



Title	センター報告 サイバーメディアHPCジャーナル No.1
Author(s)	
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2011, 1, p. 51-82
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/70450
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

センター報告

・2010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	53
・第17回スーパーコンピューティング・コンテスト (SuperCon2011)	70
・2011年度大規模計算機システム利用講習会	71
・「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	72
・「大規模計算機システムにおける企業利用」の活動状況	73
・2011年度大規模計算機システム利用相談員・指導員	75
・大規模計算機システムFAQ	79

2010 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 2010 年 4 月から 2011 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] Hajime Yoshino, Tomoaki Nogawa and Bongsoo Kim: From the Frenkel-Kontorova model to Josephson junction arrays - the Aubry's transition as a jamming-glass transition, Prog. Theor. Phys., Supplement No. 184, 153, 2010 年.
- [2] Hajime Yoshino and Marc Mezard: Emergence of rigidity at the structural glass transition: a first principle computation, Physical Review Letters, 105, 015504, 2010 年 7 月.
- [3] Hajime Yoshino, Tomoaki Nogawa and Bongsoo Kim: Vortex solid phase with frozen undulations in superconducting Josephson-junction arrays in external magnetic fields, Physical Review Letters, 105, 257004, 2010 年 12 月.
- [4] Tanaka, T., A. Nakamizo, A. Yoshikawa, S. Fujita, H. Shinagawa, H. Shimazu, T. Kikuchi, K. K. Hashimoto: Substorm convection and current system deduced from the global simulation, J. Geophys. Res., 115, doi:10.1029/2009JA014676, 2010 年.
- [5] Yoshikawa, A., H. Nakata, A. Nakamizo, T. Uozumi, M. Itonaga, S. Fujita, K. Yumoto, T. Tanaka: Alfvenic-coupling algorithm for global and dynamical magnetosphere-ionosphere coupled system, J. Geophys. Res., 115, doi:10.1029/2009JA014924, 2010 年.
- [6] Fujita, S., T. Kikuchi, and T. Tanaka: Formation of the overshielding potential in the magnetosphere-ionosphere compound system during a northward turn of the interplanetary magnetic field revealed from a global MHD simulation, J. Geophys. Res., 115, 2010 年.
- [7] Nishimura, Y., T. Kikuchi, A. Shinbori, J. Wygant, Y. Tsuji, T. Hori, T. Ono, S. Fujita, and T. Tanaka: Direct measurements of the Poynting flux associated with convection electric fields in the magnetosphere, J. Geophys. Res., 2010 年.
- [8] Fujita, S.: The Global MHD Magnetosphere Simulation and Prospect for the Space Weather Prediction, NICT Journal, 2010 年.
- [9] Fujita, S., T. Tanaka and T. Motoba: Long-period ULF waves driven by periodic solar wind disturbances, The Dynamic Magnetosphere, 2011 年.
- [10] Hiroyuki Okamoto, Kenzo Yamaguchi, Ken-ichiro Nakamatsu, Hidenori Sogabe, Shinji Matsui, Masanobu Haraguchi, Toshihiro Okamoto, and Masuo Fukui: Fabrication of Organic Spin-on-Glass Microring Resonator with a Narrow Gap between a Microring Resonator and a Waveguide Using Nanoimprint Lithography, Jpn. J. Appl. Phys., 49, 7, 072502, 2010 年 7 月.
- [11] Hiroyuki Okamoto, Kenzo Yamaguchi, Masanobu Haraguchi, and Toshihiro Okamoto: Plasmonic Racetrack Resonator for Application to Photonic Integrated Circuits at Sub-Wavelength, Journal of Nonlinear Optical Physics & Materials, 19, 4, 583-588, 2010 年 12 月.
- [12] 犬塚修一郎, 町田正博, 松本倫明: Emergence of Protoplanetary Disks and Successive Formation of Gaseous Planets by Gravitational Instability, The Astrophysical Journal Letters, Vol. 718, 2, pp. 58-72, 2010 年 8 月.
- [13] 町田正博, 犬塚修一郎, 松本倫明: Emergence of Protoplanetary Disks and Successive Formation of Gaseous Planets by Gravitational Instability, The Astrophysical Journal, Vol. 724, 2, pp. 1006-1020, 2010 年 12 月.
- [14] 町田正博, 犬塚修一郎, 松本倫明: ecurrent Planet Formation and Intermittent Protostellar Outflows Induced by Episodic Mass Accretion, he Astrophysical Journal, Vol. 729, 1, pp. 42-59, 2011 年 3 月.
- [15] Nabuhiko Suzuki, Toru Sato, Tsung-Shung Harry Lee: Extraction of electromagnetic transition form factors for nucleon resonances with a dynamical coupled-channel model, Physical Review, Vol.

- [16] Yoshiyuki Egami, Kikuji Hirose, Tomoya Ono: Time-saving first-principles calculation method for electron transport between jellium electrodes, *Phys. Rev. E*, 82, 5, 056706, 2010 年 11 月.
- [17] Yoshiyuki Egami, Keita Yamada: First-principles study on quantum-transport properties of single molecule depending on adsorption conditions, *Computer Physics Communications*, 182, 1, 103-105, 2011 年 1 月.
- [18] 池田浩人, 森脇英恵, 湯川美穂, 岩瀬由紀子, 安藝初美: 抗精神病薬リスペリドンと茶葉カテキンとの相互作用メカニズム (1)エピガロカテキンガレートとの不溶性複合体形成, *YAKUGAKU ZASSHI*, 130, 11, 1589-1595, 2010 年 11 月.
- [19] Takayuki Yamada, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, Nobuyuki Tsuboi, Venkat E. Tangirala and Toshi Fujiwara: Detonation Limit Thresholds in H_2/O_2 Rotating Detonation Engine, *Combustion Science and Technology*, Vol.182, Issue 11&12, 1901-1914, 2010 年 1 月.
- [20] Kengo Tomida, Masahiro N. Machida, Kazuya Saigo, Kohji Tomisaka, Tomoaki Matsumoto: Exposed Long-lifetime First Core: A New Model of First Cores Based on Radiation Hydrodynamics, *The Astrophysical Journal Letters*, 725, L239-L244, 2010 年 12 月.
- [21] Haraguchi R, Ashihara T, Namba T, Tsumoto K, Murakami S, Kurachi Y, Ikeda T, Nakazawa K, Transmural Dispersion of Repolarization Determines Scroll Wave Behavior During Ventricular Tachyarrhythmias - A Simulation Study -, *Circ J*, Vol. 75, No. 1, pp. 80-88 (2011).
- [22] Yu Takano, Haruki Nakamura: "Electronic structures of heme a of cytochrome c oxidase in the redox states-Roles of Propionate and Formyl Groups in Electron Transfer-", *Journal of Computational Chemistry*, Vol. 31, Issue 5, pp. 954-962, Apr. 2010.
- [23] Kenichi Koizumi, Mitsuo Shoji, Kizashi Yamaguchi, Haruki Nakamura, Yu Takano: "Theoretical studies on electronic structure and magnetic properties of mixed-valence uteroferrin active site, " *International Journal of Quantum Chemistry*, Vol 111, Issue 3, pp. 702-710, Mar.
- [24] Yu Takano, Yasushige Yonezawa, Yuichi Fujita, Genji Kurisu, Haruki Nakamura: " Electronic structures of the $[4Fe-4S]$ cluster in dark-operative protochlorophyllide oxidoreductase (DPOR), " *Chemical Physics Letters*, Vol. 503, Issues 4-6, pp.296-300, Feb. 2011.
- [25] Hong-bo Cai, Kunioki Mima, Tomoyuki Jozaki, Hideo Nagatomo, Atsushi Sunahara, Wei-min Zhou, Rodney J. Mason: "Collimation of relativistic laser-generated high energy electron beams via double cone target in fast ignition scheme", *Journal of Physics, Conference Series* 244, 022030, Oct.2010.
- [26] Akito SAGISAKA, Alexander S. PIROZHKOV, Michiaki MORI, Akifumi YOGO, Koichi OGURA, Satoshi ORIMO, Mamiko NISHIUCHI, Jinglong MA, Hiromitsu KIRIYAMA, Shuhei KANAZAWA, Shuji KONDO, Yoshiki NAKAI, Takuya SHIMOMURA, Manabu TANOUE, Atsushi AKUTSU, Hajime OKADA, Tomohiro MOTOMURA, Hiroyuki DAIDO, Kiminori KONDO, Sergei V. BULANOV, Timur Zh. ESIRKEPOV, Shigeki NASHIMA, Makoto HOSODA, Hideo NAGATOMO, Yuji OISHI, Koshichi NEMOTO, Il Woo CHOI, Seong Ku LEE, Jongmin LEE: "Proton Generation and Terahertz Radiation from A Thin-Foil Target with A High-Intensity Laser", *The Review of Laser Engineering*, Vol.39, No.9, Sep.2010.
- [27] 木村友亮、尾崎典雅、奥地拓生、佐野孝好、清水克哉、宮西宏併、遠藤恭、實井辰也、曾田智史、佐野智一、寺井智之、廣瀬明夫、掛下知行、坂和洋一、兒玉了祐: "高強度レーザー衝撃圧縮を用いたメガバール領域における水の状態方程式計測", *日本惑星科学会誌 遊星人*, vol. 20, pp. 36-41, Mar.2011.
- [28] Atsushi Sunahara, Hongbo Cai, Tomoyuki Jozaki, Hideo Nagatomo, and Kunioki Mima: "EFFECTS OF PRE-FORMED PLASMA INSIDE A GUIDING CONE IN FAST IGNITION SCHEME", *Journal of Physics, Conference Series* 244, 022079, Oct.2010.
- [29] H. Nagatomo, T. Jozaki, A. Sunahara, H. Shiraga, H. Sakagami, H. Cai, K. Mima: "Controlling dynamics of imploded core plasma for fast ignition", *Journal of Physics*, 224, 022050,

Oct.2010.

- [30] T. Sano, N. Ozaki, T. Sakaiya, K. Shigemori, M. Ikoma, T. Kimura, K. Miyaniishi, T. Endo, A. Shiroshita, H. Takahashi, T. Jitsui, Y. Hori, Y. Hironaka, A. Iwamoto, T. Kadono, M. Nakai, T. Okuchi, K. Otani, K. Shimizu, T. Kondo, R. Kodama, K. Mima: "Laser-Shock Compression and Hugoniot Measurements of Liquid Hydrogen to 55 GPa", *Physical Review B*, vol. 83, 054117, 7 pp., Feb.2011.
- [31] 佐藤義永, 永岡龍一, 撫佐昭裕, 江川隆輔, 滝沢寛之, 岡部公起, 小林広明: "ルーフラインモデルに基づくベクトルプロセッサ向けプログラム最適化戦略," *情報処理学会論文誌 コンピューティングシステム*, Vol.4, No.3, pp.1-11, May 2011.
- [32] 田中 敏嗣, 辻 拓也: "流動層 DEM-CFD シミュレーションの大規模化と高分解能化," *粉体と工業*, Vol.2, No.12, pp.29-34, Dec.2010.
- [33] Nghiem Thi Minh Hoa, Emi Minamitani, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, "Kondo Effect in the Systems of Magnetic Trimers on a Metal Surface", *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol.79, pp.113706, Nov.2010.
- [34] Emi Minamitani, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, "Effect of antiferromagnetic RKKY interaction and magnetic field in a two-impurity Kondo system", *Physical Review B*, Vol.82, pp.153203, Oct.2010.
- [35] Emi Minamitani, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, "Scanning tunneling spectroscopic evidence of crossover transition in the two-impurity Kondo problem", *Surface Science*, Vol.604, pp.2139, Sep.2010.
- [36] Susan Aspera, Melanie David, Hideaki Kasai, "First principles study of the Adsorption of Water Molecule on Tri-s-triazine based Graphitic Carbon Nitride ($g-C_3N_4$)", *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol.49, pp.115703, Nov.2010.
- [37] Tien Quang Nguyen, Mary Clare Escaño, Hideaki Kasai, "Nitric Oxide adsorption effects on metal phthalocyanines", *Journal of Physical Chemistry B*, Vol.114, pp.10017, Jul.2010.
- [38] Allan Abraham B. Padama, Mary Clare S. Escaño, Melanie Y. David, Hideaki Kasai, Hiroyuki Kawai, "First principles investigation for H_2 dissociative adsorption on Ni and Cr-decorated Ni surfaces - An application to alkaline polymer electrolyte fuel cell", *e-Journal of Surface Science and Nanotechnology*, Vol.8, pp.325, Jun.2010.
- [39] Nghiem Thi Minh Hoa, Emi Minamitani, Wilson Agerico Diño, Bach Thanh Cong, Hideaki Kasai, "Effect of RKKY Interaction on the System of Two Magnetic Atoms on a Metal Surface at Finite Temperatures", *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol.79, pp.074702, Jun.2010.
- [40] Hermawan Kresno Dipojono, Adhitya Gandaryus Saputro, Susan Menez Aspera, Hideaki Kasai, "Density functional theory study on the interaction of O_2 molecule with Cobalt-(6)Pyrrole clusters", *Japanese Journal of Applied Physics*, accepted.
- [41] Triati Dewi Kencana Wungu, Wilson Agerico Diño, Hermawan Kresno Dipojono, Hideaki Kasai, "Effect of Lithium Absorption at Tetrahedral Site and Isomorphic Substitution on Montmorillonite Properties: A Density Functional Theory Study", *Japanese Journal of Applied Physics*, accepted.
- [42] Mary Clare Escaño, Tien Quang Nguyen, Hideaki Kasai, "Molecular and electronic tuning of Si/CNT hybrid system", *Japanese Journal of Applied Physics*, accepted.
- [43] Handoko Setyo Kuncoro, Mamoru Sakaue, Hiroshi Nakanishi, Hermawan Kresno Dipojono, Hideaki Kasai, "First-principles Investigation on Ionization Strength, Volume Expansion, and Water Rotational Rigidity of Small Water Cluster Systems Formed around Sodium(I), Calcium(II), and Iron(II) Ions", *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol.80, pp.024601, Jan.2011.
- [44] Do Ngoc Son, Bach Thanh Cong, and Hideaki Kasai, "Hydronium Adsorption on OOH Precovered $Pt(111)$ Surface: Effects of Electrode Potentiale", *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, Vol.11, pp.2983, Apr.2011.
- [45] Mary Clare Escaño, Elod Gyenge, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, " Pt/Cr and Pt/Ni catalysts for oxygen reduction reaction: To alloy or not to alloy?", *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, Vol.11, pp.2944, Apr.2011.
- [46] Triati Dewi Kencana Wungu, Susan Menez Aspera,

