

平成27年度におけるRISTの動き

I まえがき

当財団は、設立以来、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、及び各種の調査・研究を総合的に推進してきた。近年においては、先端の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。

平成27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（以下「共用法」という。）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（以下「京」という。）の利用促進業務（事業予定期間：平成24年度から平成28年度まで）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」におけるHPCIの利用促進業務（事業予定期間：平成24年度から平成28年度まで）を実施した。

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、総合科学技術・イノベーション会議の革新的研究開発推進プログラム（ImPACT）「核変換による高レベル放射性廃棄物の大幅な低減・資源化」及び文部科学省のセンター・オブ・イノベーション（COI）プログラム「世界の豊かな生活環境と地球規模の持続可能性に貢献するアクア・イノベーション拠点」に参画し、大規模シミュレーション用ソフトウェア開発を実施した。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調査分析業務（研究振興事業に関する課題の調査分析業務）」を実施

した。

大規模高速計算機の利用技術の開発では、原子力機構の大型計算機運用の技術支援を引き続き実施した。

原子力分野の解析コード、データベース等に関する情報の調査収集・整備提供では、一般財団法人化に伴う公益目的支出計画（平成24年度から平成28年度まで）における実施事業として、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するとともに、インターネットを利用した原子力関連情報提供サイトを整備・運用した。

これらの事業の推進にあたっては、財団運営において一般財団法人としての定款に基づく適正な法人運営及び公益目的支出計画の確実な実施を図ってきた。また、「京」の利用促進業務及びHPCIの利用促進業務については、国及び施設設置者である国立研究開発法人理化学研究所計算科学研究機構（以下「理化学研究所」という。）並びにHPCIシステム構成機関と緊密に連携協力し、利用者本位の業務運営に努めた。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の新規格（JIS Q 27001:2014/ ISO/IEC 27001:2013）の考え方に基づき、その維持、改善を継続的に進めた。

平成27年度に実施した個別事業は、以下のとおりである。

II 事業内容

1. 「京」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、一般利用研究課題等の利用者選定を実施した。

- ①成果創出・加速課題について、10件の応募課題から6課題を選定し、計600万ノード時間の資源を配分した。
- ②随時募集課題について、個別利用課題（有償・成果非公開）18件、及び競争的資金等獲得課題（有償・成果公開）5件の応募を全て選定した。
- ③重点化促進課題について、国から提案された「南海トラフの巨大地震及び直下型地震による被害予測の高度化（長周期地震動）」課題を選定し、70万ノード時間の資源を配分した。また、ポスト「京」研究開発枠重点課題について、平成27年度下期課題として31件の選定プロセスを審査・確認した。
- ④3年以内の成果公開を義務付けられている平成24年度、平成25年度及び平成26年度の終了課題全356課題のうち119課題（前年度からの通算では209課題）に対して成果公開の認定を行った。
- ⑤平成28年度の一般利用枠の計算資源量を35%から45%（うち、産業利用課題については、10%から15%）に拡大し、104件の応募課題から72課題を選定した。
- ⑥平成28年度のポスト「京」研究開発枠重点課題について、33件の候補決定プロセスを審査・確認した。

(2) 利用支援業務

1) 情報支援

- ①「京」及びその他のHPCI計算資源によって創出された成果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、平成27年度末で通算4,202件（内、査読付き論文数は554件）に達した。
- ②平成26年度末に終了したHPCI利用研究課題の利用報告書（170課題）をHPCIポータルで公開した。利用

報告書のダウンロード総数は平成26年7月の統計データ取得開始以降、平成27年度末で通算20,711件に達し、成果の公表・普及が進展した。利用報告書のダウンロード分析により、東証1部33業種中27業種からダウンロードされるなど産業界において広く参照されていることを明らかにした。

- 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）掲載の最初の論文を9月に公開し、平成27年度末にvol.1 No.1（掲載論文7件）を発刊した。9月に公開した最初の論文のダウンロード数は平成27年度末で165回に達した。

- ④「京」における成果や「京」の利用についての情報発信のために、季刊誌「京算百景」vol.10～13、成果事例集Ⅲ、成果事例集Ⅱ英語版を発行し、「京」の利用に関心を持つ研究者、技術者に配布するとともに、一般国民に向けた分かりやすい成果の説明資料としてホームページに公開した。

