えています。本稿が皆様のお目に触れるときには既にスケジュールが進行しているかもしれません、もしも可能ならば皆様もお知り合いの高校生に SuperCon2025 というものがあり、大変に楽しい行事であることを呼びかけてください。また、来年以降、すなわち SuperCon2026 以降への参加、お申し込みをご検討頂ければ幸いです。

### 5. Web

コンテストページです。ぜひ一度御覧ください。

SuperCon2024（第 30 回大会）

<https://www.supercon.cii.isct.ac.jp/attwiki/index.php?SupercomputingContest2024>

SuperCon2025（第 31 回大会）

<https://www.supercon.cii.isct.ac.jp/>

# 大規模計算機システム利用者講習会等の紹介

大阪大学 D3 センター教授 降旗 大介

## 1. 概要

大阪大学の大規模計算機システムの利用者講習会について紹介しましょう。まず、D3 センターの教職員をはじめとしてこの大規模計算機システムの運営、開発、支援に関わっている人々は、ユーザにより有効にシステムを活用していただくために何が出来るか、と日々考えています。その一端が、マニュアル・ドキュメント類を充実させること、ユーザからの質問を受け付けて遗漏なく適切に返答する仕組み作りと維持、そして得られたユーザにとって有益な情報を明文化するための web における FAQ の整備、などの活動になります。

こうした活動の中で重要なものの一つが、ここで紹介する利用者への情報提供 (web によるシステム紹介や利用の手引等) と利用者向けの講習会です。情報提供は web で行えば場所・時間の制約がなく、ユーザの皆様が困ったときに即座に頼れる、非常に有益な存在です。そして、利用者への講習会は、ユーザへシステムや計算機の知識を伝える場だというだけでなく、講習会の場での質疑などを通じてシステム運営等に関わっている人とユーザとが直接やりとり出来る場でもあります。こうした場はお互いに大変貴重な機会です。そのため、利用者講習会にはしばしば、講習会担当者だけでなく、大規模計算機システムの運営・開発・管理・支援などを行っている関係者が立ち会うことがあります。そのように力の入った利用者講習会について、以下、本稿で皆様にご説明を申し上げます。

これら講習会の内容ですが、スーパーコンピュータの OS である Unix 環境や、プログラム投入のためのバッチシステム、一般的の PC 等とは異なるスーパーコンピュータの特殊なハードウェアについての概要説明といった入門的内容からはじめります。さらに、スーパーコンピュータの面白躍如たる大規模計算を行うユーザにとって重要な並列計算の基礎、

OpenMP、MPI などの並列計算通信プロトコルの概要から GPU を使いこなすための OpenACC についてのプログラミング技法の詳細、intel コンパイラに関する詳しい解説、スーパーコンピュータ上のコンテナ利用講習会といった、大型計算機にまつわる内容の講習会もあります。そしてさらに発展的な講習会として、阪大が誇るスーパーコンピュータ SQUID 特有のハードウェアであるベクトルプロセッサ SX-Aurora TSUBASA を用いる高速化技法、昨今のデータ指向型研究へ対応可能な大阪大学のストレージシステム ONION の利用の仕方、KKR グリーン関数法を用いた第一原理計算プログラム AkaiKKR、“非”熱加工を理解・解析するための電子と光の相互作用をシミュレートする SALMON といった専門家用の特殊なソフトウェア等々、多岐にわたる内容のものがあります。

これらの内容はユーザの要望に沿って運営関係者が検討し、計画を作っています。詳しくは次ページに掲載しております表に掲載しておりますが、大規模計算機の利用者だけではなく、学生、教員、研究者を幅広く対象とし、年に 10 回~20 回程度開催しております (2024 年度は 15 回開催いたしました)。これらについては、より詳細な情報を D3 センター大規模計算機システムの web において掲載しておりますので、ぜひご参照ください。

## 2. 多忙な方も参加しやすく

御存知の通り、近年は学部学生、大学院生、教員、そして職員も大変に多忙ですので、講習会に参加したくともスケジュールが合わないことがあります。こうした事情を考慮しまして、一部の講習会はほぼ同じ内容の講習会を時期をずらして 5 月から 6 月後半に一回、9 月頭~12 月頃に一回と、年に二回開催するように工夫しています。この時期については、「学期始まりや学期末の時期は外して欲しい」「あ

まり遅い時期では、学生の研究開始に間に合わない」などのユーザの声をうけ、なるべく多くのユーザが参加できるようにと配慮して決定したものです。また、以前は利用者講習会は現場での対面開催のみでした。ですが、2019年以降、その一部についてオンライン配信を開始し、ユーザがより参加しやすい形へと移行しつつあります。実際、講師の方々の協力もあり、2024年もすべての利用者講習会を無事にオンラインにて実施することができました。

また、スーパーコンピュータの高度なプログラミングについてや、AkaiKKR、SALMONなどの研究者用専門ソフトウェアについてなど、高度な内容の講習会では講師を確保しにくいという問題があります。これに対し、われわれは日本電気株式会社様、プロメテック・ソフトウェア株式会社様、エクセルソフト株式会社様、高度情報科学技術研究機構様、株式会社アカデメイア様、Q-LEAP 先端レーザーイノベーション拠点「光量子科学によるものづくり CPS 化拠点」部門様、量子科学技術研究開発機構 関西光量子科学研究所様などの皆様と協力して講師を確保するようにしており、これにより高度な内容の講習会の開催を実現しています。こうした努力の甲斐あってか、これまでに各講習会ともに一定数のユーザの参加をいただいており、ユーザの皆様のお役に立てているように自負しております。

### 3. 初学者にも優しく

対象がスーパーコンピュータということもあり、未参加の方にとって講習会は敷居が高いと思うこともあるでしょう。しかし、先に述べたように初学者向けの講習会もあります。2024年の15回の講習会のうち1/4ほどの開催は初学者が対象のものと言ってよいでしょう。具体的には、OSである Unix の簡単な操作方法の解説や、スーパーコンピュータのハードウェアの概要説明、細かい技法の説明の前に必要となる並列計算の概念の説明、バッチシステムの解説、そしてコンパイラの説明などからなります。スーパーコンピュータを使うユーザというと、こうした知識やプログラミング技法について通じたプロ

フェッショナルばかりと想像されるかもしれません、そうではないのです。どなたも最初は初心者ですし、そもそもスーパーコンピュータの利用者は「計算したいことについての専門家」であって、計算機の専門家ではないのです。そして、細かい技術についてのマニュアルは豊富に見つかっても、初心者が把握しにくい基礎的な概念や手法についての良い資料・ドキュメント類は探しにくいものです。われわれ D3 センターでは、こうした利用者講習会を通じてより広い分野・方面の初学者に困難を克服してシステムを有意義に使ってもらうべく、常に初学者に優しくありたいと考え、このような講習会構成にしています。

### 4. プロフェッショナルな方も

もちろん、われわれは初学者ばかりでなくプロフェッショナルとも言うべき高度な能力を持つユーザへの支援も怠っておりません。各種の専門的な内容について、多くの講習会を計画し、そして実施しています。大阪大学の誇る大規模計算機である SQUID を利用しての講習会、近年の並列計算プログラミングに必須である OpenMP や MPI についての講習会、GPU プログラミングに必要な OpenACC の講習会や SQUID に搭載されているベクトルプロセッサ SX-Aurora TSUBASA の講習会、CPU ノードにおける高速化技法の講習会、近代型データストレージシステム ONION の講習会、そして、第一原理計算プログラム AkaiKKR や電子・光の相互作用シミュレータ SALMON の講習会も行っています。こうした高度な内容については座学のみでは情報がうまく伝わらない側面がありますので、一部の講習会では無料配布アカウントを用いて大規模計算機システムそのものを実際に使って行う実習形式をとっています。微細な部分に至る具体的な体験を通じて現実的な議論を行うことが出来る機会としてもユーザの皆様にご利用いただいております。

## 5. ぜひご参加され、そしてフィードバックを

講習会の情報については、われわれ D3 センターの web [https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/lecture\\_event/lecture/](https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/lecture_event/lecture/) にて常に公開しております。情報は随時更新しておりますので、ぜひ頻繁にご覧になり、ご興味のある講習会に積極的にご参加ください。皆様のご参加を常に歓迎いたします。

また、大規模計算機のハードウェア、ソフトウェア、そしてユーザの使い方といったものは日々変化していくものです。上記に述べたように様々な工夫や努力を通じて開催している講習会ではありますが、こうした変化に合わせ、講習会のありかたも変化、進歩していく必要があります。そして、それにはユーザの方々からいただく意見がなにより重要です。そのフィードバックの先により良い講習会の実現があるのです。ユーザの皆様におかれましては、遠慮をせずに、いつでも構いませんので、講習会についての要望をぜひ D3 センターまでお聞かせください。

