



Title	センター報告 サイバーメディアHPCジャーナル No.2
Author(s)	
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2012, 2, p. 43-87
Version Type	VoR
URL	https://hdl.handle.net/11094/70457
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

・ 2011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	----- 45
・ 第18回スーパーコンピューティングコンテスト(SuperCon2012)	----- 64
・ 2012年度大規模計算機システム利用講習会	----- 65
・ 2011年度大規模計算機システム利用講習会アンケート集計結果	----- 66
・ 2012年度「学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点」の活動状況	----- 74
・ 2012年度「大規模計算機システムにおける企業利用」の活動状況	----- 75
・ 2012年度大規模計算機システム利用相談員・指導員	----- 76
・ 大規模計算機システムFAQ	----- 81

2011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、本センターハイブリッドシステムを利用して2011年4月から2012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] Hidefumi Saito and Takeo Kajishima, "Evaluation of aircraft cabin air quality considering breath by people on board", Journal of Fluid Science and Technology, Vol.6, No.6, pp.962-975, 2011.10.
- [2] Takashi Ohta, Hiroki Sakai, Kie Okabayashi, Takeo Kajishima, "Investigation of interaction between vortices and cavitation in a turbulent shear layer", Journal of Fluid Science and Technology, Vol.6, No.6, pp.1021-1035, 2011.10.
- [3] Takeo Kajishima and Shintaro Takeuchi, "Direct numerical simulation of multiphase flows involving dispersed components with deformable interfaces", Heat Transfer - Asian Research, Vol.40, Issue 4, pp.387-403, 2011.7.
- [4] 大山峻幸, 伊井仁志, 杉山和靖, 竹内伸太郎, 高木周, 松本洋一郎, "フロント・トラッキング法を用いた自由界面と剛体壁における単一気泡の反発現象の解析", 日本混相流学会誌, Vol.26, pp. 60-67, 2012.
- [5] Satoshi Ii, Kazuyasu Sugiyama, Shintaro Takeuchi, Shu Takagi, Yoichiro Matsumoto and Feng Xiao, "An interface capturing method with a continuous function: the THINC method with multi-dimensional reconstruction", Journal of Computational Physics, Vol.231, Issue 5, pp.2328-2358, 2012.
- [6] Mohammad Kemal Agusta, Wilson Agerico Diño, Melanie David, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, "Theoretical study of hydrazine adsorption on Pt(111): Anti or cis?", Surface Science, Vol. 605, pp. 1347, 2011.
- [7] Wahyu Tri Cahyanto, Ferensa Oemry, Allan Abraham B. Padama, Mamoru Sakaue, Rachid Belkada, Susan M. Aspera, Masahiro Chikaishi, Shinichi Kunitaka, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Hiroyoshi Maekawa, Kazuo Osumi, Yoshihisa Tashiro, "Favorable pathway of O₂ dissociative adsorption on a single platinum adatom coated on gamma-alumina (111) surface: a density functional theory study", Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 50, pp. 105602, 2011.
- [8] Mary Clare Escaño, Elod Gyenge, Ryan Arevalo, Hideaki Kasai, "Reactivity descriptors of borohydride interaction with metal surfaces", The Journal of Physical Chemistry C, Vol. 115, pp. 19883, 2011.
- [9] Mary Clare Escaño, Tien Quang Nguyen, Hideaki Kasai, "Analysis of band gap formation in graphene by Si impurities: local bonding interaction rules", Chemical Physics Letters, Vol. 515, pp. 85, 2011.
- [10] Wahyu Cahyanto, Mary Clare Escaño, Hideaki Kasai, Ryan Lacdao Arevalo, "Pt-alloy surfaces for non-activated OOH dissociation", e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, Vol. 9, pp. 352, 2011.
- [11] Hirofumi Kishi, Abdulla Ali Abdulla Sarhan, Mamoru Sakaue, Susan Meñez Aspera, Melanie Yadao David, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, Yukio Tamai1, Shigeo Ohnishi, Nobuyoshi Awaya, "Controllability of Electrical Conductivity by Oxygen Vacancies and Charge Carrier Trapping at Interface between CoO and Electrodes", Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 50, pp. 071101, 2011.
- [12] Yogi Wibisono Budhi, Hermawan Kresno Diponjono, I. Noezar, Subagjo, Allan B. Padama, Ferry Aldiansyah, Putri V. Kemala, Hideaki Kasai, "Forced Unsteady State Operation to Improve H₂ Permeability through Pd-Ag Membrane during Start-up", International Journal of Hydrogen Energy, Vol.36, pp. 15372, 2011.
- [13] Yuji Kunisada, Mary Clare S. Escaño, Hideaki Kasai, "Surface magnetism in O₂ dissociation -from basic to application-", Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 23, pp. 394207, 2011.
- [14] Ryan L. Arevalo, Mary Clare S. Escaño, Hideaki Kasai, "First principles study on the adsorption and dehydrogenation of borohydride on Mn(111)", e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, Vol. 9, pp. 257, 2011.
- [15] Yuji Kunisada, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, "A First Principles Study of O₂/Ag(111)-Adsorption and Magnetic Properties-", Journal of

- the Physical Society of Japan, Vol. 80, pp. 084605, 2011.
- [16] Hermawan Kresno Dipojono, Adhitya Gandaryus Saputro, Susan Meñez Aspera, Hideaki Kasai, "Density functional theory study on the interaction of O₂ molecule with Cobalt-(6)Pyrrole clusters", Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 50, pp. 055702, 2011.
- [17] 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, Vol. 50, pp. 055701, 2011.
- [18] Kunio Fujiwara and Masahiko Shibahara, "A Molecular Dynamics Study on Wetting Phenomena at a Solid Surface with a Nanometer-Scale Slit Pore", Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering (投稿中), 2011.
- [19] 川口寿裕, 萩原 健一郎, 乾 真規, 辻拓也, 田中敏嗣, "液中固体粒子挙動のDEM-MPS解析およびPTV計測", 日本機械学会論文集, Vol.78, No.786 B, pp. 276-290, 2012.
- [20] Takuya Tsuji, Yuta Nakagawa, Takemori Takayama, Norihisa Matsumoto, Toshitsugu Tanaka, Yuichi Kadono, "3-D DEM simulation of cohesive soil-pushing behavior by bulldozer blade", Journal of Terramechanics, Vol.49, No.1, pp. 37-47, 2012.
- [21] 井門孝博, 乾真規, 田中敏嗣, "MPS法による液滴漏れ挙動の数値シミュレーション", 粉体工学会誌, Vol.48, No.12, pp. 822-828, 2011.
- [22] 辻拓也, 成田栄嗣, 田中敏嗣, "高濃度粒子を含む流れに壁面が与える影響について", 粉体工学会誌, Vol.48, No.12, pp. 847-858, 2011.
- [23] Yu Takano, Yasuteru Shigeta, Kenichi Koizumi, Haruki Nakamura, "Electronic structures of the Cu₂S₂ core of the Cu_A site in cytochrome c oxidase and nitrous oxide reductase", International Journal of Quantum Chemistry, Vol. 112, Issue 1, pp. 208-218, Jan. 2012.
- [24] Toru Saito, Shusuke Yamanaka, Keita Kanda, Hiroshi Isobe, Yu Takano, Yasuteru Shigeta, Yasufumi Umena, Keisuke Kawakami, Jian-Ren Shen, Nobuo Kamiya, Mitsutaka Okumura, Mitsuo Shoji, Yasunori Yoshioka, Kizashi Yamaguchi, "Possible Mechanisms of Water Splitting Reaction Based on Proton and Electron Release Pathways Revealed for CaMn₄O₅ Cluster of PSII Refined to 1.9 Å X-Ray Resolution", International Journal of Quantum Chemistry, Vol. 112, Issue 1, pp. 253-276, Jan. 2012.
- [25] Nor Shahida Mohd Shah and M. Matsumoto, "Analysis and experiment of all-optical time-interleaved multi-channel regeneration based on higher-order four-wave mixing in a fiber", Optics Communications, Vol. 284, No. 19, pp. 4687-4694, 2011.
- [26] Nor Shahida Mohd Shah, Masaru Sato, and Masayuki Matsumoto, "Adaptive delay control for time-interleaved multi-channel amplitude limiter based on saturation of four-wave mixing in a fiber", Opt. Express, Vol. 19, No. 22, pp. 21246-21257, 2011.
- [27] M. Matsumoto, "Fiber-based all-optical signal regeneration", IEEE J. Selected Topics in Quantum Electronics, Vol. 18, No. 2, pp. 738-752, 2012.
- [28] Toshiyuki ENOMOTO, Urara SATAKE, Takahiro MIYAKE and Norikazu TABATA, "A Newly Developed Polishing Pad for Achieving High Surface Flatness Without Edge Roll Off", Annals of the CIRP, 60, 371-374, 2011.
- [29] Urara SATAKE, Wenxiao WANG, Toshiyuki ENOMOTO and Norikazu TABATA, "Investigation of a Polishing Pad and a Carrier Film for Decreasing Edge Roll Off of Workpiece", Advanced Materials Research, 325, 476-481, 2011.
- [30] 佐竹うらら, 榎本俊之, 三宅貴大, 田畠憲一, "高平坦エッジ形状を実現する研磨パッドの開発(二層構造研磨パッドの上層軟質化によるエッジ平坦性の向上)", 日本機械学会論文集(C編), 78, 786, 669-676, 2012.
- [31] Daisuke Matsunaka and Yoji Shibutani, "Effects of tensile strain on Ag(111) epitaxial growth by kinetic Monte Carlo simulations", Journal of Physics: Condensed Matter, Vol. 23, No. 26, pp. 265008-1-6, 2011.
- [32] Ryuichi Tarumi, Tomohiro Matsuhisa and Yoji Shibutani, "Numerical analysis for acoustic resonance of one-dimensional nonlinear elastic bar", Jpn. J. Appl. Phys., Vol. 50, pp. 07HB02, 2011.
- [33] 廣内 智之, 都留 智仁, 渋谷 陽二, "高次 Multi-phase-field モデリングによる粒成長過程の予測", 日本機械学会論文集A, Vol.77, No.782, pp.1723-1734, 2011.
- [34] Tomoyuki Hirouchi, Tomohito Tsuru and Yoji Shibutani, "Grain Growth Prediction with Inclination Dependence of <110> Tilt Grain Boundary us-

- ing Multi-Phase-Field Model with Penalty for Multiple Junctions”, Computational Materials Science, Vol. 53, No. 1, pp. 474-482, 2012.
- [35] Yoji Shibutani, Takuya Nakano, Hiro Tanaka and Yasuo Kogo, “Size effects on deformation mechanism of nanopillars by FIB-CVD using double-cantilever testing”, Journal of Materials Research, Vol. 27, No. 3, pp. 521-527, 2012.
- [36] Junyoung Park, Yoji Shibutani, “Common errors of applying the Voronoi tessellation technique to metakitic glasses”, Intermetallics, Vol. 23, pp. 91-95, 2012.
- [37] Ryuichi Tarumi, Hassel Ledbetter and Yoji Shibutani, “Some remarks on the range of Poisson's ratio in isotropic linear elasticity”, Philosophical Magazine (accepted).
- [38] Ryuichi Tarumi, Shinpei Yamada and Yoji Shibutani, “Acoustic resonance of a two-dimensional isotropic medium studied by Airy stress function”, Jpn. J. Appl. Phys. (in press).
- [39] Ryuichi Tarumi, Tomohiro Matsuhisa and Yoji Shibutani, “Low temperature elastic constants and piezoelectric coefficients of LiNbO₃ and LiTaO₃: RUS measurement and lattice dynamics analysis”, Jpn. J. Appl. Phys. (in press).
- [40] 渋谷陽二, 松中大介, 垂水竜一, “ホールペッヂ効果の塑性ひずみ依存性と温度依存性”, 材料 (in press).
- [41] Michio Ishikawa, Makoto Katsura, Satoru Nakashima, Kento Aizawa, Tsutomu Inoue, Hidekazu Okamura, and Yuka Ikemoto, “Modulated near-field spectral extraction of broadband mid-infrared signals with a ceramic light source”, Optics Express, Vol. 19, Issue 13, pp. 12469-12479, 2011.
- [42] Yoko Kebukawa, Satoru Nakashima, Michio Ishikawa, Kento Aizawa, Tsutomu Inoue, Keiko Nakamura-Messenger, Michael E. Zolensky, “Spatial distribution of organic matter in the Bells CM2 chondrite using near-field infrared microspectroscopy”, Meteoritics & Planetary Science, Volume 45, Issue 3, pages 394–405, 2010.
- [43] Yuka Ikemoto, Michio Ishikawa, Satoru Nakashima, Hidekazu Okamura, Yuichi Haruyama, Shinji Matsui, Taro Moriwaki, and Toyohiko Kinoshita, “Development of Scattering Near-Field Optical Microspectroscopy Apparatus Using an Infrared Synchrotron Radiation Source”, Optics Communications (in press), 2012.
- [44] K. Iwano, “Incoherence induced by phonon excitations in domain-growth dynamics”, Role of the domain center-of-gravity motion, Phys., Rev. B 84, 235139-(1-5), 2011.
- [45] Hideo Shiogama, Masahiro Watanabe, Masakazu Yoshimori, Tokuta Yokohata, Tomoo Ogura, James D Annan, Julia C Hargreaves, Manabu Abe, Youichi Kamae, Ryouta O'ishi, Rei Nobui, Seita Emori, Toru Nozawa, Ayako Abe-Ouchi and Masahide Kimoto, “Perturbed Physics Ensemble using the MIROC5 Coupled Atmosphere-Ocean GCM without Flux Corrections”, Experimental Design and Initial Results. Climate Dynamics, revised, 2012.
- [46] 中沢一雄, 原口亮, 芦原貴司, 難波経豊, 戸田直, 山口豪, 井尻敬, 高山健志, 五十嵐健夫, 倉智嘉久, 池田隆徳, “心臓モデリングとコンピュータシミュレーションが導く不整脈研究の世界”, 心臓, Vol. 42, Suppl. 4, pp. 208-215, 2010.
- [47] 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.
- [48] 稲田慎, 原口亮, 中沢一雄, “イオンチャネルモデルを用いた心筋組織における興奮伝播シミュレーション”, 医学のあゆみ, Vol. 238, No. 3, pp. 223-228, 2011.
- [49] J. Gao, Y. Wang, K.M. Folta, V. Krishna, W. Bai, P. Indeglia, A. Georgieva, H. Nakamura, B. Koopman, and B. Moudgil, “Polyhydroxy Fullerenes (Fullerols or Fullerolens): Beneficial Effects on Growth and Lifespan in Diverse Biological Models”, PloS one, 6, e19976, 2011.
- [50] K. Horiuti and T. Ozawa, “Multi-mode stretched spiral vortex and nonequilibrium energy spectrum in homogeneous shear flow turbulence”, Physics of Fluids, Vol. 23, No. 3, 35107, Mar. 2011.
- [51] K. Horiuti and Y. Masuda, “Extraction of nonequilibrium -7/3 energy spectrum in experimental measurement turbulence data”, Bulletin of the American Physical Society, Vol. 56, No. 11, 270-271, Nov. 2011.
- [52] K. Horiuti, K. Matsumoto and M. Adachi, “Marked drag reduction in non-affine viscoelastic turbulence in homogeneous isotropic and pipe flows”, J. Phys.: Conf. Ser., Vol. 318, 9216, Dec. 2011.
- [53] Yoshitaka Fujimoto and Susumu Saito, “For-

