

Title	センター報告 サイバーメディアHPCジャーナル No.14
Author(s)	
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2024, 14, p. 128- 174
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/96541
rights	
Note	

## Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

## センター報告

#### 2023 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 2023 年 4 月から 2024 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] Akio Ishii, "Ab initio prediction of temperature-dependent stability of heterogeneous B19' phase in TiNi alloy using atomistically informed Eshelby's ellipsoidal inclusion", Mater. Today comm, 35, 105861, 2023.
- [2] Hungu Kang, Jiung Jang, Gyu Don Kong, Sangmin Jung, Tatsuhiko Ohto and Hyo Jae Yoon, "Deposition Condition Impacts Charge Tunneling and Thermoelectric Properties of N-Heterocyclic Carbene Monolayers", J. Mater. Chem.A, 11, 16233, 2023.
- [3] Gyu Don Kong, Jiung Jang, Suin Choi, Gayoung Lim, In Soo Kim, Tatsuhiko Ohto, Seiya Maeda, Hirokazu Tada, and Hyo Jae Yoon, "Dynamic Variation of Rectification Observed in Supramolecular Mixed Mercaptoalkanoic Acid", Small, 20, 2305997, 2024.
- [4] Zhiwen Jiang & Masahiko Shibahara, "Molecular dynamics investigation of the effects of thin periodic defective graphene on the interfacial thermal resistance at liquid–solid interfaces", Numerical Heat Transfer, Part A: Applications, DOI: 10.1080/10407782.2023.2300355, 2024.
- [5] 鹿島千尋,中谷祐介,"地形改変による瀬戸内海の流動変化",土木学会論文集特集号(海岸工学), Vol.79.DOI: doi.org/10.2208/jscejj.23-17055, No.17, 23-17055, 2023.
- [6] 出口博之, 鹿島千尋, 中谷祐介, "大阪湾奥部の溶存酸素濃度の短期変動に及ぼす波浪の影響", 土木学会論文集特集号(海岸工学), Vol.79.DOI:/doi.org/10.2208/jscejj.23-17138, No.17, 23-17138, 2023.
- [7] Kokoro Shikata, Takuma Kikutsuji, Nobuhiro Yasoshima, Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi, "Revealing the hidden dynamics of confined water in acrylate polymers: Insights from hydrogenbond lifetime analysis", Journal of Chemical Physics, Vol.158, No.174901, (10pages), May (2023).
- [8] Hiroaki Tatsumi\*, C.R. Kao, Hiroshi Nishikawa, "Impact of crystalline orientation on Cu-Cu solid-state bonding behavior by molecular dynamics simulations", Scientific Reports, 13, 23030, 2023.
- [9] Kunichika Tsumoto, Takao Shimamoto, Yuma Aoji, Yukiko Himeno, Yuhichi Kuda, Mamoru Tanida, Akira Amano, Yasutaka Kurata, "Theoretical prediction of early afterdepolarization-evoked triggered activity formation initiating ventricular arrhythmias", Computer methods and programs in biomedicine, vol.240.Doi:10.1016/j.cmpb.2023.107722, 107722, Mar 2023.
- [10] Hidetaka Marumo and Takashi Matsubara, "Scale-Equivariant Convolution for Semantic Segmentation of Depth Image", Nonlinear Theory and Its Applications IEICE, vol. 15, no. 1, pp. 36-53, 2024.

- [11] Yu Kashihara and Takashi Matsubara, "Inverse Heat Dissipation Model for Medical Image Segmentation", IEICE Transactions on Information and Systems, vol. E106-D, no. 11, pp. 1930-1934, 2023.
- [12] Ohashi, K.; Nagita, K.; Yamamoto, H.; Nakanishi, S.; Kamiya, K., "C—C Coupling in CO2 Electroreduction on Single Cu-Modified Covalent Triazine Frameworks: A Static and Dynamic Density Functional Theory Study", ChemElectroChem, Vol.11, No.6, e202300693, Jan. 2024.
- [13] Nagita, K.; Kamiya, K.; Nakanishi, S.; Hamamoto, Y.; Morikawa, Y., "CO Hydrogenation Promoted by Oxygen Atoms Adsorbed onto Cu(100)", J. Phys. Chem. C, Vol.128, No.11, pp.4607-4615, Mar. 2024.
- [14] Kenta Akita, Yuki Morimoto, Reiji Tsuruno, "Hand-drawn anime line drawing colorization of faces with texture details", computer animation & virtual worlds, Volume 35, Issue 1, e2198, 27 July 2023.
- [15] S. Goto, K. Kim, and N. Matubayasi, "Unraveling the Glass-like Dynamic Heterogeneity in Ring Polymer Melts: From Semiflexible to Stiff Chain", ACS Polymers Au 3(6), (査読つき), 437–446, 2023.
- [16] Suzuki, S.; Sakai T.; Takagi, S.; Naota, T., "On-Demand Control of Short-Wave Infrared Light Transparency Based on Stimuli-Responsive Association of Tetrathiafulvalene Radical Cation", Angew. Chem., Int. Ed., Vol.62 DOI: 10.1002/anie.202308570, e202308570, 2023.
- [17] Suzuki, S.; Shu, R.; Shiomi, D.; Naota, T., "Temperature-dependent Modulation of Short-wave-infrared Light Transparency Based on Associated Structures of a Liquescent Nickel(III) Complex", Small, Vol.20 DOI: 10.1002/smll.202305668, 2305668, 2024.
- [18] Shu, R.; Naota, T.; Suzuki, S., "Needlestick-Stimulation-Induced Conversion of Short-Wave Infrared-Light Transparency Using a Liquescent Radical Anion", Small in press, DOI: 10.1002/smll.202311557.
- [19] T. Hiejima, "Streamwise vortex breakdown due to the interaction with crossed shock waves", Journal of Fluid Mechanics, 973 [10], A41, 31 pages, 2023.
- [20] N. Iwabayashi, K. Matsushita, S. Okada, T. Hiejima, "Shock-induced supersonic combustion with a streamwise vortex", Physics of Fluids, 36 [3], 036117, 18 pages, 2024.
- [21] Yukihiko Okumura, "Development of ammonia burner and elucidation of fundamental heat transfer in boiler", Journal of Japan Boiler Association, 442, ISSN 0387-0162., pp. 21-26, 2023.12.
- [22] Enriquez, J.I.G., Yamasaki, T., Michiuchi, M., Inagaki, K., Geshi, M., Hamada, I., Morikawa, Y., "Origin of the Surface Facet Dependence in the Oxidative Etching of the Diamond (111) and (100) Surfaces from First-Principles Calculations", The Journal of Physical Chemistry, Accepted 25 March 2024.
- [23] Enriquez, J.I.G., Halim, H. H., Yamasaki, T., Michiuchi, M., Inagaki, K., Geshi, M., Hamada, I., Morikawa, Y., "Origin of the Surface Facet Dependence in the Thermal Degradation of the Diamond (111) and (100) Surfaces in Vacuum Investigated by Machine Learning Molecular Dynamics Simulations", Under Review Preprint, http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4731456.
- [24] Akihiro Kimura, Hirotaka Kitoh-Nishioka, Toru Kondo, Hirozo Oh-oka, Shigeru Itoh, and Chihiro

- Azai, "Experimental and Theoretical Mutation of Exciton States on the Smallest Type-I Photosynthetic Reaction Center Complex of a Green Sulfur Bacterium Chlorobaclum tepidum", The Journal of Physical Chemistry B, Vol.128, No.3, pp. 731-743, Jan 2024.
- [25] 鬼頭宏任, 梅垣俊仁, 西山陽大, 田中成典, "量子開放系に対する準古典マッピング動力学シミュレーション", 理論化学会誌「フロンティア」, Vol.5, No.4, pp.261-269, Oct 2023.
- [26] H. Gao, G. He, Q. Li, Y. Li, W. Hu, S. Zhou, F. Liu, J. Yi, Y. Zhang, Z. Cai, S. Ogata, L. Qiao and L. Gao., "Diffusion bonding of high entropy alloy and stainless steel at a relative lower temperature via surface nano-crystallization treatment", Journal of Materials Research and Technology, 24, 475-487, 2023.
- [27] Shihao Zhang, Fanshun Meng, Rong Fu, Shigenobu Ogata, "Highly efficient and transferable interatomic potentials for α-iron and α-iron/hydrogen binary systems using deep neural networks", Computational Materials Science, Vol.215, pp.112843, 2024.
- [28] Jinyu Zhang, Gaël Huynh, Fuzhi Dai, Tristan Albaret, Shihao Zhang, Shigenobu Ogata, David Rodney, "A deep-neural network potential to study transformation-induced plasticity in zirconia", Journal of the European Ceramic Society, Vol.44, Issure 1, pp.4243-4254, 2024.
- [29] Sho Kimura, Takuma Hattori, Changqing Ye, Masaki Okada, Satoshi Kondo, Yui Sakurama, Akira Saito, Pawel Krukowski, Hideji Osuga and Yuji Kuwahara, "STM/TERS observation of (M)-type diphenyl[7]thiaheterohelicene on Ag(111)", Phys. Chem. Chem., Phys. 26, 7658, 2024.
- [30] Ryusei Oketani, Koki Shiohara, Ichiro Hisaki, "Overcoming a Solid Solution System on Chiral Resolution Combining Crystallization and Enantioselective Dissolution", Chem. Commun, 59, 6175-6178, 2023.
- [31] Yuna Yamaguchi, Kouki Kasuya, Ryusei Oketani, Ichiro Hisaki, "Construction of Hydrogen-bonded Crystalline Frameworks Using Tetrakis(carboxyphenyl)dimethyl-dihydropyrene Derivative", Chem. Lett, 52, 542-545, 2023.
- [32] Taito Hashimoto, Ryusei Oketani, Asato Inoue, Kohei Okubo, Kouki Oka, Norimitsu Tohnai, Kazuhide Kamiya, Shuji Nakanishi, Ichiro Hisaki, "Single Crystalline, Statically and Dynamically Flexible Hydrogen-bonded Frameworks Based on 4,5,9,10-Tetrakis(4-carboxyphenyl)pyrene", Chem. Commun, 59, 7224-7227, 2023.
- [33] Mao Yamaguchi, Mario de la Hoz Tomás, Ayano Fujiwara, Ryusei Oketani, Kohei Okubo, Kouki Oka, Norimitsu Tohnai, Abderrazzak Douhal, Ichiro Hisaki, "An Expanded Hydrogen-bonded Organic Framework Formed by A Tetrakis(terphenyl)ethene Derivative", Bull. Chem. Soc. J., 97, uoae004, 2024.
- [34] 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, 1311591, 2024.
- [35] Yinan Yang, Tsukasa Hori, Shinya Sawada, Fumiteru Akamatsu, "Development of a Chemistry Dynamic Load Balancing Solver with Sparse Analytical Jacobian Approach for Rapid and Accurate Reactive Flow Simulations", arXiv, preprint arXiv:2311.14941, 2023.

- [36] Takuma Kobayashi, Takayoshi Shimura, Heiji Watanabe, "Oxygen-vacancy defect in 4H-SiC as a near-infrared emitter: An ab initio study", Journal of Applied Physics, Vol.134, No.14, pp. 145701-1-145701-9, 2023.
- [37] Yoshiaki Yasumizu et al, "Single-cell transcriptome landscape of circulating CD4+ T cell populations in autoimmune diseases", Cell Genomics 2024, Volume 4, Issue 2, 100473, 2024.
- [38] Hajime Yoshino, "Spatially heterogeneous learning by a deep student machine", Phys. Rev. Research 5, 033068, 2023.
- [39] K. RANI, N. OZAKI, Y. HIRONAKA, K. HASHIMOTO, R.KODAMA, K. MUKAI, H. NAKA-MURA, S. TAKAI, AND H.NAGATOMO, "Prediction of the superimposed laser shot number for copper using a deep convolutional neural network", Optics Express (查読付論文), Vol. 31, No. 15, 24045, 17 Jul 2023.
- [40] Belmiloud, Naser, Masanobu Sato, and Yasutoshi Okuno, "Fluid Simulation over a Rotating Disk: Momentum and Mass Transfer across the Wafer Boundary", Solid State Phenomena, DOI:https://doi.org/10.4028/p-7hsyuj., August 14, 2023.
- [41] Yuko Nakagi, Takua Matsuyama, Naoko Koide-Majima, Hiroto Yamaguchi, Rieko Kubo, Shinji Nishimoto, Yu Takagi, "The Brain Tells a Story: Unveiling Distinct Representations of Semantic Content in Speech, Objects, and Stories in the Human Brain with Large Language Models", bioRxiv, 2024.
- [42] Timo I. Denk, Yu Takagi, Takuya Matsuyama, Andrea Agostinelli, Tomoya Nakai, Christian Frank, Shinji Nishimoto, "Brain2Music: Reconstructing Music from Human Brain Activity", arXiv, 2023.
- [43] Susumu Goto, Yutaro Motoori, "Hierarchy of coherent vortices in developed turbulence", Rev. Mod. Plasma Phys. (in print).
- [44] Yutaro Fujiki, Hideto Awai, Yutaro Motoori, Susumu Goto, "Attraction of neutrally buoyant deformable particles towards a vortex", Phys. Rev. Fluids 9, 014301, 2024.
- [45] Jun Fujino, Yutaro Motoori, Susumu Goto, "Hierarchy of coherent vortices in turbulence behind a cylinder", J. Fluid Mech, 975, A13, 2023.
- [46] Yutaro Motoori, Susumu Goto, "Multiscale clustering of heavy and light small particles in turbulent channel flow at high Reynolds numbers", Int. J. Heat Fluid Flow, 102, 109166, 2023.
- [47] Kurt Irvin M. Rojas, Yoshitada Morikawa, and Ikutaro Hamada, "Structures of hydrogen boride sheets with increasing hydrogen vacancy concentration", (in-preparation), 2024.
- [48] Daisuke Yamamoto and Katsuhiro Morita, "Engineering of a Low-Entropy Quantum Simulator for Strongly Correlated Electrons Using SU(N)-Symmetric Cold Atom Mixtures", arXiv, 2311.08014 (accepted for publication in Physical Review Letters).
- [49] Bumjoon Kim, Yohei Yamaguchi, Yoshiyuki Shimoda, "Physics-based modeling of electricity load profile of commercial building stock considering building system composition and occupancy profile", Energy&Buildings, 304 https://doi.org/10.1016/j.enbuild.2023.113813., 113813, 2024.
- [50] Perwez U, Shono K, Yamaguchi Y, Shimoda Y, "Multi-scale UBEM-BIPV coupled approach for the assessment of carbon neutrality of commercial building stock", Energy and Buildings, 291

