

2023年度におけるRISTの動き

I まえがき

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

2023年度においては、特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律に基づく登録施設利用促進機関として、特定高速電子計算機施設の利用促進業務を引き続き推進するとともに、文部科学省科学技術試験研究委託事業「HPCIの運営」を代表機関として実施し、画期的な研究成果の創出及び科学技術の発展や産業競争力強化、並びにハイパフォーマンス・コンピュータ利用の裾野の拡大に貢献した。

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

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

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

施した。

これらの事業の推進にあたっては、定款に基づき一般財団法人としての適正な法人運営を図ってきた。新型コロナウイルス感染症については、5月8日より新型コロナウイルス感染症が「5類」に移行したことに伴い、当財団における感染症対策等を終了した。引き続き在宅勤務、各種会議・講習会のオンライン併用開催等を適宜実施し、当初計画通り事業を進めた。また、特定高速電子計算機施設の利用促進業務及びHPCIの運営業務については、国及び特定高速電子計算機施設設置・運営主体者である国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究センター（以下「理研R-CCS」という。）並びに9大学の各センター、最先端共同HPC基盤施設（JCAHPC）及び国立研究開発法人海洋研究開発機構等（以下「HPCIシステム構成機関」という。）と緊密に連携協力し、利用者本位の業務運営に努めた。その際、業務をより効率的・効果的に実施する観点から、当財団内に外部有識者によるアドバイザリー委員会を設置し、PDCAサイクルを回しながら業務を実施した。当財団の業務に係る情報資産の保存・管理体制については、情報セキュリティマネジメントシステム（ISO/IEC27001:2022（JIS Q 27001:2023））の考え方に基づき、その維持、改善を継続的に進めた。

2023年度事業計画に従い実施した個別事業は、以下のとおりである。

II 事業内容

1. 特定高速電子計算機施設の利用促進業務

(1) 利用者選定業務

選定委員会及び利用研究課題審査委員会を開催し、国が定める方針等を踏まえ、

「富岳」の利用制度等の検討、設定を行ったほか、2023年度B期、2024年度A期の「富岳」定期課題及び年間を通じた「富岳」随時募集課題の募集・選定等を行った。

①2023年度B期の「富岳」利用研究課題定期募集（年2回のうち2回目）を行い、レビュアー審査、利用研究課題審査委員会及び選定委員会の審議を経て、「富岳」のB期課題として申請63課題のうち34課題を選定した。なお、「富岳」一般課題においては、政府の方針等を踏まえて重点的に推進する研究分野を重点分野として募集し、採択に優位性を持たせ、申請14課題のうち6課題（いずれも上記の内数）を当該分野の課題として選定した。

②2024年度A期の「富岳」を中核とするHPCIシステム利用研究課題定期募集（「富岳」は年2回のうち1回目）を行い、レビュアー審査、利用研究課題審査委員会及び選定委員会の審議を経て、「富岳」のA期課題として申請99課題のうち83課題を選定した。「富岳」一般課題の重点分野については、申請18課題のうち16課題（いずれも上記の内数）を当該分野の課題として選定した。なお、今期の定期募集より、一般課題のうち、いわゆるLクラスにおける要求資源量増加に対応して課題当たりの資源量上限を従来比75%に見直したほか、生成AI及び大規模言語モデル等の研究促進のため重点分野のテーマを見直した。

③2024年度B期の「富岳」利用研究課題定期募集を2024年3月に開始した。

④「富岳」において、定期募集と比較して小規模な計算資源を速やかに必要とする課題を対象に、随時募集課題のうち機動的課題（一般/若手/産業）及び試行課題（一般/産業）の募集を行う

とともに、試行課題（一般/産業）において更に小規模な計算資源を使用する場合の手続きを簡素化した試行課題（ファーストタッチオプション）の募集を実施した。2023年度は、機動的課題については、申請17課題のうち11課題を採択した（残り6課題は審査中）。また、試行課題については、申請67課題のうち66課題（残り1課題は審査中）を、試行課題（ファーストタッチオプション）については、申請161課題のうち161課題を採択した。なお、2023年度、「富岳」有償課題・試行有償課題（一般/産業）については、申請14課題があり、14課題を採択した。

⑤「富岳」の大規模並列ジョブ実行性能を最大限活用するため、2023年11月に、全系規模実行による革新的・先進的な研究に挑戦する課題募集を実施し、2023年度は、申請3課題のうち2課題を採択した。

