

実際、FOCUS スパコンにおいて第 3 世代密度汎関数計算法の優れた並列計算性能を示すことができた。計算サイズを一定にしたまま CPU コア数を増加させて計算時間を測定するストロングスケーリング測定を行った。CPU コア数に対して対象としたモデル分子が小さかったため、dynamic-replica 法と distribute 法ではコア数が増えるに連れて並列計算性能頭打ちになってしまったが、第 3 世代密度汎関数計算法では良好な計算性能を達成している。計算時間も大幅に短縮されており、数万コアを越える分散メモリ型並列計算機を利用する場合は、本手法が最適であることが示された。ただし、第 3 世代密度汎関数計算法巨大なコレスキーベクトルを扱う必要があり、現在これをディスク領域に退避させつつ計算を行っている。本ベンチマークテストによりディスク I/O の軽減が高速化・高並列化に向けた次の課題となった。

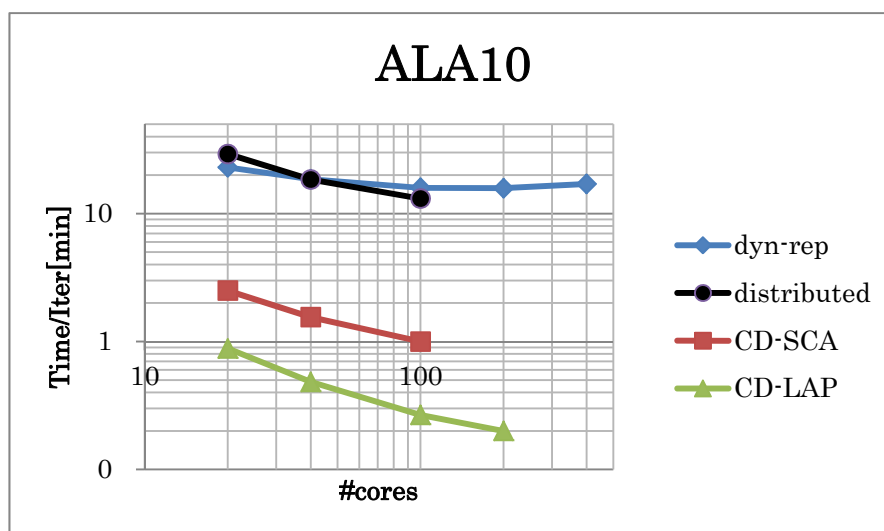


Fig. 6-91 Log-log string scaling plots of the ALA10 molecule calculation using dynamic-replica, distributed, CD-Scalapack and CD-LAPACK method on the ProteinDF.

(iii) ABINIT-MP

フラグメント分子軌道(FMO)プログラム ABINIT-MP の機能で最も利用頻度の高い 2 次摂動(MP2) 計算について、HIV-1 プロテアーゼ+ロピナビル複合体などを対象にコア数を増やしながら時間の低減を測定し、好ましい線形のスケーリングを確認した。

FMO グループでは、リガンドとタンパク質の複合系や DNA 水和系などのリアルな生体分子を、並列処理を駆使して実用的に量子化学的に計算出来る ABINIT-MP プログラムを長年開発してきた。種々の機能が実装されているが、分散力の寄与をリーズナブルに取り込める 2 次摂動法 (FMO-MP2) は応用計算サイドから最も需要が高くなっている。ABINIT-MP の FMO-MP2 計算は Flat MPI 条件下では、研究室単位で気軽に持てる小規模の PC クラスタ、スパコンでは地球シミュレータのようなベクトル並列機、あるいは「京」に代表されるスカラ型の超並列機まで動作するが、分子サイズとコア数を変えて加速性能を調べるベンチマークテストはこれまで系統的に試みてこなかった。そこで今回、商業利用の可能性も考慮して神戸 FOCUS の並列機を使って下記のような測定を行った。

FMO-MP2 では 2 電子積分の扱いがコストを決めるので、いわゆるコレスキー分解(CDAM)を使って近似的に高速計算するオプションでも計算している。計算した系は 4 種で、女性ホルモンと 241 残

基のアミノ酸から成る受容体(ER)の複合系と 50 残基の部分モデル、198 残基の HIV-1 プロテアーゼとロピナビルの複合系(Fig.6-97 left)、それに DNA の 12 塩基対の水和モデル(Fig.6-97right)である。

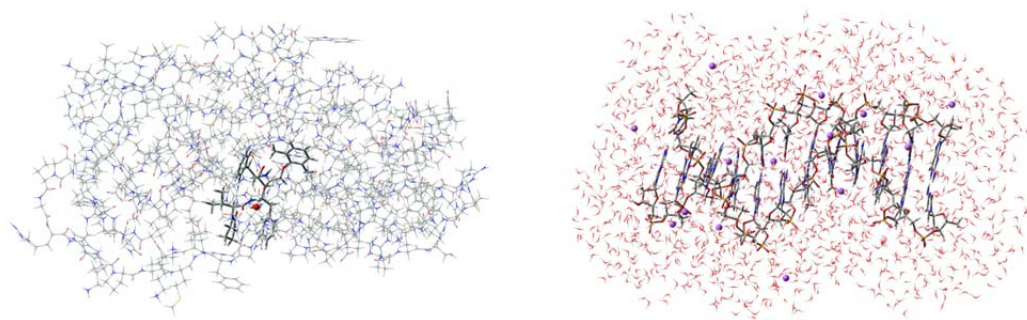


Fig. 6-92 Molecular graphics - left: HIV-1 protease + lopinavir right:Hydrated DNA model with 12 base pairs

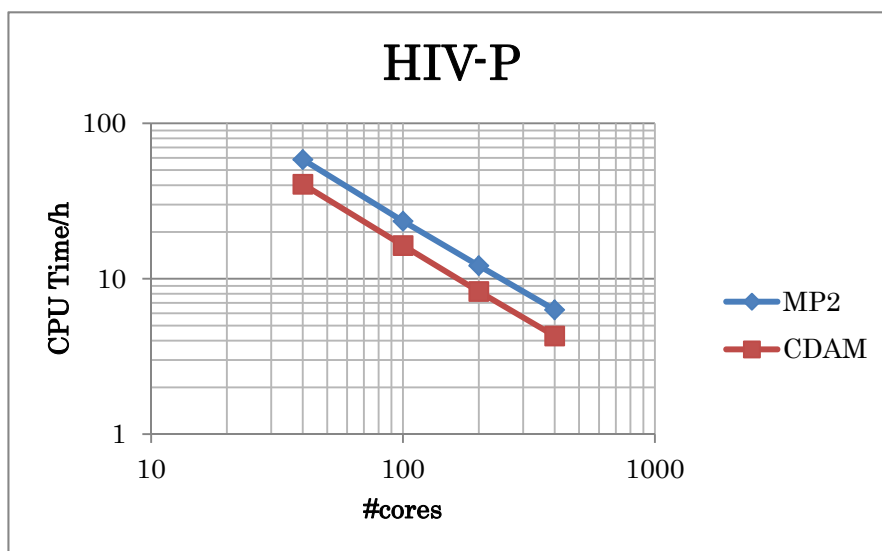


Fig. 6-93 Log-log plot of computational time for MP2 calculation for HIV-1 protease + lopinavir

ER ではコア数を 100、200、400 と変えたところ MP2(CDAM)の計算時間は順に 33.9h(25.3h)、17.3h(12.8h)、8.6h(6.4h)となり、100 コアを基準とした加速としては理想に近いスケールリングで 2.0 倍、3.9 倍が得られた(CDAM も同じ)。HIV では 40 コアの場合も行い、タイミングとして順に 58.4h(40.6h)、23.5h(16.4h)、12.1h(8.3h)、6.3h(4.3h)となった。Fig.6-98 に対数プロットを示すが、こちらもスケールリングは良好で、40 コア基準の加速は順に 2.5 倍(2.5 倍)、4.8 倍(4.9 倍)、9.3 倍(9.5 倍)である。ER や HIV-1 のタンパク質-リガンド系のサイズは創薬応用の典型的なサイズであり、実際に使われるコア数としても 40~400 程度が想定されるので、このテストで好ましい結果が得られているのは朗報と言える。

DNA の水和モデルの計算時間の対数プロットを Fig.6-99 に示すが、こちらは残念な結果になっている(コア数は HIV-1 と同じ)。40 コアでの時間は 8.7h(7.6h)であるが、400 コアでも 6.9h(6.9h)で加速は 1.1 倍に過ぎない。この理由は、DNA12 塩基に対してナトリウムのカウンターイオン 14 個、そして水が 1648 個と多いために、フラグメント対のタスクリストを生成するところにコストがかかってしまっ

いること、水と DNA 部分との計算負荷が違い過ぎるためと考えられる。これを受け、前者の対策としてリスト生成のアルゴリズムの改良を施したので、次回のベンチでは改善が見られると期待している。

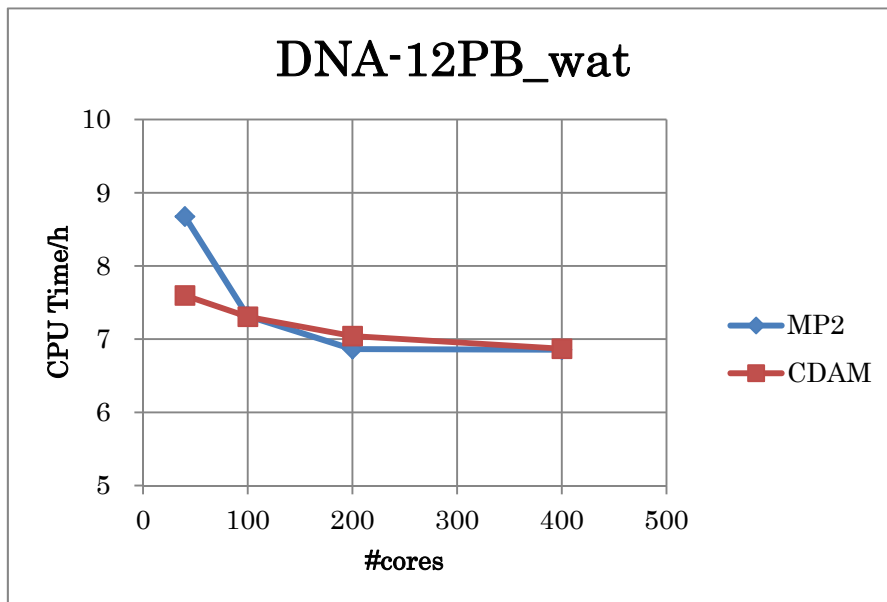


Fig. 6-94 Log-log plot of computational time for MP2 calculation for hydrated DNA model with 12 base pairs

d) ソフトウェアのアップグレード支援

1) FrontFlow/blue

本業務では、大小の速度スケールが混在する場合に計算時間を短縮する方法として、「局所時間刻み」機能を FrontFlow/blue (以下、FFB)に実装する。また、実装した「局所時間刻み」機能を用いたテスト計算を実施し、本機能の有効性を確かめる。流体解析の計算対象において、限られた領域のみに速度スケールが大きい現象が混在していると、その領域の影響で全体の時間刻みが小さくなるため、計算ステップ数が増え、計算時間が増大する。このような状況において、計算時間を短縮する方法として以下の方法をとる。尚、本資料では速度スケールが小さい大部分の領域を「領域 A」、速度スケールが大きい限られた領域を「領域 B」とする。

- ① 各計算領域で個別の時間刻みを設定する。ただし、処理の都合上、大きい時間刻みは小さい時間刻みの整数倍(以下、N)とする。
- ② 領域 A の計算は N 回に一回しか実行せず、領域 B の計算は毎ステップ計算を行う。
- ③ 領域 B には領域 A よりも相対的に多くの計算ノードを割り当て、ノード当たりのグリッド数を可能な限り少なくする。

上記方法では、領域 B の計算時間が全体の計算時間を決めるので、領域 B に多くの計算ノードを割り当てることによって全体の計算時間を短縮することが可能である。なお、本手法では、領域 B のステップ毎の計算時間の短縮が前提となっているため、FFB がどの程度 Strong-scale するかが重要である。FFB ではスーパーコンピュータ京の 24,576 ノードを用いた Strong-scale のベンチマークテ

ストを実施しており、その結果を Table 6-15 に示す。この結果から、ノード当たりのグリッド数の減少と共に実効性能は低下するものの、約 2,000 グリッド/ノードの計算では計算時間が 0.175 sec/step まで低下することを確認できており、この程度計算時間が短縮できていれば本手法は有効である。

本機能を Fig.6-95 に示す曲りパイプ流れを対象にテスト計算を実施した。本計算モデルは、入口領域(静止系)、パイプ領域(回転系)、出口領域(静止系)の 3 領域で構成されており、本機能を用いれば各領域に対し独立に時間刻みを設定することができる。ただし、お互いの時間刻みの比は整数倍である必要がある。テスト計算の結果、一定の時間刻みを与えた場合と、パイプ領域のみ、他の領域の 1/4 の時間刻みを与え場合でほぼ同じ計算結果となり、本機能が正常に動作することを確認している。

Table 6-15 Strong scale benchmark test of FFB on K

ノード数	グリッド数		計算時間 (sec/step)	実効性能 (%)
	トータル	ノードあたり (Mgrid/ノード)		
24,576	6000 万	0.0024	0.175	0.21
24,576	4.8 億	0.020	0.335	0.93
24,576	38.4 億	0.156	1.079	2.45
24,576	307 億	1.250	6.300	3.10

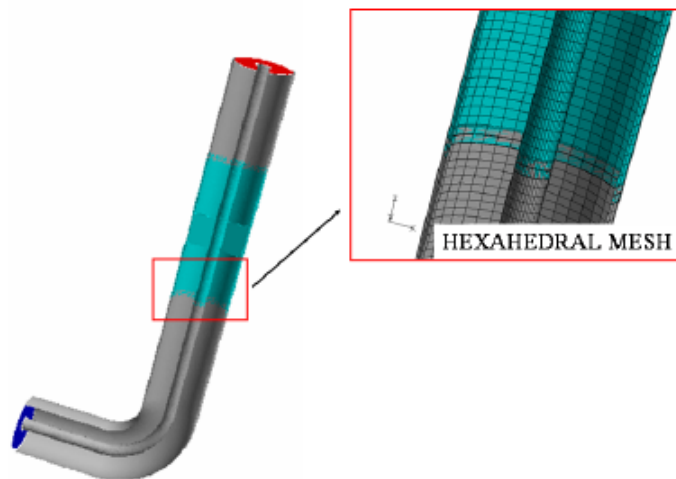


Fig.6-95 Computational model to test the function of local time step function

2) FrontISTR

並列 FEM 構造解析ソフト FrontISTR (以下、FISTR) は、FISTR システム (プリ・ポスト REVOCAP_PrePost を含む) の利用促進、産業応用、ソフトウェア資産や解析データの維持管理、機能改良、等を目的に、FrontISTR 研究会と称するユーザー会を発足し、プログラムの中味を理解し改良して利用しようと考えているユーザー、マニュアルに従って利用するエンドユーザー、らを対象に、ハンズオン、話題提供、などのセミナー開催、WEB を通じたバグフィックス版や各種情報提供を行った。FrontISTR 研究会を含め、これまでに FISTR のユーザーから寄せられたリクエスト、ならびに、開発者らによって指摘されてきた事項のうち、プログラム改良、バグフィックス、およびそれらにともなう検証計算を実施し、マニュアルなど関連するドキュメントの更新も含めマイナーバージョンアップを行い、FrontISTR Ver.4.3 として公開した。

FrontISTR 研究会の状況 (<http://www.multi.k.u-tokyo.ac.jp/FrontISTR>)

2013 年 3 月の発足以来、10 回開催した。研究会のサイトには用いた資料をすべてアップし、最新バージョンのソースコードやマニュアルを入手できるようになっている。2014 年 1 月 6 日時点で、登録メンバー数 113 名、参加企業・団体数:65 社。

Ver.4.3 における更新内容

① 構造解析機能

- ・ブロックサイズ 3 のシェル・梁要素の開発、および、ソリッド要素との混在解析への対応
- ・シェル要素における直交異方性材料、積層シェルへの対応
- ・大変形解析の際の荷重 FOLLOW 機能追加 (!DLOAD にパラメータ FOLLOW を追加)
- ・梁要素の動解析への対応
- ・動解析におけるモニタリング機能の向上
- ・連成解析における入力流体力へのウィンドウ関数の適用

② パーティショナ関連機能

- ・大幅な高速化 (4,000 万節点モデルを 2 万領域に分割する場合で約 150 倍の高速化)
- ・Metis Ver.5 に対応 (MUMPS が Metis Ver.4 のみ対応のため、引き続き Ver.4 にも対応)

③ メッシュリファイン機能

- ・要素タイプ混在モデルのリファインに対応 (ただし、節点自由度数の異なる要素タイプの混在は不可)
- ・平面モデル、および、シェル・梁モデルのリファインに対応
- ・入力温度データのリファイン情報に基づく補間に対応 (例えば、リファインなし、あるいは、リファイン 1 回で熱伝導解析を行い、その結果を入力として、リファイン 2 回で熱応力解析を実施する、など)

④ 線形ソルバー関連

- ・前処理におけるマルチカラー処理およびハイブリッド並列に対応
- ・ベクトル計算機向けオーダリングに対応 (!SOLVER にパラメータ USEJAD を追加)
- ・節点自由度数 3 の問題で、全ての前処理と反復解法の組み合わせに対応
反復解法: CG, BiCGSTAB, GPBiCG, GMRES
前処理: SSOR, 対角スケールリング, BILU(0), BILU(1), BILU(2)
- ・行列データのダンプ機能を追加 (!SOLVER にパラメータ DUMPTYPE, DUMPEXIT)

⑤ バグ修正、その他

- ・シェル要素の Drilling DOF の修正
- ・非線形静解析における収束判定の修正
- ・線形動解析のリスタート時の時刻の修正
- ・連成解析時のメッセージ内の節点番号表示の修正
- ・ILU 前処理の修正
- ・HEC-MW の通信ルーチンの修正
- ・一部のコンパイラによる最適化時の不具合回避 など

3) REVOCAP

REVOCAP システムは大規模アセンブリ構造を対象としたマルチ力学シミュレーションを実現するためのソフトウェア(モジュール群)の総称であり、マルチ力学解析エンジン REVOCAP_Coupler、プレポスト REVOCAP_PrePost、モデル細分化モジュール REVOCAP_Refiner から構成される。ここでの大規模アセンブリ構造とは、実際に設計現場にて使用されている複数の部品から構成されているアセンブリ構造体を指し、またマルチ力学とはいわゆる連成解析(マルチフィジックス解析)のことをいう。主なマルチ力学解析には流体-構造解析、熱-流体-構造解析などがあげられるが、REVOCAP システムの開発開始当時(2005 年ごろ)には大規模なアセンブリ構造体(実機アセンブリ構造体)をターゲットとしたマルチ力学解析は実用化されていなかった。このため、当時の大規模解析は、構成要素に対して流体、構造、熱、電磁場等単体で行われており、精度的に不十分なものとなっていた。この問題を解決するために PC クラスタから世界最高クラスの演算性能を持つスーパーコンピュータ「京」などの超並列計算機にも対応可能な大規模アセンブリ構造対応マルチ力学シミュレーター、REVOCAP システムの開発を継続的に行ってきた。現在では REVOCAP システムは文部科学省高性能汎用計算機高度利用事業「HPCI 戦略プログラム」分野4 次世代ものづくりにおいて HPC 次世代ものづくりプラットフォーム(HPC/PF)のアプリケーションラインナップの一つとして利活用され、また、産業界への普及活動が積極的に行われている。平成 25 年度にはユーザーからのリクエストに対応する形で、ユーザービリティの向上に向けた追加実装を行った。以下、追加実装された 3 つの新しい機能について概要を述べる。

① 可視化ツールへのマッピング情報出力インターフェース

ユーザーが視覚的に連成界面におけるマッピング情報を確認することを補助するため、REVOCAP_Coupler が入出力するファイルを用いて、REVOCAP_PrePost により可視化可能なファイルを作成する追加機能。

② マッピング情報ログの出力機能強化

REVOCAP_Coupler において実装されている異なるメッシュトポロジー間における連成物理量の補間式作成機能について、上記の可視化だけでは得られない補間式そのものをファイル出力し、ユーザーが確認可能とする追加機能。

③ 単位・座標変換支援機能

異なるメッシュトポロジーを取り扱う力学現象解析ソルバにおける無次元化や、座標系単位、原点座標位置の差異などに伴う各種の変換作業を、REVOCAP_Coupler 内部で行うことでソルバ間におけるメッシュや物理量の単位、および座標系の整合を保障する追加機能。

上記の追加機能は主に REVOCAP_Coupler モジュールに実装されており、バージョン 2.1 として 2014 年 6 月にリリースした。

4) FrontCOMP

FrontCOMP は炭素繊維強化プラスチックの強度評価に特化したソフトウェアであり、メソスケールモデルを作成するプリプロセッサにあたる FrontCOMP_mold、熱硬化性樹脂の硬化プロセス時の温度変化と残留ひずみ・応力解析を行う FrontCOMP_cure、外荷重による損傷発展解析を行う FrontCOMP_damage からなる。本アップグレード支援においては、FrontCOMP_damage に関して下記 4 点の機能強化を行った。

① ミドルウェア更新

FrontCOMP_damage は FrontISTR をベースに作成されており、FrontISTR において実施済みのミドルウェアに関する機能アップ成果をインプリメントする。

② 動的衝撃解析機能の強化

前述の FrontISTR で強化された接触解析機能および動的解析機能をインプリメントする。

③ 直交異方性材料モデル設定機能の強化

FrontCOMP の中核をなすメソスケールシミュレーションにおいては、炭素繊維束を直交異方性材料として設定する。炭素繊維束の複雑な配置に対応して、要素ごとの材料主軸データを読み込み、直交異方性材料の材料定数を設定する機能を FrontCOMP_damage に追加する。

④ 並列効率強化

「京」を利用した大規模並列計算を想定して、ソルバーの並列計算効率強化を行う。

上記の機能強化は、炭素繊維強化プラスチック製ジェットエンジンファンブレードの開発を視野に入れたものである。ファンブレード開発においては、バードストライク試験が最も過酷で重要な設計確認試験となる。炭素繊維強化プラスチックの動的破壊様式は、材料の非均質性から非常に複雑となり、破壊の予測と設計による対処を実験的な手法のみで実施することは不可能である。この問題を解決するためにはシミュレーションを援用した動的破壊メカニズムの解明が必須である。本機能強化により、超並列計算による炭素繊維強化プラスチック製ファンブレードの動的破壊シミュレーションの途が拓かれ、FrontCOMP を活用した設計の高度化が図られるものと期待される。

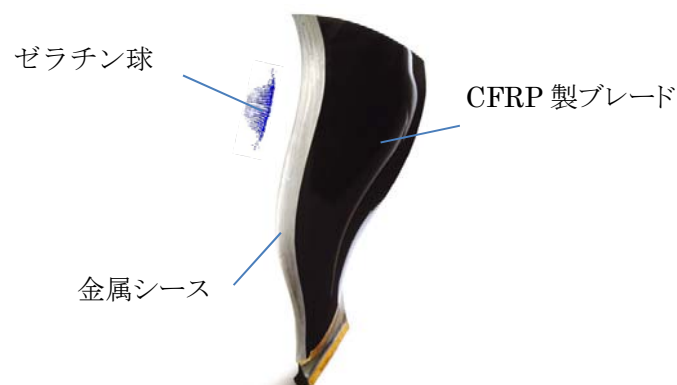


Fig.6-96 Dynamic rupture test simulation of CFRP fan blade

(2) SPring-8 によるタンパク質の電子密度分布ならびに構造データと「京」による解析結果とを比較検討しデータの解像度と信頼性の飛躍的向上

フラグメント分子軌道(FMO)計算から得られる電子相関の効果を含めた全電子密度を X 線実験による電子分布と直接比較したり、エネルギー微分計算に基づく構造最適化を連携させたりすることで、より信頼性の高いタンパク質-リガンド相互作用解析を実用時間的に行うことを目標にプログラム整備を進めている。実際の計算の系統的な実行には、スーパーコンピュータ「京」の高い超並列性能を活用できるように ABINIT-MP に対して多面的なチューニング、モジュールの新規開発や改良、ベンチマークを実施する。また、改良・拡張がなされたプログラムの公開も図る。

【成果の内容】

本研究では以下に項目別に詳述するように、ABINIT-MP/BioStation Viewer について高速化と種々の機能強化を行い、併せて実証的な応用計算を行うことが出来た。そこで道標としたのは、「京」での超並列 FMO 計算の(実用性能での)実行、ならびに SPring-8 に代表される X 線実験設備からの電子密度・構造データへの対応であり、共に十分な達成度が得られた。これを受け、ABINIT-MP は Ver.7.0 に、また BioStation Viewer は Ver.16.0 に進化した(2014 年度上期中にリリース予定)。また、「京」/AICS に対しては 2014 年 3 月 26 日に ABINIT-MP Ver.6+としてライブラリ提供も行っている。

a) 高速化と機能拡張

1) エネルギー計算の高速化

FMO 法の応用でよく使われるのは 2 次摂動(MP2)レベルでの計算であるが、MP2 ステップで使われる分子軌道と軌道エネルギーの組は環境静電ポテンシャルを印加した条件でのハートリー・フォック-自己無撞着場(HF-SCF)の手続きで求められている。計算コスト的には(あるフラグメントの)基底関数の総数を N とした時に HF は N^4 、MP2 は N^5 の依存性を持つため、通常の 2 電子積分を用いる場合には MP2 の割合がジョブ時間の中で支配的である。しかし、コレスキー分解(CD[1])

$$(\mu\nu, \lambda\sigma) \approx \sum_I L_{I,\mu\nu} L_{I,\lambda\sigma} \quad (6-1)$$

を導入することにより、通常の 2 体フラグメント(ダイマー)までの FMO2-MP2 ジョブで時間のかかるフラグメントダイマーの MP2 のコストは 1/10 程度にまで低減することが可能となる(私たちは CDAM と呼んでいる[2]が、CD と略すこともある)。式(6-1)で I はコレスキー展開基底で基底関数の積に取られるので、そこは N^2 性を持つが精度とのバランスで実効的に選別して省くことが出来る。 I は並列処理時にはプロセスに分散して持てることと、 L テンソルでの基底関数添字から分子軌道添字(占有軌道と仮想軌道の対)への変換 $\mu\nu \rightarrow ia$ は高効率の DGEMM によって処理されるために CD の MP2 では大きな加速が得られる[2]。しかし、HF での Fock 行列では交換項の計算を DGEMM でやるにせよ、上述の展開基底の N^2 性によって実行的に N^5 的なコストになってしまうことと、SCF 性の確保のために繰り返しが必要なために、通常 2 電子積分での計算よりむしろ時間がかかってしまう難点があり、CD の HF は実際には使われてはこなかった。一方で、4 体フラグメントまで考慮する ABINIT-MP 独自の FMO4-MP2 エネルギー計算[3]では MP2 を CD とした場合、通常の PC クラスタあるいは地球シミュレータ(ES2)でも全ジョブ時間の 8 割以上を 4 体と 3 体の HF 計算が占める状況にあり、コスト低減のために複合的な方策が必要であることは分かっていた。これを受けて行った 4 つの改善策を以下に箇条書きで示す。