- Melanie Yadao David, Hermawan Kresno Dipojono, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, "Absorption of Lithium in Montmorillonite: A Density Functional Theory (DFT) Study", *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, Vol.11, pp.2793, Apr.2011.
- [47] Ferensa Oemry, Mary Clare Escaño, Hirofumi Kishi, Shinichi Kunikata, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Hiroyoshi Maekawa, Kazuo Osumi, Yoshihisa Tashiro, "Nitrogen Monoxide Adsorption on Pt_4 Clusters Coated on γAl_2O_3 (111) Surface", *Journal of Nanoscience and Nanotechnology*, Vol.11, pp.2844, Apr. 2011.
- [48] 白川真澄, 中山浩太郎, 荒牧英治, 原隆浩, 西尾章治郎: WikipediaとWebの情報を組み合わせたオントロジ構築の試み, 電子情報通信学会と文論文誌 D, Vol. J94-D, No. 3, pp. 525-539, Mar. 2011.
- [49] M. Ishikawa, M. Katsura, S. Nakashima, K. Aizawa, T. Inoue, Y. Ikemoto and H. Okamura, "Application of a Modulating Technique to Detect Near-Field Signals Using a Conventional IR Spectrometer with a Ceramic Light Source," *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* 9, 40-45, (2011).
- [50] Y. Ikemoto, T. Moriwaki, T. Kinoshita, M. Ishikawa, S. Nakashima, H. Okamura, "Near-Field Spectroscopy with Infrared Synchrotron Radiation Source," *e-J. Surf. Sci. Nanotech.* (to be published).
- [51] D.X. Viet and H. Kawamura, "Monte Carlo studies of the ordering of the one-dimensional Heisenberg spin glass with long-range power-law interactions", *J. Phys. Soc. Jpn.*, 79(10), 104708-(1-14), (2010).
- [52] T. Okubo and H. Kawamura, "Signature of a Z_2 vortex in the dynamical correlations of the triangular-lattice Heisenberg antiferromagnet" *J. Phys. Soc. Jpn.*, 79(8), 084706-(1-6), (2010).
- [53] S. Okumura, H. Kawamura, T. Okubo and Y. Motome, "Novel spin-liquid states in the frustrated Heisenberg antiferromagnet on the honeycomb lattice", *J. Phys. Soc. Jpn.*, 79(11), 114705-(1-7), (2010).
- [54] R.N. Mondal, Md. S. Uddin, S. Yanase: Numerical Prediction of Non-Isothermal Flow Through a Curved Square Duct, *International Journal of Fluid Mechanics Research*, Vol.37, No.1, pp.85-99, 2010.
- [55] K. Toyoda, I. Hamada, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa, "Origin of Surface-Band Dispersion at the Pentacene/*Cu* Interface", *Appl. Phys. Express*, 3, 025701-1-3 (2010).
- [56] T. Kumagai, M. Kaizu, H. Okuyama, S. Hatta, T. Aruga, I. Hamada, and Y. Morikawa, "Symmetric hydrogen bond in a water-hydroxyl complex on *Cu* (110)", *Phys. Rev. B* 81, 045402-1-5 (2010).
- [57] M. Sogo, Y. Sakamoto, M. Aoki, S. Masuda, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa, " C_{60} adsorbed on platinum surface: An excellent mediator of metal wave function", *J. Phys. Chem. C* 114, 3504-3506, (2010).
- [58] K. Okazaki-Maeda, Y. Morikawa, S. Tanaka, and M. Kohyama, "Structures of *Pt* clusters on graphene by first-principles calculations", *Surf. Sci.* 604, 144-154, (2010).
- [59] T. Nakamura, K. Miyajima, N. Hirata, T. Matsumoto, Y. Morikawa, H. Tada, and A. Nakajima, "Electronic structure of hydrogen-terminated silicon surfaces [*H-Si* (111)] studied by two-photon photoemission", *Appl. Phys. A* 98, 735-743, (2010).
- [60] I. Hamada, K.H. Lee, and Y. Morikawa, "Interaction of water with a metal surface: Insight from the van der Waals density functional", *Phys. Rev. B*, 81, 115452-1-6, (2010).
- [61] K. Toyoda, I. Hamada, K.-H. Lee, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa, "Density Functional Theoretical Study of Pentacene/Noble Metal Interfaces with van der Waals Corrections: Vacuum Level Shifts and Electronic Structures", *J. Chem. Phys.*, 132, 134703-1-9, (2010).
- [62] H.-J. Shin, J. Jung, K. Motobayashi, S. Yanagisawa, Y. Morikawa, Y. Kim, and M. Kawai, "State-selective dissociation of a single water molecule on an ultrathin *MgO* film", *Nature Materials*, 9, 442-447, (2010).
- [63] J. Brede, N. Atodiresei, S. Kuck, P. Lazic, V. Caciuc, Y. Morikawa, G. Hoffmann, S. Blugel, and R. Wiesendanger, "Spin- and Energy-Dependent Tunneling through a Single Molecule with

- Intramolecular Spatial Resolution”, *Phys. Rev. Lett.*, 105, 047204-1-4, (2010).
- [64] T. Taniike, M. Tada, R. Coquet, Y. Morikawa, T. Sasaki, Y. Iwasawa, “A novel mechanism for spectator *CO*-mediated reaction with unique *cis-(NO)₂* dimer on a *Co₂*+dimer/g-*Al₂O₃*(110) model catalyst: Density functional theory calculations”, *Catal. Today*, 154, 118-126, (2010).
- [65] S. Masuda, T. Kamada, K. Sasaki, M. Aoki, and Y. Morikawa, “Chemisorption-induced gap state at organic-metal interface: Benzenethiol on *Pt*(111)”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 12, 10914-10918, (2010).
- [66] K. Lee, Y. Morikawa, and D. C. Langreth, “Adsorption of n-butane on *Cu*(100), *Cu*(111), *Au*(111) and *Pt*(111): Van der Waals density-functional study”, *Phys. Rev. B* 82, 155461-1-6, (2010).
- [67] K. Toyoda, I. Hamada, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa, “Density-functional theoretical study of fluorination effect on organic/metal interfaces”, *Organic Electronics*, 12, 295-299, (2011).
- [68] K. Toyoda, I. Hamada, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa, “Adsorption of Benzene on Noble Metal Surfaces Studied by Density Functional Theory with van der Waals Correction”, *J. Nanoscience and Nanotech.*, 11, 2836, (2011).
- [69] I. Hamada and Y. Morikawa, “A density-functional theory study of water on clean and hydrogen preadsorbed *Rh*(111) surfaces”, *J. Chem. Phys.*, 134, 154701, (2011).
- [70] S. Saita, A. Kadokura, N. Sato, S. Fujita, T. Tanaka, Y. Ebihara, S. Ohtani, G. Ueno, K. Murata, D. Matsuoka, A. Kitamoto, T. Higuchi: “Displacement of conjugate points during a substorm in a global MHD simulation”, *Journal of Geophysical Research*, doi:10.1029/2010JA016155, in press, accepted 6 April 2011.
- [71] Ebihara, Y., T. Sakanoi, K. Asamura, M. Hirahara, and M. F. Thomsen, Reimei observation of highly structured auroras caused by nonaccelerated electrons, *J. Geophys. Res.*, 115, A08320, doi:10.1029/2009JA015009, 2010.
- [72] Ebihara, Y., R. Kataoka, A. T. Weatherwax, and M. Yamauchi, Dayside proton aurora associated with magnetic impulse events: South Pole observations, *J. Geophys. Res.*, 115, A04301, doi:10.1029/2009JA014760, 2010.
- [73] Ebihara, Y., M.-C. Fok, T. J. Immel, and P. C. Brandt, Rapid decay of storm time ring current due to pitch angle scattering in curved field line, *J. Geophys. Res.*, 116, A03218, doi:10.1029/2010JA016000, 2011.
- [74] Kitamura, N., T. Nishimura, T. Ono, Y. Ebihara, N. Terada, A. Shinbori, A. Kumamoto, T. Abe, M. Yamada, S. Watanabe, A. Matsuoka, and A. Yau, Observations of very-low-energy (<10 eV) ion outflows dominated by *O⁺* ions in the region of enhanced electron density in the polar cap magnetosphere during geomagnetic storms, 115, A00J06, doi:10.1029/2009JA015601, 2010. (共著)
- [75] Kikuchi, T., Y. Ebihara, K. K. Hashimoto, R. Kataoka, T. Hori, S. Watari, and N. Nishitani, Penetration of the convection and overshielding electric fields to the equatorial ionosphere during a quasiperiodic DP 2 geomagnetic fluctuation event, *J. Geophys. Res.*, 115, A05209, doi:10.1029/2008JA.
- [76] 松中大介, 土井嘉治, 渋谷陽二, エピタキシャル成長における基板のひずみの効果に関する解析, *材料*, 59 巻・8 号・610-615 頁, 2010-AUG.
- [77] T. Tsuru, Y. Kaji, D. Matsunaka and Y. Shibutani, Incipient plasticity of twin and stable/unstable grain boundaries during nanoindentation in copper, *Physical Review B*, 82 巻・2 号・024101 頁, 2010-JUL.
- [78] Junyoung Park, Yoji Shibutani and Masato Wakeda, Enhancement of Plasticity of Highly Density-Fluctuated *Cu-Zr* Amorphous Alloy, *Materials Transactions*, 51 巻・9 号・1504-1509 頁, 2010-AUG.
- [79] T. Tsuru, Y. Shibutani, Y. Kaji, Nanoscale contact plasticity of crystalline metal: Experiment and analytical investigation via atomistic and discrete dislocation models, *Acta Materialia*, 58 巻・8 号・3096-3102 頁, 2010-MAY.
- [80] Kyoung-Won Park, Yoji Shibutani, Michael L.