⑥「富岳」を活用した2023年度成果創出加速課題20課題、政策対応利用課題4課題及びSociety5.0推進利用課題1課題に係る利用手続きの支援等を行った。

⑦シンガポールのNSCC（The National Supercomputing Centre Singapore, Science And Engineering Institute）との協定に基づくシンガポール在住の研究者向け「富岳」利用プロジェクト/2024年度実施課題を11月に募集し、申請17課題のうち5課題を採択した。

(2) 利用支援業務

1) 情報支援

①「京」又は「富岳」を中核とするHPCI利用成果の公開情報を一元的にまとめた公開データベース（HPCI成果発表データベース）に

登録された成果発表件数は、2023年度末で通算11,121件（うち、査読付き論文数は3,317件）に達した。

- ②2022年度末終了のHPCIの一般課題や産業課題、「富岳」試行課題（ファーストタッチオプションを含む）等を中心に、これら課題の利用報告書410件（2023年度末で通算2,700件）をHPCIポータルサイトで公開した。利用報告書のダウンロード数（DL）（Botを除く）は、2023年度末で通算244,950件に達した（2023年度は29,578件）。利用報告書をダウンロードしている企業は1,465社あり、その業種は東京証券取引所の33業種中32業種に及ぶなど、成果の公表・普及が着実に進展した。

- ③HPCI利用研究成果集（当財団発行の査読付き電子ジャーナル）に通算101編の論文が掲載され（2023年度は10編）、全体のDL数（Botを除く）は19,877回、うちDL数トップ論文のDL数は1,764回に達した。

- ④広報サイト「富岳百景」上に、Webマガジン「富岳百景」のvol.12～15を公開し、「富岳」の利用に関心を持つ研究者、技術者等に情報発信した。また、当該サイト閲覧者への情報発信力の強化、アクセシビリティ向上を図るため、サイト構成・デザインの再構築を行った。

- ⑤話題性のある研究や活動等についてのインタビューを10分程度のYouTube動画に編集して、一般に向けて情報発信した（2023年度は計10本）。

- ⑥SNS(X)「スーパーコンピュータ「富岳」(公式)」アカウントに、HPCIに関するタイムリーな話題を発信した（2023年度は計194件）。

2) 技術支援

- ①利用支援のための一元的窓口として設置したヘルプデスクを通して、利用者にワンストップ・サービスを提供することで効率的な利用を支援するとともに、プログラム移植等の技術支援、プログラム性能の分析評価等の高度化支援・利用前技術支援を合計32課題実施した。

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

3) その他の支援

①講習会等

「富岳」の利用技術の習得等を目的とした初級・中級講習会及び産業界で利用が多い各種OSSの入門講習会を合計18回開催（共催を含む）し、延べ計540名の参加を得た。そのうち産業界からの参加者は5割を超えるなど、産業利用の推進にも着実に貢献した。

②セミナー・シンポジウム等

HPCI システム利用研究課題成果報告会（2023年10月）を現地参加及びオンライン参加のハイブリッドで開催し、1日目304名、2日目356名の参加を得た。また、材料系分野やCAE分野に特化したワークショップ（2023年10月（参加196名）、2024年2月（参加318名）、3月（参加100名））をハイブリッドで開催し、産業利用事例や利用技術に関する情報提供を行うとともに、利用者間の情報交流を図った。

さらに、「富岳」の効率的な利用を促すため、チューニング技術の普及

を目的としたA64FX向けチューニング技術検討会(2023年10月(2回)(参加計55名))を、理研R-CCSと共同でオンライン形式にて開催した。2014年度から開催している「大型実験施設とスーパーコンピュータとの連携利用シンポジウム」について、公益財団法人高輝度光科学研究センター(JASRI)及び一般財団法人総合科学研究機構(CROSS)とともに、第9回のシンポジウム(2023年9月(参加202名))をハイブリッドで開催した。

実験研究者や計算の初心～中級者等を対象に、計算の研究事例や利用可能アプリケーション紹介等を行うセミナー「スパコンコロキウム」を、計2回(2023年9月、2024年1月)開催した。

「富岳」成果創出加速プログラムの他、文部科学省が推進する政策対応利用課題、Society5.0推進利用課題の成果をわかりやすく発信するための公開シンポジウムを2023年12月に開催した。

③展示会等

HPCIの利用促進に向け、ISC2023(2023年5月、ドイツハンブルグ)、SC23(11月、米国デンバー)、SC Asia2024(2024年2月、オーストラリアシドニー)のほか、神戸で開催された国際会議CCP2023(2023年8月)に現地出展し、海外向けに情報提供、情報発信を行った。