・コレスキー分解(CDAM)の展開基底の1中心化(1C):

既述のようにコレスキー分解は基底関数積を展開に用いるが、それを同一原子上に中心を置く組に限る1中心化[1]を施すことで、精度劣化とのトレードオフとなるが展開長を数分の1程度に下げるオプションを導入した。速度の向上と精度のチェックは、アミノ酸残基の数で10のchignolin(主鎖と側鎖を分割して16フラグメント)でFMO4-MP2レベルでPCクラスタ(SBの128コア)上で行った。

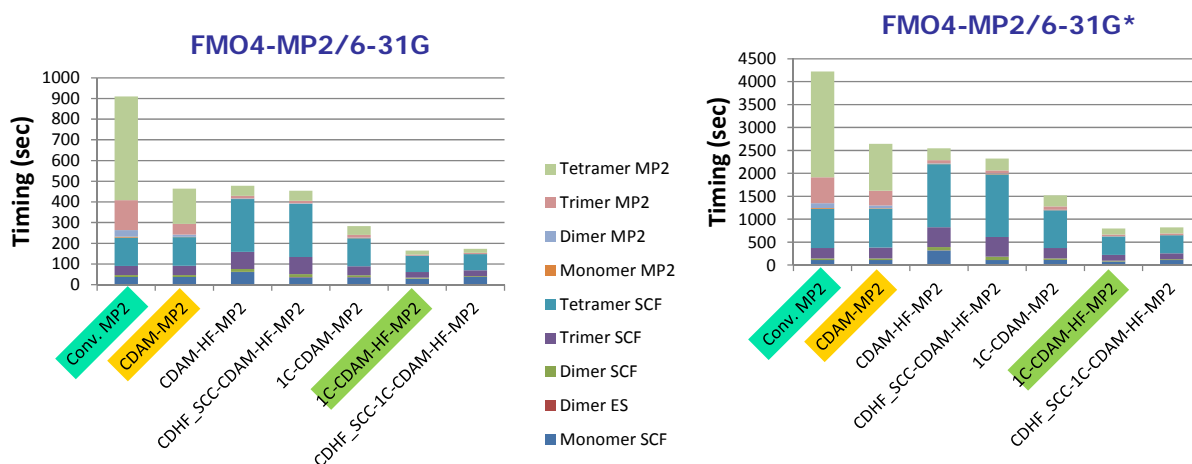


Fig.6-97 Benchmark timing data of MP2 calculation for Chignolin on PC cluster

ここでラベルにCDAMの前にHFがある場合、HF段階でもCDAMを使ったことを示す。最右のタイプは、環境静電ポテンシャル(ESP)を決するフラグメントモノマーのHF計算だけは通常2電子積分とした変則的な扱いである。基底関数が6-31Gの場合、MP2のみのCDAM化で時間はほぼ1/2になるが、1C化してさらにHFもCDAMで行うと1/4以下の時間で済む。特に、4体フラグメントの部分が加速されているのはポイントである。6-31G*の場合も1C-CDAMによる加速の効果は大きい。モノマーだけ通常積分とした1Cの扱いでは計算時間の短縮は顕著ではない上、応用計算では全エネルギーよりも重要な相互作用エネルギー(IFIE)にも誤差(2電子積分の近似無を基準)が増し、その大きさは6-31G基底では1kcal/mol超、6-31G*基底では0.3kcal/mol程になるため、このオプションは推奨出来ない。それ以外の1Cの場合、6-31Gと6-31G*での誤差の大きさは0.4kcal/mol、0.1kcal/mol以内となる。d関数が含まれない6-31Gでは精度が相対的に下がるのは理に適っており、6-31G*より良質のcc-pVDZでは0.05kcal/mol以下の誤差となる。

次にES2(128ノード使用)でのHIV-1プロテアーゼ+ロピナビル(198残基、主鎖-側鎖分割により総数363フラグメント)のFMO4-MP2計算のタイミングを示す。

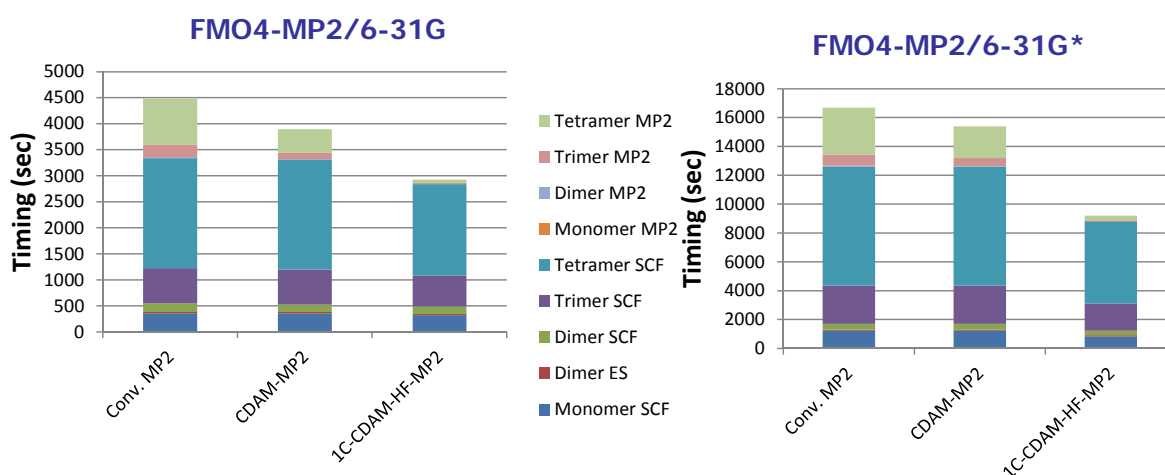


Fig.6-98 Benchmark timing data of MP2 calculation for HIV-1 protease + lopinavir on ES2

両基底とも、HF と MP2 を 1C-CDAM で行った場合、これまでの MP2 単体の場合より高速化されており、1C 化のメリットが見える。とりわけ 6-31G*ではトータルで 4.5 時間が半分の 2.3 時間にまで低減されており、中でも 4 体フラグメント(テトラマー)でそれが顕著であるが、HF-SCF 部分の重みが大い問題は残ったままではある。いずれにせよ、1C 化は FMO2-MP2 でも有効であるため、これまではコスト高ゆえに使い難かった 6-31G*や cc-pVDZ での計算がこれからは増えていくことが期待される。

・2 次収束 HF-SCF と SCF 収束条件の緩和:

HF は SCF の繰り返し計算を通常は収束まで 10~30 回は行うために、その回数を減らすことが出来れば全体のコストを下げられる。アプローチの一つとしてニュートン・ラフソンの 2 次収束 SCF[4] を使うことが考えられ、MOO(Molecular Orbital Optimizer)として実装した。MOO では Fock 行列の占有軌道-仮想軌道の回転の要素 f_{ia} に対応する CPHF(Coupled Perturbed HF)を解くために微小反復を行うが、その際に通常 2 電子積分と CDAM の両方が使えるようになっている。実際のタンパク質でのテスト計算を十分に行うことまでは進められなかったが、PC クラスタ上では通常 SCF に比べて 1,2 割の加速が見られる場合もあった。

もう一つ別のアプローチとしては、FMO4 計算での 3 体(トリマー)と 4 体の SCF の収束閾値を緩めて、残りの緩和エネルギーの寄与を摂動論的に補正

$$E_{Relax} \approx \sum_{ia} (f_{ia})^2 / (\epsilon_i - \epsilon_a) \tag{6-2}$$

する機能も追加した。こちらでも系統的なテストまでは至らなかったが、「京」の 600 ノードを使った FMO4-HF/6-31G のテスト計算で通常 2 電子積分の場合には 4.4 時間が 2.6 時間となるなどの効果は見られたが、全エネルギーでは 10^{-4} au の桁に誤差が入ってくる。ただし、IFIE では影響はより少なくなる。ともあれ、HF-SCF の収束条件の使い分けは精度と時間のバランスの上ではこれから選択し得るオプションであろう。

・Schwarz 不等式の導入(微分計算も含む):

FMO 計算の対象となるようなタンパク質では、アミノ酸(の構成要素)からなるフラグメントのダイマー以上の場合、2 電子積分の値の多くは有効数値的にゼロになり、寄与を省略するスクリーニング方法が高速化にとって重要である。ABINIT-MP では、小原の式[5]に従って積分計算中に現れる重なり積分値のうち閾値 10^{-12} au 以下の値を省略している。しかしながら、この方法は必ずしも計算精度を保証するものではなく、過剰に省略してしまう可能性がある。これに対し、Schwarz 不等式に基づいたスクリーニング方法は数学的に精度が保証される方法である。そこで、ABINIT-MP にも Schwarz 不等式スクリーニングを導入する。2 電子積分の Schwarz 不等式は次式で表すことができる。

$$(\mu\nu, \lambda\sigma)^2 \leq |(\mu\nu, \mu\nu)| |(\lambda\sigma, \lambda\sigma)| < \varepsilon_{\text{swz}}^2 \quad (6-3)$$

つまり、コストが高い4中心の積分ではなく2中心の作業用積分のみを使って $\varepsilon_{\text{swz}}^2$ で閾値判断する。実装では、基底関数のタイプ、すなわち *spd* 関数のシェル毎に行うようになっており、2 電子積分生成の外側のループでの省略が可能になる。

後述する構造最適化や分子動力学(MD)の計算ではエネルギー微分による力を使うが、そこでは 2 電子積分の核座標による微分値を効率よく求める必要がある。今回、Schwarz 不等式のスクリーニングをこちらにも適用した。随伴する式のセットは次のようになる。

$$\begin{aligned} (\mu'\nu, \lambda\sigma)^2 &\leq |(\mu'\nu, \mu'\nu)| |(\lambda\sigma, \lambda\sigma)| < \varepsilon_{\text{swz}}^2 \\ (\mu\nu', \lambda\sigma)^2 &\leq |(\mu\nu', \mu\nu')| |(\lambda\sigma, \lambda\sigma)| < \varepsilon_{\text{swz}}^2 \\ (\mu\nu, \lambda'\sigma)^2 &\leq |(\mu\nu, \mu\nu)| |(\lambda'\sigma, \lambda'\sigma)| < \varepsilon_{\text{swz}}^2 \\ (\mu\nu, \lambda\sigma')^2 &\leq |(\mu\nu, \mu\nu)| |(\lambda\sigma', \lambda\sigma')| < \varepsilon_{\text{swz}}^2 \end{aligned} \quad (6-4)$$

ここで、微分計算の性質上2次の微分が現れており、実装では新規に積分ルーチンを作成して実装した。Schwarz 式の導入以外にも積分生成の最深部分のループ構造の変更やバッファ領域の扱いの巧妙化などの細かな改良も行った。下に、PC クラスタ(1B の 48 コア)で行ったアミノ酸 20 残基から成る TrpCage の FMO3-HF/6-31G*のエネルギー計算のタイミング例を示す。

Table 6-15 Breakdown timing data of FMO3-HF/6-31G* calculation for TrpCage on PC cluster

THSWZ	0	1. 0D-12	1. 0D-10	1. 0D-8
MonomerSCF	127. 9s	129. 8s	122. 4s	116. 1s
MonomerGrad	42. 4s	40. 7s	40. 6s	40. 2s
MonomerTotal	171. 3s	171. 5s	164. 1s	157. 3s
DimerES	7. 2s	7. 1s	7. 2s	7. 3s
DimerSCF	133. 5s	129. 5s	120. 7s	98. 2s
DimerGrad	213. 3s	207. 3s	200. 9s	186. 8s
DimerTotal	362. 4s	354. 0s	344. 8s	312. 2s
TrimerSCF	1318. 9s	1211. 1s	1091. 8s	773. 9s
TrimerGrad	1048. 4s	992. 3s	946. 4s	844. 8s
TrimerTotal	2370. 1s	2210. 3s	2043. 2s	1618. 8s
Total	2903. 8s	2735. 7s	2552. 1s	2088. 3s

閾値ゼロはスクリーニング無に対応するが、Schwarz 式判定によるコストの低減は閾値設定値の左から順に6%、12%、28%となっている。精度的にも、右端の場合で誤差は小数8桁で担保されている。より大型のタンパク質では、Schwarz の不等式によるスクリーニングのメリットがより出てくると期待される。

・Dimer-ES 基準範囲の再設定と多重極展開

FMO 法でタンパク質を高速に計算するための技法の一つがいわゆるダイマー静電近似(Dimer-ES)である。これは、距離の離れたフラグメント間では HF-SCF 計算をスキップして代わりに電子分布間の静電的な(クーロン)相互作用のみを考慮するものである。

$$\Delta E_{IJ}^{\text{elec}} = \sum_{\mu\nu \in I} \sum_{\lambda\sigma \in J} D_{\mu\nu}^I D_{\lambda\sigma}^J (\mu\nu, \lambda\sigma) \quad (6-5)$$

上式での IJ はフラグメントの添字で $D_{\mu\nu}^I$ は各フラグメントの密度行列である。これまで ABINIT-MP での FMO 計算では、静電近似の範囲は Ldimer 名のファンデルワールス半径でのコンタクトの判断値で 2.0 までを使ってきたが、この値は 3 体や 4 体のフラグメント計算の実行対象の数に大きな影響を与えるので、より近いところから適用することでジョブ時間の低減が期待される。本研究では、1.5 の値でも FMO4-HF 計算でのテストジョブでは精度劣化を避けつつも、対象系にも依るが従来の 2.0 の設定に比して 1/2~1/3 程度の時間で済むことを確認している。また、Dimer-ES に関する計算タスクのリストの生成法についてもループ構造の変更を行い、数千フラグメントの場合でも時間がかからなくなったことを付記する。

ABINIT-MP には Dimer-ES 計算そのものを加速する手段として、連続多重極モーメント(CMM)展開が既実装されている。CMM は、古典論に基づく重力多体系問題(銀河シミュレーションなど)向けに開発された技法を量子論にも拡張したもの[6]であり、2 電子積分の代わりに球面調和関数に関する数値計算で(2.2.1-40)式の静電相互作用を高速に近似計算することが可能である。本研究では、通常 Dimer-ES 計算と CMM 計算の切り替えについて再検討・評価を行い、Ldimer 値で 5.0 が精度(全エネルギーでは 10^{-5} 桁)と時間節約の両立点であることが確認された。この設定では、Dimer-ES ステップでの計算時間は PC クラスタでは 1/2 程度、「京」では特に有効で 1/8 程度にまで低減される(OpenMP/MPI 混成並列条件下で通常 2 電子積分利用での実行)。

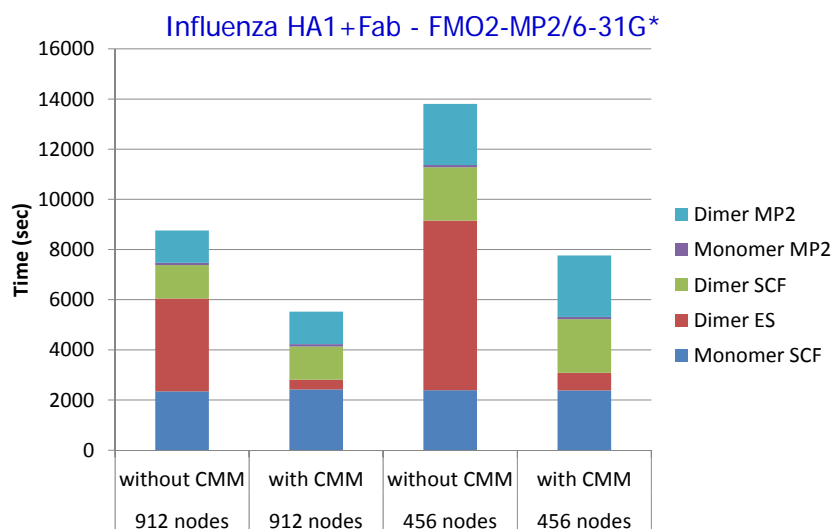


Fig. 6-99 Benchmark timing of FMO2-MP2/6-31G* calculation for influenza HA monomer - Fab antibody on K-computer)

Fig.6-104 は、インフルエンザウィルスのヘマグルチニンのモノマー(HA1)と Fab 抗体との複合体(921)残基の FMO2-MP2/6-31G*ジョブの「京」の 912 ノードと 456 ノードでの計算時間で、Dimer-ES の CMM による劇的な加速がよく分かる。

2) 部分構造最適化の改良

FMO 計算によるタンパク質の IFIE 解析は、通常はオンラインのデータベース(PDB 等)から骨格座標をダウンロードして、分子モデリングソフト(MOE 等)で水素付加をして水素の位置を古典力場(MM)で最適化したものをベースとすることがほとんどだが、X 線の解像度によって計算結果が左右され得るという難点があった。これを解消する一つの策は、ファーマコフォアなどの注目領域の構造を FMO 計算で部分的に最適化することで、分散力を考慮出来る FMO2-MP2 レベル(2 体フラグメント展開で十分)での扱いが本質的となる。文献[7]に報告しているように、2012 年度までに本機能は実装されてはいたが、効率や計算速度には十分とは言えなかった。そこで、本研究では下記のような四つの改善を行った。

・GDIIS の導入

HF-SCF 計算の一連の反復過程の加速では DIIS 法が有効であり、ABINIT-MP でも利用している。この基本技術を構造最適化にも適用したものが GDIIS[8]で、エネルギー最小化過程の初期段階で有効であるとされる。2013 年度の改良では、これまで[7]実装されている最適化法 BFGS と併置する形で GDIIS 機能を新規に導入した。水のクラスターでのテスト計算では、好ましい収束性を示すことが確認された。初期段階では GDIIS を使い、ある程度(エネルギーで 10^{-3})収束した段階で BFGS にスイッチすることが有効であろう。

・モノマー微分計算の省力化

FMO2 での部分構造最適化は、対象領域のフラグメントモノマーとそのモノマーを含むダイマーに関してのエネルギー微分の計算が必要になる。これまでの実装[7]では制御ループの入れ子構造に問題があり、モノマー部分の計算は実質的に全て行わざるを得なかったため、大きなタンパク質ではコスト的に不利になっていた。今回の改造では、ループ構造を刷新してこの無駄を省いた。当該部分の時間はこれにより、女性ホルモン受容体のリガンド複合体の 87 残基モデルでは HF レベルで 1/4 程度、MP2 で 1/2 程度の時間で済むようになった。

・MP2 微分の CD 化

既に述べているように、FMO2-MP2 エネルギー計算ではフラグメントダイマーの MP2 計算は CD によって 10 倍ほどの加速が得られる[2]。本研究では MP2 エネルギー微分計算にも CD を導入した。微分計算でコストのかかるところは幾つかあり、通常 2 電子積分の場合には MP2 エネルギー計算に比して、6-31G*基底を使うと 10 倍以上のコスト増となってしまう(6-31G だと数倍程度)。特に、MP2 電子相関による HF からの電荷分布の変化を記述する応答密度 P_{ai} を決める

$$\sum_{jb} [\delta_{ij} \delta_{ab} (\varepsilon_a - \varepsilon_i) + 4(ia, jb) - (ij, ab) - (ib, ja)] P_{bj} = L_{ai} \quad (6-6)$$

の CPHF 方程式の右辺のラグランジアン L_{ai} の構築(占有軌道に関する P_{ij} や仮想軌道に関する P_{ab} の寄与も含まれる)には時間がかかる[9,10]。CD 化は主に密度行列関係に施したが、ラグランジアンが一旦出来れば上式を基底関数の積分から直接解く反復解法は CD ではなく通常 2 電子積分を使う方が実効的に速くなる。この条件で TrpCage の FMO2-MP2/6-31G*での中心 6 フラグメントを微分計算の対象としたテストを行ったところ(Table 2.2.1-17 と同じマシンで 64 コア)、ダイマーのステップが通常 2 電子積分で 3.5 時間から 1.7 時間へと半減出来た。しかし、これでもなお微分計算に関するコストの低減は十分ではないことは明らかで、今後さらに抜本的な改善を行うためには CD よりも分解の展開長が少なくすむ RI 法[1]を採用することも視野に入れざるを得ない。

・SCZV(HF)の追加

2 体の FMO 法では ESP はフラグメントのモノマーの HF-SCF が全体で電荷整合する SCC 条件において決められてダイマーの計算に使われる。FMO2-HF でエネルギー微分を行うと、ダイマーに関しては ESP の SCC 未成立に由来する応答項の寄与が実は残存しているが、ダイマー集合(すなわち全系)を扱うことはコスト的に困難であるため無視されてきた[11]。しかしこの近似が分子動力学シミュレーションのように動的変形を追跡する際の保存量の劣化、あるいは平衡配置から離れた箇所からの分子構造最適化の収束性の悪化を招くことが知られてもいた。永田らが開発した SCZV 法[12]は、ダイマーの応答寄与をモノマー的なコストの範囲内で解析的に計算する優れた方法である。SCZV でも CPHF が現れ、あるモノマー I について

$$\begin{aligned} & - \sum_k^{\text{occ}} \sum_b^{\text{virt}} [(\varepsilon_a - \varepsilon_i) \delta_{ik} \delta_{ab} + 4(ai, kb) - (ak, ib) - (ab, ik)] U_{kb}^{x,I} - 4 \sum_{K \neq I}^{\text{occ}} \sum_k^{\text{occ}} \sum_b^{\text{virt}} U_{kb}^{x,K} (ai, bk) \\ & = F_{ai}^{x,I} - \varepsilon_i S_{ai}^{x,I} - \sum_{kl}^{\text{occ}} S_{kl}^{x,I} [2(ai, kl) - (ak, il)] - 2 \sum_{K \neq I}^{\text{occ}} \sum_{kl}^{\text{occ}} S_{kl}^{x,K} (ai, kl) \end{aligned} \quad (6-7)$$

のように、右辺側のラグランジアン部分も極めて複雑な構造をしており、他のモノマーからの寄与も含まれている。また、実際には ESP 近似に応じた内訳が変化する(詳細は文献[12]を参照)。実装のための工数も大きかったが 2013 年度に FMO2-HF に関する作業を一通り終えた。SCZV のステップとしては、モノマー、ダイマーの後で行うことになる。後出の FMO-MD 計算[13,14]で小型の水クラスターでテストしたところ、SCZV 無の場合に比べて保存量が 1 桁程度改善され、ほぼ通常 MO 計算に匹敵する精度となった。なお、MP2 に対しても SCZV は導出されている[15]が、こちらはさらに複雑で膨大な工数を要するため、今後機会があれば実装したい。

3) 解析機能の追加と改良

本研究では、産業技術総合研究所の古明地氏オリジナルの MD プログラム PEACH[16]の ABINIT-MP への移植、あるいは溶媒和効果のポアソン・ボルツマン(PB)型連続誘電体モデルの改良、あるいは MP2 電子密度生成の高精度化と on-the-fly 化などの機能面での強化も行った。以下にポイントをまとめる。

・FMO-MD の導入

古明地によって FMO-MD の試みが最初に報告されたのは 2003 年[17]に遡るが、性能的には実験レベルに留まっていた。実用性を確保したのは 2006 年の再実装[13]の以後で、文献[14]に網羅されているように種々の応用計算が行われた。この再実装では、ABINIT-MP と PEACH をスクリプトで連動させ、ステップ毎の動的なフラグメントの定義情報など必要なデータのやり取りはファイル経由で行っていた。しかし、この仕組みでは共同利用センターでの実行に運用上の問題があることや、動作の機種依存性がある難点があった。そこで 2012 年度から PEACH を ABINIT-MP 側に「内包」させる作業が古明地によって進められ、2013 年度にシステムとしての完成に至った。下図は、「内包」状態での MD で必要な力(エネルギー微分の反符号値)などのデータと FMO 計算で必要となる原子の座標データのやり取りを模式的に示したものである。

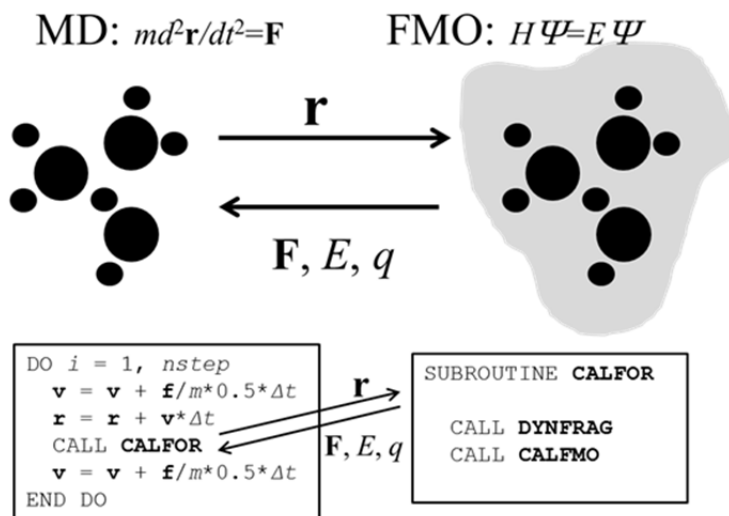


Fig. 6-100 Schematic data exchange during FMO-MD simulation with ABINIT-MP

MD シミュレーションは専用のネームリスト群によって制御され、定エネルギーMD、定温 MD が FMO4-MP2 レベルまでで可能となっている。本研究の各種の高速化改良を施す前でのテストタイミングではあるが、64 コアの PC クラスタで TrpCage と塩化物イオン 1 個を 608 個の水分子で囲んだ液滴モデルの FMO2-HF/6-31G* 計算による MD1 ステップの計算は約 1 時間である。さらなる高速化が課題ではあるが、今後は「京」などの超並列計算機の上で FMO-MD の実応用が広がっていくと期待される。

・FMO-PB の拡張

水和に代表される溶媒和の扱いは、リガンドとアミノ酸残基との相互作用エネルギーや結合エネルギーでの評価に影響を与える可能性がある。露わに水和水を置くことも考えられるが、計算コストが増すこと、また水和層の厚さの任意性や統計性の加味などに恣意性が残ることもあるため適用には限りがあり、連続誘電体モデルの記述性を向上させる方が望ましい。さて、文献[18]では外部プログラムとして DELPHI を使って PB 式

$$\nabla \cdot [\epsilon(\mathbf{r}) \nabla \phi(\mathbf{r})] = -4\pi[\rho(\mathbf{r}) + \rho_{\text{ion}}(\mathbf{r})] \quad (6-8)$$

を解き、誘電体場側の電荷データを ABINIT-MP とやり取りしていたが、2012 年度の研究で PB 解を求めるモジュールを内製してワンストップでの計算が可能となった。本研究では、新たに分子表面積 (SA) に関連する脱溶媒和エネルギーの寄与も考慮するように拡張し、FMO-PB/SA モデルとした。併せて、溶媒側の遮蔽効果[17]も取り込めるような修正も行い、IFIE を後処理的に統計補正する SCIFIE[19]よりも精緻な計算を可能とした。これにより、荷電残基間の相互作用エネルギーの過大評価の問題が是正される。43 残基の Crambin に対する FMO2-PB-HF/6-31G* 計算での IFIE と SCIFIE の可視化を下に示す。

