



Title	サイバーメディアHPCジャーナル No.16 目次
Author(s)	
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2026, 16
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/106222
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

目 次

特集：	オープンサイエンスを促進する計算・ストレージプラットフォーム OCTOPUS: Osaka university Compute & sTOrage Platform Urging open Science 高橋 慧智 大阪大学 D3センター	1
大規模計算機システム利用者研究報告		12
サイバーフィジカル植物工場システムの開発	栗本 育三郎 木更津工業高等専門学校	13
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	寺島 洋史 北海道大学 大学院工学研究院	17
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	村上 匡且 大阪大学 レーザー科学研究所	21
Proton acceleration by collisionless shocks in black-hole coronae: first-principles constraints for high-energy neutrino sources Takayoshi Sano ¹ 、Minh Nhat Ly ^{1,2} ¹ Institute of Laser Engineering, The University of Osaka ² Department of Physics, Graduate School of Science, The University of Osaka		25
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	杉本 馨 京都大学 基礎物理学研究所	29
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	大西 正人 統計数理研究所 先端データサイエンス研究系	33
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	高木 悠司 大阪大学 レーザー科学研究所	37
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	桑原 卓哉 大阪公立大学 大学院工学研究科	40
Contribution of subthreshold energy ions' neutralization on defect formation in monolayer graphene P. Vinchon ¹ 、L. Spiske ¹ 、Y. Miyamoto ² 、S. Hamaguchi ¹ ¹ R ³ (R-cubed) Institute of Newly-Emerging Science Design (INSD), The University of Osaka ² National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)		44
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	原 惇也 大阪大学 大学院工学研究科	48
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	長沼 大樹 モントリオール大学 コンピュータ科学専攻	52

機械学習力場MDによる原子層プロセス表面反応解析 浜口 智志、幾世 和将、Jomar U. Tercero、磯部 倫郎、Nicolas Mauchamp、Lucas Spiske 大阪大学 エマージングサイエンスデザインR ³ センター	56
大規模原子シミュレーションによる炭素鋼の水素脆化メカニズム解析に 向けた機械学習ポテンシャルの開発 新里 秀平 大阪大学 大学院基礎工学研究科	60
Integrating Multi-scale Simulations and Inverse Design for Heterogenous Catalysis Materials at Operating Conditions by Machine Learning Interatomic Potentials Harry H. Halim 大阪大学 大学院工学研究科	64
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 水上 渉 大阪大学 量子情報・量子生命研究センター	68
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 横山 尋斗 東京大学 大学院工学系研究科電気系工学専攻	72
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 水谷 耕介 大阪大学 大学院理学研究科	76
第一原理分子動力学計算を用いた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 栗原 諒 大阪大学 大学院基礎工学研究科	80
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 立木 健嗣、山中 敬太 大阪大学 大学院工学研究科 電気電子情報通信工学専攻	84
格子QCDを用いたハドロン内部のダイクォークの探索 西岡 蒼矢 大阪大学 大学院理学研究科	88
Deep Neural Network Potential for Modeling Formic Acid Dissociation in Aqueous Solution Rizka Nur Fadilla、Yoshitada Morikawa 大阪大学 大学院工学研究科	92
Enhancing Phosphorescence in Platinum(II) Complexes through Intramolecular CH-N Interactions Shufang Huang 大阪大学 大学院基礎工学研究科	96
Theoretical elucidation and design of local atomic structures and their colossal permittivity properties of doped TiO ₂ Dinh Ngoc Dung Department of Precision Engineering, The University of Osaka	99
Quantum Monte Carlo Study of the Electronic Structure and Spectroscopy of the Al ₁₃ Superatom Meliton Chiong III ¹ 、Atsushi Nakajima ² 、Yoshitada Morikawa ¹ ¹ Graduate School of Engineering, The University of Osaka ² Faculty of Science and Technology, Keio University	103

グラフ構造を活用した解釈可能な脳波モデルの開発	106
小峠 陸登	大阪大学 大学院情報科学研究科
Diquarks study from lattice QCD using the extended HALQCD method	110
Kai-Wen Kelvin-Lee、Noriyoshi Ishii	大阪大学 核物理研究センター
弾性波速度付近の高速滑り速度での摩擦則	114
岩下 航	産業技術総合研究所 製造基盤技術研究部門
Trans -ビス(イミノアゾレート)白金(II) 錯体の励起状態の分子構造とりん光性特性制御	118
川守田 創一郎	大阪大学 大学院基礎工学研究科
計算化学アプローチによるマイナーアクチノイド分離抽出剤のミドルアップダウン型分子設計	122
金子 政志	大阪大学 大学院理学研究科
高エネルギー原子核衝突反応の大統計シミュレーションを用いた原子核形状の研究	126
坂井 あづみ ¹ 、村瀬 功 ²	¹ 長崎総合科学大学 総合情報学部、 ² 大阪大学 大学院理学研究科
局所非調和振動計算によるロドプシンのアミドバンド予測	130
松山 奈央	筑波大学 大学院理工情報生命学術院 数理物質科学研究群
分子動力学法による塑性仕事の熱変換効率の予測の境界条件依存性	134
李 響	大阪大学 大学院工学研究科マテリアル生産科学専攻
A priori Test of Data-Driven Subgrid-Scale Model with Few-shot Learning for Large-Eddy Simulation of Turbulent Channel Flow	138
Bahrul Jalaali、Kie Okabayashi	Department of Mechanical Engineering, Graduate School of Engineering, The University of Osaka
ホウ素中性子捕捉療法における深部がん照射計画の開発・最適化	142
守實 友梨	大阪大学 大学院工学研究科環境エネルギー工学専攻
半導体光学冷却に向けたホストゲスト構造のハロゲン化ペロブスカイト結晶の冷却能力評価	145
田中 大地	大阪大学 大学院工学研究科
First-principles finite-temperature study of polyethylene using stochastic self consistent harmonic approximation	149
Samuel Eka Putra Payong Masan、Yoshitada Morikawa	Department of Precision Engineering, Graduate School of Engineering, The University of Osaka
センター報告	153
・ 2025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	154
・ SC25出展報告	172

・ 第31回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2025)報告および 第32回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2026)告知	180
・ 大規模計算機システム利用者講習会等の紹介	182
・ 2026年度大規模計算機システム利用講習会	185
・ 2025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	186
・ 2026年度「HPCI利用」の活動状況	194
・ 2026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	196
・ 2025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	198
・ 2026年度大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況	199
・ 大規模計算機システムQ&A	201
利用規程等	203
・ 規程関係	204
大阪大学D3センター大規模計算機システム利用規程	204
大阪大学D3センター大規模計算機システム利用負担額一覧	206
大阪大学D3センター大規模計算機システム試用制度利用内規	208
・ 附表	209
大規模計算機システム ホスト一覧	209
スーパーコンピュータSQUIDのジョブクラス一覧	209
スーパーコンピュータOCTOPUSのジョブクラス一覧	211
2025年度大規模計算機システム稼働状況	212
募 集	213
・ 大規模計算機システムを利用して行った研究・開発等の記事の募集について	214
・ 大規模計算機システム利用案内（サービス内容・サービス時間等）	215