## 2025 年度 大規模計算機システム利用講習会

	講習会名	開催日時	講 師
1	スパコンに通じる並列プログラミングの基礎	6月3日 9月開催予定	D3センター 宮武 勇登 準教授
2	初めてのスパコン	6月6日 9月開催予定	D3センター 木戸 善之 招へい教員（招へい教授）、 情報基盤課 技術職員
3	OpenMP 入門	6月9日	D3センター 吉野 元 教授
4	並列プログラミング入門 (OpenMP/MPI)	7月3日	エクセルソフト株式会社
5	スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用	7月18日	プロメテック・ソフトウェア株式会社
6	SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎	7月23日	日本電気株式会社
7	ONION 活用講習会	7月25日	プロメテック・ソフトウェア株式会社
8	コンテナ入門	7月29日	日本電気株式会社
9	汎用 CPU ノード高速化技法の基礎 (Intel コンパイラ)	7月31日	日本電気株式会社
10	GPU プログラミング入門 (OpenACC)	調整中	日本電気株式会社
11	GPU プログラミング実践 (OpenACC)	調整中	日本電気株式会社

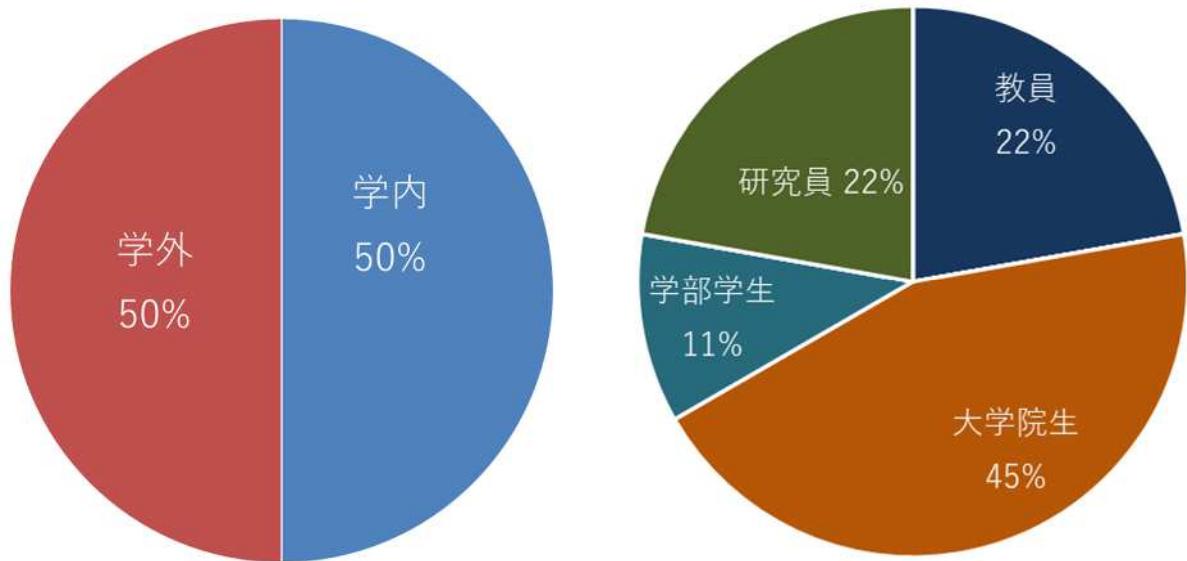
※全てオンラインでの開催

## 2024 年度 大規模計算機システム利用講習会 アンケート集計結果

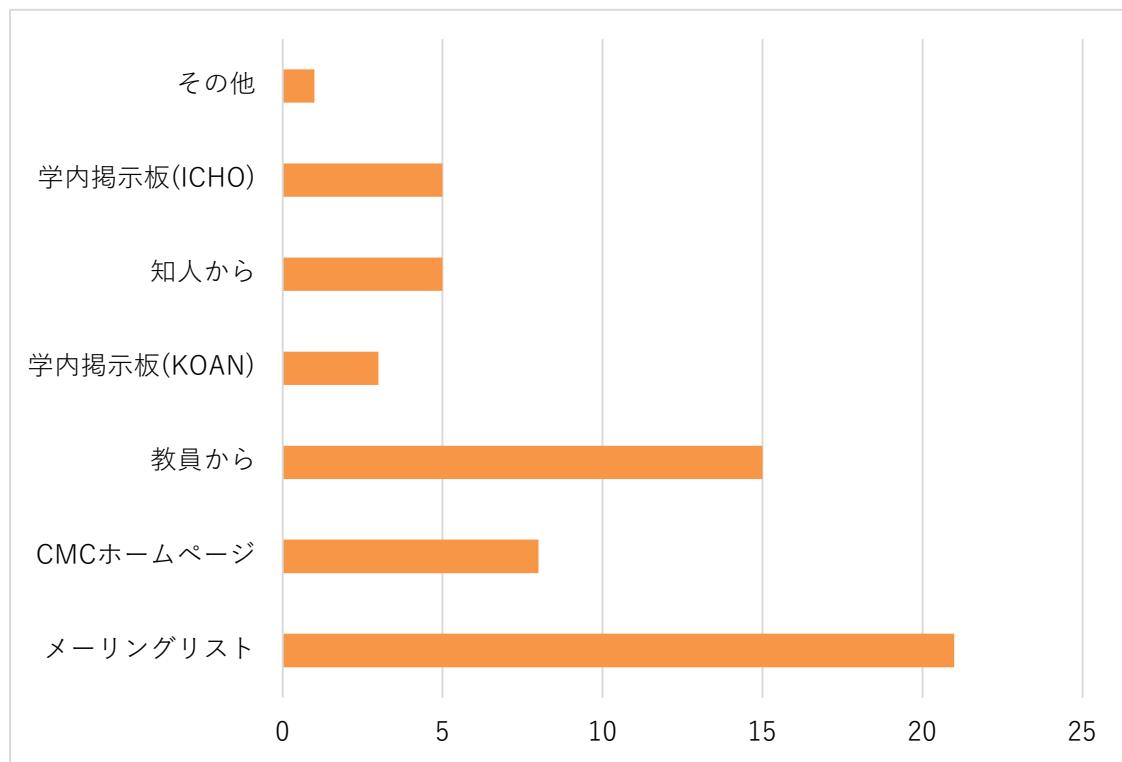
### ◆受講者数（すべてオンラインで開催）

講習会名	申込者数	受講者数
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(6/3)	28	22
初めてのスパコン(6/6)	23	17
OpenMP 入門(6/12)	17	13
並列プログラミング入門(OpenMP/MPI)(6/17)	14	9
スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用(6/18)	7	5
SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎(6/24)	3	2
ONION 活用講習会(6/26)	7	5
GPU プログラミング入門 (OpenACC) (6/27)	12	10
コンテナ入門(6/28)	12	7
GPU プログラミング実践 (OpenACC) (7/4)	17	12
汎用 CPU ノード 高速化技法の基礎 (Intel コンパイラ) (7/9)	10	2
初めてのスパコン(9/5)	25	17
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(9/25)	31	21
合計	206	142