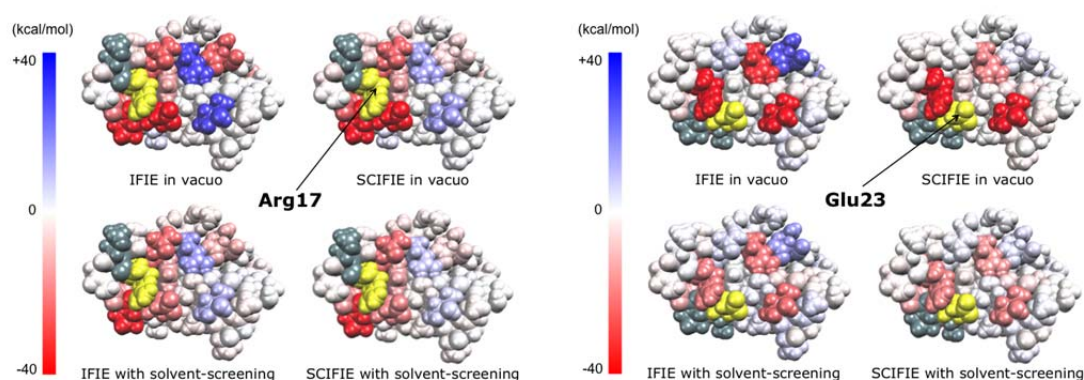


Fig. 6-101 Visualized IFIE and SCIFIE results of FMO-PB-HF calculation for Crambin

SCIFIE でも遮蔽効果はある程度上手く記述出来ているが、外側の残基では溶媒和による遮蔽効果を入れる方が好ましい様子が見られる(Arg は正荷電、Glu は負荷電)。

・MP2 電子密度の高精度化

MP2 電子密度の単体での計算は、2013 年 3 月末までの実装では実は密度式も摂動の 2 次としていた。すなわち、占有軌道と仮想軌道の混合を記述する応答要素を摂動の ∞ 次まで反復計算によって求める式(2.2.1-41)の CPHF を正確に解く代わりに、2 次の近似によって反復無で評価していた[20]。この理由は主に計算コストの問題からであったが、計算対象とするタンパク質によっては平衡構造からのずれが大きい場合に誤差が乗ってくる懸念があった。そこで本研究の改良では、エネルギー微分計算の中の処理をバイパス的に利用して CPHF を解いた MP2 密度をオプションで計算可能とした(コストは増加)。テスト計算では、ヘテロな多重結合を含む箇所では 2 次近似の場合と若干の差が見られた。MP2 レベルで構造を最適化した上で密度を評価する場合には、もちろんこちらのオプションを使うべきである。

・電子密度計算の多体化と on-the-fly 化

本研究の結果、全系の MP2 電子密度生成の多体化として、これまでの FMO2 から FMO4 まで[3] 対応出来るようになった(CPHF にも対応)。使い勝手も、従来は FMO 計算を一度行ってファイルを保存して別ジョブで密度を生成するという二度手間であったが、on-the-fly すなわちファイルレスで直接密度を求めるようになり、大きく向上した。これは、「京」などの共同利用センターの超並列システムが CPU 演算パワーに比してファイル IO 的に極めてプアな状況に対する対策でもある。

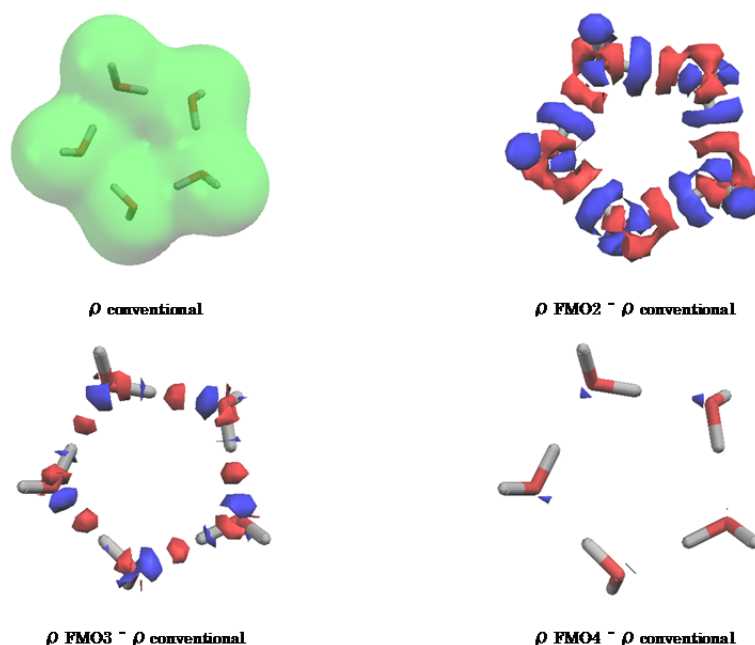


Fig. 6-102 Visualized differential electron density of water pentamer ($0.001e/\text{au}^3$)

上図は、環状の水分子の 5 量体での MO 電子密度からの差分を示すが、FMO4 ではほぼ誤差が無く精確に再現されていることが分かる(この可視化の基準はテストとして厳しくしており、実用上は FMO2 でも大きな問題はない)。

・電子密度の可視化と実験データとの比較

FMO 電子密度と X 線結晶構造解析による電子密度とを直接比較して構造決定の精度向上に役立つ目的で、FMO 計算結果の可視化および実験値のハンドリング、さらにはそれらと比較する機能を BioStation Viewer に実装した。これまでの BioStation では立方グリッド形式の電子密度のみを扱っていたが、斜方晶にも対応可能な CNS 形式を導入し、分子構造に応じた電子密度の切り出しを含むグリッドデータの編集機能や、実験値との比較のためのグリッド生成インターフェース、複数の密度データを数値比較する機能を開発した。これにより、実験値と計算値の比較、あるいは複数の配座候補があるアミノ酸残基の占有率の計算等が可能となった。

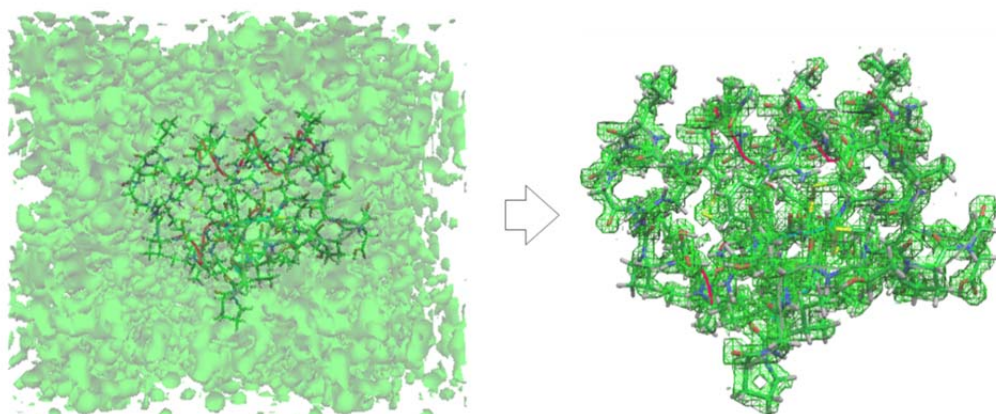


Fig. 6-103 Cutout view of X-ray-based electron density of Crmbin(1.0 e/bohr³)

b) 実証計算

1) タンパク質-リガンド系の構造最適化

FMO 計算による部分構造最適化の主要なターゲットは、リガンド結合サイトや酵素反応中心であり、これらの構造を精密に決定することで、創薬分子設計への応用や生体分子のメカニズム解明へ繋がると期待できる。ここでは、本研究において改良した部分構造最適化機能を用いて、リガンド結合系の精密構造を決定した例を紹介する。

・事例 1: エストロゲン受容体

MP2 構造最適化の実証計算として、エストロゲン受容体(ER)とリガンド(17 β -エストラジオール)の複合体の部分構造最適化計算を行った。この際、リガンド周辺の 87 残基(Fig.6-109(a) の赤色部分)からなるモデル構造を用い、最適化領域はリガンド結合に重要と考えられる 4 つのアミノ酸残基(Glu353, Arg394, Phe404, His524)および水1分子、リガンドとした。計算レベルには HF/6-31G*および MP2/6-31G*を用いた。

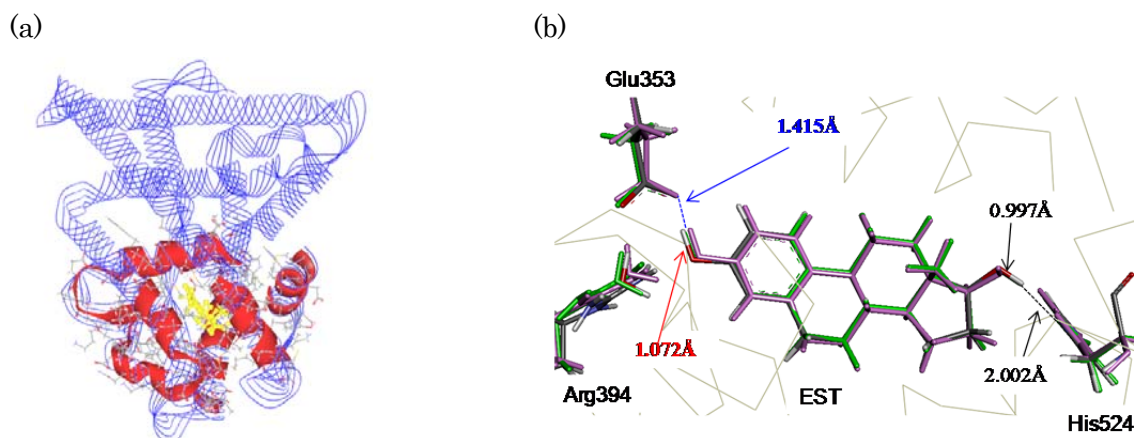


Fig. 6-104 (a) Molecular structure of estrogen receptor - ligand complex (b) optimized structure of corresponding pharmacophore (pink: crystal structure, green: HF level, atomic colors; MP2 level)

リガンド周辺の MP2 最適化構造 (Fig.6-104(b)) では、リガンドー残基間の水素結合距離が、Glu353ーリガンド間で 1.42 Å、His524ーリガンド間で 2.00 Å であった。前者はかなり短い値であり、対応する水酸基の OH 結合長が 1.07 Å に伸びていることから、弱いプロトン共有が起きていると言える。一方で、HF レベルではこのようなプロトン共有は観測されなかった。MP2 による電子相関の効果がよく表れている。

Table 6-17 に示すように、X 線結晶構造、HF/6-31G* および MP2/6-31G* での最適化構造における MP2/6-31G* レベルのリガンド結合エネルギー (IFIE_sum) を求めると、結晶構造と比較して、HF 構造で -20 kcal/mol, MP2 構造で -39 kcal/mol の安定化が見られた。ここでも MP2 レベルで適切に構造最適化されていることがわかる。

Table 6-17 IFIE results depending on optimized structure (estrogen receptor complex) (kcal/mol)

Energy	MP2/6-31G*	MP2/6-31G*	MP2/6-31G*
Geometry	Crystal	HF/6-31G*	MP2/6-31G*
GLU353	-33.15	-36.56	-46.46
ARG394	-9.02	-4.51	-10.72
Phe404	-5.08	-5.40	-5.63
His524	3.31	-15.29	-16.68
water	-2.42	-1.48	-1.30
IFIE_sum	-86.48	-107.74	-125.87

・事例 2: インフルエンザ NA

2つ目の例として、インフルエンザウイルスのノイラミニダーゼ (NA) とオセルタミビル (商品名: タミフル) との複合体構造を用いた構造最適化の収束判定条件の評価を行った。構造最適化計算に於いては、収束判定条件が計算精度および速度に係る重要な指標になる。ここでは、原子にかかる力と座標の変異幅に対し、3段階の基準 (tight, loose, very loose) を設定して構造最適化に要するステップ数と NAーリガンド間の IFIE を比較した。計算モデルにはリガンドと周辺の 89 残基の構造を用いて最適化の領域はリガンド結合に重要な 7 残基とリガンド、計算の方法は HF/6-31G* とした。

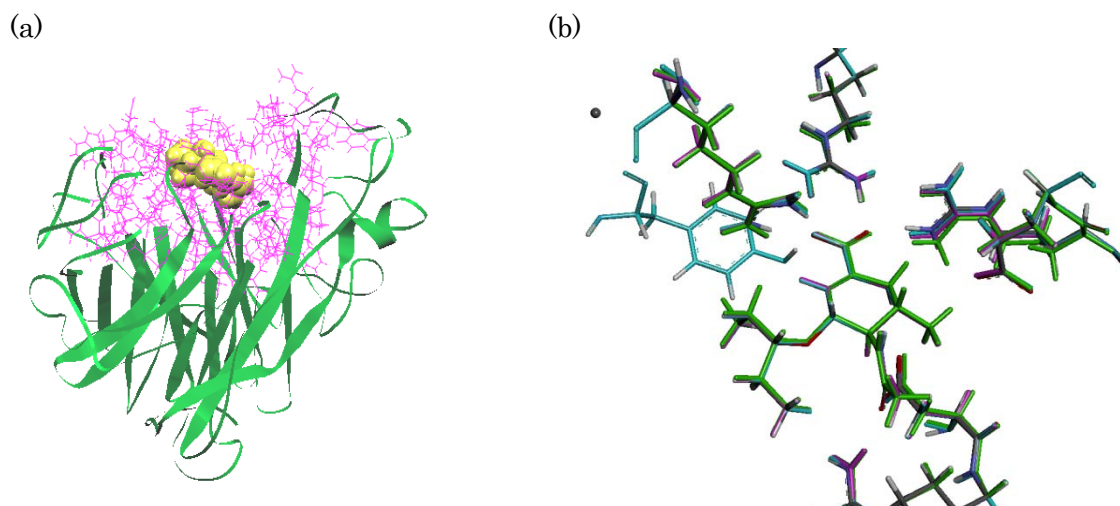


Fig. 6-105 (a) Molecular structure of influenza NA - ligand complex (optimized region is given with pink) (b) Structure depending on optimization criteria (atomic colors: crystal structure, green; tight convergence, pink; loose convergence, blue; very loose convergence, light blue)

最適化の収束判定オプションtight, loose, very looseでは、それぞれ113, 29, 7ステップで収束した。リガンド結合において主要なアミノ酸残基との IFIE (Fig.6-106)を見ると、very loose 構造の相互作用はほぼ結晶構造から変化していないが、loose 構造ではtightと同等の相互作用になっていることがわかった。計算コストとの兼ね合いで、判定基準としては loose 程度(maximum force = 1.0×10^2 , RMS force = 7.0×10^3 , maximum displacement = 2.0×10^2 , RMS displacement = 1.4×10^2)が良いと言える。他の実証系でも同様の検討を行ったところ、やはり loose が適当であった。

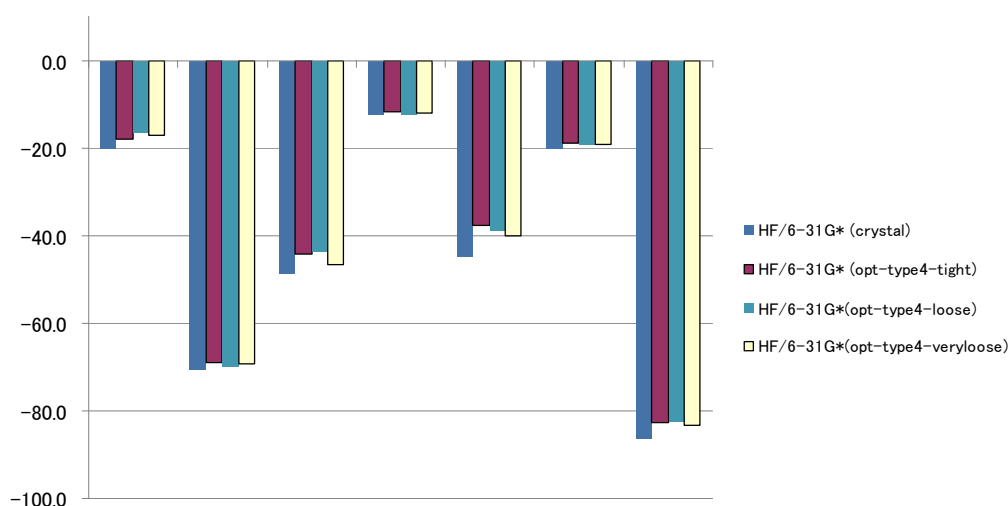


Fig. 6-106 IFIE results depending on convergence criteria of geometry optimization (kcal/mol)

2) 電子密度の評価

現在の生体高分子の構造決定法として最もよく用いられているのは X 線結晶構造解析であるが、その精度は結晶の解像度に依存してしまい、水素原子の位置やコンフォマーの同定、またリガンド周辺の精密構造の決定は依然として困難である。そこで本グループでは、FMO 計算によって得ら

れる電子密度情報を用いて X 線結晶解析からの情報を補完し、生体高分子の精密構造決定を行うことを目的としている。本研究では、電子密度計算に関する上述の機能改良を加え、予備検討および実験値と計算値の数値比較を行った。

・事例 1: Crambin

48 残基からなるミニタンパク質である Crambin は、超高解像度の X 線結晶構造解析データが公開されており(PDB ID=3NIR, 0.48 Å)、実証系に適している。本研究では、まず Crambin の X 線電子密度と FMO 電子密度との比較可能性を検討した。Fig.6-107 に示すように、分子全体の電子密度分布は類似しており、また個々のアミノ酸残基においても、Phe13 のように FMO 密度にスケールリングを施すことで X 線密度との数値比較が可能になることを示唆する結果となった。

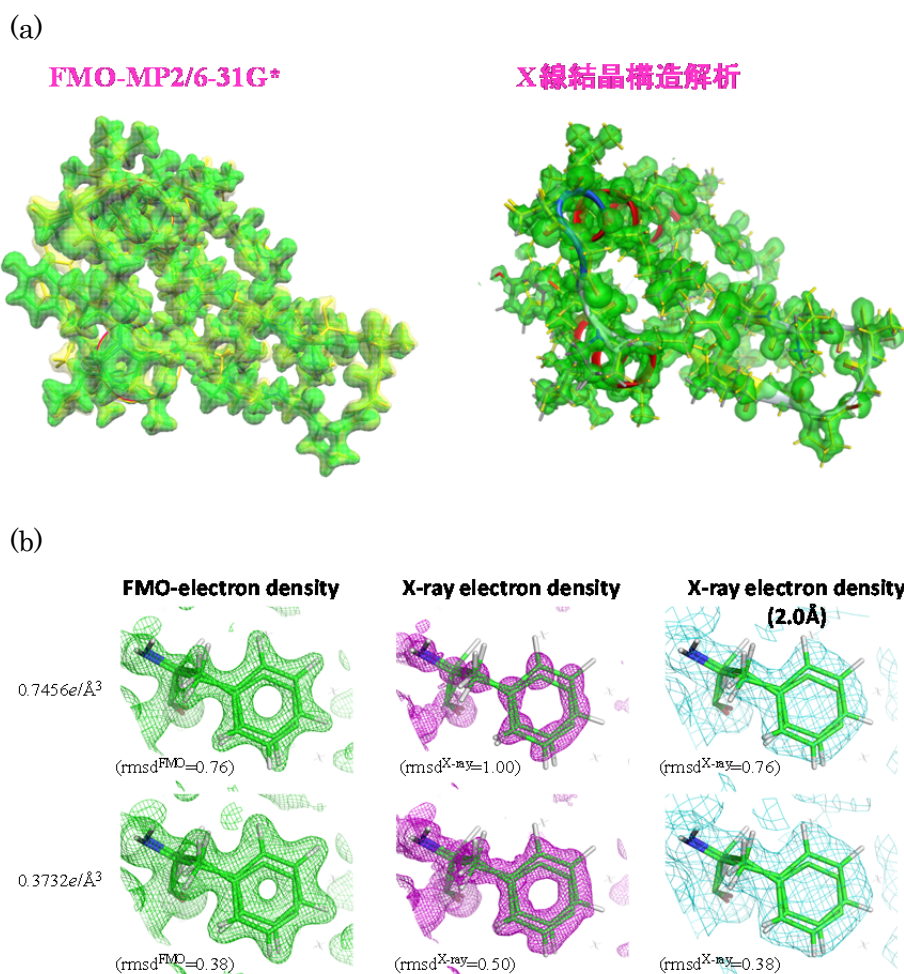


Fig. 6-107 (a) Visualized electron density of Crambin (left: FMO-MP2/6-31G* , right: X-ray)
(b) Close view around Phe13

・事例 2 真菌ガレクチンの糖鎖認識構造

これらの精密構造決定を大規模化するためには、放射光施設 SPring-8 や京コンピュータのような大型設備との連携も意識する必要がある。本研究では、SPring-8 で決定されたヤナギマツタケの真菌ガレクチンと糖鎖との複合体構造(PDB ID: 1WW4 [22])を用いて京コンピュータ上で FMO 計算を行い、糖鎖認

識の特異性を解析するとともに、電子密度の比較を行った。まず、糖鎖(GAL-SIA-BCG)とガレクチンとの IFIE 相互作用解析結果から、これらの相互作用は、末端の SIA よりもむしろ、GAL や BGG が強く結合していることが分かった (Fig.6-108)。これらの電子密度を可視化すると FMO 計算結果と X 線電子密度が良く一致し、さらに FMO 計算では、X 線で見えていない電子密度が補完されている様子がわかる (Fig.6-109)。

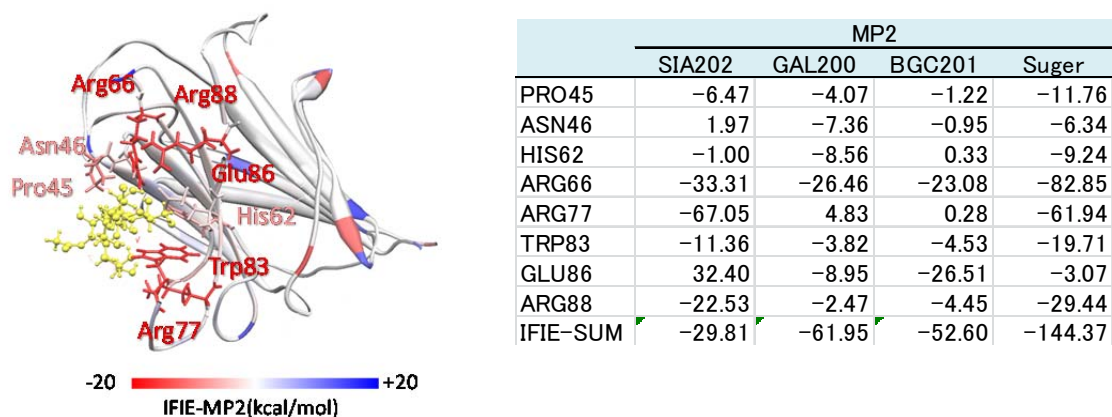


Fig. 6-108 IFIE results of galectin and sugar chain (kcal/mol)

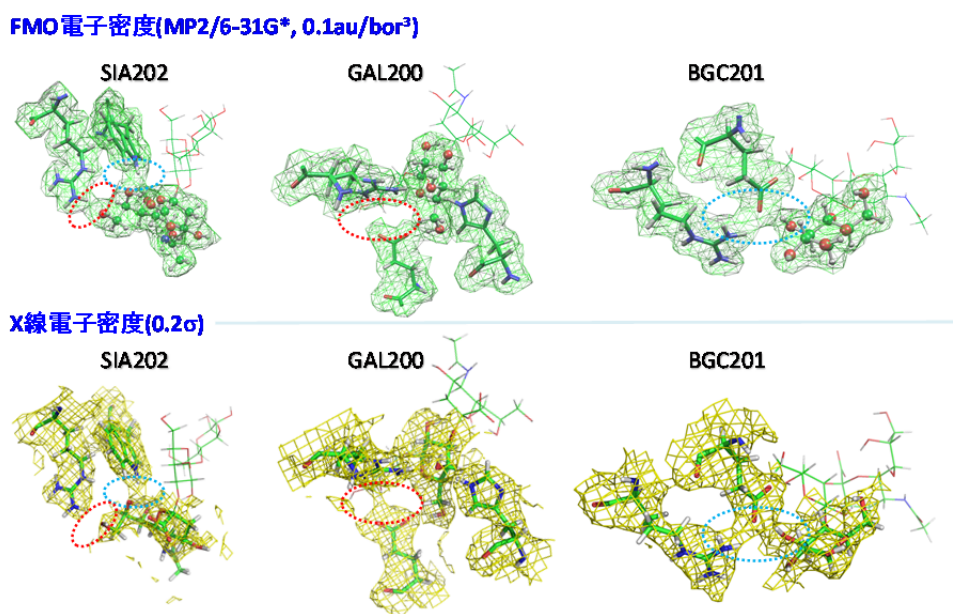


Fig.6-109 Visualized electron density of sugar-binding region [22]
(hydrogen-bonding region is shown with broken line)

・事例 3 EGFR チロシンキナーゼ

最後に、FMO 計算と X 線の電子密度を数値比較した例を示す。EGFR チロシンキナーゼと分子標的薬のエルロチニブ(商品名:タルセバ)との複合体について、係数を考慮した、 $2m\text{Fo}-\text{Fc}^{\text{FMO}}$ マップを作製した (Fig.6-110)。リガンドの骨格部分は正值となり構造が良く決定されているといえるが、官能

基の先端部分は負値になっており、実験的には不確定であることが示唆される。これらの不確定部分については、上述の FMO 部分構造最適化を用いて構造精密化を行うことができる。

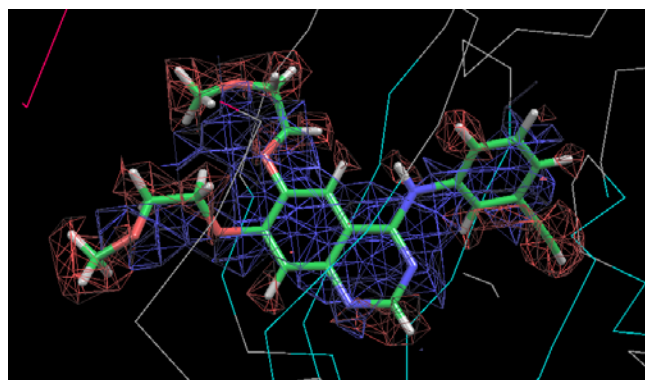


Fig. 6-110 $2mF_o-Fc^{FMO}$ map of ligand part ($m=3$, $\rho=0.1/\text{\AA}^3$)
(Blue and red colors present positive and negative values, respectively)

以上のように、X線電子密度の結果に電子密度解析や構造最適化計算を適切に組み合わせることによって、構造精密化に繋がるのが期待できる。

参考文献

- [1] T. B. Pedersen, F. Aquilante, R. Lindh, *Theor. Chem. Acc.*, 124 (2009) 1.
- [2] Y. Okiyama, T. Nakano, K. Yamashita, Y. Mochizuki, N. Taguchi, and S. Tanaka, *Chem. Phys. Lett.*, 490 (2010) 84.
- [3] T. Nakano, Y. Mochizuki, K. Yamashita, C. Watanabe, K. Fukuzawa, K. Segawa, Y. Okiyama, T. Tsukamoto, and S. Tanaka, *Chem. Phys. Lett.*, 523 (2012) 128.
- [4] G. B. Bacskay, *Chem. Phys.*, 61 (1981) 385.
- [5] S. Obara, A. Saika, *J. Chem. Phys.*, 84 (1986) 3963.
- [6] C. A. White, B. G. Johnson, P. M. W. Gill, M. Head-Gordon, *Chem. Phys. Lett.*, 230 (1994) 8.
- [7] T. Tsukamoto, Y. Mochizuki, N. Watanabe, K. Fukuzawa, and T. Nakano, *Chem. Phys. Lett.*, 535 (2012) 157.
- [8] P. Csaszar, P. Pulay, *J. Mol. Struct.*, 114 (1984) 31.
- [9] C. M. Aikens, S. P. Webb, R. L. Bell, G. D. Fletcher, M. W. Schmidt, M. S. Gordon, *Theor. Chem. Acc.*, 110 (2003) 233.
- [10] Y. Mochizuki, T. Nakano, Y. Komeiji, K. Yamashita, Y. Okiyama, H. Yoshikawa, H. Yamataka, *Chem. Phys. Lett.*, 504 (2011) 95.
- [11] K. Kitaura, S. Sugiki, T. Nakano, Y. Komeiji, M. Uebayasi, *Chem. Phys. Lett.*, 336 (2001) 163.
- [12] T. Nagata, K. Brorsen, D. G. Fedorov, K. Kitaura, M. S. Gordon, *J. Chem. Phys.*, 134 (2011) 124115.