- Falk, Byeong-Joo Lee and Jae-Chul Lee, Shear localization and the plasticity of bulk amorphous alloys, *Scripta Materialia*, 63 巻・2 号・231-234 頁, 2010-JUL.
- [81] M. Wakeda, Y. Shibutani, Icosahedral clustering with medium-range order and local elastic properties of amorphous metals, *Acta Materialia*, 58 巻・11 号・3963-3969 頁, 2010-JUN.
- [82] 田中展, 松尾幸哉, 渋谷陽二, ポアソン比にみられる 4 位節柔軟節構造体の非線形弾性変形挙動, 日本機械学会論文集(A 編), 76 巻・768 号・1025-1031 頁, 2010-AUG.
- [83] Tomohito Tsuru, Yoshiyuki Kaji and Yoji Shibutani, Minimum Energy Motion and Core Structure of Pure Edge and Screw Dislocations in Aluminum, *Journal of Computational Science and Technology*, 4 巻・3 号・185-193 頁, 2010-JUN.
- [84] 成瀬友博, 渋谷陽二, ボルト締結体の軸方向剛性と曲げ剛性の高精度化, 日本機械学会論文集(A 編), 76 巻・770 号・1234-1240 頁, 2010-OCT.
- [85] 成瀬友博, 渋谷陽二, ボルト締結体の曲げモーメント下における被締結体剛性の非線形特性, 日本機械学会論文集(A 編), 76 巻・771 号・1420-1428 頁, 2010-NOV.
- [86] Tomohiro Naruse and Yoji Shibutani, Equivalent Stiffness Evaluations of Clamped Plates in Bolted Joints under Loading, *Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering*, 4 巻・12 号・1791-1805 頁, 2010-DEC.
- [87] 古城直道、樋口誠宏、山口智実、杉本隆史、島田尚一、寺内俊太郎、松田茂敬、松森昇、尾倉秀一：“鋼の超仕上げにおけるダイヤモンド砥石の摩耗抑制”，日本機械学会論文集, C76, 763, pp.777-783, Mar. 2010.
- [88] 古城直道、樋口誠宏、山口智実、杉本隆史、島田尚一：“炭素拡散に基づくダイヤモンド工具の熱化学研磨”，日本機械学会論文集, C76, 764, pp.974-980, Apr. 2010.
- [89] N. FURUSHIRO, M. HIGUCHI, T. YAMAGUCHI, T. SUGIMOTO, N. MATSUMORI, H. OGURA, S. SHIMADA: “Development of Mechanochemical Diamond Stone Containing BaSO₄ Abrasive”, *Precision Engineering*, 34, 3, pp.419-424, Jul. 2010.
- [90] N. FURUSHIRO, H. TANAKA, M. HIGUCHI, T. YAMAGUCHI, S. SHIMADA: “Suppression Mechanism of Tool Wear by Phosphorous Addition in Diamond Turning of Electroless Nickel Deposits”, *Annals of the CIRP*, 59, 1, pp.105-108, Aug. 2010.
- [91] Y. Fujimoto and A. Oshiyama: “Atomic structures and energetics of 90° dislocation cores in *Ge* films on *Si*(001),” *Physical Review B*, Vol. 81, pp.205309-1-5, 2010.
- [92] S. Yanagisawa, I. Hamada, K. Lee, D. C. Langreth, and Y. Morikawa, "Adsorption of Alq₃ on *Mg*(001) surface: Role of chemical bonding, molecular distortion, and van der Waals interaction", *Physical Review B*, submitted (accepted for publication on Apr. 14, 2011).
- [93] K. Toyoda, I. Hamada, S. Yanagisawa, and Y. Morikawa, "Density-functional theoretical study of fluorination effect on organic/metal interfaces", *Organic Electronics*, Vol. 12, no. 2, pp. 295-299, Feb. 2011.
- [94] K. Toyoda, I. Hamada, K. Lee, S. Yanagisawa and Y. Morikawa, "Density functional theoretical study of pentacene/noble metal interfaces with van der Waals corrections: Vacuum level shifts and electronic structures", *Journal of Chemical Physics* Vol. 132, no. 13, 134703 (9 pages), Apr. 2010.
- [95] Horiuti K., Ozawa T., Multi-mode stretched spiral vortex and nonequilibrium energy spectrum in homogeneous shear flow turbulence, *Phys. Fluids*, American Institute of Physics, Vol. 23, No. 3, pp. 035107, Mar. 2011.

2 国際会議会議録掲載論文

- [1] Hideya Nakamura, Vijay Krishna, Ben Koopman, Brij Moudgil: Molecular Dynamics Study of Interactions of C₆₀ with Model Cell Membranes: Influence of Sterol Molecules, *Proc. of the World Congress on Particle Technology* 6, #HH10 00708, 2010 年 5 月.
- [2] Yasuyuki Koyama, Tatsuya Okuno, Toshihiro Okamoto and Masanobu Haraguchi: Simple coupler for the gap plasmon waveguide,

INTERNATIONAL CONFERENCE ON
NANOPHOTONICS, 2010 年 6 月.

- [3] Masanobu Haraguchi, Hidenori Sokabe, Masamichi Taniguchi, Tatsuya Okuno, Toshihiro Okamoto and Masuo Fukui: Optical resonator in gap Plasmon waveguide, SPIE Optics & Photonics, 2010 年 8 月.
- [4] Hidenori Sokabe, Tatsuya Okuno, Masanobu Haraguchi, Toshihiro Okamoto and Masuo Fukui: Compact wavelength selective filter in Gap plasmon waveguide, 11th International Conference on Near-field Nano Optics, Nanophotonics& Related Techniques, 2010 年 8 月.
- [5] Masanobu Haraguchi, Hidenori Sokabe, Tatsuya Okuno, Yousuke Matsuzaki and Toshihiro Okamoto: Gap plasmon waveguide, 3rd German-Japanese Seminar on Nanophotonics, 2010 年 9 月.
- [6] Hiroyuki Okamoto, Kenzo Yamaguchi, Masanobu Haraguchi, and Toshihiro Okamoto: Characteristics of plasmonic racetrack resonators, proceedings of the international conference on Nanophotonics2010, 239, 2010 年 6 月.
- [7] Hiroyuki Okamoto, Kenzo Yamaguchi, Masanobu Haraguchi, and Toshihiro Okamoto: Characteristics of racetrack shape resonators using Surface plasmon polaritons, 11th International conference on near-field optics nanophotonics and related techniques, 2010 年 9 月.
- [8] Daisuke Toma, Yoshiyuki Egami: First-principles study on electron-transport property of molecular chain depending on geometrical conformation, The 13th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN13), 2010 年 11 月.
- [9] Daisuke Toma, Yoshiyuki Egami: First-principles study on electron-transport properties of single-row phenyl chains, 5th International Meeting on Molecular Electronics (ElecMol'10), 2010 年 12 月.
- [10] Hiroto Kataoka, Tetsuro Tamura: Numerical prediction of the peak pressure distributions on square cylinder by LES, 13th International Conference on Wind Engineering, 投稿中, 2011 年 7 月.
- [11] Shigeru Ninagawa: Search for Computationally Universal Cellular Automata Guided by $1/f$ Noise," Proceedings of ALIFE XII, pp. 413 2011.
- [12] K Nozawa, T Tamura "LES one-way coupling of nested grids using scale similarity model", Proc. of the Seventh International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena, 2011/07.
- [13] M. Hata, H. Sakagami, A. Sunahara, T. Johzaki, and H. Nagatomo: "Effects of Preformed Plasma of CH Foam on Fast Electron Generation", Journal of Physics, Conference Series 244, 02203, Oct.2010.
- [14] T. Kimura, N. Ozaki, T. Okuchi, T. Mashimo, K. Miyanishi, T. Endo, T. Jitsui, A. Hirose, M. Ikoma, T. Kakeshita, Y. Sakawa, T. Sano, T. Sano, K. Shimizu, T. Terai, R. Kodama: "Static compression experiments for advanced coupling techniques of laser-driven dynamic compression and precompression target", Journal of Physics: Conference Series, vol. 215, 012152, Apr.2010.
- [15] H. Nagatomo, T. Johzaki, K. Mima, H. Shiraga, H. Azechi, A. Sunahara, H. Sakagami, T. Taguchi: "Implosion Physics and Robust Target Design for Fast Ignition Realization Experiment", IAEA, Proceedings of Fusion Energy Conference, CN-180, IFE/P6-12, Oct.2010.
- [16] T. Sano, N. Ozaki, T. Sakaiya, K. Shigemori, M. Ikoma, T. Kimura, K. Miyanishi, T. Endo, A. Shiroshita, H. Takahashi, T. Jitsui, Y. Hori, Y. Hironaka, A. Iwamoto, T. Kadono, M. Nakai, T. Okuchi, K. Otani, K. Shimizu, T. Kondo, R. Kodama, K. Mima: "Hugoniot and temperature measurements of liquid hydrogen by laser-shock compression", Journal of Physics: Conference Series, vol. 244, 042018, 4 pp., Apr.2010.
- [17] Takuya Tsuji, Keizo Yabumoto, Toshihiro Kawaguchi, Toshitsugu Tanaka: "Large-scale parallel DEM-CFD coupling simulation of three-dimensional bubbling gas-fluidized bed," Proceedings of 6th World Congress on Particle Technology, CD-ROM HH1000502, Apr.2010.
- [18] Takuya Tsuji, Hirotaka Yada, Kaoru Yoshikawa, Toshitugu Tanaka: "Comparison between DNS and DEM-CFD coupling mesoscopic simulation

- for 2-D spouted fluidized bed”, Proceedings of International conference on Multiphase Flow, CD-ROM No.13.1.2, May 2010.
- [19] Yuta Nakagawa, Takuya Tsuji, Takemori Takayama, Norihisa Matsumoto, Toshitugu Tanaka, Yuichi kadono: “DEM simulation of cohesive soil-pushing behavior by bulldozer blade,” Proceedings of The Joint 9th Asia-Pacific ISTVS Conference and Annual Meeting of Japanese Society for Terramechanics, CD-ROM No.071, Sep.2010.
 - [20] N. Tsuboi, Y. Kawakami, K. Ezure, A. Hayashi, E. Yamada, Numerical Study and Performance Evaluation for Pulse Detonation Engine with an Aerospike Nozzle, AIAA-2011-800, 49th AIAA Aerospace Sciences Meeting, 2011.
 - [21] Y. Morii, M. Asahara, N. Tsuboi, A.K. Hayashi, M. Koshi, H. Ogawa, S. Tokudome, The effects of the schemes in inviscid flux on spinning detonation in a round tube, Eighth International Symposium on Hazards, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions, ISH101, 2010.
 - [22] N. Tsuboi, A.K. Hayashi, M. Uchida, T. Fujimori, Three-dimensional simulations of H_2/O_2 detonation in a round bent tube, Eighth International Symposium on Hazards, Prevention, and Mitigation of Industrial Explosions, ISH106, 2010.
 - [23] P. R Varadwaj, R. Fujimori, K. Kawaguchi; “Fourier Transform Infrared Spectral Investigation of the ν_6 band of cyclic- C_3H_2 ” 65th Ohio State University international symposium on molecular spectroscopy, FB11(Columbus, USA) p. 85, 2010, June 25.
 - [24] Shirakawa M., Nakayama K., Aramaki E., Hara T. and Nishio S.: Relation Extraction between Related Concepts by Combining Wikipedia and Web Information for Japanese Language, Asia Information Retrieval Societies Conference (AIRS 2010), pp. 310-319, Dec. 2010.
 - [25] Tetsuro Tamura, Yasuo Okuda, Takeshi Kishida, Osamu Nakamura, Koichi Miyashita, Akira Katsumura, Masatoshi Tamari: “LES for aerodynamic characteristics of a tall building inside a dense city district”, CWE2010, 2010.
 - [26] Tetsuro Tamura: “Application of LES-based model to wind engineering - Implementation of meteorological effects”, CWE2010, 2010.
 - [27] Takenobu Michioka, Ayumu Sato, Koichi Sada: “CFD MODEL CONSIDERING MESO-SCALE DISTURBANCE FOR GAS DISPERSION IN AN URBAN DISTRICT”, HARMO14, submitted, 2011.
 - [28] Shun Takahashi, Takashi Ishida, Kazuhiro Nakahashi: “Flow Simulation around Ahmed Body by Cartesian-based Method,” 6th Asia Workshop on Computational Fluid Dynamics, Mar. 2010.
 - [29] Esmatullah Maiwand Sharify, Norio Arai, Shun Takahashi: “Fluid-Structure Interaction of Body with Elastic Wall,” European Conference on Computational Fluid Dynamics ECCOMAS CFD 2010, Jun. 2010.
 - [30] Norimitsu Wakama, Takafumi Aki, and Yukio Iida, Simple and Small Silicon Optical Switch with Silicon Waveguide as a Optical Control Gate, Ext. Abstr. 2010 Int. Meeting for Future of Electron Devices, Kansai, pp. 102-103, May 2010 (May, 2010) (Osaka, May 13-14, 2010).
 - [31] N. FURUSHIRO, M. HIGUCHI, T. YAMAGUCHI, S. TERAUCHI, S. MATSUDA, S. SHIMADA: “Tool Wear in Diamond Turning of Steel”, Proc. ASPE 2010 Annual Meeting, Atlanta, U.S.A., vol. 46, pp.431-434, Nov. 2010.
 - [32] KIYOSI HORIUTI, Kazuma Matsumoto. Normal stress difference and drag reduction mechanism in Johnson-Segalman viscoelastic turbulence, 63rd Annual Meeting of the Division of Fluid Mechanics, Bulletin of the American Physical Society, American Physics Society, Vol. 55, No. 16, p. 396, Nov. 2010.
 - [33] KIYOSI HORIUTI. Energy cascade in multi-mode stretched spiral vortices, 6th IMS Turbulence Workshop, Proceeding of 6th IMS Turbulence Workshop, Institute for Mathematical Science, Imperial College, p. 17, Jul. 2010.