- mation, stabilities, and electronic properties of nitrogen defects in graphene”, Physical Review B, Vol. 84, pp. 245446_1-7, Dec. 2011.
- [54] 片岡浩人, 田村哲郎, “LESによる実在市街地上空風の鉛直分布と地表面粗度との関係に関する研究”, 日本建築学会構造系論文集, Vol. 77, No. 678, 2012.8 (掲載予定) .
- [55] Koichi TSUJIMOTO, Koji AO, Toshihiko SHAKOUCHI and Toshitake ANDO, “Numerical Investigation on Flow Structures and Mixing Performances of Vector-Controlled Free Jet using DNS”, Journal of Fluid Science and Technology, Vol. 6, No. 4, pp.401-411, 2011.
- [56] Edyta Dzieminska, Motoki Fukuda, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, “Fast flame propagation in Hydrogen-Oxygen mixture”, Combustion Science and Technology, accepted, .
- [57] Edyta Dzieminska, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, and Nobuyuki Tsuboi, “Lewis number profiles in propagating flame and DDT process”, Science and Technology of Energetic Materials, accepted, .
- [58] K. Tatsumi, Y. Komori, T. Arakawa, K. Nishitani and K. Nakabe, “Development of a Numerical Model for Single Red Blood Cell Motions in Stationary Fluid in the Presence of Uniform Magnetic Field”, Progress in Computational Fluid Dynamics, (投稿中).
- [59] Makoto Asahara, Nobuyuki Tsuboi, A. Koichi Hayashi, and Eisuke Yamada, “Two-dimensional analysis of Hydrogen/Oxygen cylindrical detonation using AUSMDV scheme”, Archivum Combustions, Polish Academy of Science, Vol. 30, No. 3, pp. 177-186, 2011.
- [60] Y.Kimura, N.Tsuboi, A.K.Hayashi, E.Yamada, “Numerical Study and Performance Evaluation for Pulse Detonation Engine with Exhaust Nozzle (1st report: Estimation on Performance using a Detailed Reaction Model)”, Transactions of the Japan Society for Aeronautical and Space Sciences, Vol.55, No.1, pp.51-59, Jan., 2012.
- [61] 町田正博、犬塚修一郎、松本倫明, “Recurrent Planet Formation and Intermittent Protostellar Outflows Induced by Episodic Mass Accretion”, The Astrophysical Journal, vol. 729, p42-59, 2011 年 3 月.
- [62] 町田正博、松本倫明, “The origin and formation of the circumstellar disc”, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, vol. 413, p2767-2784, 2011 年 6 月.
- [63] 町田正博、犬塚修一郎、松本倫明, “Effect of Magnetic Braking on the Circumstellar Disk Formation in a Strongly Magnetized Cloud”, Publications of the Astronomical Society of Japan, vol. 63, p555-573, 2011 年 6 月.
- [64] K. Tomisaka and K. Tomida, “Observational Identification of First Cores: Non-LTE Radiative Transfer Simulation”, PASJ, 63, 5, 1151-1164, 2011.
- [65] Kenji Kiyohara, Hiroshi Shioyama, Takushi Sugino, and Kinji Asaka, “Phase transition in porous electrodes. II. Effect of asymmetry in the ion size”, J. Chem. Phys., Vol. 136, 94701, 2012.
- [66] 池田浩人, 森脇英恵, 松原友規, 湯川美穂, 岩瀬由紀子, 湯川栄二, 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 (2) カテキンのgalloyl基の有無が不溶性複合体形成に与える影響”, YAKUGAKU ZASSHI, 132(1), 145-153, 2012.
- [67] S.Matsunaga, “Dynamical and thermodynamic properties of Ag⁺ and Cu⁺ halide mixtures”, Molecular Simulation, Volume 38, Issue 5, pages 384-388, April 2012.
- [68] M.Kusakabe, S.Takeno, T.Koishi, S.Matsunaga and S.Tamaki, “A theoretical extension for the electrical conductivity of molten salts”, Molecular Simulation, Volume 38, Issue 1, pages 45-56, January 2012.
- [69] S.Matsunaga and S.Tamaki, “On the inter ionic potentials of molten salts”, The European Physical Journal Web of Conferences, vol.15, 02010, 6pp, 2011.
- [70] Saita, S., A. Kadokura, N. Sato, S. Fujita, T. Tanaka, Y. Ebihara, S. Ohtani, G. Ueno, K. Murata, D. Matsuoka, A. Kitamoto, and T. Higuchi, “Displacement of conjugate point during a substorm in a global MHD simulation”, Journal of Geophys. Res., Vol. 116, A06213, 13 pp., doi: 10.1029/2010JA016155, 2011.
- [71] 渡邊 英伸, 山本 和憲, 村田 健史, 木村 映善, 亘 慎一, 村山 泰啓, 宮地 英生, 萩野 龍樹, 深沢 圭一郎, “3 次元可視化パラメータ共有による多地点遠隔ボリュームコミュニケーションシステム”, 電子情報通信学会和文論文誌, D, J95-D, 5, 2012.

2 国際会議会議録掲載論文

- [1] Byung-jin An, Takeo Kajishima, "Discussion of the influence of turbulence models on unsteady cavitation flows past a hydrofoil", 3rd International Cavitation Forum 2011, 2011.7.
- [2] Chang-hwa Han, Takeshi Omori, Takeo Kajishima, "Numerical simulation of turbulent flow past a serrated airfoil", ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011, AJK2011-02009, 2011.7.
- [3] Toshiaki Fukada, Takeshi Omori, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, "Direct numerical simulation of flow past a solid particle - Influence of streamline curvature and particle non-sphericity -", ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011, AJK2011-20007, 2011.7.
- [4] Suguru Miyauchi, Takeshi Omori, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, "Numerical simulation of unsteady flow through a two-dimensional channel with a vocal cord model", ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011, AJK2011-20009, 2011.7.
- [5] Kazuyasu Sugiyama, Satoshi Ii, Shintaro Takeuchi, Shu Takagi and Yoichiro Matsumoto, "A Full Eulerian Finite Difference Method for Hyperelastic Particles in Fluid Flows", ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011, AJK2011-04001, 2011.7.
- [6] Takeo Kajishima, Shintaro Takeuchi, Suguru Miyauchi, "Fixed-Grid FSI Technique - IB-FEM Coupled Method", Lectures on Computational Fluid-Structure Interaction, pp.45-54, 2012.3.
- [7] Chang-hwa Han, Takeshi Omori, Takeo Kajishima, "Numerical Simulation of Reduction of Discrete Frequency Noise by Trailing Edge Serration of Airfoil", 8th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, GSF20-003, 2012.3.
- [8] Suguru Miyauchi, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, "Numerical Simulation of Intermittent Flow through Two-Dimensional Elastic Channel", 8th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, GSF22-005, 2012.3.
- [9] Toshiaki Fukada, Shintaro Takeuchi, Takeo Kajishima, "Comparison of fluid force and movement of an arbitrary-shaped particle in uniform and curved flows", 8th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, GSF25-008, 2012.3.
- [10] Byung-jin An, Takeo Kajishima, "A Prediction Method of Cavitation Surge by Response Analysis of Flow Rate Fluctuation in a Two-Dimensional Cascade", 8th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, GSF26-015, 2012.3.
- [11] Koji Shibata, Takeshi Omori, Takeo Kajishima, "Numerical Analysis of Gas-Liquid Interface Instability due to Impinging Jet", 8th JSME-KSME Thermal and Fluids Engineering Conference, GSF32-012, 2012.3.
- [12] Shintaro Takeuchi, Takaaki Tsutsumi, Takeo Kajishima, "Effect of solid-liquid heat conductivity ratio on two-phase flow behaviours", International Symposium on Discrete Element Modelling of Particulate Media, No.A025, 2012.3.
- [13] Yukio Kaneda, Yasuyuki Yokota, Yoshitada Morikawa, and Ken-ichi Fukui, "First-Principle Molecular Dynamics Simulation of the Aqueous $\text{Fc}^- / \text{Fc}^+$ Redox Reaction: Toward the Redox Reaction of Electrode Interface", 7th Handai Nanoscience and Nanotechnology International Symposium, Osaka, Japan, Nov. 2011.
- [14] Yasuyuki Yokota, Yukio Kaneda, Yoshitada Morikawa, and Ken-ichi Fukui, "Electrochemical Properties of Ferrocene in Aqueous Solutions Using First-Principle Molecular Dynamics Calculations", International Symposium on Surface Science -Towards Nano-, Bio-, and Green Innovation-(ISSS-6), Tokyo, Japan, Dec. 2011.
- [15] Kunio Fujiwara and Masahiko Shibahara, "A Molecular Dynamics Study on the Wetting Phenomena at a Solid Surface with a Nanometer Scale Slit Pore", Proceedings of the Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow 2011, 037, CD-ROM, Sep. 2011.
- [16] Kobayashi, T., Shimada, N. and Tanaka, T., "DEM-CFD Coupling Simulation of Fluidized Behavior of Geldart's Group A Particles (A Contact Force Model for Expressing Adhesion Force)", Proc. of ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011 (AJK2011-FED), AJK2011-120112011.
- [17] Takuya Miyauchi, Satoshi Oh, Takuya Tsuji, Toshitsugu Tanaka, "Motion and Temperature of Individual Particles in Two-Dimensional Fluidized Bed with Heat Transfer", Proc. of ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011 (AJK2011-FED), AJK2011-120232011.
- [18] Yu Takano, Orio Okuyama, Yasuteru Shigeta, Haruki Nakamura, "Electronic structures of the Cu_2S_2 core of the Cu_A site in cytochrome *c* oxidase",

- 52th Sanibel Symposium, The King and Prince Golf & Beach Resort, Georgia, Feb. 2012.
- [19] D. Matsunaka and Y. Shibutani, "Strain Dependence of Adsorption and Dissociation of NO on Metal Surfaces by First-principles Calculations", 28th European Conference on Surface Science (ECOSS28), Poland, August 2011.
- [20] Munazah Andrabi, Hisato Kondoh, "Genome-wide prediction of POU/SOX factor dependent regulatory modules involved in the developmental processes", Third International Sox Meeting, Grainau, Germany, 2011 年 9 月 12 日。
- [21] Michio Ishikawa, Makoto Katsura, Satoru Nakashima, Kento Aizawa, Tsutomu Inoue, Yuka Ikemoto and Hidekazu Okamura, "Application of a Modulating Technique to Detect Near-Field Signals Using a Conventional IR Spectrometer with a Ceramic Light Source", e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, Vol. 9, pp.40-45, 2011.
- [22] Yuka Ikemoto, Taro Moriwaki, Toyohiko Kinoshita, Michio Ishikawa, Satoru Nakashima and Hidekazu Okamura, "Near-Field Spectroscopy with Infrared Synchrotron Radiation Source", e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, Vol. 9, pp.63-66, 2011.
- [23] Inada S, Ashihara T, Haraguchi R, Iwata M, Nakazawa K, "Stability of ventricular fibrillation is altered by wall deformation after the onset of fibrillation", Asia Pacific Heart Rhythm Society Scientific Session, 2011.
- [24] Haraguchi R, Ashihara T, Tsumoto K, Inada S, Nakazawa K, "Rotational anisotropy prevents transitions of tachycardia to fibrillation in the ventricular wall model with large transmural dispersion of repolarization: a simulation study", Asia Pacific Heart Rhythm Society Scientific Session, 2011.
- [25] Haraguchi R, "Transmural Dispersion of Repolarization Determines Scroll Wave Behavior During Ventricular Tachyarrhythmias – A Simulation Study", The 4th Global COE International Symposium on Physiome and Systems Biology for Integrated Life Sciences and Predictive Medicine, 2011.
- [26] N. FURUSHIRO, T. YAMAGUCHI, S. TERAUCHI, S. MATSUDA, S. SHIMADA, "Suppression of Tool Wear in Diamond Turning of Steels by Surface Modification - Effect of Carburizing-", Proc. ASPE 2011 Annual Meeting, Denver, U.S.A(CDR), P4, Nov. 13-18, 2011.
- [27] T. KANEEDA, H. TORIGOE, H. IWASHITA, S. SHIMADA, K. OBATA, L. ANTHONY, "Effects of Internal Micro-defects on Diamond Tool Wear in Precision Cutting -- Micro FT-IR Analysis for Internal Micro-defects at the Tool Edge --", Proc. ASPE 2011 Annual Meeting, Denver, U.S.A(CDR), P10, Nov. 13-18, 2011.
- [28] H. Nakamura, Y. Nozaki, and S. Watano, "Molecular Dynamics Analysis of Passive Transport of Fullerene C₆₀ Through Lipid Bilayers", Proc. of the International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT) 2011, # II3- 5, 2011.
- [29] Y. Nozaki, H. Nakamura, T. Iwasaki and S. Watano, "Translocation of Fullerene C₆₀ Through Lipid Membranes with Different Packing Density: A Molecular Dynamics Simulation Study", Proc. of the International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT) 2011, # II3-PO4-5 , 2011.
- [30] Yoshitaka Fujimoto and Atsushi Oshiyama, "Formation and Stability of 90 Degree Dislocation Cores in Ge Films on Si(001)", AIP Conference Proceedings, Vol. 1399, pp. 185-186, 2011.
- [31] Kataoka, H. and Tamura, T, "Numerical prediction of the peak pressure distributions on square cylinder by LES", 13th International Conference on Wind Engineering, Paper No. 190, 2011.7.
- [32] Kazuya Tsuboi, Tatsuya Hasegawa, "An Analysis on Local Burning Velocity and Flame Displacement Speed Using DNS Database", 13th International Conference on Numerical Combustion, p.205, Apr. 2011.
- [33] Kazuya Tsuboi, Tatsuya Hasegawa, "DNS including the Chemical Process on a Solid Surface in Turbulent Premixed Flames", Proceedings of the Eighth KSME-JSME Thermal and Fluids Engineering Conference, GST04-012, Mar. 2012.
- [34] Y. Yoshikawa and Y. Ide, "The wind-driven turbulence and flow under surface heating", Ocean Sciences Meeting 2012, Saltlake City, USA, 2012 年 2 月 20 日.
- [35] Koichi TSUJIMOTO,Koji AO,Toshihiko SHAKOUCHI, and Toshitake ANDO, "Mixing and Flow Structures of Vector-Controlled Free Jets using DNS", Seventh International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena(TSFP-7),CD-ROM, pp.1-6, Jul. 2011.
- [36] Tsujimoto, K., Ao, K., Shakouchi, T. and Ando, T., "Direct Numerical Simulation of Vector-Controlled Free Jets", 13 th European Turbulence Conference

Books of Abstract, p.172, Sep. 2011.

