

平成30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。

平成30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：令和3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」（事業予定期間：令和3年度まで）を代表機関として実施し、計算科学技術関連コミュニティの醸成・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、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、データベース等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ーへの提供、及びインターネットを利用した原子力関連情報提供サイトの運用を実施した。

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。また、「京」の利用促進業務及びHPCIの運営業務については、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センター（以下「理研R-CCS」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（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30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. 「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、平成30年度2回目（下期）並びに令和元年度の「京」の利用研究課題等の利用者選定を実施した。

- ①平成29年度から利用研究課題の定期募集を年2回実施することとし、平成30年10月から「京」一般利用枠総資源量の

3割程度を利用提供する第2回目の課題募集・選定を実施した。第2回目の募集には50件の応募があり、16課題を選定した。

また、令和元年度は、「京」が8月中旬に運用停止することから「京」一般利用枠配分資源量を運用期間に比例した4.5ヶ月分として、令和元年度の課題を半年課題として募集し、34件の応募があり、23課題を選定した。なお、一般利用課題、産業利用課題及び若手人材育成課題の採択率は平均67%と高い値となった。

さらに、ポスト「京」の運用に向け、ポスト「京」性能評価環境利用課題の募集を行い、3件の申請を受け付けた。

②随時募集課題では、一般利用課題のトライアル・ユースに1件、競争的資金等獲得課題に3件の応募があり、全て選定した。また、産業利用課題の個別利用（有償・成果非公開）に11件、ASP（アプリケーションサービスプロバイダ）事業実証利用課題に2件の応募があり、全て選定した。

③国の施策として実施する重点化促進課題では、1件の利用があり、720万ノード時間の資源を配分した。

④令和元年度のポスト「京」研究開発枠では、重点課題として34件、萌芽的課題として24件の選定プロセスを審査・確認した。

(2) 利用支援業務

1) 情報支援

①「京」を中核とするHPCI計算資源の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、平成30年度末で通算7,267件（内、査読付き論文数は1,568件）に達した。

②平成29年度から平成30年度上期にかけて実施したHPCI利用研究課題（計226課題）のうち189課題の利用報告書をHPCIポータルで公開した。利用報告書のダウンロード数は、平成30年度末で通算92,871件に達した（平成30年度は29,436件）。利用報告書をダウンロードしている企業は約1,000社に増加し、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39編の論文が掲載され、全体のダウンロード（DL）数は6,407回、うちDL数トップ論文のDL数は640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.22～25、成果事例集Ⅵ、及び成果事例集Ⅴの英語版を発行し、「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的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調整支援、プログラム性能の分析評価等の高度化支援を29課題（うち、産業利用7課題）について実施した。

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。)の利用環境整備を進めた。

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、OSSを用いた固体材料の電子状態計算に関する調査研究、及び「京」における大規模磁気流体シミュレーションのための更なる調査研究を行った。

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、初級・中級講習会、ハンズオン講習会、利用者のすそ野を広げる一般向けHPCセミナー、及び産業界で利用が多いLAMMPSやOpenFOAM等のOSSの入門講習会を、都合11回主催した。これらの講習会等への参加者は、下記の②に示すワークショップを含めて延べ427名で、その内産業界からの参加者は約6割に上り、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

「京」を中核とするHPCIシステム利用課題成果報告会（平成30年11月、東京）を開催し、306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（平成30年10月、11月、平成31年2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うとともに、利用者とソフトウェアベンダーとの情報交流の機会とした。

また、「京×ポスト京シンポジウム～シミュレーション・AI・ビッグデータ～」(平成31年1月、東京)を理研R-CCSと共同開催し、ビジネスパーソンを中心に148名の参加を得た。「京」による成果を振り返り、ポスト「京」によって更に飛躍を遂げる可能性のある分野をアピールする

ことで、ポスト「京」への関心を高める機会となった。

「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5回)～熱電材料～」(平成31年3月、東京)を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)と共同開催し、この分野での有益な情報交換や議論等が行われた。