3 国内研究会等発表論文

- [1] 岡本 浩行, 山口 堅三, 原口 雅宣, 岡本 敏弘: プラズモニックレーストラック共振器の特性評価, 第 57 回応用物理関係連合講演会, 2010 年 3 月.
- [2] 岡本 浩行, 荒野 智大, 小松 実, 山口 堅三, 中松 健一郎, 松井 真二, 原口 雅宣, 岡本 敏弘: マイクロリング共振器を利用した液体屈折率の計測方法検討, 平成 22 年度電気関係学会四国支部連合大会, 2010 年 9 月.
- [3] 岡本 浩行, 山口 堅三, 原口 雅宣, 岡本 敏弘: プラズモニックレーストラック型共振器における結合長の影響, 第 71 応用物理学会学術講演会, 2010 年 9 月.
- [4] 森脇 英恵, 松原 友規, 池田 浩人, 湯川 美穂, 湯川 英二, 安藝 初美: 市販茶葉抽出飲料服用時のリスペリドン含量低下に対するシクロデキストリン類の添加効果, 日本化学会第 91 春季年会, 2010 年 3 月.
- [5] 森脇 英恵, 池田 浩人, 大山 竜也, 湯川 美穂, 安藝 初美: 茶カテキンと統合失調症治療薬リスペリドンとの複合体形成におけるシクロデキストリン添加効果, 第 46 回熱測定討論会, 2010 年 9 月.
- [6] 池田 浩人, 長尾 優香, 松原 友規, 森脇 英恵, 湯川 美穂, 湯川 英二, 安藝 初美: 緑茶カテキンと統合失調症治療薬リスペリドンとの不溶性複合体形成メカニズム 分子モデリング計算による解明, 日本化学会第 91 春季年会, 2011 年 3 月.
- [7] 森脇 英恵, 松原 友規, 西 美樹, 森永 理香, 池田 浩人, 湯川 美穂, 湯川 英二, 安藝 初美: シクロデキストリン添加によるリスペリドンと緑茶カテキンとの不溶性複合体形成抑制効果, 日本薬学会第 131 年会, 2011 年 3 月.
- [8] 大久保毅, Nguyen Trung Hai, 川村光: 強磁性的次近接相互作用を持つパイロクロア反強磁性体の位相ゆらぎと秩序化, 日本物理学会講演概要集, 65, 1, 517, 2010 年 3 月.
- [9] 大久保毅, Nguyen Trung Hai, 川村光: パイロクロア反強磁性体における Multiple-Q 状態, 日本物理学会講演概要集, 65, 2, 388, 2010 年 9 月.
- [10] 尾曲 克己, 中島 捷久: The binding affinity of swine influenza virus which caused global outbreak in 2009 to human type receptor, 第 10 回蛋白質科学会年会, 2010 年 6 月.
- [11] 尾曲 克己: 新型インフルエンザウイルスの糖鎖認識機構の解析, 第 48 回日本生物物理学会年会, 2010 年 9 月.
- [12] 藤間 大介, 江上 喜幸: 第一原理計算によるピフェニル分子の電気伝導特性予測, 日本物理学会 2010 年秋季大会, 2010 年 9 月.
- [13] 江上 喜幸, 塚本 茂, 藤本 義隆, 小野 倫也: 第一原理輸送計算によるナノデバイスの機能評価とデザイン, 日本物理学会第 66 回年次大会, 2011 年 3 月.
- [14] 加門 直洋, 原口 雅宣, 岡本 敏弘, 岡本 浩行: 連結スタブ構造によるプラズモン変調素子の特性, 日本光学会年次学術講演会 Optics & Photonics Japan 2010, 2010 年 11 月.
- [15] 原口 雅宣, 岡本 敏弘: 機能性プラズモニック導波路, 第 58 回応用物理学関係連合講演会, 2011 年 3 月.
- [16] 朝原誠, 坪井伸幸, 林光一, 山田英助: 爆轟限界近傍での直接起爆による酸素素爆轟波の数値解析, 2010 年度 火薬学会秋季研究発表会 講演要旨集, 53 ページ, 2010 年 11 月.
- [17] 朝原誠, 坪井伸幸, 林光一, 山田英助: AUSMDV スキームを用いたデトネーションの衝撃波構造に関する 2 次元数値解析, 第 47 回 燃焼シンポジウム 講演論文集, 390 ページ, 2010 年 12 月.
- [18] 福田幹, Edyta Dzieminska, 林光一, 山田英助, 坪井伸幸: 酸素素素混合気を用いた壁面条件がデトネーション遷移過程に与える影響に関する 2 次元数値解析, 第 48 回燃焼シンポジウム, pp.506-507, 2010 年 12 月.
- [19] Edyta Dzieminska: Propagation of the Flame in the Boundary Layer in the process of DDT, 第 48 回燃焼シンポジウム講演論文集, 510, 2010 年 12 月.
- [20] Edyta Dzieminska: The Generation of DDT in the Boundary Layer, 衝撃波シンポジウム講演論文集, 385, 2011 年 3 月.

- [21] 上村 悠歩, 山田 貴幸, 坪井 伸幸, 山田 英助, 林 光一: ローテーションゲートネーションエンジンと既存エンジンとの比較, 平成 22 年度宇宙輸送シンポジウム, 2011 年 1 月.
- [22] 松木 亮治, 坪井 和也, 富田 栄二: 平面予混合火炎における固有不安定性の励起に関する直接数値シミュレーション, 日本機械学会中国四国支部第 49 期総会・講演会講演論文集, pp. 393-394, 2011 年 2 月.
- [23] 飯村拓哉, 吹場活佳, 上村卓也: 遷音速域におけるエアデータセンサシステムの計測特性, 平成 22 年度宇宙輸送シンポジウム, STCP-2010-020, 2011 年 3 月.
- [24] 野崎祐介, 仲村英也, 岩崎智宏, 綿野 哲: 分子動力学シミュレーションによるナノ粒子-細胞膜間の相互作用の解析: C_{60} フラーレンとの相互作用, 日本薬学会第 131 年会 要旨集, 29P-0079, 2011 年 3 月.
- [25] 青木 達也, 坪井 伸幸, 林 光一, 山田 英助: エタノールを用いたパルスゲートネーションエンジンの数値解析, 平成 22 年度 衝撃波シンポジウム講演論文集, pp.245-246, 2011 年 3 月.
- [26] 蜷川繁, $1/f$ ゆらぎにもとづく2次元3状態万能セルオートマトンの探索, 第 73 会情報処理学会全国大会講演論文集 DVD, 2011年3月.
- [27] “3次元心室モデルによる心臓不整脈のシミュレーション研究について”, 原口亮, 第25回生体・生理工学シンポジウム[オーガナイズドセッション: 心臓電気活動の可視化解析および臨床応用], 2010923-25, 岡山 (2010).
- [28] 原口亮, 芦原貴司, 山口豪, 難波経豊, 池田隆徳, 中沢一雄, “心筋線維走向ねじれは心室較差増大による不整脈性を抑制する: 3次元心室壁モデルによる理論的研究”, 第27回日本心電学会学術集会, 2010108-9, 大分 (2010).
- [29] 鷹野 優, 米津 康滋, 藤田 祐一, 栗栖 源嗣, 中村春木: “補因子 Fe_4S_4 クラスターの酸化還元反応における電子構造の理論的研究” 第 10 回蛋白質科学会(札幌), June 2010.
- [30] 鷹野 優, 中村春木: “ヘムポルフィリン環の違いによるヘムの電子構造への影響”, 分子科学討論会 2010 大阪, 大阪大学豊中キャンパス(豊中), Sep. 2010.
- [31] 鷹野 優, 米津 康滋, 藤田 祐一, 栗栖 源嗣, 中村春木: “Electronic Structures of the Novel $[4Fe-4S]$ Cluster in Dark-operative Protchlorophyllide Oxidoreductase”, 第 48 回日本生物物理学会, 東北大学川内キャンパス(仙台), Sep. 2010.
- [32] 鷹野 優, 米津 康滋, 藤田 祐一, 栗栖 源嗣, 中村 春木: “酸化還元反応における光非依存型プロトクロフィリド還元酵素中の F_4S_4 クラスターの電子構造の理論的研究”, 第 60 回錯体化学討論会, 大阪国際交流センター(大阪), Sep. 2010.
- [33] 鷹野 優, 米津 康滋, 藤田 祐一, 栗栖 源嗣, 中村春木: “光非依存型プロトクロフィリド還元酵素中の補因子 $[4Fe-4S]$ クラスターの酸化還元反応における電子構造の理論的研究,” スーパーコンピュータワークショップ 2011「分子科学プログラムライブラリの充実にむけて」, 分子科学研究所(岡崎), Jan. 2011.
- [34] 鷹野 優, 米津 康滋, 藤田 祐一, 栗栖 源嗣, 中村 春木: “光非依存型プロトクロフィリド還元酵素中における $[4Fe-4S]$ クラスターの電子構造の理論的研究”, 第 3 回バイオスーパーコンピューティングシンポジウム, 理化学研究所計算科学研究機構・甲南大学ポートアイランドキャンパス(神戸), Feb. 2011.
- [35] Yu Takano, Yasuteru Shigeta Kenichi Koizumi, Haruki Nakamura : “Electronic structures of the Cu_2S_2 core of the Cu_A site in cytochrome c oxidase”, 51th Sanibel Symposium, The King and Prince Golf & Beach Resort, Georgia, Feb., 2011.
- [36] 野澤剛二郎, 田村哲郎, 「MM5とLESのスケール相似則によるカップリング」, 土木学会第 65 回年次学術講演会概要集.
- [37] 野澤剛二郎, 田村哲郎, 「LESによるスケール相似則を用いた one-way ネスティング」, 第 24 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集.
- [38] 富樫 祐一: “混雑環境下での生体分子機械の動作と反応拡散パターン”, 理研シンポジウム「細胞システムの動態と論理 II」, April 2010.
- [39] Yuichi Togashi: “Formation of Reaction-Diffusion Pathways by Molecular Machines in the Crowded Intracellular Environment”, 日本生物物理学会 第 48 回年会, 2P302, Sept. 2010.

- [40] 富樫 祐一, 柳田 敏雄, Alexander S. Mikhailov: “生体分子機械の構造変化と非線形性”, 日本機械学会 第 23 回計算力学講演会(CMD2010), No. 269, Sept. 2010.
- [41] Yuichi Togashi: “Abstract and Coarse-Grained Modeling toward Understanding of the Biomolecular Machinery in the Crowded Intracellular Environment”, RIKEN Quantitative Biology Center (Tentative) Kick-off meeting, Poster 10, Oct. 2010.
- [42] 富樫 祐一: “混雑した細胞内環境における分子機械システム～反応拡散と力学的相互作用が交錯する系のモデリング”, 定量生物学の会 第3回年会, Poster 9, Nov. 2010.
- [43] T. Johzaki, H. Nagatomo, A. Sunahara, H.-B. Cai, S. Ohira, H. Sakagami, K. Mima, Y. Nakao, H. Nakamura, S. Fujioka, H. Shiraga, H. Azechi: "Scaling of Core Heating Performance for FIREX-I", 37th EPS Conference on Plasma Physics, Dublin, アイルランド, Jun.2010.
- [44] H. Nagatomo, T. Johzaki, A. Sunahara, H. Sakagami, K. Mima: "Three-dimensional Core Plasma Dynamics in Cone-guided Implosion for Fast Ignition", 52nd Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, Hyatt Regency Chicago, Chicago, IL, USA, Nov.2010.
- [45] T. Sano: "Laser-shock compression of liquid hydrogen and interior structure of gas giant planets", Joint Seminar, Department of Earth Sciences & Department of Physics, University of Hong Kong, Nov.2010.
- [46] T. Johzaki, A. Sunahara, H. Nagatomo, K. Mima, S. Fujioka, H. Shiraga, H. Azechi and FIREX project: "Advanced Concept of High-Energy Coupling Cone for FIREX-I", 11th International Workshop on Fast Ignition of Fusion Targets, Angelicum, Pontificia Università San Tommaso d'Aquino, Largo Angelicum 1, Roma, Italy, Oct.2010.
- [47] T. Johzaki, H. Nagatomo, A. Sunahara, H.-B. Cai, H. Sakagami, Y. Nakao, K. Mima, H. Nakamura, S. Fujioka, H. Shiraga, H. Azechi, and FIREX project group: "Core Heating Scaling for Fast Ignition Experiment FIREX-I", 23rd IAEA Fusion Energy Conference, Daejeon, Korea Rep. of, Oct.2010.
- [48] T. Johzaki, H. Nagatomo, A. Sunahara, H.-B. Cai, H. Sakagami, Y. Nakao, K. Mima, H. Nakamura, S. Fujioka, H. Shiraga, H. Azechi, and FIREX project group: "Fast electron guiding by extended double cone", 日米高速点火 WS2010, 和歌山, Oct. 2010.
- [49] T. Johzaki, H. Nagatomo, A. Sunahara, H.-B. Cai, H. Sakagami, K. Mima, H. Shiraga, H. Azechi, and FIREX project group: "Simulation Study of Pre-Plasma Effects on Core Heating in FIREX-I", 52nd Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, Hyatt Regency Chicago, Chicago, IL, USA, Nov.2010.
- [50] T. Johzaki: "Fokker-Planck simulations for relativistic fast electron in dense matters", 2nd UK - Japan Winter School in High Energy Density Science, エディンバラ・スコットランド, Jan.2011.
- [51] T. Sano: "Cryogenic hydrogen EOS measurements", 3rd Japan-France Workshop and School on High Density, Les Houches, France, Jan.2011.
- [52] 佐藤義永, 永岡龍一, 撫佐昭裕, 江川隆輔, 滝沢寛之, 岡部公起, 小林広明: “ルーブリックモデルに基づくベクトルプロセッサ向けプログラム最適化戦略”, 2011 年ハイパフォーマンスコピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS2011), pp. 140-147, つくば, January 18-19, 2011.
- [53] 佐藤義永, 撫佐昭裕, 江川隆輔, 滝沢寛之, 岡部公起, 小林広明: “次世代ベクトルプロセッサ向けプログラム最適化戦略”, 次世代スーパーコンピューティングシンポジウム 2010, 神戸, January 17, 2011.
- [54] 田中 敏嗣, 辻 拓也, 小方 康弘, 武藤 真一: “粒子層平坦化操作の DEM 解析と実験による検証”, 第 59 回理論応用力学講演会論文集, pp.315-316, May 2010.
- [55] 上田 修也, 田中 敏嗣, 川口 寿裕, 辻 拓也: “石炭ガス化炉内流動の DEM-CFD カップリングシミュレーション”, 2010 年度粉体工学会春期研究発表会論文集, pp.11-12, May 2010.
- [56] 辻 拓也, 矢田 大貴, 田中 敏嗣: “IB-DEM 法による固気流動層内流れの直接数値計算”, 日本混相流学会年会講演会論文集, pp.14-15, July 2010.