- [37] 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.
- [38] Tetsuro Tamura, "Kojiro Nozawa One-way coupling of nested grids in WRF-LES and local LES for turbulent boundary layer".
- [39] E. Dzieminska, M. Fukuda, A.K. Hayashi, N. Tsuboi, and E. Yamada, "Fast flame propagation and ignition process of DDT in the boundary layer of H₂/O₂ mixture", 28th International Symposium on Shock Waves, Manchester, 17-22, July 2011.
- [40] Motoki Fukuda, Edyta Dzieminska, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, and Nobuyuki Tsuboi, "Effect of Wall Conditions on DDT in Hydrogen-Oxygen Mixture", 23rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, University of California, Irvine, Paper No. 207, July 24-29, 2011.
- [41] Makoto Asahara, Nobuyuki Tsuboi, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, "Detailed Shock Configuration of Cylindrical Cellular Detonation", 23rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, University of California, Irvine, Paper No. 324, July 24-29, 2011.
- [42] Takayuki Yamada, Yuho Uemura, Nobuyuki Tsuboi, A. Koichi Hayashi, and Eisuke Yamada, "Physics of Detonation Propagation in Rotating Detonation Engine", 23rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, University of California, Irvine, Paper No. 173, July 24-29, 2011.
- [43] Dzieminska, E., Fukuda, M., Hayashi, A.K., Tsuboi, N., Yamada, E., "Fast Deflagration in the Smooth Tube, in Hydrogen-Oxygen Mixture", 23rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, University of California, Irvine, Paper No. 185, July 24-29, 2011.
- [44] E. Dzieminska, A. K. Hayashi, N. Tsuboi, "Lewis number effect on DDT process and detonation", The 4th International Symposium on Energetic Materials and their Applications - Naha, Okinawa, Japan, 16-B1-4, 16-18 November.
- [45] N. Tsuboi, T. Yamada, A. K. Hayashi, E. Yamada, "Three-dimensional simulation on a rotating detonation engine: Three-dimensional shock structure", The 4th International Symposium on Energetic Materials and their Applications - Naha, Okinawa, Japan, 18-H-2, 16-18 November.
- [46] E. Dzieminska, A.K. Hayashi, E. Yamada, and N. Tsuboi, "Ignition in the boundary layer driven by shock-boundary layer interaction", 3rd International Workshop on Detonation/Detonation Engine, November 19, 2011.
- [47] A. Koichi Hayashi, Tatsuya Aoki, Eisuke Yamada, Nobuyuki Tsuboi, "Bio Fuel and its Pulse Detonation Engine", 3rd International Workshop on Detonation/Detonation Engine, November 19, 2011.
- [48] A. Koichi Hayashi, Yuho Uemura, Takayuki Yamada, Eisuke Yamada, Nobuyuki Tsuboi, "Rotating Detonation Engine Study in AGU", Plenary Lecture, the 2011 Fall Conference of the Korean Society of Propulsion Engineers, Pusan, Korea, November 24, 2011.
- [49] H. Hosoda*, A. K. Hayashi, E. Yamada, "Numerical analysis on combustion efficiency of nano aluminum particle-oxygen two-phase detonation", The 4th International Symposium on Energetic Materials and their Applications - Naha, Okinawa, Japan, 17-A3-1, 16-18 November, 2011.
- [50] N. Kitabayashi, Y. Wada, T. Mogi, T. Saburi, and A.K. Hayashi, "Experimental Study on Auto-Ignition of High Pressure Hydrogen Jets Coming out of Tubes of 0.1-4.2 m in Length", 4th International Conference on Hydrogen Safety, San Francisco, Paper No. 257, September 12-14, 2011.
- [51] M. Asahara, N. Tsuboi, A.K. Hayashi, and E. Yamada, "Dependency of Equivalence Ratio on Hydrogen Cylindrical Detonation Induced by Direct Initiation", 4th International Conference on Hydrogen Safety, San Francisco, Paper No. 257, September 12-14, 2011.
- [52] Edyta Dzieminska, Motoki Fukuda, A. Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, "Fast Flame Propagation in Smooth Tube", ICDERS - a colloquium organized by the Institute for the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, University of California, Irvine, U.S.A., July 24-29, 2011.
- [53] Y. Komori, T. Arakawa, K. Nishitani, K. Tatsumi and K. Nakabe, "Motion of Red Blood Cell in Stationary Fluid under Uniform Magnetic Field", Proc. 3rd Int. Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT-2011), 2011 September 22-26.
- [54] K. Tatsumi, R. Kuroki, K. Nishitani, T. Arakawa and K. Nakabe, "Numerical Modeling of Red Blood Cell Suspended in a Channel with Uniform Mag-

- netic Field”, Proc. ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference (AJK2011), 2011 July 24-29.
- [55] Asahara, M., Tsuboi, N. Hayashi, A.K. and Yamada, E., “Dependency of Equivalence Ratio on Hydrogen Cylindrical Detonation Induced by Direct Initiation”, 4th International Hydrogen Safety, paper no.224, 2011.
- [56] Makoto Asahara, Nobuyuki Tsuboi, A.Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, “Detailed Shock Configuration of Cylindrical Cellular Detonation”, 23rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Oral 324, 2011.
- [57] Nobuyuki Tsuboi, A.Koichi Hayashi, Youhi Morii, Mitsuo Koshi, “Numerical Simulation on Two-Dimensional Detonation including Boundary Layer Effects”, 23rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Oral 187, 2011.
- [58] Takayuki Yamada, Nobuyuki Tsuboi, Yuho Uemura, A.Koichi Hayashi, Eisuke Yamada, “Physics of Detonation Propagation in Rotating Detonation Engine”, 23rd International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems, Poster 173, 2011.
- [59] Nobuyuki Tsuboi, Katsuyoshi Fukiba, Toru Shimada, “Three-Dimensional Numerical Simulation on Unsteady Compressible Flow Using Preconditioning Method: Swirling Injector Flowfield in Hybrid Rocket Engine”, Eighth International Conference on Flow Dynamics (ICFD2011), OS5-15, pp.312-313, 2011.
- [60] N. Tsuboi, T. Yamada, A. K. Hayashi, E. Yamada, “Three-dimensional simulation on a rotating detonation engine: Three-dimensional shock structure”, The 4th International Symposium on Energetic Materials and their Applications, 18-H-2, 2011.
- [61] Youhi Morii, Nobuyuki Tsuboi, Hiroyuki Ogawa, Shinichiro Tokudome, and A. Koichi Hayashi, “Numerical approach to one-dimensional CH₄/O₂ detonation with the reduction model DRG30”, The 4th International Symposium on Energetic Materials and their Applications, 17-A1-1, 2011.11.
- [62] Yuichi Togashi, “Modeling Bio-Molecular Machinery in the Complex Environment Inside the Cell”, Proceedings of the 11th IEEE/IPSJ International Symposium on Applications and the Internet, SAINT 2011, p. 266, 2011.
- [63] Kan Watanabe, Nobuo Funabiki, Toru Nakanishi and Masaru Fukushi, “Modeling and Performance Evaluation of Colluding Attack in Volunteer Computing Systems”, Proc. of The International Multi-Conference of Engineers and Computer Scientists 2012, pp.1658-1663, Mar. 2012.
- [64] TOYOSHIMA,Masayuki, “Creation of metallic movable types of Japanese KANJI/KANA by the Jesuits”, (The 7th international conference on Missionary Linguistics, 2012年2月28日～3月2日、University of Bremen, Bremen, Germany, 2012年3月1日; 白井純と共同発表.
- [65] 豊島正之, “金属活字の製作に於ける異体字”, 漢字字体史研究国際シンポジウム「字体規範と異体の歴史」、International symposium on the history of normative glyphs and their variants, 2011年12月16日～18日、東京外国语大学アジア・アフリカ言語文化研究所, 2011.12.18.
- [66] TOYOSHIMA,Masayuki, “Fazer ligações entre dicionários históricos on-line, e manter bases-de-dados distribuídos”, Simpósio sobre a historiografia linguística, CEDOCHE, Universidade de São Paulo, Brasil, 2011.9.30 [招待発表].
- [67] TOYOSHIMA,Masayuki, “Arquivos digitais japoneses para a pesquisa da historiografia linguística”, Simpósio internacional "Estudos japoneses na América Latina : Diálogos, perspectivas e projetos conjuntos", 2011.9.26--30,Associação brasileira de estudos japoneses(ABEJ), Centro de estudos japoneses, São Paulo, Brasil), Memorial da América Latina, São Paulo, Brasil , 2011.9.29 [招待発表].
- [68] Shun Takahashi, Norio Arai, “Multidisciplinary Investigation by Fluid-Structure-Motion Integrated Simulation”, IV International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering, June. 2011.
- [69] Esmatullah Maiwand Sharify, Norio Arai, Shun Takahashi, “Fluid-Structure Interaction of Circular Cylinders with Elastic Surface”, ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011, July. 2011.
- [70] Esmatullah Maiwand Sharify, Junnan Li, Hiroki Saito, Shun Takahashi, Norio Arai, “Experimental Investigation and Numerical Computation of Fluid-Structure Interaction on a Square-Section Cylinder with Elastic Surface”, 6th International Symposium on Advanced Science and Technology in Experimental Mechanics, Nov. 2011.
- [71] Kubota, Y., K. Yamamoto, K. Fukazawa, and K. T. Murata, “Visualization of fluxrope generation pro-

- cess using large quantities of MHD simulation data”, The 1st ICSU WDS Conference, Kyoto, Japan, September, 2011.
- [72] Watari, S., H. Kato, K. T. Murata, K. Yamamoto, H. Watanabe, Y. Kubota, and M. Kunitake, “Research environment and information service of Space Weather Cloud”, The 1st ICUSU World Data System Conference - Global Data for Global Science -, Space Weather Workshop, Colorado, USA, April, 2011.

- [73] Y.Yamamoto and T. Kunugi, “MHD heat transfer assessment under blanket design condition utilized molten salt coolant by means of new improved RANS simulation”, 10th International Symposium on Fusion Nuclear Technology, Paper No. 2011.

3 国内研究会等発表論文

- [1] 深田利昭, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “曲がった流れの中における固体粒子に働く流体力および粒子の回転に関する研究”, 第 25 回 数値流体力学シンポジウム講演予稿集, B05-4, 2011.12.
- [2] 宮内優, 竹内伸太郎, 梶島岳夫, “流体と声帯を模擬した柔軟構造物との相互作用により励起される振動に関する研究”, 第 25 回 数値流体力学シンポジウム講演予稿集, A07-2, 2011.12.
- [3] 丸谷康二, 梶島岳夫, “準線形近似した Rayleigh-Plesset の式によりベンチュリ管内の気泡の初生を考慮した流れの数値解析”, 第 25 回 数値流体力学シンポジウム講演予稿集, C07-4, 2011.12.
- [4] 韓昌和, 大森健史, 梶島岳夫, “翼の後縁セレーションによる離散周波数騒音の低減に関する研究”, 第 25 回 数値流体力学シンポジウム講演予稿集, A08-4, 2011.12.
- [5] 清水康介, 大森健史, 梶島岳夫, “境界適合格子におけるVOF法を用いた自由界面近傍の物体に作用する流体力の解析”, 第 25 回 数値流体力学シンポジウム講演予稿集, A11-2, 2011.12.
- [6] 丸谷康二, 梶島岳夫, “ベンチュリ管内のキャビテーション流れの数値解析”, 日本機械学会関西支部 第 87 期定期総会講演会講演前刷集, p.1.37, 2012.3.
- [7] 中西寛, 笠井秀明, “固体表面近傍でのミューイオンの非局在効果”, 日本物理学会第 67 回年次大会, 関西学院大学, 2012 年 3 月.
- [8] 坂上護, 笠井秀明, 石原達己, 中西基浩, “希土類系酸化物における酸素イオン伝導”, 日本物理学会第 67 回年次大会, 関西学院大学, 2012 年 3 月.
- [9] 岸浩史, 笠井秀明, 田中裕久, 御立千秋, 西畠保雄, “元素戦略プロジェクト - 脱貴金属自動車触媒のデザインと実証 - ”, 日本物理学会第 67 回年次大会, 関西学院大学, 2012 年 3 月.
- [10] Nghiem Thi Minh Hoa, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, “Kondo Effect and Magnetic Frustration in a System of Magnetic Trimer on a Metal Surface”, 日本物理学会第 67 回年次大会, 関西学院大学, 2012 年 3 月.
- [11] 國貞雄治, 中西寛, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, “酸素分子共吸着銀表面上での水素分子のオルソ・パラ転換における分子拡散及び束縛回転状態の影響”, 日本物理学会第 67 回年次大会, 関西学院大学, 2012 年 3 月.
- [12] 岡耕平, 中西寛, 笠井秀明, “第一原理計算に基づくペロブスカイト型酸化物の強誘電性と構造相転移に関する研究”, 日本物理学会第 67 回年次大会, 関西学院大学, 2012 年 3 月.
- [13] 國貞雄治, 中西寛, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, “Ag(111)表面上の水素分子のオルソ・パラ転換におけるファン・デル・ワールス力の影響”, 第 52 回真空に関する連合講演会, 学習院大学, 2011 年 11 月.
- [14] 岡耕平, 中西寛, 笠井秀明, “第一原理計算を用いたペロブスカイト型酸化物の自発分極に関する理論的研究”, 第 52 回真空に関する連合講演会, 学習院大学, 2011 年 11 月.
- [15] 笠井秀明, “水素アトミクスの理論研究とその展望”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.
- [16] Wilson Agerico Diño, “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 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.
- [17] 中西寛, “ミュオンがみる固体表面・サブ表面”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.
- [18] 中西寛, 笠井秀明, “金属表面近傍での水素・ミューオンの量子状態”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.
- [19] Nghiem Thi Minh Hoa, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, “A Possible Transition in Systems of Magnetic Trimers on a Metal Surface”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.
- [20] Handoko Setyo Kuncoro, Mamoru Sakaue, Hideaki Kasai, “Interaction of Trivalent Transition

- Metal Ions (Cr, Mn, Fe, Co, Ni) with Water Molecules”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.
- [21] Triati Dewi Kencana Wungu, Febdian Rusydi, Hermawan Kresno Dipojono, Hideaki Kasai, “First Principles Calculations of the Adsorption of Water on Li-Montmorillonite”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.
- [22] 國貞雄治, 中西寛, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, “銀表面上へ吸着した酸素の準安定強磁性状態”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.
- [23] 三輪邦之, 笠井秀明, “金属表面上の分子の振動運動における電子相関効果”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.
- [24] 岡耕平, 中西寛, 笠井秀明, “ペロブスカイト型酸化物の構造相転移と自発分極に関する第一原理的研究”, 日本物理学会 2011 年秋季大会, 富山大学, 2011 年 9 月.
- [25] 岸浩史, Allan Abraham Bustria Padama, 笠井秀明, “NO_x還元触媒表面におけるNO分子のダイナミクスに関する研究”, 2011 年秋季 第 72 回応用物理学会学術講演会, 山形大学, 2011 年 8 月.
- [26] 笠井秀明, “計算機マテリアルズデザイン先端研究事例”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [27] 岸浩史, Allan Abraham Bustria Padama, 笠井秀明, “NO_x還元触媒表面におけるNO分子のダイナミクスに関する研究”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [28] Wahyu Tri Cahyanto, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, “Atomic composition of PtRuMo Alloy Catalysts on CO oxidation of Anodic DMFCs”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [29] Mohammad Kemal Agusta, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, “Mechanism of hydrazine adsorption on metal surfaces”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [30] Handoko Setyo Kuncoro, Hideaki Kasai, “BOMD study on Structure of Small Water Clusters near 353.15K”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [31] Nghiêm Hoa Thi Minh, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, “Kondo effect in the systems of magnetic trimers on a metal surface”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [32] Mary Clare Sison Escaño, Tien Quang Nguyen, Hideaki Kasai, “Molecular and Electronic Tuning of Si/CNT Hybrid System”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [33] 國貞雄治, 中西寛, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, “銀表面上での水素分子の核スピン転換における共吸着酸素分子の影響”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [34] Abdulla Ali Abdulla Sarhan, Hiroshi Nakanishi, Hideaki Kasai, “Effect of the Electron-phonon interaction on Transport through Adsorbed Melamine Molecule on Cu Surface”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [35] Wungu Triati Dewi Kencana, Hideaki Kasai, “Study of Adsorbed Water on Li-Montmorillonite”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [36] Nguyen Tien Quang, Hideaki Kasai, “Oxygen dissociative adsorption on Pt₄/CeO₂(111) surface”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [37] Aspera Susan Meñez, Hiroshi Nakanishi, Wilson Agerico Dino, Hideaki Kasai, Hiroyuki Kawai, “Role of Surface Distortion on Molecular Adsorption on the Tri-s-triazine-based Graphitic Carbon Nitride Surface: A Specific Analysis on O₂ Molecule Interaction”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [38] Febdian Rusydi, Hideaki Kasai, “The first result on the properties of ground state porphyrin (the study of photosensitizing process in photodynamic therapy)”, 第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第 16 回分子動力学シン

- ポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [39] 小島一希, Wilson Agerico Diño, 笠井秀明, “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”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [40] 三輪邦之, 松中大介, 笠井秀明, “金属表面に吸着している磁性原子の超格子における電子状態密度”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [41] Saputro Adhitya Gandaryus, Hideaki Kasai, “H₂O₂ dissociation on Co-(6)Ppy Clusters”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [42] Allan Abraham Bustria Padama, Hiroshi Nakaniishi, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, “First Principles Investigation of H₂ Dissociative Adsorption on Mn-modified Ni(111) Surface”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [43] 岡耕平, 中西寛, 笠井秀明, “ペロブスカイト型酸化物の自発分極と圧電性に関する第一原理的研究”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [44] Moreno Joaquin Lorenzo Valmoria, Hideaki Kasai, “Selective oxidation of semiconducting Fe-filled SWNT”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [45] Ryan Lacdao Arevalo, Mary Clare Sison Escaño, Hideaki Kasai, “Adsorption and dehydrogenation of borohydride on Mn(111)”, 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 大阪大学, 23-24 May 2011.
- [46] 兼田 有希央、横田 泰之、森川 良忠、福井 賢一, “第一原理分子動力学法によるレドックス活性種の酸化還元電位評価”, 分子科学討論会 2011、札幌, 2011年9月。
- [47] 兼田 有希央、横田 泰之、森川 良忠、福井 賢一, “第一原理分子動力学計算による水溶液中のフェロセンの酸化還元特性の評価”, 日本化学会第92春季年会、横浜, 2012年3月。
- [48] 神谷崇仁, 藤原邦夫, 芝原正彦, “界面微細構造が固液界面での液体分子挙動に及ぼす影響に関する分子動力学的研究”, 第25回数値流体シンポジウム, USB-Memory, Dec. 2011.
- [49] 酒井規行, 辻拓也, 田中敏嗣, “壁面近傍に固定した粒子が乱流特性に与える影響のPIV計測”, 日本機械学会関西支部第87期定期総会講演会講演論文集, No.124-1, p.7-12, 2012.
- [50] 若松知哉, 辻拓也, 田中敏嗣, “修正体積力型埋め込み境界法”, 第25回数値流体力学シンポジウム講演予稿集, C05-3, 2011.
- [51] 東田恭平, 奥山佳那, 辻拓也, 田中敏嗣, “気系流動層中に存在する粗大物体の挙動予測モデルの開発”, 第25回数値流体力学シンポジウム講演予稿集, D01-3, 2011.
- [52] 川口寿裕, 萩原健一郎, 乾真規, 辻拓也, 田中敏嗣, “DEM-MPSカップリング手法による液中粒子群挙動解析”, 第17回流動化・粒子プロセッシングシンポジウム講演論文集, pp.18-20, 2011.
- [53] 東田恭平, 辻拓也, 田中敏嗣, “気系流動層中に存在する粗大物体の挙動予測モデル開発”, 第17回流動化・粒子プロセッシングシンポジウム講演論文集, pp.32-35, 2011.
- [54] 宮井慎一郎, 辻拓也, 高山武盛, 田中敏嗣, 永田貴則, 上田匡邦, 近藤闇太, “油圧ショベルによる掘削挙動のDEM解析(礫粒子形状の影響について)”, テラメカニックス第32回研究会講演論文集, p.14, 2011.
- [55] スバルマン アドリアヌス ノバドリ, 辻拓也, 田中敏嗣, 高山武盛, 門野裕一, “ブルドーザブレードによる押し土作業のためのベンチスケール実験(豊浦砂とガラス球の比較)”, テラメカニックス第32回研究会講演論文集, p.19, 2011.
- [56] 中川裕太, 辻拓也, 高山武盛, 田中敏嗣, 門野裕一, “ブルドーザブレードによる付着性土砂掘削挙動のDEM解析”, テラメカニックス第32回研究会講演論文集, p.16, 2011.
- [57] 田中敏嗣, “流動層DEM-CFDカップリングミュレーションの現状と展望(大規模計算, 付着性粒子への展開)”, 第28回製剤と粒子設計シンポジウム講演要旨集, pp. 4-5, 2011.
- [58] 宮井慎一郎, 辻拓也, 高山武盛, 田中敏嗣, 永田貴則, 上田匡邦, 近藤闇太, “礫粒子の形状効果を加味した離散要素法による油圧ショベルの掘削解析”, 粉体工学会2011年度秋期研究発表会講演論文集, pp. 47-48, 2011.
- [59] 中川裕太, 辻拓也, 田中敏嗣, 高山武盛, 門野裕一, “ブルドーザによる付着性土砂掘削挙動の

- 離散要素法解析”, 粉体工学会 2011 年度秋期研究発表会講演論文集, pp.45-46, 2011.
- [60] 井門孝博, 乾真規, 辻拓也, 田中敏嗣, “DEM-MPS カップリングによる固体粒子間濡れ挙動の数値シミュレーション”, 日本混相流学会年会講演会 2011 講演論文集, pp.72-73, 2011.
- [61] 宮内卓也, 王聰, 辻拓也, 田中敏嗣, “流動状態にある粒子の運動と温度の同時計測”, 日本混相流学会年会講演会 2011 講演論文集, pp.382-383, 2011.
- [62] 川口寿裕, 萩原健一郎, 乾真規, 辻拓也, 田中敏嗣, “液中粒子群挙動のDEM-MPS解析およびPTV計測”, 日本混相流学会年会講演会 2011 講演論文集, pp.398-399, 2011.
- [63] 辻拓也, 成田栄嗣, 田中敏嗣, “高濃度粒子を含む流れ場へ壁面が与える影響について”, 日本混相流学会年会講演会 2011 講演論文集, pp.400-401, 2011.
- [64] 若松知哉, 辻拓也, 田中敏嗣, “修正体積力型埋め込み境界法の開発”, 日本混相流学会年会講演会 2011 講演論文集, pp.402-403, 2011.
- [65] 児林智成, 田中敏嗣, “DEM-CFD カップリングシミュレーションによる A 粒子流動層の解析(動的付着力モデルとその適用範囲について)”, 日本混相流学会年会講演会 2011 講演論文集, pp.408-409, 2011.
- [66] 西嶋康行, 辻拓也, 田中敏嗣, “2 次元流動層内流れの大規模DEM-CFD解析”, 日本混相流学会年会講演会 2011 講演論文集, pp.412-413, 2011.
- [67] 宮内卓也, 王聰, 辻拓也, 田中敏嗣, “2 次元流動層内における個々の粒子の運動と温度の同時計測”, 第 16 回動力・エネルギー技術シンポジウム講演論文集, No.11-13, pp.409-410, 2011.
- [68] 井門孝博, 乾真規, 辻拓也, 田中敏嗣, “MPS 法による液滴挙動の数値シミュレーション”, 粉体工学会 2011 年度春期研究発表会講演論文集, pp.49-50, 2011.
- [69] 児林智成, 田中敏嗣, “動的付着力モデルを用いた A 粒子流動層 DEM-CFD カップリングシミュレーション(流動と気泡径分布に対する付着力の影響)”, 粉体工学会 2011 年度春期研究発表会講演論文集, pp. 125-126, 2011.
- [70] 辻拓也, 成田栄嗣, 田中敏嗣, “高濃度粒子が存在する流れ場に対して壁面が及ぼす影響に関する検討(メゾスコピックモデルの視点から)”, 粉体工学会 2011 年度春期研究発表会講演論文集, pp.127-128, 2011.
- [71] 鷹野 優, 米澤 康滋, 藤田 祐一, 栗栖 源嗣, 中村春木, “光非依存型プロトクロロフィリド還元酵素中の[4Fe-4S]クラスターの電子構造の理論的研究”, 第 11 回蛋白質科学会, ホテル阪急エキスポパーク (吹田), Jun-11.
- [72] Yu Takano, Yasuhige Yonezawa, Yuichi Fujita, Genji Kurisu, Haruki Nakamura, “Density functional study of electronic structures of a characteristic [4Fe-4S] cluster, [Fe₄S₄(SCH₃)₃(CH₃COO)]_n, in dark-operative protochlorophyllide oxidoreductase”, 7th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, Waseda University, Tokyo, Sep. 2011.
- [73] Yu Takano, Yasuhige Yonezawa, Yuichi Fujita, Genji Kurisu, Haruki Nakamura, “Computational study of electronic structures of a characteristic [4Fe-4S] cluster, [Fe₄S₄(SCH₃)₃(CH₃COO)]_n, in dark-operative protochlorophyllide oxidoreductase”, XVIth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics, Ishikawa Prefecture Museum of Art (IPMA), Kanazawa, Ishikawa, Sep. 2011.
- [74] Makoto Kita, Haruki Nakamura, Yu Takano, “Computational study of conformational preferences in intermediates and transition states of the hydrolysis of dimethyl phosphate”, XVIth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics, Ishikawa Prefecture Museum of Art (IPMA), Kanazawa, Ishikawa, Sep. 2011.
- [75] Orio Okuyama, Yasuteru Shigeta, Haruki Nakamura, Yu Takano, “Origin of the variety of the Cu₂S₂ core of the Cu_A site”, XVIth International Workshop on Quantum Systems in Chemistry and Physics, Ishikawa Prefecture Museum of Art (IPMA), Kanazawa, Ishikawa, Sep. 2011.
- [76] 鷹野 優, 米澤 康滋, 藤田 祐一, 栗栖 源嗣, 中村 春木, “Characteristic electronic structures of a novel [4Fe-4S] cluster in dark-operative protochlorophyllide oxidoreductase (DPOR)”, 第 48 回日本生物物理学会, 東北大大学川内キャンパス (姫路), Sep. 2011.
- [77] 鷹野 優, 重田 育照, 奥山 折緒, 小泉 健一, 中村 春木, “シトクロム c 酸化酵素、亜酸化窒素還元酵素にみられる Cu_A 部位の Cu₂S₂ コアの電子構造の起源の理論的解明”, 第 61 回錯体化学討論会, 岡山理科大学 (岡山), Sep. 2011.
- [78] 鷹野 優, 重田 育照, 奥山 折緒, 小泉 健一, 中村 春木, “シトクロム c 酸化酵素、亜酸化窒素還元酵素にみられる Cu_A 部位の Cu₂S₂ コアの電子構造の起源の理論的解明”, 分子科学討論会 2011 北海道, 札幌コンベンションセンター

- (札幌) , Sep. 2011.
- [79] Yu Takano, Orio Okuyama, Yasuteru Shigeta, Haruki Nakamura, "Coordination effects on the electronic structures of the Cu_A site in cytochrome *c* oxidase", The 14th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-14), The University of Tokyo, Tokyo, Oct. 2011.
- [80] 鷹野 優, 奥山 折緒, 重田 育照, 中村 春木, "シトクロム*c* 酸化酵素中のCu_A部位の電子構造に関する理論的研究", スーパーコンピュータワークショップ 2012「バイオサイエンスに対する計算分子科学からのアプローチ」、分子科学研究所（岡崎）, Jan. 2012..
- [81] 岩本 知之, 鷹野 優, 中村 春木, "弾性ネットワークモデルによる基準振動モードを取り込んだ β_2 アドレナリンGPCRのフレキシブルドッキングシミュレーション", 神戸大学大学院システム情報学研究科計算科学専攻協定講座第1回協定講座シンポジウム「計算アルゴリズムと化学・生物学の融合」、神戸大学統合研究拠点（神戸）, Feb. 2012.
- [82] 鷹野 優, 中田 一人, 山中 秀介, 米澤 康滋, 中村 春木, "Platypus-QM/MMの開発と生体分子電子構造の解析", 「次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発(ナノ)/次世代生命体統合シミュレーションソフトウェアの研究開発(ライフ)」公開シンポジウム、ニチイ学館 神戸ポートアイランドセンター（神戸）, Mar. 2012.
- [83] 鷹野 優, 奥山 折緒, 重田 育照, 中村 春木, "シトクロム*c*酸化酵素のCu_A部位の電子構造の配位子効果に関する理論的研究", 文部科学省科学研究費新学術領域「コンピュータイクスによる物質デザイン：複合相関と非平衡ダイナミクス」平成24年度研究会、東京大学大学院工学研究科（東京）, Mar. 2012.
- [84] 鷹野 優, 奥山 折緒, 重田 育照, 中村 春木, "シトクロム*c* 酸化酵素にみられるCu_A部位の電子構造の配位子効果に関する理論的研究", 日本化学会第92回春期年会、慶應義塾大学, Mar. 2012.
- [85] 松下勝義, 菊池誠, "競合効果に由来する天然変性の可能性", 新学術領域研究「天然変性タンパク質の分子認識機構と機能発現」、平成23年度 第2回 領域会議、宮崎, パームビーチホテル, Aug. 2011.
- [86] Katsuyoshi Matsushita, Macoto Kikuchi, "Frustration-Induced Intrinsic Disorder of NRST/REST", The 49th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Himeji Shosha Campus, Univ. Hyogo, Sep. 2011.
- [87] 松下勝義, 菊池誠, "天然変性タンパク質の結合折りたたみにおけるエントロピー効果", 日本物理学会2011年秋季大会、富山大学五福キャンパス, Sep. 2011.
- [88] 松下勝義, 菊池誠, "天然変性タンパク質結合によるターゲットタンパク質の構造安定化", 日本物理学会 第67回年次大会、関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス, Mar. 2012(予定).
- [89] 松下勝義, 菊池誠, "結合と折りたたみの共起におけるタンパク質構造の安定化", YSM-SPIP2012, 京都基礎物理学研究所研究会, Mar. 2012(予定).
- [90] 松本正行、小林大禎, "信号再生器が配置された光ファイバ伝送路の情報速度解析", 電子情報通信学会研究報告, OCS2011-312011年7月.
- [91] 高見昂亮, 高谷裕浩, 林照剛, 道畠正岐, "高アスペクト比形状計測のための光放射圧プローブスタイルス最適形状の光電磁場解析", 日本機械学会関西学生会学生員卒業研究発表講演会講演前刷集, pp.19-14, Mar. 2012.
- [92] 佐竹うらら, 榎本俊之, "構造解析を用いた高平坦エッジ形状を実現する研磨パッドの開発", 第18回精密工学会学生会員卒業研究発表講演会論文集, 107-108, 2011.
- [93] 佐竹うらら, 榎本俊之, 田畠憲一, "構造解析を用いた高平坦エッジ形状を実現する研磨パッドの開発", 2011年度砥粒加工学会学術講演会講演論文集, 25-28, 2011.
- [94] 加納明, 松中大介, 渋谷陽二, "双晶境界近傍での転位の相互作用に関するエネルギー論的検討", 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 2011.
- [95] 松中大介, 垂水竜一, 渋谷陽二, "1次元連結はりモデルにおける座屈不安定性の考察", 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 2011.
- [96] Seo Junghee, Daisuke Matsunaka, Yoji Shibutani, "First-principles study of adsorption properties of H₂S on metal surfaces", 第1回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム(第16回分子動力学シンポジウム), 2011.
- [97] 廣内智之, 都留智仁, 渋谷陽二, "粒界特性の面方位依存性を考慮したMulti-phase-field モデルの構築と粒成長シミュレーション", 第1回マ

- ルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム（第 16 回分子動力学シンポジウム）, 2011.
- [98] 中野明宏, 渋谷陽二, “ナノインデンテーションを用いた新たな粒界相互作用指数による欠陥相互作用の評価”, 日本機械学会関西支部第 87 期定期会講演会講演論文集, 2012.
- [99] 廣内智之, 渋谷陽二, “高次Multi-phase-field モデルによる粒成長とEBSD法による実材料組織の対応粒界分布の比較”, 日本機械学会関西支部第 87 期定期会講演会講演論文集, 2012.
- [100] 加納明, 松中大介, 渋谷陽二, “第一原理計算によるマグネシウム材の変形双晶に及ぼす界面転位の影響”, 日本機械学会関西支部第 87 期定期会講演会講演論文集, 2012.
- [101] 中野拓也, 渋谷陽二, “通電加熱法によるナノピラーの内部構造変化と力学挙動”, 日本機械学会関西支部第 87 期定期会講演会講演論文集, 2012.
- [102] 大西 恭彰, 加納 明, 松中 大介, 渋谷 陽二, “分子動力学シミュレーションによるマグネシウム材の基本変形メカニズムの解析”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2012.
- [103] 正 典子, 中野 拓也, 渋谷 陽二, “表面凝着を考慮したインデンテーションの弾性力学特性”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2012.
- [104] 宮部 菜苗, 垂水 竜一, 渋谷 陽二, “非線形弾性理論による立方晶の力学的安定性評価”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2012.
- [105] 行広 健太, 廣内 智之, 渋谷 陽二, “EBSD法による弾性ひずみ場における粒成長過程の考察”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2012.
- [106] 池田 健二郎, 中野 明宏, 渋谷 陽二, “界面近接場での欠陥間弾性相互作用の解析”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2012.
- [107] 穂鹿 一穂, 垂水 竜一, 松中 大介, 渋谷 陽二, “ゲージ転位の弾性相互作用と自己組織化”, 日本機械学会関西支部卒研講演会講演論文集, 2012.
- [108] 松中大介, 加納明, 大西恭彰, 渋谷陽二, “第一原理計算によるMgの変形双晶および界面転位における不純物の効果”, 日本物理学会第 67 回年次大会, 2012.
- [109] Munazah Andrabi, Hisato Kondoh, “Genome-wide prediction of POU/SOX factor dependent regulatory modules involved in the development processes”, 第 34 回 日本分子生物学会年会, 横浜, 日本, 2011 年 12 月 14 日.
- [110] 稲田慎, 岩田倫明, 原口亮, 芦原貴司, 中沢一雄, “心室筋厚と心室細動の持続性との関係：シミュレーションによる検討”, 第 50 回日本生体医工学会大会, 2011.
- [111] 原口亮, “致死的不整脈防御機構としての心室較差の電気生理学的意義”, 第 50 回生体医工学会, オーガナイズドセッション「心室性不整脈発生のメカニズムの基礎・そして発生の予測から治療まで」, 2011.
- [112] 中沢一雄, “ハイパフォーマンスコンピューティングが拓く不整脈研究”, 日本機械学会第 24 回バイオエンジニアリング講演会シンポジウム：ハイパフォーマンスコンピューティングと生命医療工学, 2012.
- [113] 比江島 俊彦, “異符号の二つの環状渦度を有する超音速縦渦の崩壊について”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, B07-3, pp.1-8, Dec. 2011.
- [114] 小野達也, 比江島俊彦, 須浪徹治, 潟渕泰寛, “非対称楔翼の後縁噴射による超音速燃焼計算”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, B07-2, pp.1-8, Dec. 2011.
- [115] 比江島俊彦, 後藤田浩, 西岡通男, “異符号の 2 重環状渦度場をもつ中空縦渦の不安定性”, 日本流体力学会年会 2011 講演論文集, 3A-23, Sep. 2011.
- [116] 仲村英也, 野崎祐介, 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-細胞膜間相互作用の解析: C60 フラーレンの親水性・疎水性が及ぼす影響”, 日本薬学会第 132 年会研究発表講演要旨集, 30P2-am080, 2012.
- [117] 江端陽一, 仲村英也, 岩崎智宏, 綿野 哲, “機能性金ナノ粒子-細胞膜間相互作用の分子動力学解析”, 日本薬学会第 132 年会研究発表講演要旨集, 30P2-am081, 2012.
- [118] 松本 一真, 堀内 潔, “Dumbbellモデルを用いたBDS-DNSによる乱流抵抗低減機構の解明”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, D003-1, Dec. 2011.
- [119] 片岡浩人, 田村哲郎, “LES結果による実市街地上空気流鉛直分布への粗度パラメータの影響評価”, 日本風工学会誌, No. 127, pp.85-86, 2011.4.
- [120] 片岡浩人, 田村哲郎, “RANS/LESハイブリッド計算法による市街地気流の予測 その 1 合成渦法 (SEM) を用いた流入変動風の作成”, 日本

- 建築学会大会学術講演梗概集, B-1, pp. 95-96, 2011.8.
- [121] 片岡浩人, 田村哲郎, “合成渦法を用いた流入変動風の生成”, 日本流体力学会年会講演要旨集, p. 322, 2011.9.
- [122] 片岡浩人, “数値流体計算による市街地建物が気流の鉛直分布に与える影響の予測”, 大林組技術研究所報, No. 75, 2010.11.
- [123] 片岡浩人, 田村哲郎, “RANS/LESハイブリッド計算法による市街地気流の予測 その2 連続条件を満たした合成渦法 (DFSEM) を用いた流入変動風の作成”, 第 24 回数値流体力学シンポジウム, B04-5, 2011.12.
- [124] 片岡浩人, 田村哲郎, “RANS/LESハイブリッド計算法による市街地気流の予測 その2 連続条件を満たした合成渦法 (DFSEM) を用いた流入変動風の作成”, ながれ, Vol. 31, No.2, 2012.4 (掲載予定).
- [125] 坪井 和也, 長谷川 達也, “乱流予混合火炎における固体壁面での化学的過程に関するDNSによる検討”, 第 49 回燃焼シンポジウム講演論文集, pp. 224-225, Dec. 2011.
- [126] 辻本公一, 柴田憲孝, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DNSによるベクトル制御噴流に対する傾斜角の影響に関する研究”, 日本流体力学会年会 2011 講演論文集(CD-ROM), pp.1-4, Sep. 2011.
- [127] 加藤太志, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DMD法を用いた円形噴流の構造解析に関する研究”, 日本機械学会 2011 年度年次大会講演論文集(CD-ROM), pp.1-5, Sep. 2011.
- [128] 柴田憲孝, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “回転モード下におけるベクトル制御噴流の DNS”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集(USB), pp.1-3, Dec. 2011.
- [129] 加藤太志, 辻本公一, 社河内敏彦, 安藤俊剛, “DMD法を用いた円形噴流の構造抽出に関する研究”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集(USB), pp.1-4, Dec. 2011.
- [130] 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デトネーションエンジンに関する数値解析”, 第 43 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 2011 講演集, 日本航空宇宙学会, 早稲田大学, 1B05, 2011 年 7 月 7-8 日.
- [131] 坪井伸幸, 山田貴幸, 林光一, 山田英助, 小島孝之, “ローテーティングデトネーションエンジンの3次元数値解析:回転するデトネーションの3次元構造”, 第 43 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 2011 講演集, 日本航空宇宙学会, 早稲田大学, 1B07, 2011 年 7 月 7-8 日.
- [132] 上村悠歩, 林光一, 坪井伸幸, 山田英助, “H2/Airを用いたローテーティングデトネーションエンジンの伝播条件およびメカニズムに関する数値解析”, 第 48 回燃焼シンポジウム講演論文集, 慶應義塾大学, E133, 2010 年 12 月 5 日~7 日.
- [133] 細田英明, 林光一, 山田英助, “ナノアルミニウム-酸素二相デトネーションの粒子径及び濃度依存性に関する数値解析”, 第 48 回燃焼シンポジウム講演論文集, 慶應義塾大学, P204, 2010 年 12 月 5 日~7 日.
- [134] 国賀健太, 林光一, 山田英助, 上村悠歩, “RDEの3次元伝播構造と管径依存に関する数値解析”, 平成 23 年度衝撃波シンポジウム, 東京大学柏キャンパス, 3B3-3, 2012 年 3 月 7 日~9 日.
- [135] Dzieminska Edyta, 林光一, 山田英助, “Shock-boundary layer interactions in a reactive mixture”, 平成 23 年度衝撃波シンポジウム, 東京大学柏キャンパス, 3C1-5, 2012 年 3 月 7 日~9 日.
- [136] 朝原誠, 林光一, 山田英助, 坪井伸幸, “2次元円筒デトネーションにおける Sub Transverse Wave の発生と発達”, 平成 23 年度衝撃波シンポジウム, 東京大学柏キャンパス, 2012 年 3 月 7 日~9 日.
- [137] 上村 悠歩, 林 光一, 坪井 伸幸, 山田 英助, “H2/Air を用いたローテーティングデトネーションエンジンの伝播条件および伝播メカニズムに関する数値解析”, 第 49 回燃焼シンポジウム講演論文集, pp.134-135, Dec. 2011.
- [138] 田村哲郎, 野津剛, 岸田岳士, 勝村章, 奥田泰雄, “高層建物に作用する風圧・風力の高精度化 –非構造格子の導入–”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム, 2011.
- [139] 岸田岳士, 田村哲郎, 奥田泰雄, 中村修, “LESにおける境界層型流入変動風データベースの作成 –三次元角柱への適用–”, 日本建築学会学術講演梗概集, pp.137-138.
- [140] 荒川智樹, 小森優輝, 異和也, 中部主敬, “一様磁場下の流体中における赤血球運動に関する数値解析モデルの開発”, 日本機械学会第 24 回計算力学講演会, 2011/10/9.
- [141] 小川洋昌, 森井雄飛, 須佐秋生, 坪井伸幸, 林 光一, 遠藤琢磨, “メタン - 酸素予混合気を伝播するデトネーション限界の研究 : デトネー

- ション速度に与える粘性の影響”, 火薬学会 2011 年度春季研究発表会, pp.21-24, 2011.5.
- [142] 森井雄飛, 小川洋昌, 坪井伸幸, 小川博之, 徳留真一郎, 林光一, “簡略化モデルDRG30 を用いたメタン/酸素デトネーションの1次元解析に向けて”, 火薬学会 2011 年度春季研究発表会, pp.59-62, 2011.5.
- [143] 川上祐司,坪井伸幸,江連涼介,林光一,小島孝之, “エアロスパイクノズルを用いたパルスデトネーションエンジンの推進性能”, 第 43 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 2011, 1B06, 2011.7.
- [144] 坪井伸幸,山田貴幸,林光一,山田英助,小島孝之, “ローテーティングデトネーションエンジンの 3 次元数値解析:回転するデトネーションの 3 次元構造”, 第 43 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 2011, 1B07, 2011.7.
- [145] 坪井伸幸,香川岳寛,吹場活佳,嶋田徹, “前処理法による非定常圧縮性低速流れの 3 次元数値解析:NACA0012 翼型におけるRe 数効果”, 第 43 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 2011, 2C04, 2011.7.
- [146] 琴浦哲史,坪井伸幸,丸祐介,藤田和央, “数値解析によるWaverider の空力特性評価:揚抗比の評価”, 第 43 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 2011, 2D08, 2011.7.
- [147] 坪井伸幸, 吹場活佳, 嶋田徹, “前処理法を用いた 3 次元非定常圧縮性流れの数値解析:ハイブリッドロケット内部の旋回流における前処理法の効果”, 第 55 回宇宙科学技術連合講演会, 3B05, 2011.12.
- [148] 森井 雄飛, 坪井 伸幸, 小川 博之, 徳留 真一郎, 林 光一, “ステイツフ・ソルバーを用いた 1 次元メタン酸素デトネーションの数値解析”, 第 49 回燃焼シンポジウム, E134, 2011.12.
- [149] 森井雄飛,坪井伸幸,小川博之,徳留真一郎,林光一, “メタン/酸素デトネーションの解析における反応モデルの依存性”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム, A12-1, 2011.12.
- [150] 坪井伸幸,朝原誠,野々村拓,林光一, “重み付きコンパクトスキームを用いたデトネーションの数値解析”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム, A12-2, 2011.12.
- [151] 富正人,津田伸一,坪井伸幸,徳増崇,越光男, “臨界点近傍における酸水素混合系の熱物性評価”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム, B10-5,
- 2011.12.
- [152] 琴浦哲史, 坪井伸幸, 丸祐介, 藤田和央, “粘性計算による疑似Waverider形状の空力特性評価”, 第 25 回数値流体力学シンポジウム, A03-1, 2011.12.
- [153] 坪井伸幸, 森井雄飛, 朝原誠, 野々村拓, 林光一, 小川博之, “デトネーションにおける新しい数値計算法について”, 平成 23 年度航空宇宙空力班シンポジウム「航空宇宙工学における空気力学の挑戦 2012」, L8, 2012.1.
- [154] 森井雄飛, 坪井伸幸, 小川博之, 寺島洋史, 徳留真一郎, 林光一, “メタン酸素及び水素酸素燃料を用いた狭い管内を伝播する爆轟波の二次元数値解析”, 平成 23 年度衝撃波シンポジウム, 1B2-4, 2012.3.
- [155] 坪井伸幸, 朝原誠, 野々村拓, 林光一, “重み付きコンパクトスキームを用いた 2 次元デトネーションの数値解析:高解像度スキームによる流れ場の詳細構造”, 平成 23 年度衝撃波シンポジウム, 1B2-6, 2012.3.
- [156] 朝原誠, 林光一, 山田英助, 坪井伸幸, “2 次元円筒デトネーションにおける Sub TransverseWave の発生と発達”, 平成 23 年度衝撃波シンポジウム, 1B2-6, 2012.3.
- [157] 杉安孝幸, 森井雄飛, 坪井伸幸, 林光一, “水素/空気デトネーションにおける反応モデルの影響の評価”, 平成 23 年度衝撃波シンポジウム, 3B2-5, 2012.3.
- [158] 村田健輔, 坪井伸幸, 吹場活佳, 嶋田徹, “低Re数における前処理型非定常圧縮性流れ場解析によるNACA0012 翼型の空力特性評価”, 日本機械学会九州学生会(2012) 第 43 回学生員卒業研究発表講演会, 439, 2012.3.
- [159] 濑戸口, 武藤, 寺島, 坪井, 越, “LESによる超臨界流体噴流の流体力学的挙動に関する数値解析”, 日本機械学会九州学生会(2012) 第 43 回学生員卒業研究発表講演会, 434, 2012.3.
- [160] 武藤大貴, 濑戸口彬, 寺島洋史, 坪井伸幸, 越光男, “前処理型非定常圧縮性解法による噴流構造の数値解析”, 日本機械学会 九州支部第 65 期総会・講演会, 803, 2012.3.
- [161] 成宮匡, 坪井伸幸, 伊藤隆, “数値解析を用いたエアロスパイクノズルの性能評価:圧力比の影響”, 日本機械学会 九州支部第 65 期総会・講演会, 812, 2012.3.
- [162] 倉本健史, 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°ランプ周りの流れ場の 3 次元数値解析:平板幅の影響”,

日本機械学会 九州支部第 65 期総会・講演会, 812, 2012.3.