2) 技術支援

- ①利用支援のための一元窓口として設置したヘルプデスクを活用し、利用者にワンストップ・サービスを提供するとともに、利用者の意見を運営に適宜反映することで、円滑な支援を実施した。
- ②「京」の利用を促進するため、戦略分野9課題、一般利用・若手利用7課題、産業利用9課題について、「京」へのプログラム移植等の調整支援、プログラム性能の分析評価・パイプライン等の最適化促進等の高度化支援を実施した。
- ③共用法第12条に基づき、「京」の利用

促進の方策検討及び利用者支援業務を行う者の資質向上のために、量子化学のオープンソースプログラムの性能評価と応用的利用に関する調査研究、及び高次精度離散化手法に関する調査研究を行った。

- ④当財団の利用支援用スーパーコンピュータ (FX10) を用いて、企業が事前に「京」でソフトウェアが動作することを確認するための支援を実施した。また、「京」上で利用可能な産業応用ソフトウェアを拡充するため、ソフトウェアベンダーとの共同研究契約の下、FX10を用いて5本のソフトウェアを移植した。

3) その他の支援

①講習会等の利用支援

「京」の利用技術の習得等を目的として、FX10を用いたハンズオン講習会を4回、高速化ワークショップを1回、利用者のすそ野を広げる一般向けHPCセミナーを3回、受講者の要請に応じて開催するオンサイト講習会を2回開催した。また、戦略プログラム実施機関との共催によるスキルアップ研修会を3回実施した。講習会等への参加者は延べ543名で、その内企業参加者は約2/5に上り、着実に産業利用の推進にも貢献した。

②展示会等

「京」及びHPCIの利用促進に向け、ISC15 (平成27年7月、独国フランクフルト)、SC15 (平成27年11月、米国オースチン)、SCF16 (平成28年3月、シンガポール) 等に出展し、海外向けに情報提供、情報発信を行った。日本国内では、第27回設計・製造ソリューション展 (平成27年6月、東京)、第8回トップセミ

ナー (平成28年1月、神戸) でのブース出展を行い、産業利用のすそ野の拡大を図った。

③セミナー・シンポジウム等

「京」を中核とするHPCIシステム利用課題成果報告会 (平成27年10月、東京) を開催し、269名の参加を得て、異分野間の研究者交流の場とした。また、「理化学研究所」と共同で講演会「スーパーコンピュータの今とこれから」 (平成28年1月、東京) を主催し、参加者は207名であった。利用者とソフトウェアベンダーとの情報交流の場として、産業界からのニーズの高いOpenFOAM等のOSSを対象としたワークショップ (平成27年10月、東京) を開催し、産業利用事例や利用技術に関する情報提供を行った。「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 (第2回) 〜ソフトマター科学を中心として〜」 (平成27年9月、東京) を公益財団法人高輝度光科学研究センター (JASRI)、一般財団法人総合科学研究機構 (CROSS)、計算物質科学イニシアティブ (CMSI) と共同開催した。主要テーマの設定による深い議論、パネル・ディスカッションの導入による問題意識の共有など、前年度の第1回シンポジウムと比べて格段に進化した。

④アウトリーチ活動

神戸市主催の「神戸医療産業都市・京コンピュータ 一般公開〜ワクワクと驚きのサイエンス・ウォッチ!」 (平成27年10月、神戸) にて、「計算機歴史博物館」を開催した。また、兵庫県、神戸市、公益財団法人計算科学振興財団主催の一般向けセミナー「実は意外と知らない?暮らしを

支えるスパコンの働き」(平成27年12月、神戸)を共催した。

⑤PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) 主催の国際会議 (PRACEdays15) (平成27年5月、ダブリン) にて、「京」を中核とするHPCIの枠組み、利用者選定、利用支援、産業利用支援、HPCIの成果などについて基調講演を行った。また、米国におけるスパコン利用促進組織であるXSEDE (Extreme Science and Engineering Discovery Environment)、PRACE、当財団の3者間の相互協力の推進について意見一致に至っている。