- [13] Y. Komeiji, T. Ishikawa, Y. Mochizuki, H. Yamataka, T. Nakano, *J. Comp. Chem.*, 30 (2009) 40.
- [14] Y. Komeiji, Y. Mochizuki, T. Nakano, and H. Mori, “Recent Advances in Fragment Molecular Orbital-Based Molecular Dynamics (FMO-MD) Simulations”, Intech - Open Access Publisher, (2012) <<http://bit.ly/PUoo4I>>.
- [15] T. Nagata, D. G. Fedorov, K. Ishimura, K. Kitaura, *J. Chem. Phys.* 135 (2011) 044110.
- [16] Y. Komeiji, M. Uebayasi, R. Takata, A. Shimizu, K. Itsukashi, M. Taiji, *J. Comput. Chem.*, 18 (1997) 1546.
- [17] Y. Komeiji, T. Nakano, K. Fukuzawa, Y. Ueno, Y. Inadomi, T. Nemoto, M. Uebayasi, D. G. Fedorov, K. Kitaura, *Chem. Phys. Lett.*, 372 (2003) 342.
- [18] H. Watanabe, Y. Okiyama, T. Nakano, S. Tanaka, *Chem. Phys. Lett.*, 500 (2010) 116.
- [19] S. Tanaka, Y. Okiyama, C. Watanabe, *Chem. Phys. Lett.*, 556 (2013) 272.
- [20] Y. Mochizuki, T. Nakano, S. Koikegami, S. Tanimori, Y. Abe, U. Nagashima, K. Kitaura, *Theor. Chem. Acc.*, 112 (2004) 442.
- [21] C. Watanabe, K. Fukuzawa, Y. Okiyama, T. Tsukamoto, A. Kato, S. Tanaka, Y. Mochizuki, T. Nakano, *J. Mol. Gr. Mod.*, 41 (2013) 31.
- [22] M. Ban, H. J. Yoon, E. Demirkan, S. Utsumi, B. Mikami, F. Yagi, *J. Mol. Biol.*, 351 (2005) 695.

⑥独創性・優位性について

(1) 輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率化・低騒音化に関する研究開発

本研究の中心となるマイクロデバイスによる剥離制御機構をシミュレーションによって再現するには、(1) ラージエディシミュレーション(LES)等の詳細モデル化と(2) 実形状を対象としたスペクトル的な高い空間解像度を有する手法の組み合わせが不可欠である。課題3内の主な研究課題も同じであるが、本研究で利用するLESの産業実利用は世界的な傾向で、欧州では大きな予算がついて2016年秋にプロジェクト発足にともなうシンポジウムが開催される。(2)の手法の工夫は、本研究課題のグループが、利用経験も含めて世界でも先端に位置しているところで、空間解像度を50倍から100倍に向上、従って、利用する計算格子点数や計算負荷を1/50から1/100に減ずることを可能とする。本研究におけるシミュレーションでは最大で10億点程度の格子点を利用したが、通常的手法であれば500億から1兆点という格子点数とそれに対応する計算時間を要求する。この両者の技術と経験を有するグループは世界中でも大変限られている。課題代表者が上記の欧州シンポジウムにおける基調講演を本依頼されていることがそのことを端的に示している。

また、実問題への適用を意識して当該テーマのプラズマアクチュエータ等マイクロデバイスによる局時流動流れを議論し、それを効果的な設定パラメータの設定に活かしている研究グループは国内外を通じても数カ所しかない。さらに、いずれもが計算機資源の限界から特定の条件下での現象議論に留まっており、結果の汎用性を示していない。本グループは、京をはじめとするHPCI資源を有効利用することで、これまでなしえなかった小・中スケールでの多数ケースの解析、大スケールを対象とした解析を世界で初めて実現し、剥離制御機構の詳細な現象を解析し、その結果を汎用的な観点でプラズマアクチュエータなどマイクロデバイスの有効利用につなげる知見を得ている。エディターからの依頼で、世界最初の科学技術論文と言われるRoyal SocietyのTransaction Aに一連の成果を発表していること、理論応用力学分野で長い歴史と高い権威を誇るIUTAM(International Union of Theoretical and Applied Mathematics)のHPCシンポジウム(Dec. 2014, 招待者のみ講演)に呼ばれたことなどがそれを証明している。

ここで必要となる詳細な現象解析には、これまで課題代表者のグループが培ってきた高度なデータ探査・設計探査手法を適用しており、それによって効率的に優れたパラメータを見いだしている。これまで実現できなかった多数ケースの剥離制御現象解析自体、さらにそれをデータ探査手法に結びつけることで効率的に知見を得ている点はともに本研究の独創的なところでもある。

また、別途科学研究費補助金などによる実験を進めており、これにより検証等を自ら行うことができる環境を有している。この点もシミュレーションのみを実施している研究グループに比して優位な点である。さらに、実験、シミュレーションの両面で本グループと違った知見を有しているオハイオ州立大学のグループ、実際にフィールドテストまで踏み込んでいる企業との定期的な意見交換により、現象論と実利用の橋渡しを行うことにつなげてきた。レイノルズ数領域ごとに最適な機器配置や作動条件を示す無次元パラメータへの提案につなげ、プラズマアクチュエータの産業実利用への道を示すことを目指している研究グループは世界にない。上述の会議を含め、代表者がいくつもの国際会議で基調講演を依頼されていること(成果リスト参照)、複数のジャーナル編集者から本技術に関する解説記事を依頼されていること(成果論文1-2は執筆中)も当該研究グループの優位性の一端を示している。

なお、産業界における数値シミュレーションの利用のほとんどは、製品開発プロセスでの利用や開発後の比較検討の道具としての利用である。シミュレーションが本来有している「新しい概念を試

行しやすい」という利点を活かした創造型の概念設計レベルでの利用は残念ながらほとんど見られない(この点は、本課題代表者が国際会議における基調講演などで強調してきた)。本研究は剥離制御デバイスの性能向上という側面だけでなく、新しい考え方や利用を創造するシミュレーションの利用方法を提案した点で既存の研究と一線を画すものである。なお、通常、概念設計は簡単なモデルを利用して行われるが、本テーマのように流体の持つ非線形性を活かしたデバイスによるバーチャルな空力設計では、概念設計レベルにおいても HPC の利用が不可欠な高度シミュレーションが要求される事実を併せて示している点にも独創性がある。

上記を物語る国際誌解説記事

1. Special Edition, Philosophical Transactions of the Royal Society, U. K., 2014 (成果論文 1-30)
(主に流体科学の観点から)
2. Computers & Fluids, Elsevier (requested to prepare the review article) under preparation
(主に計算科学の観点から)

(2) 次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発

次世代ナノデバイス分野において、非シリコン系新規材料(炭素系材料、SiC 等)の研究開発が国内外で精力的に実施されている。特に注目されるグラフェン・デバイス、SiC パワーデバイスの研究開発では、グラフェン膜の高品質・大面積化、SiC 酸化膜の高移動度化等が重要な課題であり、実験・計算両面から研究が行われている。しかし、これら新規材料に対するプロセス・デバイス構造の最適化技術を得るに至っていない。計算科学としては、ナノ構造の表面・界面プロセスに関して実成長温度でのシミュレーションや広範な構造探索が困難であり、現状では、絶対零度での解析や想定した狭い範囲での構造探索等に限られており、現象を解明し課題解決への指針を提供できないのが問題である。本研究課題では、京計算機を活用した、実成長温度での解析、従来にない幅広い構造探索等の大規模解析が可能であり、これにより現象を解明し、課題解決への指針を構築することを目指すものである。

我々が開発している第一原理分子動力学プログラム PHASE は、上記の非シリコン系新規材料に関する大規模解析を可能にし、この点が本研究課題の大きな優位性である。PHASE は、数万原子系に対して 60 数万コア並列で高い実行効率を示すとともに、数千原子系に対して約 10 万コア並列まで強スケーリング性を示す。これは実計算規模の系(数千原子系)に対して高精度な計算を効率的に実行できることを意味しており、新規ナノ材料の探索に大きな強みを持つ。

(3) 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発

- ・実車車体形状を対象として、百億セル規模まで対応な超大規模非定常乱流を実現し、対風洞実験値誤差を2%程度の誤差で予測が可能であることを実証したのは世界初。
実車車体形状に対して、車両運動との連成解析システムを構築し、ドライバー反応を含んだ突風時の自動車運動挙動を予測するシステムは世界初。
- ・実設計レベルで大規模計算を実現する手段をシミュレータのみならず、プリポストを含めたシステムとしてその方法を確立した点は他に例がない。この提案システムにより、短時間での大規模並列解析(300 億要素)を 24 時間以内で解析することを実現した。
- ・現状、ターボ機械の性能評価に適用されている流体解析手法は、通常、時間平均ベースの RANS 解析である。本研究では、ターボ機械の性能評価に対し、乱流の準直計算技術の有用性を実証するため、最大数十億グリッド規模の LES 解析をターボ機械内部流れに適用し、製品の一般性能、非

定常特性の評価を実施した。これにより、圧縮機のサージ点近傍の不安定現象、送風機から発生する空力騒音、ドラフトチューブ内部のふれまわり渦、ポンプ吸込み水槽の吸込み渦等を精度よく予測できることが実証された。ターボ機械内部流れに対し、数十億グリッド規模の流れ計算を実施する研究事例はほとんどなく、本研究課題により、はじめて準直接計算の有用性が示されつつある。一方で、レイノルズ数の大きな流れ（例えば、ポンプ等の水力機械）では、数百億グリッドの計算格子を用いても、内部の乱流を解像できない場合もあるため、これらの高レイノルズ数流れに関しては、部分的に RANS ベースの手法を併用する等の対策が必要となる。

- ・従来の船体推進抵抗技術では、船体タイプごとにチューニングされた時間平均ベースの乱流モデルが適用されてきたが、本研究では、世界ではじめて 300 億グリッドを用いた準直接計算を実施し、乱流モデルを用いずに、推進抵抗の定量予測（予測誤差 0.9%）が可能であることを実証した。上記の計算は造波抵抗の影響が無視できる小さなフルード数の抵抗試験（プロペラをつけない船体を用いた試験）であるが、上記の抵抗試験に対応した計算に加え、船およびプロペラまわり流れを同時に計算する計算（自航試験に対応）や造波抵抗を計算するための自由表面計算を、上記の大規模計算と組み合わせる技術を確立した。
- ・ガス燃焼場、噴霧燃焼場および石炭燃焼場内の温度、NO_x濃度およびすす濃度を大規模計算により評価可能な統合ソフトウェアは他に存在しない。本提案システムにより、実圧条件下（～25 気圧）における温度、NO_x 濃度、およびすす濃度の高精度予測を実現した（温度および NO_x 濃度のそれぞれの予測精度 10%、30% 程度を達成）。

(4) 多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究

- ・ここで開発した多目的設計最適化手法 Cheetah について、現在世界でもっとも性能がよいと言われるアルゴリズムである MOEA/D との性能比較を行い、Cheetah が MOEA/D よりも優れていることを示した。また、本研究課題において Cheetah が自動車車両構造設計問題や超電導リニアの空力音響設計問題、自動車タイヤの空力問題に適用され、実問題における有効性が実証された。
- ・並列計算可能な多数目的進化計算アルゴリズムを世界で初めて開発した。このアルゴリズムを京で走らせることで、大規模集団サイズを用いた多数目的設計最適化が可能になり、これまでパレート最適解を得ることが難しいと言われていた多数目的設計問題においてもよい解が得られることを初めて実証した。この結果は海外からも注目され、2016 年 2 月に開催される国際会議 ACALCI2016 において基調講演を行うことになった。
- ・ロケット射点形状や超電導リニアの多目的空力音響設計探査を実施し、これまでよりも優れた設計を得るとともに有益な知見を得ることに成功した。多目的空力音響設計最適化問題を解いたのは世界で初めてである。京を用いることで多数の large eddy simulation が必要な空力音響設計問題が初めて解けるようになった。
- ・自動車車両構造の多目的設計探査を実施した。京を用いることで初めて車両構造の正確な衝突性能評価をとともう多目的設計探査ができるようになり、従来手法で得られた設計よりも優れた設計を得るとともに有益な知見を効率的に得ることに初めて成功した。
- ・自動車タイヤの空力多目的設計探査を実施した。京を用いることで初めて車両形状も含めたタイヤの空力性能評価が多数実施可能になった。これにより抵抗と揚力の両方を同時に削減する画期的な形状を得ることに初めて成功した。

(5) 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発

世界各国で販売されている市販コードのおおよその上限は、導入価格が並列数に比例して増大するため、一般に数並列程度であり、100 万自由度程度である。また、別の理由の一つとして、大規模なデータを準備する手段が存在しないことも、大規模計算が進展しない要因の一つではある。

このような現状に対して、ADV_K は、

- 1) 要素技術の研究開発では 4,096 ノードを用い実行効率 42%を達成、
- 2) プロダクションランでは 32,768 ノードを用い実行効率 10%を達成、

しており、国内外の学協会において高く評価されている。具体的には、受賞 (APACM Computational Mechanics Award、ICCES Distinguished Achievement Award 等)、及び、国際会議において多くのプレナリー招待講演を受けた。

FIESTA (Finite Element Analysis for Structure of Assembly) は、組立構造品を意識した有限要素解析コードであることから、部品を集積して解析実行する。これにより市販コードでボトルネックとなっている大規模なデータを準備する問題を解決している。これは、プラントなどの組立構造物の解析をするために部品毎に有限要素分割されたデータを結合する機能を本プロジェクトで完成させたからである。また、「京」の 1,024 ノードを用いて部品ごとの機能分析を同時並行して実施する機能をも付け加え、アルゴリズムに依存する計算精度のバラつきを考慮する手段も具備させている。従来手法で多用されてきているひずみエネルギー減衰法は、膨大な計算量を必要とするため、詳細な有限要素解析では不可能とされ、簡易な有限要素のモデルにしか適用されてこなかった。今回、京という計算資源を得て、FIESTA ではひずみエネルギー減衰法を実装した。これにより部品毎の減衰を扱えるようにした。

(6) 計算科学技術推進体制構築

計算科学技術推進体制の構築施策において、特に独創性・優位性に係る項目について以下にその内容を記す。

(6-1) 計算機資源の効率的マネージメント

多様な産業ニーズへの HPCI 利活用の促進と支援活動においての特徴は、広範の産業界を対象とするという点と、ヘビーユーザー(大企業)のみならず、ボリュームゾーンユーザー(中、小企業)までを包含するという点であり、換言すればオールジャパン体制での推進を指向しているところにある。従って、計算機資源の活用については、戦略的・計画的に推進する研究開発課題とともに、産業界の幅広いニーズを反映させた課題を取り込む仕組みを併存させることとした。後者については、産業界ニーズを広く取り込むため、「公募」をベースとした仕組みを採ることとした。本事業については、ニーズの分類として HPC 産業利用スクール(人材育成)、HPC 実証研究(利用拡大)、HPC 共同研究(高度活用)の 3 段階を設けている。公募事業の一覧を Table7-1 に示す。

Table7-1 List of publicly posted projects

HPCI戦略プログラム「分野4 次世代ものづくり」公募事業一覧

事業の種類別	事業名	事業の趣旨	補助金を充当して提供される計算機資源	成果の帰属及び公開	契約形態	参加費用
革新的研究成果の創出を狙った事業	共同研究課題公募事業	京速コンピュータ「京」をターゲットとし、先端ソフトと革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)環境を活用することで初めて解決が見込まれる産業界の個別課題を募集する。課題の内容は、実証計算をはじめ先端ソフトの研究開発課題まで幅広く募集する。 先端ソフト開発機関と協力して課題に取り組み、HPCI環境性能を十分に引き出すことで初めて解決が見込まれるような課題について共同研究として実施していく。	京コンピュータ 1PFLOPS程度のリソース 東大・情報基盤センター FX10スーパーコンピュータシステム 革新センター R620クラスタ 136ノード(2,176コア)	成果の帰属については、共同研究契約の際に両者協議の上決定する。基本的には共同研究を受ける組織の知的財産に関するポリシーに基づき対応する。 成果は原則公開とするが、共同研究契約の際に公開範囲等を両者協議の上で取り決める。	共同研究契約	共同研究契約に基づき研究費負担
産業界でのHPC利用効果の実証を確認する事業	実証研究課題公募事業	先端ソフトウェアと数十TFLOPSのスパコンから京速コンピュータ「京」までの幅広い革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)環境を活用した産業界実問題に対する解析の実効性把握を目指した利用課題について、プロダクト/イノベーション、プロセスイノベーション、安心・安全社会の構築の実現に関する分野を中心に課題を募集する。 スパコンの本格利用の足がかりを得ることをはじめとした、次世代スパコン「京」を中核とするHPCI環境の利用でものづくりの革新に貢献できる波及効果の大きい課題を募集し、スパコ	東大・情報基盤センター FX10スーパーコンピュータシステム 革新センター R620クラスタ 136ノード(2,176コア) GX1000クラスタ 36ノード(432コア) 計算科学技術財団 FOCUSスパコン 48ノード(576コア)	得られた成果は利用者に帰属 成果は原則公開 公開延期は2年間	誓約書の提出 必要に応じて NDA等締結	無償
人材育成事業	HPC産業利用スクール 先端コース (スーパーコンピューティング技術産業応用協議会との共催) ※入門・実践コースとサマースクールは希望すれば受講可能で用意された課題のみなので対象外	産業界において次のイノベーションの担い手となる人材を育成するため、HPC技術を習得する機会としてHPC産業利用スクールを開講している。先端コースは、革新センターと共催で、他の講習会では経験できない大型並列計算機を用いた大規模並列計算による、持ち込み個別課題に取り組む、ニーズ直結型のスクールである。最大3ヶ月間、最大で1,000コア程度の計算機資源を用い、適宜専門家の指導を受けつつ課題を実施することが可能な、特別な育成プログラムである。 年間10課題程度で、申し込み順に課題内容のヒアリングを行い、受け	東大情報基盤センター FX10スーパーコンピュータシステム	得られた成果は利用者に帰属 成果公開は個別相談	申し込みのみ	100,000円 ICSCP会員は80,000円 講師謝礼と事務経費を 実費負担 無償のトレーニング5件程度を計画

上記公募事業とは別に、スパコン利用課題の需要開拓事業を計算科学技術財団が委託により実施する。

(6-2) 研究成果の普及

(6-2-1) HPC/PF 開発整備

シミュレーションを企業の設計活動で活用するためには、シミュレータの開発だけではなく、その周辺技術の整備が必須である。例えば、大規模並列計算においては、生成されるファイル数が膨大になるために、計算リソースの効率的な管理方法が必要である。一方、計算そのものに格子が必要であるが、大規模な格子を合理的に作成できる方法の開発、また、得られた大規模なデータから設計に必要なデータを抜き出し、提示する技術開発が必要となる。さらに、シミュレーションの実施自体にも自動化などの支援が望まれる。HPC/PFはこのようなシミュレータエンジンと連携して、設計情報を得る効率的なシステムと位置づけられる。大規模並列計算をターゲットとして、このようなシミュレーション支援環境を開発整備した事例はかつてなく、この点で独創性と優位性がある。

(6-2-2) HPC/PF 向け圧縮性流体解析プログラム UPACS の開発

高レイノルズ数流れを高精度で解析できる構造格子法を用いた汎用的な圧縮性流体解析プログラムとして、「京」の最大規模である 80,000 プロセス並列まで並列効率が 90% 以上を実現した。解析プログラム(いわゆるソルバー)だけでなく、その前処理として必須となる計算格子作成に関しても、実際のものづくりで対象となる複雑な物体形状に対して、100 億点規模の計算格子の作成が可能な大規模格子生成手法を開発し、名目ではなく実質的な大規模解析(数万並列プロセス、数百億点規模の計算格子)を実現している。

(6-2-3) 階層型直交格子を用いた実用複雑系流体解析システム「FFV」の整備

FFV-C(直交等間隔格子)/FFV-BCM(直交階層格子)は実用性を考慮した熱流体解析システムで、格子生成時間が短いこと、計算時間が早く実用的な時間内で結果が得られること、多様な境界条件を設定でき、HPC/PFシステムとの親和性が高いことが特徴である。

(6-2-4)共通基盤技術(核融合)

超並列計算の並列化率を向上する上で通信マスク手法の有効性は認識されていたが、従来の多くの手法は専用ライブラリを用いた非同期 1 対 1 通信に関するものであった。一方、本業務では OpenMP で実装した通信スレッドを用いる独自のアルゴリズムによって、非同期 1 対 1 通信だけでなく同期 1 対 1 通信や集団通信にも適用可能な汎用的な通信マスク手法を世界で初めて確立した。

本業務ではこの手法を差分乱流コード GT5D、スペクトル乱流コード GKV という 2 種類の核融合プラズマ流体解析プログラムに適用し、 10^{12} 自由度規模のペタスケール流体計算において「京」フルシステム規模までストロングスケーリングを拡張することに成功し、並列化率~99.9999%という高効率で約 60 万コア規模の大規模流体計算を実現した。

また、本業務では大規模データの可視化に関して粒子ベースボリュームレンダリングという独自アルゴリズムを採用し、その性質を活かしたクライアント・サーバ型分散並列可視化モデルを確立し、「京」のストレージ上の大規模データを転送することなく遠隔地から直接解析する手法を確立した。本基盤技術の独創性と優位性は国際的に高く評価されており、主要国際会議における成果発表、国際論文誌における論文発表、および、学会賞等の受賞に結実している。

(6-3) 人材育成

(6-3-1)開発者教育

産学が連携して構築した全く新しい科学技術シミュレーション開発教育である。これらの経験を活かした本分野初の教科書、参考書の出版にも成功。いわゆる標準的なソフトウェア工学とは矛盾する要求が必至の HPC ソフトウェア開発において、新たに科学技術シミュレーションソフトウェア工学という分野を提唱・構築したといってよい。本研究開発のようなシステムティックかつ実践的な試みは他に例を見ない。

(6-3-2) 利用者教育

利用者教育として推進中の「HPC産業利用スクール」では、利用者のレベル・目的に応じたコースメニューを整備してニーズに合った教育を実現している点ならびに、特別コース等を設けて単に高度なソフトウェアの利用技術の習得だけでなく、HPCがものづくりにもたらす効果等について徹底した議論を行う機会を設けている点は極めて独創的な教育システムとなっている。

(6-4) 人的ネットワークの形成

本分野には、研究者集団よりも圧倒的多数の産業界技術者の参加があることからシンポジウムなどの諸行事には、登壇者として産業界代表を必ず加えて、人的ネットワークの拡大に努めているところに特徴がある。また、平成25年度からは、年度末に成果の総合報告を意図した技術(あるいは製品)部門別の統合ワークショップも加える計画であり、広くものづくり産業に携わる研究者・技術

者が一堂に会する機会を増強する。

(6-5) 分野を超えた取組の推進

分野4だけでなく、他分野でも利用できるしくみとして、アウトリーチ web サイトの設計とプロトタイプ開発を実施した。このサイトは、単なるウェブサイトではなく、HPC/PF と連携して動作することが他にはない新しい点である。一例として、事例データベースと連携して動作する点が挙げられる。事例データベースに各シミュレータの計算事例について、様々な情報とともに追試可能なデータを収録しておく。このデータベースが増えれば、シミュレータをどのようにして使うと効果的であるか、利用ガイドラインが蓄積されていくことになる。また、検証(V&V)についても豊富な事例が集まれば、ユーザーが訪れたいサイトとして認知度が向上する。このように開発したシステムと連動したアウトリーチサイトは、他の分野でも有用だと思われる。まず、分野4内で実証を行い、その後他分野への展開を考えている。

(6-6) プロジェクトの総合的推進

本分野は広範にわたる「ものづくり」に寄与するシミュレーションを対象としており、3研究機関のネットワーク型組織の形態をとっている。対象とする製品群は、原子力施設から宇宙航空、さらに民生用機器まで極めて広く従来の研究活動では連携した取り組みは困難である。今回の事業により上記製品群に関する技術開発を牽引する研究機関間の情報交換、連携研究が円滑に行われており、従来にないプロジェクトの推進が実現しているところは極めて斬新である。