③展示会等

「京」及びHPCIの利用促進に向け、ISC18(平成30年6月、独国フランクフルト)、SC18(平成30年11月、米国ダラス)、Supercomputing Asia2019(平成31年3月、シンガポール)に出展し、海外向けに情報提供、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、神戸医療産業都市20周年記念事業の一環として、高校生を対象にした「スパコン体験塾」(平成30年8月、神戸)を開催するとともに、「はじめてのプログラミング講座」(平成30年12月、平成31年2月、3月、神戸)を理研R-CCSと共同開催した。「スパコン体験塾」には3校13名、「はじめてのプログラミング講座」には延べ16校75名が受講した。

また、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」(平成30年11月、神戸)にて、「計算機歴史博物館」を開催した。

⑤当財団(RIST)、欧州のPRACE(Partnership for Advanced Computing in Europe)、米国のXSEDE(eXtreme Science and Engineer-

ing Discovery Environment) との三者間で平成29年4月に締結したMOUの更新手続きを進めるとともに、共同研究課題に対する共同利用支援について協議を継続した。

- ⑥NSCC (シンガポール国立スーパーコンピューティングセンター) と締結したMOUに基づき、平成30年度第1回情報交換会を平成30年11月に米国で、第2回を平成31年3月にシンガポールで開催した。

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。)、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「国立情報学研究所」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) 今後の運営の在り方に関する調査検討
HPCIコンソーシアムと協力して、「京」の停止期間における代替資源としてのHPCI利用に向けた課題等の調査検討を実施し、報告書として取り纏め、文部科学省研究振興局長に提出した。また、ポスト「京」による成果創出とHPCIの継続的発展に向けた調査検討を開始し、中間報告の取り纏めを行った。

2) 技術企画・調整

9大学の情報基盤センター、2大学共同利用機関法人及び3国立研究開発法人(以下「HPCIシステム構成機関」

という。)から構成されるHPCI連携サービス委員会を開催し、「京」の停止に伴いHPCIシステム構成機関から追加提供される「京」代替資源の確認、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システムの全体的な運用に係るソフトウェアの改良に関する検討等を議論するなど、適切に委員会を運営した。

(2) HPCIの利用促進

1) 課題選定及び共通窓口の運用

- ①「京」の停止に伴い追加提供される「京」代替資源を含むHPCI計算資源を利用する令和元年度研究課題として、112件の応募課題の中から84課題を選定した。なお、「京」代替資源の提供に伴い、「京」のみに設定されていた若手人材育成課題を「京」を除くHPCI計算資源でも新設した。その結果、前年度に比べ応募件数が40%増加し、採択面においても若手研究者の要求に応えることができた。さらに、HPCIの利用経験豊富な企業と利用経験が少ない企業とを分離して審査することにより、ベテラン企業と同程度の採択率で新規企業を選定することができ、新規利用企業の拡大に寄与した。また、共用ストレージの利用ニーズの高まりと、更なる利用促進と資源の有効活用という要望に応えるため、HPCI共用ストレージの随時募集を開始した。

- ②HPCI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(JHPCN:学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点事業)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システムの利用前相談や利用相談、高並列計算の指導・助言、大容量データの転送利用、対面認証などの目的で延べ約180名に利用された。また、セミナーやシンポジウムを開催して、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い、課題応募につながる成果を得た。

②新規利用企業の応募拡大のため、初めてHPCIを利用した企業へのインタビュー記事を掲載するリーフレット「はじめてのHPCI」を2種類発行した。HPCIの課題応募を検討中の企業からは、大変参考になると好評であった。

③産業界の懸念事項である情報セキュリティと大容量データハンドリングについての情報交換を行うために、スーパーコンピューティング産業応用協議会と資源提供機関との情報交換会を2回開催した。各資源提供機関にセキュリティ状況を問い合わせるための標準的な質問シートが合意された。

3) 技術支援

OSS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講習会を3回（平成31年2月及び

平成31年3月に2回）実施した。

(3) HPCIシステムの運用

1) HPCI共用ストレージ等の運用・保守
本事業は、東大情報基盤センター及び理研R-CCSに再委託して、代表機関との調整のもと実施した。

2) 認証局の運用

本事業は、国立情報学研究所に再委託して、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拡充

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)等の機能拡充を実施した。

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、及び情報セキュリティ対策システムの運用に係る技術支援を実施した。さらに、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今年度より新たに受託した。

