

平成28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28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「量研機構」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整備・運用を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）の最終年度事業として行い、同計画を当初計画どおり実施し終えた。

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「理研AICS」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）の考え方にに基づき、その維持、改善を継続的に進めた。

平成28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29年4月より利用を開始する第1回目の選定を実施した。第1回目の募集には96件の応募があり、通年課題として45課題、半年課題として22課題を選定した。

また、平成29年10月から利用が開始される第2回目の課題募集を3月より開始した。

- ②成果創出・加速課題について、6件の応募課題から3課題を選定し、計500万ノード時間の資源を配分した。
- ③随時募集課題について、個別利用課題（有償・成果非公開）15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（うち1件は平成29年5月利用開始予定）。
- ④国の施策として実施する重点化促進課題については平成28年度の利用はなかった。また、平成28年度のポスト「京」研究開発枠萌芽的課題として22件の選定プロセスを審査・確認した。
- ⑤平成29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26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計算資源を用い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28年度末で通算4,995件（内、査読付き論文数は774件）に達した。
- ②平成27年度に実施したHPCI利用研究課題の利用報告書（193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（DL）数は平成26年7月の統計データ取得開始以降、平成28年度末で通算37,190件に

達し（年間DL数では平成27年度の12,210件から平成28年度は16,487件に増加）、成果の公表・普及が更に進展した。

- 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17編の論文が掲載され、全体のDL数は1,490回、うちDL数トップ論文のDL数は267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. 14～17、成果事例集Ⅳ、成果事例集Ⅲ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、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22課題（うち、産業利用11課題）について実施した。
- ③国の資産としてのプログラムの活用、及びスパコンの新しい利用分野の開拓等を目指したプログラム利用環境整備計画を、海外派遣調査を含む国内外の調査と有識者による議論に基づき策定した。平成29年度から具体的整備作業に着手する予定である。
- ④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を行った。

- ⑤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、一般社団法人日本自動車工業会との共同研究契約の下、FX10を用いて2本のソフトウェアを移植し、「京」上で利用可能な産業応用ソフトウェアを拡充した。

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3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6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、ポスト「京」研究開発枠重点課題実施機関との共催によるスキルアップ研修会を29回実施した。講習会等への参加者は延べ776名で、その内企業参加者は約1/2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、ISC16 (平成28年7月、独国フランクフルト)、SC16 (平成28年11月、米国ソルトレイクシティ)に出展し、海外向けに情報提供、情報発信を行った。

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28年10月、東京)を開催し、272名の参加を得て、異分野間の研究者交流の場とした。

また、理研AICSと共同で講演会「京×産業シンポジウム～つながりが未来をひらく～」(平成28年9月、東京)を主催した。産業界からのニーズの高いLAMMPSやOpenFOAM等のOSSを対象としたワークショップ (平成28年10月、12月、平成29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。「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3回)～最先端電池材料～」(平成28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)、ポスト「京」研究開発枠重点課題「エネルギーの高効率な創出、変換・貯蔵、利用の新規基盤技術の開発」と共同開催した。前回に比べて、参加者総数や企業からの参加者が更に増加し、登録施設連携利用の有効性が着実に認識されてきた。

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」(平成28年11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スパコンセミナー「未来へ続くスパコンの挑戦」(平成28年10月、神戸)を共催した。

- ⑤PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe) とのMOUに基づくPRACE-RIST間の情報交換会合 (第3回) を平成28年10月に開催した。双方の事業内容、今後の計画等に関する有意義な情報交換を実施した。

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MOU締結に関する調整が完了した。

- ⑥アジアとの国際協力の一環として、情報交換と将来の連携のため、平成28年6月にNSCC (シンガポール国立スパコンセンター) とMOUを締結した。平成28年10月、MOUに基づく第1回の情報交換会を日本で、平成29年3月に第2回をシンガポールで開催した。

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、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の使用済燃料輸送及び貯蔵に係る遮蔽解析の高度化を目的として、Weight Windowパラメータの自動生成機能の高度化を実施した。

② PHITS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、放射線治療装置の放射化評価等を実施した。

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 量研機構の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、非線形安定性解析、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、最新のアーキテクチャであるメニーコアマシンへの最適化等を実施した。

- (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/海水淡水化等に应用する革新的ナノ炭素逆浸透膜の透水性、脱塩性、耐ファウリング性、耐塩素性などの膜性能に関