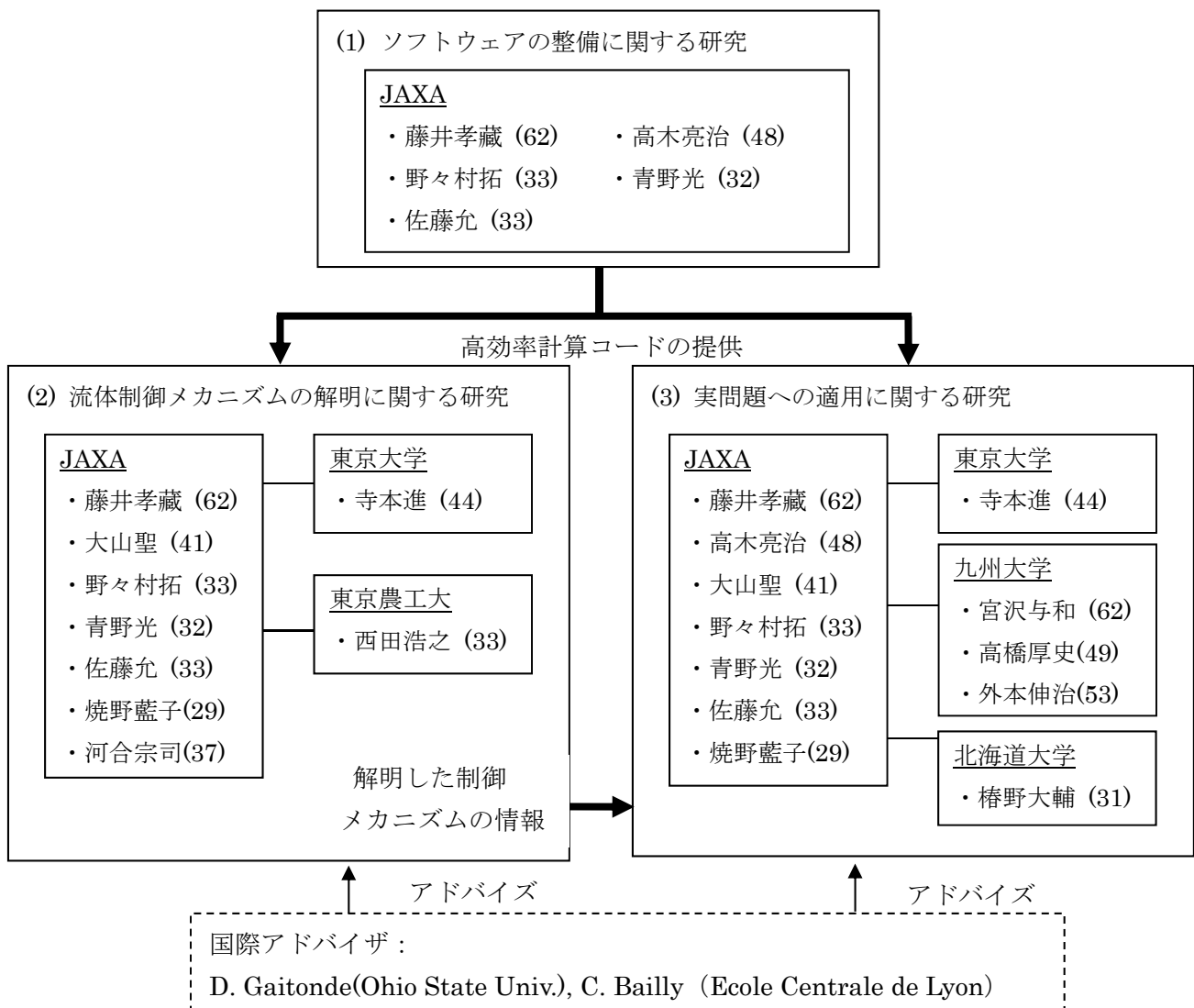
(2) 研究開発体制について

(1) 輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率化・低騒音化に関する研究開発

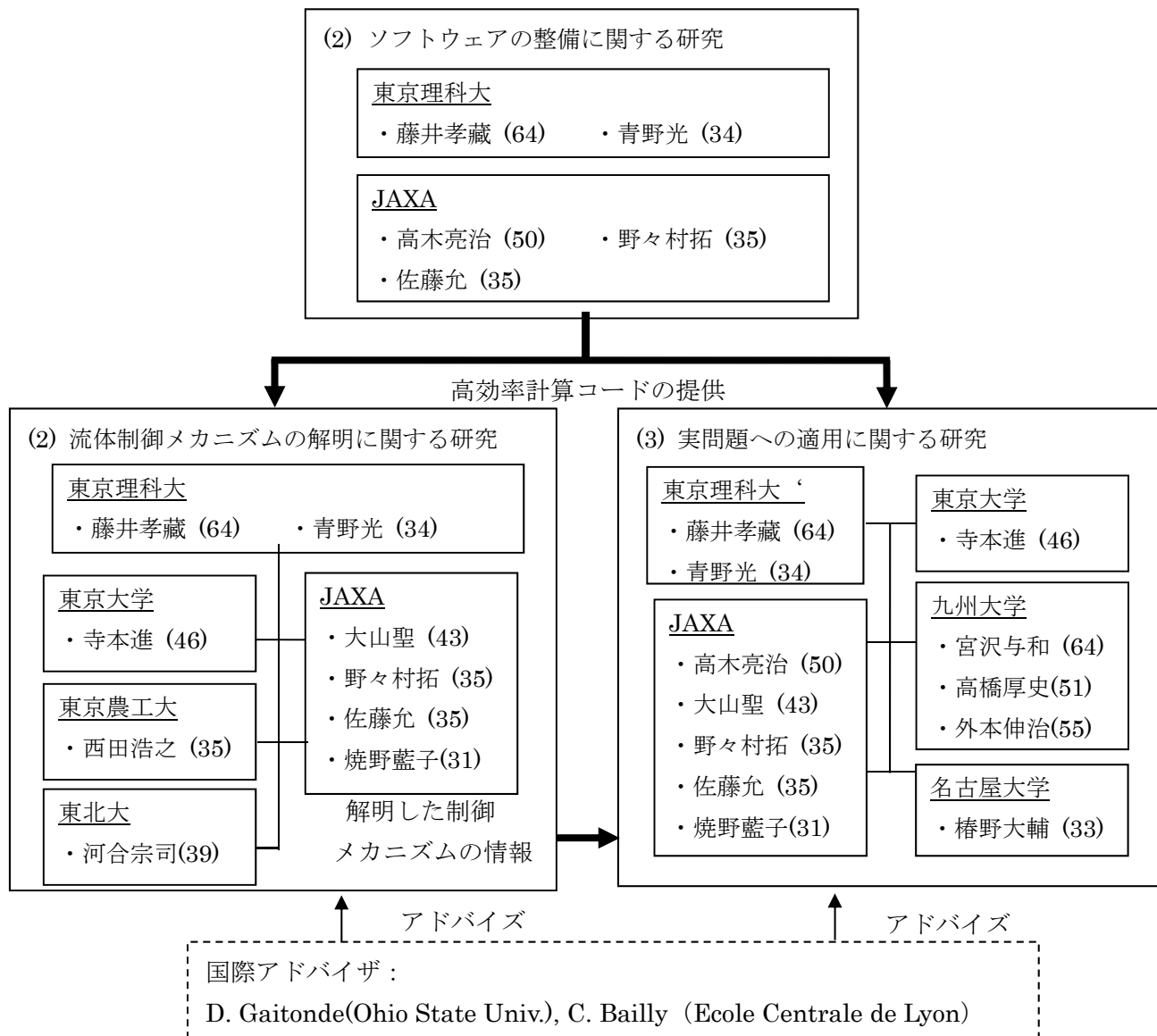
記載のように、最終年度に一部所属機関の変更があったが、変更による研究遂行への影響は全くない。

研究費や計算資源のばらまきにならないように、各チームがそれぞれの専門を活かして貢献するというコンパクトなチームによる研究体制とした。京の利用を進めるプログラム開発、流体现象解析、それに基づくデバイスパラメータ設定など流体側の研究は JAXA 宇宙科学研究所(最終年度は理科大を含む)、デバイス部分のシミュレーションを検証するプラズマ関係は東京農工大、流体制御に関する部分は九州大学とした。なお、流体力学と制御の知見を併せ持つ研究者を必要としたため、北海道大学(現在、名古屋大学)の研究者を追加している。唯一、応用としてのタービン関係適用事例を東京大学にお願いした。個別の打ち合わせに加えて、年数回の定期的な議論によって全員が情報を共有するよう配慮して研究を進めた。国際アドバイザーには、主に学会などの機会に状況を説明し、意見を求めてきた。

2014 年度まで(異動前)



2015 年度 (異動後、終了時)



他プロジェクト/外部機関との連携：

本研究はプロダクトイノベーションを目指したもので、研究対象は設計に革新をもたらさるる将来技術である。その主眼は 5 年間という短期で実利用を促進することではなく、十年から数十年後に輸送機器や流体機器の流体力学設計の変革を生み出す期待の元で、多くの企業がこの技術に興味を持つことにある。すなわち、産業界の意識改革のきっかけを作ることが本研究の目指すところであり、複数の企業が実験や試験等による実利用を目指した研究を開始することが産業応用面の成果と考えている。

それを前提とした上で以下に数件の民間との連携を記載する。風力発電機器については、T 社との共同研究が継続中である。研究開始以前から、さまざまな議論を重ねており、本研究で得られた知見の数々は 1.7MW クラスの産業用風車を利用した大がかりなフィールド試験でのプラズマアクチュエータのパラメータ設定に活かされている(最終報告会で T 社が発表)。なお、2010 年度後半から 2012 年度にかけて、NEDO の「省エネルギー革新技術開発事業(先導研究フェーズ)」の 1 つとして T 社と JAXA 研究開発本部提案の課題が採択され、2011 年以降は本研究課題と連携した研究を進

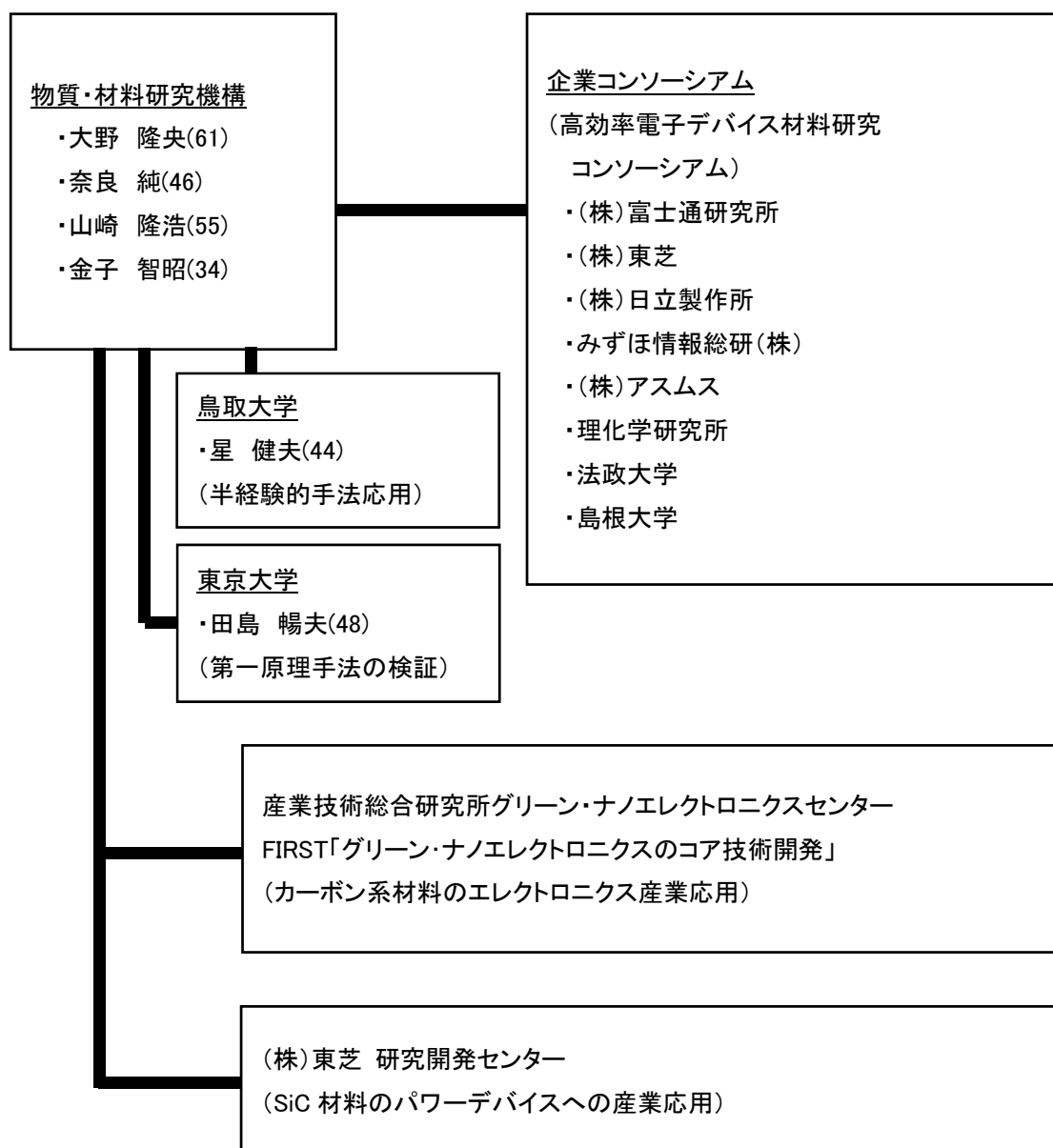
めた。このNEDOテーマは主として大型風洞実験により実用に近いスケールで特定デバイスの効果を検証するもので、実験結果の一部は私たちのシミュレーション結果の検証データとなった。逆に、本課題研究からは数値シミュレーションの解析結果や知識基盤など本研究解題で得られた成果を彼らに提供した。重複は2年間のみであったが、このNEDOテーマの中で本研究課題による成果が産業界での実利用への展開が加速された。

2015年には、M社等との共同研究の枠組みの中で自動車への適用に関する風洞試験がはじまっている。試験ははじまったばかりであるが、プラズマアクチュエータ設置によって流れ場構造が変化する様子は捉えられており、今後の風洞試験によって目的とする制御の実現を目指している(最終報告会でM社が発表)。航空機メーカーのF社とは、すでに現場レベルにおける共同の取り組みが進みつつあり、現在共同研究の立ち上げを準備している。小型ファンメーカーに関しては、具体的な共同研究契約は結んでいないものの、NDAの元で形状の提供を受けてプラズマアクチュエータによる流れ制御の効果を確認し、今後より適切な制御を探っていく予定である。それ以外にも、上記と別の複数の自動車会社が興味を示しており、社内報に取り上げられるなどこの技術の優位性に高い興味を引くことに成功している。

上記の研究にすべてにおいて、本課題研究グループ側の役割はシミュレーションの実施とそこから得られた知見の提供、産業界は(一部、風洞試験も共同で実施中のものもある)試験や実験を担当している。

アカデミックな観点では、2012年から3年間は科学研究費補助金基盤研究A「プラズマアクチュエータ制御における局時流れ機構と制御パラメータ策定に関する研究」(代表者:藤井孝藏)が、2015年から3年間は同じく科学研究費補助金基盤研究A「DBDプラズマアクチュエータの実利用に向けた性能実証に関する研究」(代表者:藤井孝藏)が採択されている。これらは小型風洞およびJAXA宇宙研が有する小型風洞を利用して当該デバイスの有効性を実験的に検証するとともに、将来の航空機の巡航状態の本格的な性能向上と運動制御への適用を目指したものである。京を利用した数値シミュレーションに加えて実験を自ら実施することで、シミュレーションの検証やシミュレーションで得られた推論の確認などができており、高い相乗効果が得られたと考えている。

(2) 次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発



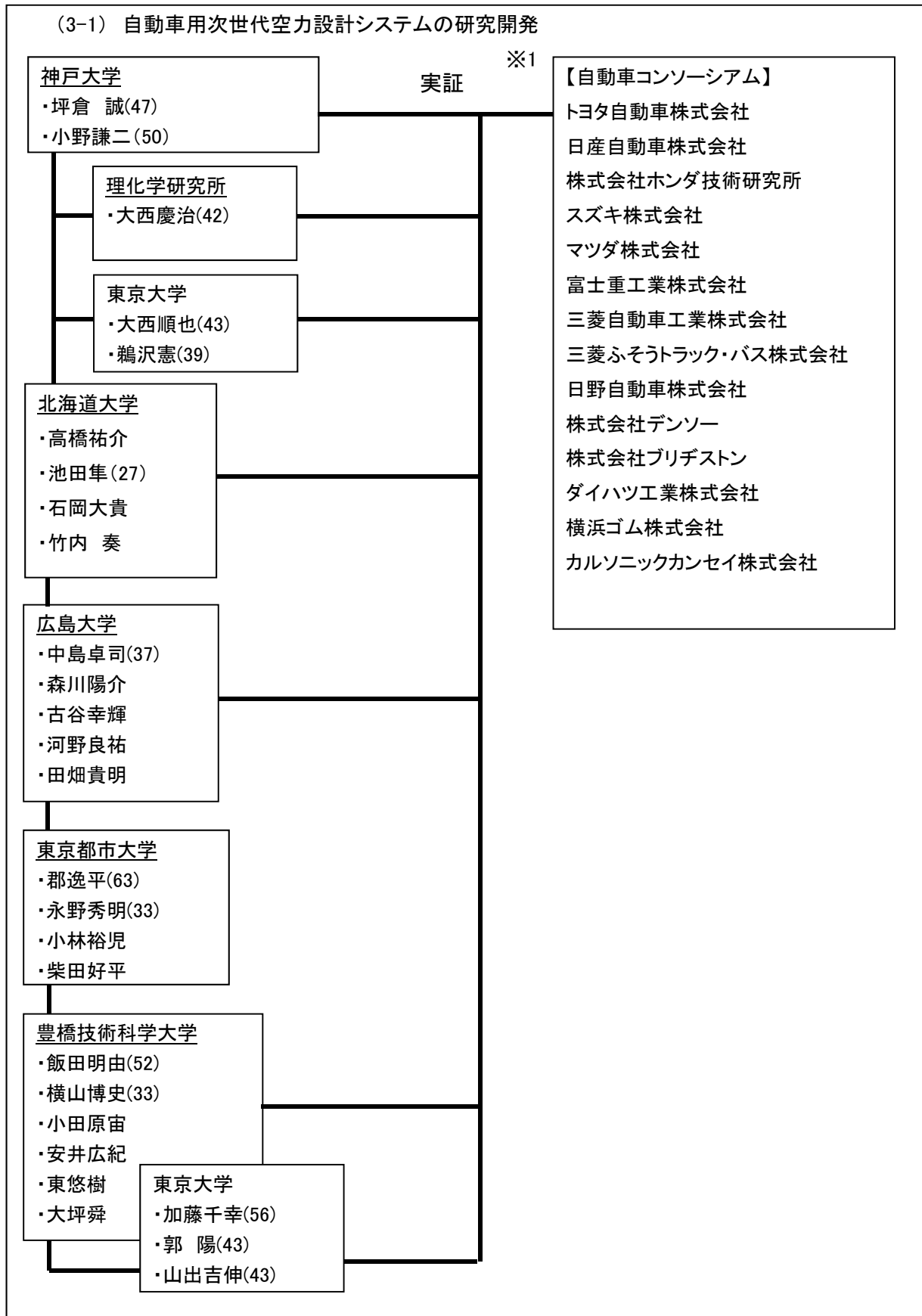
本研究課題では、産業界における「ものづくり」現場との連携を強く意識して研究開発を進めており、京計算機によるシミュレーションを活用した次世代半導体デバイス開発のための知的基盤の構築と設計指針の提供を目指している。そのため、研究開発当初の平成23年度から、企業コンソーシアム(高効率電子デバイス材料研究コンソーシアム)を組織し、本研究課題を推進する中核とした。次世代半導体デバイスの研究開発は競争の激しい分野であるが、新規材料の実デバイス適用に関しては、競争的な知見だけでなく、研究開発の基礎となる基礎的な知見も決定的に不足している。企業コンソーシアムでは、「ものづくり」現場の現状を踏まえて、京計算機を利用したシミュレーションを通じて、実デバイス適用のための新規材料に関する前競争的な共通基盤的な知見の獲得を目標としている。

より進んだ競争的な研究開発の段階では、個別テーマに関する共同研究を実施し、シミュレーション結果を実デバイス開発にフィードバックする体制を構築している。平成23年度後半からは、産業技術研究所グリーン・ナノエレクトロニクスセンター(GCN)と共同研究を立ち上げ、最先端研究開発支援プログラム

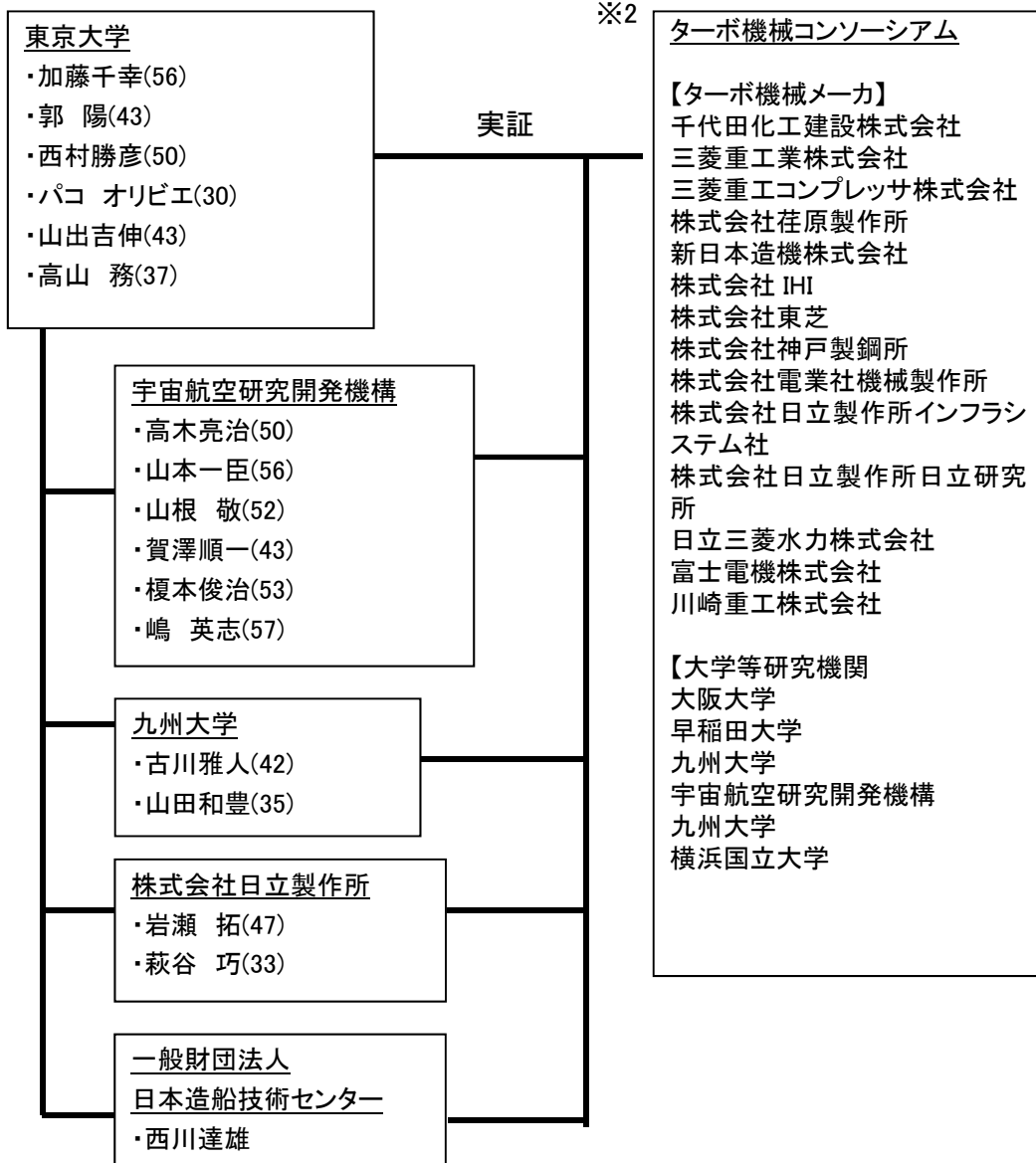
(FIRSTプログラム)「グリーン・ナノエレクトロニクスのコア技術開発」との連携を開始した。この共同研究では、グラフェン・トランジスタ等のカーボン系ナノデバイスを対象として、グラフェン創成プロセス(遷移金属CVD法やbottom-up法)、グラフェン接合構造等の最適化指針構築のための研究開発を実施しており、計算と実験との良好な連携による研究開発が進んでいる。

平成25年度からは、(株)東芝研究開発センターと、SiCパワーデバイス開発に関する共同研究を開始した。SiCはワイドギャップ半導体であり、パワーデバイス材料として有望である。秘密保持契約の下で問題点を明確化した後、共同研究契約を締結した。この共同研究では、SiCパワーデバイス開発の要点である高品質SiC酸化膜の設計指針構築のための研究開発を実施し、その成果からSiC酸化膜に関する特許申請に繋げた。

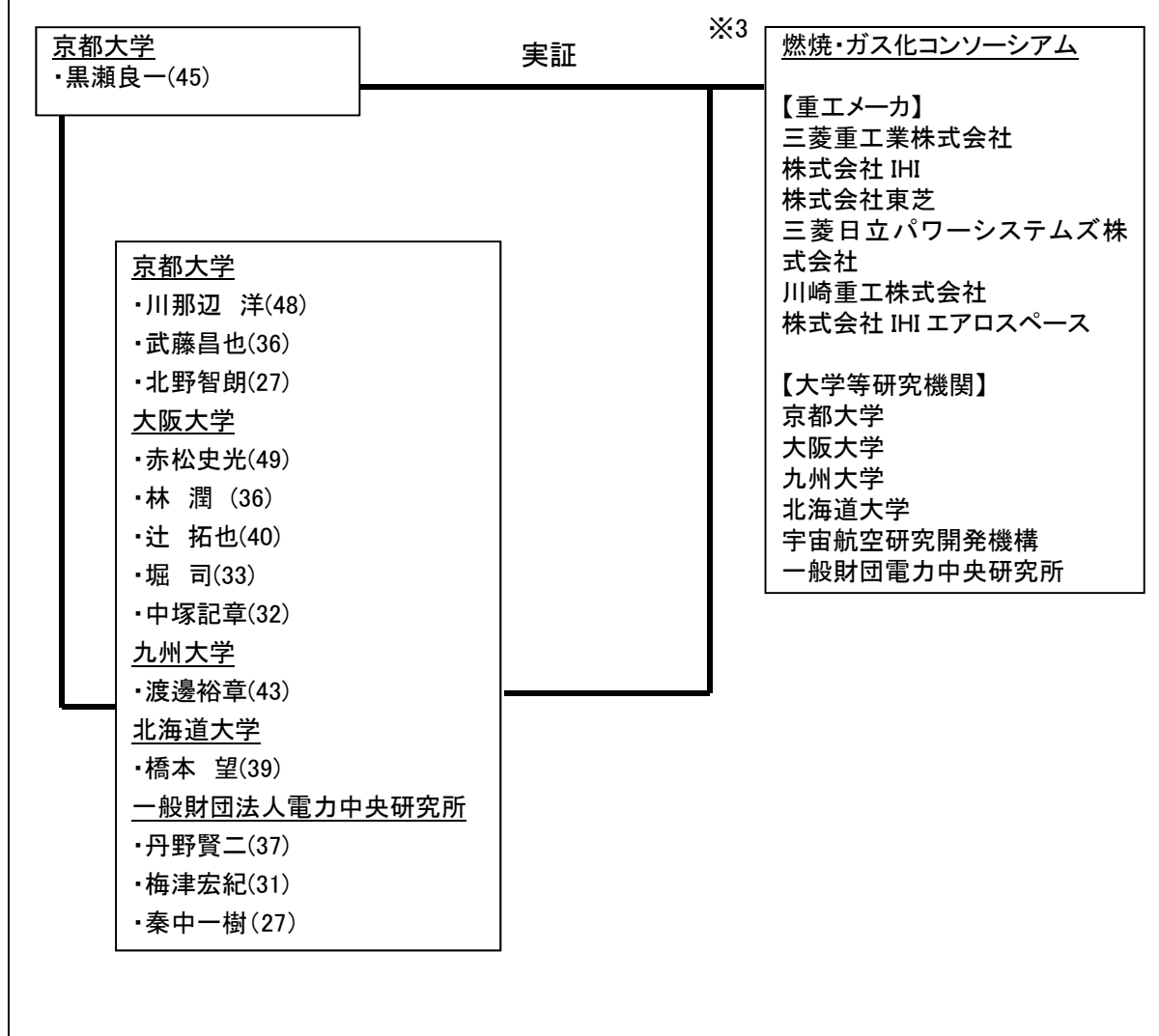
(3) 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発



(3-2) ターボ機械用次世代設計システムの研究開発



(3-4) 次世代燃焼・ガス化装置設計システムの研究開発



(3-1) 自動車用次世代空力・熱設計システムの研究開発

北海道大学が中心となって、研究機関 5 機関、民間企業 13 社が参画する「HPC による自動車用次世代空力・熱設計システムの研究開発」プロジェクトを立ち上げ、自動車開発での実用化を目指して以下の課題を実施している。