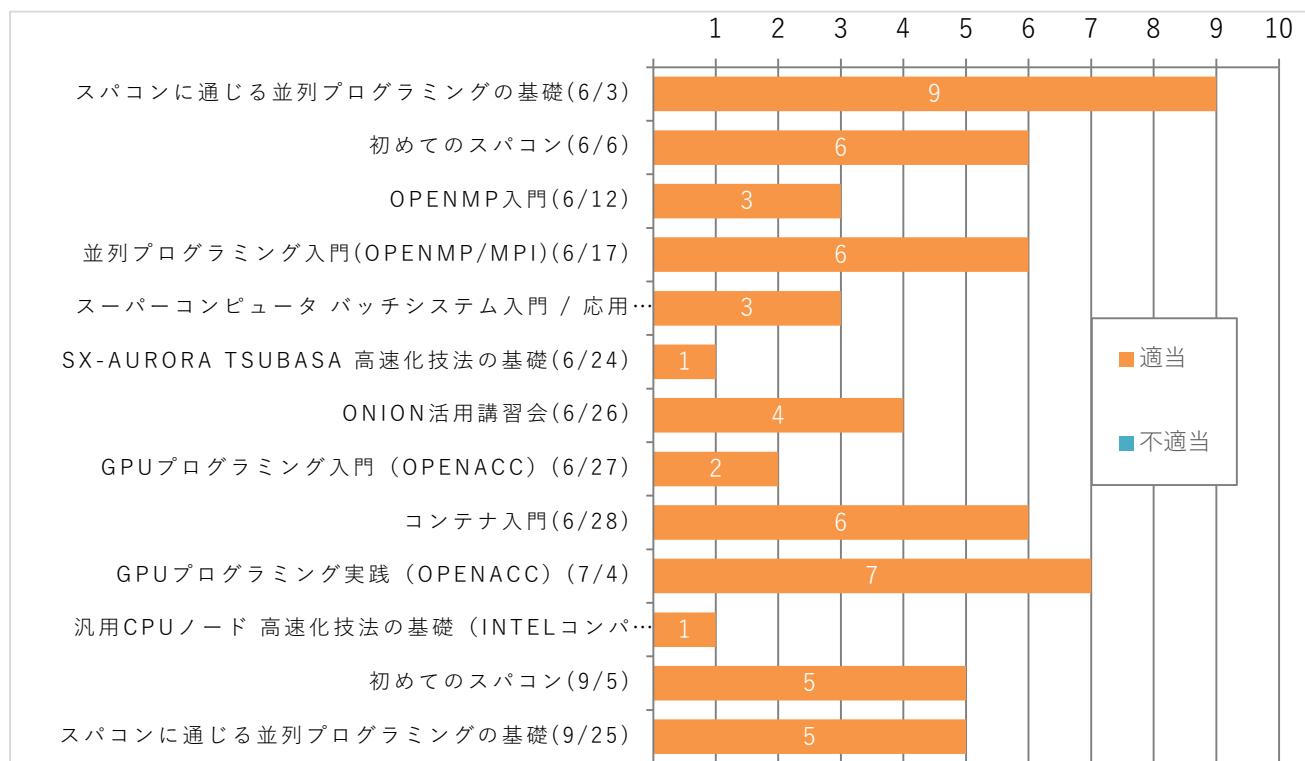
◆受講者の内訳



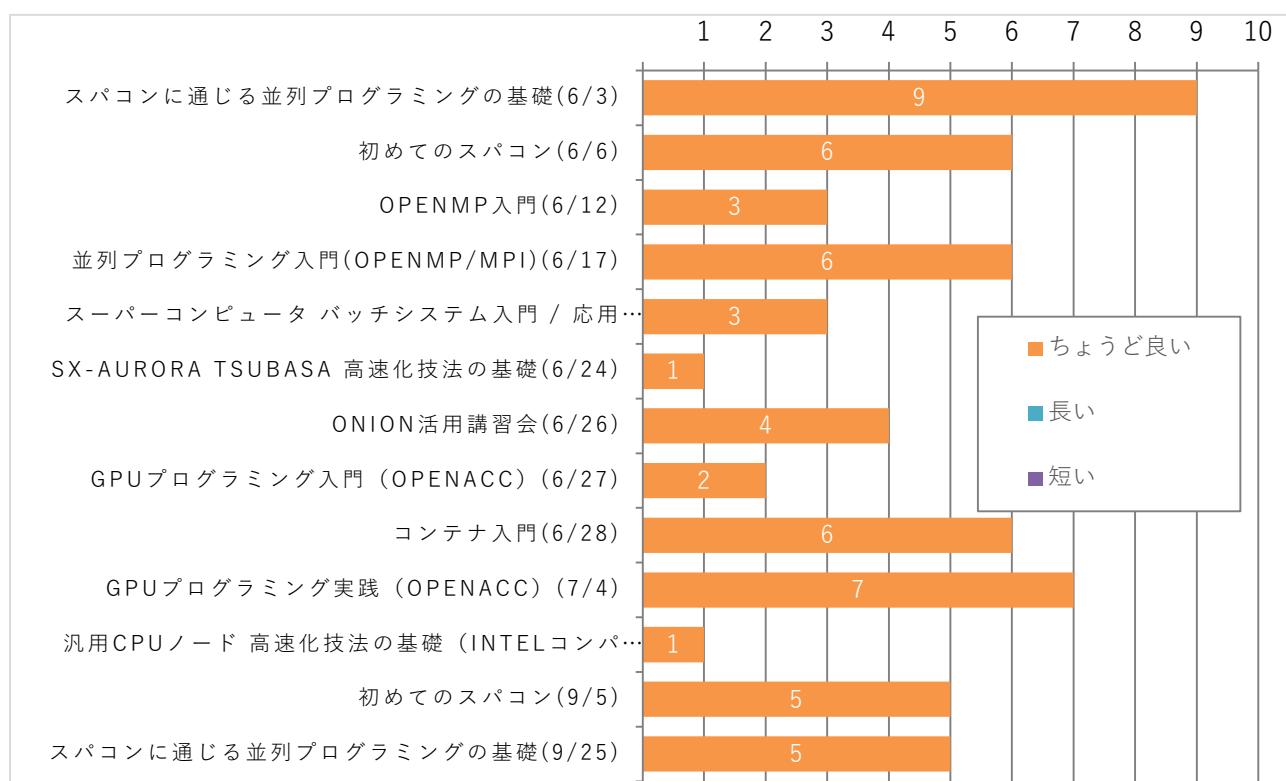
◆講習会についてどのようにお知りになりましたか。（複数回答可）



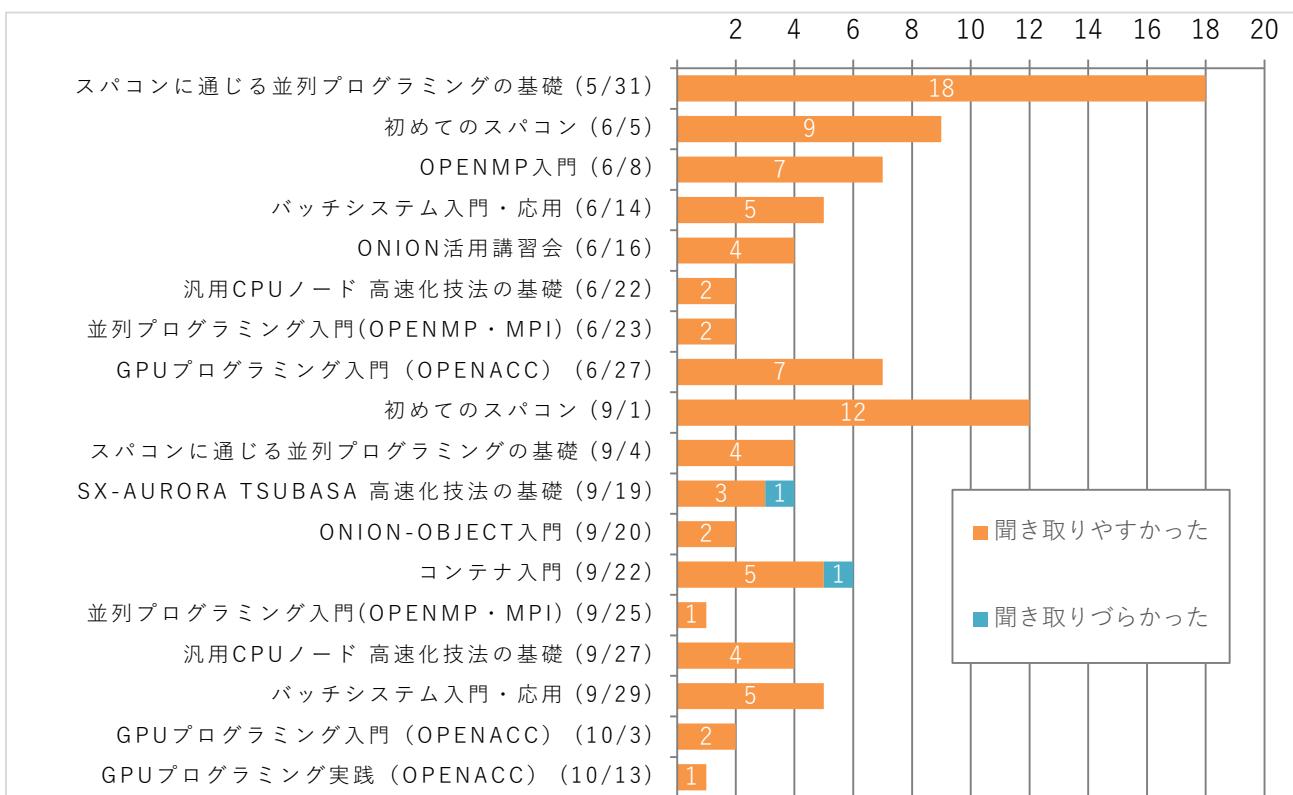
◆開催日は適当でしたか。



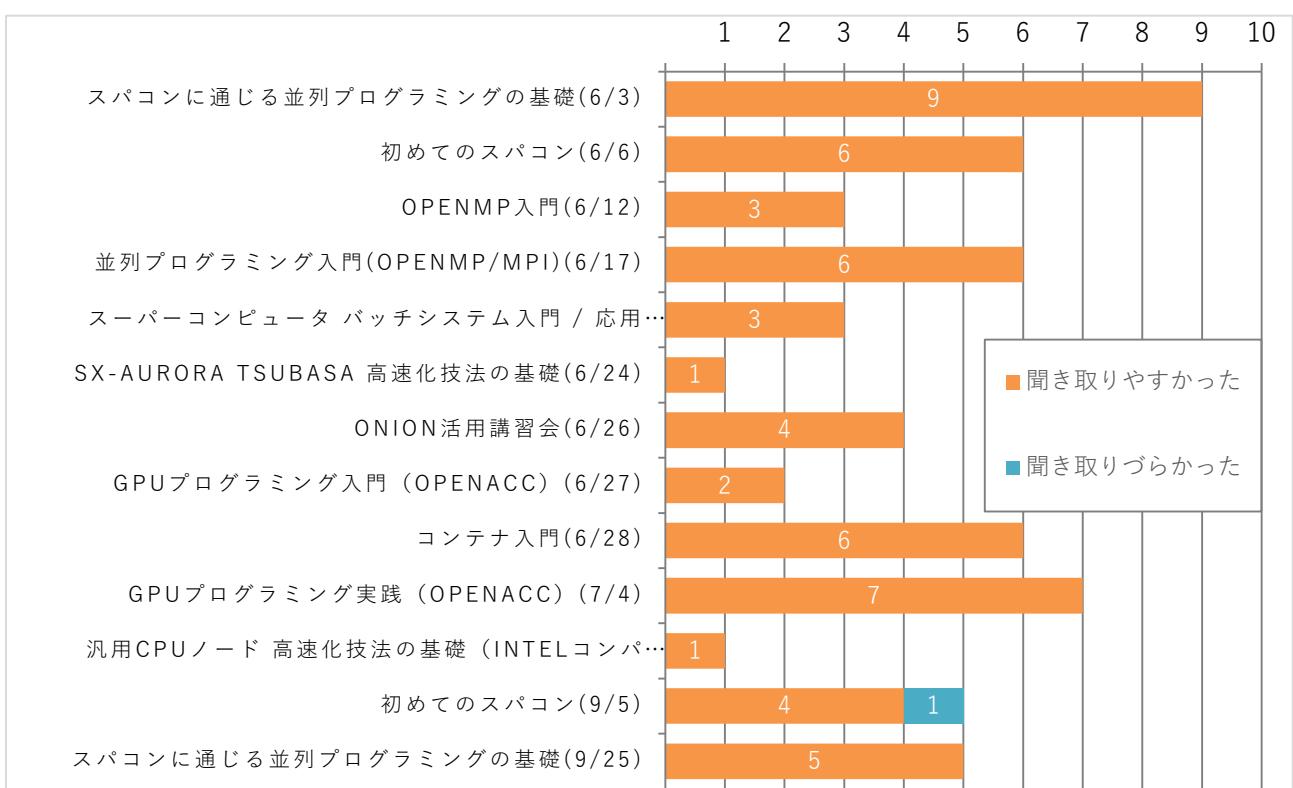
◆講習会の時間は適当でしたか。



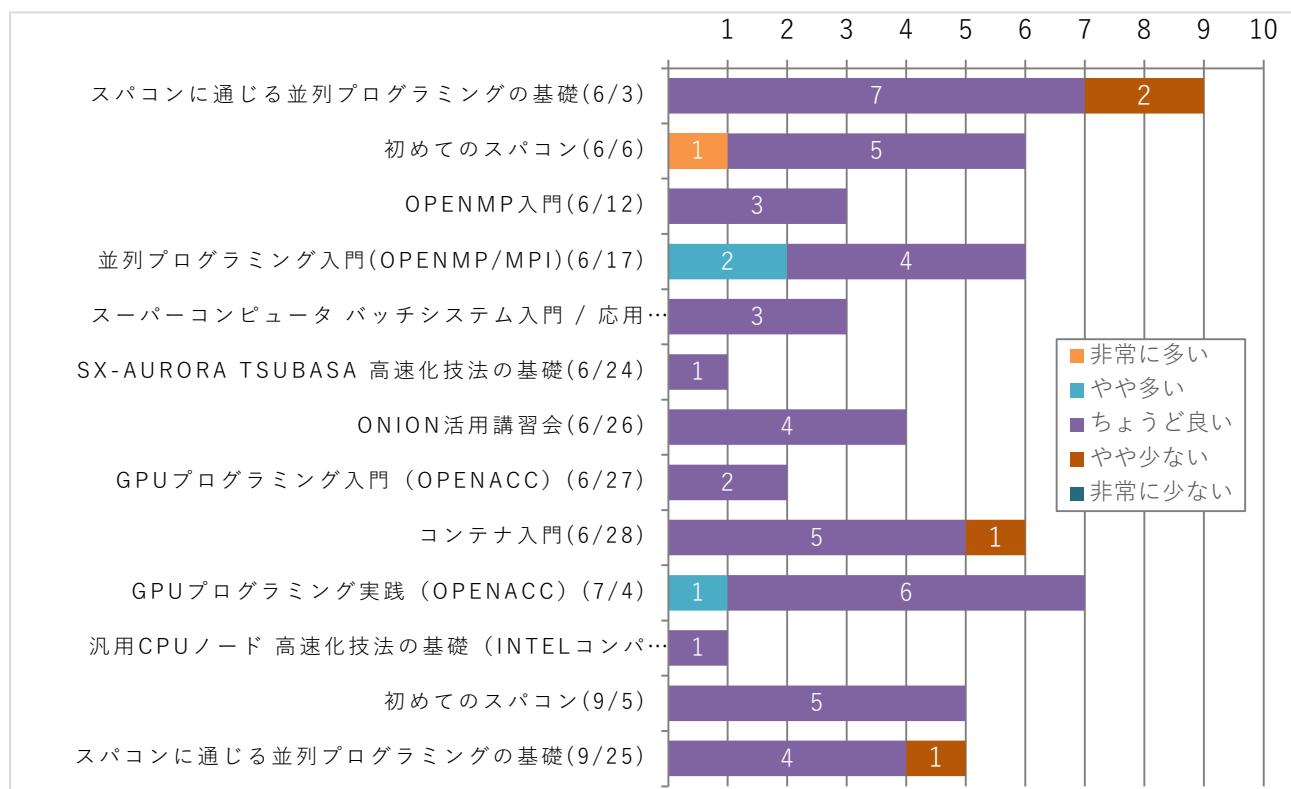
◆今回の講習会の音声はいいかがでしたか。