- https://doi.org/10.1016/J.ENBUILD.2023.113086., 113086, 2023.
- [51] K. Hagita, T. Murashima, T. Miyata, H. Jinnai, "Model Based on the River Meander Curve for Simulating the Adhesion of Cross-Linked Polymers to Rough Surfaces", Macromolecules, https://doi.org/10.1021/acs.macromol.3c02660, 発行年月 2024.3.
- [52] Xiangrui Li, Wentao Chen, Gyoko Nagayama, "Interfacial thermal resonance in an SiC-SiC nanogap with various atomic surface terminations", Nanoscale, Vol.15, No.19, pp. 8603-8610, Apr. 2023.
- [53] H. Yoshino, "Spatially heterogeneous learning by a deep student machine", arXiv, 2302.07419, 2023.
- [54] Atsushi Sunahara, Ahmed Hassanein, Kentaro Tomita, Shinichi Namba, and Takeshi Higashiguchi, "Optimization of Extreme Ultra-Violet light emitted from the CO2 laser-irradiated tin plasmas using 2D radiation hydrodynamic simulations", Optics Express, 31, 20, 31780-31795, 2023.
- [55] Y. Pan, K. Tomita, A. Sunahara, A. Sasaki, and K. Nishihara, "Joint measurement of electron density, temperature, and emission spectrum of Nd:YAG laser-produced tin plasma", Applied Physics Letters, 123, 204103, 2023.
- [56] Takeru Niinuma, Tsukusa Sugiura, Masaki Kume, Yuto Nakayama, Hiroki Morita, Atsushi Sunahara, Shinichi Namba, and Takeshi Higashiguchi, "Evaluationof suprathermal ions in a laser producd plasma beyond-EUV source ", Proceedings, Volume 12915 https://doi.org/10.1117/12.2687366, Photomask Japan 2023: XXIX Symposium on Photomask and Next-Generation Lithography Mask Technology;, 129150L, 2023.
- [57] Yuichiro Yoshida, Wataru Mizukami, and Norio Yoshida, "Solvent Distribution Effects on Quantum Chemical Calculations with Quantum Computers", J. Chem. Theory Comput, Vol. 20, pp.1962–1971, Feb. 2024.
- [58] Tomoya Shiota, Kenji Ishihara, Wataru Mizukami, "Universal neural network potentials as descriptors: Towards scalable chemical property prediction using quantum and classical computers", arXiv, 2402.18433, Feb. 2024.

#### 2 国際会議会議録掲載論文

- [1] Kashima, C. and Nakatani, Y., "The selection of ocean boundary conditions on coastal hydrodynamic simulations", Proceedings of the 40th IAHR Congress, DOI: doi.org/10.3850/978-90-833476-1-5\_iahr40wc-p0785-cd, August, 2023.
- [2] Kashima, C. and Nakatani, Y., "Behavior analysis of open ocean water in the Seto Inland Sea by using particle tracking", Proceedings of the 34th International Ocean and Polar Engineering Conference, 2024(accepted).
- [3] Y. Baba, and X. LU, "Analysis of Lightning-induced Surges Inside a High-rise Condominium Building Struck by Lightning", The 17th International Symposium on EMC and Transients in Infrastructures / International Student Session (ISET/ISS), 2023.
- [4] Tianyi Wei, Abhishek Lakshman Pillai, Ryoichi Kurose, "Numerical investigation of high-speed droplet impact on flat surfaces with different wettability", ICMF2023, Kobe Japan, Apr. 2023.

- [5] Tatsuki Itasaka and Masahiro Okuda, "Zero-Shot Hyperspectral Image Denoising With Self-Completion with Patterned Masks", 2023 IEEE International Conference on Image Processing (ICIP). IEEE, Oct 8, 2023.
- [6] Haruhi Matsuyama, Takehiro Fujii, Suguru Miyauchi, and Shintaro Takeuchi, "Computational simulation of the intracellular pressure response to action potentials using the permeation flux model for multicomponent electrolyte solutions", American Physical Society (APS) 76th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics (DFD) at Washington D.C, Abstract ID: 1687276, November 19-21, 2023.
- [7] Kento Hashimoto and Shintaro Takeuchi, "Heat transfer in natural convection with conductive particles considering radiative heat transfer", Turbulence, Heat and Mass Transfer 10 (THMT23) at Rome, Italy, September 11-15, 2023.
- [8] Haruhi Matsuyama, Suguru Miyauchi, Shintaro Takeuchi, "Study of the Mechanical Effects of Solvents Acting on Neuronal Membranes Using the Permeation Flux Model of Multicomponent Electrolyte Solutions", Abstract of ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2023 (AJK FED2023) at Osaka, Japan, Paper ID: 1-11-3-02, July 9-13, 2023.
- [9] Kento Hashimoto, Shintaro Takeuchi, "Heat transfer in particle-laden flow considering temperature gradient within the particles and radiative heat transfer", Abstract of ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2023 (AJK FED2023) at Osaka, Japan, Paper ID: 1-11-3-02, July 9-13, 2023.
- [10] Owen, E. R., Kong, A. K. H., Pan, K.-C., "Cosmic ray calorimetry in star-forming galaxy populations and implications for their contribution to the extra-galactic *γ* -ray background. In: Proceedings of Science", 38th International Cosmic Ray Conference, in Nagoya, Japan, id. 554., 26 July -3 August 2023.
- [11] Kota Sueyoshi and Takashi Matsubara, "Predicated Diffusion: Predicate Logic-Based Attention Guidance for Text-to-Image Diffusion Models", Proc. of The IEEE/CVF Computer Vision and Pattern Recognition Conference 2024 (CVPR2024), Seattle, arXiv, Jun. 2024.
- [12] Keigo Tsutsui, Phuoc Thanh Tran-Ngoc, Hirotaka Sato, and Takashi Matsubara ", "Deep-Learning-Based Time-Series Analysis of Insect Behavior, Proc. of 2023 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2023), Catania, Sep. 2023.
- [13] Hidetaka Marumo and Takashi Matsubara, "Scale-Equivariant Convolution for Projection-based Point Cloud Segmentation", Proc. of 2023 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2023), Catania, Sep. 2023.
- [14] Kota Sueyoshi and Takashi Matsubara, "Concept Composition by Energy-Based Model using Order Embedding", Proc. of 2023 International Symposium on Nonlinear Theory and Its Applications (NOLTA2023), Catania, Sep. 2023.
- [15] Takashi Matsubara and Takaharu Yaguchi, "Good Lattice Accelerates Physics-Informed Neural Networks", Proc. of ICML2023 Workshop on the Synergy of Scientific and Machine Learning Modeling (SynS and ML), Honolulu, Jun. 2023.

- [16] Yudai Kotani, Hiori Kino, Satoshi Hamaguchi, "Development of machine-learning-based interatomic potentials for sputtering simulation of silicon and silicon dioxide", Okinawa Japan, April 2023.
- [17] Yudai Kotani, Hiori Kino, Satoshi Hamaguchi, "Development of machine-learning-based interatomic potentials for sputtering simulation of silicon", Aix-en-Provence, June 2023.
- [18] Yudai Kotani, Hiori Kino, Satoshi Hamaguchi, "Towards Accurate Sputtering Simulations: Developing Machine Learning-Based Interatomic Potentials for Silicon", Antibes French Riviera, September 2023.
- [19] Keichi Takahashi, Soya Fujimoto, Satoru Nagase, Yoko Isobe, Yoichi Shimomura, Ryusuke Egawa, Hiroyuki Takizawa, "Performance Evaluation of a Next-Generation SX-Aurora TSUBASA Vector Supercomputer", ISC High Performance 2023, May 2023.
- [20] Yukihiko Okumura, "Flame structure and reaction analysis for ammonia turbulent burner", Proc. 7th International Workshop on Heat-Mass Transfer Advances for Energy Conservation and Pollution Control (IWHT2023), Paper II -10, 9 pages, 2023.8.
- [21] Yukihiko Okumura, Tomohiro Tsubota, Kenta Kikuchi, Noritoshi Yagawa, Tomohiro Matsunami, "Combustion characteristic of NH3/H2/N2 premixed flame", Proc. 33rd International Symposium on Transport Phenomena (ISTP2023), Paper-ID Combustion and Reacting Flows 1 -25, 5 pages, 2023.9.
- [22] Sheila Langa and Yusuke Takahashi, "Nonlinear Transonic Aeroelastic Analysis of a Cropped Delta Wing using Fluid-Structure Interaction and Dynamic Mode Decomposition", 4th SU2 conference, Varenna/Italy and Virtual, October 23-25, 2023.
- [23] Sanjoy Kumar Saha and Yusuke Takahashi, "Strongly Coupled Aeroelastic Modeling of Deployable Aerodynamic Decelerator at Transonic Speed", 4th SU2 conference, Varenna/Italy and Virtual, October 23-25, 2023.
- [24] Yang Yinan, Zhiren Bai, Tsukasa Hori, Shinya Sawada, Fumiteru Akamatsu, "Towards Accurate Simulation on a Three-dimensional Turbulent Partially Premixed Flame with Detailed Chemistry and Radiative Heat Transfer", Proceedings of 14th Asia-Pacific Conference on Combustion (ASPACC 2023)., 2023.
- [25] Kalash Dixit, Ritu Raj Kumar, Nagabhushana Rao Vadlamani, Nobuyuki Tsuboi, "Effects of Reynolds Number and Ramp Angle on Gortler Vortices over a Compression Ramp", The 34th International Symposium on Shock Waves, Daegu Korea, 16-21 July 2023.
- [26] Tsuyoshi Ifuku, Tsuyoshi Okura, Nobuyuki Tsuboi, Kohei Ozawa, Satoshi Nonaka, Takashi Ito, "Numerical Simulation on Aerodynamic Characteristics of Reusable Vehicle Experiment RV-X: Effect of Turbulence Model", The 34th International Symposium on Space Technology and Science, Kurume Japan, June 2023.
- [27] Shui Kohama, Nobuyuki Tsuboi, Kouhei Ozawa, Koichi A Hayashi, "Two-Dimensional Detailed Numerical Simulation on Ammonia/Hydrogen/Air Detonation: Stability of Cellular Structure", ICDERS2023, 176 SNU Siheung Korea, July 2023.
- [28] Kubota Daiki, Tsuboi Nobuyuki, Ozawa Kohei, Hayashi A. Koichi, "Detailed Numerical Simulation

- on Dimethyl Ether/Oxygen Premixture Detonation Using Reduced Chemical Reaction Model -Disturbance of Cellular Structure-", The 29th The International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (ICDERS2023), 193 Siheung, South Korea, July 2023.
- [29] 田中栄次、津嘉田敬章、大橋泰裕, "APPLICABILITY OF LARGE-SCALE SEISMIC RESPONSE ANALYSIS TO NUCLEAR POWER BUILDING BASED ON FINITE ELEMENT MODELING", SMiRT 27(27th International Conference of Structural Mechanics in Reactor Technology), Division V, 2024 年 3 月.
- [30] H. NAGATOMO, T. JOHZAKI, R. TAKIZAWA, S. FUJIOKA, "FORMATION OF HIGH AREAL DENSITY FUEL CORE USING AN EFFICIENT AND ROBUST IMPLOSION METHOD FOR FAST IGNITION", IAEA/Fusion Energy Conference, London, IAEA-CN-316/IFE-P4-4, October 18, 2023.
- [31] K. Tsujimoto, Y. Banno, T. Ando and M. Takahashi, "Flow and heat transfer characteristics of impinging jets controlled with rotating inclined jet using direct numerical simulation", Proc. the 10th Int. Symp. Turbulence, Heat and Mass Transfer, 12p, Sep. 2023.
- [32] R. OKADA, K. TSUJIMOTO, T. ANDO, M. TAKAHASHI, "Analysis of the effect of density ratio on flow characteristics in atomization of liquid jets", Proc. 33rd Int. Sym.Transport Phenomena, 5p, Sep. 2023.
- [33] Y. Koizumi, R. Miyake, Y. Hayashi, T. Tohei, A. Sakai, "Finite element analysis of Oxygen Vacancy Behavior in Rutile TiO2 under External Electric Fields", 2023 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM2023), Nagoya, PS-2-13, Sep. 7.2023.
- [34] Yutaro Motoori, Susumu Goto, "Hierarchy of coherent vortices and energy cascade in turbulence behind a cylinder", Oral presentation, European Turbulence Conference 18 (ETC18), Valencia Spain.
- [35] Momona Tamagawa, Haruka Ohba, Shinya Mizuno, "Optimizing Facilities by Adjusting Node and Server Numbers in a Closed BCMP Queueing Network", Program & Abstract Proceedings Book The 7th Asian Conference of Management Science and Applications, pp.43-43, Dec. 2023.
- [36] Wentao Chen, Gyoko Nagayama, "Local Heat Flux of Resonant Layers at Solid-liquid Interface", Proceedings of 14th International Conference on Computational Heat and Mass Transfer, Sep. 2023.
- [37] Xiangrui Li, Wentao Chen, Gyoko Nagayama, "Spectral Analysis of Phonon Transport across an SiC–SiC Nanogap", Proceedings of 14th International Conference on Computational Heat and Mass Transfer, Sep. 2023.
- [38] Atsushi Sunahara, "Radiation hydrodynamic simulation study of efficient extreme ultraviolet light emission from laser-produced tin plasmas", 12th Advanced Lasers and Photon Sources (ALPS), PACIFICO Yokohama Japan, April 18-21 2023.