- [163] 富樫 祐一, “混雜した分子機械システムにおける反応・輸送・力学的応答”, 日本物理学会講演概要集, Vol. 66, No. 2, p. 254 (22pPSB-30), Sept. 2011.
- [164] 富樫 祐一, “生体分子機械システムの構造形成～障壁と分子構造変化の効果”, 日本物理学会講演概要集, Vol. 67, No. 1, p. 333 (25pPSA-36), Mar. 2012.
- [165] 吹場活佳、山田悠太, “伝熱工学的経験式を用いた空気予冷却器の数値解析”, 平成 23 年度宇宙輸送シンポジウム, 印刷中, Jan. 2012.
- [166] 渡邊寛, 舟曳信生, 中西透, 福士将, “ボランティアコンピューティングシステムにおける結託攻撃のモデル化と性能評価”, 電子情報通信学会研究報告, DC-2011-24, pp.25-30, Oct. 2011.
- [167] 渡邊寛, 舟曳信生, 中西透, 福士将, “ボランティアコンピューティングの妨害者対策における抜取検査併用の効果”, 電子情報通信学会研究報告, NS-2011-163, pp.103-108, Jan. 2012.
- [168] K. Hagita, “Coarse-grained simulation approaches of filled polymer nano- composites”, European Workshop on Nano composites and polymer dynamics (Montpellier, France), 2011.6.16-17.
- [169] 萩田克美, 高野 宏, 土井正男, 森田裕史, “粗視化分子動力学によるフィラー充填ポリマーメルトの延伸破壊シミュレーション 2”, 日本物理学会 2011 年秋季大会,(富山大学), 2011.9.24.
- [170] 萩田克美, “高分子ナノコンポジットの粗視化MDとVR可視化分析”, 第 2 回計算統計物理学研究会,(金沢大学), 2011.9.25.
- [171] 萩田克美, “没入型可視化装置を用いた 3 次元複雑形状の空間内探索的観察事例の紹介”, 「バーチャルリアリティ装置による表現法の追求」研究会,(核融合科学研究所), 2011.12.9.
- [172] 萩田克美, “ポリマーナノコンポジットの非線形レオロジーの理解に向けた粗視化分子動力学アプローチ”, MRS-J 学術シンポジウム, (横浜情報文化センター) , 2011.12.20.
- [173] K. Hagita, “Coarse-Grained Simulation Approaches for Nano-Design of Soft Materials with Mind of Combination among Experiments and Math-Material”, The 2012 WPI-AIMR Annual Workshop, (Sendai, Japan), 2012.2.21.
- [174] K. Hagita, H. Morita, M. Doi, H. Takano, “Glass transition temperature of polymer nano-composites with polymer and filler interactions”, APS March

Meeting 2012 (Boston, USA), 2012.2.29.

- [175] 萩田克美, 高野 宏, 土井正男, 森田裕史, “フィラー充填ポリマーメルトのガラス転移温度に対する界面相互作用の影響”, 日本物理学会 2012 年年次大会, (関西学院大学) , 2012.3.24.
- [176] 高橋俊, 新井紀夫, “直交格子積み上げ法を用いた重合格子法による流体構造連成解析”, 第 16 回 計算工学講演会, 2011 年 5 月.
- [177] 水田和希, 西田梨奈, 高橋俊, 新井紀夫, “直交格子を用いた脳動脈瘤の連成解析”, 第 25 回 数値流体力学シンポジウム, 2011 年 12 月.
- [178] 高橋俊, 新井紀夫, “直交格子積み上げ法と境界適合格子を用いた重合格子による数値解析”, 第 25 回 数値流体力学シンポジウム, 2011 年 12 月.
- [179] 亘 慎一, 深沢 圭一郎, 山本 和憲, 森川 靖大, “NICT サイエンスクラウド実験”, 日本地球惑星科学連合 2011 年大会, 幕張, 2011 年 5 月 22 日.
- [180] 村田 健史, 亘 慎一, 長妻 努, “NICT サイエンスクラウド”, 日本地球惑星科学連合 2011 年大会, 2011 年 5 月 22 日.
- [181] 村田 健史, “e-Space Weather: 新しい宇宙天気 Web アプリケーション”, 日本地球惑星科学連合 2011 年大会, 幕張, 2011 年 5 月 22 日.
- [182] 亘 慎一, 坪内 健, 森川 靖大, 加藤 久雄, 田中 高史, 品川 裕之, 村田 健史, “宇宙天気クラウドによるリアルタイム磁気圏シミュレーションの解析”, 日本地球惑星科学連合 2011 年大会, 幕張, 2011 年 5 月 22 日.
- [183] 亘 慎一, 坪内 健, 加藤 久雄, 田中 高史, 品川 裕之, 村田 健史, “宇宙天気クラウドを活用したリアルタイム磁気圏シミュレーションデータの解析 II”, 地球電磁気・地球惑星圈学会 2011 年講演会, 神戸大学, 2011 年 11 月 5 日.
- [184] 亘 慎一, 加藤 久雄, 村田 健史, 國武 学, 山本 和憲, 渡邊 英伸, 久保田 康文, “宇宙天気クラウドと情報サービス”, 第 8 回 宇宙環境シンポジウム, 東京ビックサイト, 2011 年 10 月 18 日.
- [185] 久保田 康文, 村田 健史, 山本 和憲, 深沢 圭一郎, 坪内 健, “グローバル MHD シミュレーション磁力線追尾システムによる、太陽風磁場の磁気圏への侵入過程の研究”, 第 2 回 極域科学シンポジウム, 国立極地研究所, 2011 年 11 月 16 日.
- [186] 久保田 康文, 村田 健史, 山本 和憲, 深沢

- 圭一郎, 坪内 健, “グローバルMHDシミュレーション磁力線追尾システムによる、太陽風磁場の磁気圏への侵入過程の研究”, 2012 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, 名古屋大学, 2012 年 1 月 25 日.
- [187] 山本義暢、功刀資彰, “高レイノルズ数MHD チャンネル流における内層乱流構造の特性”, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2011, 静岡大学, 2011 年 10 月 29-30 日.
- [188] 山本義暢、功刀資彰, “高レイノルズ数MHD 亂流場の大規模構造とスケーリング”, 京都大学数理解析研究所共同研究集会 亂流の普遍性と個別性：流体乱流を通して宇宙を見る, 京都大学, 2012 年 1 月 11-13 日.

4 著書

- [1] M. Matsumoto, “Optical regenerators for novel modulation schemes”, in Impact of Nonlinearities on Fiber Optic Communications, S. Kumar Ed. pp. 415-450, Springer Verlag, 2011, 分担執筆.
- [2] 渋谷陽二, “塑性の物理 素過程から理解する塑性力学”, 森北出版株式会社, 2011.
- [3] 渋谷 陽二, “ナノインデンテーションによる局所的な材料強度評価”, 機械の研究 第 64 卷 第 1 号, 2012.
- [4] K. Iwano, “Material designs and new physical properties in MX- and MMX-chain compounds”, Springer, 2012 年出版予定, 一章を執筆.
- [5] 中沢一雄, 原口亮, 稲田慎, 芦原貴司, “仮想心臓シミュレーション”, シミュレーション辞典, 2012, 分担執筆.
- [6] S. Matsunaga, T. Koishi, M. Saito and S. Tamaki, “Dielectric Screening Properties and Many Body Effects in Molten Salts”, Noble Metals, Dr. Yen-Hsun Su (Ed), InTech, ISBN:978-953-307-898-4, Feb. 2012, pp.3-32.

5 その他

- [1] 田中敏嗣, “流動層DEM-CFDカップリングシミュレーション（メゾおよびミクロスケールモデルでの展開）”, 2012, PHARM TECH JAPAN, Vol. 28, No. 4 (2012), pp. 829-833.
- [2] 岡田悠悟, 酒井謙一, 北岡慎, 三輪一元, 大石泰男, 竹谷純一, “圧力印加時におけるペンタセントFETの伝導特性”, 2012 年 3 月 24 日, 日本物理

学会第 67 回年次大会、関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス.

- [3] 岡田悠悟, 北岡慎, 酒井謙一, 三輪一元, 植村隆文, 大石泰男, 竹谷純一, “圧力印加によるルブレン単結晶トランジスタの伝導特性及び結晶構造の変調”, 2012 年 3 月 24 日, 日本物理学会第 67 回年次大会、関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス.
- [4] 酒井謙一, 岡田悠悟, 北岡慎, 三輪一元, 大石泰男, 滝宮和夫, 竹谷純一, “高圧下におけるDNTTの電気伝導性と結晶構造”, 2012 年 3 月 24 日, 日本物理学会第 67 回年次大会、関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス.
- [5] 秦健太郎, 冬広明, 福田貴光, 石川直人, “積層フタロシアニン四量体の酸化状態における電子構造”, 2011 年 9 月, 第 61 回錯体化学討論会, 岡山理科大学.
- [6] Yoshitaka Fujimoto, “Nitrogen-Doping Effects on Energetics and Electronic Properties in Carbon Nanotubes and Graphene”, Oct. 2011, BIT's Annual World Congress of Nano-S&T-2011, Dalian, China.
- [7] Yoshitaka Fujimoto, “Formation, Stabilities, and Electronic Properties of Nitrogen Defects in Carbon Nanotubes: A Density-Functional Study”, Accepted, in Carbon Nanotubes: Synthesis, Properties and Applications, (Nova Science Publishers, New York).
- [8] 坂元玄太, “DEMシミュレーションによる粒子間距離を考慮した充填率と配位数の関係式の検討”, 2012 年 3 月, 平成 23 年度岡山大学工学部物質応用化学科, 学士論文.
- [9] K. Tomida, “Radiation Magnetohydrodynamic Simulations of Star Formation Processes”, 2012, PhD Thesis, The Graduate University for Advanced Studies.
- [10] Kenichi Dedachi, “Molecular simulation of peptides using the Single Amino Acid Potential force field”, September 2011, Wissenschaftsforum Chemie 2011, Bremen, Germany.
- [11] Kenichi Dedachi, Takeshi Nomura, Taku Shimosato, Toshiya Minezaki, Michio Iwaoka, “Molecular simulation of short peptides containing uncommon amino acid residues by using the SAAP force field”, 2011 年 9 月, 第 48 回ペプチド討論会, 札幌.
- [12] 出立兼一, 下里卓, 峯崎俊哉, 岩岡道夫, “单一アミノ酸ポテンシャル力場を用いた低分子ペプチドの構造探索”, 2011 年 12 月, 第 25 回分子シミュレーション討論会, 東京.

- [13] Hirohito Ikeda, Tomonori Matsubara, Hanae Moriwaki, Miho Yukawa, Eiji Yukawa, Hatsumi Aki, “Inhibitory Effect of Cyclodextrin on Complexation of Risperidone with Tea Catechin”, August 2011, Hachiouji.
- [14] M. Fujisawa, H. Tsutsumi, H. Ikeda, H. Aki, T. Kimura, “On the relationship of the enthalpy of inclusion by cyclodextrins and the interaction energy”, August 2011, Hachiouji.
- [15] 池田浩人, 長尾優香, 松原友規, 森脇英恵, 湯川美穂, 湯川栄二, 安藝初美, “薬物と嗜好品の相互作用 I 統合失調症治療薬リスペリドンと緑茶との相互作用解析”, September 2011, Saporo.
- [16] 松原友規, 森脇英恵, 西美樹, 森永理香, 池田浩人, 湯川美穂, 湯川栄二, 安藝初美, “リスペリドンと緑茶カテキンとの不溶性複合体形成におけるシクロデキストリン類の添加効果”, December 2011, Fukuoka.

第18回スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2012)

時田 恵一郎

大阪大学 サイバーメディアセンター 大規模計算科学研究部門

電腦甲子園

今年も2012年8月20日から24日までの5日間にわたって、高校生を対象とする「スーパーコンピューティングコンテスト (SuperCon2012)」が、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) で開催されます。

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「電腦甲子園」とも呼ばれています。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。昨年は東工大 GSIC の TSUBAME を使用する予定でしたが、震災の影響による夏の電力事情を考慮した結果、阪大 CMC の SX-8R を使うことになり、全国から11チームが阪大 CMC 豊中教育研究棟会場に集まり熱戦を繰り広げました。

今年も6月1日に予選問題がウェブに発表され、高校生たちは3週間かけて学校や家庭のパソコンを用いて予選問題を解いて、この記事が出る頃には出場チームも決定しているものと思われます。

メンバーが複数集まらない場合には、個人で「スーパーコン認定」に応募することもできます。問題のレベルに応じて「スーパーコン1級」、「スーパーコン2級」、「スーパーコン3級」が認定されます。

今年の本選では TSUBAME が使われる予定で、TSUBAME のアーキテクチャーの特長を存分に發揮する本選課題が出題される予定です。

最終日の8月24日には、出場チーム紹介やインタビューなどの成果発表会と優勝チーム及び学会奨励賞などの表彰式が行われます。成果発表会や表彰式は東工大と阪大の両会場で二元開催します。両会場とも公開しますので、興味をお持ちの方は是非高校生たちの素晴らしい成果をご覧頂ければと思います。

SuperCon ホームページ :

<http://new-web.gsic.titech.ac.jp/supercon/>

The screenshot shows the homepage of the Supercomputing Contest (SuperCon) website. At the top, there's a banner with the text "Supercomputing Contest" and a background image of many people working on computers. Below the banner, there's a navigation bar with links like "TOP", "News & Events", "Archive", and "Link". The main content area features a large logo for "Supercomputing Contest (SuperCon)" with the subtitle "Programming Contest for High School Students". Below the logo, there's a section titled "夏の電腦甲子園" (Summer Computer Koshien) with the text "第18回大会 : 2012年8月20日～8月24日" and "予選応募期間 : 2012年6月1日～6月22日". There's also a link "2012年募集要項". Further down, there's a "News (一覧)" section with a link "SuperCon2012予選・認定問題公開". The bottom of the page has a "SuperConとは" section with a brief description and a photo of students working on computers.