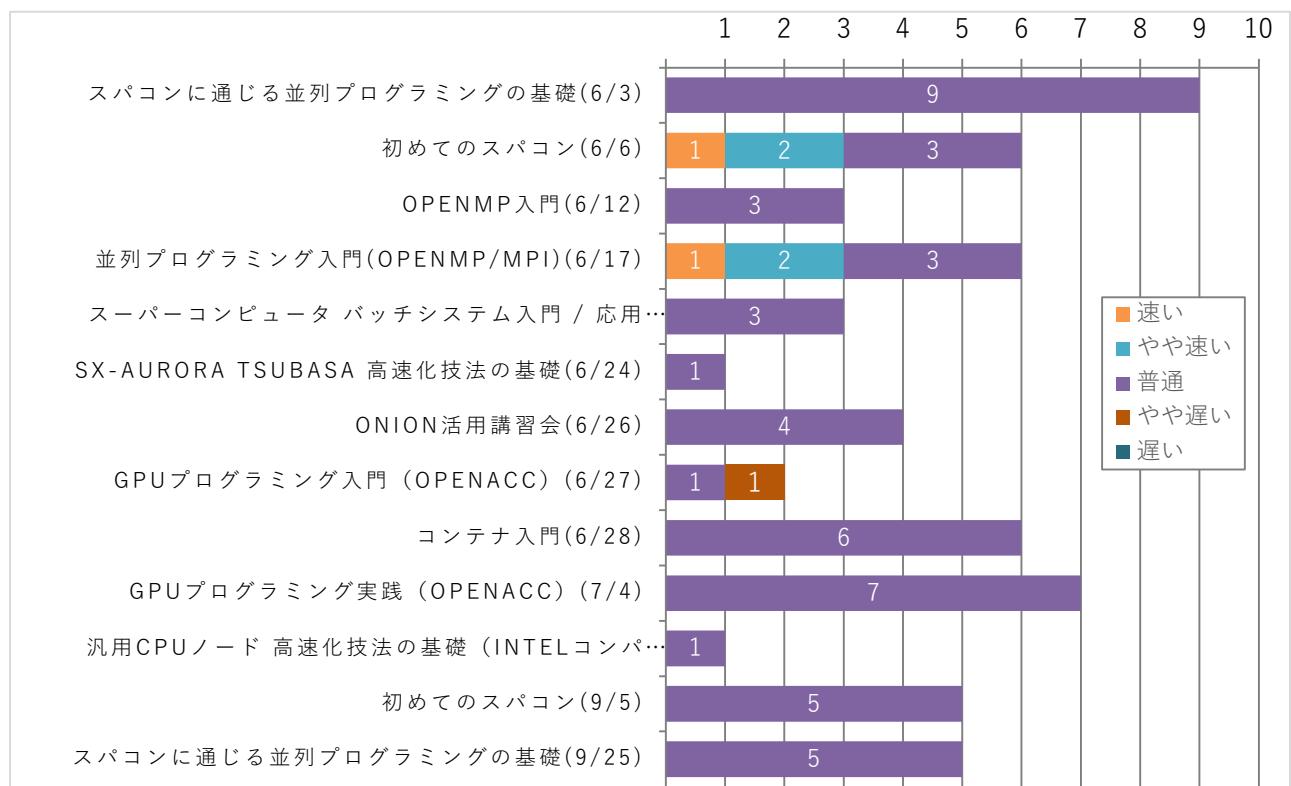
◆講習会の内容はどうでしたか。



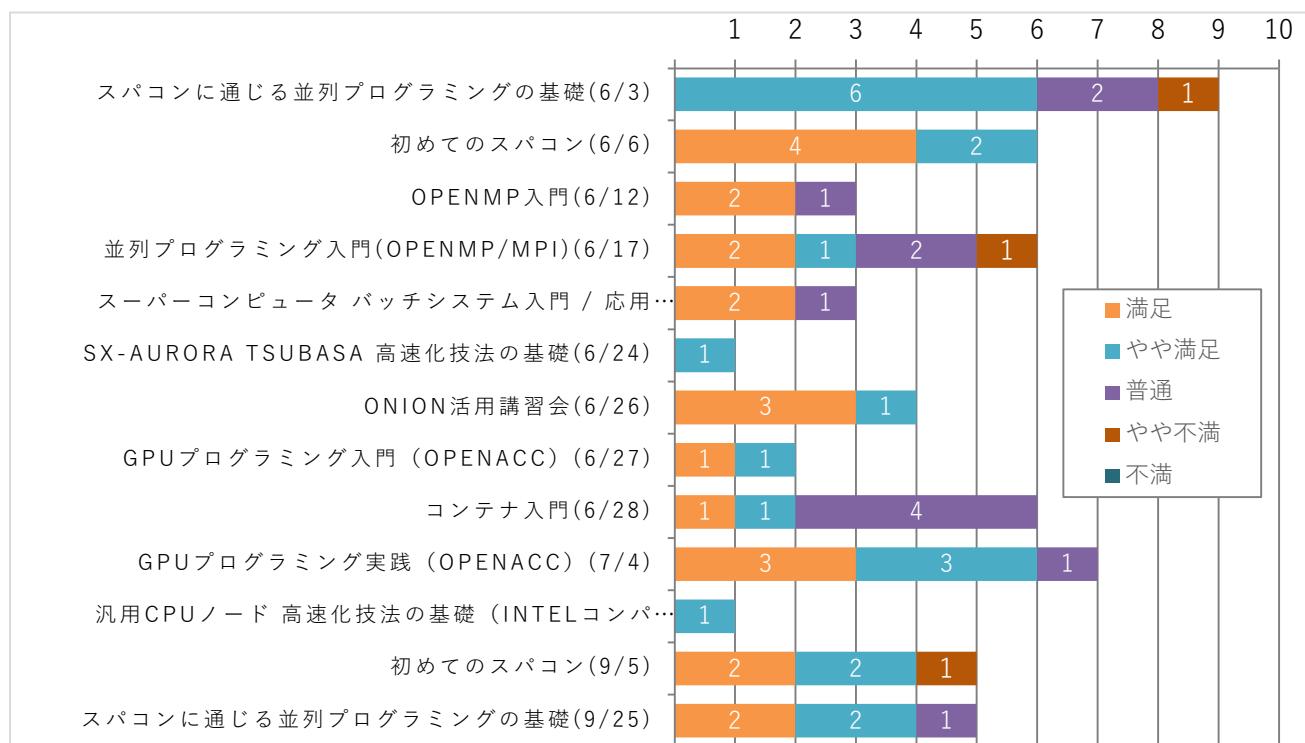
◆講習会で取り扱った内容量はどうでしたか。



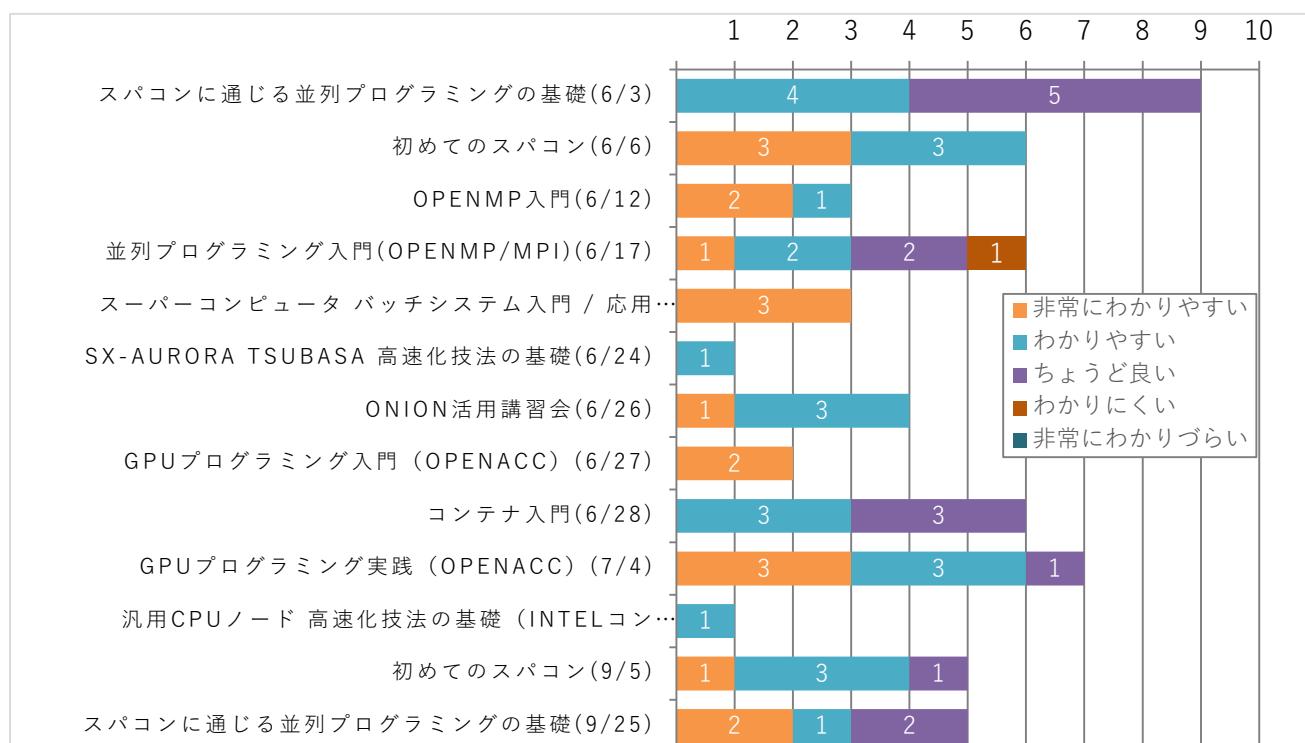
◆講師の進め方はどうでしたか。



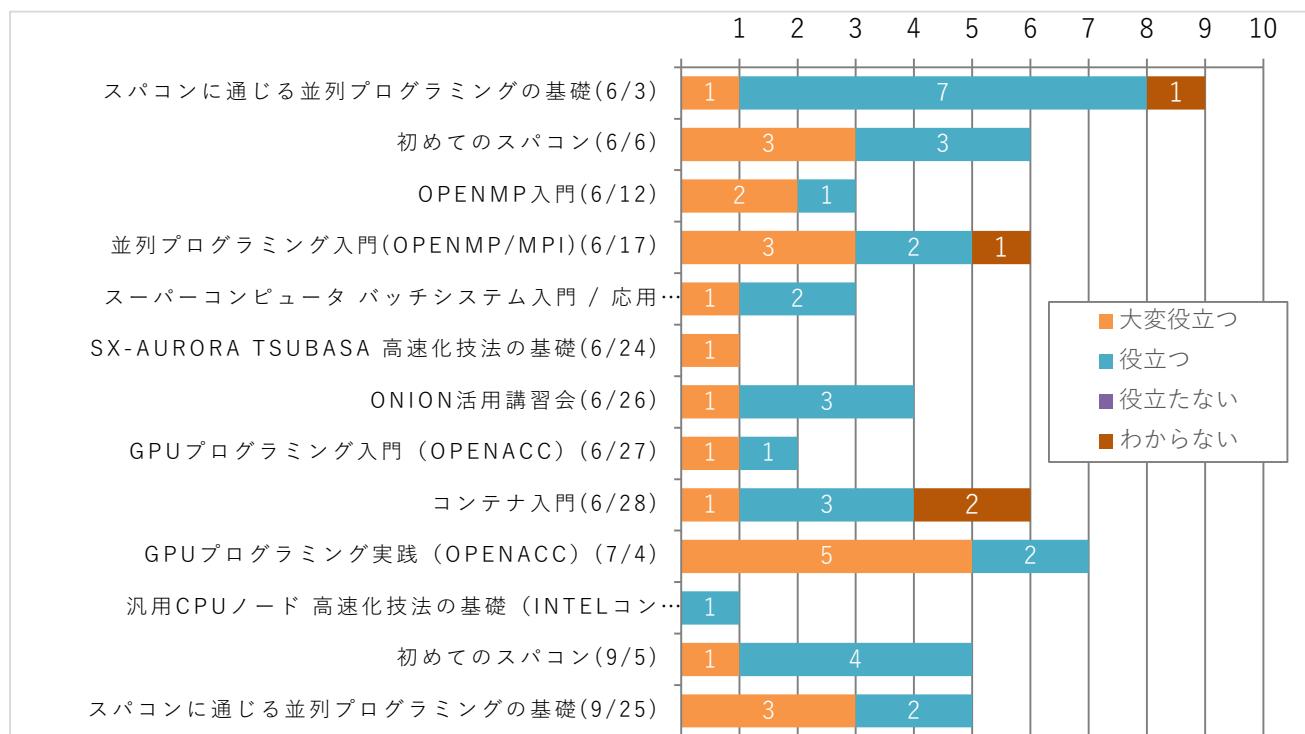
◆満足度は？



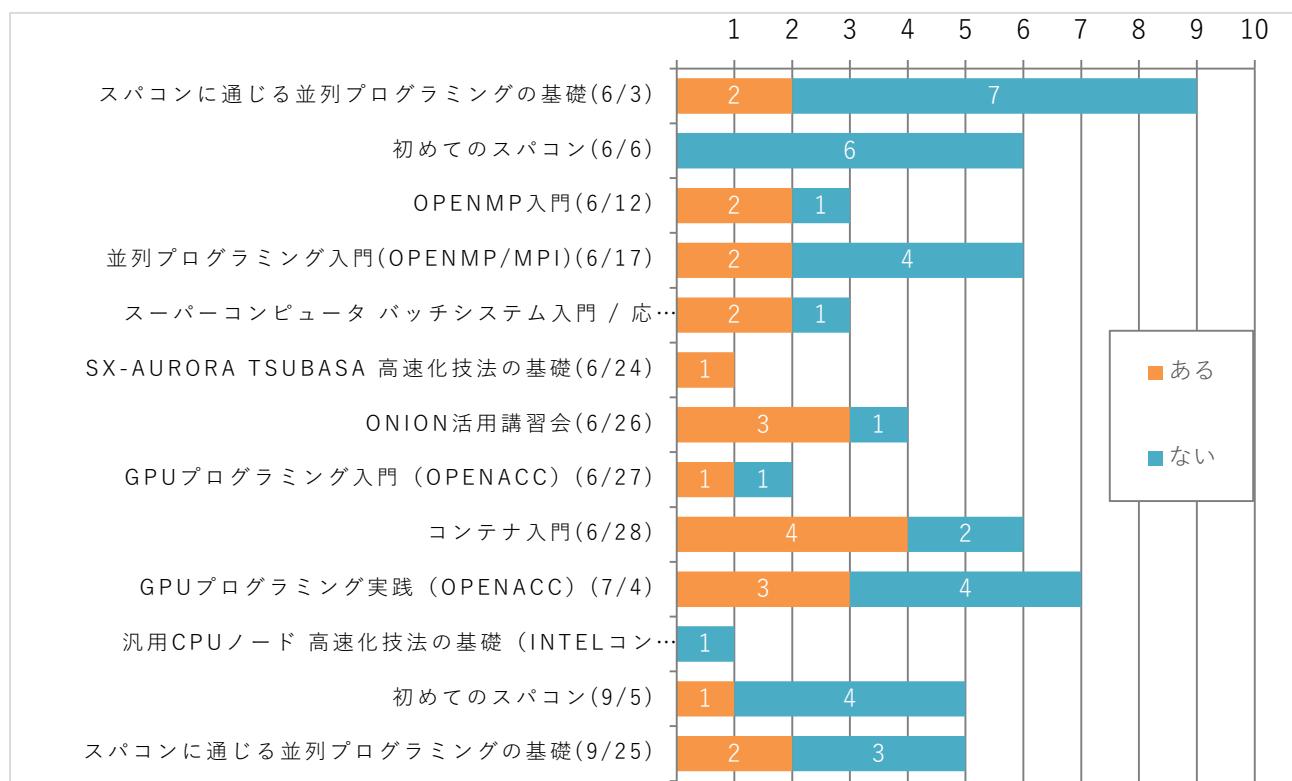
◆講習会の資料はどうでしたか。