#### 3 国内研究会等発表論文

- [1] 星野聖奈, 小椋優, 横井達矢, 松永克志, "リン化ガリウムにおける転位コア量子構造に関するDFT 解析", 新学術領域研究「機能コアの材料科学」若手の会・領域全体会議 合同会議, 東京大学, ポスター, 2023 年 7 月.
- [2] 星野聖奈,小椋優,横井達矢,松永克志,"GaPにおける転位コア量子構造に関するDFT計算",日本金属学会 2023 年秋期(第 173 回)講演大会,富山大学,口頭,2023 年 9 月.
- [3] 中谷祐介, 懸樋洸大, 岩岡慶晃, 鹿島千尋, "定点カメラ観測システムと粒子追跡モデルを用いた河川スカムの挙動解析", 第58回日本水環境学会年会, 福岡, P-A-22, 2024年3月.
- [4] 鹿島千尋,中谷祐介,"地形改変が瀬戸内海の流動に及ぼす影響の数値解析",第 30 回瀬戸内海研究フォーラムin山口,山口,2023年8月.
- [5] 出口博之, 鹿島千尋, 中谷祐介, "流動 水質 波浪カップリングモデルを用いた底層DOに及ぼす 波浪の影響解析", 第 30 回瀬戸内海研究フォーラムin山口, 山口, 2023 年 8 月.
- [6] Tianyi Wei, Kenya Kitada, Abhishek Lakshman Pillai, Ryoichi Kurose, "Numerical Investigation on Influence of Surface Wettability on Thin Liquid Film Ejection During Droplet Impingement", 37th CFD Symposium, Nagoya, Japan, Dec. 2023.
- [7] 南條 舜, アリ フィン, 林 慶浩, 吉田 亮, "逐次実験計画法と高分子物性自動計算の融合に基づく光学用高分子の探索", 統計関連学会連合大会講演報告集, pp.297, Sep. 2023.
- [8] 南條 舜, アリ フィン, 林 慶浩, 吉田 亮, "逐次実験計画法と高分子物性自動計算の融合:高屈折率・高アッベ数高分子の探索", 高分子学会予稿集, 72 巻, 2 号, Sep. 2023.
- [9] Kunichika Tsumoto, Takao Shimamoto, Yuma Aoji, Yukiko Himeno, Akira Amano, Yasutaka Kurata, "Possible anisotropy-based directivity in EAD-induced triggered activity that leads to reentrant tachyarrhythmias", 第 69 回日本不整脈心電学会学術集会, 札幌コンベンションセンター, 札幌市, July 2023.
- [10] 津元国親、島本貴生、青地悠馬、九田裕一、谷田守、天野晃、倉田康孝, "心室性不整脈発症に関与する撃発活動形成の理論的機序: in silico研究", 第 32 回日本病態生理学会大会, ベルサール西新宿, 新宿区, Aug 2023.
- [11] 津元国親、島本貴生、青地悠馬、九田裕一、谷田守、天野晃、倉田康孝."心室不整脈の起点としてのEAD誘発撃発活動形成の指向性, "炎症・免疫系と心血管系の相互作用から切り拓く循環生理機能の解析", 2023 年度生理学研究所心血管研究会, 自然科学研究機構, 岡崎市, Oct 2023.
- [12] 津元国親、島本貴生、青地悠馬、天野晃、倉田康孝, "第III群抗不整脈薬の催不整脈作用による致死的不整脈の起点としてのEAD誘発撃発活動形成の指向性", 第 97 回日本薬理学会年会, 神戸国際会議場・神戸国際展示場 2 号館, 神戸市, Dec. 2023.
- [13] 津元国親、倉田康孝, "医工・情報学から明かされる心臓不整脈の発生メカニズム", 第 101 回日本 生理学会大会, 北九州国際会議場・西日本総合展示場, 北九州市, Mar 2024.
- [14] 末吉耕大, 松原崇, "述語論理を用いた拡散モデルによるテキストに忠実な画像生成", 電子情報通信学会情報論的学習理論と機械学習研究会(IBISML)東広島, vol. 123, no. 410 IBISML2023-41, pp. 6-13, 3 月 2024.

- [15] 丸茂英敬, 松原崇, "2 次元投射を用いたLiDAR点群のセグメンテーションのためのスケール同変 畳み込み", 第 26 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2023), 2-046, 福岡, 10 月 2023.
- [16] 筒井奎剛, Phuoc Thanh Tran-Ngoc, Hirotaka Sato, 松原崇, "深層学習を用いた昆虫行動の時系列解析", 第 26 回情報論的学習理論ワークショップ (IBIS2023), 1-049, 福岡, 10 月 2023.
- [17] 吉田崇人, 谷口隆晴, 松原崇, "物理システムにおける深層学習のための損失関数", 2023 年度 第 37 回 人工知能学会全国大会 (JSAI2023), 2M6-GS-10-06, 熊本, 6 月 2023.
- [18] 青嶋雄大, 松原崇, "深層生成モデルのための可換かつ非線形な画像編集", 2023 年度 第 37 回 人工知能学会全国大会 (JSAI2023) (人工知能学会 全国大会優秀賞 受賞), 1O4-GS-7-02, 熊本, 6 月 2023.
- [19] 末吉耕大, 松原崇, "順序埋めこみを用いたエネルギーベースモデルによる概念合成", 2023 年度 第 37 回 人工知能学会全国大会 (JSAI2023), 1O4-GS-7-01, 熊本, 6 月 2023.
- [20] 松原崇, "数学的構造を保存する深層学習の圏論的解釈について", 2023 年度 第 37 回 人工知能学会全国大会 (JSAI2023), 1G3-GS-1-04, 熊本, 6 月 2023.
- [21] 松原崇, "圏としての幾何学的深層学習による構造保存", 第 67 回 システム制御情報学会 研究発表講演会 (SCI'23), 京都, 5 月 2023.
- [22] 筒井奎剛, 松原崇, "データ駆動型降水量予測のための評価関数の設計", 第 67 回 システム制御情報学会 研究発表講演会 (SCI'23), 京都, 5 月 2023.
- [23] 丸茂英敬, 松原崇, "距離情報を含む画像のセグメンテーションのための距離同変畳み込み", 第 67 回 システム制御情報学会 研究発表講演会 (SCI'23), 京都, 5 月 2023.
- [24] 樽井 章太, 森川 良忠, 福井 賢一, "イオン液体/グラファイト電極界面に生じる電気二重層におけるLi+イオンの電位に応じた挙動のMD計算による解析", 第 17 回分子化学討論会, 大阪, 2023年9月.
- [25] 高橋慧智,藤本壮也,長瀬悟,磯部洋子,下村陽一,江川隆輔,滝沢寛之,"ベクトル型スーパーコンピュータ「AOBA-S」の性能評価",研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2023-HPC-191(1), 2023 年 9 月.
- [26] 鈴木 優太, 内藤 健, 小林 知嵩, 中川 竜輝, 松村 咲音, 佐藤 理久, 鳥羽 雄大, 小島 健人, 山田 創太, "Tri-octagon型噴流衝突圧縮機構を有する航空宇宙用エンジンの流動数値解析", 第67回 宇宙科学技術連合講演会, Oct. 2023.
- [27] 花野正浩, 佐野孝好, Alessio Morace, 坂和洋一, "臨界密度近傍の多成分プラズマ中のレーザー駆動無衝突静電衝撃波:レーザー偏光方向依存性", 日本物理学会 2023 年年次大会, 18pA105-8, 2023年9月.
- [28] 坂和洋一, 花野正浩, Alessio Morace, 佐野孝好, "臨界密度近傍プラズマ中のプラズマ磁気圧駆動無衝突静電衝撃波", プラズマ核融合学会 2023 年第 40 回年会, 29cA05, 2023 年 11 月.
- [29] 坂和洋一, 花野正浩, Alessio Morace, 佐野孝好, "臨界密度プラズマ中のプラズマ磁気圧駆動無衝 突静電衝撃波イオン加速", レーザー学会 第 44 回年次大会, C05-19a-VII-02C, 2024 年 1 月.
- [30] 坂和洋一, "高強度レーザー駆動無衝突静電衝撃波によるイオン加速", 「宇宙プラズマとレーザー 生成プラズマにおける粒子加速・加熱」研究会, 2024 年 3 月.
- [31] 塩山悠大,河原伸幸,小橋好充,ほか3名,"水素予混合乱流火炎の火炎伝播速度に及ぼす選択拡

- 散の影響", 第34回内燃機関シンポジウム, 講演番号69,2023年12月7日.
- [32] 新宮寛康, 河原伸幸, 小橋好充, "軽油着火式二元燃料ガスエンジンにおけるPREMIER燃焼~当量 比のエンドガス自着火に及ぼす影響~", 日本機械学会中国四国支部第 62 期講演会, 講演番号 06b2, 2024 年 3 月 8 日.
- [33] 天野開,水野賢吾,比江島俊彦,"スクラムジェットエンジンのインレットにおけるゲルトラー渦発生を利用した剥離抑制",第 60 回日本航空宇宙学会関西・中部支部合同秋期大会講演論文集, A05, pp.1-2, 2023.
- [34] 松下啓,岩林菜々香,比江島俊彦,"超音速燃焼におけるSRストラットの燃料噴射位置の効果について",第 37 回数値流体力学シンポジウム講演論文集,3-01,pp.1-2,2023.
- [35] 守山宗和,松山力生,土岐紘大,比江島俊彦,"超音速ジェット流におけるマッハ波と剪断渦の関係について",第 37 回数値流体力学シンポジウム講演論文集,3001-04-04,pp.1-2,2023.
- [36] 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インメント",第 77 回情報処理学会バイオ情報学研究会 情報処理学会研究報告,2024-BIO-77 (21),石川県能美市,Mar 2024.
- [37] 奥村 幸彦, 坪田 知大, 松田 直也, 堀 司, 赤松 史光, "水素保炎型アンモニア拡散バーナーの火 炎構造と反応解析", 第 61 回 燃焼シンポジウム講演論文集電子版 (日本燃焼学会), 講演番号: A311, 4 pages, 2023.11.
- [38] 楠 直也, 竹原 裕貴, 奥村 幸彦, "旋回 絞り構造バーナーによるバイオシンガスの高負荷燃焼機構", 第 60 回日本伝熱シンポジウム講演論文集電子版 (日本伝熱学会), 講演番号: F222, 6 pages, 2023.5.
- [39] Xinpeng Liu, Hiroaki Santo, Yosuke Toda, Fumio Okura, "TreeFormer: Hard-constrained Image-to-graph Generation", 画像の認識・理解シンポジウム, 2023 年 7 月.
- [40] 松本 優作(大阪大学), 堀 司(大阪大学), 河本 祐作(中外炉工業株式会社), 田口 脩平(中外炉工業株式会社), 仲井 和成(中外炉工業株式会社), 尾松 大輔(中外炉工業株式会社), 大倉 莉奈(中外炉工業株式会社), 中塚記章(大阪大学), 澤田 晋也(大阪大学), 赤松 史光(大阪大学), "流体固体熱連成を考慮したラジアントチューブバーナの数値解析",第61回燃焼シンポジウム前刷講演論文集,第61回燃焼シンポジウム, C112, 2023.
- [41] 松元 開 (大阪大学), 吉原 東吾 (大阪大学), 堀 司 (大阪大学), 中塚 記章 (大阪大学), 澤田 晋也 (大阪大学), 赤松 史光 (大阪大学), "酸素水素火炎の燃焼器を対象とした燃焼流と固体の熱連成解析", 第 62 回燃焼シンポジウム前刷講演論文集, 第 61 回燃焼シンポジウム, B212, 2023.
- [42] Yinan Yang (Osaka University), Tomoya Nakai (Osaka University), Tsukasa Hori (Osaka University), Shinya Sawada (Osaka University), Fumiteru Akamatsu (Osaka University), "Numerical Analysis of NO Emission Characteristics in a 10-kW Class Combustion Furnace with Ammonia Co-Firing", 第 62 回燃焼シンポジウム前刷講演論文集,第 61 回燃焼シンポジウム, D121, 2023.
- [43] 香川 麟太郎(阪大), 堀 司, 赤松 史光, 澤田 晋也, "粒子を伴う燃焼器を対象とした数値解析手法の開発", 日本機械学会関西支部 2023 年度関西学生会卒業研究発表講演会, 11PM2-3, 2024.
- [44] 野々村 昂大(阪大), 堀 司, 赤松 史光, "素反応を考慮した RANS 燃焼解析手法の検討", 日本機械学会関西支部 2023 年度関西学生会卒業研究発表講演会, 12PM1-2, 2024.