※1

- 課題 1: 階層的データ構造による超大規模格子生成
- 課題 2: 実走行状態における気流・車両運動連成空力解析
- 課題 3: 空力・振動・音響連成解析による車室内騒音予測
- 課題 4: エンジンルーム・排管系熱害予測
- 課題 5: 大規模データ処理に適した統合インターフェースの開発

(3-2) ターボ機械用次世代設計システムの研究開発

ターボ機械協会内に研究機関 7 機関、民間企業 14 社が参画するターボ機械 HPC コンソーシアムを形成し、ターボ機械の性能、振動、騒音を評価する実証計算を実施している。ターボ機械 HPC コン

ソーシアムでは以下に示す 6 課題に関してワーキンググループを設け、実証研究を進めている。

※2

- 課題 1 遠心圧縮機サージ予測
- 課題 2 多段遠心ポンプの非定常計算
- 課題 3 ファンの性能・騒音予測
- 課題 4 水車・ドラフトチューブの非定常流動予測
- 課題 5 蒸気タービン最終段の非定常流動予測
- 課題 6 ポンプ吸込水槽の非定常解析

(3-4) 次世代燃焼・ガス化装置設計システムの研究開発

研究機関4機関、民間企業5社が参画する燃焼・ガス化コンソーシアムを形成し、様々な燃焼・ガス化装置を対象にした実証計算を実施している。

※3

- 課題 1 ガス燃焼性能の予測
- 課題 2 噴霧燃焼性能の予測
- 課題 3 石炭燃焼・ガス化性能の予測

(4) 多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発

とりまとめ

宇宙航空研究開発機構 (JAXA)
・大山聖(43)

研究開発

宇宙航空研究開発機構 (JAXA)
・大山聖(43)
・立川智章(37)
・渡辺毅(41)
・ハイムスアントニオ(38)
・シュルーターマーチン
・藤井孝藏(64)
・高木亮治(47)
・嶋英志(57)
・中橋和博(64)

信州大学
・田中清(55)
・アギレエルナン(50)
・秋本洋平(30)

東北大学
・大林茂(56)
・下山幸治(37)
・三坂孝志(36)
・ルオチャン

名古屋大学
・吉川大弘(55)

研究開発内容についてアドバイス

国際アドバイザー
Prof. Carlos Coello (GINVESTAV)



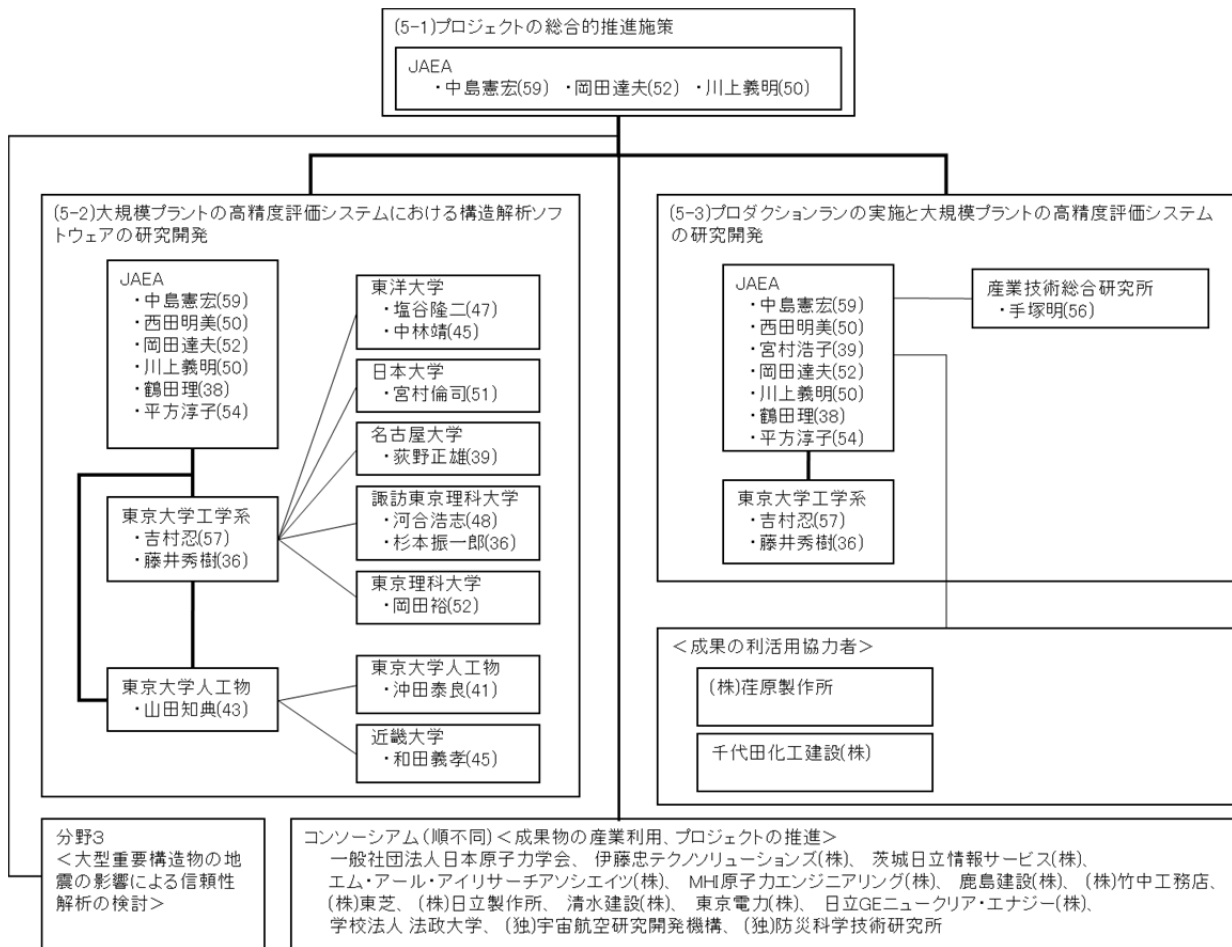
(1-1)多目的設計探索のアルゴリズム開発については、大規模多目的設計探索技術に関する研究の第一線で世界的に活躍する東北大学、信州大学、名古屋大学とチームを組んで取り組んだ。研究の進捗について頻りに情報交換・アイデア交換を行うことで、アルゴリズム開発を効率的に推し進めることができた。

(1-2)JAXA の設計問題での実証では、ロケット射点形状設計を実施している JAXA JEDI グループや深宇宙探査ミッション DESTINY ワーキンググループのメンバーと密に連携をとりながら宇宙工学分野における実問題での多目的設計探索の有効性を実証した。

(1-3)分野4他課題の設計問題での実証においては、研究開発課題1とともにプラズマアクチュエータの多目的設計探索を実施した。

(1-4)企業の設計問題での実証においては、自動車車両構造の多目的設計探索をマツダ株式会社、自動車工業界、富士通とともに JAXA が実施した。超電導リニアの空力音響多目的設計探索については超電導リニアを開発する東海旅客鉄道株式会社とともに JAXA が実施した。なお、圧縮性流体ソルバーは研究開発課題1が開発した LANS3D を利用させていただいている。自動車タイヤの空力形状多目的設計探索については横浜ゴムとともに東北大学が計算を実施している。なお、流体ソルバーは研究開発課題3で開発した FrontFlow/red を利用させていただいている。

(5) 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発

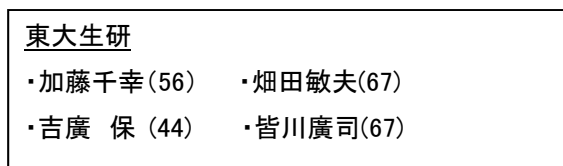


他のプロジェクトとの連携

他分野との連携として、分野3と大型重要建造物の耐震シミュレーションと分野3の地震シミュレーションの連携方策について意見交換するとともに、双方の研究開発状況を報告し、進捗の確認をしている。そのための耐震課題連絡会議を設置し、平成 23 年 9 月 30 日、平成 23 年 10 月 13 日、平成 24 年 9 月 3 日、平成 25 年 6 月 24 日に実施した。

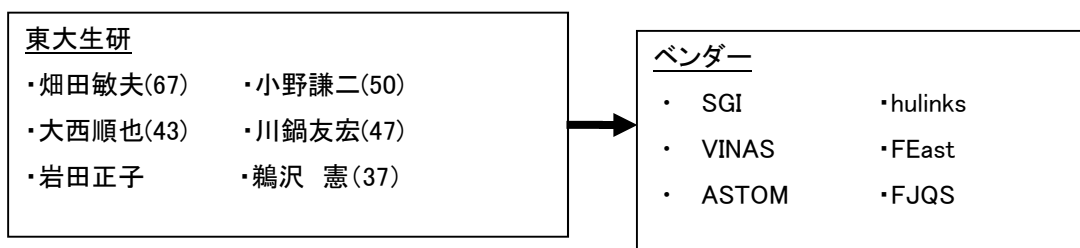
(6) 計算科学推進体制構築

(6-1) 計算機資源の効率的マネージメント

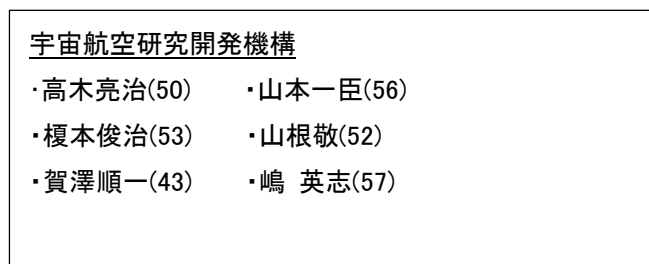


(6-2) 研究成果の普及

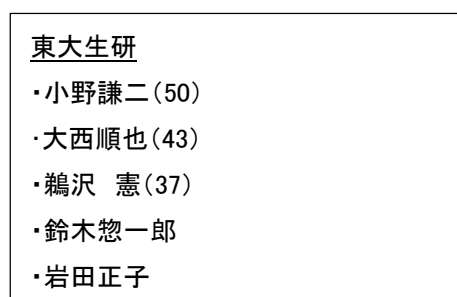
(6-2-1) HPC/PF 開発整備



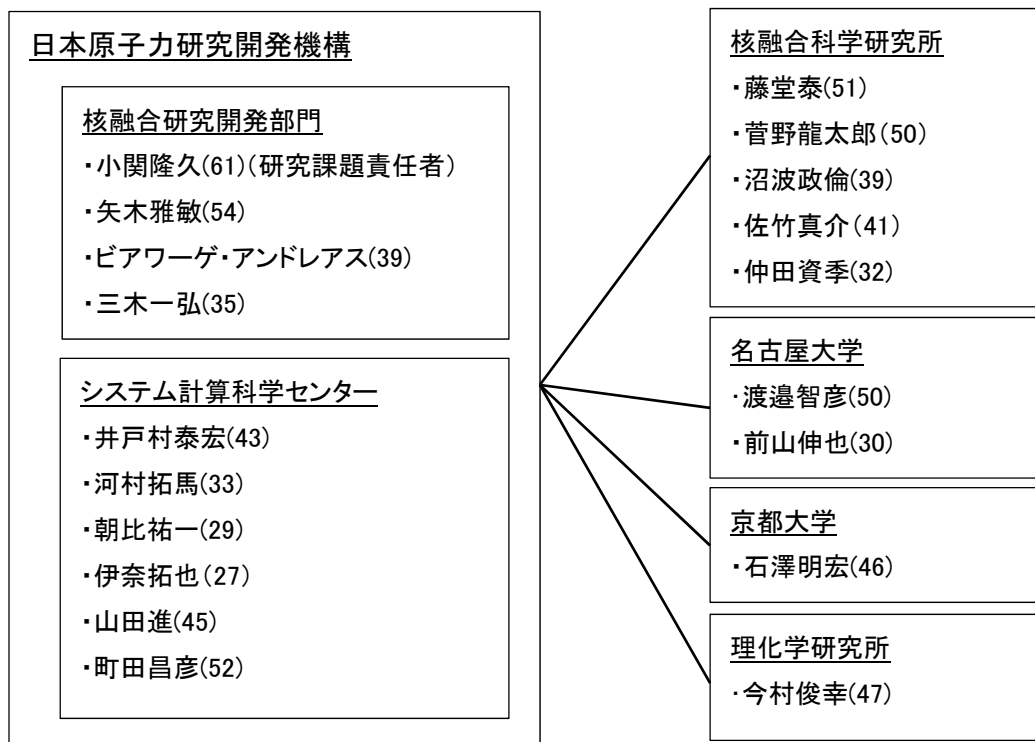
(6-2-2) HPC/PF 向け圧縮性流体解析プログラム「UPACS」の開発



(6-2-3) 階層型直交格子を用いた実用複雑系流体解析システム「FFV」の整備

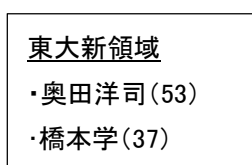


(6-2-4) 共通基盤技術(核融合)

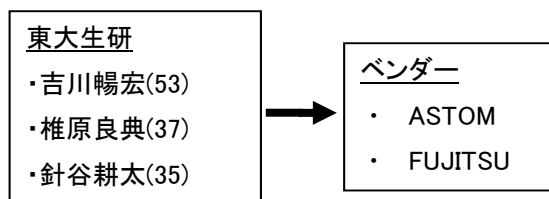


本業務は「京」一般利用課題(hp120011、hp140044、hp150027)、および、「京」若手人材育成利用課題(hp120138、hp140053)と連携して進められた。これらのプロジェクトでは、本業務で開発した基盤技術を応用することによって 10^{12} 自由度規模のペタスケール流体計算を駆使した核融合プラズマ流体解析が実施され、本基盤技術の有効性が実証された。

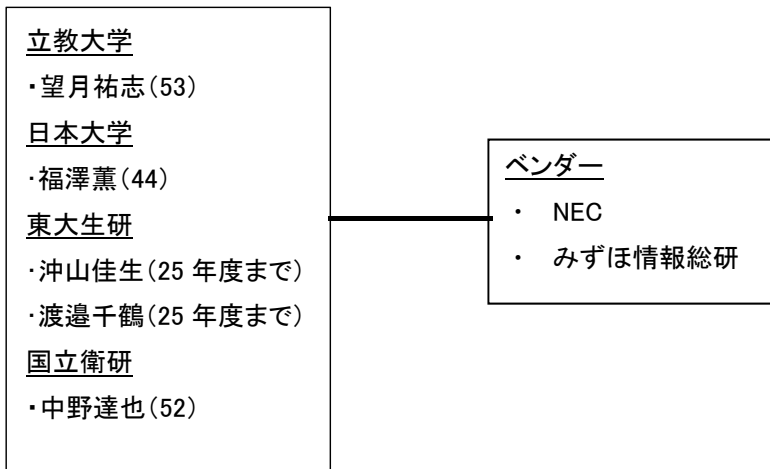
(6-2-5) 並列 FEM 構造解析ソフト「FrontISTR」高度化の検討



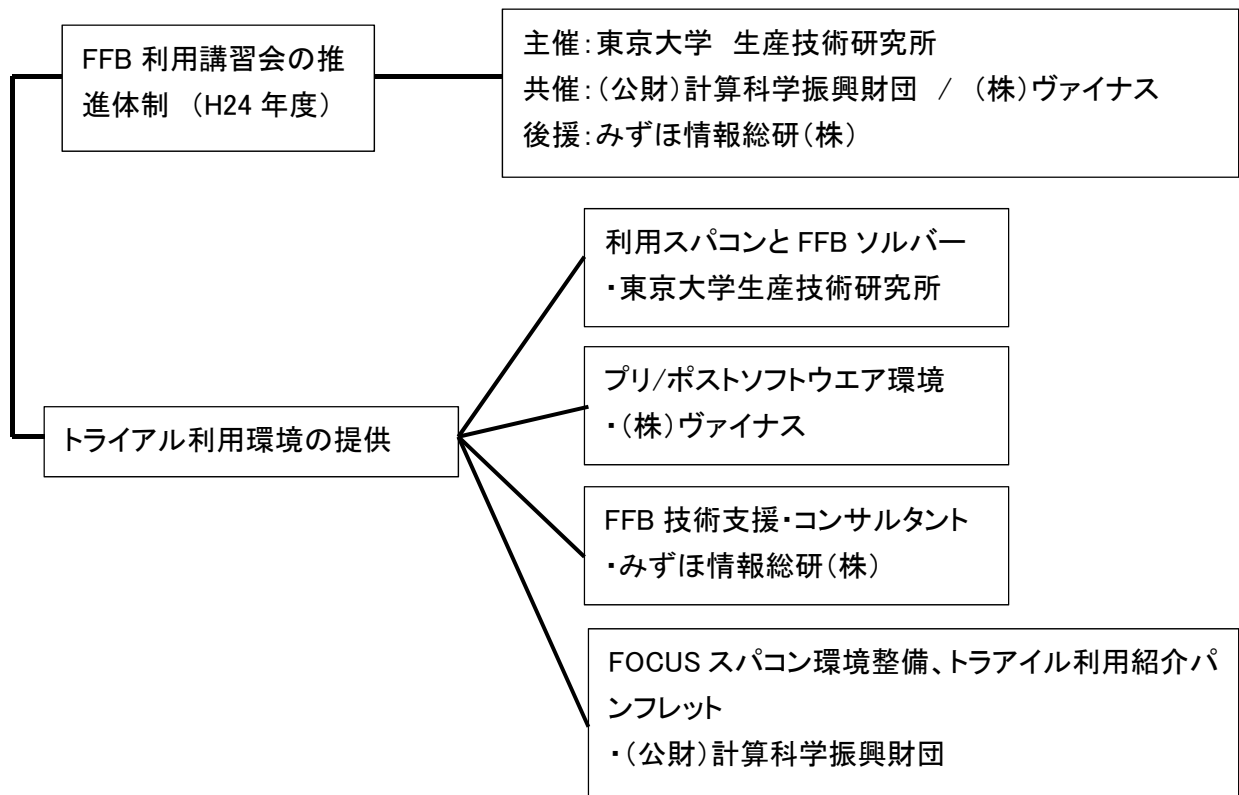
(6-2-6) 「FrontCOMP」の高度化



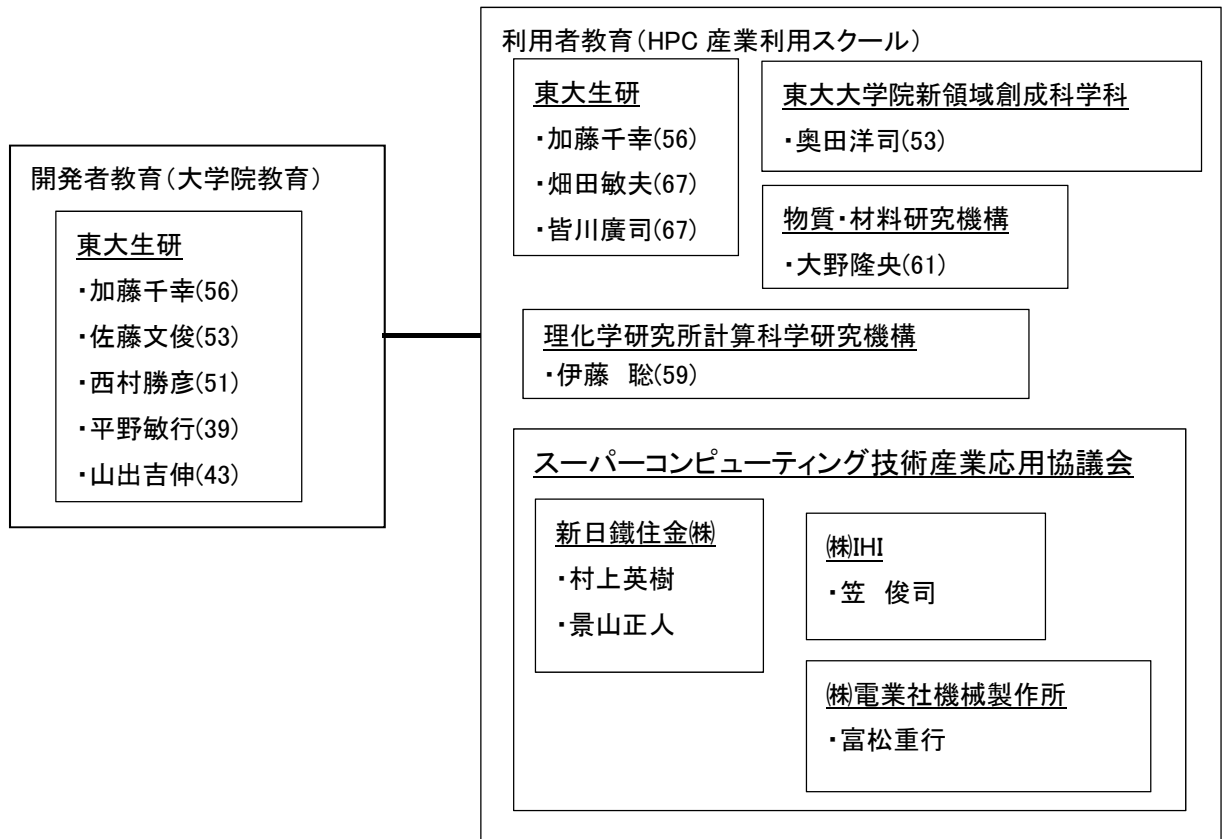
(6-2-7) バイオ分子シミュレータ「ABINIT-MP」高度化の検討



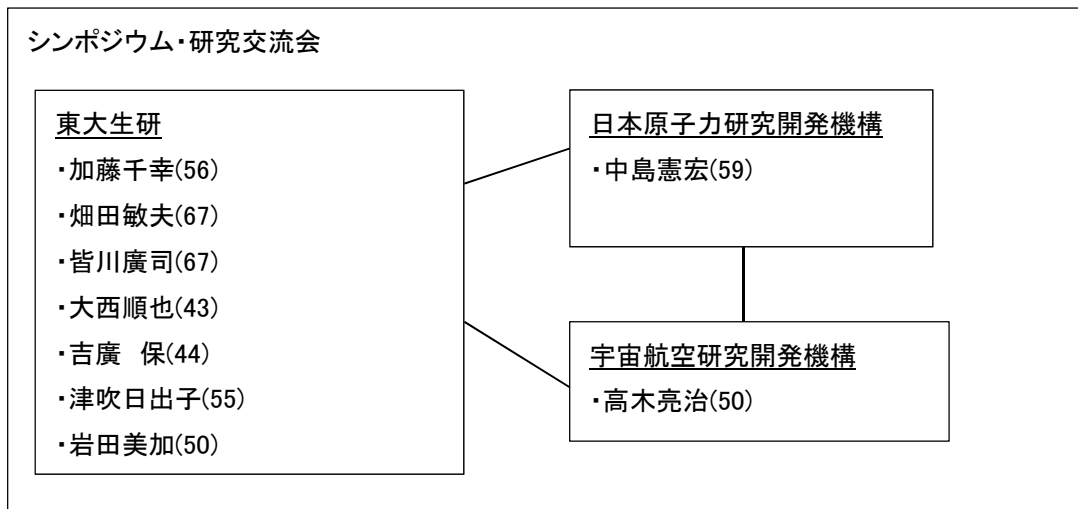
(6-2-8) 利用者層の拡大



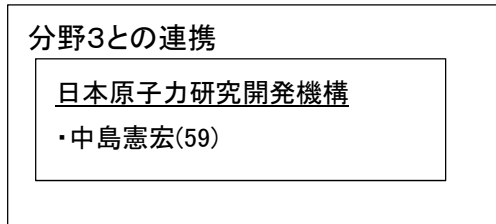
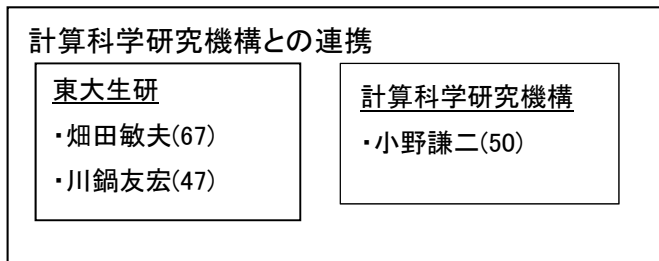
(6-3) 人材育成



(6-4) 人的ネットワークの形成



(6-5) 分野を超えた取組の推進



(3) 成果の利活用について

(1) 輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率化・低騒音化に関する研究開発

既述のごとく、「流体機器設計の概念を変える」という大きな目標があり、5年間の成果はその可能性を示す一里塚である。その意味で、国内外における学会発表によって、本技術の可能性を広く知らしめていくことが基本的な成果利活用の戦略といえる。とはいえ、本研究は「ものづくり」分野の1課題であり、剥離制御による性能向上という直近の実用技術としての普及も大切と考える。そこで、中間評価の指摘事項の回答に記載したように、2013年9月に日本機械学会流体工学部門に流体制御の研究会を立ちあげた。本研究会を様々な企業との議論や情報交換の場と位置づけ、成果の普及に努めている。研究会を母体として、機械学会のシンポジウムにおけるプラズマアクチュエータセッションの企画、また研究会独自のシンポジウムもすでに3回を数え、毎回50名以上(企業から10名以上)の参加者が集まっている。プラズマアクチュエータの標準モデルの策定なども議論している。

本課題はプロダクトイノベーションが主目的なので、ソフトウェアの直接的な普及は想定していないが、必要になった段階でシミュレーションの機能を分野4で整備中のプラットフォームに入れ込むことを想定している。なお、研究内容を広く知っていただくように、当該課題のウェブサイトを作成し、関連研究成果の公開に努めている。現在、これまで得られた結果(翼型形状、プラズマアクチュエータのパラメータなど設計変数と出口としての空力性能向上結果などのデータをデータベースとして誰でも利用できるよう、ウェブサイトに掲載する作業を進めており、3月末までには公開する予定である。

(2) 次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発

1) 実用化に向けた方策

- ・ものづくり現場との共同研究の実施
- ・最先端研究開発支援プログラム「グリーン・ナノエレクトロニクス」のコア技術開発(産業技術総合研究所横山プロジェクト)
 - グラフェン・デバイスに関する共同研究を実施中
- ・(株)東芝 研究開発センター
 - パワーデバイスに関する共同研究を実施中

2) 解析ソフトウェアの普及方策

- ・ワークショップ開催: 年1回程度(H24.10.29、H25.09.02)
- ・利用者セミナー開催: 不定期に開催(H25.05.21)
- ・インターネットによる情報発信活動: ポータルサイト設置・運用

(3) 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発

- ・日産、スズキ、本田 R&D 等のコンソーシアムメンバーが主体となって、HPCI システム利用研究課題に応募し、開発したシステムを用いて各社で個別の実証解析を行っている(一部有償利用)。その際、研究機関メンバーは一部を利用サポートすると共に、産業界メンバーは利用状況をコンソーシアムに還元することで、システム利用技術の普及展開と、各社個別の利用環境への対応、

システムのロバストネスの向上を図っている。

- ・「ターボ機械 HPC プロジェクト」を形成し、開発中のシステムに関するディスカッション、試用などを進めている。
- ・ 燃焼・ガス化コンソーシアムを形成し、開発中のソフトウェアに関するディスカッション、試用などを進めている。日本燃焼学会において燃焼解析プラットフォームとすべく普及活動を実施中。