- [57] 田中 敏嗣, 辻 拓也, 小方 康弘, 武藤 真一, 川口 寿裕: “粒子層平坦化操作の DEM 解析と作用力のモデル化”, 粉体工学会 2010 年度秋期研究発表会論文集, S1-5, Dec. 2010.
- [58] Tomoya Wakamatsu, Hirotaka Yada, Takuya Tsuji, Toshitsugu Tanaka: “Direct numerical simulation of flow including dense solid particles having microscopic arrangements”, Bulletin of 64th Annual meeting of the Division of Fluid Dynamics, the American Physics Society, Vol.55, No.16, EV6, Nov. 2010.
- [59] 若松 知哉, 辻 拓也, 矢田大貴, 田中 敏嗣: “高濃度固体粒子群と流体間相互作用の直接数値計算”, 第 24 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, CD-ROM B9-5, Dec. 2010.
- [60] 成田 栄二, 辻 拓也, 田中 敏嗣: “高濃度粒子が存在する流れ場に壁面が及ぼす影響の検討とそのモデル化”, 日本機械学会関西支部講演会論文集, No.5-22, Mar. 2011.
- [61] 福山 智之, 辻 拓也, 田中 敏嗣: “DIM-IBM カップリング法による液滴内固体粒子挙動の解析”, 日本機械学会関西支部講演会論文集, No.5-24, Mar. 2011.
- [62] 萩原 健一郎, 川口 寿裕, 辻 拓也, 田中 敏嗣: “自由界面を伴う固液二相流解析に向けた DEM—MPS カップリングモデルの構築”, 日本機械学会関西支部講演会論文集, No.5-23, Mar. 2011.
- [63] 岸浩史, Allan Abraham B. Padama, 笠井秀明, “触媒表面における NO 分子還元特性に関する理論的解析”, 2010 年秋季第 71 回応用物理学会学術講演会, 長崎大学, 2010 年 9 月.
- [64] 小島一希, 南谷英美, 笠井秀明, “金属表面の磁性原子吸着系における一粒子励起スペクトルに対する磁気異方性の影響”, 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [65] 谷正則, 坂上護, 中西寛, 笠井秀明, 上谷昌稔, 岡昭範, “グラフェン表面上の $C_7H_{12}ON^+$ カチオン分子吸着に関する理論的研究”, 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [66] 三輪邦之, 松中大介, 笠井秀明, “非磁性金属表面上の磁性原子格子系における電子相関効果”, 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [67] 國貞雄治, 中西寛, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, 福谷克之, “銀表面における水素分子のオルソ・パラ転換における共吸着酸素分子の影響の理論的研究”, 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [68] 南谷英美, Wilson Agerico Diño, 中西寛, 笠井秀明, “金属表面上磁性原子対における近藤温度”, 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [69] 岸浩史, Allan Abraham B. Padama, 中西寛, 笠井秀明, “第一原理計算による貴金属表面上の NO 分子の吸着構造に関する解析”, 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [70] 坂上護, 上羽弘, 宗像利明, 笠井秀明, “固体表面からの二光子光電子放出における正孔散乱とフエノ干渉の効果”, 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [71] 中西寛, 笠井秀明, “Fe ポルフィリン分子と金属電極表面との接合界面構造”, 日本物理学会 2010 年秋季大会会, 大阪府立大学, 2010 年 9 月.
- [72] Saputro Adhitya Gandaryus, Dipojono Hermawan Kresno, Aspera Susan Menez, 笠井秀明, “DFT Study on the Interaction of O_2 Molecule with Co-(6)Ppy Clusters”, 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [73] Allan Abraham Padama, Melanie Yadao David, 笠井秀明, Kawai Hiroyuki, “Density functional theory investigation on H_2 dissociative adsorption on Ni(111) and Cr-decorated Ni(111) surfaces”, 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [74] 小島一希, Wilson Agerico Diño, 南谷英美, 笠井秀明, “絶縁層が被覆された金属表面上に吸着した磁性原子における一粒子励起スペクトルに対する磁気異方性の影響”, 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [75] 谷正則, 坂上護, 中西寛, 笠井秀明, “グラフェン表面上におけるイオン液体カチオン分子吸着に関する理論的研究”, 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [76] 三輪邦之, 松中大介, 笠井秀明, “固体表面上の磁性原子格子系に対する STM 像の解析”, 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年

- 11 月.
- [77] Aspera Susan Menez, Melanie Yadao David, 笠井秀明, " H_2O Molecular Adsorption on the Tri-s-triazine-based graphitic Carbon Nitride ($g-C_3N_4$): A DFT-based study", 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [78] Ferensa Oemry, 中西寛, 笠井秀明, "担体効果の影響を受けた Pt 原子および Pt_4 クラスタ上における O_2 解離吸着特性", 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [79] Wungu Triati Dewi Kencana, Dipojono Hermawan Kresno, 中西寛, 笠井秀明, "FIRST PRINCIPLES CALCULATION STUDY ON THE LITHIUM MONTMORILLONITE: EFFECT OF ISOMORPHIC SUBSTITUTION", 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [80] Abdulla Sarhan, 中西寛, 笠井秀明, "銅表面上に吸着されたメラミン分子の電子輸送", 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [81] 國貞雄治, 中西寛, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, "酸素共吸着銀表面における水素分子のオルソ・パラ転換機構", 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [82] Mary Clare Sison Escaño, 中西寛, 笠井秀明, "Enhancing Gas-Bimetallic Surface Reaction via Spin Manipulation", 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [83] Wahyu Tri Cahyanto, Do Son Ngoc, Elod Gyenge, 笠井秀明, "Methanol Electro-oxidation Mechanism on Rare Metal Surfaces: A DFT Study", 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [84] 岸浩史, 国方伸一, 中西寛, 笠井秀明, 玉井幸夫, 太西茂夫, 栗屋信義, "密度汎関数理論に基づく RRAM の伝導性変化に関する解析", 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [85] 南谷英美, Wilson Agerico Diño, 中西寛, 笠井秀明, "表面における 2 不純物近藤効果の磁場および温度依存性", 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [86] 坂上護, 上羽弘, 宗像利明, 笠井秀明, "固体表面のファノ共鳴を介した二光子光電子放出の理論", 第 51 回真空に関する連合講演会, 大阪大学, 2010 年 11 月.
- [87] 谷正則, 国方伸一, 中西寛, 笠井秀明, "グラフェン表面近傍におけるキャパシタ用電解質の挙動解析", 2011 年春季 第 58 回応用物理学関係連合講演会, 神奈川工科大学, 2011 年 3 月.
- [88] 岸浩史, Allan Abraham Padama, 笠井秀明, "触媒表面における NO 分子の吸着プロセスに関する理論的解析", 2011 年春季 第 58 回応用物理学関係連合講演会, 神奈川工科大学, 2011 年 3 月.
- [89] Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, "人工光合成デバイスのシミュレーション", 2011 年春季 第 58 回応用物理学関係連合講演会, 神奈川工科大学, 2011 年 3 月.
- [90] 笠井秀明, Wilson Agerico Diño, "燃料電池の課題と展望", 2011 年春季 第 58 回応用物理学関係連合講演会, 神奈川工科大学, 2011 年 3 月.
- [91] Allan Abraham B. Padama, Diño, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Hiroyuki Kawai, Shigeaki Murata, "The influence of Mn on the adsorption of H_2 and O on $Ni(111)$ surface", 日本物理学会第 66 回年次大会, 新潟大学, 2011 年 3 月.
- [92] 小島一希, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, "絶縁層被覆された金属表面上の磁性原子吸着系におけるスペクトル関数に対する磁気異方性の影響", 日本物理学会第 66 回年次大会, 新潟大学, 2011 年 3 月.
- [93] 三輪邦之, 松中大介, 笠井秀明, "金属表面上の磁性原子超格子における電子状態の格子定数依存性", 日本物理学会第 66 回年次大会, 新潟大学, 2011 年 3 月.
- [94] Triati Dewi Kencana Wungu, Hermawan Kresno Dipojono, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, "The Effect of Isomorphic Substitution in Montmorillonite: First Principles Calculation Study", 日本物理学会第 66 回年次大会, 新潟大学, 2011 年 3 月.
- [95] 國貞雄治, 中西寛, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, "銀表面上のステップ構造近傍での水素分子の吸着状態", 日本物理学会第 66 回年次大会, 新潟大学, 2011 年 3 月.