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空間線量率値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、画像データから構造物を認識し空間線量率を評価するシステムの開発、放射線源逆推定のための機械学習システムの開発、粉塵輸送と連携した空間線量率解析システムの開発、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、使用済核燃料貯蔵施設モデルの敷地境界線量の高精度化を目的としたPHITSコードの新規機能の開発・整備を実施した。

- 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の遮蔽設計を実施した。
- ③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、プログラム最終年度として成果総合報告書を取りまとめた。
- ④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。
- ⑤量研のトカマク型核融合装置のディスプレイ解析、電磁流体平衡解析、非線形安定性解析、不純物輸送解析、グローバルジャイロ運動論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、GPU型マシンへの最適化等を実施した。また、トカマク型核融合

装置から得られる運転データ解析ソフトウェアの開発を実施した。

(2) 大規模シミュレーション技術の開発・研究

ナノ材料、気象モデルの分野で、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、信州大学の実験データをもとに、革新的ナノ炭素逆浸透膜に対して第一原理シミュレーション及び分子動力学シミュレーションを実施し、透水性、脱塩性、耐ファウリング性、耐塩素性などの膜性能評価を行った。さらに、実証試験で開発したスぺーサ内のファウリングの流体解析を開始した。
- ②文部科学省の「統合的気候モデル高度化研究プログラム」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引き続き実施した。
- ③NEDOのエネルギー・環境新技術先導プログラムにおいて、住友電気工業株式会社、筑波大学と共同で「革新的次世代軽量高強度構造材の研究開発」を開始した。カーボンナノチューブの集合化・長尺化を可能とする新規製造法について、分子動力学シミュレーション

ンによるメカニズム解明研究を開始した。

- ④産業界との実践的なシミュレーションとして、「微細気泡の生成法・安定性と洗浄効果に関する研究」、「光吸収材料のシミュレーションによる理論設計」の共同研究開発を推進した。

(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継続して実施した。

- 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手続き、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、公募事業の推進に必要な情報の把握等を行った。
- ②スーパーコンピュータ開発公募事業(委託事業17課題、補助金事業3課題)について、課題の公募、採択課題のホームページでの公表・周知、採択課題の契約締結手続きの支援、各課題の事業面・経理面での進捗管理、平成29年度の委託契約額及び補助金額の確認調査等を実施した。
- ③上記の業務を通じて、本公募事業のあり方や問題点等の調査・考察を行い、本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、データベース等に関する情報の調査収集・整備提供

(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11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153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7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264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「SCALE6.2を用いた臨界解析と遮蔽解析の初歩」に関する講習会(平成30年10月、東海)を開催した。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30年度末で66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」の運営を行った。平成30年度におけるATOMICAサイトへのアクセス数は約4万4千件であった。なお、ATOMICAの運営については、原子力委員会の原子力情報体系整備に係る見解に基づき平成31年3月14日より原子力機構に引き継ぎ、当財団による自主運営を終了した。

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. 64」を平成30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、第79回応用物理学会秋季学術講演会、第32回数値流体力学シンポジウム、日本物理学会第74回年次大会の展示会に参加して「京」を中核とするHPCIシステムの利用及び成果事例を紹介するなど、事業成果の普及活動を行った。