わる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。
- ③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。
- ④「京」産業利用課題（トライアル・ユース）の枠組みを活用した企業との共同研究として、カーボンナノチューブの新規成長法の基礎メカニズム解明のための物性シミュレーションを実施した。また、産業界との実践的なシミュレーションとして、「水中の微細気泡の洗浄効果に関わるシミュレーション」、「鉄鋼材料の水素侵入に関わるシミュレーション」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な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、PD・PO会議及び課題ごとのPO主催の推進委員会の開催、外部有識者による課題の事後評価と成果の公表等を行った。
- ③スーパーコンピュータ開発公募事業では、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等を実施した。
- ④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

原子力機構及び量研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、量研機構が運用中のスーパーコンピュータ「ヘリオス」のユーザ支援等を実施した。

- (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29年度研究課題として、155件の応募課題の中から69課題を選定した。なお、平成29年度から筑波大学計算科学研究センターと東京大学情報基盤センターが共同運営・管理する最先端共同HPC基盤施設(JCAHPC)が新たに資源を提供することとなり、HPCIの総計算資源量は2.4倍となった。

- ②HPCI運営事業の一環として平成29年度JHPCN公募型共同研究課題について、49件の応募課題の中から25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130名に利用された。アクセスポイント東京の個室利用については、効率的な利用を促進するため平成28年10月より有償化した。

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データベースから収集した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210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6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347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28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9件の追加と既存データ23件の更新を行った。また、用語辞書に登録されている用語について2件の追加と2件の更新を行った。なお、平成28年度におけるATOMICAサイトへのアクセス数は約5万3千件であった。

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28年7月及び平成29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」に関する講習会(平成28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 tech2017)(平成29年2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28年度における当該発表をⅢに示す。また、情報科学技術関連の研究に従事している若手大学院生2名に対し国際学会への参加を援助した。その他、日本原子力学会の「2016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った。

Ⅲ その他

1. 研究成果の発表

平成28年度の主な研究成果発表は以下のとおり。

- (1) T.Yamagishi, Y. Matsumura; “GPU Acceleration of a Non-hydrostatic Ocean Model with a Multigrid Poisson/Helmholtz Solver”, *Procedia Computer Science*, **80**(2016)1658-1669.
- (2) Rodolfo Cruz-Silva, Takumi Araki, Takuya Hayashi, Humberto Terrones, Mauricio Terrones, Morinobu Endo; “Fullerene and nanotube growth: new insights using first principles and molecular dynamics”, *Philosophical Transactions of the Royal Society A -Mathematical Physical and Engineering Sciences*, **374** (2016) 0327
- (3) Y. Iwamoto, T. Sato, S. Hashimoto, T. Ogawa, T. Furuta, S. Abe, T. Kai, N. Matsuda, R. Hosoyamada, K. Niita; “Benchmark study of the recent version of the PHITS code”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, **1-19** (2017)
- (4) H.Sawai, N. Nishimura, T. Takiwaki, S. Yamada; “R-Process Nucleosynthesis in Core-Collapse Supernovae Aided by Magnetorotational Instability”, *JPS Conf. Proc.* **14**(2017) 020618 .
- (5) N.Nishimura, H. Sawai, T. Takiwaki, S. Yamada, F.-K. Thielemann; “The Intermediate r-process in Core-collapse Supernovae Driven by the Magneto-rotational Instability”, *Astrophysical Journal Letters*, **836** (2017) L21.
- (6) T. Ogawa, T. Sato, S. Hashimoto, K. Niita; “Analysis of angular distribution of fragments in relativistic heavy-ion collisions by quantum molecular dynamics”, *EPJ Web of Conf.*, **117**, 03011 (2016)
- (7) T. Ogawa, S. Hashimoto, T. Sato, K. Niita; “Application of JAERI quantum molecular dynamics model for collisions of heavy nuclei”, *EPJ Web of Conferences*, **122**, 04005 (2016)
- (8) T. Yamagishi, Y. Matsumura; “GPU acceleration of a non-hydrostatic ocean model with a multigrid Poisson/Helmholtz solver”, *International Conference on Computational Science 2016 (San Diego, USA., June 2016)*.
- (9) M. Okuda; “Japanese HPCI, High Performance Computing Infrastructure, - Open to the Global HPC community -”, *ISC2016 HPC in Asia2 session (Frankfurt Germany, June 2016)*.