⑥シンガポールのHPC動向調査及び「京」の国際利用促進のため、シンガポール科学技術庁配下の2研究機関 (Computational Resource Centre (A*CRC) 及びInstitute of High Performance Computing (A*IHPC)) を訪問 (平成27年9月) し、平成28年度利用課題の募集説明会を行った。

2. 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について、その開発・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。

②原子力施設の耐震性高度化のための原子炉、冷却・配管系、建屋等の施

設全体に関する大規模並列有限要素モデルの構築・整備・検証作業、構造部連結部の非線形挙動のモデル高度化を実施した。

③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モニタリングデータを補正するための解析、福島における森林パイロットフィールドでの空間線量評価、及びJ-PARC中性子ビームラインの遮蔽設計を実施した。また、PHITSの汎用化を図るために、連続エネルギー・アジョイント輸送モードの機能拡張、PHITSの高速化を目的とした高エネルギー核データライブラリの取り扱いに関わる機能拡張、最新バージョンのPHITSの信頼性検証を目的としたベンチマーク計算を実施するとともに、核燃料輸送物遮蔽への適用を目的としたPHITSの改良を実施した。

④PHITSの原子力分野以外への応用として、地磁気圏外の宇宙放射線評価、粒子線がん治療施設の遮蔽設計、放射線治療装置の放射化評価等を実施した。

⑤総合科学技術・イノベーション会議の革新的研究開発推進プログラム (ImPACT) において、「核変換による高レベル放射性廃棄物の大幅な低減・資源化」の研究開発機関の1機関として、PHITSを用いた核反応シミュレーションの高度化に向けた研究開発を実施した。

⑥トカマク型核融合装置のディスラプション解析、固定境界軸対称電磁流体平衡解析、密度限界近傍解析等の大規模な核融合プラズマ特性解析ソ

フトウェアの高度化及び関連モジュールの作成を実施した。

(2) 大規模シミュレーション技術の開発・研究

先端科学及び新産業技術における大規模シミュレーションの応用を目指す次世代型アプリケーションソフトウェア技術に関する研究及び次世代スーパーコンピュータ（エクサスケールスパコン）のアプリケーションに関する調査研究を以下のとおり行った。

- ①文部科学省のセンター・オブ・イノベーション（COI）プログラムにおいて、信州大学を拠点とする「世界の豊かな生活環境と地球規模の持続可能性に貢献するアクア・イノベーション拠点」の参画機関として、水道水、かん水／海水淡水化等に応用する革新的ナノ炭素逆浸透膜の開発及びナノ空間における水分子・吸着挙動に関する基礎的シミュレーション研究を実施した。
- ②文部科学省の「気候変動リスク情報創生プログラム」において、地球規模気候変動に関する予測・影響解析の一部として、日本版標準カップラ開発・適用・性能評価及びカップラを介した大規模データ利用に関する入出力ソフトウェア開発等を実施した。
- ③JST・CRESTの研究領域「ポストペタスケール高性能計算に資するシステムソフトウェア技術の創出」において、自動チューニング機構を有するアプリケーション開発・実行環境研究の一部として、複数のアプリケーションを結合しつつ大規模データ転送・変換を実施する弱連成カップリングツール（ppOpen-MATH/MP）の開発、実装及び検証支援を実施した。
- ④エクサスケールを見据えたメニーコア化によるノード性能の向上を引き出す

新しいプログラミングモデル XcalableMP（XMP）言語開発に関して、XMPをアプリケーション群「FIBER MiniApp」に実装する開発支援を実施した。

- ⑤地球シミュレータの産業戦略利用の枠組みを活用した企業との共同研究として、銅原子とナノカーボンの複合材料が示す極めて高い伝導特性の発現機構の解明を目指すシミュレーション技術の開発、及び微細気泡が及ぼす長時間に及ぶ高洗浄効果の発現機構を解明するシミュレーション技術の開発を実施した。また、産業界との実践的なシミュレーションとして、「鉄鋼材料の水素侵入シミュレーションに係る研究」、「鉄鋼材料の腐食に係るシミュレーション技術の研究」等の共同研究開発を推進した。
 - ⑥エクサ級の大規模スーパーコンピュータ等を新産業技術開発へ応用する方策について調査研究するため、一般財団法人新技術振興渡辺記念会の助成を受けて「ポストムーア時代のスピトロニクス技術に貢献するシミュレーション法の調査研究」及び「省エネルギー資源社会実現に向けた低循環負荷／低コスト熱電変換材料の調査研究」を実施した。
- (3) 情報科学技術分野の研究振興に関する調査分析
- 平成27年度から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調査分析業務（研究振興事業に関する課題の調査分析業務）」として、未来社会実現のためのICT基盤技術公募事業及びスーパーコンピュータ開発公募事業を実施するために必要とされる以下の業務を実施した。
- ①文部科学省と課題実施機関との委託契