Ⅲ その他

1. 研究成果の発表

平成30年度の主な研究成果発表は以下のとおり。

- (1) Yoshihiro Takizawa, Shigeki Inukai, Takumi Araki, Rodolfo Cruz-Silva, Josue Ortiz-Medina, Aaron Morelos-Gomez, Syogo Tejima, Ayaka Yamanaka, Michiko Obata, Auppatham Nakaruk, Kenji Takeuchi, Takuya Hayashi, Mauricio Terrones, and Morinobu Endo; “Effective Antiscalting Performance of Reverse-Osmosis Membranes Made of Carbon Nanotubes and Polyamide Nanocomposites”, ACS Omega, 3(2018) 6047-6055.
- (2) Hisaki Sawahata, Ayaka Yamanaka, Mina Maruyama, and Susumu Okada; “Energetics and formation mechanism of borders between hexagonal boron nitride and graphene”, Applied Physics Express, 11(2018) 065201.
- (3) Airi Yasuma, Ayaka Yamanaka, and Susumu Okada; “Energetics of edge oxidization of graphene nanoribbons”, Japanese Journal of Applied Physics, 57(2018) 06HB63.
- (4) Kazufumi Yoneyama, Ayaka Yamanaka, and Susumu Okada; “Energetics and electronic structures of corrugated graphene nanoribbons”, Japanese Journal of Applied Physics, 57(2018) 085101.
- (5) T. Kawakami, K. Miyagawa, H. Isobe, M. Shoji, S. Yamanaka, M. Katouda, T. Nakajima, K. Nakatani, M. Okumura and K. Yamaguchi; “Relative stability between the manganese hydroxide- and oxo-models for water oxidation by CCSD, DMRG CASCI, CASSCF, CASPT2 and CASDFT methods; Importance of static and dynamical electron correlation effects for OEC of PSII”, Chemical Physics Letter, 705(2018) 85-91.
- (6) J. Kuno, Y. Imamura, M. Katouda, M. Tashiro, T. Kawai and T. Nakashima; “Inversion of Optical Activity in the Synthesis of Mercury Sulfide Nanoparticles: Role of Ligand Coordination”, Angewandte Chemie International Edition, 57(2018) 12022-12026.
- (7) Y. Imamura, M. Tashiro, M. Katouda and M. Hada; “Extrapolation of polymer gap by combining cluster and periodic boundary condition calculations with Hückel theory”, Chemical Physics Letter, 707(2018) 44-48.
- (8) B. Chan, Y. Kawashima, W. Dawson, M. Katouda, T. Nakajima, and K. Hirao; “A Simple Model for Relative Energies of All Fullerenes Reveals the Interplay between Intrinsic Resonance and Structural Deformation Effects in Medium-Sized Fullerenes”, Journal of Chemical Theory and Computation,

- 15(2019) 1255-1264.
- (9) Rodolfo Cruz-Silva, Yoshihiro Takizawa, Auppatham Nakaruk, Michio Katouda, Ayaka Yamanaka, Josue Ortiz-Medina, Aaron Morelos-Gomez, Syogo Tejima, Michiko Obata, Kenji Takeuchi, Toru Noguchi, Takuya Hayashi, Mauricio Terrones, Morinobu Endo.” New Insights in the Natural Organic Matter Fouling Mechanism of Polyamide and Nanocomposite Multiwalled Carbon Nanotubes-Polyamide Membranes”, *Environ. Sci. Technol.*(2019), 53, 11, 6255-6263
- (10) T. Sato, Y. Iwamoto, S. Hashimoto, T. Ogawa, T. Furuta, S. Abe, T. Kai, P.E. Tsai, N. Matsuda, H. Iwase, N. Shigyo, L. Sihver and K. Niita ; “Features of Particle and Heavy Ion Transport Code System PHITS Version 3.02”, *J. Nucl. Sci. Technol.* 55(2018), 684-690
- (11) T. Ogawa, T. Sato, S. Hashimoto and K. Niita; “Cluster formation in relativistic nucleus-nucleus collisions”, *Phys. Rev. C*, 98(2018), 024611.
- (12) M. Kim, A. Mailins, K. Yoshimura, K. Sakuma, H. Kurikami, A. Kitamura, M. Machida, Y. Hasegawa and H. Yanagi; “Simulation study of the effects of buildings, trees and paved surfaces on ambient dose equivalent rates outdoors at three suburban sites near Fukushima Dai-ichi”, *J. Environ. Radioact.*, <https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2018.09.001> (2018)
- (13) T. Kokubo, S. Nagaoka, H. Teramae, U. Nagashima; “Practical Training in Simple Hückel Theory: Matrix Diagonalization for Highly Symmetric Molecules and Visualization of Molecular Orbitals”, *Journal of Chemical Education*, 95(2018), 1579-1586.
- (14) M. Katouda, Y. Imamura, M. Tashiro, S. Furukawa, K. Hayashi, M. Saito, I. Hisaki, D. Sakamaki, S. Seki; “DFT Investigation of Structural and Electronic Properties of Covalent Organic Frameworks Containing Trichalcogenasumanene”, 16th International COngress of Quantum Chemistry (16-ICQC) (Menton, France, June 2018).
- (15) A. Miyauchi; “Application of Hexagonal Close Pack Mesh for Fluid Dynamics”, FIFTEENTH MARCEL GROSSMANN MEETING (Rome Italy, July 2018).
- (16) M. Katouda; “Performance evaluation of multi-GPU implementation of RI-MP2 method on Tesla V100 GPUs”, GPU Technology Conference Japan 2018 (GTC Japan 2018) (Tokyo, September 2018)
- (17) S. Iga; “Grid generation with flexibility in resolution distribution based on spring dynamics method”, Workshop on Moving and Adaptive Meshes for Global Atmospheric Modeling (Berkshire UK, September 2018)
- (18) T. Yamagishi, Y. Matsumura, H. Hasumi; “An MPI-CUDA Acceleration for a Non-Hydrostatic Ocean Model with GPUDirect RDMA Transfers”, GPU Technology Conference Japan