- (10) K. Yoshizawa, Y. Yoshimoto, S. Tsuneyuki; “First principles simulation by using GUI software TAPI-OCA and C-Tools”, International Symposium on New Horizons in Condensed Matter Physics (Tokyo Japan, June 2016).
- (11) Y. Ono, T. Yamasaki, J. Nara, T. Ohno; “First-principles molecular dynamics simulations for graphene growth mechanism on SiC surface-Growth process from 1D carbon chains to 2D graphene sheets”, Seventeenth International Conference on the Science and Application of Nanotubes and Low-Dimensional Materials - NT16 (Vienna Austria, August 2016)
- (12) T. Yamagishi, Y. Matsumura; “A fast GPU accelerated lagrangian particle tracking on a non-hydrostatic numerical ocean modelling”, GPU Technology Conference Japan 2016 (Tokyo Japan, October 2016).
- (13) H. Sawai; “Core-Collapse Supernovae Assisted by Magnetorotational Instability”, 2nd NAOJ-ECT* Workshop MRACCS2016 (Tokyo Japan, June 2016).
- (14) T. Yamagishi, Y. Matsumura; “GPU Acceleration of a Non-Hydrostatic Ocean Model with Lagrangian Particle Tracking”, Supercomputing Conference 2016 (Salt Lake City USA, November 2016).
- (15) K. Yoshizawa, Y. Yoshimoto and S. Tsuneyuki; “First principles electronic structure calculation by using DFT codes input support tool C-Tools”, 1st International Symposium on Research and Education of Computational Science (Tokyo Japan, November 2016).
- (16) Y. Ota, Y. Nagai, M. Machida; “Ginzburg-Landau equations in superconducting topological insulator doped Bi₂Se₃”, 10th International Conference on Computational Physics (Macau China, January 2017).
- (17) Y. Ota, M. Shiga; “Solvation and temperature effects on proton chemical shifts in anionic hetero-conjugated complexes”, International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics 2017 (Kobe Japan, January 2017).
- (18) D. Yamaki; “Difference density matrix analysis of epigenetic chemical modifications”, 57th Sanibel Symposium (St. Simons Island USA, February 2017).
- (19) H. Sawai; “Magnetically assisted explosions of weakly magnetized stars”, SN 1987A, 30 years later – Cosmic Rays and Nuclei from Supernovae and their aftermaths, IAU Symposium 331 (Reunion Island France, February 2017).
- (20) T. Yamagishi, Y. Matsumura; “Accelerating a Non-Hydrostatic Ocean Model with Lagrangian Particle Tracking using a GPU”, The 7th AICS International Symposium (Kobe Japan, February 2017).
- (21) M. Okuda; “Country report, Japan Update”, Supercomputing Frontiers 2017 (Singapore, March 2017).
- (22) H. Sawai; “Magnetohydrodynamic Simulations to reveal Supernovae Explosion Mechanism”, SCF2017