約締結に係る諸事務の支援、委託契約書に基づく事務処理及び課題実施状況に関する進捗管理について文部科学省業務を支援するとともに、前年度の委託契約額の確認調査及び公募事業の推進に必要となる情報の把握等を行った。

②未来社会実現のためのICT基盤技術公募事業では、文部科学省の指定に基づきプログラムディレクター (PD) 及びプログラムオフィサー (PO) の委嘱及びPD・PO業務の支援を行った。また、PD・PO会議及び課題ごとにPO主催の推進委員会を開催した。

③上記の業務を通じて、本公募事業のあり方や問題点等を抽出し、分析・考察を行い、本公募事業の今後に向けた提案を行った。

3. 大規模高速計算機の利用に関する技術開発

(1) 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の運用に係る技術支援及び原子力機構内情報システムの管理運用等の技術支援を実施した。

また、日欧協力で整備された国際核融合エネルギー研究センター事業 (幅広いアプローチ活動の一事業) において、スーパーコンピュータ「ヘリオス」のユーザ支援並びにネットワーク等の関連インフラ整備に係る技術支援を実施した。

(2) HPCIの利用促進

①文部科学省科学技術試験研究委託事業「HPCIの運営」の共同事業参画機関として、9大学の情報基盤センターを含む11のHPCIシステム構成機関から提供される計算資源の利用促進業務を「京」の利用促進業務と併せて実施した。

「京」の利用課題選定の仕組みを活用し、「京」を除くHPCI計算資源を利用

する平成28年度研究課題として、139件の応募課題の中から69課題を選定した。

②HPCI運営事業の一環として平成28年度JHPCN公募型共同研究課題について、47件の応募課題の中から22課題を選定した (JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点事業)。

③HPCI計算資源及びJHPCN計算資源の利用に伴う利用負担金の支払いについては、HPCIシステム構成機関及びJHPCN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。

④産業界のユーザ向けの利用環境として当財団の東京事務所内に設置した「京」及びHPCIシステムへのアクセスポイント (アクセスポイント東京) を運用し、HPCIシステムの利用、応募前相談や利用相談、技術的な指導、対面認証などの目的で延べ約180名に利用された。ネットワーク通信機器の最適調整によって「京」からのデータ実効転送速度を従来の約3倍 (最高600MB/s) に高速化し、利用者の利便性を大きく向上させた結果、ダウンロード利用件数は35件に達し、前年度 (18件) から倍増した。

⑤文部科学省HPCI計画推進委員会による「HPCIの運営」の中間評価を受審し、関係機関が連携し効率的・効果的・安定的に実施されており、成果目標に対して、全体として着実に進捗しているとの評価を得た。

4. 原子力分野の解析コード、データベース等に関する情報の調査収集・整備提供 (公益目的支出計画・実施事業)

(1) 原子力分野の解析コードの調査収集・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及びOECD/NEAデータバンクから収集した20件の原子力コードを新規登録した。産業界を含む国内加盟機関への原子力コードの提供は289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349件の原子力コードを配付した。なお、当財団が運営している「RSICCユーザ会」の加盟機関は、平成27年度末で62機関である。

(2) 原子力分野のデータベース等の整備・提供

インターネットを利用して原子力関連情報を社会に提供する「原子力百科事典ATOMICA」のコンテンツの制作と運営を行った。コンテンツの制作においては、新規データ5件の追加と既存データ31件の更新を行った。また、用語辞書に登録されている用語のうち1件の更新を行った。なお、平成27年度におけるATOMICAサイトへのアクセス数は約5万2千件であった。

5. 事業の成果の普及等(公益目的支出計画・実施事業)

(1) RISTニュースの発行

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」を平成27年7月及び平成28年1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。