- 2018 (Tokyo Japan, September 2018).
- (19) K. Yoshizawa; “Performance information of first-principles codes in K computer”, The 21st Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (Daejeon Korea, October 2018).
- (20) E. Tomiyama, T. Iwasaki, H. Washizu; “Temperature dependent dynamics simulation of traction fluid by molecule dynamics method”, The 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (Osaka Japan, October 2018).
- (21) T. Yamagishi, Y. Matsumura, H. Hasumi; “Multi-GPU Accelerated Non-Hydrostatic Numerical Ocean Model with GPUDirect RDMA Transfers”, Supercomputing Conference 2018 (Dallas USA, November 2018).
- (22) A. Miyauchi; “Reinterpretation of Yang-Mills Fields as a Non-Abelian Electromagnetism”, The 28th Workshop on General Relativity and Gravitation in Japan (Tokyo Japan, November 2018).
- (23) Y. Kusama, T. Noguchi, M. Okuda; “User Support Activities by RIST in the HPCI System including K computer in Japan”, The 1st R-CCS International Symposium (Kobe Japan, February 2019)
- (24) 太田幸宏、小久保達信、野口孝明; 「「京」における式テンプレートを利用したC++コードの性能分析：多項式の評価」HPCI利用研究成果集Vol. 3, No. 2 (2018年7月)
- (25) 松岡浩; 「ビット演算によるCFD (数値流体力学) と等価な高精度流体解析手法」 RIST NEWS No. 64 (2018年9月) 17–28.
- (26) 山岸孝輝; 「GPUの気象・気候・海洋モデルへの適用とその最適化を目指した取り組み」 RIST NEWS No. 64 (2018年9月) 29–40.
- (27) 吉澤加奈子、奥田基、吉本芳英、常行真司; 「第一原理計算アプリケーションの利用について」(株)技術情報協会「マテリアルズインフォマティクスによる材料開発と活用集」(2019年1月) 53–61.
- (28) 吉澤香奈子、吉本芳英、常行真司; 「GUI支援ツールC-Toolsによる電子状態計算の実行経過時間の評価」物性研スパコン共同利用・CCMS合同研究会「計算物質科学の今と未来」(2018年4月、東京大学)
- (29) 河東田道夫、田代基慶、今村穰; 「ボウル型トリカルコゲナスを基本 π 骨格とする共有結合性有機構造体の構造・電子機構の理論的研究」第21回理論化学討論会 (2018年5月、分子科学研究所、岡崎)
- (30) 河東田道夫、田代基慶、今村穰; 「ボウル型トリカルコゲナスを基本 π 骨格とする共有結合性有機構造体の構造・電子機構の理論的研究」第21回理論化学討論会 (2018年5月、分子科学研究所、岡崎)
- (31) 太田幸宏、志賀基之; 「Gentlest Ascent Dynamics法による遷移状態探索：周期系への適用」第21回理論化学討論会 (2018年5月、岡崎コンファレンスセンター)
- (32) 小久保達信、長岡伸一、寺前裕之、長嶋雲平; 「対称性の高い固有ベクトルを得る新規固有値固有ベクトル計算のアルゴリズム」日本コンピュータ化学会2018春季年会 (2018年6月、東京工業大学)
- (33) 吉澤加奈子、吉本芳英、常行真司; 「GUI支援ツールC-Toolsの分析：DFTコードの連携を見据えて」H30年度ポスト「京」