(4) 多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発

本研究開発課題の最終的な目標は、京を使った多目的設計探査の有用性を実設計問題で実証することで、京クラスのコンピュータが産業界でも利用可能になる 2020 年代に産業界のさまざまな分野で多目的設計探査が使われるようになり、日本の産業競争力が強化されることである。そのためには今回得られた成果について産業界に広く周知していく必要があると考えられる。そのためにこれまでもシンポジウムやセミナー、企業での講演を積極的に行い、学術雑誌等での解説記事も可能な限り執筆するとともに、本研究課題のウェブサイトを作成し成果を公開している。また、初めての試みとして、今回得られた成果を動画にまとめ youtube で公開したが、これまでに約6000の視聴があり、成果の普及に一定の貢献を果たしたと考えられる。これらの結果、産業界でも多目的設計探査の有用性が認知され始めているようである。今回産業応用利用実証を行ったマツダ株式会社、東海旅客鉄道株式会社、横浜ゴム株式会社では今後も多目的設計探査を使っていく予定であると聞いている。

また、直接的な成果として、本研究開発課題で開発した3つの設計データの解析ソフト「ADVICE」「iSPM」「STV」を本研究課題のウェブサイトで公開している。そのうちの1つ iSPM は現在 18 社 8 大学でダウンロードされ活用されている。本研究開発課題で開発した多目的設計最適化アプリ Cheetah も HPC/PF に実装し一般への公開を平成27年度より開始した。

(5) 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発

FIESTA は、原子力機構の本年度更新した新たなスーパーコンピュータ上で、動作するように移植する計画である。移植後は、コード利用が可能ないように利用公開を計画している。本プロジェクトで連携した企業とは、共同研究等の研究協力を継続するように努め、企業での利用に積極的に関与していく計画である。

(6) 計算科学推進体制構築

(6-1) 計算機資源の効率的マネージメント

実証研究課題公募事業で実施した課題から提出された利用成果報告書は、HPC 次世代ものづくりプラットフォーム(HPC/PF)の知識ベースとして登録し、実証計算例としての知見を公開することを予定している。

(6-2) 研究成果の普及

(6-2-1) HPC/PF 開発整備

HPC/PF は様々なコンポーネント群で構築されるシミュレーション環境である。現時点では、種々のライブラリやアプリケーションの開発整備に停まっているが、プロジェクトの後半、京関連のユーザ

に向けて開発したソフトウェアの利用セミナーなどを1～2ヶ月に一度の頻度で企画しており、普及を図っていく計画である。

(6-2-2) HPC/PF 向け圧縮性流体解析プログラム UPACS の開発

計算科学推進体制構築自体が成果の利活用を促進する方策であり、産業界を対象としたコンソーシアムを構築し、成果の継続的な普及を推進している。

(6-2-3) 階層型直交格子を用いた実用複雑系流体解析システム「FFV」の整備

普及施策の一つとして自動車コンソーシアムを形成し、開発中のシステムに関するディスカッション、試用などを進めている。

(6-2-4) 共通基盤技術(核融合)

本業務で開発した基盤技術については、その知見を国内外の主要会議、国際論文誌等で広く公表するとともに、HPC 次世代ものづくりプラットフォーム(HPC/PF)の知識ベースとしても整備することによって成果の普及を図った。また、遠隔可視化システムについては、オープンソースソフトウェアとして公開するとともに、主要国際会議でチュートリアル(ハンズオンセミナー)を実施することによって国内外のユーザに成果の普及を図った。

(6-2-5) 並列 FEM 構造解析ソフト「FrontISTR」高度化の検討

FrontISTR 普及と維持・発展を目指して、平成 24 年度末から「FrontISTR 研究会」(ホームページ <http://www.multi.k.u-tokyo.ac.jp/FrontISTR/>) の運営が開始された。FrontISTR システム(ソルバーだけでなく、プリ・ポストも含む)のユーザーが要望する機能追加・不具合修正・最新版配布・利用促進、解析データの維持管理などを行う。平成 24 年 4 月から平成 27 年まで 24 回の定例研究会を計画・実施した。定例研究会では、非線形実問題のスーパーコンピューティングの研究成果を定例研究会で発表したり(非線形解析の理論、プログラミング、スパコン上での実行方法などの解説も含む)、大学・企業・研究機関との研究者たちの非線形解析に関する情報交換を行える場を提供したりしている。平成 27 年 1 月時点で、FrontISTR 研究会の登録メンバー数は 179 名、参加企業数は 92 社である。

(6-2-6) 「FrontCOMP」の高度化

HPC ユーザー会「FrontCOMP 分科会」を設置し、高度化の方向性を議論するとともに、ユーザー層の拡大を行った。また、NEDO 事業等の他プロジェクトにおいて FrontCOMP を活用し、燃料電池自動車用高圧水素容器の開発に貢献している。

(6-2-7) バイオ分子シミュレータ「ABINIT-MP」高度化の検討

ABINIT-MP/BioStation Viewer は、生研の一連のソフトウェア関係プロジェクトの中で研究開発の枠組みが維持され、機能の拡充やベンチマーク計算を行うことができた。さらに、理論創薬や生物物理化学、さらにナノバイオや高分子系の多種多様な問題に対して先導的な実証的な応用研究も自グループで実施して、FMO 計算の実用性と利便性をアピールすることもできた(Phys. Chem. Chem. Phys., 16, 10310-10344 (2014) に自レビューとして報告)。こうした例示もあり、ABINIT-MP

の一般の利用者はとりわけ製薬関係の企業や大学・国研の研究室で着実に増加してきたのだが、その外部的な成果の一つが「京」での ABINIT-MP の活用に連動した「FMO 創薬コンソーシアム」（代表：福澤薫）として結実したのは特記される。ナノバイオ系の応用計算でプレス発表を2件実施できたことも、広報的には有益であったと。また、高分子の粗視化シミュレーションとの連携させた高分子モデリングの試みがポスト「京」プロジェクト重点課題6での ABINIT-MP 関係の研究開発に「接続」できたことはきわめて重要である。

(6-5) 分野を超えた取組の推進

開発した基盤技術は、アウトリーチサイトを通して広く普及させることを計画している。また、プログラム開発者や企業ユーザ、学生などを対象とした「ものづくり技術セミナー（仮称）」を計画している。ものづくり技術に関連するソフトウェア技術の紹介や意見交換を通して、開発した技術の普及とニーズの吸い上げを行い、今後の開発方針の参考にする。

4. 今後の展望

(1) 輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率化・低騒音化に関する研究開発

何よりも機械学会流体工学部門に設置した「プラズマアクチュエータ研究会」を母体として産学連携の動きを継続、加速していく。同時に、複数企業との共同研究を継続するとともに、科学研究費補助金基盤研究 A「DBD プラズマアクチュエータの実利用に向けた性能実証に関する研究」（2015-2017、代表者：藤井孝藏）の中で更なる研究を進めていく。

当該分野、特に風車への応用に向けた各種実験や理論で世界の先端を行くオランダのデルフト工科大学から共同研究締結の依頼があり、産業界も含めた共同研究の締結を準備している。また、米国ではフロリダ大学、フロリダ州立大学、オハイオ大学を中心に流体制御の研究を推進する議論集団が形成され、本課題代表者も参加を依頼されている。ここでは、ベンチマーク用の課題を準備しており、これを世界的に実施することで流体制御の研究を加速することが期待されている。

また、模型飛行機にプラズマアクチュエータをつけ、実フライトにおけるフライトマニューバを進める研究を準備しており、5 月頃に募集される競争的資金を申請して研究を加速したいと考えている。競争的資金との関係もあるが、この研究はある航空機メーカーとの共同研究下で実施される可能性が高い。

本課題で採用したポスドク研究員は、今後もそれぞれの（新たな）立場で、本研究課題に一部の時間を割けられることを確認している。本研究はアカデミックな研究を産業界の意識改革に利用することを目指したプロダクトイノベーションの入り口研究であり、現時点で中長期的に期待される経済効果を議論する立場にはないが、企業の競争力強化と話題性という意味で少なからぬ社会的効果は十分に期待できると考えている。

(2) 次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発

計算科学手法の開発に関しては、第一原理プログラム PHASE/0 の開発を継続的に進めるとともに、メソスケール解析手法との連携を深めて、研究者・技術者が普段使い出来る材料・デバイス設計ツールボックスの構築を目指す。また、本課題で構築したコンソーシアムを中核に研究者コミュニティを拡大し、パワーデバイス材料等の次世代半導体材料に加えて多様な実用材料への適用を通じた産業界への展開を加速し、ものづくり現場での計算科学シミュレーションの活用を促進する。

(3) 乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発

- ・ プリ処理からポスト処理までの時間をさらに加速することで、システムの最適化設計への展開を図る。特に連成解析における解法の統一化を行い、システムの高高速化を行う。
- ・ 本課題で開発した技術の実用化を進める。ここで開発した技術は車、ターボ機械、船舶、燃焼器の分野でその実用化の準備が。例えば、ターボ機械関連では、プロジェクト期間中に実施された「ターボ機械 HPC プロジェクト」のワーキンググループで構成される分科会においてシステムの利活用が検討されている。船舶関連では、日本造船技術センタが中心とする中小造船メーカが独自にシステムの検証計算を開始している。これらの取り組みを加速するため、流れソルバーのさらなる高速化、自動メッシュ作成機能等のシステムの機能拡張を行う必要がある。
- ・ 次世代燃焼・ガス化設計システムをより複雑な系、条件に対しても適用可能なものに拡張していく。具体的には、液体燃料の微粒化や石炭灰の溶融等を対象にした固気液三相計算、数百気圧程度の超臨界燃焼条件に適用可能な計算が可能となるようなシステムを目指す。また、日本燃焼学会等を通して、本システムを広く紹介、展開すると共に、利用者拡大にも努め、本システムの更なる高精度化、利用普及に努める。

(4) 多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発

本研究開発課題では、多目的設計探査を構成する(1)多目的設計最適化手法、(2)応答曲面近似手法、(3)データマイニング手法の研究開発、に取り組み、実際の製品設計プロセスにおいて頻繁に直面する大規模多目的設計最適化問題に適用可能な新しい多目的設計探査技術を開発した。また、JAXA や他課題、企業と共同研究を進めながら、京を用いて実問題における有効性を実証した。その結果は各種シンポジウムや学術雑誌解説記事等で発表している。また、3.4.2-4節で述べたロケット射点形状の空力音響設計探査については youtube[15]に紹介動画を掲載し 2016 年 1 月現在約 6000 視聴がなされている。これらの発表・広報活動により産業界でも多目的設計探査が認知されつつある。また、多目的設計探査を実施することを目的の 1 つとしてスーパーコンピュータの導入を検討している会社もあると聞く。今後は「京」クラスの計算機資源が企業でも利用可能になってくる 2020 年代にここで開発された多目的設計探査技術が製品の設計開発等に活用され、日本のものづくりが革新されていくことを期待する。

一方、多目的設計探査の新たな課題も明らかになった。1つはターンアラウンドタイムがかかりすぎることである。たとえばマツダ株式会社と実施した自動車車両構造の多目的設計探査の場合、ジョブの待ち時間も考慮すると 1 世代あたり約 1 週間を必要とした。ポスト京コンピュータでは京よりもノード数が増えることが期待されることから、並列計算ノード数は増やしつつも、パレート最適解が得られるまでに必要とされる世代数を大幅に削減するような多目的設計最適化アルゴリズムが望まれると考える。また、制約条件が厳しい多目的設計最適化問題でも効率的にパレート最適解をえるような多目的設計最適化アルゴリズムの開発も必要であろう。設計の上流段階での多目的設計探査や製造誤差等を考慮した多目的設計探査を可能にする不確定性定量評価技術も今後注目されてくると予想される。また、今後さらにデータ規模が大きくなると考えられるパレート最適解データのデータマイニング手法の開発も重要な研究開発課題であろう。

(5) 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発

高温工学試験研究炉の安全審査申請手続き等に協力し、従来シミュレーションに加え、本技術を

適用し、俯瞰的な耐震裕度計算とプラント各部ごとの詳細な計算結果を提示したことにより、技術的だけでなく事業的な意味も含めて、大きく寄与できたと考える。現在、安全審査に向けた手続きは継続中であるが、引き続き、審査を補強する計算例等を算出していく計画である。

5. その他

(1) 輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率化・低騒音化に関する研究開発

研究の学術的な部分は世界の中で評価されるべきで、国際評価を実施する必要がある。そこで、当該分野で世界をリードする3名の研究者に国際評価を依頼した。当初、彼らを日本に招いてワークショップを開催予定であったが、予算等の制限から、個別に資料を送付し、国際会議や直接訪問の機会を利用して face to face で成果概要を説明して評価を行っていただいた。現在、レビュー結果の送付待ちで1月中にはすべて受け取れる予定である。これらの結果を本最終報告の添付資料としたい。

評価者は以下の3名である。オハイオ大学はプラズマアクチュエータでは全米をリード、フロリダ州立大学では流体制御分野で大きなプロジェクトが進行中、デルフト工科大学はプラズマアクチュエータと風車の研究で欧州の先頭を行く研究グループである。評価者のうち2名は比較的若いですが、流体制御やプラズマアクチュエータの分野では高い評価を有しており、当該分野で高い知名度を有する研究者であることはウェブ等で情報確認していただければわかる。

(1) Prof. Datta Gaitonde

Department of Mechanical and Aerospace Engineering
Ohio State University, U. S. A.

(2) Dr. Kunihiko Taira, Assistant Professor

Department of Mechanical Engineering
Florida State University, U. S. A.

(3) Dr. Marios Kotsonis, Assistant Professor

Faculty of Aerospace Engineering
Delft University of Technology, The Netherland

なお、フランスポワチエ大学の Eric Moreau 教授と Nicolas Benard 准教授にも依頼を想定し、本レビューのために11月に訪問と 세미나 講演を予定していたが、直前のパリでのテロの影響で出張が中止となり今回の報告に入れることはできなかった。

(5) 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発

計算に用いたデータは、実機のデータであるため、公開等においては、都度、使用許諾を得る必要がある。

1 研究成果の発表

研究開発課題1: 輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高効率化・低騒音化に関する研究開発

代表者 藤井孝蔵

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌名等）	発表した時期	国内・国際 の別	査読（有りの場合 ○を記入）
1	Effect of interval of spanwise-modulated local forcing on mechanisms of flow separation control	A. Yakeno, Y. Abe, S. Kawai, T. Nonomura and K. Fujii	selected as a special issue of International Journal of Heat and Fluid Flow	2016	国際	○
2	Control of dynamic flowfield around a Pitching NACA633-618 Airfoil by a DBD plasma actuator	H. Fukumoto, H. Aono, T. Watanabe, N. Tanaka, H. Matsuda, T. Ohsako, T. Nonomura, A. Oyama, K. Fujii	selected as a special issue of International Journal of Heat and Fluid Flow	2016	国際	○
3	Conservative high-order conservative flux-reconstruction scheme on moving and deforming grids,	Y. Abe, T. Haga, T. Nonomura and K. Fujii,	Computers & Fluids, accepted for publication	2016	国際	○
4	Numerical study of plasma dynamics and electrohydrodynamic effect in DBD plasma actuator	H. Nishida, T. Nonomura and T. Abe	International Journal of Plasma Environmental Science and Technology	accepted for publication 2015	国際	○
5	Computational studies on flow separation controls at relatively low Reynolds number regime, " Proc. of IUTAM Symposium "Advances in computation, modeling and control of transitional and turbulent flows	K. Fujii	World Scientific	2015/11	国際	○
6	Numerical study on spanwise nonuniformity in body-force field of dielectric-barrier-discharge plasma actuator	H. Nishida, T. Nonomura and T. Abe	AIAA Journal, doi: 10.2514/1.J054315	2015	国際	○
7	Multifactorial effects of operating conditions of dielectric-barrier-discharge plasma actuator on laminar-separated-flow control	M. Sato, K. Okada, H. Aono, A. Yakeno, K. Asada, T. Nonomura, and K. Fujii	AIAA Journal, Vol. 53(9), pp. 2544-2559	2015	国際	○
8	Generation of acoustic disturbances in supersonic laminar cavity flows	W. Li, T. Nonomura, and K. Fujii	International Journal of Acoustics and Vibration Vol.20, No. 3, pp. 135-142	2015	国際	○
9	Computational and experimental analysis of flow structures induced by a plasma actuator with burst modulations in quiescent air	H. Aono, S. Sekimoto, M. Sato, A. Yakeno, T. Nonomura and K. Fujii	Bulletin of the JSME Mechanical Engineering Journal Vol.2, No.4 pp. 1-16	2015	国際	○
10	Separation-control based on turbulence transition around 2D hump at different Reynolds numbers	A. Yakeno, S. Kawai, T. Nonomura and K. Fujii	International Journal of Heat and Fluid Flow, Vol. 55, pp. 52-64	2015	国際	○
11	The effects of actuation frequency on the separation control over an airfoil using a synthetic jet	Y. Abe, K. Okada, T. Nonomura, and K. Fujii	Progress in Flight Physics, TORUS PRESS, Vol.7, pp.147-168	2015	国際	○
12	LES of transient flows controlled by DBD plasma actuator over a stalled airfoil	K. Asada, T. Nonomura, H. Aono, M. Sato, K. Okada and, K. Fujii	International Journal of Computational Fluid Dynamics Vol. 29, pp. 215-229	2015	国際	○
13	Mechanisms for laminar separated-flow control using dielectric-barrier-discharge plasma actuator at low Reynolds number	M. Sato, T. Nonomura, K. Okada, K. Asada, H. Aono, A. Yakeno, Y. Abe, and K. Fujii	Physics of Fluids Vol. 27 (117101)	2015	国際	○
14	Comparison of numerical methods evaluating airfoil aerodynamic characteristics at low Reynolds number	D. Lee, T. Nonomura, A. Oyama, K. Fujii	Journal of Aircraft Vol. 52, No. 1, pp.296-306	2015	国際	○
15	Mechanisms of surface pressure distribution within a laminar separation bubble at different Reynolds numbers	D. Lee, S. Kawai, T. Nonomura, M. Anyoji, H. Aono, A. Oyama, K. Asai, K. Fujii	Physics of Fluids Vol. 27 (023602)	2015	国際	○

16	On the freestream preservation of high-order conservative flux-reconstruction schemes	Y. Abe, T. Haga, T. Nonomura and K. Fujii	Journal of Computational Physics Vol.281, pp. 28-54	2015	国際	○
17	A new technique for freestream preservation of finite-difference WENO on curvilinear grid	T. Nonomura, Daiki Terakado, Y. Abe and K. Fujii	Computers & Fluids 107 (2015) 242-255	2015	国際	○
18	二次元ハンプ剥離後流渦への周期的制御振動周波数の影響	A1. 焼野藍子, 河合宗司, 野々村拓, 藤井孝藏	ながれ, Vol. 34, pp. 97-102	2015	国内	
19	流体制御を利用した輸送システム・流体機器設計概念の革新を目指して —「京」利用による流れ現象理解と制御パラメータの発見	藤井孝藏, 野々村拓, 青野光, 佐藤允, 焼野藍子	計算工学会Vol20. No4.	2015	国内	
20	プラズマアクチュエータの動向—はじめに—	野々村拓, 瀬川武彦, 深湯康二, 松野隆, 清水一男, 白石裕之	プラズマ核融合学会誌第91巻10号p648-650	2015	国内	
21	プラズマアクチュエータの動向—DBD プラズマアクチュエータの作動原理と基本特性—	西田浩之, 清水一男, 安部隆士, 小方聡	プラズマ核融合学会誌第91巻10号p651-656	2015	国内	
22	プラズマアクチュエータの動向—基礎的な流れ場に対する実験的・数値的研究—	深湯康二, 青野光, 藤井孝藏, 山田俊輔, 石川仁, 松野隆	プラズマ核融合学会誌第91巻10号p657-660	2015	国内	
23	プラズマアクチュエータの動向—流体計測法—	松野隆, 本阿弥真治, 藤井孝藏, 関本諭志, 飯田明由	プラズマ核融合学会誌第91巻10号p661-664	2015	国内	
24	プラズマアクチュエータの動向—まとめ—	野々村拓, 瀬川武彦, 深湯康二, 松野隆, 清水一男, 白石裕之	プラズマ核融合学会誌第91巻10号p671-673	2015	国内	
25	革新的流体制御技術の研究開発「京」大規模計算によるマイクロデバイス	藤井孝藏, 野々村拓, 青野光, 佐藤允, 焼野藍子	ターボ機械, 2014年5月号内4ページ	2014	国内	
26	シンセティックジェットの無次元パラメータ効果の数値解析	岡田浩一	日本航空宇宙学会誌 62(3), 72, 2014-03-05	2014	国内	
27	DBDプラズマアクチュエータを用いたよく剥離制御の大規模パラメトリックスタディ	佐藤允, 岡田浩一, 青野光, 焼野藍子, 野々村拓, 藤井孝藏	ながれ, Vol. 32 pp. 145-148	2013	国際	○
28	シンセティックジェットによる流れの能動制御	大山聖, 岡田浩一, 浅田健吾, 野々村拓, 宮路幸二, 藤井孝藏	日本航空宇宙学会誌, Vol. 61(2), pp. 57-63	2013	国内	
29	Computational and experimental analysis of a high performance airfoil under low-Reynolds-number flow condition	M. Anyoji, T. Nonomura, H. Aono, A. Oyama, K. Fujii, H. Nagai and K. Asai	Journal of Aircraft, Vol. 51(6), pp. 1864-1872	2014	国際	○
30	High-performance computing based exploration of flow control with micro devices	K. Fujii	Philosophical Transaction A, Vol.372, 20130326	2014	国際	○
31	Three-dimensional simulations of discharge plasma evolution on a dielectric barrier discharge plasma actuator	H. Nishida, T. Nonomura, A. Takashi	Journal of Applied Physics, Vol. 115, 133301	2014	国際	○
32	Geometric interpretations and spatial symmetry property of metrics in the conservative form for high-order finite-difference schemes on moving and deforming grids	Y. Abe, T. Nonomura, N. Iizuka and K. Fujii	Journal of Computational Physics, Vol.260, pp.163-203	2014	国際	○

33	Analysis of owl-like airfoil aerodynamics at low Reynolds number flow	K. Kondo, H. Aono, T. Nonomura, M. Anyoji, T. Liu, A. Oyama, K. Fujii and M. Yamamoto	Transactions of JSASS Space Technology Japan, Vol. 12(ists29), pp. Tk_35-Tk_40	2014	国際	○
34	Control surface effectiveness of low Reynolds number flight vehicles	M. Anyoji, M. Okamoto, H. Hidaka, K. Kondo, A. Oyama, H. Nagai, K. Fujii	Journal of Fluid Science and Technology, Vol. 9, No.5, paper No. 14-00176	2014	国内	○
35	Numerical study of vortex flow control on high-angle-of-attack slender body	M. Satoh, H. Nishida and T. Nonomura	Transactions of JSASS, Aerospace Technology Japan 12, No. ists29, Pe_43-Pe_49	2014	国内	○
36	Scalar tuning of a fluid solver using compact scheme for a supercomputer with a distributed memory architecture	H. Aono, T. Nonomura, N. Iizuka, T. Ohsako, T. Inari, Y. Hashimoto, R. Takaki and K. Fujii	CFD letters, Vol5(4), pp.143-152	2013	国際	○
37	Robust explicit formulation of weighted compact nonlinear scheme	T. Nonomura and K. Fujii	Computers & Fluids, Volume 85, Pages 8-18	2013	国際	○
38	Scaling analysis of propeller-driven aircraft for mars exploration	T. Liu, A. Oyama and K. Fujii	Journal of Aircraft, Vol. 50(5), pp. 1593-1604	2013	国際	○
39	Mechanism of controlling supersonic cavity oscillations using upstream mass injection	W. Li, T. Nonomura, and K. Fujii	Physics of Fluids, Vol25, 086101	2013	国際	○
40	On the feedback mechanism in supersonic cavity flows	W. Li, T. Nonomura and K. Fujii	physics of Fluids, American Physical Society, Vol.25, pp.056101	2013	国際	○
41	Large-eddy simulation of low-Reynolds-number flow over thick and thin NACA airfoil	R. Kojima, T. Nonomura, A. Oyama and K. Fujii	Journal of Aircraft, Vol. 50, pp. 187-196	2013	国際	○
42	Computational analysis of vortex structures induced by a synthetic jet to control separated flows	K. Okada, T. Nonomura, K. Fujii and K. Miyaji	International Journal of Flow Control, Vol. 4, pp45-46	2013	国際	○
43	Conservative metric evaluation for high-order finite difference schemes with the GCL identities on moving and deforming grids	Y. Abe, N. Iizuka, T. Nonomura and K. Fujii	Journal of Computational Physics, Vol. 232, pp.14-21	2013	国際	○
44	An effective three-dimensional layout of actuation body force for separation control	I. Kaneda, S. Sekimoto, T. Nonomura, K. Asada, A. Oyama, and K. Fujii	International Journal of Aerospace Engineering, Vol.2012, Article ID 786960	2012	国際	○
45	Numerical investigation of asymmetric separation vortices over slender body by RANS/LES hybrid simulation	R. Inaba, H. Nishida, T. Nonomura, K. Asada and K. Fujii	Transactions of the Japan Society for Aeronautical and Space Sciences, Aerospace Technology Japan, vol. 10(2012) no. ists28, pp. pe_89_96	2012	国際	○
46	Role of RANS hybrid and LES for wing flow simulations at relatively low reynolds numbers	K. Fujii	Springer Book, Progress in Hybrid RANS-LES Modeling, Ed. by Song Fu et al. pp. 45-57	2012	国際	○
47	Computational study of effects of nondimensional parameters on synthetic jets	K. Okada, K. A. Oyama, K. Fujii, K. Miyaji	Transactions of the Japan Society for Aeronautical and Space Sciences, 2012, vol. 55, pp.1-11	2012	国際	○