また、国際フロンティア産業メッセ2023(2023年9月、神戸)に出展し、産業界向けに情報提供、情報発信を行った。

④アウトリーチ活動

青少年の科学技術への理解増進、将

来のHPCI利用者となる研究技術者育成を目的に、中学生・高校生・高専生を対象にした「スパコン「富岳」体験塾」(2023年8月)を東京及び神戸で開催し、計37名が参加したほか、「はじめてのプログラミング」(2024年3月)を開催し、14名が受講した。なお、神戸以外での「スパコン「富岳」体験塾」の開催は初めての取り組みとなった。その他、神戸市主催の「神戸医療産業都市一般公開」(2023年11月)において、計算機歴史博物館を出展した。

⑤当財団、欧州のPRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe)、米国のXSEDE (The Extreme Science and Engineering Discovery Environment) 間の連携、協力に資する3機関覚書については、XSEDEプロジェクトが2022年に終了したことで自動消滅した。今後の新たな連携、協力体制の構築に向け、欧州のPRACE及びEuroHPC JU (The European High Performance Computing Joint Undertaking) 並びにXSEDEの後継プロジェクトである米国のACCESS (Advanced Cyberinfrastructure Coordination Ecosystem: Services & Support) の事業動向等を確認した。

⑥スーパーコンピュータの共用促進に係る情報交換に関するオーストラリア国立大学にあるNational Computational Infrastructure (NCI) と当財団との覚書が2023年5月に有効期限を迎えるため、延長手続きを行った。

⑦第9回アドバイザリー委員会を2023年5月に開催し、「富岳」に

おけるクラウド的利用の推進、「富岳」有償利用の促進に関する意見を
得て、「富岳」クラウド的利用の事
業者の取り組み事例の紹介、「富岳」
有償利用申請の簡素化を行った。

2. HPCIの運営業務

当財団は、文部科学省科学技術試験研究
委託事業「HPCIの運営」の中核的役割を
担う代表機関として、理研R-CCS、国立
大学法人東京大学情報基盤センター（以
下「東大情報基盤センター」という。）、国
立大学法人筑波大学計算科学研究センター
（以下「筑波大-CCS」という。）、大学共同
利用機関法人情報・システム研究機構国立
情報学研究所（以下「NII」という。）、及
び公益財団法人計算科学振興財団（以下
「FOCUS」という。）からなる分担機関に
一部業務を再委託し、総合調整を図りつつ
これら分担機関と緊密かつ一体的に連携し
た体制を構築して以下の業務を主体的に実
施した。

(1) HPCIの運営企画・調整

1) 分担機関の総合調整等

HPCIの運営に係る代表機関として、
受託再委託業務を効率的に統括し、分
担機関等との連絡窓口を設けて、文部
科学省等との連絡体制の下、調整を
行った。

2) 今後の運営の在り方に関する調査検討 HPCIシステムの今後の運営の在り方 に関する調査検討ワーキンググループ を設置して、一般社団法人HPCIコン ソーシアムの協力の下、「次世代計算 基盤を利用した成果最大化に向けて」 をテーマに10回にわたり議論を行う とともに、当該テーマについての意見 交換会を行った。

3) 技術企画・調整

HPCIシステム構成機関等から構成さ

れるHPCI連携サービス委員会及び
HPCI連携サービス運営・作業部会等
を開催した。これらの委員会等では、
HPCIシステムの運用に際して生じる
技術的不具合の原因究明・対応策の検
討、HPCIシステム全体の運用に係る
ソフトウェアの改良に関する検討等を
実施し、多様なニーズに応えるHPCI
システムの運用環境を維持するととも
に、次期認証基盤システムの本格運用
試験や共用ストレージの新たな利用に
関する議論を進めるなど、分担機関と
密接に連携して検討を行った。

(2) HPCIの利用促進

1) 課題選定及び共通窓口の運用

①HPCI共用計算資源を利用する2024
年度研究課題として、申請110課題
（「富岳」との同時利用及び「富岳」
の第2希望として審査対象とした課
題数を含む）の中から73課題を選
定した。なお、2024年度の募集よ
り、AIやデータサイエンスを活用
して、科学的・社会的課題の解決に
資する研究促進のため重点分野を新
設し、採択に優位性を持たせ、申請
20課題のうち12課題（いずれも上
記の内数）を当該分野の課題として
選定した。

また、2023年度の随時募集課題に
ついては、HPCI産業試行課題に1
課題、HPCI産業有償課題に1課題、
HPCI共用ストレージ（共有型）利
用研究課題に4課題の申請があり、
いずれも選定した。