(2) ワークショップ、セミナー等の開催

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「MCNP等モンテカルロ法遮蔽計算における分散低減

について」に関する講習会(平成27年10月、東海)を開催した。国際ナノテクノロジー総合展・技術会議(nano tech2015)(平成28年1月、東京)に参加し、ナノテクノロジーに係るシミュレーション研究成果に関する紹介展示及び企業との共同研究に関する相談等を実施した。

(3) 学術協力

当財団における研究開発の成果を国内外の学術論文誌、学会及び研究展示会等で発表した。平成27年度における当該発表をⅢに示す。また、日本原子力学会の「2015年秋の大会」展示会に参加して原子力コードセンターに関する普及活動を行うとともに、日本物理学会、応用物理学会、応用数理解学会、日本機械学会等を通じて国内学界活動に協力をした。

Ⅲ その他

1. 研究成果の発表

平成27年度の主な研究成果発表は以下のとおり。

- (1) Shusaku Noda, Shintaro Hashimoto, Tatsuhiko Sato, Tokio Fukahori, Satoshi Chiba and Koji Niita; “Improvement of photonuclear reaction model below 140 MeV in the PHITS code”, J. Nucl. Sci. Technol. **52** (2015) 57.
- (2) S. Hashimoto O. Iwamoto, Y. Iwamoto, T. Sato, K. Niita; “PHITS Simulation of Quasi-Monoenergetic Neutron Sources from ${}^7\text{Li}(p,n)$ Reactions”, Proceedings of INES-4, Energy Procedia **71** (2015) 191.
- (3) T. Ogawa, T. Sato, S. Hashimoto, D. Satoh, S. Tsuda and K. Niita; “Energy-dependent fragmentation cross sections of relativistic ${}^{12}\text{C}$ ”, Phys. Rev. **C92** (2015) 024614.

- (4) Aiko Nagamatsu, Marco Casolino, Oscar Larsson, Tsuyoshi Ito, Naka-
hiro Yasuda, Keiichi Kitajo, Ken
Shimada, Kazuo Takeda, Shuichi
Tsuda, Tatsuhiko Sato; "Space Radia-
tion Dosimetry to Evaluate the Effect
of Polyethylene Shielding in the
Russian Segment of the
International Space Station", *Physics
Procedia*, **80** (2015) 25.
- (5) Masaharu Matsumoto, Takashi
Arakawa, Takeshi Kitayama, Futo-
shi Mori, Hiroshi Okuda, Takashi
Furumura and Kengo Nakajima;
"Multi-Scale Coupling Simulation of
Seismic Waves and Building Vibra-
tions using ppOpen-HPC", *Procedia
Computer Science* **51**(2015) 1514-
1523
- (6) Takumi Araki, Rodolfo Cruz-Silva,
Syogo Tejima, Kenji Takeuchi, Ta-
kuya Hayashi, Shigeki Inukai, Toru
Noguchi, Akihiko Tanioka, Takeyuki
Kawaguchi, Mauricio Terrones and
Morinobu Endo; "Molecular Dynam-
ics Study of Carbon Nanotubes/
Polyamide Reverse Osmosis
Membranes: Polymerization, Struc-
ture, and Hydration", *ACS Appl.
Mater. Interfaces*, **7**(44)(2015) 24566-
24575
- (7) Shigeki Inukai, Rodolfo Cruz-Silva,
Josue Ortiz-Medina, Aaron Morelos-
Gomez, Kenji Takeuchi, Takuya
Hayashi, Akihiko Tanioka, Takumi
Araki, Syogo Tejima, Toru Noguchi,
Mauricio Terrones and Morinobu
Endo; "High-performance multi-func-
tional reverse osmosis membranes
obtained by carbon nanotube
polyamide nanocomposite" *Scientific
Reports* **5**(2015) 13562
- (8) Kenji Takeuchi, Masatsugu Fu-
jishige, Hidenori Kitazawa, Noboru
Akuzawa, Josue Ortiz Medina, Aaron
Morelos-Gomez, Rodolfo Cruz-Silva,
Takumi Araki, Takuya Hayashi,
Mauricio Terrones and Morinobu
Endo; "Oil sorption by exfoliated
graphite from dilute oil-water emul-
sion for practical applications in
produced water treatments" *Journal
of Water Process Engineering*
8(2015) 91-98
- (9) Josue Ortiz-Medina, Hiroki Kitano,
Aaron Morelos-Gomez, Zhipeng
Wang, Takumi Araki, Cheon-Soo
Kang, Takuya Hayashi, Kenji
Takeuchi, Takeyuki Kawaguchi, Aki-
hiko Tanioka, Rodolfo Cruz-Silva,
Mauricio Terrones and Morinobu
Endo; "Nanostructured carbon-based
membranes: nitrogen doping effects
on reverse osmosis performance",
NPG Asia Materials **8**(2016) 258
- (10) Min-A Kim, Dawon Jang, Syogo
Tejima, Rodolfo Cruz-Silva, Han-Ik
Joh, Hwan Chul Kim, Sungho Lee
and Morinobu Endo; "Strengthened
PAN-based carbon fibers obtained by
slow heating rate carbonization",
Scientific Reports **6** (2016) 22988.
- (11) H. Sawai, S. Yamada; "The Evolution
and Impacts of Magnetorotational
Instability in Magnetized Core-Col-
lapse Supernovae", *Astrophysical
Journal*, **817** (2015) 153.
- (12) Y. Zempo, N. Akino, M. Ishida, E.
Tomiyama, H. Yamamoto; "Real-time
and real-space program tuned in K-