- [45] 寺田雄亮, 升本順夫, "東太平洋における赤道中層海流の駆動メカニズム", 「微細規模から惑星規模にかけての海洋力学過程と規模間相互作用の研究」研究集会, 大分, Oct. 2023.
- [46] Yusuke Terada, Yukio Masumoto, "Interannual modulation of the intraseasonal variability at 1000m depth in the eastern tropical Pacific Ocean", International workshop on Ocean-Atmosphere Coupling, Tokyo, Nov. 2023.
- [47] 寺田雄亮,升本順夫,"東太平洋における赤道中層海流の駆動メカニズム",研究集会:海洋の統合的 理解に向けた新時代の力学理論の構築,札幌,Nov. 2023.
- [48] Yusuke Terada, Yukio Masumoto, "Generation of the Equatorial Intermediate Current in the eastern Pacific Ocean", 6th ISEE Symposium, Nagoya, Dec. 2023.
- [49] 立浪 祐貴, 瀧 雅人, "物体検出のためのバックボーンとしての再帰ニューラルネットワーク", 情報処理学会 第 86 回全国大会, Mar. 2024.
- [50] 本田悠一郎, 坪井伸幸, 寺島洋史, 荒木天秀, "多成分超臨界・遷臨界流体に対するエネルギー保存 /圧力発展方程式ハイブリッド法の改善と検証", 2023 年度機械学会九州支部卒論発表会, 2024,3
- [51] 帆足真尋, 荒木天秀, 寺島洋史, 坪井伸幸, "超臨界圧下における極低温水素の熱力学物性値に関する数値解析: 状態方程式が数値計算に与える影響", 日本機械学会九州支部 九州学生会第 55 回学生員卒業研究発表講演会, 琉球大学工学部, 2024.3.7
- [52] 鹿釜由衣,坪井伸幸,"翼型の遷音速空力解析における空力特性:乱流モデルの影響評価",2023 年度衝撃波シンポジウム,2024.3.
- [53] 岩見彩花,坪井伸幸,小澤晃平,丸 祐介,藤田 和央,"数値計算による簡易ウェーブライダー形状の空力特性評価:乱流モデルの影響",2023年度衝撃波シンポジウム,2024.3.
- [54] 二本松良祐, 伊藤拓海, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, "2 次元数値解析による水素/空気非予混合 噴射条件下におけるRDEの性能評価:噴射口数が与える影響", 2023 年度衝撃波シンポジウム, 2024.3.
- [55] 奥田響,伊藤拓海,坪井伸幸,小澤晃平,林光一,"水素/空気デトネーションの2次元非定常数値解析:対流項の高次精度化及び数値流束項の影響",2023年度衝撃波シンポジウム,2024.3.
- [56] 笠友介、植村文哉、坪井伸幸、小澤晃平、林光一, "水素酸素デトネーションにおける解適合格子を用いたDDTの数値解析", 2023 年度衝撃波シンポジウム, 2024.3.
- [57] 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:RUT22 について", 第 55 回流体力学講演会/第 41 回ANSS, 2023.7.
- [58] 伊藤拓海,吉富啓介,坪井伸幸,小澤晃平,林光一,"回転デトネーションエンジンにおける水素/空気を用いた予混合及び非予混合気下の2次元数値解析:流れ場と推進パラメータに及ぼす影響の比較",第55回流体力学講演会/第41回ANSS,1B11,2023年6月.
- [59] 伊藤拓海, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, "3 次元数値解析による水素空気予混合気多孔噴射を用いたディスク型RDE の性能評価 噴射口数が伝播特性に与える影響 -", 第 61 回燃焼シンポジウム, C221, 2023 年 11 月.
- [60] 伊藤拓海, 坪井伸幸, 小澤晃平, 林光一, "3 次元数値解析による水酸素予混合気多孔噴射を用いた ディスク型RDE の性能評価 -格子解像度の影響-", 日本航空宇宙学会西部支部講演会(2023),

- JSASS-2023-S007, 2023 年 12 月.
- [61] 植村文哉, 坪井伸幸, 小澤晃平, 唐新猛, 林光一, "ブロックAMR法を用いた 2 次元水素/酸素爆轟の 数値解析:計算の妥当性と構造格子の比較・検討", 第 55 回流体力学講演会/第 41 回ANSS, 1B04, 2023 年 6 月.
- [62] 植村文哉, 坪井伸幸, 小澤晃平, 唐新猛, 林光一, "ブロック AMR 法を用いた水素/酸素デトネーションの DDT に関する 2 次元数値解析- 細分化条件及び AMR レベルによる解析結果の比較検討- ", 第 61 回燃焼シンポジウム, E311, 2023 年 11 月.
- [63] 椎名 峻平, 田浦 健次朗, "分散タスク並列処理系Itoyoriにおける局所性に配慮した大域アドレス 空間およびスケジューリング", 研究報告ハイパフォーマンスコンピューティング (HPC), 2023-HPC-190, July 2023.
- [64] Xiang Li, Ryo Matsumoto, Hiroshi Utsunomiya and Shigenobu Ogata, "The energy dissipation of the slip of edge dislocations of pure Aluminum", the Japan Institute of Metals and Materials Autumn Meeting 2023, Toyama Japan, Sept. 2023.
- [65] 長友英夫, "3次元レーザープラズマシミュレーションコードにおける光線追跡コードの開発と数値解析", 第40回 プラズマ・核融合学会年会, 盛岡市, 2023 年11月28日.
- [66] 冨吉良徳, "任意のトポロジー構造を持つブロック共重合体に対する密度汎関数法",第 72 回高分子討論会,香川大学幸町キャンパス, 2023 年 9 月 26 日.
- [67] 岡田陸, 辻本公一, 安藤俊剛, 高橋護, "DIM による気液密度比が液体噴流の微粒化初期過程に与える影響の解析", 日本混相流学会混相流シンポジウム 2023 講演論文集, 2p, Aug. 2023.
- [68] 増田竜海, 辻本 公一, 安藤 俊剛, 高橋 護, "DNSによる衝突面を振動制御させた多重衝突噴流の 伝熱特性", 日本機械学会 2023 年度年次大会講演論文集, 5p., Sep. 2023., "DNSによる衝突面を振動制御させた多重衝突噴流の伝熱特性", 日本機械学会 2023 年度年次大会講演論文集, 5p, Sep. 2023.
- [69] 村井 詳悟, 田ノ上飛翔, 辻本 公一, 安藤 俊剛, 高橋 護, "DNS による脈動を付与された多重噴流の流動特性", 第 37 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, 6p, Dec. 2023.
- [70] 岡田 陸, 辻本 公一, 社河内 敏彦, 安藤 俊剛, 高橋 護, "分割制御された平面液体噴流の微粒化における密度比の影響", 第 37 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, 5p, Dec. 2023.
- [71] 村井詳悟,田ノ上飛翔, 辻本 公一,安藤 俊剛,高橋 護,"脈動ならびに間欠制御された多重噴流のDNS",日本機械学会東海支部第73期総会・講演会講演論文集,1p,Mar. 2024.
- [72] 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のDNS", 日本機械学会東海支部第 73 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2024.
- [73] 岡田 陸, 辻本 公一, 安藤 俊剛, 高橋 護, "分割制御された液体噴流における密度比が流動特性 に与える影響", 日本機械学会東海支部第 73 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2024.
- [74] 藤森 航紀, 辻本 公一, 安藤 俊剛, 高橋 護, "間欠制御された多重衝突噴流の位相平均場", 日本機械学会東海支部第 73 期総会・講演会講演論文集, 1p, Mar. 2024.
- [75] 都築 昇悟, 太田 貴士, "粘弾性流体乱流のためのLESモデルの開発とその適用範囲の検証", 日本機械学会 2023 年度 年次大会, Sep. 2023.
- [76] 皆本 慧, 太田 貴士, "過冷却液体の乱流のDNSにおける凝固組織構造の形成メカニズムの解明",

- 日本機械学会 第 36 回計算力学講演会, Oct. 2023.
- [77] 上野 玄稀, 太田 貴士, "水素予混合燃焼を伴う壁乱流DNSにおける火炎構造とNOx生成の関係の解析", 第 21 回日本流体力学会中部支部講演会, Nov. 2023.
- [78] 浅野 柚, 太田 貴士, "キャビテーションが発生する乱流クエット流れのDNSにおける非定常渦キャビテーションの維持メカニズム", 第 37 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 2023
- [79] 永井 智也,太田 貴士,"一様に溶融する壁面に沿う乱流境界層における乱流変調のメカニズムの解明",流体工学シンポジウム(第 72 回北陸流体工学研究会), Dec. 2023.
- [80] 道坂 大介, 太田 貴士, "粘塑性流体乱流における組織的構造の特徴の解明", 流体工学シンポジウム (第72回北陸流体工学研究会), Dec. 2023.
- [81] 黒田 陸真, 太田 貴士, "回転する円柱の表面に沿う乱流の抵抗低減条件の導出", 流体工学シンポジウム(第72回北陸流体工学研究会), Dec. 2023.
- [82] 法邑 拓真, 太田 貴士, 中澤 勇亮, "乱流境界層の非定常構造の影響による固体壁振動の解析", 日本機械学会 北陸信越支部 2024 年合同講演会, Mar. 2024.
- [83] 野呂 覚, 太田 貴士, 上野 玄稀, "数値シミュレーションによる水素-空気予混合燃焼を伴う壁乱流の予測の検証", 日本機械学会 北陸信越支部 2024 年合同講演会, Mar. 2024.
- [84] 浪井 稀羽, 太田 貴士, 浅野 柚, "渦キャビテーションの発生を伴う乱流せん断層のDNSにおける 乱流変調の観察", 日本機械学会 北陸信越支部 2024 年合同講演会, Mar. 2024.
- [85] 増山 遼大, 太田 貴士, 皆本 慧, "異なる数値シミュレーション方法による粗面に沿う乱流の予測結果の比較", 日本機械学会 北陸信越支部 2024 年合同講演会, Mar. 2024.
- [86] 小泉優紀、三宅亮太郎、林侑介、藤平哲也、酒井朗, "4 端子平面型TiO2-xメモリスタにおける酸素空孔挙動の有限要素法解析", 第84回応用物理学会秋季学術講演会, 21a-A307-6, 熊本, 2023年9月21日.
- [87] 本告遊太郎,後藤晋,"粒子の添加による壁乱流の低減および乱流構造の変化",混相流シンポジウム 2023, 北海道, 2023.08.24-26.
- [88] 本告遊太郎,後藤晋,"粒子による壁乱流中の秩序構造の低減",日本流体力学会年会 2023,東京, 2023.09.20-22.
- [89] 山本大輔, "SU(N)磁性と冷却原子量子シミュレータ",極限宇宙ワークショップ〜実験と理論の協奏に向けて:固体物質系から量子・冷却気体系まで(招待講演),東大駒場キャンパス東京,2023年5月16日.
- [90] 荻本 和彦, 岩船 由美子, 竹内 知哉, 瀬川 周平, 東 仁, 井上 智弘, 黒沢 厚志, 加藤 悦史, 山口容平, 内田 英明, 太田 豊, 下田 吉之, "ソフトリンクによる 2050 年のエネルギー需給分析: (2) 民生需要変化の電力需給への影響評価", エネルギー・資源学会論文誌, 44 巻, 5 号, p. 245-254, 2023 年 (https://doi.org/10.24778/jjser.44.5\_245).
- [91] 井上 智弘, 黒沢 厚志, 加藤 悦史, 荻本 和彦, 岩船 由美子, 山口 容平, 内田 英明, 太田 豊, 下田 吉之, "ソフトリンクによる 2050 年のエネルギー需給分析: (1) 民生需要変化を考慮したシナリオとその評価", エネルギー・資源学会論文誌 (https://doi.org/10.24778/jjser.44.5\_234), 44 巻, 5 号, p. 234-244, 2023 年.
- [92] 山本紘生, 大森健史, "固液境界における流体力学的境界条件の周波数依存性", 日本伝熱シンポジ

- ウム, 2023.5.25.
- [93] 庄野竜生,畑中健太,Yohei Sato,矢吹智英,"数値計算による水のプール沸騰熱伝達メカニズムの研究",第 60 回日本伝熱シンポジウム,2023.5.
- [94] 庄野竜生,畑中健太,Yohei Sato,矢吹智英,"数値計算による発泡点を制御した水のプール沸騰における対流熱伝達メカニズムの研究",日本機械学会熱工学コンファレンス 2023, 2023.10.
- [95] 中沢一雄,稲田慎,岸田優作,柴田仁太郎,富井直輝,高山健志,井尻敬,山口豪,芦原貴司,"心房細動患者を想定した 3 次元心房形状モデルの構築による興奮伝播ダイナミクスの可視化",第43回医療情報学連合大会,神戸ファッションマート,口頭発表,2023/11/22-25.
- [96] 中沢一雄,稲田慎,岸田優作,柴田仁太郎,富井直輝,高山健志,井尻敬,芦原貴司,"心房細動興奮伝播様式の再現を目指した大規模電気生理学的シミュレーションと可視化",第 62 回日本生体医工学会大会,名古屋国際会議場,口頭発表,2023/5/18-20.
- [97] 玉川 桃菜, 大場 春佳, 水野 信也, "閉鎖型 BCMP 待ち行列ネットワークにおける拠点・窓口数 同時最適化モデルの構築", 日本経営工学会秋季大会予稿集, Oct. 2023.
- [98] 小宮山 佑樹, 大場 春佳, 富樫 敦, 水野 信也, "閉鎖型BCMP待ち行列ネットワークにおける複数窓口に注目した最適拠点配置の実施", 日本経営工学会春季大会予稿集, June. 2023.
- [99] 陳文涛, 長山暁子, "固液界面における熱輸送のスケール効果に関する分子動力学的研究", 日本機械学会熱工学コンファレンス 2023, Oct. 2023.
- [100] 李祥瑞, 陳文涛, 長山暁子, "印加電場がSiC-SiCナノキ ャップ を介したフォノン熱輸送に及ぼす影響", 日本機械学会熱工学コンファレンス 2023, Oct. 2023.
- [101] 木村優太,長山暁子,"多成分系の気液界面における蒸発・凝縮の分子動力学解析",日本機械学会 熱工学コンファレンス 2023, Oct. 2023.
- [102] 諸見里柊, 長山暁子, "接触角の液滴サイズ依存性に関する分子動力学解析", 日本機械学会熱工 学コンファレンス 2023, Oct. 2023.
- [103] 小田 豊, 古川 泰成, 松本亮介, "一様発熱面の熱容量を考慮したチャネル乱流伝熱場の直接数値計算", 第 60 回日本伝熱シンポジウム, Paper No. C132, May 2023.
- [104] 古川泰成,小田豊,松本亮介,香月正司,"一様発熱面の熱容量を考慮したチャネル脈動乱流場のDNS",日本機械学会熱工学コンファレンス 2023, Paper No. B134, Oct. 2023.
- [105] 寺西 勇裕, 平岡 昇真, 水上 渉, 置田 真生, 伊野 文彦, "状態ベクトルに基づく並列量子回路 シミュレーションにおける量子ビット交換の削減のための演算スケジューリング", SWoPP2023, Aug. 2023.