②HPCI共用計算資源及びJHPCN（学
際大規模情報基盤共同利用・共同
研究拠点事業）計算資源の利用に
伴う利用負担金の支払いについて
は、HPCIシステム構成機関及び

JHPCN参加機関からの請求に基づき、適宜支払い事務を実施した。

2) 産業利用促進

①産業界における利用拡大・人材育成を目的とした伴走型利用支援では、6か月の定期型として2023年度上期に1件の支援を行うとともに、2024年度上期の支援依頼を募集し、1件を採択した。また、HPCI利用の裾野拡大の新たな取組みとして、2023年度から2か月以内の短期の支援依頼を常時受け付ける随時型の募集を開始し、8件の支援を行った。

②産業利用促進のための利用環境として当財団の東京事務所に設置した「富岳」及びHPCIシステムへのアクセスポイント（アクセスポイント東京）を運用し、2023年度はリモート利用を含め144名延べ203名にHPCIシステムの利用前相談や利用相談、高並列計算の指導・助言、対面認証などで利用された。また、セミナーやシンポジウム等を開催し、HPCIの産業利用に関するPR活動を実施するとともに、その都度、産業利用相談会を開催して新規利用者の開拓を行った。なお、神戸のアクセスポイントの設置及び運用は、FOCUSに再委託して、代表機関との調整のもと実施した。

なお、アクセスポイントの利用活性化のために、2023年度は新たに「HPCIアクセスポイント解説セミナー」を8回（参加18名）開催した。

③新規利用企業へのインタビュー他、産業利用全般の情報を発信する「Hello!「富岳」～産業利用の広場～」のNo.3を2023年10月に発行した。

3) 技術支援

①プログラム移植等の技術支援、プロ

グラム性能の分析評価等の高度化支援・利用前技術支援等を合計2課題について実施した。

②国プロアプリの利用環境整備を進めるとともに、国プロアプリの普及を目指して、開発グループや整備先のHPCIシステム構成機関と連携してプログラムのハンズオン講習会を6回（2023年12月、2024年2月（3回）、3月（2回））開催し、合計40名が参加した。また、(株)Quemixが開催するQuloudセミナー（計5回、合計328名参加）に共催し、国プロアプリを紹介した。さらに、HPCI利用者の裾野を広げるHPCプログラミングセミナーを16回（2023年5月（4回）、6月（2回）、7月（2回）、10月（4回）、12月（4回））開催し、合計222名が参加した。

③HPCIの計算科学・計算機科学に関わる人材育成の新たな取組みに関して、当財団スタッフの高度化等支援能力向上を目指したHPCI計算機の利活用を検討した。

(3) HPCIシステムの運用

1) HPCI共用ストレージ等の運用・保守・機能整備

本事業は、東大情報基盤センター、理研R-CCS及び筑波大-CCSに再委託して、代表機関との調整のもと実施した。

2) 認証基盤システムの整備・運用

本事業は、NIIに再委託して、代表機関との調整のもと実施した。

3) 課題選定及び共通窓口に関する基盤システムの機能整備、保守

HPCIヘルプデスクシステム、HPCI情報共有コンテンツマネジメントシステム（CMS）等の機能整備、保守を実施した。

3. 大型計算機システム及びネットワークシステムの運用支援

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

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

これらにより、各システムの利用者に対する円滑かつ継続的な利用支援サービスの提供に大きく貢献した。

4. 情報科学技術の高度化に関する研究開発・調査

(1) 原子力研究開発コードの高度化に関する研究・調査

①原子力機構と協力して開発を進めている粒子・重イオン輸送コードシステムPHITSを使用して、福島第一原子力発電所事故によって拡散した放射性物質の放射線量からその周辺の地域における核種分布を推定するシステムの開発、原子炉建屋内で観測される放射線量から機械学習を用いて高線量線源を逆推定するシステムの開発を実施した。PHITSコードの新機能開発として、核燃料輸送物、使用済燃料貯蔵容器及び使用済燃料貯蔵施設の許認可における分散低減機能の高度化、重陽子・ α 粒子ライブラリを用いた分散低減機能の高度化、核データ出力及び利用機能の拡張等を実施した。

②PHITSの原子力分野以外への応用として、粒子線がん治療施設やJ-PARC共用実験装置の遮蔽評価や放射化評価等を実施した。

③原子力機構のスーパーコンピュータで利用される原子力研究開発コードの開

発・改良、計算結果の評価手法の開発及び可視化ソフトウェアの開発・改良を実施した。また、原子力機構の研究者等が開発・整備した各種の原子力研究開発コードのチューニング及び並列化による高速化を実施した。