- computer”, J. Phys: Conf. Series **640** (2015) 012066
- (13) K. Nakajima, M. Satoh, T. Furumura, H. Okuda, T. Iwashita, H. Sakaguchi, T. Katagiri, M. Matsumoto, M. Ohshima, H. Jitsumoto, T. Arakawa, F. Mori, T. Kitayama, A. Ida, and M.Y. Matsuo; “ppOpenHPC:-Open Source Infrastructure for Development and Execution of Large-Scale Scientific Applications on Post-Peta-Scale Supercomputers with Automatic Tuning (AT)”, Optimization in the Real World—Towards Solving Real-Worlds Optimization Problems, Mathematics for Industry **13** (Springer, 2015)
- (14) K. Hagita, Y. Ono, and S. Tejima; “Stability Study of Ring-like Sheet of Ag Atoms Wrapping a CNT”, J. Chinese Chem. Soc., Vol. **3**, (2016).
- (15) M. Seki; “Present Status of RIST in Promotion of High Performance Computing Infrastructure in Japan”, Keynote speech in PRACE Scientific and Industrial Conference 2015 (PRACEdays15)) (Dublin Ireland, May 2015).
- (16) H. Sawai; “Impacts of magnetorotational instability on core-collapse supernovae”, F.O.E. Fifty-One Erg (North Carolina State University USA, June 2015).
- (17) Y. Ono, T. Yamasaki, and T. Ohno; “First-principles molecular dynamics simulations for the initial stage of graphene growth on stepped SiC surface”, NT15:—The Sixteenth International Conference on the Science and Application of Nanotubes (Nagoya Japan, June 2015)
- (18) T. Yamagishi, Y. Matsumura; “A fast GPU accelerated mixed precision calculation for a non-hydrostatic ocean model with a multigrid preconditioned conjugate gradient method”, GPU Technology Conference Japan 2015 (Tokyo Japan, September 2015).
- (19) T. Yamagishi, Y. Matsumura; “A GPU Acceleration of a Non-Hydrostatic Ocean Model Using a Mixed Precision Multigrid Preconditioned Conjugate Gradient Method”, Supercomputing Conference (Austin USA, November 2015).
- (20) T. Ichimura, K. Fujita, P. Errol, B. Quinay, L. Maddegadara, M. Hori, S. Tanaka, Y. Shizawa, H. Kobayashi, K. Minami; “Implicit Nonlinear Wave Simulation with 1.08T DOF and 0.270T Unstructured Finite Elements to Enhance Comprehensive Earthquake Simulation”, Supercomputing Conference (Austin USA, November 2015).
- (21) K. Yoshizawa, Y. Iwazaki, Y. Gohda, S. Tsuneyuki; “Excess electron states accompanying impurity hydrogen in rutile TiO_2 ”, The 18th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (Tokyo Japan, November 2015).
- (22) Takashi Arakawa, “Introduction of an atmosphere-ocean model coupling and a seismic-structure model coupling by a coupler ppOpen-MATH/MP”, International Workshop on Software for Peta-scale Numerical Simulation (Tokyo Japan, December 2015)