#### 4 その他

- [1] 中谷祐介, "外洋起源有機物の動態が瀬戸内海の COD 濃度に及ぼす影響", 国立環境研究所 地方環境研共同研究全体会合[依頼講演].大阪, 2024 年 2 月 20 日.
- [2] 中谷祐介, "スパコンを活用した瀬戸内海の水環境シミュレーション", スパコンセミナー「のぞいてみようスパコンの世界 『富岳』を見て, 聞いて, 知って [依頼講演].神戸, 2023 年 10 月 14 日.
- [3] 中谷祐介, "AI を活用した河川浮遊ごみのモニタリングと挙動解析", 国立環境研究所セミナー[依

- 頼講演].オンライン, 2023年7月6日.
- [4] 中谷祐介, "瀬戸内海の栄養塩類はどこまで管理できるのか?", 兵庫県漁協青壮年部連合会研修会 [依頼講演].洲本, 2023 年 5 月 26 日.
- [5] Takehiro Aoshima and Takashi Matsubara, "Semantic Images Editing by Operations on Latent Space of Deep Generative Models", 日本画像学会誌, vol. 62, no. 6, pp.579-587, 2023 年.
- [6] 松原崇, 陳鈺涵, 谷口隆晴, "幾何学的深層学習による力学系のグレーボックスモデル化", 人工知能, vol. 38, no. 3, pp. 308-317, 2023 年.
- [7] 青嶋雄大, 松原崇, "潜在空間で画像編集―大きさ・色・形, 思いどおりに画像を編集!", in コンピュータビジョン最前線 Winter 2023, 共立出版, 2023 年.
- [8] 大橋圭太郎,原田隆史,中西周次,神谷和秀,"銅担持共有結合性有機構造体による一酸化炭素電解 還元反応とそのメカニズム解析",2023 電気化学秋季大会,九州大学伊都キャンパス,Sep. 2023.
- [9] 名木田海都, 濱本雄治, 神谷和秀, 中西周次, 森川良忠, "銅(100)表面上での CO2 電解還元に対して吸着酸素原子が与える影響の第一原理解析", 電気化学会第 91 回大会, 名古屋大学東山キャンパス, Mar. 2024.
- [10] 石原菜々子, 田畑裕, 西島弘晃, 近谷元大, 向山義治, 長谷陽子, 向田志保, 中西周次, "糖の人工 光合成系の設計におけるデータ駆動型アプローチ と生成 AI の活用", 第 13 回 CSJ 化学フェスタ 2023,タワーホール船堀, (優秀ポスター発表賞), Oct. 2023.
- [11] 石原菜々子, 田畑裕, 西島弘晃, 近谷元大, 向山義治, 長谷陽子, 向田志保, 中西周次, "Data-driven Exploration of Chemical Stabilizers of Life-sustaining Sugars", 第 46 回ケモインフォマティクス討論会,中央大学後楽園キャンパス, Nov. 2023.
- [12] S. Koshimura, E. Mas, B. Adriano, A. Musa, "Tsunami Digital Twin A new paradigm for tsunami disaster resilience", the 28th General Assembly of the International Union of Geodesy and Geophysics, July 11-20, 2023.
- [13] 鍬守 直樹、撫佐 昭裕、金城 潤子、瀧川 陽平、佐藤 佳彦、越村 俊一, "MAS SAMANEZ ERICK ARTURO、災害評価装置、災害評価方法、及びプログラム", 日本電気株式会社、国立大学法人東北大学、特願 2024-044648, 2024 年 3 月 21 日出願.
- [14] 竹本宏輝, 明孝之, 堀川昶, 井坂政裕, M. Lyu, Q. Zhao, N. Wan, "複素スケーリングされた生成座標法で得られた Bloch--Brink 波動関数による 8Be の共鳴の解析", 一般社団法人 日本物理学会 オンライン, 2024 年 3 月 20 日.
- [15] 宮下竜、高橋裕介、"低速領域における柔軟エアロシェルの流体構造連成モデリングと再構築手法について"、令和5年度宇宙 航行の力学シンポジウム 神奈川、12/11-12、2023.
- [16] 高橋裕介、Sanjoy Kumar Saha, "柔軟構造エアロシェルの流体構造連成解析と動的モード分解による主要モード抽出の進捗 ついて", OpenCAE シンポジウム 2023 A-09 神奈川, 12/8-9, 2023.
- [17] 高橋裕介, "動的モード分解を用いた流体構造連成挙動の解析", 第 36 回計算力学講演会 (CMD2023)OS-0603 豊橋, 10/25-27, 2023.
- [18] Sanjoy Kumar Saha and Yusuke Takahashi, "Dynamics of Coherent Patterns Around Deployable Aeroshell Using Dynamic Mode Decomposition", 第 67 回宇宙科学技術連合講演会 2H13 富山, 10 月 17-20 日, 2023.

- [19] Sanjoy Kumar Saha and Yusuke Takahashi, "Aeroelastic Behavior of Deployable Aeroshell in Subsonic and Transonic Flow", 第 55 回流体力学講演会/第 41 回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 2B07 東京, 7 月 12-14 日, 2023.
- [20] Y. Kuwahara, T. Hattori, P. Krukowski, C. Ye, A. Saito, Y. Hamamoto, Y. Morikawa, and H. Osuga, "Stereochemical Recognition of thiaheterohelicene derivatives Investigated by STM and Raman Scattering Spectroscopy", 国際会議発表 ポーランド (ウッジ Lodz), 2023 年 8 月.
- [21] 楊 軼楠, 中井 智哉, 堀 司, 澤田 晋也, 赤松 史光, "共役熱伝達を考慮した数値解析による二段 燃焼を適用した 10kW 級アンモニア燃焼炉における NO 排出予測", 熱工学コンファレンス 2023, E122, 2023.
- [22] 松元 開(阪大), 堀 司, 中塚 記章, 澤田 晋也, 赤松 史光, "流体固体熱連成解析によるフィルム 冷却を適用した酸素水素燃焼器ライナーの壁温度の予測", 第 99 期定時総会講演会 20201., 2024.
- [23] 松本優作(阪大), 堀 司, 河本 祐作(中外炉工業), 田口 脩平, 仲井 和成, 尾松 大輔, 大倉 莉奈, 中塚 記章(阪大), 赤松 史光, "流体固体熱連成を考慮したラジアントチューブバーナ炉の数値解析", 第 99 期定時総会講演会 10203., 2024.
- [24] 寺田雄亮,升本順夫,"東部太平洋赤道域の深さ 1000m における季節内変動の経年変化", 月刊海洋, 56, 10-16., 2024.
- [25] Takuma Kobayashi, Takayoshi Shimura, Heiji Watanabe, "Ab initio study of oxygen-vacancy defect in 4H-SiC: A potential qubit", International Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ICSCRM 2023), Sorrento, Italy, Sep. 2023.
- [26] 岩本 蒼典, 志村 考功, 渡部 平司, 小林 拓真, "第一原理計算に基づく 4H-SiC 中酸素関連欠陥 の系統的調査", 第71 回応用物理学会春季学術講演会 東京 日本, 2024 年 3 月.
- [27] 織戸悠輔, 吉野元, "画像データを用いた深層学習における隠れ層のレプリカ相関", 日本物理学会第 78 回年次大会 東北大学, 2023 年 9 月.
- [28] 織戸悠輔, 吉野元, "画像データを用いた深層学習における長時間ダイナミクス", 日本物理学会 2024 年春季大会 オンライン, 2024 年 3 月.
- [29] 竹内雄人, 竹内潤一郎, 藤原正幸, "キャピラリ数が吸水過程に与える影響について", 令和 5 年度 応用水理研究部会講演会 東京大学., 2023 年 12 月 2 日.
- [30] Shinsuke Takasao, "Impacts on stellar scale processes on disk evolution", Tohoku University, Mar. 19, 2024.
- [31] 萩田克美, 村島隆浩, "ブロックコポリマーの相分離構造を自発的に形成する Kremer-Grest 粗視化 MD モデルの検討", 日本物理学会 2024年春季大会 オンライン, 発表年月 2024.3.
- [32] Katsumi Hagita, "Systematic analysis of adhesion and delamination mechanisms at polymer-inorganic interfaces via coarse-grained molecular dynamics", CREST-NIST joint mini-symposium ワシントン, 発表年月 2024.3.
- [33] T. Sano, "MHD simulation and laser experiment", Athena++ Workshop (Invited) New York USA, May 8-12, 2023.
- [34] T. Sano, "Mitigation of shock-driven interfacial instability", 6th International Conference on Matter

- and Radiation at Extremes (Invited) Zhuhai China, Jun 5-9, 2023.
- [35] T. Sano, "Relativistic wave-particle interaction under a strong magnetic field", Torino International Conference on Fundamental Plasma Physics (Invited) Torino Italy, Jun 21-23, 2023.
- [36] T. Sano, "Laser astrophysics experiment on the amplification of magnetic fields by shock-induced interfacial instabilities", Protostars and Planets VII (Poster) Kyoto Japan, Apr 10-15, 2023.
- [37] T. Sano, S. Isayama, K. Takahashi, and S. Matsukiyo, "Relativistic two-wave resonant acceleration of electrons at large-amplitude standing whistler waves during laserplasma interaction", International Conference on High Energy Density Sciences (HEDS2023) (Poster) Yokohama Japan, Apr 18-21, 2023.
- [38] T. Sano, "Richtmyer-Meshkov instability in magnetized plasmas", 7th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (AAPPS-DPP) (Invited) Nagoya Japan, Nov 12-17, 2023.
- [39] T. Sano, S. Isayama, K. Takahashi, and S. Matsukiyo, "Relativistic two-wave resonant acceleration of electrons at large-amplitude standing whistler waves during laser-plasma interaction", 65th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics (APS-DPP) (Oral) Denver USA, Oct 30-Nov 3, 2023.
- [40] T. Sano, S. Isayama, S. Matsukiyo, K. Sugimoto, and Y. Sentoku, "Acceleration of relativistic particles and gamma-ray emission in standing Alfven waves", 65th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics (APS-DPP) (Poster) Denver USA, Oct 30-Nov 3, 2023.
- [41] M. N. Ly, T. Sano, Y. Sakawa, and Y. Sentoku, "The impacts of downstream heating on ion reflection for collisionless electrostatic shock", 65th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics (APS-DPP) (Poster) Denver USA, Oct 30-Nov 3, 2023.
- [42] M. N. Ly, T. Sano, Y. Sakawa, and Y. Sentoku, "Conditions of structural transition from collisionless electrostatic shock to double-layer structure", 65th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics (APS-DPP) (Poster) Denver USA, Oct 30-Nov 3, 2023.
- [43] T. Sano et al., "A novel scheme of laser-driven proton-boron fusion under an ultra-strong magnetic field", 29th IAEA Fusion Energy Conference (FEC 2023) (Poster) London UK, Oct 16-21, 2023.
- [44] T. Sano, "Richtmyer-Meshkov instability in magnetized plasmas", International school and workshop on Matter in Extreme Conditions for Magnetized PLAsmas (MECMATPLA) Montgenèvre France, Feb 5-9, 2024.
- [45] 佐野孝好, "強磁場中でのレーザープラズマ相互作用とその応用", レーザー学会学術講演会第 44 回年次大会(口頭)東京, 2024/1/16-19.
- [46] 佐野孝好, 諫山翔伍, 松清修一, "実験室および天体プラズマにおける大振幅ホイッスラー波の伝播特性", 第40回 プラズマ・核融合学会 年会 (口頭) 盛岡, 2023/11/26-30.
- [47] 佐野孝好, "大振幅ホイッスラー波の伝播特性に対するイオン質量の依存性", 日本物理学会 2023 年第 78 回年次大会(口頭)仙台, 2023/9/16-19.
- [48] Minh Nhat Ly, T. Sano, Y. Sakawa, and Y. Sentoku, "The impact of downstream heating on ion acceleration for collisionless electrostatic shock", 日本物理学会 2023 年第 78 回年次大会(口頭,学生優秀発表賞受賞)仙台, 2023/9/16-19.

- [49] 佐野孝好, "強磁場中の相対論的波動粒子相互作用", ISEE 研究会「宇宙プラズマとレーザー生成プラズマにおける粒子加速・加熱」(口頭) 名古屋 2024/3/4-5.
- [50] Yusuke Yasuda, Hiroshi Morita, "Coarse-Grained Model of Dynamic Bond Elastomers with Tunable Binding Entropy and Energy", The 13th SPSJ International Polymer Conference, Jul.2023.
- [51] Yusuke Yasuda, Hiroshi Morita, "Mechanical and Structural Analysis of Dynamic Bond Elastomer via Coarse-grained Molecular Dynamics Simulation Techniques", 9IDMRCS (9th International Discussion Meeting on Relaxations in Complex Systems), Aug.2023.
- [52] Yusuke Yasuda, Hiroshi Morita, "Dynamics and Mechanical Simulations of Entropy-Driven and Enthalpy-Driven Dynamic Bond Elastomers via Coarse-grained Molecular Dynamics Techniques", MRM2023/IUMRS-ICA2023, Dec.2023.
- [53] Yusuke Yasuda, Shintaro Nakagawa, Hirohiko Houjou, Naoko Yoshie, Hiroshi Morita, "Coarse-grained molecular dynamics simulations on mechanical properties of dynamic bond elastomers with entropy/enthalpy-driven mechanisms", ACS Spring 2023, Mar.2024.