④量研が進める核融合研究に対して、原型炉開発に求められる第一原理系シミュレーションコードや設計に応用されるシステム系シミュレーションコードの計算モデル拡張や新機能実装、GPUによる高速化を実施した。

(2) 大規模シミュレーション技術の開発・研究

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

①防衛装備庁「安全保障技術研究推進制度」の研究課題「高強度CNTを母材とした耐衝撃緩和機構の解明と超耐衝撃材の創出」を筑波大学、住友電気工業株式会社と取り組み、その成果を論文発表、国際学会発表し今年度で終了した。新たに研究課題「実験・計算科学の融合による革新的塗膜創製と機序解明の基礎研究」を株式会社GSIクレオス、海洋研究開発機構と本年度から開始した。

②産業界との実践的なシミュレーションとして、総合電機メーカーと機械学習を用いた反応予測の研究開発を、薬剤メーカーと分子シミュレーションによる創薬研究を進めるとともに、大学等と量子化学計算、分子動力学計算のソフトウェア開発、数値解析を実施した。

(3) 情報科学技術分野の研究振興に関する課題の運営管理

文部科学省の民間委託事業「研究開発推進事業等の実施に係る運営管理業務(研究振興事業に関する課題の運営管理業務)」として、スーパーコンピュータを用いた研究開発(以下「公募事業」という。)を実施するために必要とされる以下の業務を継続して実施した。

①文部科学省と採択課題実施機関との間での交付決定に係る諸事務手続き、補助金交付要綱・取扱要領に基づく事務処理について、文部科学省業務を支援するとともに、公募事業の推進に必要な情報の把握等を行った。

②公募事業について、2022年度からの継続3課題、2023年度新規採択課題(10課題(計17課題のうち計算資源のみが配分される7課題を除く))に対して、2023年度の交付申請手続きの支援、各課題の事業面・経理面での進捗管理を実施した。また、2022年度に実施された補助事業21課題の補助金額の確認調査等を実施した。

③「富岳」成果創出加速プログラムの4領域の進捗管理を効率的・効果的に進めるためプログラムディレクター(PD)4名から構成される「領域総括会議」を設置し、当該会議の事務局業務、PD業務の支援を行った。また、領域総括会議のもと、「富岳」成果創出加速プログラムに関わる研究者間の情報交換・交流を深め、研究の発展と人材育成につなげるための研究交流会を2024年3月に開催した。

④文部科学省の「富岳」課題推進ワーキンググループによる進捗状況ヒアリングにおいて、委員会の事務局として日程調整、資料の配付、評価結果の集計等の支援を行った。

⑤上記の業務を通じて、公募事業のあり方や問題点等の調査・考察を行い、公募事業の今後に向けた提案を行った。

5. 原子力分野の解析コードに関する情報の調査収集・整備提供

わが国の原子力コードセンターとして、原子力機構等の国内機関から収集した1件の原子力コードを新規登録した。産業界を含む国内機関への原子力コードの提供は62件であった。

米国オークリッジ国立研究所・放射線安全情報計算センター(ORNL/RSICC)との契約の下で、新規に3件の原子力コードを収集・整備するとともに、「RSICCユーザ会」加盟機関に220件の原子力コードを配付した。また、原子力コード利用の促進に資するため、「RSICCユーザ会」加盟機関向けに「ADVANTGとMCNPを用いた最適分散低減法によるモンテカルロ法遮蔽解析(入門編+応用編)」に関する講習会(2023年10月)を開催し、7加盟機関から7名が参加した。なお、当財団が運営している「RSICCユーザ会」の加盟機関は、2023年度末で67機関である。

6. 事業の成果の普及等

計算科学技術研究の成果の普及を目的として、最新の研究開発成果の紹介、関連研究の解説、事業動向の報告、トピックス等を内容とする「RISTニュースNo.69」を2023年9月に刊行し、関連機関に配付するとともに当財団の公開ホームページに掲載し、成果の普及を図った。また、当財団における研究開発の成果を国内外の学術論文誌、学会等で発表するとともに、スーパーコンピューティングに関する国際会議(ISC2023, SC23, SCAsia2024)や計算物理学に係る国際会議(CCP2023(神戸))、産業向け展示会(国際ナノテクノロジー総