◆皆さんの今後の研究・業務・勉学に役立つと思いますか。



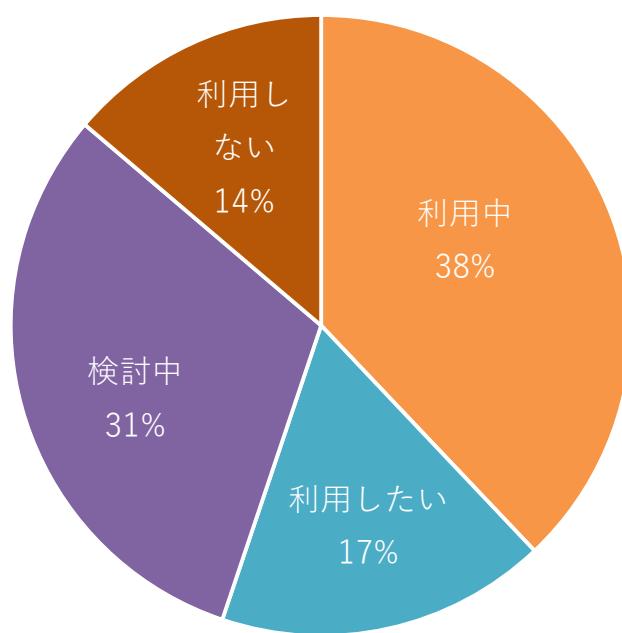
◆他の情報基盤センター等も含め、これまでにスーパーコンピュータを利用したことがありますか。



### ◆ 「ある」と回答された方の利用方法



◆D 3センターの大規模計算機システムの利用を希望されますか。



## 2025 年度「HPCI 利用」の活動状況

HPCI (High Performance Computing Infrastructure) システムは、個別の計算資源提供機関ごとに分断されがちな全国の幅広いハイパフォーマンスコンピューティング (HPC) ユーザ層が全国の HPC リソースを効率よく利用できる体制と仕組みを整備し提供することを目的として構築され、2012 年 10 月より運用開始しました。北海道大学、東北大学、筑波大学、東京大学、東京科学大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学の各情報基盤センター、及び理化学研究所、海洋研究開発機構、統計数理研究所が資源提供機関となり、計算機資源や、共有ストレージ、ネットワーク、認証基盤、可視化装置等といったシステムを、中立・公正で科学的・技術的・社会的根拠に基づき配分・提供しています。