- (23) D. Yamaki; “Analysis of the changes in electronic structures due to intermolecular interactions by using the difference of density matrices”, 56th Sanibel Symposium (St. Simons Island USA, February 2016).
- (24) T. Yamagishi, Y. Matsumura; “Accelerating a non-hydrostatic ocean model with multigrid Poisson/Helmholtz solver using a GPU” The 6th AICS International Symposium (Kobe Japan, February 2016).
- (25) M.Okuda; “How do supercomputers contribute to a safe, reliable and sustainable society?”, JCC Science & Technology Lecture (Singapore, March 2016).
- (26) M.Okuda; “Japanese HPCI, High Performance Computer Infrastructure, past, present and future”, Supercomputing Frontiers 2016 (Singapore, March 2016)
- (27) S. Todo, R. Igarashi, S. Kasamatsu, T. Kato, N. Kawashima, T. Kawatsu, Y. Konishi, H. Kouta, H. Matsuo, M. Noda, S. Sasaki, Y. Terada, S. Tsuchida, K. Yoshimi, K. Yoshizawa; “MateriApps – a Portal Site of Materials Science Simulation”, Supercomputing Frontiers 2016 (Singapore, March 2016)
- (28) 中島憲宏、鈴木喜雄、宮村（中村）浩子、西田明美、川上義明、郭智宏、富山栄治；「「京」利用による次世代耐震シミュレーションの例証」日本計算工学会誌「計算工学」Vol. 20 (2015) No. 4.
- (29) 荒木拓海、近藤恒、中村賢、手島正吾、小野裕己；「ナノバブルの形成および挙動に関する大規模シミュレーション」2015年地球シミュレータ産業利用成果報告集
- (30) 手島正吾、中村賢、荒木拓海、小野裕己、近藤恒；「環境負荷低減に向けたカーボンナノチューブ複合材料の電気伝導に関する大規模シミュレーション」2015年地球シミュレータ産業利用成果報告集
- (31) 山岸孝輝；「京における最適化手法の調査研究」HPCI利用研究成果集（2016）
- (32) 富山栄治、吉田秀逸；「シンガポールにおけるHPCの動向調査」RIST NEWS No. 59 (2015年7月) 13–20.
- (33) 荒木拓海、手島正吾；「アクア・イノベーション拠点（COI）ー信州大学における大規模シミュレーションを用いた革新的ロバスト炭素膜による水処理機構に関する研究の照会」 RIST NEWS No. 60 (2016年1月) 4–10.
- (34) 澤井秀朋；「重力崩壊型超新星爆発における磁気回転不安定の大域シミュレーション～人類のルーツを求めて～」RIST NEWS No. 60 (2016年1月) 11–21.
- (35) 吉澤香奈子、岩崎誉志紀、合田義弘、常行真司；「ルチルTiO₂中の不純物水素と余剰電子状態」日本物理学会2015年秋季大会（2015年9月、関西大学）
- (36) 山崎隆浩、小野裕己、奈良純、大野隆央；「第一原理シミュレーションに基づいたSiC表面上のSi熱脱離グラフェン成長機構」日本応用物理学会秋季学術講演会（2015年9月、名古屋大学）
- (37) 小林寛；「平成28年度「京」を含むHPCIシステム利用研究課題の募集案内と第3回OpenFOAMワークショップのご紹介」化学工学会第47回秋季大会（2015年9月、北海道大学）
- (38) 山本大輔；「差密度行列解析法によるpost-HF計算の解析」第9回分子科学討論会（2015年9月、東京工業大学）