- [96] 南谷英美, Abdulla Ali Abdulla Sarhan, 松中大介, Wilson Agerico Diño, 中西寛, 笠井秀明, 高木紀明, "*Au*(111)表面上の鉄フタロシアニン分子に対する第一原理電子状態計算", 日本物理学会第 66 回年次大会, 新潟大学, 2011 年 3 月.
- [97] 中西寛, 笠井秀明, "水素・ミューオンの固体表面近傍での量子ダイナミクスと電子状態", 日本物理学会第 66 回年次大会, 新潟大学, 2011 年 3 月.
- [98] 笠井秀明, "表面・界面・固体中のプロトン伝導とその量子ダイナミクス計算", 日本物理学会第 66 回年次大会, 新潟大学, 2011 年 3 月.
- [99] 坪井伸幸, 森井雄飛, 越光男, 林光一, 爆轟限界における粘性の影響, 第 42 回流体力学講演会/航空宇宙シミュレーション技術シンポジウム 2010, pp. 10, JSASS-2010-2023, 米子, 2010.6.
- [100] 坪井伸幸, 香川岳寛, 吹場活佳, 嶋田徹, ハイブリッドロケット内部流れの解析に向けた前処理型非定常圧縮性低速流れ: 前処理型流束計算法の影響について, 第 54 回宇宙科学技術連合講演会プログラム, 3B03, 2010.11.
- [101] 中山 和俊, 森井 雄飛, 坪井 伸幸, 細田 英明, 林 光一, 内田 正宏, 藤森 俊郎, ダブルエルボ内を伝播する H_2/O_2 デトネーションの数値解析, 第 48 回燃焼シンポジウム, C323, 2010.12.
- [102] 坪井伸幸, 吹場活佳, 嶋田徹, ハイブリッドロケット内部流れの解析に向けた前処理型非定常圧縮性低速流れ, 3次元流れの影響, 平成22年度宇宙航行の力学シンポジウム, 2010.12.(印刷中)
- [103] 武藤大貴, 坪井伸幸, 永井大樹, 浅井圭介, 極超音速流れにおける30°ランプ周りの衝撃波/境界層干渉に関する3次元数値解析, 平成22年度宇宙航行の力学シンポジウム, 2010.12.(印刷中)
- [104] 香川岳寛, 坪井伸幸, 吹場活佳, 嶋田徹, 前処理型非定常圧縮性流れ場解析による低Re数の3次元翼の空力特性評価, 日本機械学会九州学生会第 42 会卒業研究発表講演会(No.118-2), pp.109-110, 2011.3.
- [105] P. R Varadwaj, R. Fujimori, K. Kawaguchi:, "Fourier Transform Infrared Spectrum of $c\text{-C}_3\text{H}_2$ and related ab initio calculations", 第 4 回分子科学討論会, 2A22, 2010 年, 9 月 15 日.
- [106] 比江島 俊彦: "高マッハ数における縦渦の線形不安定性和非線形発達," 日本流体力学会年会 2010 講演論文集, 67, CD-ROM, pp.1-8 Sep. 2010.
- [107] 比江島 俊彦: "超音速縦渦と斜め衝撃波の干渉による渦崩壊について," 第 24 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, B12-2, CD-ROM, pp.1-6 Dec. 2010.
- [108] 白川真澄, 中山浩太郎, 荒牧英治, 原隆浩, 西尾章治郎: 格フレームを考慮した Web 検索スニペット解析による動作関係抽出, 情報処理学会研究報告 DBS 研究会, Vol. 2010-DBS-151, No. 38, Nov. 2010.
- [109] Michio Ishikawa, Makoto Katsura, Satoru Nakashima, Kento Aizawa, Tsutomu Inoue, Yuka Ikemoto, Hidekazu Okamura: "Application of Modulating Technique to Detect Near-Field Signals for Conventional IR Spectrometer with a Ceramic Light Source.", 6th International Workshop on Nano-Scale Spectroscopy and Nanotechnology (NSS6), P34, Kobe, Oct. 2010.
- [110] 石川迪雄, 桂誠, 中嶋悟, 会沢見斗, 井上勉, 池本夕佳, 岡村英一: "セラミック光源を用いた近接場赤外光の変調検出", 日本物理学会, 23aRE-2, 大阪, 2010 年 9 月.
- [111] 石川迪雄, 桂誠, 中嶋悟, 会沢見斗, 井上勉, 岡村英一, 池本夕佳: "セラミック光源を用いた近接場赤外光スペクトルの変調検出", 日本物理学会, 25aHA-1, 新潟, 2011 年 3 月.
- [112] 田村哲郎, 岸田岳士, 奥田泰雄: "高層建物に作用する風力の変動特性に関する LES", 第24回数値流体力学シンポジウム, D5-1, 2010.
- [113] 道岡武信, 佐藤歩: "2次元キャニオン内からのガス放出に関する LES", 第24回数値流体力学シンポジウム, D4-1, 2010.
- [114] 高橋 俊, 新井 紀夫: "マルチレベル格子による流体計算のための基礎研究", 日本計算工学会第 15 回計算工学講演会, May. 2010.
- [115] 山崎 由夢, 高橋 俊, 新井 紀夫: "等間隔直交格子を用いた T 字分岐管内三次元流の解析", 第 42 回流体力学講演会/航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム 2010, Jun. 2010.

- [116] 高橋 俊, 新井 紀夫, 佐々木 大輔, 中橋 和博: “直交格子積み上げ法を用いた非圧縮流れの大規模数値解析”, 第 24 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 2010.
- [117] 山崎 由夢, 新井 紀夫, 高橋 俊: “直交格子法による柔軟壁を有する分岐管流れのシミュレーション”, 第 24 回数値流体力学シンポジウム, Dec. 2010.
- [118] Shinagawa, H., H. Jin, Y. Miyoshi, H. Fujiwara, S. Fujita, T. Tanaka, N. Terada, and K. Terada, Development of an ionosphere-atmosphere coupled model for space weather forecast, 38th COSPAR Scientific Assembly, Bremen, Germany, July 18-25, 2010.
- [119] Shinagawa, H., H. Jin, Y. Miyoshi, H. Fujiwara, K. Terada and N. Terada, Ionosphere-Atmosphere Coupled Model for Ionosphere Weather Forecast, 2010 Asia-Pacific Radio Science Conference (AP-RASC'10) Toyama International Conference Center, Toyama, Japan September 22-26, 2010.
- [120] Y. Morikawa, “First-principles theoretical study of benzene/metal and pentacene/metal interfaces”, The 5th edition of the international workshop on “Electronic Structure and Processes at Molecular-Based Interfaces (ESPMI-V)”, Chiba University (Chiba, Japan), Jan. 25-28 2010.
- [121] 森川良忠, 「量子シミュレーションの今後の展望」, 第46回応用物理学会スクール(2010 年春季), 「コンピューテーショナル・マテリアルズ・デザイン (CMD)入門」, 東海大学(平塚市), Mar. 17 2010.
- [122] 森川良忠, 「界面におけるナノスケールプロセスの第一原理シミュレーション」, 第57回応用物理学 関係連合講演会, シンポジウム「X 線による埋もれた固液界面の精密科学の可能性」, 東海大学湘南キャンパス(平塚市), Mar. 17-20, 2010.
- [123] Y. Morikawa, “Theoretical Study of Dipole Layer Formation at Metal-Organic Interfaces”, The WPI Advanced Institute for Materials Research (WPI-AIMR) Annual Workshop, Sendai Excel Hotel Tokyo (Sendai, Japan), Mar. 25-27 2010.
- [124] Y. Morikawa, “First-principles Simulations of Nano-scale Processes at Surfaces and Interfaces”(Tutorial), International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials, Osaka University Convention Center (Suita, Japan), May 30-June 4, 2010.
- [125] Y. Morikawa, “Theoretical Study of Dipole Layer Formation at Metal-Organic Interfaces”(O-FrI-4), International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials, Osaka University Convention Center (Suita, Japan), May 30-June 4, 2010.
- [126] Y. Morikawa, “Density functional simulations of hydrogen evolution reaction at the metal/water interface”, CECAM Workshop on Ab initio Electrochemistry, CECAM-HQ-EPFL (Lausanne, Switzerland), July 12-14, 2010.
- [127] 森川良忠, 「有機半導体界面の電子状態: 計算科学で分かること」, 平成22年度飯綱・サイエンスサマー道場「有機半導体の科学」, 飯綱高原ホテルアル カディア (長野市), Aug. 16-18, 2010.
- [128] 森川良忠, 「第一原理シミュレーションによる有機/金属界面の界面電気二重層の解明と制御」, 2010 年電気化学秋季大会, 神奈川工科大学 (厚木市), Sep. 2-3, 2010.
- [129] 森川良忠, 「第一原理シミュレーションによるインテリジェント触媒の自己再生機構の解明」, グリーンイノベーションのための表面・界面化学, 分子科学研究所 (岡崎市), Oct. 5-6, 2010.
- [130] 森川良忠, 「界面における化学反応過程の第一原理シミュレーション」, 真空・表面科学合同 講演会, 第30回表面科学学術講演会, 第51回真空に関する連合講演会, 大阪大学 (吹田市), Nov. 4-6, 2010.
- [131] Y. Morikawa, K. Toyoda, I. Hamada, and S. Yanagisawa, “Theoretical Study of Dipole Layer Formation at Metal-Organic Interfaces”, 38th Conference on the Physics and Chemistry of Surfaces and Interfaces (PCSI-38), San Diego, California, USA, Jan. 16-20, 2011.
- [132] 河村 保彦, 武田 光市, 西内優騎: “[60]フラーレン存在下の求核性カルベン の二量化”, 第 34 回有機電子移動化学討論会講演要旨集, pp.38-39, Jun. 2010.
- [133] 肥田 和男, 青野 裕樹, 倉科 昌, 藤永 悦子, 上田 昭子, 西内 優騎, 河村 保彦: “クムレンの付加環化を基軸とした特異な化合物の生成”, 第 21 回基礎有機化学討論会講演要旨集,

pp.116-117, Sept. 2010.

Symposium, Tainan, Taiwan, June 2010.

- [134] 渡邊 慧, 竹内 翔太, 堀 彰良, 水沢 厚志, 西内 優騎, 河村 保彦: “ミュンヒノン(1,3-オキサゾリウム-5-オレート)と[60]フラーレンとの付加環化反応”, 第 21 回基礎有機化学討論会講演要旨集, p.310, Sept. 2010.
- [135] 河村 保彦, 川崎 昂, 西内 優騎: “光照射が誘起する 3-(アロイルメチル)ヘキサ-1,5-ジンの正宗-バグマン環化”, 2010 年日本化学会西日本大会講演要旨集, p.125, Nov. 2010.
- [136] 河村 保彦, 別宮慎二郎, 西内 優騎: “光バグマン環化に及ぼすジイン両末端の水素結合の効果”, 2010 年日本化学会西日本大会講演要旨集, p.125, Nov. 2010.
- [137] S. Saita, A. Kadokura, N. Sato, S. Fujita, T. Tanaka, Y. Ebihara, S. Ohtani, G. Ueno, K. Murata, D. Matsuoka, A. Kitamoto, T. Higuchi: "Relative displacement of conjugate point during a course of substorm in a global MHD simulation", The 34th Symposium on Space and Upper Atmospheric Sciences in the Polar Regions(日本東京立川市国立極地研究所), 2010 年 12 月 3 日.
- [138] S. Saita, A. Kadokura, N. Sato, S. Fujita, T. Tanaka, Y. Ebihara, K. Murata, D. Matsuoka, G. Ueno, A. Kitamoto, T. Higuchi: "Reconfiguration of the magnetosphere for southward IMF in a global MHD simulation, Workshop on dynamic modeling in geomagnetism", Workshop on dynamic modeling in geomagnetism (日本東京立川市統計数理研究所), 2010 年 7 月 1 日.
- [139] S. Saita, A. Kadokura, N. Sato, S. Fujita, T. Tanaka, Y. Ebihara, K. Murata, D. Matsuoka, G. Ueno, A. Kitamoto: "Reconfiguration of the magnetosphere for southward IMF and displacement of conjugate points in a MHD simulation", International Polar Year - Oslo Science Conference (ノルフェー オスロ), 2010 年 6 月 9 日.
- [140] Ebihara, Y., T. Kikuchi, N. Nishitani, T. Hori, F. J. Rich, M. -C. Fok, and M. F. Thomsen, Cross-region coupling during the 14-15 December 2006 storm, Western Pacific Geophysics Meeting, Taipei, Taiwan, June 2010.
- [141] Ebihara, Y., M. -C. Fok, N. Nishitani, and T. Kikuchi, Consequence of high pressure torus surrounding the Earth, International Space Plasma
- [142] 海老原 祐輔: 磁気嵐におけるリングカレントの減衰過程, 日本地球惑星科学連合大会, 千葉県, 2010.(招待講演)
- [143] 海老原 祐輔, 菊池 崇, 家田 章正, 新堀 淳樹, 平木 康隆, 堀 智昭, 西谷 望, 樋口 知之, 上野 玄太, Ohtani Shinichi: GEMSIS-電離圏: 擾乱時のグローバルな電離圏電場ポテンシャル分布の導出へ向けて, 日本地球惑星科学連合大会, 千葉県, 2010.
- [144] 海老原 祐輔, フォック メイチン, Immel Thomas, Brandt Pontus, リングカレントの早い消失過程: シミュレーションと IMAGE 衛星観測, 地球電磁気・地球惑星圏学会 第 128 回総会及び講演会, 金沢, 2010 年 10-11 月.
- [145] 土居立典, 田中宏明, 島田尚一, 樋口誠宏, 古城直道, 山口智実: "Ni の加工におけるダイヤモンド工具の損耗機構", 2010 年度精密工学会秋季大会学術講演会講演論文集, pp.114-115, Sep. 2010.
- [146] 土居立典, 田中宏明, 島田尚一, 樋口誠宏, 古城直道, 山口智実: "鉄系金属の超精密切削加工における工具損耗の抑制", 2011 年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集, pp.53-54, Mar. 2011.
- [147] 田中宏明, 島田尚一: "分子動力学法によるシリコン・カーバイドの延性モード加工への指針", 2011 年度精密工学会春季大会学術講演会講演論文集, pp.55-56, Mar. 2011.
- [148] Y. Fujimoto and A. Oshiyama: "Formations and stability of 90 degree dislocation cores in Ge films on Si(001)", 30th International Conference on the Physics of Semiconductors, Seoul, Korea, July 2010.
- [149] 堀内潔, 多重モード Spiral vortex と非平衡エネルギースペクトルの抽出, 共同利用研究集会「乱流現象及び非平衡系の多様性と普遍性」, 九州大学応用力学研究所共同利用研究集会「乱流現象及び非平衡系の多様性と普遍性」講演要旨集, 九州大学応用力学研究所, p. 2, Nov. 2010.
- [150] 松本一真, 堀内潔, 粘弾性法線応力差による乱流抵抗低減機構の解明, 日本流体力学会年会 2010, 日本流体力学会誌「ながれ」別冊, 日本流体力学会, Vol. 229, pp. 278, Sep. 2010.