2012年度大規模計算機システム利用講習会

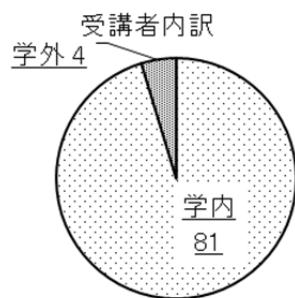
講習会名	開催日時	講 師	開催場所
スーパーコンピュータ概要	5月17日	東田(サイバーメディアセンター)	レーザーエネルギー学研究センター 研究棟 4階大ホール
IDL利用入門	6月7日	Exelis VIS(株)	サイバーメディアセンター 豊中教育研究棟 7階会議室
並列プログラミング入門	6月11日	時田(サイバーメディアセンター)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
MPIによる並列プログラミング	6月11日	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
SXにおけるベクトル化・並列化	6月12日	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
スーパーコンピュータ利用入門	6月14日	レーザー研技術専門職員 情報基盤課職員	サイバーメディアセンター 豊中教育研究棟 4階CALL第3教室
IDL利用入門	9月5日	Exelis VIS(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
スーパーコンピュータ概要	9月	東田(サイバーメディアセンター)	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
スーパーコンピュータ利用入門	9月	レーザー研技術専門職員 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
並列プログラミング入門	9月	時田(サイバーメディアセンター)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
MPIによる並列プログラミング	9月	日本電気(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室
SXにおけるベクトル化・並列化	9月	日本電気(株)	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	9月	サイバネットシステム(株)	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	9月	サイバネットシステム(株)	サイバーメディアセンター 吹田本館 2階小会議室

テレビ会議システムによる講習会

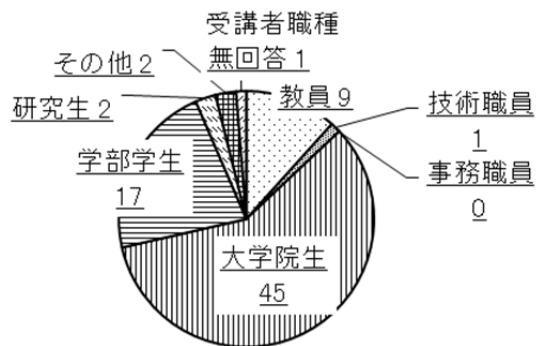
講習会名	開催日時	開催機関	受講場所
Gaussian入門	8月7日	東北大学	サイバーメディアセンター 吹田本館3階大会議室

2011年度大規模計算機システム利用講習会 アンケート集計結果

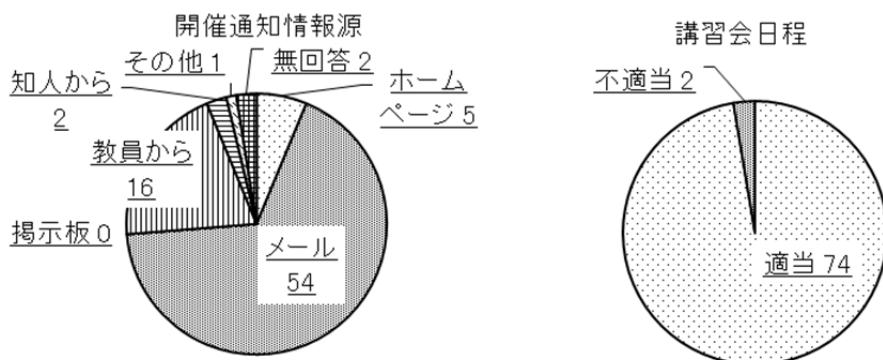
講習会名	開催日時	申込者数	受講者数			アンケート回収数
				学内	学外	
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	7月8日(金) 10:00～17:00	42	36	34	2	30
スーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	9月13日(火) 10:00～17:00	36	35	34	1	33
IDL利用入門	9月14日(水) 13:20～17:00	9	7	7	0	7
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	9月15日(木) 13:00～17:00	2	1	1	0	1
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	9月16日(金) 10:00～17:00	7	6	5	1	6
合 計		96	85	81	4	77



講習会名	所属等についてお教えください。									
	所属		職種							
	大阪大学	その他大学・機関	教員	技術職員	事務職員	大学院生	学部学生	研究生	その他	無回答
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)	29	1	5	1	0	19	5	0	0	0
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)	32	1	2	0	0	20	7	1	2	1
IDL利用入門	7	0	0	0	0	2	4	1	0	0
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	6	0	2	0	0	3	1	0	0	0
合計	75	2	9	1	0	45	17	2	2	1

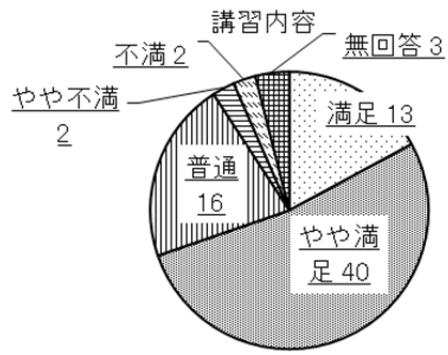
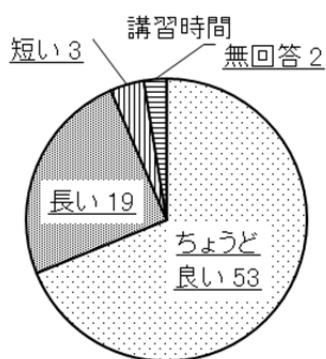


講習会名	今回の講習会についてどのようにお知りになりましたか。 (複数回答可)							今回の講習会の開催日は適当でしたか。	
	ホームページ	メール	掲示板	教員から	知人から	その他	無回答	適当	不適当
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	1	24	0	5	0	1	1	29	1
スーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	1	23	0	6	2	0	1	31	1
IDL利用入門	1	1	0	5	0	0	0	7	0
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	0	1	0	0	0	0	0	1	0
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	2	5	0	0	0	0	0	6	0
合計	5	54	0	16	2	1	2	74	2



講習会名	今回の講習会の開催日は適当でしたか。 よろしければ選択した理由をご記入ください。	
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)	適当	個人的には <u>4~5月</u> が良いが、秋よりはましなので。
	不適当	午後からの講義がかぶっていて、最後の演習に参加できなかつたので、 <u>できれば土日</u> が都合がよかったです。
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)	適当	前から講習会に出たいと思っていましたが、授業等と重なり、今回は <u>夏休み中</u> でやっと参加できるようになりました。 もう少し <u>受講可能日を増やす</u> してもらえば助かります。 <u>授業がない時期</u> なので時間が調整しやすい。 <u>夏期休業中の院試後</u> で助かりました。 9月がベストです。もしくは、 <u>8月のお盆明けすぐ</u> が良いです。 <u>授業期間中でない</u> ことが良い。
	不適当	プログラムの作成は主に4月から始めるため、 <u>3月頃</u> に講習会が開催されると都合が良い。
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	適当	<u>授業期間外</u> が良い。 本日は空いていたがMicroも都合がつけば受講したかったので <u>複数日同じ講習</u> を行ってもらえると助かります。 <u>院試が終わって</u> 研究が本格化するところなのでちょうど良かった。

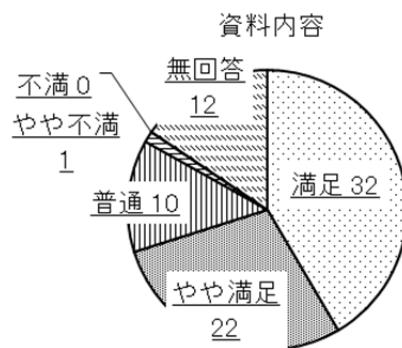
講習会名	今回の講習会の時間は適当でしたか。				今回の講習会の内容はどうでしたか。						
	ちょうど良い	長い	短い	無回答	満足	やや満足	普通	やや不満	不満		
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	22	6	1	1	3	15	7	1	2	2	
スーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	20	10	2	1	4	19	7	1	0	1	
IDL利用入門	6	1	0	0	1	4	2	0	0	0	
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	4	2	0	0	4	2	0	0	0	0	
合計	53	19	3	2	13	40	16	2	2	3	



講習会名	今回の講習会の時間は適当でしたか。		よろしければ選択した理由をご記入ください。				
	長い	短い					
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)	長い	短い	1日2時間程度で3日間に分ける等をして頂けた方が良かったです。 実習時間がもう少し欲しい。				
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)	ちょうど良い	長い	2時間位が集中できる丁度良い時間だったと思う。 初心者の私にはちょうど良い量だった。	日にちを分けて行ってもらえば助かります。 もう少し休み時間がほしかったです。 途中でだれてしまうため、手を動かしたかったです。			
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	短い	長い	もう少し各項目の説明が詳しい方が良い。	すごくていねいで良かったのですが、もう少し速くても良かったかと思います。			

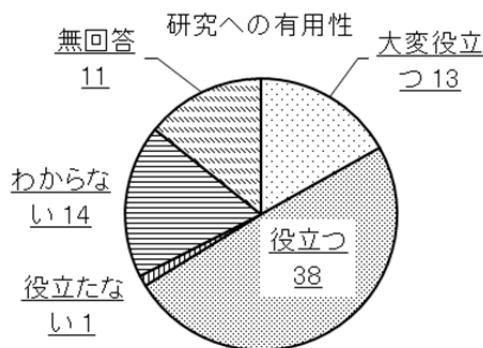
講習会名	今回の講習会の内容はどうでしたか。 よろしければ選択した理由をご記入ください。			
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	満足	基礎的な部分を知ることができたためになったため。		
	やや満足	もう少し演習で自分で動かす時間があるうれしいです。		
	普通	内容は良かったですが、講習会と実習の時間配分を改善してほしいです。実習をもう少し長くしてほしいです。 もう少し説明してほしかった。聞くのが精一杯でした。		
	やや不満	特に午後の部の対象者がよくわからない。”初心者”と銘打っている割には、ある程度プログラミングを経験していないと理解できないチューニングの話に片寄りすぎではないか。また、テキストをひたすら読んでいくような講義方式は時間の無駄だと感じた。午前の内容はおもしろく良かった。		
	不満	研究室内にある12coreのPCでの並列化について学びにきたが、SX-9をベースにしたものだったのではなくかった。(OpenMPをすればいいのか。)		
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)	未記入	ベクトル化・並列化について基礎から学べた。		
	満足	MPIプログラミング入門が特に参考になりました。		
	やや満足	ベクトル化の基礎は良く理解できたが、ベクトル化の実例なども知りたかった。 スペコンの歴史、機能などの説明があったが、結局何を伝えたいのか分からなかった。 資料がかなり充実していたため、今後に生かしやすいと思ったため。 MPIの基本を学べて良かった。		
	普通	今回はユーザー向けの説明会だと思っていたが、各スライドの目的が見えなかった。1人目は対象者、目的が分かりにくい。2人目は対象、目的ともに分かり易い。歴史、評価等を知ることは大事だと思うが、使う側にすれば、スカラーとベクトルの違い、スペコン特有のアーキテクチャ等、別の事に重きを置いて欲しい。初心者向けに書いてあるが、スペコンを触るプログラミングをした事あるということが前提？対象者をもっと明確に！		
	満足	独学で知らなかつたこともありましたが、少し易しめの印象を受けました。何か実習があれば良かったと思います。		
IDL利用入門	やや満足	MPI入門は私の研究目的には必要なかつたかもしれない。並列化、ベクトル化だけで十分だった。		
	満足	初めて使用したのですが、分かりやすかったです。		
	やや満足	今まで使ったことのないことにまで実習できた。		
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	満足	後の方の実習が少し速かった(持参PCが遅かった)が、実習が多くて良かった。 Fortranの説明は不要だった。AVSの使い方を実際にPCを触りながら聞けて良かった。		
	やや満足	Fortranデータの実際の読み込み方法を詳しく知りたかった。		
	満足	Fortranデータの説明はさらっと流しても良い気がする。(プログラムの内容とか)		

講習会名	今回の講習会の資料はどうでしたか。					
	満足	やや満足	普通	やや不満	不満	無回答
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)	12	8	4	0	0	6
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)	14	9	4	1	0	5
IDL利用入門	1	4	2	0	0	0
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	1	0	0	0	0	0
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	4	1	0	0	0	1
合計	32	22	10	1	0	12



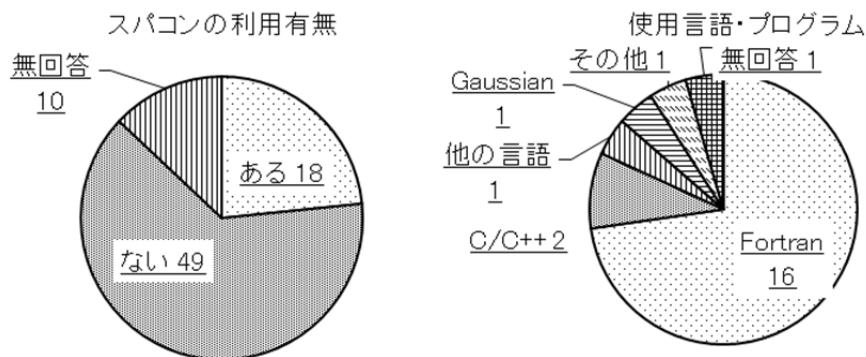
講習会名	今回の講習会の資料はどうでしたか。 よろしければ選択した理由をご記入ください。		
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	満足	とても詳しくわかりやすかったので、 プログラム例が参照できるのでわかりやすい。 Fortranの教科書 となるような資料やベクトル化、並列化の具体的なやり方が書かれていた。 実習で超初心者の私にも工寧に説明していただけて大変満足できました。	
	やや満足	演習問題もあり、基礎の内容から掲載されていたので、自身で勉強するのにも役立ちそうです。ただし内容の濃さ多さの割に時間が少なくてついていくのがやっとだったので、もう少し時間が欲しかった。 資料はいずれも内容が充実していてよかったです。資料も殆ど読むだけでわかるため、いちいち読み上げは不要だと感じた。	
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)	満足	詳しく書かれていると思う。わかりやすい。 MPIがなんとなくわかった。Fortranをやり始めたばかりなので為になった。	
	やや満足	質量ともに多め？だが技術資料の確認には使えそう。 近年のスバコン事情がわかりやすく紹介されていた。	
	やや不満	power pointと全く同じだったので、資料だけでは理解しにくい部分があった。	
IDL利用入門	やや満足	わかりやすかったが、それぞれのコマンドの意味をもっと具体的に書いていてくれていたらもっと良かった。	
	普通	もう少し初心者以上の内容も入れてほしかった。	

講習会名	今回の講習会は今後の研究に役立ちますか。				
	大変役立つ	役立つ	役立たない	わからない	無回答
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)	4	12	1	8	5
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)	5	17	0	6	5
IDL利用入門	2	5	0	0	0
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	0	1	0	0	0
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	2	3	0	0	1
合計	13	38	1	14	11



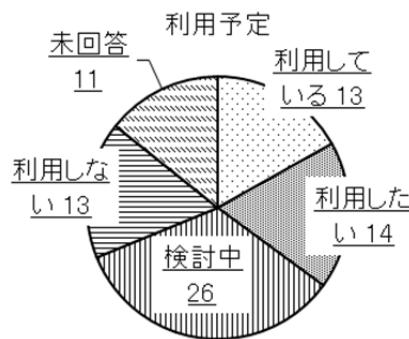
講習会名	今回の講習会は今後の研究に役立ちますか。 よろしければ選択した理由をご記入ください。				
	大変役立つ	役立つ	役立たない	わからぬ	無回答
初心者のためのスーパーコンピュータ入門 (ベクトル化・並列化の基礎からチューニングまで)	大変役立つ	私は流体解析を行っています。現在はANSYSという流体解析のソフトウェアを使っていますが、それでは境界層遷移を捉えきれず、Fortranに移行予定です。しかし、私自身はFortranが苦手で基礎すら覚えていませんでした。独学では限界もあり教科書もあまり分かりやすいものがなかったので、今回の講習は自分にとってかなり良かったです。 プログラムの計算時間を短縮したいので、ベクトル化、並列化など色々と試してみたい。			
	役立つ	ベクトル化、並列化に関する知識を修得できた。			
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)	大変役立つ	スパコン使用の必要にせまられています。 クラスターを管理しないといけないので。			
	役立つ	電磁界シミュレーションにFortranを使うので。 自分の研究にFortranを用いたプログラムを使っているので計算の効率化ができる。 シミュレーションコードの高速化を図りたいと考えている。			
	わからぬ	まだ並列化、ベクトル化したことなく、やる予定も未定なため。			
IDL利用入門	大変役立つ	IDLを使う研究をしているので。			

講習会名	他の情報基盤センター等も含め、これまでにスーパーコンピュータを利用したことがありますか。									
				あると回答された方へ。利用方法について。(複数回答可)						
	ある	ない	無回答	作成したプログラムの実行			無回答	ある	アプリケーション名	その他
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	18	5	5	2	1	1	1	Gaussian	1
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	20	4	9	0	0	0	0		0
IDL利用入門	0	7	0	0	0	0	0	0		0
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	0	1	0	0	0	0	0	0		0
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	2	3	1	2	0	0	0	0		0
合計	18	49	10	16	2	1	1	1		1



講習会名	サイバーメディアセンターの大規模計算機システムの利用を希望されますか。 「利用している」以外を回答された方へ。選択した理由をご記入ください。	
	利用したい	試用中。
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)	まだ登録したばかりでこれから計算を走らせる予定なので。	
	検討中	職務で利用できる事案があれば、積極的に利用してみたい。 お金がかかるため。
	利用しない	メリットが今月の講習では不明。
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)	検討中	現時点ですべて使うかすら決めていないため。シミュレーションのメインが電磁界解析で比較的扱いやすい点が多いという点も。 アカウントの申込み方法が面倒。よくわからない。
	利用しない	大規模計算機を利用するほどの数値計算を行わないため。 使用しているプログラムのアルゴリズムがスカラ計算機に適しているため。利用料金が高額である。