合展・技術会議、国際フロンティア産業メッセ2023)に出展するなど、海外や産業界に向けても事業成果の普及活動を行った。

Ⅲ その他

1. 研究成果等の発表

2023年度の主な研究成果等の発表は以下の通り。

- (1) Tatsuya Yamada, Patrick A. Bonnaud, Syogo Tejima, Jun-ichi Fujita. Modelling shear thinning of Imidazolium-based ionic liquids. *Chemical Physics Letters* 816, 140387 (2023)
- (2) Ayaka Yamanaka, Ryota Jono, Syogo Tejima, Jun-ichi Fujita. Molecular Dynamics Simulation of Carbon Nanotube Growth under A Tensile Strain. *Sci. Rep.* 14, 5625 (2024)
- (3) Y. Harashima, H. Koga, Z. Ni, T. Yonehara, M. Katouda, A. Notake, H. Matsui, T. Moriya, M. K. Si, R. Hasunuma, A. Uedono, Y. Shigeta. Finite temperature effects on the structural stability of Si-doped HfO₂ using first-principles calculations. *Appl. Phys. Lett.* 122, 262903 (2023)
- (4) Y. Harashima, H. Koga, Z. Ni, T. Yonehara, M. Katouda, A. Notake, H. Matsui, T. Moriya, M. K. Si, R. Hasunuma, A. Uedono, Y. Shigeta. Systematic Search for Stabilizing Dopants in ZrO₂ and HfO₂ Using First-Principles Calculations. *IEEE Trans. Semicond. Manuf.* 36, 543 (2023)
- (5) Kohjiro Tokutake, Aaron Morelos-Gomez, Ken-Ichi Hoshi, Michio Katouda, Syogo Tejima and Morinobu Endo. Artificial intelligence for the prevention and prediction of colorectal neoplasms. *Journal of Translational Medicine* 21, 431 (2023)
- (6) Shoichi Ishida, Tanuj Aasawat, Masato Sumita, Michio Katouda, Tatsuya Yoshizawa, Kazuki Yoshizoe, Koji Tsuda, Kei Terayama. ChemTSv2: Functional molecular design using de novo molecule generator. *WIREs Comput Mol Sci.* 13, e1680 (2023)
- (7) T. Yokoyama, A. Matsuyama, Y. Yamamoto, S. Miyamoto, Y. Shibata, S. Inoue, S. Kojima, S. Nakamura, T. Wakatsuki, and M. Yoshida. Characterization of early current quench time during massive impurity injection in JT-60SA. *Nuclear Fusion*, 63, 126049(2023)
- (8) Y. Yamamoto, A. Matsuyama, Y. Someya, W. Chen, S. Miyamoto, and Y. Shibata. Integrated Modeling of Runaway Electron Beam Formation in JA DEMO Post-Disruption Plasmas. *Plasma and Fusion Research*, 18, 1203064(2023)
- (9) 河東田 道夫. 量子コンピュータのケモインフォマティクスへの応用. ケモインフォマティクスにおけるデータ解析の最適化と解析手法第: 4章4節 量子コンピュータのケモインフォマティクスへの応用、技術情報協会、2023年4月
- (10) Dhileep N. Reddy, Shinji Aono, Tetsuro Nagai, Susumu Okazaki. Permeation of CO₂ through polydimethylsiloxane with different cross-linking ratios studied by the molecular dynamics calculations. 第25回理論化学討論会 (2023年5月、横