- (39) 荒川隆、井上孝洋、松本正晴、久保川陽呂鎮、佐藤正樹；「結合ソフトウェアppOpen-MATH/MPの性能評価と最適化」第14回情報科学技術フォーラム (2015年9月、愛媛大学)
- (40) ファム・バン・フック、井上義昭、浅見暁、内山学、千葉修一；「「京」コンピュータでのC++型流体コードにおけるMPIの評価」第151回情報処理学会ハイパフォーマンスコМПューティング研究会 (2015年9月、沖縄産業支援センター)
- (41) 内山学、ファム・バン・フック、千葉修一、井上義昭、浅見暁；「OpenFOAMによる流体コードのHybrid並列化の検討」第151回情報処理学会ハイパフォーマンスコМПューティング研究会 (2015年9月、沖縄産業支援センター)
- (42) 山岸孝輝、井上孝洋、坪木和久；「雲解像モデルCReSSのGPU適用と最適化に向けて」日本気象学会秋季大会 (2015年10月、京都テルサ)
- (43) 新宮哲；「「京」を中核とするHPCI産業利用のご案内」第3回OpenFOAMワークショップ (2015年10月、秋葉原UDX)
- (44) 井上義昭、小林寛；「「京」での移植状況・支援内容」第3回OpenFOAMワークショップ (2015年10月、秋葉原UDX)
- (45) 富山栄治；「RISTの利用支援の紹介」第3回OpenFOAMワークショップ (2015年10月、秋葉原UDX)
- (46) 小野裕己、山崎隆浩、奈良純、大野隆央；「SiC表面上のSi熱脱離グラフェン成長機構に関する第一原理計算」NIMSナノシミュレーションワークショップ2015 (2015年11月、学術総合センター橋大学一橋講堂)
- (47) 浅見暁；「「京」、HPCIにおける高速化事例紹介」平成27年度「京」における高速化ワークショップ (2015年12月、秋葉原UDX)
- (48) 志澤由久、原山卓也；「「京」におけるQuantum ESPRESSO v. 5. 1. 1の高速化」平成27年度「京」における高速化ワークショップ (2015年12月、秋葉原UDX)
- (49) 吉澤香奈子、吉本芳英、常行真司；「第一原理計算向け入出力支援ツールの開発：TAPIOCAとC-Tools」第5回計算物質科学イニシアティブ (CMSI) 研究会 (2015年12月、東京大学)
- (50) 吉澤香奈子、岩崎誉志紀、合田義弘、常行真司；「ルチルTiO₂中の不純物水素とTi³⁺イオン」第13回水素量子アトムクス研究会 (2016年2月、東京大学)
- (51) 吉澤香奈子；「LAMMPSを使うための環境整備状況と支援体制」第1回「京」における材料系ワークショップ (2016年2月、TKP品川カンファレンスセンター)
- (52) 富山栄治；「LAMMPSの高度化支援について」第1回「京」における材料系ワークショップ (2016年2月、TKP品川カンファレンスセンター)
- (53) 澤井秀朋；「MRIニュートリノ爆発におけるr-process元素合成」宇宙核物理連絡協議会研究会 (2016年2月、国立天文台)
- (54) 仁井田浩二；「陽子ビームを用いた長寿命核分裂生成物の核変換の効率化」日本原子力学会2016年春の年会 (2016年3月、東北大学)
- (55) 吉澤香奈子、岩崎誉志紀、合田義弘、常行真司；「酸素欠陥のあるルチルTiO₂中の不純物水素とTi³⁺イオン」日本物理学会第71回年次大会 (2016年3月、東北学院大学)
- (56) 小野裕己、山崎隆浩、奈良純、大野隆央；「SiC表面上のSi熱脱離グラフェン成長機構に関する第一原理分子動力学シミュレーションー炭素鎖から二次元的構造の形成過程」日本応用物理学会

春季学術講演会 (2016年 3 月、東京工業大学)

- (57) 荒木拓海 ; 「ナノバブルの形成および挙動に関する大規模シミュレーション」平成27年度地球シミュレータ利用報告会 (2016年 3 月、学術総合センター橋大学一橋講堂)
- (58) 近藤恒 ; 「環境負荷低減に向けたカーボンナノチューブ複合材料の電気伝導に

関する大規模シミュレーション」平成27年度地球シミュレータ利用報告会 (2016年 3 月、学術総合センター橋大学一橋講堂)

- (59) 手島正吾、中村賢、小野裕己、荒木拓海 ; 「ナノテクノロジーに係るシミュレーション研究成果に関する紹介」展示 Nanotech 2016 (平成28年 1 月、東京ビッグサイト)