講習会名	サイバーメディアセンターの大規模計算機システムの利用を希望されますか。				
	利用している	利用したい	検討中	利用しない	未回答
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)	3	8	10	3	6
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	5	9	8	4
IDL利用入門	0	0	5	2	0
AVS可視化処理入門 (MicroAVS入門)	1	0	0	0	0
AVS可視化処理応用 (AVS/Express & Fortranプログラム入門)	2	1	2	0	1
合計	13	14	26	13	11



講習会名	その他、ご意見・ご要望があれば些細なことでも結構ですのでご記入ください。
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)	<p>内容の濃さと多さの割に時間が少なかった。説明も資料はまとめられていたが、スライドを読んでいるだけだったので、もう少し説明が欲しかった。</p> <p>午後は寝ている人も多く、一方的に進んでいる感が強い。プロジェクトでのコンパイル、プログラミング、チューニングの実演があればテキストの内容を実感できて良いと思う。</p> <p>GPUに関する講習会があれば参加したい。</p> <p>資料の改訂版を公開して、メールで知らせて頂きたいと思います。</p>
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)	<p>アカウントなどもう少し手軽に使える様にしてもらうと助かります。</p> <p>CUDAの講習会を開催して欲しい。</p>

2012年度「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、東北大学、東京大学、東京工業大学、名古屋大学、京都大学、大阪大学、九州大学にそれぞれ附置するスーパーコンピュータを持つ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、地球環境、エネルギー、物質材料、ゲノム情報、Webデータ、学術情報、センサーネットワークからの時系列データ、映像データ、プログラム解析、その他情報処理一般の分野における、これまでに解決や解明が極めて困難とされてきたいわゆるグランドチャレンジ的な問題について、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なります。本ネットワーク型拠点には上記の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。

2012年度の課題募集には合計39件の応募があり、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、35件が採択されました。このうち、5課題が大阪大学を利用することとなっています。

受付番号	研究課題名	課題責任者 所属機関	利用大学
JHPCN12-0007	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
JHPCN12-0012	高分子系粗視化シミュレーション基盤の計算機科学的高度化検討	防衛大学校	北大、東大、名大、阪大
JHPCN12-0028	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	情報通信研究機構	東北大、名大、阪大、九大
JHPCN12-0038	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
JHPCN12-0040	大規模計算機空気冷却風速場の実時間解析と移動型ネットワークセンター連携による計測融合オペレーション	大阪大学	東北大、阪大、九大

2012年度「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年から文部科学省「先端研究施設共用イノベーション創出事業」（平成2009年度から「先端共用施設共用促進事業」）の支援を受け、2010年度末までスーパーコンピュータの利用を民間企業に開放してきました。

2011年度からは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。

2012年度は第1期の募集に1企業の応募があり、1企業を採択しました。

■ 2012年度 募集日程

- ・第1期（2月1日～3月5日）：募集終了（申請1件）
- ・第2期（5月1日～5月31日）：募集終了（申請無し）
- ・第3期（8月募集予定）
- ・第4期（11月募集予定）

■ 企業利用一覧

2012年度企業利用一覧

企業名	申請課題名	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	平成24年4月～平成25年3月

2011年度企業利用一覧

企業名	申請課題名	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	平成23年4月～平成24年3月
技術研究組合单層CNT融合新材料研究開発機構	フェムト秒レーザを用いたグラフェン加工シミュレーション	平成23年10月～平成24年3月

■ 企業利用の案内

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

2012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：2012年4月1日～2013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
外川 浩章	大阪大学核物理研究センター	助 教
福田 優子	大阪大学レーザーエネルギー学研究センター	技術専門職員
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：2012年4月1日～2013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

2012 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。よろしくお願ひ申し上げます。

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でしょうか。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)

去年からサイバーメディアに飛び込んでくる質問のなかに 64 cpu MPI というのが目につくようになった。個人的には 4 cpu 1 NODE でことは足りてないので、マルチノード処理となると時間的に手も足も出ない。そこで、Q&A マニュアルのような素晴らしい情報基盤課の対応を、横目で眺める毎日が続いている。HowTO ものが出版されたのではと疑いたくなるほど最近のユーザーの HPC スキルレベルには目を見張るものがあり、領域分割法だとかデッドロックなどと言われると、対応には相当な時間を要しますが宜しいでしょうかと言わざるをえない。

とがわ ひろあき
外川 浩章

(大阪大学核物理研究センター 助教)

私は、原子核物理学の実験的な研究を行うために必要な、計算機とネットワークの整備・運用に長期間携わってきたので、そのノウハウを活かして、スパコンの整備・運用を行っている。アルゴリズム等の深い相談には対応できないが、中程度までの利用方法に関しては、広く浅く相談を受けられると思う。

ふくだ ゆうこ
福田 優子

(大阪大学レーザーエネルギー学研究センター 技術専門職員)

大阪大学レーザーエネルギー学研究センターの福田優子です。今年から RCNP の外川さんとともに、CMC の利用相談員として、CMC のすべての利用者の皆様からの相談に協力して対応させていただくことになりました。

私は、研究室に配属された初めてシミュレーションをする情報系以外の理系の大学生、大学院生の方などを近くでサポートしてきました。その経験と、講習会などでいただいたみなさんの質問や、協力いただいたアンケートなどを生かして、「パソコン&スーパーコンピュータで計算するための基礎知識」という自習書にまとめて、以下の WEB で公開しています。

<http://www.ile.osaka-u.ac.jp/research/cmp/text.html>

スーパーコンピュータは利用しないけど、パソコンは利用するという方のお役にもたてるようにと願って作成しました。一度参照していただき、コメントや質問などをいただけたら大変ありがとうございます。

2004 年からは、CMC と共に講習会を開催させていただいている。実際に講習会を受講された方は、聞いてよかったですと言つてくださることが多いです。教科書がどんなによくても、講義は受けたほうがいいですね。講習会やプログラム相談もそれと同じだと思います。大学にいる間に、ぜひ一度は講習会を受講し、スパコンの概念や、ベクトル化・並列化などの基礎知識、さらには高度な並列化、可視化とはなど身について卒業していただきたいと希望しています。

最後になりますが、皆様からいただいた質問や、アンケートは大変参考になります。ここが分からない、こんなことを教えてほしいという声も大歓迎です。ひとりで苦しまず、ぜひお気軽にご質問ください。

やまい なりよし
山井 成良

(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頂きます。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。

2012 年度大規模計算機システム利用指導員 自己紹介

いたの ともあき
板野 智昭

(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、最近は雑務と子守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、これまでの研究時間の大半は愛用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、机の前に座って時間をかけて疑問について熟考するという習慣が激減しています。これも時代の流れかとは思いますが、一生をかけて達成すべきような本当に大きな意義のある身のある仕事にとりかかることが難しい、大変世知辛い世の中に周りの環境は変化していますね。こんなことを国全体を挙げてやっているのでは、現状維持でさえ難しい日本の国力が落ちるばかりではないかと心配していますが、さりとて政治家に立候補しようとは思っていません。話は脱線しました。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。

たけち ひでお
武知 英夫

(阿南工業高等専門学校 機械工学科 准教授)

NEC Express5800 PC クラスタの並列ジョブ実行を対象とする CPU 負荷分散解析で強力な解析ツールとして使用できる ITA(Intel Trace Analyzer)のカスタマイズが完成し、昨年から手元の端末の画面から操作できるようになった。願いが叶うまでに約 3 年を要したが、自作の FEM プログラムの並列処理を複数の CPU 上で実行している際に時間トレースを取って、CPU 別の負荷分散を可視化して表示できるようになった。最近になって”高速化推進研究活動報告第 5 号”でプロセス間通信に関しての同類記事を発見することがあり、手がけてきた ITA が時代遅れになっていないことを確認できた次第である。

ふじ けんしょう
藤 堅正

(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のお世話になって居ります。

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が、何れも専ら FORTRAN を

使用している関係上、研究室で適宜 FORTRAN とバッチジョブ利用のご相談を承っております。宜しくお願
います。

大規模計算機システム FAQ

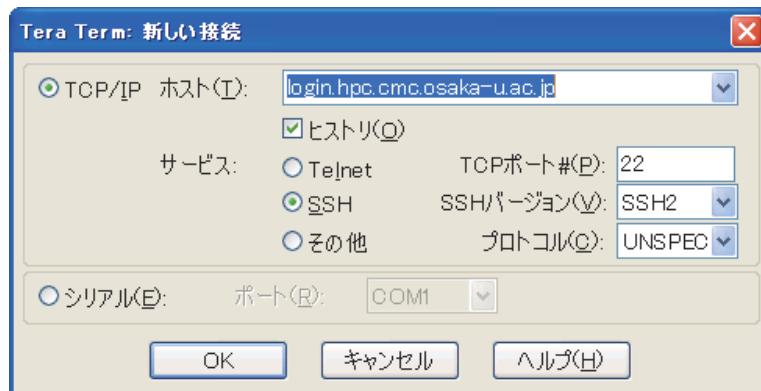
I. 利用方法

1. ログインについて

計算機を使用するには 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。

接続する場合、接続先ホスト名に”login.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp”、プロトコル（サービス）は”SSH”、TCP ポートは”22”を指定します。（以下の画面は TeraTerm の場合）

ログインするとメニュー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、バッチリクエストの投入、計算結果の確認などを行います。



トラブルシューティング

No	現象	確認内容	備考
1	接続できない	インターネットに接続できているか	
		接続先ホスト名が間違っていないか	ホスト名 : login.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
		TCP ポートが間違っていないか	TCP ポート : 22
		SSH で接続しているか	Telnet では接続不可
		ファイアウォールやネットワークの設定で SSH、TCP ポート 22 の使用を許可しているか	
2	ログインできない	ユーザ名（利用者番号）が間違っていないか	
		パスワードが間違っていないか	忘れた場合は「III.利用手続き」の「4. パスワード忘れについて」を参照
		利用期限が切れていないか	
3	文字化けが発生している	文字コードの設定が間違っていないか	送信、受信とも「EUC」に設定 ※本システムの文字コードは「EUC」

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。

トラブルシューティング

No	現象	確認内容	備考
1	コンパイルできな い	エラーメッセージを確認する。以下に主な原因を示す。	
		コンパイラーのパスが間違っている (Intel MPI)	パス : /opt/intel/mpi/3.2/bin64 コマンド : C : mpicc、C++ : mpiicpc、 Fortran : mpiifort
		コマンド名が間違っている	
2	コンパイルエラー が発生する	エラーメッセージを確認する。以下に主な原因を示す。	
		オプションの指定が間違っている	
		リンク先ライブラリの指定が間違っている	PC クラスタ用ライブラリか SX 用ライブ ラリか確認する
		リンクオプションの指定順が違う	リンクオプションは対象ファイルより後、 また”-l”は”-L”より後に指定する
		文字コードが「SJIS」、改行コードが「CRLF」にな っている（主に Windows 上で作成したファイルを FTP 転送した場合に発生）	以下のコマンドで文字コードを「EUC」、 改行コードを「CR」に変換する nkf -e -Lu [ファイル] > [一時ファイル] mv [一時ファイル] [ファイル]
		配列のサイズなど、使用メモリサイズが大きい	以下のオプションを指定する Intel コンパイラ： -mcmmodel=large -shared=intel SX クロスコンパイラ： -size_t64 (C/C++)、-ew (Fortran)

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。

キューネーム（以下の「#PBS -q PCC」）を”PCC”にすることで PC クラスタに、”SX9”にすることで SX-9 に、”SX8F”または”SX8L”にすることで 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ネームの指定)
#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 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.
```



受け付けたバッチリクエストには リクエスト ID が付けられる。

トラブルシューティング

No	現象	確認内容	備考
1	正常に投入できない	エラーメッセージを確認する。以下に主な原因を示す。 キューネームが違う オプションが違う パラメータが違う	”#PBS -q”で指定しているキューネームを確認する ”-q”、”-l”など、各行のオプションに間違いないか確認する ”cpunum_job”など、各行のパラメータの綴り等に間違いないか確認する

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以下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。実行が終わると以下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-8R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)

トラブルシューティング

No	現象	確認内容	備考
1	実行されない	エラーメッセージを確認する。以下に主な原因を示す。	
		NQS スクリプトファイルの”cpunum_job”の値が大きい	指定可能な最大値以下の値を指定する PC クラスタ : 4、SX-8R : 8、SX-9 : 16
		NQS スクリプトファイルの改行コードが「CRLF」になっている（Windows 上で作成したファイルを FTP 転送した場合に主に発生）	FTP 転送時に”テキストモード”で転送するか、以下のコマンドを実行する nkf -e -Lu [ファイル]>[一時ファイル] mv [一時ファイル] [ファイル]
		NQS スクリプトファイルの最終行に改行がない（csh スクリプトの場合）	最終行にコマンドを記述している場合、改行を入れる
		NQS スクリプトファイルのプログラムの指定が間違っている	指定ファイル名、パス、実行権限、バイナリ形式（PCC 用、SX-8R 用、SX-9 用）等を確認する
		NQS スクリプトファイルの”#PBS”行の間に通常のコマンド行がある	”#PBS”行を全て記述後、通常のコマンド行を記述する
2	エラーが発生する	エラーメッセージを確認する。以下に主な原因を示す。	
		プログラム実行中に時間切れになる	NQS スクリプトファイルの”elapstim_req”の値（経過時間）を大きくする
		メモリが足りない（” Exceeded memory size limit”等のエラーが出る）	NQS スクリプトファイルの”memsz_job”の値（ノード当たりのメモリサイズ）を大きくする
		” Batch job received signal SIGXRLG1. (Exceeded RLG1 limit”というエラーが出る	標準出力、標準エラー出力をリダイレクトなどでファイルに出力するようにする
		”[エラーコード] [メッセージ] PROG=[ソースファイル] ELN=[行](YYYYYY) TASKID=Z”というフォーマットのエラーが出る	[ソースファイル]の[行]を[メッセージ]に従って修正する 最適化による影響の場合は、最適化レベルを落としてリコンパイルする

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、手順は次の 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

トラブルシューティング

No	現象	確認内容	備考
1	接続できない	インターネットに接続できているか	
		接続先ホスト名が間違っていないか	ホスト名 : ftp.hpc.cmc.osaka-u.ac.jp
		TCP ポートが間違っていないか	TCP ポート : 22
		SFTP で接続しているか	FTP では接続不可
		ファイアウォールやネットワークの設定で SSH、TCP ポート 22 の使用を許可しているか	

6. パスワードの変更について

次の 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。

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

※Mac OS の InternetExplorer でのご利用は非推奨となっておりますのでご注意ください。

なお、フロントエンド端末での”passwd”コマンドでは変更できませんのでご注意ください。

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

II. サポート、マニュアル

1. 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、次の情報推進部 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(06-6879-8812、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、次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次の 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次の URL をご覧ください。

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

2. マニュアルについて

次の 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ります。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ります。

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

III. 利用手続

1. 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ります。利用資格の詳細は次の 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。詳細は次の URL をご覧ください。

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

2. 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定額制をとっており、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。詳細は次の URL をご覧ください。

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

3. 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。詳細は次の URL をご覧ください。

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

4. 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、次の URL にあるパスワード変更届に必要事項を記入し、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次の 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>

5. 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。利用申請は Web ページから受け付けています。詳細は次の URL をご覧ください。

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

IV. その他

1. 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次の URL をご覧ください。

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