### 本センターの計算機資源を利用する 2025 年度 HPCI 採択課題一覧

利用枠	研究課題名
一般課題	星形成と惑星形成分野を横断する大規模数値シミュレーション
一般課題	柔軟構造大気突入機の流体構造連成解析と動的モード分解
一般課題	有効電荷を加味した機械学習力場によるイオン液体・濃厚電解液系シミュレーション
一般課題	量子ユニタリ回路ダイナミクスで実現する新奇非平衡量子状態
一般課題	超高速・大規模 QM/MM 分子動力学計算に基づく酵素反応機構の解明
一般課題	カーボンニュートラルに向けたガスタービン燃焼器の乱流 LES 実証解析
一般課題	無衝突降着円盤中の磁化プラズマ乱流による粒子加速
一般課題	宇宙論的流体シミュレーションデータベースの構築と観測的宇宙論
一般課題	テンソルネットワーク法を用いた素粒子物理学の研究
一般課題	潤滑油中の添加剤および増稠剤の自己組織化シミュレーション
一般課題	気象の実際的問題への適用に向けた超水滴法の性能検証と改良
一般課題	不均一な構造を有するナノ物質や固液界面の光や電圧に対する応答機構
一般課題	フラグメント分子軌道法による構造生物学と量子化学の連携基盤の構築
一般課題	カーボンニュートラル実現に向けたデータ駆動に基づく革新的ポリマーナノコン ポジット 絶縁材料の創成技術
一般課題	自由エネルギー摂動法パイプラインの高度化
一般課題	スケールド・シュレーディンガー方程式の厳密解法による超精密量子化学計算
一般課題	第一原理計算を用いた非調和フォノン特性データベースの構築
若手課題	Non-dilute simulation of finite-size Kolmogorov-scale particles

若手課題	テンソル繰り込み群に基づく新しい相転移解析手法の開発と応用
若手課題	非平衡グリーン関数法を用いた核分裂の微視的機構の解明
若手課題	Direct numerical simulation on high Weber number bubbles: analysis of boundary layer development impact on bubbles
若手課題	水溶性高分子及び小分子の各種環境における集合様態と挙動に関する分子論的研究（1）
産業課題	深層学習を活用した高解像度空間的遺伝子発現データの大規模並列解析による動脈硬化メカニズムの解明
産業課題	次世代パワー・デバイス用 SiC Remote Epitaxial 膜の Peel メカニズム解明

## 2025 年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況

「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」は、北海道大学、東北大学、東京大学、東京科学大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学にそれぞれ附置するスーパーコンピュータを持つ 8 つの共同利用の施設を構成拠点とし、東京大学情報基盤センターがその中核拠点として機能する「ネットワーク型」共同利用・共同研究拠点として、文部科学省の認可を受け、平成 22 年 4 月より本格的に活動を開始しました。

本ネットワーク型拠点の目的は、超大規模計算機と大容量のストレージおよびネットワークなどの情報基盤を用いて、地球環境、エネルギー、物質材料、ゲノム情報、Web データ、学術情報、センサーネットワークからの時系列データ、映像データ、プログラム解析、その他情報処理一般の分野における、これまでに解決や解明が極めて困難とされてきた、いわゆるグランドチャレンジ的な問題について、学際的な共同利用・共同研究を実施することにより、我が国の学術・研究基盤の更なる高度化と恒常的な発展に資することにあります。本ネットワーク型拠点には上記の分野における多数の先導的研究者が在籍しており、これらの研究者との共同研究によって、研究テーマの一層の発展が期待できます。

2025 年度の課題募集には合計 74 課題が採択されました。このうち以下の 16 課題が本センターの計算機資源を利用することになっています。

課題代表者	研究課題名
中澤 嵩 様 (金沢大学)	Logarithm Conformation Representation による新規圧縮性流体ソルバーの開発
村上 匡且 様 (大阪大学 レーザー科学研究所)	マイクロノズル加速による GeV プロトン生成の 3 次元シミュレーション
松崎 義孝 様 (海上・港湾・航空技術研究所)	標準的な水環境評価に向けた流動生態系シミュレーションシステム EcoPARI のプラットフォーム構築
山口 雅也 様 (医薬基盤・健康・栄養研究所ヘルス・メディカル微生物研究センター)	大規模比較ゲノム解析による病原細菌の進化と病態発症機構の解明
森田 直樹 様 (筑波大学)	グラフ構造で一般化された動的負荷分散フレームワークに基づくマルチスケールシミュレータの開発
深谷 猛 様 (北海道大学)	QR 分解に関する高性能計算技術の研究
萩田 克美 様 (防衛大学校)	超大規模高分子系 MD データの位相幾何解析の並列高速化基盤検討
Takeshi Nanri 様 (Kyushu University)	Study on the real effect of non-blocking collective communications
佐藤 正寛 様 (東京大学)	環境循環型社会の実現に向けたポリマーインフォマティクスのデータ基盤構築
西澤 淳 様 (岐阜聖徳学園大学)	数値シミュレーションで読み解く最深宇宙の構造形成
滝沢 寛之 様 (東北大学)	複数拠点の連携による緊急ジョブ実行基盤の構築と評価
村田 忠彦 様 (大阪大学 D3 センター)	合成人口プロジェクト：エージェントへの生活行動時間割当て
森川 良忠 様 (大阪大学 大学院工学研究科)	機械学習駆動のマルチスケールシミュレーションによるグリーン触媒設計

安田 修悟 様 (兵庫県立大学)	AI leveraged multiscale scheme for kinetic equations
緒方 横 様 (大阪大学 大学院工学研究科)	CO <sub>2</sub> と水の注入による地下岩体フラクチャリングプロセスを予測する大規模数値シミュレーションと CO <sub>2</sub> 活用型地熱発電への展開
高棹 真介 様 (大阪大学 大学院理学研究科)	現実的な原始惑星系円盤のガス散逸シナリオ構築に向けた多角的アプローチ

## 2024 年度 大規模計算機システム公募型利用制度 (追加募集) の活動状況

大阪大学D 3センターでは、大規模計算機システムを活用する研究開発の育成・高度化支援の観点から、本センターが参画する「ネットワーク型」学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点（JHPCN）や革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）の目的を踏まえつつ、今後の発展が見込まれる萌芽的な研究課題や本センターの大規模計算機システムを最大限活用することで成果が見込まれる研究課題を公募しています。2024 年度は通常の募集に加えて追加募集を行い、以下の 12 課題を採択しました。

### 若手・女性研究者支援萌芽枠 採択課題

代表者名	研究課題名
顧 彦珺 様 (大阪大学 産業科学研究所)	レーザープラズマ駆動電子加速における放射減衰効果
高木 悠司 様 (大阪大学 理学研究科)	運動論的レーザープラズマ相互作用で発生する非熱的高速電子特性の解析
芳賀 智宏 様 (大阪大学 工学研究科)	自然の多面的価値の理解に向けたランドスケープの埋め込み表現の開発

### 大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
畠 昌育 様 (量子科学技術研究開発機構 関西光量子科学研究所)	超高強度レーザーイオン加速におけるイオン化の物理とその制御
中澤 嵩 様 (金沢大学)	Logarithm conformation representation による圧縮性流体方程式の導出と数値計算
岩下 航 様 (大阪大学 基礎工学研究科)	溝付き粘弾性体の滑り摩擦の連続体解析
杉村 奈都子 様 (鹿児島工業高等専門学校)	機械摩擦の摩耗焼付き機構解明に資するマルチスケールモデルの開発

### 人工知能研究支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
浜口 智志 様 (大阪大学 工学研究科)	反応性プラズマと物質の相互作用を解析するための機械学習原子間力場の構築

世界と伍する学生育成特設枠 採択課題

代表者名	研究課題名
Bahrul Jalaali 様 (Department of Mechanical Engineering, Graduate School of Engineering, Osaka University)	Data-driven subgrid-scale model for large-eddy simulation
山口 栄治 様 (琉球大学 大学院理工学研究科)	固体群と流体の三次元連成数値シミュレーションを用いた混合粒 径土砂流の力学機構の解明
YIJIA WU 様 (School of Engineering, The University of Tokyo)	Investigating dynamically super-disordered Graphite Intercalation systems for Metaphonics modeling through advanced Material Informatics and molecular dynamics simulations
Minh Nhat Ly 様 (Department of Physics, Graduate School of Science, Osaka University)	Particle acceleration in collisionless shocks with pre-existing turbulences by particle-in-cell simulations