4 その他

- [1] TOYOSHIMA, Masayuki: Base-de-datos de diccionarios portugueses para el estudio de la historiografía de la lengua japonesa de mil quinientos, Ideias Linguísticas na Península Ibérica (séc. XIV a séc. XIX), 865-875, 2010 年 11 月.
- [2] 尾崎典雅、佐野孝好、真下茂、佐野智一、兒玉了祐: "パワーレーザーで拓く超高压と物質の世界", プラズマ・核融合学会誌, vol. 86, pp. 604-610, Oct.2010.
- [3] Yoshiei Sato, Ryuichi Nagaoka, Akihiro Musa, Ryusuke Egawa, Hiroyuki Takizawa, Koki Okabe, and Hiroaki Kobayashi: "A Performance Tuning Strategy under Combining Loop Transformations for a Vector Processor with an On-Chip Cache", International Conference for High Performance Computing, Network, Storage and Analysis (SC10), pp. 135-136, New Orleans, Louisiana, November 13-19, 2010.
- [4] 萩田克美: "粗視化分子動力学法による高分子系シミュレーション基盤の計算機科学的高度化検討", 学際大規模情報基共同利用・共同研究拠点第2回シンポジウム(神戸), 2011 年 1 月.
- [5] 萩田克美: "フィラー充填高分子の延伸破壊の大規模MDシミュレーション", 次世代スーパーコンピューティングシンポジウム(神戸), 2011 年 1 月.
- [6] 幸谷有子、黒木勇、萩田克美: "高分子系粗視化MDの大規模・高品質可視化手法の検討", 次世代スーパーコンピューティングシンポジウム(神戸), 2011 年 1 月.
- [7] 萩田克美: "高分子材料の粗視化MDシミュレーションの探索的可視化", 第46回CAVE研究会(中央大学, 東京), 2011 年 3 月.
- [8] Katsumi Hagita: "Deformation and fracture of coarse-grained model of filled rubber composites", American Physical Society March Meeting 2011, (Dallas, USA), 2011 年 3 月.
- [9] Katsumi Hagita: "Immersive visualization of coarse-grained molecular dynamics simulation of polymer nano-composite", WWCEKD 2011: The First International Workshop on World Wide Computing Environments for Knowledge Discovery, (大阪), 2011 年 3 月. <大震災のため、会議中止>
- [10] 市川 雄一: "WGM 共振を利用した真球度測定のための光ファイバと球の光結合に関する研究", Osaka University, February 2011.
- [11] S. Yanagisawa, T. Saigo, K. Toyoda, I. Hamada, K. Lee and Y. Morikawa, "Theoretical Study of Electronic Properties at Organic/Metal Interfaces: Interface Dipole and Nature of Organic-Metal Interaction", Third International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology, Osaka Univ. Nakanoshima Center, Osaka, JAPAN, November 24-26, 2010.
- [12] S. Yanagisawa, I. Hamada, K. Lee and Y. Morikawa, "'Chemisorption' of Alq3 on metal surfaces: roles of the van der Waals interaction and distortion of adsorbed fragments", International Conference on Core Research and Engineering Science of Advanced Materials (Global COE Program) & Third International Conference on Nanospintronics Design and Realization (3rd-ICNDR), Osaka, JAPAN, May 30-June 4 2010.

第 17 回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2011)

時田 恵一郎

大阪大学 サイバーメディアセンター

1 「電脳甲子園」

2011 年 8 月 22 日から 26 日までの 5 日間にわたって、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 (SuperCon2011)」が開催されました。本来は東京工業大学学術国際情報センター (GSIC) 及び大阪大学サイバーメディアセンター (CMC) の両会場を使つての開催ですが、東日本大震災の影響により電力供給が厳しいこともあり、今年は大阪大学会場のみで行われました。

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。

1995 年の第 1 回から 2005 年の第 11 回までは東工大 GSIC の単独主催でしたが、2006 年の第 12 回からは阪大 CMC も共同主催しています。富士川以東 50Hz 地域からの 10 チームは東工大で、60Hz 地域からの 10 チームは阪大でプログラミングを行います。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た二元中継で行ってきました。

4 日間にも渡る長丁場で、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コンテストです。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 年は阪大 CMC の SX-8R、2009 年は SX-9 が使われました。今年は阪大 CMC の SX-8R が使われました。

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。

2 予選

今年の予選課題は、道路網における二地点間の最短経路となる経路の総数を求める問題が出題されま

した。課題は 6 月 1 日にウェブに公開され、6 月 22 日正午までに課題を解くプログラムを添えてメールで申し込みます。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、「スーパーコン 1 級」が認定されます。

今年の予選には、全国から 27 校 31 チームが参加し、例年以上の激戦を勝ち抜いた上位 11 校 11 チームが本選出場を果たしました。

3 本選

本選課題は予選課題と変わって、コンテスト用に独自に考案されたゲームを解いて高得点を得るというものです。このゲームは、2 次元の盤面に配置された 4 色のボールを、周囲にある同色の穴から落とすというもので、「なくろん」と名付けられました。以下の参考の URL で実際に「なくろん」で遊べるようになっているので、是非試してみてください。本戦では 250x250 という「巨大なくろん」が出題されました。

熱戦の結果、開成高等学校（東京都）のチーム PANAI（村井翔悟君、秀 郁未君、笠浦一海君）が優勝を果たしました。2 位は甲陽学院高等学校（兵庫県）のチーム YAMERO、3 位は早稲田高等学校（東京都）のチーム H1ToHA となりました。また、審査の結果、アルゴリズムを工夫して優れたプログラムを作成したチームに、電子情報学会と情報処理学会から贈られる学会奨励賞は、開成高等学校（東京都）のチーム PANAI に授与されました。

最終日の成果発表会、表彰式の後には懇親会も行われ、高校生・高専生の参加者たちは、両大学の教授、大学院生チューターらとプログラミングや大学生活などについて語り合いました。

参考

SuperCon2011 ホームページ : <http://j.mp/rv2ZDJ>

「なくろん」のページ : <http://j.mp/nYkdH7>

2011 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	開 催 場 所
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化並列化の基礎からチューニングまで)	7月8日	東田助教、レーザー研技術専門職員、情報基盤課職員、NEC	レーザーエネルギー学研究センター 研究棟4階大ホール
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化並列化の基礎からチューニングまで)	9月13日	東田助教、レーザー研技術専門職員、情報基盤課職員、NEC	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
IDL利用入門	9月14日	アイティーティー・ヴィアイエス、情報基盤課職員	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	9月15日	サイバネットシステム、情報基盤課職員	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	9月16日	サイバネットシステム	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
MSC Nastran基礎トレーニング	9月13日 ～14日	エムエスシーソフトウェア	エムエスシーソフトウェア 大阪営業所
Marc入門トレーニング	10月13日 ～14日	エムエスシーソフトウェア	エムエスシーソフトウェア 大阪営業所
Patran基礎トレーニング	11月8日 ～9日	エムエスシーソフトウェア	エムエスシーソフトウェア 大阪営業所

テレビ会議システムによる講習会

講 習 会 名	開催日時	開催機関	受 講 場 所
Gaussian 入門	8月9日	東北大学	サイバーメディアセンター 吹田本館 3階大会議室
スーパーコンピュータの高速化技法	9月1日	東北大学	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
MPIプログラミング入門	9月2日	東北大学	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室

「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、北海道大学情報基盤センター、東北大学サイバーサイエンスセンター、東京大学情報基盤センター、東京工業大学学術国際情報センター、名古屋大学情報基盤センター、京都大学学術情報メディアセンター、大阪大学サイバーメディアセンター及び九州大学情報基盤研究開発センターの 8 つの共同利用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、2010 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及びネットワークなどの情報基盤を用いて、これまでに解決や解明が極めて困難とされてきた問題に対し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各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。

2011 年度の課題募集には合計 41 件の応募があり、2011 年 3 月 7 日に東京大学情報基盤センターで開催された課題審査委員会及び運営委員会にて審議され、39 件が採択されました。この内、大阪大学では 2010 年度と同じ 6 機関が利用しています。

2011 年度の大阪大学利用課題

受付番号	研究課題名	応募機関	利用大学
JHPCN11-0022	粗視化分子動力学法による高分子系シミュレーション基盤の計算機科学的な高度化検討	防衛大学校	北大、東大、名大、阪大
JHPCN11-0024	次世代ペタスケール CFD のアルゴリズム研究	東北大学	東北大、名大、阪大
JHPCN11-0027	マルチパラメータサーベイ型シミュレーションを支えるシステム化技術に関する研究	東京大学	北大、東北大、東大、東工大、名大、京大、阪大、九大
JHPCN11-0029	計測融合オペレーション実現のための大規模計算機空気冷却風速場の実時間解析	独立行政法人理化学研究所	東北大、阪大、九大
JHPCN11-0032	学術グリッド基盤の構築・運用技術に関する研究	国立情報学研究所	北大、東北大、東大、東工大、名大、京大、阪大、九大
JHPCN11-0038	グリッドデータファームによる大規模分散ストレージの構築とサイエンスクラウド技術の研究	独立行政法人情報通信研究機構	東北大、名大、阪大、九大

「大規模計算機システムにおける企業利用」の活動状況

全国共同利用施設であるスーパーコンピュータを有する7大学は、2007年7月より2009年3月まで、東京大学を窓口として文部科学省の「先端研究施設共用イノベーション創出事業」に参加し、社会貢献の一環として大学で開発された応用ソフトウェアとスーパーコンピュータの利用を民間企業に提供してきました。また、2009年4月から2011年3月までは、「研究開発施設共用等促進費補助金（先端研究施設共用促進事業）」に移行し、引き続きスーパーコンピュータの利用を民間企業に提供してきました。

2011年度から、7大学それぞれが自主事業に移行し、サイバーメディアセンターも有償でスーパーコンピュータの利用を民間企業に提供しています。

2011年度第1期の募集には2企業の応募があり、この内、1企業を採択しました。

■2011年度 募集日程

- ・2月 2011年度第1期 募集（終了）
- ・5月 2011年度第2期 募集（終了）
- ・8月1日(月) 2011年度第3期 募集 受付開始
- ・8月31日(水) 2011年度第3期 募集 受付締切
- ・9月上旬 ヒアリング実施
- ・9月中旬 審査結果通知
- ・10月 利用開始
- ・11月 2011年度第4期 募集

2011年度第1期企業利用一覧

企業名	申請課題名	利用コース（申請額）	利用期間（計画）
NPO法人バイオグリッドセンター関西	創薬分野におけるHPCの利用促進及び普及・啓蒙	10万円	2011年4月～2012年3月

（企業利用の案内）

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/shinsei/kigyo/index.html>

2011 年度大規模計算機システム利用相談員・指導員

【利用相談員】 委嘱期間：2011 年 4 月 1 日～2012 年 3 月 31 日

氏 名	所 属	職 名
高木 達也	大阪大学大学院薬学研究科	教 授
武知 英夫	阿南工業高等専門学校 機械工学科	准教授
山井 成良	岡山大学情報統括センター	教 授

【利用指導員】 委嘱期間：2011 年 4 月 1 日～2012 年 3 月 31 日

氏 名	所 属	職 名
板野 智昭	関西大学システム理工学部	准教授
武知 英夫	阿南工業高等専門学校 機械工学科	准教授
藤 堅正	近畿大学理工学部	講 師

2011 年度大規模計算機利用システム相談員 自己紹介

高木 達也（たかぎ たつや）

（大阪大学大学院薬学研究科 生命情報環境科学専攻 教授）

大阪大学大学院薬学研究科の高木達也と申します。よろしくお願い申し上げます。

数えてみれば、1983年からだと思いますので、大型計算機センター時代からもう28年も、相談員をさせて頂いております。この間、相談内容も大きな変化がありました。当初は、皆さんプログラムを自ら組まれる方ばかりでしたので、Fortran（当時はFORTRAN77）のプログラミング方法が主たる問い合わせでしたが、現在は、アプリケーションの使い方や、基本的な実行時エラーが、主たる質問内容になっています。今後、種々の分野のデータベースや周辺技術の進歩により、更に変化するものと考えております。

さて、特に実験・観測研究者の皆さん、皆さんのお手元には大量の実験・観測データが、解析できないで残っていませんか。たとえば、

- ・オミクスデータ
- ・大量のアンケート結果
- ・数理的解析を行いたい文献データ
- ・疫学、臨床データ
- ・雑多なテキストの山

などは、宝の山かも知れません。そのような場合には、どうか一度ご相談下さい。例えば、テキストマイニングやアンケート結果の共分散構造分析、ベイジアンネットワーク法による解析、疫学データの一般化ノンパラメトリック回帰など、適切なデータ解析方法をご提示できるかも知れません。これからは、大量の網羅的実験データを、数理的に解析することにより、情報を得る時代になってきました。これまでよりもっと、実験研究者とデータ解析研究者の密な語り合いが必要だと、私は考えています。