- 浜 資生堂 S/PARKホール)
- (11) 赤田 圭史、石橋 諒一、大久保 総一郎、徳田 一弥、山口 浩司、山田 達矢、小野木 伯薫、手島 正吾、小林 幹佳、藤田 淳一. 高速時間分解 Rheo-SAXS によるコロイド懸濁液シアシッキング現象の過渡構造解明. 日本レオロジー学会第50回記念会 (2023年5月、京都大学)
 - (12) 富山 栄治. トラクションフルードのマテリアルズインフォマティクス解析. トライボロジー会議2023 春 東京 (2023年5月、国立オリンピック記念青少年総合センター)
 - (13) Ayaka Yamanaka, Syogo Tejima, Jun-ichi Fujita. Molecular Dynamics Simulation of Carbon Nanotube Growth under Tensile Strain. NT23: The 23rd International Conference on the Science and Applications of Nanotubes and Low-Dimensional Materials (2023年6月、フランス)
 - (14) 城野 亮太. 分子動力学法による自由エネルギー計算：その意義と手法について. 原子スケールシミュレーション活用セミナー、(株)アスミス主催 (2023年7月、オンライン)
 - (15) Keishi Akada, Ryouichi Ishibashi, Soichiro Okubo, Kazuya Tokuda, Koji Yamaguchi, Takamasa Onoki, Tatsuya Yamada, Syogo Tejima, Motoyoshi Kobayashi, Jun-ichi Fujita. Time-resolved Rheo-SAXS study on Shear Melting Development of Colloidal Crystal in Impacted Shear Thickening. The XIXth International Congress on Rheology (2023年8月、ギリシャ)
 - (16) Y. Sakae, T. Kawasaki, Y. Okamoto. Distribution and Structure Analysis of Fibril-Forming Peptides Focusing on Concentration Dependency. CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics (2023年8月、神戸国際会議場)
 - (17) 金 敏植、吉村 和也、佐久間 一幸、メイリンズアレック、町田 昌彦、斎藤 公明、長谷川 幸弘、柳 秀明. 3D-ADRES による詳細な環境モデルを用いたシミュレーション解析—除染活動・耕作による空間線量率低減効果の予測—. 環境放射能除染学会 第12回研究発表会 (2023年8月、福島 とうほう・みんなの文化センター)
 - (18) 山岸 孝輝. マルチグリッド前処理付き共役勾配法を用いた数値海洋モデルの複数GPUへの実装と最適化. 第190回HPC研究発表会 (2023年8月、函館アリーナ)
 - (19) 吉澤 香奈子. User Support in HPCI. CCP2023 - 34th IUPAP Conference on Computational Physics (2023年8月、神戸国際会議場)
 - (20) 山岸 孝輝. A non-hydrostatic ocean model for multi-scale/multi-process simulations. The 6th International Workshop on Nonhydrostatic Models (2023年8月、北海道大学)
 - (21) 山中 綾香、手島 正吾、藤田 淳一. Molecular Dynamics Simulation of Carbon Nanotube Growth under Tensile Strain. 第65回フラーレン・ナノチューブ・グラフェン総合シンポジウム (2023年9月、九州大学西新プラザ)
 - (22) R. Jono. On the shear-thickening event of the spherical bodies: a non-equilibrium molecular dynamics study. ICMSN-2023: 6th International Conference on Material Science & Nanotechnology (2023年9

- 月、オンライン)
- (23) 大久保 総一郎、赤田 圭史、徳田 一弥、山口 浩司、小野木 伯薫、山田 達矢、城野 亮太、手島 正吾、藤田 淳一. シアシックニング現象におけるシリカコロイド溶液の構造変化. 第20回 Spring-8 産業利用報告会 (2023年 9 月、神戸国際会議場)
 - (24) 赤田 圭史、石橋 諒一、大久保 総一郎、山田 達矢、徳田 一弥、山口 浩司、小野木 伯薫、手島 正吾、小林 幹佳、藤田 淳一. シアシックニング現象におけるコロイド構造の高速時間分解測定. 日本物理学会第78回年次大会 (東北大学川内キャンパス、2023年 9 月)
 - (25) 山田 達矢、赤田 圭史、大久保 総一郎、石橋 諒一、小野木 伯薫、小林 幹佳、手島 正吾、藤田 淳一. シリカ粒子分散液のシェアシックニングに伴うX線小角散乱変化. 第84回応用物理学会秋季学術講演会 (熊本城ホール、2023年9月)
 - (26) 赤田 圭史、石橋 諒一、大久保 総一郎、山田 達矢、小野木 伯薫、手島 正吾、小林 幹佳、藤田 淳一. シアシックニング流体における粒子構造の高速時間分解測定. 日本流体力学会年会2023 (2023年 9 月、東京農工大小金井キャンパス)
 - (27) 富山栄治. Analysis of the Performance of Traction Fluids Molecules using Materials Informatic. 9th International Tribology Conference (2023年 9 月、福岡国際会議場)
 - (28) 山岸 孝輝、井上 義昭、青柳 哲雄、浅見 暁. RapidCFDの高速化事例紹介. オープンCAE学会OpenFOAM GPUトレーニング2023 (2023年 9 月、オンライン)
 - (29) 浅見 暁. 「富岳」/HPCIの利用制度と産業利用の伴走型利用支援. 第13回 SPring-8 データ科学研究会/第93回 SPring-8 先端利用技術ワークショップ (2023年 9 月、神戸国際会議場)
 - (30) 齊藤 哲. 「富岳」とHPCIの利用制度・利用支援の紹介. 日本機械学会関西支部セミナー (2023年 9 月、FOCUS)
 - (31) 赤田 圭史、石橋 諒一、大久保 総一郎、徳田 一弥、山口 浩司、山田 達矢、小野木 伯薫、手島 正吾、小林 幹佳、藤田 淳一. 高速時間分解 Rheo SAXS によるシアシックニング流体の衝撃応答観察. 第71回レオロジー討論会 (2023年10月、松山市総合コミュニティセンター)
 - (32) 山田 達矢、赤田 圭史、大久保 総一郎、石橋 諒一、小野木 伯薫、小林 幹佳、手島 正吾、藤田 淳一. シリカ粒子分散系のシェアシックニングにおける粒子配置変化. 第71回レオロジー討論会 (2023年10月、松山市総合コミュニティセンター)
 - (33) Tatsuya Yamada and Syogo Tejima. Simulation of silica particle dispersions for developing impact-resistant materials. 15th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences: Program of Parallel sessions (2023年10月、筑波大学)
 - (34) 河東田 道夫. 量子コンピュータを用いた分子シミュレーション技術の基本. 技術情報協会、2023年10月
 - (35) 新宮 哲. 「富岳」の利用申請と利用支援. 日本音響学会関西支部向け説明会 (2023年10月、FOCUS)
 - (36) 山岸 孝輝. GPU Implementation and Optimization of Numerical Ocean Models with OpenACC. Open Accelerated Computing Summit 2023 (2023年10月、オンライン)