#### SC23 出展報告

伊達 進 <sup>1,2</sup> 速水 智教 <sup>1</sup> Kundjanasith Thonglek <sup>1</sup> 谷口 昂平 <sup>1,5</sup> 曽我 隆 <sup>2</sup> 田主 英之 <sup>2</sup> 細見 岳生 <sup>2</sup> 並木 悠太 <sup>2,3</sup> 上野 雅矢 <sup>4</sup> 高嶋 和貴 <sup>5</sup> 村田 忠彦 <sup>1</sup> <sup>1</sup>応用情報システム研究部門 <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>日本電気株式会社 <sup>4</sup>情報推進部情報基盤課 <sup>5</sup>大学院情報科学研究科

2023年11月に米国コロラド州 Denver にて開催された国際会議/展示会 SC(通称 SC23)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 おり、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、今年は過去最高の14,295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22回目となる。

2023 年の SC (通称 SC23) は、米国コロラド州デンバー市にある Colorado Convention Center (図 1) にて、11 月 12 日から 17 日までの期間に開催された。なお、デンバーでの SC の開催は、2001、2013、2017、

2019年度に続いて5度目となり、本センターのデン バーでの展示も5度目となる。デンバーはコロラド 州の州都であり、別名マイル・ハイシティ (Mile High City) とよばれる。このマイル・ハイという名の由 来は、デンバー市は標高1マイル(1,609 m)にある ことによる。そのため、空気が希薄であり、お酒に は酔いやすいという高地ならではの特徴もある。ま た、デンバーは1年を通して空気が乾燥している。 そのため、毎回体調を崩す者がいるが、今回の展示 においても本調子ではなく風邪をひく者も多くいた。 また、今回最も厳しかったのは、歴史的な円安(1 USD = 150 JPY) であった。クレジットカードで決済 すると 1 ドル 154.4 円程度となっており、全ての物 が高く感じられた。さらに、今回の展示では、持参 したポスター筒が空港で紛失(おそらく盗難)する というアクシデントに見舞われた。そのため、急遽 電子版から現地でポスター印刷を行うという緊急対 応を行なった。

そのような中、本センターの展示に携わった皆全 てが責任感を持って、自身の対象となる展示を行い、 結果として、400 名超の来訪者に説明を行うことが



図 1: Colorado Convention Center



図 2:参加スタッフ記念撮影その1



図 3: 参加スタッフ記念撮影その2

できた。なお、この数字は概ねコロナ禍前の数字と同等である。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報告・発表に責任感をもって対応でき、サイバーメディアセンターの国際的なプレゼンス向上、本センターの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。

#### 2. 展示内容

SC23 では、11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13名(表1)が大阪大学サイバーメディア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、本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、3)。

表 1:参加スタッフ一覧

応用情報システム研究	究部門				
スタッフ	尹達 進				
<b>†</b>	村田 忠彦				
j	速水 智教				
Kundjanasith Thonglek					
í	谷口 昂平				
ß	阿部 洋丈(招へい准教授)				
J	片岡 小百合				
大学院生	高嶋 和貴				
高性能計算・データタ	分析融合基盤協働研究所				
スタッフ [	曽我 隆				
E	田主 英之				
糸	細見 岳生(招へい准教授)				
<u>)</u>	並木 悠太(NEC 研究員)				
情報推進部情報基盤課					
技術職員 _	上野 雅矢				

- (1) "Large-scale Computing Systems at the Cybermedia Center"
- (2) "Development of AI models for analyzing dental panoramic radiographs" & "MPI communication logging module with BlueField-2 Data Processing Unit"
- (3) "Provenance Management Framework for HPC Systems"
- (4) "High-speed Data Transmission" & "Information Infrastructure Integration"
- (5) "Cloud-Edge Continuum Computing Platform: An Application Platform in Post-5G Era"
- (6) "Synthetic Population for Real-Scale Social Simulations"

ブース展示は、11月13日から16日までの4日間行われた。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。その間の当ブースへの来訪者数は431名であった。訪問者数はコロナ禍前の2019年度の423名と比較すると微増という結果となり、コロナ禍前の水準まで回復した。

ブース来訪者の地域別分類(図 4)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59.2%を占めている。続いて、日本からの来訪者が16.2%、欧州からの来訪者が13.5%、アジアから

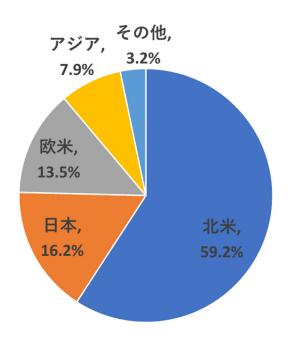


図 4: ブース来訪者 - 地域分類別

の来訪者が7.9%であった。北米、アジア、欧州で全体の96%以上を占め、その他には中南米、中東、アフリカ、オセアニアの来訪者が含まれており、南極を除く全ての大陸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と言える。

平均すると 1日で 107.75 人の来訪者があった。展示初日の 11月 13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、100人近い来訪者があった。

以下、SC23 にて大阪大学サイバーメディア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 Cybermedia Center" (上野)

本ポスターでは、大規模計算機システムの構成や利用状況についての紹介を行った(図 5)。ブース来訪者からは主に、「どのような分野のユーザが使用しているのか?」、「OCTOPUS、SQUID それぞれ、どのようなアプリケーションが使えるのか?」といった質問があった。また、OCTOPUS のサービスを終了する旨紹介した際は、「次に導入するシステムはどのような構成になるのか?」といった質問があった。

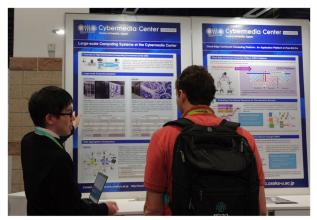


図 5: ポスター説明を行う上野(技術職員)

また、次期システムの名称について興味を持たれる 方もいた。SQUID、ONIONともに他のスパコンと比 較すると名称が印象的なので、本学を知らない来訪 者にも興味を持ってもらうことができ、そこから 様々な話を伺うことができた。

# (2) "Development of AI models for analyzing dental panoramic radiographs" & "MPI communication logging module with BlueField-2 Data Processing Unit" (速水、高嶋)

本ポスターでは2つの研究テーマについての発表を行った。ポスター前半では、歯科医療における人工知能(AI)の応用として、歯科用パノラマエックス線画像から歯式(歯の番号)を抽出・分類するための AI システムについて紹介した(図6)。実際の医療現場で採取されるパノラマエックス線画像の特徴を踏まえ、歯科医師の判断の仕方をプロセスに取り入れることで歯式を精度良く判別するための工夫について説明した。

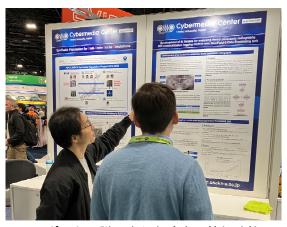


図 6: ポスター説明を行う速水(特任助教)

来訪者からは、そもそもなぜ歯に番号を付ける必要があるのか、どのように付けるのかといったものから、使用した AI モデルの構成やデータの種類について、さらに他の医療機関との連携の有無や将来の展望について質問があった。歯の治療記録を管理するために必要な歯式を正確に検出することが、治療対象となる歯の取り違え等の医療ミスを防止するうえでも有用である。こうした意義は専門分野外の方にも大いに共感いただけた。

ポスター後半では、MPI アプリケーション実行時のプロセス間の通信ログを取得するためのモジュールを提案した(図 7)。MPI プロセス間の通信ログを取得することでMPI アプリケーションのデバッグや性能チューニングに活用することができる。しかし、通信ログの取得処理を CPU 上で実行する場合、MPI アプリケーションで利用できたはずの計算資源が消費される。この問題を解消するために、我々は通信処理を CPU からオフロードすることが可能なアクセラレータデバイスである Data Processing Unit (DPU)の活用に着目した。本研究では、CPU 使用率を増加させないことを目的として、通信ログの取得処理を DPU 上で実行する MPI 通信ロギングモジュールを開発した。

来訪者からは、MPI アプリケーションのチューニングを行うツールの必要性についての共感を得ることができた。一方、本研究の提案モジュールの性能については課題があるという指摘があった。特に提案モジュールによる通信遅延時間のオーバヘッドは、最新の InfiniBand ネットワーク環境においては無視できないものであるとの指摘があった。また、DPUの利用が効果的なユースケースについて知りたいという質問が多く寄せられた。GPU や FPGA といった他のアクセラレータデバイスと比較して、DPU はそのユースケースが少ない状況である。本会議のプレゼンテーションセッションやポスターセッションで、DPU についての研究発表が複数件見られたことからも、DPU の活用方法について注目が集められていることが確認できた。

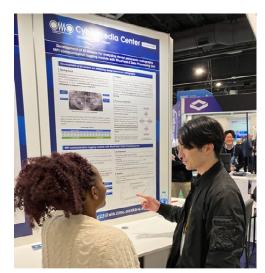


図 7: ポスター説明を行う高嶋(大学院生)

## (3) "Provenance Management Framework for HPC Systems" (並木)

本ポスターでは研究データ管理の一環として、HPC システムにおいて生み出されるデータの来歴を記録、管理するためのフレームワークを提案した(図8)。

提案の背景には世界的に広がりつつあるオープンサイエンスの潮流における、研究データを再現可能な形で管理することへの要求がある。来歴は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列挙したものであり、再現可能性を高める情報のひとつである。しかし、来歴を研究者が手作業で正確に記録することは現実的ではない。我々の提案は既存のプログラムなどの資産に変更を加えることなく、自動的に来歴を記録、管理するための手法である。

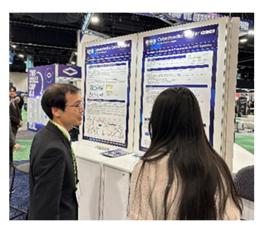


図 8: ポスター説明を行う並木(NEC 研究員)

来訪者のうち、特に大学や国立研究所(主に米国)の関係者からは来歴の必要性に共感してもらうことができた。「再現しようとしても試行錯誤の過程で同じようなファイルが大量にあり、必要な版のファイルを探し出すのに苦労した」というまさに本手法が解決しようとしている問題の実体験を聞くこともできた。また、テラバイト級の大容量データへの対応、分散した拠点に跨った計算機の利用への対応、様々なアプリケーションの挙動が記録できるのか、といった点に関して質問が寄せられた。議論では具体的な事例や質問が多く、日本国内と比較して研究データ管理への取り組みが進んでいることが窺えた。

## (4) "High-speed Data Transmission" & "Information Infrastructure Integration" (細見、田主)

本ポスターでは、研究データ管理基盤の領域での研究成果として、高速データ転送と、集約基盤と公開基盤の連携について展示を行った(図 9)。高速データ転送は、大学キャンパス内において研究データを高速に転送可能とする Red-ONION を実現する要素技術である。各研究部門で生成される大量の研究データを、100 Gbps の速度で高速に集約基盤に転送、また研究部門間で共有可能とすることを目指している。本ポスターでは、複数のデータ転送技術の性能評価を SC23 に設置したサーバと大阪大学に設置したサーバとで実施することを説明した。また、集約基盤と公開基盤の連携は、現在サイバーメディアセンターが試験運用している集約基盤 ONION と大阪大学附属図書館が運用している公開基盤 OUKA との連携を実現した方式について説明を行った。こ



図 9: ポスター説明を行う田主 (特任研究員)

れにより、研究部門からの研究データの集約、そして公開までの一連のフローを実現できることを示した。

来訪者からは、高速データ転送についてこのような技術が求められている背景の確認、同様の問題意識の共有、実験でどのような性能が出たのかの質問があった。また、研究データの集約、そして公開に関しては、来訪者の中でオープンリサーチデータに対する認知度が低く、まずはオープンリサーチデータの背景、必要性の説明から行った。「研究データ管理における研究者の負担を減らす」という目的に共感が得られ、ワンクリックでデータ公開申請を行えるその手法に関心が寄せられた。

## (5) "Cloud-Edge Continuum Computing Platform: An Application Platform in Post-5G Era" (Thonglek、谷口)

「ポスト 5G 情報通信システム基盤強化研究開発事業/ポスト 5G 情報通信システムの開発」プロジェクトの概要と研究予定についてのポスター発表を行った(図 10、11)。本プロジェクトの目標は、クラウド、エッジ、デバイスを含む IT インフラを安価に提供するアプリケーションプラットフォームの実現である。この目標に向けて、我々は資源を必要な量・時間だけ切り分けて提供するリソーススケジューラの研究開発、ネットワーク資源をより細かな時間単位で管理・提供するための研究開発の 2 点に取り組む。

プロジェクトの初年度ということもあり、聴衆からはさまざまな観点からの質問をいただいた。ユー

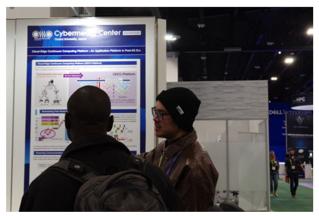


図 10: ポスター説明を行う Thonglek (特任助教)

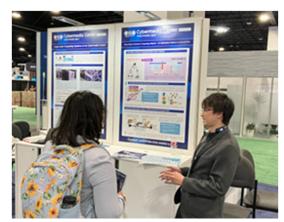


図 11: ポスター説明を行う谷口 (特任研究員)

ザの観点からは、どのようなアプリケーションを実行できるのか?プラットフォームの外にあるサービスと連携できるか?といった質問をいただいた。技術的な観点からは、デバイスや計算機などの性能差をどう扱うのか?データ転送およびリソースを切り替えた際のセキュリティ対策はどうするのか?といった質問をいただいた。ポスター発表を通じて、今年度の目標である要件定義に向けた実りのある議論ができた。

## (6) "Synthetic Population for Real-Scale Social Simulations" (村田)

本ポスターでは、2019 年度から毎年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 年度までを予定している JST 未来社会創造事業における合成人口データを用いたシミュレーション事例についての報告を行った(図 12)。合成人口プロジェクトでは、大阪大学サイバーメディアセンターの OCTOPUS 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バ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センターの 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。

聴衆からは、合成する人口の規模についての質問が寄せられ、日本の全人口 1 億 2000 万人の全世帯を 2000 年、2005 年、2010 年、2015 年の国勢調査に基 づいて合成し、各年度 100 セットずつ合成している ことを伝えると、大規模計算の必要性を感じてもらうことができた。また、計算の高速化の可能性についての質問も寄せられ、都道府県別の統計であることから、47 都道府県それぞれで分散の計算はできること、最大は東京都の全市区町村の同時合成で、最適化の精度をもっとも高めた場合には、4 ヶ月程度

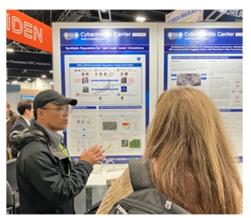


図 12: ポスター説明を行う村田(教授)

かかることを伝えることができた。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

さらに本年度は、情報通信機構 NICT の研究展示 ブースにおいても、ポスター(4)に関連した Red-ONION 実演を行った(図 13)。また本内容につ いて、NRE シアターで展示内容の発表を行った(図 14)。