- (Singapore, March 2017).
- (23) 鳩野美佐子、芳村圭、荒川隆、山崎大、沖大幹；「高解像度河川氾濫過程の導入が大気大循環モデルの推計値に及ぼす影響」土木学会論文集B1（水工学）、72（4），2016
- (24) 太田幸宏、小久保達信；「京における倍々精度疎行列ベクトル積の性能に関する行列格納形式依存性」HPCI利用研究成果集 Vol. 1（2016）No. 2 p. 64.
- (25) 浅見 暁、井上 義昭、青柳 哲雄；「京」、HPCIにおける大規模並列化に向けたOpenFOAM高度化支援」RIST NEWS No. 61（2016年7月）3-13
- (26) 原山卓也、井上孝洋、手島正吾、村井均；「高性能並列プログラミング言語XcalableMPの紹介」RIST NEWS No. 62（2017年1月）21-29.
- (27) 木村晴行、平塚篤、渡辺一慶、佐藤正泰；「HPCI利用報告書のダウンロード分析に基づくHPCI利用研究成果の普及状況」RIST NEWS No. 61（2016年7月）27-40.
- (28) 太田幸宏；「計算化学を利用した分子構造のスクリーニング」RIST NEWS No. 62（2017年1月）11-20.
- (29) 吉澤香奈子、吉本芳英、常行真司；「第一原理計算GUI支援ソフトウェアTAPIOCAとC-Toolsの開発」物性研究所スパコン共同利用・CCMS合同研究会（2016年4月、東京大学）
- (30) 山岸孝輝、井上孝洋、坪木和久；「雲解像モデルCReSS雲物理過程のGPUへの適用性について」2016年度日本気象学会春季大会（2016年5月、国立オリンピック記念青少年総合センター）
- (31) 富山栄治；「LAMMPS素人ユーザー向けのお手軽「京」利用入門」第2回LAMMPS利用入門セミナー（2016年5月、名古屋大学）
- (32) 富山栄治；「HPCI、「京」の公募課題と書面ポイントの紹介」第2回LAMMPS利用入門セミナー（2016年5月、名古屋大学）
- (33) 富山栄治；「LAMMPS素人ユーザー向けのお手軽「京」利用入門」第2回高分子材料系LAMMPS大規模計算の活用入門セミナー（2016年6月、グランフロント大阪）
- (34) 吉澤香奈子、吉本芳英、常行真司；「DFTコードに対するGUI支援ツールC-Toolsを用いた第一原理シミュレーション」第1回ポスト「京」重点課題（7）研究会（2016年7月、東京大学）
- (35) 吉澤香奈子、吉本芳英、常行真司；「GUI支援ツールC-Toolsによる第一原理シミュレーションの自動セットアップ」第2回ポスト「京」重点課題（7）研究会（2016年7月、東京大学）
- (36) 富山栄治；「プロファイラ等を利用したベンチマーク評価」高分子材料系LAMMPS大規模計算の活用入門セミナー<第3回目>（2016年7月、グランフロント大阪）
- (37) 富山栄治；「RISTの利用支援の紹介」高分子材料系LAMMPS大規模計算の活用入門セミナー<第3回目>（2016年7月、グランフロント大阪）
- (38) 吉澤香奈子、岩崎誉志紀、合田義弘、常行真司；「ルチルTiO₂中の不純物水素の電子状態と超微細構造」超低速ミュオンが拓く科学シンポジウム（2016年8月、いばらき量子ビーム研究センター）
- (39) K. Yoshizawa, Y. Yoshimoto, S. Tsuneyuki; "Computational science simulation by DFT input support tool C-Tools", "TIAかけはし" ポスター交流会～計算科学・計測技術・インフォマティクスの融合によるインテリジェント解析～（2016年8月、エポカルつくば）

- (40) 富山栄治：「OpenMPの実習体験」高分子材料系LAMMPS大規模計算の活用入門セミナー<第4回目> (2016年8月、グランフロント大阪)
- (41) 富山栄治：「HPCIや「京」の申請に向けた性能データ取得」高分子材料系LAMMPS大規模計算の活用入門セミナー<第4回目> (2016年8月、グランフロント大阪)
- (42) 富山栄治：「動作確認とプロファイル取得」高分子材料系LAMMPS大規模計算の活用入門セミナー<第4回目> (2016年8月、グランフロント大阪)
- (43) 仁井田浩二；「核反応学とシミュレーション」日本物理学会2016年秋季大会 (2016年9月、宮崎)
- (44) 澤井秀朋；「重力崩壊型超新星の高解像度磁気流体シミュレーション」日本天文学会秋季年会 (2016年9月、愛媛大学)
- (45) 荒川隆、鳩野美佐子、芳村圭；「大気-河川モデル連成計算の性能評価」第15回情報科学技術フォーラム (2016年9月、富山大学)
- (46) 塩原紀行；「HPCIにおける産業利用と連携利用の現状」第3回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 (2016年9月、秋葉原UDX)
- (47) 吉澤香奈子；「「京」HPCIにおけるLAMMPS活用と課題募集、利用支援の紹介」第65期第1回日本材料学会分子動力学部門委員会 (2016年9月、東京大学)
- (48) 山木大輔；「分子間相互作用による電子状態変化の差密度行列解析」第10回分子討論会 (2016年9月、神戸ファッションマート)
- (49) 太田幸宏、志賀基之；「水素結合を含む複合体[A--H--X]-における核磁気共鳴化学シフトに対する溶媒・温度効果」シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア」 (2016年9月、京都教育文化センター)
- (50) 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 (Simulation Study of Macroscopic Transmutation Processes of Long-lived FPs in the Targets)」5th International Conference on Asian Nuclear Prospects 2016 (2016年10月、仙台)
- (51) 木村晴行；“Status on Publication and Dissemination of HPCI Research Achievements”、第3回「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題成果報告会 (2016年10月、東京)
- (52) 新宮哲；「「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題の募集案内」第2回材料系ワークショップ (2016年10月、秋葉原UDX)
- (53) 吉澤香奈子；「材料系アプリケーションの紹介：利用環境と支援体制」第2回材料系ワークショップ (2016年10月、秋葉原UDX)
- (54) 吉澤香奈子；「LAMMPSのexample例の実施」LAMMPSの基礎的利用セミナー (2016年10月、計算科学振興財団)
- (55) 富山栄治；「LAMMPSの大規模計算体験」LAMMPSの基礎的利用セミナー (2016年10月、計算科学振興財団)
- (56) 仁井田浩二；「核変換シミュレーション」2016年度核データ研究会 (2016年11月、高エネルギー加速器研究機構)
- (57) 原山卓也、井上孝洋、手島正吾；「XcalableMPによるFiberミニアプリ集の実装と評価」第4回XcalableMPワークショップ (2016年11月、秋葉原UDX)
- (58) 澤井秀朋；「弱磁場・低速回転を伴う星の重力崩壊シミュレーション」国立天文台天文シミュレーションプロジェクト平成28年度ユーザーズミーティング (2016年11月、国立天文台)