- (37) 太田 幸宏. Use of WHEEL in Fugaku OpenOnDemand Service. The 13th meeting for application code tuning on A64FX computer systems (2023年10月、オンライン)
- (38) 山岸 孝輝. ヘテロジニアスアーキテクチャによるマルチスケール統合海洋モデリングプラットフォームの実現. 第10回HPCIシステム利用研究課題成果報告会 (2023年10月、THE GRAND HALL)
- (39) 吉澤 香奈子. 「富岳」に整備されている材料系アプリケーションと「富岳」Open OnDemand. 第16回 材料系ワークショップ (2023年10月、秋葉原UDX及びオンライン)
- (40) 古立 直也、吉田 亨、柳 秀明、長谷川 幸弘、町田 昌彦. 線源対策最適化のためのPHITSシミュレーション技術及び数値計算手法の開発. 2023年核データ+PHITS合同研究会 (2023年11月、東海村産業・情報プラザ)
- (41) 新宮 哲. 「富岳」の利用申請と利用支援. 京都工業会AI研究会向け説明会 (2023年11月、FOCUS)
- (42) 寺澤 麻子. Improvement of JiJ calculation for extended basis sets having large nonorthogonality : current situation and problem. The 4th OpenMX developer's meeting (2023年11月、東京大学柏キャンパスISSP)
- (43) 河東田 道夫. エネルギーや環境に関する最新のシミュレーション研究. 講義「先端科学技術」(2023年12月、横浜市立大学金沢八景キャンパス)
- (44) 山田 達矢、東谷 圭祐、鄭 サムエル、手島 正吾、藤田 淳一. CNT間の凝着と滑りの力学的計測実験のシミュレーション. 第37回分子シミュレーション討論会 (2023年12月、福井県県民ホール)
- (45) Dhileep Nagi Reddy Thummuru¹, Shinji Aono, Tetsuro Nagai, Susumu Okazaki. Molecular Dynamics Simulations of CO₂ Permeation Through Polydimethylsiloxane Membrane with Varying Cross-Linking Percentage. MRM2023 IUMRS-ICA2023 (2023年12月、京都)
- (46) 吉澤 香奈子、松岳 大輔、浅見 暁. スーパーコンピュータ「富岳」におけるCT再構成環境の開発. 第37回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム (2024年1月、アクリエひめじ)
- (47) 吉澤 香奈子. 「富岳」における材料系アプリケーションの利用について. 第17回 材料系ワークショップ (2024年2月、秋葉原UDX及びオンライン)
- (48) 吉澤 香奈子. 「富岳」・HPCIにおける材料シミュレーション. Quloudセミナーシリーズ (計5回) (2023年5月～2024年2月、オンライン)
- (49) 赤田 圭史、石橋 諒一、大久保 総一郎、山田 達矢、小野木 伯薫、手島 正吾、小林 幹佳、藤田 淳一. シアシックニグ発生下におけるマイクロ秒コロイド構造変形. 日本物理学会2024年春季大会 (2024年3月、東北大学川内キャンパス)
- (50) Y. Yamada, T. Yoshida, Y. Hasegawa, and M. Machida. Effectiveness of Fused LASSO for Prediction of Distribution of Radioactive Materials in Reactor Buildings. WM2024 (Mar. 2024, Phoenix, Arizona)
- (51) 齊藤 哲. 産業界に向けたHPCIシステムの利用促進の取組. Cyber HPC Symposium 2024 (2024年3月、大阪大学サイバーメディアセンター)