図 13: 情報通信機構 NICT でのデモの様子

NICT 展示者としてデモ実演を担当した片岡洋介氏 (NEC)

デモでは、NICT のブースに設置したサーバと大阪大学に設置したサーバを、NICT が提供する日米間の 100 Gbps のネットワーク回線を用いて接続した環境でデータ転送実験を行っている様子を示した。サーバのハードウェア構成としては、多数の NVMeストレージと 100 Gbps の NIC を搭載した。これにより、100 Gbps を超えるディスクアクセスと 100 Gbps での通信を可能とした。サーバには、高速データ転送ツールとして、HPC 分野におけるデータ転送ツールとして広く用いられている GridFTP、XRootD、Archaea の 3 つをインストールし、それらのツールを用いて転送実験を行った。



図 14: NRE シアターで展示内容を発表する細見 (招へい准教授)

実験の結果、GridFTP と Archaea のツールを用いて複数ファイルの同時転送で約 40Gbps の性能を観測することができた。また、単一ファイルの転送においてはさらに低く約 20 Gbps にとどまっており、課題があることも確認できた。本原因を解析するためにディスクを用いないメモリ間転送で測定を行ったところ、両ツールにて 100 Gbps の速度を観測することができた。このことからファイル I/O に課題があることも確認できた。なお、XRootD については設定トラブルによって評価が実施できなかった。

NRE シアターでの発表は、本デモの内容と上記実験の途中結果を報告した。

展示ブースやシアターの来訪者からは、測定方法 や、単一ファイル転送にて性能が出ない理由につい て質問があり、議論を行った。また、データ転送技 術を開発している Northwestern 大学の Jim Chen 氏や、同じ NICT ブースにて展示を行っていた KDDI の担当者と情報交換を実施し課題の共有をおこなった。

#### 3. おわりに

今年度の展示においても、大阪大学サイバーメディアセンターの大規模計算機および可視化事業をはじめとし、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 431 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の開催は米国ジョージア州アトランタ市で同時期に開催されるが、大阪大学サイバーメディア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と考える。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 29 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2023)報告および 第 30 回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2024)告知

大阪大学サイバーメディアセンター教授 吉野 元

#### 1. SuperCon2023

昨年 2023 年 8 月 21 日から 25 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(SuperCon2023)」が行われました。本年も引き続きコロナ禍にありながらもオンラインにて本選を開催することができました。これに向けて予選が行われ、18 チームが予選を通過しました。その結果は下記 HP に掲載されております。通常は西日本の上位 10 チーム、東日本の上位 10 チームを選抜し、それぞれ大阪大学(阪大)と東京工業大学(東工大)の会場に集まって本選が開催されていました。しかし、オンライン開催であるため東西区別なく上位 18 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チームが参加します。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 日間にも渡る合宿型で、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 本選では富嶽が用いられました。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 が用いられました。

#### 2. 予選

2023年の予選課題は5月31日に下記の 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16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。2023年の予選課題は、阪大の作成チームによる「地形推定問題」というものでした。これはでこぼこの地形をあるルールに従って進む複数のハイカーのスタートおよびゴール地点の情報が与えられ、それから逆に地形を推定するという問題です。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 東工大の作成チームによる「最近点対探索」という 問題でした。2次元空間に分布した点の中で最も距 離の近いペアを見つけるという問題で、様々な実際 の科学技術計算で遭遇する問題です。実際の本選で は、課題に取り組む前に、富嶽スーパーコンピュー タ、また OpenMP/MPI を用いた並列プログラミング 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 2024 の告知

2024年は8月19日(月)から23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19日に公表、課題提出が切は6月14日正午です。今回は、阪大CMCのスパコン、SQUIDを使用する予定です。しばらく理研の富嶽を用いる年が続いておりましたので阪大CMCのスパコンを使用するのは久しぶりとなります。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が、もしも可能ならば皆様もお知り合いの高校生に SuperCon2024 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 SuperCon2025 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

http://www.gsic.titech.ac.jp/supercon/ がコンテストページです。ぜひ一度御覧ください。

#### 大規模計算機システム利用者講習会等の紹介

大阪大学サイバーメディアセンター教授 降籏 大介

#### 1. 概要

サイバーメディアセンターの教職員をはじめ、大阪大学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関係者は、システムをユーザにより有効に活用していただくために何が出来るかを日々考えています。たとえばその一端として、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メールなどで受け付け適切に返答するための仕組みの構築と維持、それらを明文化するためのweb にける FAQ の整備などの活動を行っています。

そうした活動の中でもわれわれが重要と考えているのが、ここで紹介するweb等による利用者への情報提供(システムの紹介や利用の手引等)と利用者講習会です。Webによる情報提供は場所も時間も制限しませんのでユーザの皆様にいつでも使っていただけ、非常に有益であると思います。そして、利用者講習会は計算機ユーザへ知識を伝える場だというだけでなく、その場での質問などを通じてユーザと直接やりとり出来る場でもあり、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、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います。本稿ではこの利用者講習会について皆様にご紹介いたしましょう。

これら講習会の内容は、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、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、大規模計算を行う近年の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 SQUID が誇る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、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、昨今のデータ志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、

スーパーコンピュータ上のコンテナ利用講習会、 KKR グリーン関数法を用いた第一原理計算プログラム AkaiKKR、密度汎関数法に基づくアプリケーションである PHASE/O といった専門家用の特殊なソフトウェア等々、多岐にわたります。こうした内容はユーザの要望に沿って、計画されています。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 20 回程度開催しております (2023 年度は 21 回開催いたしました)。これらについては、より詳細な情報をサイバーメディア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

近年、学生も研究者も大変に多忙です。これをう けて、一部の講習会は年に2回、ほぼ同じ内容の講 習会を時期をずらして開催するように工夫していま す。実際には、5月から6月後半と9月頭~12月頃 に開催しています。これは、「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反映 したもので、なるべく多くのユーザが参加できるよ うに、また、講習会の受講が意義あるものになるよ うにと配慮した結果です。また、これまで現場での 開催のみだった講習会にも 2019 年よりその一部に ついてオンライン配信を開始し、ユーザがより参加 しやすいような形へと拡張しています。このように オンライン配信を導入していたため、2023年も無事 にすべての利用者講習会をオンラインにて実施する ことができました。

また、AkaiKKR、PHASE/0 などの研究者用専門ソフトウェア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が、われわれは一般財団高度情報科学技術研究機構、株式会社アカデメイア様、PHASE

システム研究会、国立研究開発法人物質・材料研究 機構、株式会社アスムス様と協力して講師を確保す るなどして、こうした専門家向けソフトウェアの講 習会を開催しています。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、講習会をユーザの皆様に役立 てていただいていると考えています。

#### 3. 初学者にも優しく

未参加の方にとって、こうした講習会は敷居が高いと思われがちです。しかし、先に述べたように初学者も講習会の対象で、2023年の21回の講習会のうちおおよそ1/4ほどは初学者が対象の内容のものです。

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大変なプロフェッショナルばかりと想像されることもありますが、もちろんそれは違います。どなたも「最初は初心者」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基礎的な概念や手法についてはなかなか良い資料・ドキュメント類が見つからないということは珍しくないのです。

われわれサイバーメディアセンターでは、こうした点を補い、より広い分野・方面の方にユーザとしてシステムを使ってもらうべく、常に初学者に優しくありたいと考え、講習会をこのような構成にしています。

#### 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な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 や密度汎関数法に基づく PHASE/O の講習会も行っています。また、一部の 講習会は、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 をとっており、微細な部分に至るまで具体的な体験 を得られ、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、われわれサイバーメディアセンターの web

http://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サイバーメディアセンターまでお聞かせください。

### 2024 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	サイバーメディアセンター 宮武 勇登 准教授
2	初めてのスパコン	6月6日 9月開催予定	サイバーメディアセンター 木戸 善之 招へい教授 情報基盤課 技術職員
3	OpenMP 入門	6月12日	サイバーメディアセンター 吉野 元 教授
4	並列プログラミング入門 (OpenMP/MPI)	6月17日	日本電気株式会社
5	スーパーコンピュータ バッチシステム入門 / 応用	6月18日	日本電気株式会社
6	SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎	6月24日	日本電気株式会社
7	ONION 活用講習会	6月26日	日本電気株式会社
8	コンテナ入門	6月28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9日	エクセルソフト株式会社(予定)
10	GPU プログラミング入門 (OpenACC)	調整中	プロメテック・ソフトウェア株式会社 (予定)
11	GPU プログラミング実践 (OpenACC)	調整中	プロメテック・ソフトウェア株式会社 (予定)

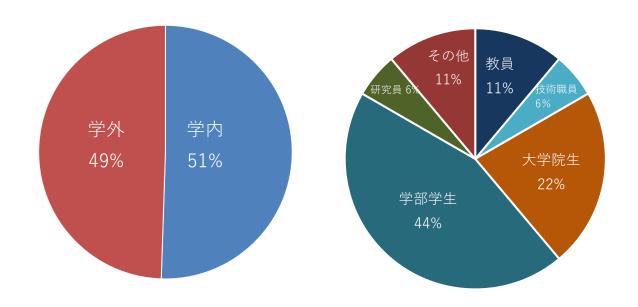
※全てオンラインでの開催

#### 2023 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

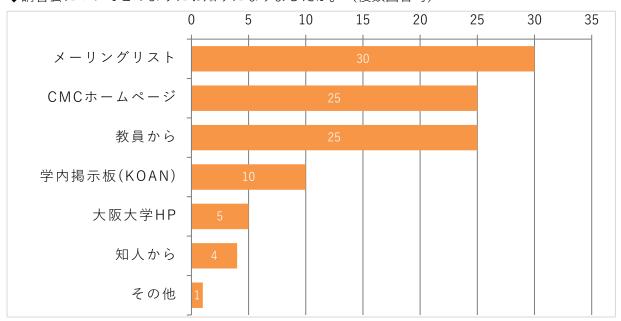
#### ◆受講者数(すべてオンラインで開催)

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 (5/31)	44	38
初めてのスパコン (6/5)	31	27
OpenMP 入門 (6/8)	16	14
スーパーコンピュータ バッチシステム入門・応用 (6/14)	9	5
ONION 活用講習会 (6/16)	8	7
汎用 CPU ノード 高速化技法の基礎 (6/22)	10	4
並列プログラミング入門(OpenMP・MPI) (6/23)	9	5
GPU プログラミング入門(OpenACC)(6/27)	17	16
初めてのスパコン (9/1)	22	19
スパコンに通じる並列プログラミングの基礎(9/4)	18	10
SX-Aurora TSUBASA 高速化技法の基礎(9/19)	7	6
ONION-object 入門 (9/20)	3	3
コンテナ入門 (9/22)	12	11
並列プログラミング入門(OpenMP・MPI) (9/25)	5	3
汎用 CPU ノード 高速化技法の基礎(9/27)	8	6
スーパーコンピュータ バッチシステム入門・応用 (9/29)	12	10
GPU プログラミング入門(OpenACC)(10/3)	13	11
GPU プログラミング実践(OpenACC)(10/13)	7	4
合計	251	199

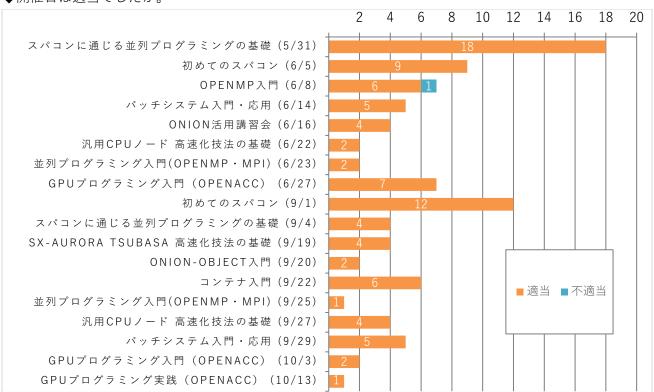
#### ◆受講者の内訳



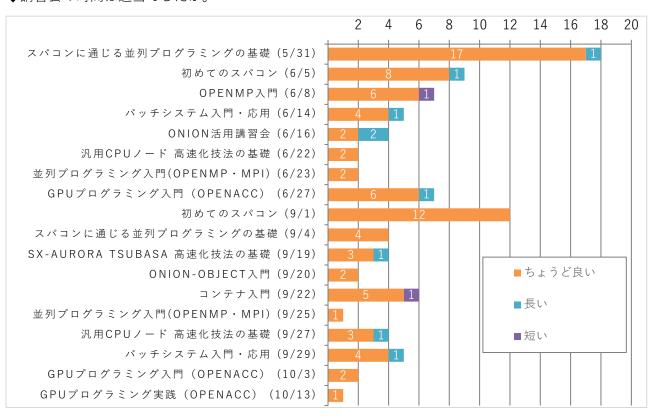
#### ◆講習会についてどのようにお知りになりましたか。(複数回答可)