- (59) 荒木拓海；「可視化を媒介とした実験とシミュレーションの連携～革新的カーボン素材創生に向けて～」第22回ビジュアライゼーションカンファレンス(2016年11月、タイム24ビル (お台場))
- (60) 新宮哲；「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題の募集案内」第4回OpenFOAMワークショップ(2016年12月、秋葉原UDX)
- (61) 浅見暁、井上義昭；「京」、HPCIでの移植状況・支援内容」第4回OpenFOAMワークショップ(2016年12月、秋葉原UDX)
- (62) 吉澤香奈子；「架橋ゴムの応力ひずみ関係の評価」LAMMPSでの仮想実験セミナー(2016年12月、計算科学振興財団)
- (63) 富山栄治；「LAMMPSの大規模計算体験」LAMMPSの基礎的利用セミナー(2016年12月、計算科学振興財団)
- (64) 富山栄治；「高分子鎖の自己拡散係数と緩和時間の評価」LAMMPSでの仮想実験セミナー(2016年12月、計算科学振興財団)
- (65) 太田幸宏、志賀基之；「水素結合を含んだアニオンのヘテロ型複合体における核磁気共鳴化学シフトの溶媒・温度効果」第30回分子シミュレーション討論会(2016年12月、大阪大学)
- (66) 富山栄治、宮内敦；「京」を中核とする革新的高性能計算環境(HPCI)の利用支援におけるRISTの活動について」AXIES大学ICT推進協議会2016年度年次大会(2016年12月、国立京都国際会館)
- (67) 三輪将彦、仙波和樹、佐野広征、山田隆、砂山良彦、志澤由久、浅見暁、新宮哲；「京コンピュータを用いた大規模電磁界解析の高並列計算の検討」電気学会産業応用部門(D部門)静止器/回転機合同研究会(2017年1月、法政大学小金井キャンパス)
- (68) 新宮哲；「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題の募集案内」第3回材料系ワークショップ(2017年2月、秋葉原UDX)
- (69) 吉澤香奈子；「第一原理アプリケーションの紹介：利用環境と支援体制および、GUI支援ツールについて」第3回材料系ワークショップ(2017年2月、秋葉原UDX)
- (70) 山本秀喜；「HPCIのご紹介と利用支援への取り組み」第4回高速化ワークショップ(2017年3月、秋葉原UDX)
- (71) Gilles Gouillardet；「Introduction to tuning on many core platforms」第4回高速化ワークショップ(2017年3月、秋葉原UDX)
- (72) 山岸孝輝、松村義正；「非静力学海洋モデルkinacoのGPUによる高速化」第4回高速化ワークショップ(2017年3月、秋葉原UDX)
- (73) 吉澤香奈子、志澤由久；「京」におけるQuantum ESPRESSO PWscf (v5.4.0)の性能評価と高速化」第4回高速化ワークショップ(2017年3月、秋葉原UDX)
- (74) 吉澤香奈子、岩崎誉志紀、合田義弘、常行真司；「ルチルTiO₂の酸素欠陥と複数の不純物水素」日本物理学会第72回年次大会(2017年3月、大阪大学)
- (75) 吉澤香奈子；「理論計算の最近の結果から」MLF利用者懇談回主催・半導体分科会研究討論会「酸化チタンの中のミュオンの状態」(2017年3月、東京大学)