# 2025 年度 大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況

2025 年度も引き続き研究課題の公募を行い、以下の 27 課題を採択しました。

## 若手・女性研究者支援萌芽枠 採択課題

代表者名	研究課題名
桑原 卓哉 様 (大阪公立大学 大学院工学研究科)	深層学習と分子シミュレーションを用いた超潤滑界面の形成メカニズムの解明
鵜沢 浩太朗 様 (日本原子力研究開発機構)	非平衡グリーン関数を用いた核分裂反応の微視的記述
Pierre Vinchon 様 (Graduate School of Engineering, The University of Osaka)	Contribution of subthreshold energy ions' neutralization on defect formation in monolayer graphene
原 悅也 様 (大阪大学 大学院工学研究科附属 フューチャーイノベーションセンター)	6G を見据えた大規模多層センサネットワークにおける多モーダル時空間データの解析

## 大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
栗本 育三郎 様 (木更津工業高等専門学校)	サイバーフィジカル植物工場システムの開発
寺島 洋史 様 (北海道大学 大学院工学研究院)	詳細反応機構を適用した高圧メタン酸素ロケットエンジン燃焼振動シミュレーション：燃焼振動発生機構の解明と噴射条件の特定
村上 匡且 様 (大阪大学 レーザー科学研究所)	マイクロノズル加速による超高エネルギープロトン生成の 3 次元シミュレーション
佐野 孝好 様 (大阪大学 レーザー科学研究所)	無衝突衝撃波-無衝突衝撃波の衝突現象における運動論的粒子加速機構の解明
杉本 馨 様 (京都大学 基礎物理学研究所)	連星中性子星合体における磁場エネルギー散逸過程の解明を目指したプラズマ粒子シミュレーション
大西 正人 様 (統計数理研究所)	第一原理計算を用いた非調和フォノン特性データベースの構築
高木 悠司 様 (大阪大学 大学院理学研究科)	運動論的レーザープラズマ相互作用による非熱的高速電子発生

## 人工知能研究支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
長沼 大樹 様 (モントリオール大学・Mila – Quebec Artificial Intelligence Institute)	汎化指標の網羅的評価の再考：現代ニューラルネットワークの課題への適応
浜口 智志 様 (大阪大学 大学院工学研究科)	機械学習力場 MD による原子層プロセス表面反応解析

新里 秀平 様 (大阪大学 大学院基礎工学研究科)	ニューラルネットワーク原子間相互作用を用いた高精度・大規模分子動力学計算に基づく水素環境下での欠陥動力学の解析と理論構築
Harry Handoko Halim 様 (Graduate School of Engineering, The University of Osaka)	Integrating Multi-scale Simulations and Inverse Design for Heterogenous Catalysis Materials at Operating Condition by Machine Learning Interatomic Potentials
水上 渉 様 (大阪大学 量子情報・量子生命研究センター)	有機・無機化合物を包括する化学のための基盤モデルの構築とその民主化

### 世界と伍する学生育成特設枠 採択課題

代表者名	研究課題名
横山 尋斗 様 (東京大学 大学院工学系研究科)	金属/絶縁ポリマー界面の接合状態が電荷注入障壁に及ぼす影響の定量的解析
水谷 耕介 様 (大阪大学 大学院理学研究科)	3次元輻射磁気流体計算を用いた連星系における共通外層期の軌道進化の調査
栗原 諒 様 (大阪大学 大学院基礎工学研究科)	第一原理分子動力学計算を用いた $\text{CO}_2$ 電解還元における電極/電解質界面の反応メカニズム解析
山中 敬太 様 (大阪大学 大学院工学研究科)	配向ナノワイヤアレイと高強度レーザーの相互作用による高輝度ガンマ線生成
西岡 蒼矢 様 (大阪大学 大学院理学研究科)	格子 QCD の数値計算によるハドロン内部のダイクォークの探索
Rizka Nur Fadilla 様 (Graduate School of Engineering, The University of Osaka)	Deep Neural Network Potential for Unveiling Drug Release Mechanism of pH-sensitive Antibody-drug Conjugates Linkers in Acidic Solutions
Shufang Huang 様 (大阪大学 大学院基礎工学研究科)	凝集誘起発光を示す Pt (II) 錯体の固体状態における光励起状態の理論的および実験的研究
Dinh Ngoc Dung 様 (Graduate School of Engineering, The University of Osaka)	Theoretical elucidation and design of local atomic structures and their colossal permittivity properties of doped $\text{TiO}_2$
Meliton R. Chiong III 様 (Graduate School of Engineering, The University of Osaka)	Exploring the structure and reactivity of $\text{Al}_{13}$ clusters deposited on organic substrates by highly parallelized quantum Monte Carlo simulation
小峠 陸登 様 (大阪大学 大学院情報科学研究科)	グラフ構造を活用した解釈可能な脳波基盤モデルの開発
Kelvin Lee Kai Wen 様 (Research Center for Nuclear Physics, The University of Osaka)	Diquark mass and Quark-diquark potential from lattice QCD with a static quark

# 大規模計算機システム Q&A

当センターに寄せられた質問を掲載しております。

同じ内容を以下の Web ページでも閲覧いただけます。

<https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/faq/>

## Q. 年度途中で計算資源やストレージ容量の追加は可能でしょうか？

A. はい。可能です。資源追加の申請につきましては、以下の利用者管理 WEB システムから申請頂いております。

利用者管理システム（要認証）

<https://manage.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/saibed/>

申請手順につきましては、以下のページにまとめておりますので、ご参照ください。

一般利用（学術利用）資源追加申請

[https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/service/basic\\_resourceadd/](https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/service/basic_resourceadd/)

## Q. 年度途中で利用負担金の支払い費目や支払い時期を変更できますか？

A. WEB システムからは変更できませんので、下記までご連絡ください。

大阪大学 情報推進部 情報基盤課 研究系システム班

Mail: [system@cmc.osaka-u.ac.jp](mailto:system@cmc.osaka-u.ac.jp)

TEL: 06-6879-8808

## Q. ディスク容量を追加した場合、利用期限はいつまでですか？

A. 年度途中に申し込まれた場合でも、利用期限は年度末までとなります。翌年度にディスク容量を追加しない場合は、データの整理を 3 月中にお願いいたします。やむを得ない事情がある場合や、間に合わない場合は、ご連絡くださいませ。原則として、事前連絡無しにこちらでデータを削除することはできません。

## Q. ユーザ間でファイルを転送することは可能でしょうか？

A. scp コマンドを使用することで可能です。

例えば、カレントディレクトリ下の abc ディレクトリの中のファイル sample.c を、b61234 のホームディレクトリに転送する場合は以下のようないいコマンドとなります。

```
scp ./abc/sample.c b61234@localhost:
```

Q. 一度に大量のジョブを投入し、ジョブごとに入力ファイル/実行ファイルを変更したい

- A. ファイル名に連続した数値が含まれている場合、パラメトリックジョブという投入方法で、一度に大量のジョブを投入できます。

パラメトリックジョブでは、ジョブスクリプト内の"\$PBS\_SUBREQNO"環境変数に、-t で指定した数値(下記の例では 1 から 5 までの数値)が格納されます。qsub すると同時に 5 本のジョブが投入され、a.out に対してそれぞれ異なる入力ファイル(下記の例では input1 から input5) が設定されます。

ジョブスクリプト例(jobscript.sh)

```
#PBS -q SQUID
#PBS -l elapstim_req=0:30:00,cpunum_job=24
cd $PBS_O_WORKDIR
./a.out input$PBS_SUBREQNO
```

投入方法

```
qsub -t 1-5 jobscript.sh
```

qstat の表示例:パラメトリックジョブの場合、1 回の qsub につき 1 件分の表示となります

RequestID	ReqName	UserName	Queue	Pri	STT	S	Memory	CPU	Elapse	R	H	M	Jobs
123456[].sqd	nqs	username	OC1C	0	QUE	-	-	-	-	Y	Y	Y	1

sstat の表示例:-t で指定した数値分だけ表示されます

RequestID	ReqName	UserName	Queue	Pri	STT	PlannedStartTime
123456[1].sqd	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[2].sqd	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[3].sqd	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[4].sqd	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -
123456[5].sqd	nqs	username	OC1C	0.5002/	0.5002	QUE -

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

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

お問い合わせフォーム

[https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/support/contact/auto\\_form/](https://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/support/contact/auto_form/)