- 重点課題(7)第3回CDMSI研究会
(2018年7月)
- (34) 仁井田浩二;「長寿命核分裂生成物の核変換シミュレーション」第14回PHITS研究会(2018年8月、いばらき量子ビームセンター)
- (35) 荒川隆、新田友子、鳩野美佐子、竹島滉、芳村圭;「統合陸域モデルILSと大気モデルの結合」第17回情報科学技術フォーラム(2018年9月、福岡工業大学)
- (36) 井戸康太、笠松秀輔、加藤岳生、川島直輝、藤堂眞治、三澤貴宏、本山裕一、吉澤加奈子;「物質科学シミュレーションのポータルサイトMateriAppsの紹介」日本物理学会2018年秋季大会(2018年9月、同志社大学)
- (37) 吉澤加奈子;「HPCIの募集開始とプリインストールされたアプリケーションソフトウェアについて」日本物理学会2018年秋季大会(2018年9月、同志社大学)
- (38) 宮内敦;「微分可能な活性化関数に基づく誤差逆伝搬法の拡張」第17回情報科学技術フォーラム(2018年9月、福岡工業大学)
- (39) 富山栄治;「分子動力学法によるトラクションフルードの温度依存ダイナミクス」日本機械学会2018年度年次大会(2018年9月、関西大学)
- (40) 吉澤加奈子;「材料系アプリケーションとデータベースの紹介:HPCI利用支援」第6回材料系ワークショップ(2018年10月、秋葉原UDX)
- (41) 荒川隆、新田友子、鳩野美佐子、竹島滉、芳村圭;「非同期結合ソフトウェアの設計と開発」気象学会秋季大会(2018年11月、仙台国際センター)
- (42) 富山栄治、岩崎猛、鷺津仁志;「分子動力学法によるトラクションフルードの温度依存性解析」トライボロジー会議2018秋伊勢(2018年11月、伊勢市観光文化会館)
- (43) 峯尾真一;「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)における研究者ネットワークの分析」大学ICT推進協議会2018年度年次大会(2018年11月、札幌コンベンションセンター)
- (44) 山岸孝輝、野口孝明、草間義紀、奥田基;「RISTによる「京」を中核とするHPCIシステムの利用支援」大学ICT推進協議会2018年度年次大会(2018年11月、札幌コンベンションセンター)
- (45) 太田幸宏、志賀基之;「周期系におけるGentlest Ascent Dynamics法による遷移状態探索」第32回分子シミュレーション討論会(2018年11月、産業技術総合研究所)
- (46) 仁井田浩二;「PHITSコードの開発とそれによる中性子実験装置遮蔽性能の高度化」日本中性子科学学会第18回年会功労賞受賞記念講演(2018年12月、茨城県立県民文化センター)
- (47) 宮内敦;「最密充填格子上の格子ボルツマンモデル」第32回数値流体力学シンポジウム(2018年12月、機械振興会館)
- (48) 吉澤加奈子;「HPCIシステムにプリインストールされたアプリケーションソフトウェア」重点課題5シンポジウム(2018年12月、北海道大学)
- (49) 井戸康太、笠松秀輔、加藤岳生、川島直輝、藤堂眞治、三澤貴宏、本山裕一、吉澤加奈子;「物質科学シミュレーションのポータルサイトMateriAppsの紹介」第4回CDMSI(ポスト「京」重点課題(7))シンポジウム(2018年12月、東京大学)
- (50) 吉澤加奈子;「材料系アプリケーションとその利用について」第7回材料系ワークショップ(2019年2月、秋葉原UDX)