武知 英夫（たけち ひでお）

（阿南工業高等専門学校 機械工学科 准教授）

最近ユーザーになられた学生諸君や近年に質問が寄せられるようになった企業に籍をおく共同研究者の皆さんに、我々(たった三人しかいませんが)のプログラム指導員制度について改めて紹介をさせて頂きたいと思っております。プログラム指導員と聞けば専従職員のようなのですが、我々は質問メールを投稿される方と同じく課金を支払って計算機を使用している現役ユーザーばかりです。Linux 汎用機や SX から得られた情報を相互利益のために共有しようという目的で参画するボランティアグループと思って頂ければと思います。質問を投稿されるユーザーは、システムのエラー情報を我々のグループと一緒に共有するという決意を固めてから送信をお願いします。複数のメンバーから回答メールが届くと、個人情報不正に転送されたと思われ以降の質問メールを急に停止されるユーザーもおられます。幸いなことに我々のグループには頼りになるサイバーメディアセンターの事務職員のバックアップ体制があり、ユーザーの質問に対してプロによるサポートがあることを申し添えます。

山井 成良（やまい なりよし）

（岡山大学情報統括センター 教授）

岡山大学情報統括センターの山井と申します。平成9年11月まで大阪大学大型計算機センター研究開発部に在籍しておりました。事前にお知らせいただければ、電子メールだけでなくセンターでの直接相談にも応じます。

さて、私の担当領域ですが、大規模計算機システムの基本的な利用法およびネットワークサービス全般とさせていただきます。遠隔地からの利用に関する相談も歓迎します。
本年度も微力ながら皆様のお役に立てれば幸いです。

2011 年度大規模計算機システム利用指導員 自己紹介

板野 智昭（いたの ともあき）

（関西大学システム理工学部 物理・応用物理学科 准教授）

大阪府出身で吹田市にある府立千里高校卒業後、駿台予備校での真黒な浪人生活を経て、晴れて京都大学理学部に進学、高校で大好きになった物理学を修めました。趣味は旅と読書とサイクリングで、特に旅では見知らぬ土地で友を作ることが好きです。研究に新しいアイデアをもたらすにも、旅とサイクリングによるリフレッシュが効果的（すなわち仕事の一部）だと信じていますが、最近は雑務に追われてなかなかできておりません。

さて、私の専門は流体物理で、研究と計算機は切っても切り離せない関係にあります。計算機環境は愛用のラップトップにインストールしたLinuxで、研究時間の大半は計算機の前で過ごしてきました。（ただし最近は雑用が多く、机の前に座る時間が激減しています。）阪大のメディアセンターではありませんが、大型計算機も使い始めて10年くらいになるでしょうか。長年の一利用者としてあちこちの計算機センターでお世話になっていますので、その視点から皆さんのお役に立てればと思っています。

武知 英夫（たけち ひでお）

（阿南工業高等専門学校 機械工学科 准教授）

SINET が毎日順調に稼働しているためか周りの同僚も自分の科学研究費の申請書が SINET を経由して転送されていることなど関係がないと思っている。従って、指導員が新規ユーザー獲得キャンペーンで足を運んでも学内の反応を得ることなど殆ど期待できない。しかし、誠に有難いことに今年は新規ユーザから登録を得ることができました。ところで、自力でシステムを稼働してきた国立大でも直近のシステム更新を学外にサーバーを置くクラウド契約に切り替える仕様が有力になり、サーバーが国内か国外かで議論になったそうです。大型計算機組織のクラウドサービスを始めて半世紀の経験を有するセンターでクラウドビジネスの拡大を始めてはと思います。

藤 堅正（ふじ けんしょう）

（近畿大学理工学部 電気電子工学科 講師）

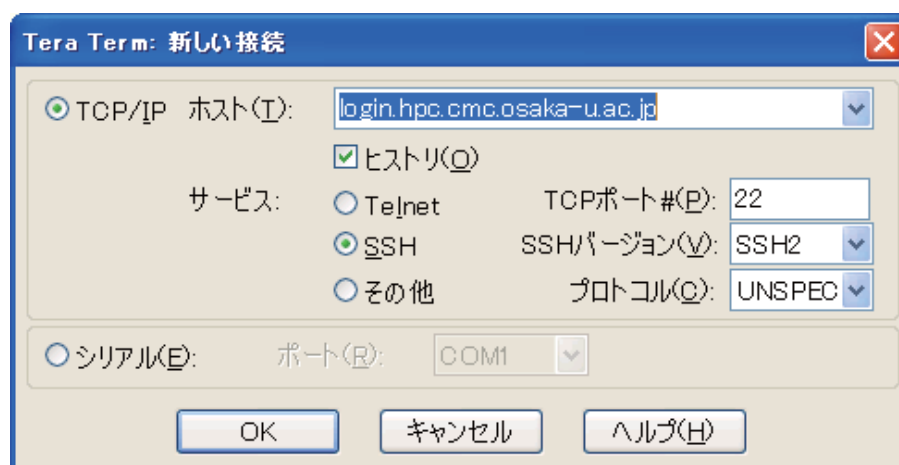
近畿大学の藤です。エネルギー材料（核燃料・原子炉材料）に関する実験系の研究室ですが、核燃料内部の化学状態を検討するための多相化学平衡計算や、燃料被覆管の水蒸気酸化シミュレーションあるいは燃料被覆材と核分裂生成物との固相反応の挙動解析に関する計算でサイバーメディアセンターを利用しております。

また、電子エネルギーレベルの計算を少しだけお手伝いすることもあります。何れもFORTRANを使用している関係上、研究室で適宜FORTRANのご相談を承っております。宜しくお願いします。

大規模計算機システム FAQ

1. ログインについて

計算機には ssh で接続します。ssh クライアントソフトは Windows 環境では Putty、TeraTerm などが一般的に利用されています。TeraTerm の接続画面を例にとると、ホスト名に(login.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp)を指定し、サービスで SSH を選択します。ログインするとホスト名の選択画面が表示されますので、Frontend Terminal(fronta~frontd)の番号(1~4)を入力しフロントエンド端末に接続します。フロントエンド端末でプログラムのコンパイル、ジョブの実行、計算結果の確認など全ての処理を行えます。



2. プログラムのコンパイルについて

プログラムのコンパイルはフロントエンド端末で行います。

% ifort test.f ——— (Intel FORTRANコンパイラの実行)

Intel コンパイラは PC クラスタで実行するロードモジュール(a.out)を作成します。

% sxf90 test.f ——— (SX用クロスコンパイラの実行)

SX 用クロスコンパイラは SX-8R 用のロードモジュール(a.out)をフロントエンド端末で作成します。SX-9 用のロードモジュールを作成する場合はオプションに-cfsx9 を付けてください。

各コンパイラの使用例

	C	C++	FORTRAN
Intel コンパイラ	% icc test.c	% icpc test.c	% ifort test.f
MPI コンパイラ (MPI-CH 1.2.7p1a)	% mpicc test.c	% mpiCC test.c	% mpif77 test.f % mpif90 test.f
SX用クロスコンパイラ	% sxc++ test.c	% sxc++ test.c	% sxf90 test.f
SX-9 用の場合は "-cfsx9" オプションを利用			

※コンパイルオプションの詳細についてはマニュアル等を参照してください。

3. プログラムの実行について

コンパイルしたロードモジュール (a.out) をスーパーコンピュータ及び PC クラスタで実行するには、NQS スクリプトファイルを作成し、バッチリクエストとして投入します。

キュー名 (以下の#PBS -q PCC) を PCC にすることで PC クラスタに、SX9 とすることで SX-9 に、SX8F・SX8L とすることで SX-8R にバッチリクエストを投入できます。なお、スクリプトファイルの作成には、vi などのエディタをご利用ください。

NQS スクリプトの例

```
#!/bin/csh
#
### Sample Script ###
#
#PBS -q PCC # (バッチリクエストを投入する計算機のキュー名の指定)
#PBS -l cpunum_job=4, memsz_job=15GB, elapstim_req=5:30:00 # (使用するCPU数・メモリ量・時間を指定)

cd $PBS_O_WORKDIR # (qsub実行時のカレントディレクトリへ移動)
./a.out # (プログラムの実行)
```

バッチリクエストの投入は、qsub コマンドを使います。

正常にバッチリクエストを受け付けるとリクエスト ID(ジョブ番号)が付けられます。

```
qsub [スクリプトファイル名]
Request 12345.cmc submitted to queue: PCC.
```

↑
受け付けたジョブには リクエスト ID が付けられる。

4. バッチリクエストの確認について

バッチリクエストの状態は下記のコマンドで確認できます。バッチリクエストは投入が完了すると最初 QUE 状態になります。次に、実行開始時間が決まりスケジュールされると ASG 状態になり、実行が開始されると RUN 状態になります。実行が終わると下記のコマンドの表示がなくなり、実行結果がファイルに出力されます。

% qstat	—— (バッチリクエストの状態を確認)
% sstat	—— (SX-8 のバッチリクエストの実行開始時間を確認)
% sstat9	—— (SX-9 のバッチリクエストの実行開始時間を確認)
% sstat -s 11	—— (PC クラスタのバッチリクエストの実行開始時間を確認)

より詳細な利用方法はこちら

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/tebiki/manual-sx.html>

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/service/front_guide.html

5. ファイル転送について

ファイルサーバ (<ftp.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp>) に SSH に対応したファイル転送ソフト (Unix/Linux : sftp、scp、Windows : WinSCP など) で接続します。

詳細な設定、手順は下記の URL をご覧ください。(sftp、scp、WinSCP を例に手順を説明しています)

http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/tebiki/file_transfer.html

6. パスワードの変更について

下記の URL から大規模計算機システムポータルにログインし、「パスワード変更」のタブを選択してください。なお、サーバの passwd コマンドでは変更できませんのでご注意ください。

<https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/>

※なお、Mac OS を利用されている場合は Firefox をご利用ください。

7. サポートについて

お問い合わせ頂く内容により担当部署が変わります。

- 大規模計算機システムの利用に関する質問や、問い合わせ先が不明な質問は、下記の情報推進部 情報基盤課 研究系システム班宛にお問い合わせください。

メール (system@cmc.osaka-u.ac.jp)、または電話(06-6879-8813)

- 大規模計算機システムで実行するプログラム等に関する質問は、下記の利用相談員宛にお問い合わせください。

メール(hpc-support@hpc.cmc.osaka-u.ac.jp)

なお、利用相談員については下記の URL をご覧ください。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/support/advisor.html>

- その他、問い合わせ先等の詳細は下記の URL をご覧ください。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/support/inquiry.html>

8. マニュアルについて

下記の URL から大規模計算機システムポータルにログインしてください。「マニュアル」のタブを選択すると、メーカー提供のマニュアルがご覧になれます。また、「講習会資料」のタブを選択すると講習会で使用した資料もご覧になれます。

<https://portal.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/>

9. 利用資格について

大学等の研究者や大学院生等がご利用になれます。利用資格の詳細は下記の URL をご覧ください。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/shikaku/index.html>

また、平成 23 年度から民間企業の方も利用の申請が可能となりました。詳細は下記の URL をご覧ください。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/shinsei/kigyo/index.html>

10. 利用負担金について

大規模計算機システムの利用負担金は、登録時に一定額を支払って頂く年間登録制をとっており、登

録後の利用による利用負担金は発生しません。なお、利用負担金の金額に応じてジョブ実行優先順位（フェアシェア値）、並列実行 CPU 数、メモリサイズ、ファイル使用量などの利用可能な資源に制限をかけています。詳細は下記の URL をご覧ください。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/futankin/index.html>

1 1. 利用申請について

大規模計算機システムを利用される方は「大阪大学サイバーメディアセンター利用申請書」に必要事項を記入・捺印し、情報推進部 情報基盤課 研究系システム班へ提出してください。詳細は下記の URL をご覧ください。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/shinsei/index.html>

1 2. パスワード忘れについて

大規模計算機システムのパスワードを忘れた場合は、下記の URL にあるパスワード変更届に必要な事項を記入・捺印し、情報推進部 情報基盤課 研究系システム班へ提出してください。パスワード変更届けは下記の URL からダウンロードしてください。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/shinsei/forms.html>

1 3. 試用制度について

本センターでは、これまでに大規模計算機システムを一度も利用していない、利用有資格者を対象にした試用制度を設けています。利用可能な資源は 1 万円の負担金を支払った場合と同等で、利用可能期間は、4 月～9 月に申請の場合は 3 ヶ月間、10 月～3 月に申請の場合は 1 ヶ月間です。利用申請は Web ページから受け付けています。詳細は下記の URL をご覧ください。

<http://www.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp/j/futankin/shiyou.html>

1 4. 他大学の情報基盤センターの情報について

他大学の情報基盤センターの情報については下記の URL をご覧ください。

<http://www.cmc.osaka-u.ac.jp/j/intro/link.html>