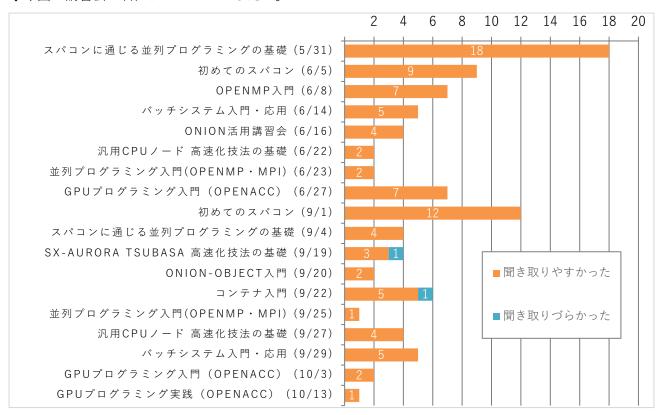
#### ◆開催日は適当でしたか。



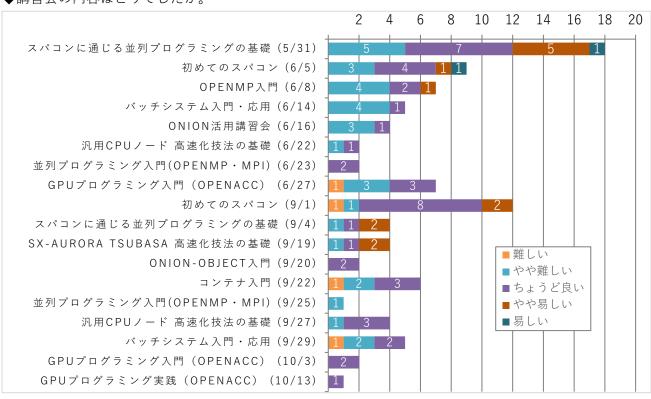
#### ◆講習会の時間は適当でしたか。



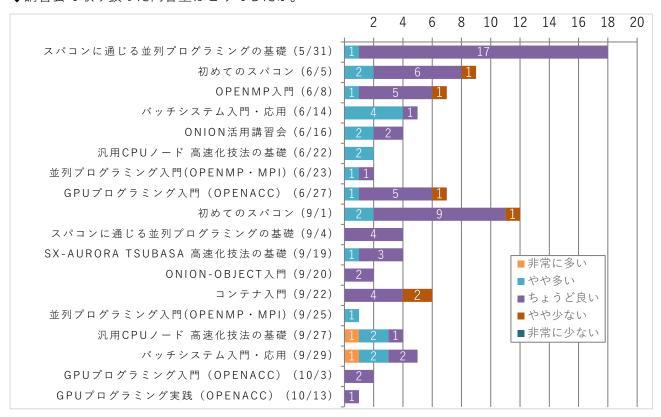
# ◆今回の講習会の音声はいいかがでしたか。



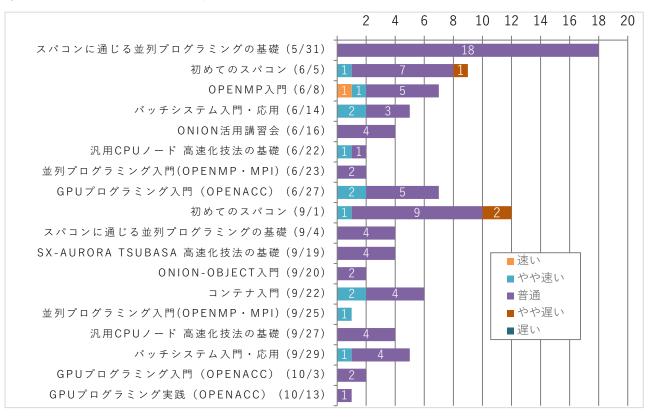
#### ◆講習会の内容はどうでしたか。



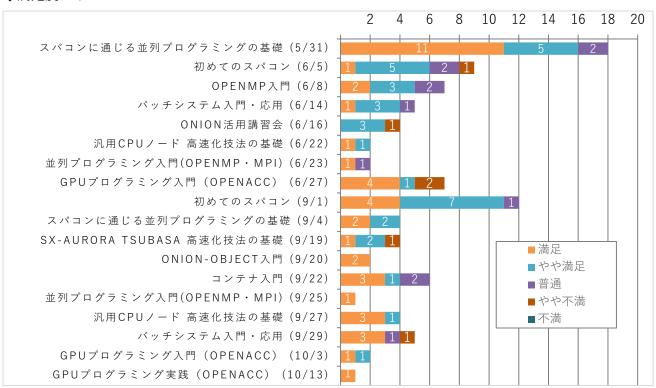
### ◆講習会で取り扱った内容量はどうでしたか。



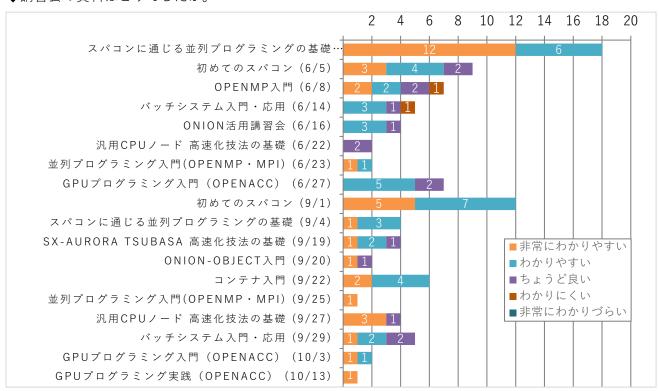
#### ◆講師の進め方はどうでしたか。



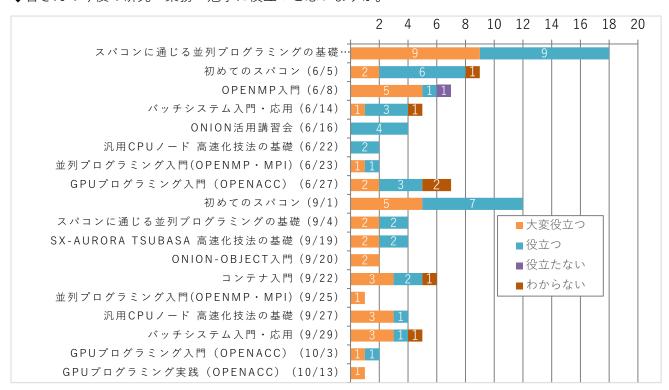
### ◆満足度は?



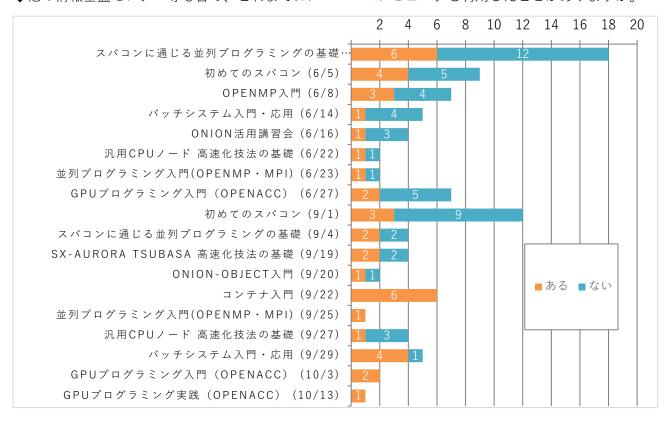
### ◆講習会の資料はどうでしたか。



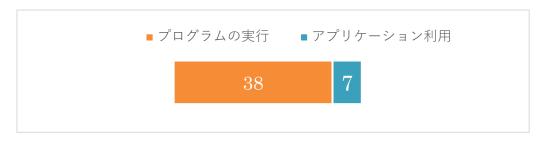
◆皆さんの今後の研究・業務・勉学に役立つと思いますか。



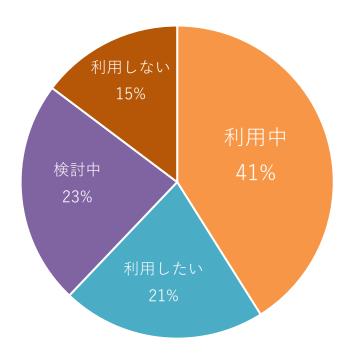
◆他の情報基盤センター等も含め、これまでにスーパーコンピュータを利用したことがありますか。



◆「ある」と回答された方の利用方法



◆サイバーメディア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。



# 2024 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、東京工業大学、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 2024 年度 HPCI 採択課題一覧

利用枠	研究課題名
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	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	内部自由度に富んだ格子理論に対するテンソルネットワーク法の開発と応用
一般課題	量子スキルミオンの非平衡ダイナミクス
一般課題	水中高分子ゲルネットワークのナノ力学分子論の機械学習援用解析
一般課題	一般化数理モデルに基づく乱流燃焼 LES による実機ガスタービン燃焼器シミュレーション の実証解析
一般課題	超高速 QM/MM 計算の開発と生体化学反応の自由エネルギー計算への応用
一般課題	機能性タンパク質デザインの「省データ」化にむけたタンパク質言語モデルと分子シミュ レーションの融合
一般課題	大規模並列計算による微小系気体中の非平衡輸送の分子気体力学的研究
一般課題	疾患関連タンパク質のインタラクトームを予測し、発症のメカニズムを探る
一般課題	潤滑油中の添加剤および増稠剤の自己組織化解析
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	アモルファスカーボンの表面構造とトライボロジー特性の相関に関する研究
一般課題	クリーン燃料の燃焼に対する詳細化学反応モデルを使用した爆轟特性の詳細数値解析
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	カーボンニュートラル実現に向けた革新的ナノコンポジット材料の創成技術
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	Turbulent mixing enhancement in flexible canopy flows
若手課題	溶液成分調整によるポリマー表面への小タンパク質吸着抑制
産業課題	複数精神疾患の診断・治療に向けた 4D 脳機能画像 Deep Learning 解析

# 2024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、東京工業大学、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。

2024年度の課題募集には合計 77 課題が採択されました。このうち以下の 13 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
山口 雅也 様 (大阪大学 大学院歯学研究科)	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
髙田 滋 様 (京都大学)	分子気体力学解析コードの GPU 実装と相分離現象シミュレーション
村上 匡且 様 (大阪大学 レーザー科学研究所)	マイクロトロイダルによるプロトン・ボロン磁場核融合の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)	流動生態系シミュレーションシステムによる水環境評価のため の標準化プラットフォーム構築
森田 直樹 様 (筑波大学)	グラフ構造で一般化された静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
関口 宗男 様 (国士舘大学)	2(+1)フレーバー格子 QCD による複合粒子の質量生成機構の研究
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
森川 良忠 様 (大阪大学 大学院工学研究科)	The Elucidation of Non-equilibrium States of Catalysis by Machine Learning Aided Atomic Simulations
南里 豪志 様 (九州大学)	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
村田 忠彦 様 (大阪大学 サイバーメディアセンター)	合成人口プロジェクト:合成人口データへの従業地属性の追加
芝 隼人 様 (兵庫県立大学)	グラフニューラルネットワークと生成モデルを用いた非晶質系 動力学予測システム開発
塙 敏博 様 (東京大学)	Energy Efficient Operation for Supercomputer Systems

# 2023 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

大阪大学サイバーメディアセンターでは、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。2023 年度は通常の募集に加えて追加募集を行い、以下の6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		
高橋 裕介 様 (北海道大学 工学研究院)	柔軟エアロシェルを有する大気突入機の流体構造連成解析		

# 大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名		
Ellis Richard Owen 様 (大阪大学 理学研究科)	Simulating the macroscopic impacts of cosmic ray microphysics in diffuse jet-remnant structures around galaxies		
杉村 奈都子 様 (鹿児島工業高等専門学校 機械工学科)	粒子法による大規模摩擦焼付きシミュレーション		
福澤 薫 様 (大阪大学 薬学研究科)	フラグメント分子軌道法による量子生命情報基盤の構築 〜タンパク質基本フォールドと生体分子動的挙動の解析〜		

# 人工知能研究支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
Harry Handoko Halim 様 (大阪大学 工学研究科)	The Investigation of Self Optimization of Active Sites by Reaction Intermediates during Non-Equilibrium States of CO2 Hydrogenation to Methanol

# 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		
高木 悠司 様 (大阪大学 理学研究科)	運動論的レーザー吸収で発生する高速電子特性の解析		

# 2024 年度 大規模計算機システム公募型利用制度の活動状況

2024年度も引き続き研究課題の公募を行い、以下の16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		
Anas Santria 様 (大阪大学 理学研究科)	Investigating Magnetic Interaction in the Photo-excited State of a Series of Triple-Decker Phthalocyaninato Lanthanide (III) Complexes		
緒方 奨 様 (大阪大学 工学研究科)	超臨界地熱発電を志向した超臨界地熱環境下での人工地熱貯留層 造成シミュレーション		
鵜沢 浩太朗 様 (京都大学 理学研究科)	生成座標法に基づく核分裂の微視的記述		

# 大規模 HPC 支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
村上 匡且 様 (大阪大学 レーザー科学研究所)	マイクロトロイダルによるプロトン・ボロン磁場核融合の3次元シミュレーション
河口 真一 様 (大阪大学 生命機能研究科)	In silico スクリーニングを用いて、毒性ウィルスタンパク質と宿主 タンパク質との相互作用を予測する
佐野 孝好様 (大阪大学 レーザー科学研究所)	ホイッスラー波を利用した新奇なレーザー核融合デザインの探索
大西 正人 様 (東京大学)	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

# 人工知能研究支援枠 採択課題

代表者名	研究課題名
小野 寛太 様	大規模シミュレーションと機械学習を活用したデータ駆動型磁性
(大阪大学 工学研究科)	材料開発

# 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
荒金 究 様 (大阪大学 蛋白質研究所)	大規模言語モデルを用いた文献からの知識抽出と細胞内ネットワ ークの数理モデルのデータ駆動的な構築
寺田 雄亮 様 (東京大学 理学研究科)	太平洋赤道上の深い循環を駆動するエネルギー供給プロセスの解 明
Rizka Nur Fadilla 様 (大阪大学 工学研究科)	Machine Learning Metadynamics for Modelling Phosphoramidate-based Antibody-drug Conjugates in Cancer Treatment
水谷 耕介 様 (大阪大学 理学研究科)	連星系における共通外層期の軌道進化を対象とする3次元磁気流 体計算
李 響 様 (大阪大学 工学研究科)	塑性変形におけるエネルギー散逸に関する分子動力学的研究
片瀬 大祐 様 (東京大学 工学研究科)	電荷注入現象の解明を目的とした金属 ポリマー界面モデリング
浅野 弘斗 様 (大阪大学 薬学研究科)	医薬品有害事象プラットフォームへの言語生成 AI の搭載による安全性情報の収集・分析の効率化
三宅 冬馬 様 (北海道大学)	高忠実流体構造連成モデルによる3次元超臨界翼の遷音速フラッター解析:特異なフラッター境界形成メカニズムの解明

# 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。

http://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

http://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

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ありません。

#### 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

sstat の表示例:-t で指定した数値分だけ表示されます

RequestID	ReqN	Jame UserNan	ne 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

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/support/contact/auto\_form/