2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会名等）	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 （○を記入）
	* 国際会議等の基調講演は受賞等の欄に記載					
1	輸送機器・流体機器の流体制御による革新的効率化・低騒音化に関する研究開発	藤井孝蔵	第6回次世代ものづくりシンポジウム（最終成果報告会）	2016/3	国内	
2	Conservative flux-reconstruction schemes towards high-fidelity flow simulation around complex geometries	Y. Abe, T. Haga, T. Nonomura, I. Morinaka, K. Miyaji, and K. Fujii,	Workshop on Next Generation Transport Aircraft 2016	2016/2	国際	
3	流体輸送機器に対するマイクロデバイスをを用いた流体制御の大規模シミュレーション	野々村拓	スーパーコンピュータの今とこれから	2016/1	国内	
4	Significance of computational spanwise domain length on LES for the flowfield with large vortex structure	H. Fukumoto, H. Aono, T. Nonomura, A. Oyama and K. Fujii	AIAA Scitech 2016	2016/1	国際	
5	Experimental study of effects of frequency for burst wave on a DBD plasma actuator	S. Sekimoto, T. Nonomura, K. Fujii	AIAA Scitech 2016	2016/1	国際	
6	DBDプラズマアクチュエータによるフィードバック剥離制御法の検討～第一報～	小川拓人, 浅田健吾, 立川智章, 藤井孝蔵	日本機械学会流体工学部門A-TS05-24研究会”プラズマアクチュエータ研究会-第3回シンポジウム	2015/12	国内	
7	自己組織化マップを用いた圧力欠損データの補完～第一報～	加藤雄介, 立川智章, 藤井孝蔵	日本機械学会流体工学部門A-TS05-24研究会”プラズマアクチュエータ研究会”第3回シンポジウム	2015/12	国内	
8	PA単体シミュレーション/体積力推定の進展	西田浩之, 野々村拓, 青野光	日本機械学会流体工学部門A-TS05-24研究会”プラズマアクチュエータ研究会”第3回シンポジウム	2015/12	国内	
9	DBDプラズマアクチュエータと シンセティックジェットを用いた翼周りに剥離流れの制御効果の比較	阿部圭晃, 佐藤允, 野々村拓, 藤井孝蔵	第29回数値流体力学シンポジウム	2015/12	国内	
10	大規模渦構造を伴う翼周りに流れ場の LES の解析におけるスパン方向計算領域の影響について	福本浩章, 青野光, 田中元史, 松田寿, 大迫俊樹, 野々村拓, 大山聖, 藤井孝蔵	第29回数値流体力学シンポジウム	2015/12	国内	
11	複数の分岐・合流部を有するチャンネル流れ制御におけるプラズマアクチュエータ設置位置の効果	焼野藍子, 佐野正利, 野々村拓, 阿部圭晃, 藤井孝蔵	第29回数値流体力学シンポジウム	2015/12	国内	
12	DBDプラズマアクチュエータによる 低レイノルズ数・高性能翼型の剥離制御	松原暁良, 関本諭志, Taufik Sulaiman, 野々村拓, 藤井孝蔵, 西田浩之	第93回日本機械学会流体工学部門講演会	2015/11	国内	
13	Fully resolved large-eddy simulation of a compressor cascade clearance flow	T. Ouchi, S. Teramoto and K. Okamoto	IGTC2015	2015/11	国際	
14	プラズマアクチュエータを用いた流体機器の流れ制御に関するLES解析	青野光	日本機械学会RC-D15研究会	2015/10	国内	
15	マイクロデバイスをを用いた輸送機器・流体機器の流体制御に関するLES	佐藤允	第37回LES研究会	2015/9	国内	
16	Effect of interval of spanwise-modulated local forcing on mechanisms of flow separation control	A. Yakeno, Y. Abe, S. Kawai, T. Nonomura and K. Fujii	Turbulence Heat and Mass Transfer (THMT'15)	2015/9	国際	

17	DBDプラズマアクチュエータを用いた低レイノルズ数における翼剥離制御の実験的パラメトリックスタディ	松原暁良, 関本諭志, Taufik Sulaiman, 野々村拓, 藤井孝蔵, 西田浩之	日本流体力学会 2015 年度年次大会	2015/9	国内	
18	低レイノルズ数領域における高性能翼と剥離制御された単純翼の空力性能の比較	浅野兼人, 佐藤允, 野々村拓, 大山聖, 藤井孝蔵	日本機械学会 2015 年度年次大会	2015/9	国内	
19	複数のプラズマアクチュエータを用いた翼周りに剥離制御のLES	佐藤允, 加藤宏基, 青野光, 焼野藍子, 野々村拓, 藤井孝蔵	日本機械学会 2015 年度年次大会	2015/9	国内	
20	DBDプラズマアクチュエータのバースト駆動における剥離制御メカニズムの実験研究	関本諭志, 野々村拓, 藤井孝蔵	日本機械学会 2015 年度年次大会	2015/9	国内	
21	Validation of numerical analysis to estimate airfoil aerodynamic characteristics at low Reynolds number region	D. Lee, T. Nonomura, A. Oyama, K. Fujii	Proceedings of ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015	2015/7	国際	
22	Reynolds number dependence of airfoil shape and aerodynamic characteristics at low Reynolds number	D. Lee, T. Nonomura, A. Oyama, K. Fujii	30th International Symposium on space Technology and Science	2015/7	国際	
23	翼周りに剥離流れ制御におけるシンセティック ジェット駆動周波数と流れの不安定周波数の比較	阿部圭晃, 野々村拓, 藤井孝蔵	第47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	2015/7	国内	
24	Characteristics of pressure distribution and skin friction within the laminar separation bubble at different Reynolds numbers	D. Lee, S. Kawai, T. Nonomura, A. Oyama, K. Fujii	9th International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena	2015/6	国際	
25	Efficient evaluations of symmetric-conservative metrics for high-order finite-difference scheme on a rotating grid	Y. Abe, H. Aono, T. Nonomura, and K. Fujii	Frontiers in computational physics	2015/6	国際	
26	Contribution of large-scale vortex and fine-scale turbulent structure in separated flow control using DBD plasma actuator	K. Asano, K. Asada, H. Kato, M. Sato, T. Nonomura, A. Oyama and K. Fujii	AIAA Aviation 2015	2015/6	国際	
27	Fully-conservative high-order FR scheme on moving and deforming grids	Y. Abe, T. Nonomura, and K. Fujii	AIAA Aviation 2015	2015/6	国際	
28	A finite difference WENO scheme maintaining velocity, pressure and temperature equilibrium in multicomponent compressible fluid analysis	T. Nonomura, Daiki Terakado, and K. Fujii	AIAA Aviation 2015	2015/6	国際	
29	Control of dynamic flowfield around pitching NACA0012 and NACA633618 airfoils by a DBD plasma actuator	H. Fukumoto, K. Asano, H. Aono, T. Watanabe, M. Tanaka, H. Matsuda, T. Osako, T. Nonomura, A. Oyama, K. Fujii	5th International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows	2015/6	国際	
30	Linear stability analyses and large eddy simulations for acoustic wave generation mechanism of a transitional supersonic jet	T. Nonomura and K. Fujii	5th International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows	2015/6	国際	
31	Two- and three-dimensional numerical analysis for flow field characteristics at various low Reynolds numbers	D. Lee, T. Nonomura, A. Oyama, K. Fujii	International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows	2015/6	国際	
32	HPCIが創る「流れ」の新展開。” 海洋地球インフォマティクス2015、地球シミュレータからの新しい展開	藤井孝蔵	国立研究開発法人海洋研究開発機構主催シンポジウム	2015/5	国内	○
33	遷移する超音速ジェットの乱れとそこから発生する音響波の特性	野々村拓, 藤井孝蔵	第46回航空宇宙学会年會講演会	2015/4	国内	

34	Control mechanism of DBD plasma actuator for deep-stall flows around NACA0015	H. Kato, M. Sato, H. Aono, A. Yakeno, T. Nonomura and K. Fujii	EDRFCM	2015/3	国際	
35	マイクロデバイスを用いた回転機器の流体制御に関するLES解析	青野光, 佐藤允, 焼野藍子, 野々村拓, 藤井孝藏	HPCI戦略プログラム分野4次世代ものづくり第2回統合ワークショップ	2015/3	国内	
36	ナノバルスプラズマアクチュエータが発生する衝撃波によるMO.3翼周リ剥離流れの制御	関本諭志, Taufik Sulaiman, 松原暁良, 田中直樹, 野々村拓, 藤井孝藏, 西田浩之	平成26年度衝撃波シンポジウム	2015/3	国内	
37	低レイノルズ数でのDBDプラズマアクチュエータを用いた翼剥離制御におけるバースト効果	加藤宏基, 田中直樹, 野々村拓, 藤井孝藏	日本航空宇宙学会北部支部2015年講演会	2015/3	国内	
38	圧縮機翼列流れのresolved LESとRANS の比較	大内 拓也, 寺本 進, 岡本 光司	第55回航空原動機・宇宙推進講演会	2015/3	国内	
39	HPC: 過去, 現在, 未来- CFDにおける限られた経験から -	藤井孝藏	東北大学サイバーサイエンスセンター新スーパーコンピュータシステム導入披露式典記念講演	2015/2	国内	○依頼特別講演
40	Design exploration of a DBD plasma actuator for massive separation control	T. Watanabe, H. Aono, T. Tatsukawa, T. Nonomura, A. Oyama, K. Fujii	AIAA Scitech 2015	2015/1	国際	
41	LES of separated-flow controlled by DBD plasma actuator around NACA 0015 over Reynolds number range of 10^4 - 10^6	M. Sato, H. Aono, A. Yakeno, T. Nonomura, K. Fujii	AIAA Scitech 2015	2015/1	国際	
42	Spatial growth of the spanwise disturbance induced by a synthetic jet on separation control over an airfoil	Y. Abe, T. Nonomura, and K. Fujii	AIAA2015 Scitech	2015/1	国際	
43	Numerical study of three-dimensional effects of plasma structure on flow field around DBD plasma actuator	H. Nishida, T. Nonomura and T. Abe	AIAA Scitech 2015	2015/1	国際	
44	DBD-PA: 現象理解とそれに基づく効果的制御法の提案へ	藤井孝藏	平成26年度航空宇宙空力シンポジウム	2015/1	国内	
45	3次元移動変形格子での高次精度保存型FR法における一様流保持	阿部圭晃, 芳賀臣紀, 野々村拓, 藤井孝藏	第28回数値流体力学シンポジウム	2014/12	国内	
46	DBDプラズマアクチュエータを用いた翼周リ剥離流れ制御における大規模渦構造と乱流微細構造の寄与—2次元計算と3次元LES計算の比較	浅野兼人, 浅田健吾, 加藤宏基, 佐藤允, 焼野藍子, 青野光, 野々村拓, 藤井孝藏(宇宙航空研究開発機構)	第28回数値流体力学シンポジウム	2014/12	国内	
47	$Re10^4$ - 10^6 におけるDBDプラズマアクチュエータを用いた翼周リ剥離制御のLES解析	佐藤允, 青野光, 野々村拓, 焼野藍子, 藤井孝藏, 岡田浩一, 浅田健吾,	第28回数値流体力学シンポジウム	2014/12	国内	
48	ピッチング翼周りの動的失速流れ制御におけるDBDプラズマアクチュエータ設置位置の影響	福本浩章, 浅野兼人, 青野光, 渡辺毅, 野々村拓, 大山聖, 藤井孝藏, 田中元史, 松田寿, 大迫俊樹	第28回数値流体力学シンポジウム	2014/12	国内	
49	二次元ハンプ剥離後流渦への周期的制御振動周波数の影響	焼野藍子, 河合宗司, 野々村拓, 藤井孝藏	第28回数値流体力学シンポジウム	2014/12	国内	
50	陰解法の時間刻みと収束率が圧縮性非定常流体解析の精度・効率に与える影響	青野光, 野々村拓, 河合 宗司, 藤井孝藏, 岡田浩一	第28回数値流体力学シンポジウム	2014/12	国内	

51	動的で高性能な流体力学形状設計を目指して	藤井孝藏	第5回「分野4次世代もの作り」シンポジウム	2014/12	国内	依頼
52	PA単体シミュレーションと問題提起	青野光, 関本諭志, 野々村拓, 藤井孝藏	日本機械学会流体工学部門A-TS05-24研究会”プラズマアクチュエータ研究会”第2回シンポジウム	2014/12	国内	
53	Mechanisms of pressure distributions within laminar separation bubble at different Reynolds numbers	D. Lee, S. Kawai, T. Nonomura, A. Oyama, K. Fujii	American Physical Society 67th Annual Meeting Division of Fluid Dynamics	2014/11	国際	
54	高次精度保存型 FR 法での一様流保持におけるエイリアシング誤差の除去	阿部圭晃, 野々村拓, 芳賀臣紀, 藤井孝藏	第 27 回計算力学講演会	2014/11	国内	
55	低レイノルズ数領域の翼型空力性能評価のための数値計算法の比較	李東輝, 野々村拓, 大山聖, 藤井孝藏	第 5 8 回宇宙科学技術連合講演会	2014/11	国内	
56	Large-eddy simulation of a two-meter, three-bladed simple wind turbine model controlled by a plasma actuator	H. Aono, M. Sato, A. Yakeno, T. Nonomura, K. Fujii, Y. Abe, K. Okada	11th International Conference on Flow Dynamics	2014/10	国際	
57	Wall-turbulence structure with adverse pressure gradient around 2D hump	A. Yakeno, S. Kawai, T. Nonomura and K. Fujii	iTi 2014 - Conference on Turbulence	2014/9	国際	
58	Separation-control based on turbulence transition around 2D hump at different Reynolds numbers	A. Yakeno, S. Kawai, T. Nonomura and K. Fujii	ETMM10	2014/9	国際	
59	2メーター直径3枚ブレード回転機器模型まわり剥離流れへのプラズマ気流制御効果に関する数値解析	青野光, 佐藤允, 焼野藍子, 野々村拓, 藤井孝藏, 阿部圭晃, 岡田浩一	日本機械学会2014年度年次大会	2014/9	国内	
60	DBDプラズマアクチュエータによる低レイノルズ数2次元翼周りに剥離制御の数値解析	加藤宏基, 阿部圭晃, 青野光, 野々村拓, 藤井孝藏	日本流体力学会年次大会2014	2014/9	国内	
61	静止気体中でプラズマアクチュエータが誘起する流れ場特性: 体積力モデルによる数値解析とシュリーレン可視化実験の比較と考察	青野光, 野々村拓, 藤井孝藏, 関本諭志	日本流体力学会年次大会2014	2014/9	国内	
62	DBDプラズマアクチュエータによる低レイノルズ数2次元翼周りに動的剥離制御の数値解析	加藤宏基, 阿部圭晃, 青野光, 野々村拓, 藤井孝藏	2014年度日本機械学会年次大会	2014/9	国内	
63	高レイノルズ数におけるDBDプラズマアクチュエータを用いた翼周りに乱流剥離制御のLES	佐藤允, 野々村拓, 青野光, 焼野藍子, 藤井孝藏, 浅田健吾	2014年度日本機械学会年次大会	2014/9	国内	
64	2次元圧縮機翼列のresolved LESとRANSの比較	大内拓也, 寺本進, 岡本光司	第42回日本ガスタービン学会定期講演会	2014/9	国内	
65	Recent CFD studies with the spectral-like high-order schemes and high performance computers	K. Fujii, Y. Abe and T. Nonomura	Workshop on Higher-Order Methods for Conservation Laws, Daejeon, Korea	2014/8	国際	○
66	Recent CFD studies with the spectral-like high-order schemes and high performance computers	Fujii, K., Abe, Y. and Nonomura T	Workshop on Higher-Order Methods for Conservation Laws	2014/8	国際	
67	HPC update in JAXA 2014	K. Fujii	53rd HPC User Forum	2014/7	国際	○
68	Many-objective evolutionary computation for optimization of separated-flow control using a DBD plasma actuator	T. Watanabe, T. Tatsukawa, Antonio Lopez Jaimes, H. Aono, T. Nonomura, A. Oyama, K. Fujii	IEEE WCCI 2014	2014/7	国際	

69	A dealiasing process for freestream preservation in a high-order conservative FR scheme,	Y. Abe, T. Nonomura, T. Haga and K. Fujii	7th International Conference on Computational Fluid Dynamics	2014/7	国際	
70	Freestream preservation on a high-order conservative FR scheme	Y. Abe, T. Haga, T. Nonomura and K. Fujii	6th European Conference on Computational Fluid Dynamics	2014/7	国際	
71	Flow control using a dbd plasma actuator for horizontal-axis wind turbine blades of simple experimental model	H. Aono, M. Sato, A. Yakeno, T. Nonomura, K. Fujii, Y. Abe, K. Okada	6th European Conference on Computational Fluid Dynamics	2014/7	国際	
72	Visualization of momentum added/induced by plasma actuator controlling separated flow over an airfoil	T. Nonomura, M. Sato, K. Okada, H. Aono, A. Yakeno, and K. Fujii	The 16th International Symposium on Flow Visualization	2014/6	国際	
73	Effective mechanisms for turbulent-separation control by DBD plasma actuator around NACA0015 at Reynolds number 1,600,000	M. Sato, T. Nonomura, H. Aono, A. Yakeno, K. Fujii	44th AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit	2014/6	国際	
74	LES on turbulent separated flow around NACA0015 at Reynolds number 1,600,000 toward active flow control	K. Asada, M. Sato, T. Nonomura, S. Kawai, H. Aono, A. Yakeno and K. Fujii	32nd AIAA Applied Aerodynamics Conference	2014/6	国際	
75	Numerical study of plasma dynamics and electrohydrodynamic effect in DBD plasma actuator	H. Nishida, T. Nonomura and T. Abe	International Symposium on Electrohydrodynamics 2014	2014/6	国際	
76	Impact of HPC over the Recent CFD Study for Practical Engineering Problems	K. Fujii and M. Koishi	International Meeting on HPC Applications and Systems: NUG XXVI May2014, Lugano, Switzerland	2014/5	国際	
77	大迎角細長物体におけるDBDプラズマアクチュエータを用いた横力制御方法の数値的研究	西田浩之, 佐藤雅幸, 野々村拓	日本航空宇宙学会 第45期定時社員総会/年会講演会	2014/4	国内	
78	マイクロデバイスを用いた輸送機器・流体機器の流体制御に関するLarge-eddy simulation	佐藤允, 岡田浩一, 青野光, 焼野藍子, 野々村拓, 藤井孝藏	分野4次世代ものづくり第1回統合ワークショップ	2014/3	国内	
79	プラズマアクチュエータ数値解析のレビュー:物理モデルと数学モデル	西田浩之, 野々村拓, 青野光	日本機械学会流体工学部門A-TS05-24研究会”プラズマアクチュエータ研究会”キックオフシンポジウム	2014/3	国内	
80	Effect of Strouhal number and Reynolds number on flow control authority of DBD plasma actuator on NACA0012 airfoil	T. Sulaiman, H. Aono, S. Sekimoto, M. Anyoji, T. Nonomura and K. Fujii	52nd AIAA Aerospace Sciences Meeting	2014/1	国際	
81	Effects of burst frequency and momentum coefficient of DBD actuator on control of deep-stall flow around NACA0015 at $Rec=2.6 \times 10^5$	H. Aono, K. Okada, T. Nonomura, S. Kawai, M. Sato, A. Yakeno and K. Fujii	52nd AIAA Aerospace Sciences Meeting	2014/1	国際	
82	DBD plasma actuator design for flow separation control by the LES with compact difference scheme	K. Fujii	5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics & 4th International Symposium on Computational Mechanics	2013/12	国際	○
83	Computational study of Reynolds number effect on owl-like wing aerodynamics at low Reynolds numbers	K. Kondo, H. Aono, T. Nonomura, A. Oyama, K. Fujii and M. Yamamoto	5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics & 4th International Symposium on Computational Mechanics	2013/12	国際	
84	Separated-flow control by DBD plasma actuator around airfoils at Reynolds number 63,000	M. Sato, K. Okada, H. Aono, A. Yakeno, K. Asada, Y. Abe, T. Nonomura and K. Fujii	5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics & 4th International Symposium on Computational Mechanics	2013/12	国際	

85	回転するタイヤから発生する空力音の解析 (Re=100000)	阿部圭晃, 野々村拓, 近藤勝俊, 飯田大貴, 渡辺毅, 池田俊之, 小石正隆, 山本誠, 藤井孝藏	第27回数値流体力学シンポジウム	2013/12	国内	
86	高精度保存型FR法における一様流保持	阿部圭晃, 羽賀臣紀, 野々村拓, 藤井孝藏	第27回数値流体力学シンポジウム	2013/12	国内	
87	剥離制御を目的とした二次元パンプ周りの層流剥離・乱流遷移現象の基礎解析	焼野藍子, 河合宗司, 野々村拓, 藤井孝藏	第27回数値流体力学シンポジウム	2013/12	国内	
88	レイノルズ数1,600,000における翼周りのLES : 乱流剥離とその制御	佐藤允, 浅田健吾, 野々村拓, 河合宗司, 青野光, 焼野藍子, 藤井孝藏	第27回数値流体力学シンポジウム	2013/12	国内	
89	Immersed boundary法における簡便な流体力算出方法について	野々村拓, 大西順也, 藤井孝藏	第27回数値流体力学シンポジウム	2013/12	国内	
90	CFD in the merging period of practical engineering and basic turbulence studies	K. Fujii	10th International Conference on Flow Dynamics	2013/11	国際	表彰記念招待講演
91	スパコンによる流体力学的新展開]京を利用した革新的な流体制御技術の研究開発	藤井孝藏	第92回日本機械学会流体力学部門会	2013/11	国内	○
92	Numerical study of separation flow control over high-angle-of-attack slender-body using plasma actuators at aft-body	M. Satoh, H. Nishida, A. Matsubara and T. Nonomura	The 12th International Symposium on Fluid Control, Measurement and Visualization	2013/11	国際	
93	LES of turbulent separated flow over NACA0015 at Reynolds number 1,600,000 -- Toward the separation control by a DBD plasma actuator --	M. Sato, K. Asada, T. Nonomura, S. i Kawai, H. Aono, A. Yakeno and K. Fujii	64th Annual Meeting of the American Physical Society, Division of Fluid Dynamics	2013/11	国際	
94	ナノ秒パルスプラズマアクチュエータによる低レイノルズ数剥離流れ制御の実験研究	関本諭志, Taufik Sulaiman, 安養寺正之, 野々村拓, 藤井孝藏	第91回日本機械学会流体力学部門会	2013/11	国内	
95	中レイノルズ数でのDBD プラズマアクチュエータを用いた翼剥離制御におけるバースト発進周波数効果	青野光, 岡田浩一, 野々村拓, 佐藤允, 焼野藍子, 藤井孝藏	第91回日本機械学会流体力学部門会	2013/11	国内	
96	乱流遷移する超音速ジェットからの音響場に対する流入せん断層パラメータの影響	野々村拓, 藤井孝藏	第91回日本機械学会流体力学部門会	2013/11	国内	
97	低レイノルズ数領域の平面形空力特性に対するレイノルズ数効果	安養寺正之, 野々村拓, 大山聖, 藤井孝藏, 永井大樹	第57回宇宙科学技術連合	2013/10	国内	
98	Control of laminar separation in various airfoils by DBD plasma actuator	M. Sato, K. i Okada, H. Aono, A. Yakeno, T. Nonomura and K. Fujii	4th International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows	2013/9	国際	
99	Effects of characteristics of laminar shear layer on the transitional supersonic jet flows	T. Nonomura and K. Fujii	4th International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows	2013/9	国際	
100	プラズマアクチュエータにおける放電プラズマ構造と誘起ジェット生成プロセスに関する数値的研究	西田 浩之, 古泉 卓弥, 野々村 拓, 安部 隆士	日本機械学会 2013年度年次大会	2013/9	国内	
101	レイノルズ数260,000におけるDBDプラズマアクチュエータを用いたNACA0015翼の剥離制御LES解析	青野光, 岡田浩一, 野々村拓, 佐藤允, 焼野藍子, 藤井孝藏	日本機械学会 2013年度年次大会	2013/9	国内	
102	DBDプラズマアクチュエータを用いた翼周り剥離制御における翼形状の影響	佐藤允, 岡田浩一, 青野光, 焼野藍子, 野々村拓, 藤井孝藏	日本機械学会 2013年度年次大会	2013/9	国内	

103	Large-eddy simulation of Owl-like wing under low Reynolds number conditions	K. Kondo, H. Aono, T. Nonomura, A. Oyama, K. Fujii and M. Yamamoto	ASME Fluid Engineering Division Summer Meeting 2013	2013/7	国際	
104	Plasma flow control simulation of an airfoil of wind turbine at an intermediate Reynolds number	H. Aono, T. Nonomura, A. Yakeno, K. Fujii and K. i Okada	ASME Fluid Engineering Division Summer Meeting 2013	2013/7	国際	
105	DBD plasma actuator multi-objective design optimization at Reynolds number 63000: baseline case	T. Sulaiman, S. Sekimoto, T. Tatsukawa, T. Nonomura, A. Oyama, K. Fujii	ASME Fluid Engineering Division Summer Meeting 2013	2013/7	国際	
106	The effects of actuation frequency on the separation control over an airfoil using a synthetic jet	Y. Abe, K. Okada, T. Nonomura and K. Fujii	5th European Conference for Aeronautics and Space Science	2013/7	国際	
107	シュリーレン撮影によるナノ秒パルスアクチュエータまわりの流れ場の可視化	関本諭志, Taufik Sulaiman, 安養寺正之, 野々村拓, 松野隆, 藤井孝藏	第41期可視化情報シンポジウム	2013/7	国内	
108	シンセティックジェットを用いた翼周りに剥離流れの制御における大規模な渦構造の時空間での可視化	阿部圭晃, 野々村拓, 藤井孝藏	第41期可視化情報シンポジウム	2013/7	国内	
109	大迎角細長物体の横力制御におけるDBDプラズマアクチュエータ設置位置の検討	佐藤雅幸, 西田浩之, 松原暁良, 野々村拓	第45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2013	2013/7	国内	
110	What do 3-D Navier-Stokes simulations tell us about fluid mechanics?	K. Fujii	Jameson, Roe, van Leer Workshop	2013/6	国際	○
111	Significance of Three-dimensional unsteady flows inside the cavity on separated-flow control around an NACA0015 using a synthetic jet	Y. Abe, K. Okada, M. Sato, T. Nonomura and K. Fujii	43rd AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit	2013/6	国際	
112	Massive parametric study by LES on separated-flow control around airfoil using DBD plasma actuator at Reynolds number 63,000	M. Sato, K. Okada, T. Nonomura, H. Aono, A. Yakeno, K. Asada, Y. Abe and K. Fujii	43rd AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit	2013/6	国際	
113	Effects of inflow shear layer parameters on a transitional Supersonic jet with a moderate Reynolds number	T. Nonomura and K. Fujii	43rd AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit	2013/6	国際	
114	Numerical study of vortex flow control on high-angle-of-attack slender body	M. Satoh, H. Nishida and T. Nonomura	29th International Symposium on Space Technology and Science	2013/6	国際	
115	Analysis of owl-like airfoil aerodynamics at low Reynolds number flow	K. Kondo, H. Aono, T. Nonomura, M. Anyoji, A. Oyama, T. Liu, K. Fujii and M. o Yamamoto	29th International Symposium on Space Technology and Science	2013/6	国際	
116	A new technique for finite difference WENO with geometric conservation law	T. Nonomura, K. Fujii, Daiki Terakado, Y. Abe	43rd AIAA Fluid Dynamics and Collocated Conferences and Exhibit	2013/6	国際	
117	回転する計算格子の下で幾何学的保存則を満足する高次精度差分スキームの提案	阿部圭晃, 野々村拓, 藤井孝藏	第18回計算工学講演会	2013/6	国内	
118	Effects of inflow shear layer parameters on a transitional supersonic jet with a moderate Reynolds number	T. Nonomura, K. Fujii	19th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference	2013/5	国際	

119	シンセティックジェットの駆動周波数が翼周りに剥離流れの制御に及ぼす影響	阿部圭晃, 岡田浩一, 野々村拓, 藤井孝藏	第44期航空宇宙学会年会講演会	2013/4	国内	
120	シンセティックジェット無次元パラメータ効果の数値解析	岡田浩一	第44期航空宇宙学会年会講演会	2013/4	国内	
121	Symmetric-conservative metric evaluations for higher-order finite differences	K. Fujii, T. Nonomura, and Y. Abe	Advance in Computational Mechanics	2013/2	国際	○
122	Control mechanism of plasma actuator for separated flow around NACA0015 at Reynolds number 63,000 - Separation bubble related mechanisms-	T. Nonomura, H. Aono, M. Sato, A. Yakeno, K. Okada, Y. Abe and K. Fujii	51th AIAA Aerospace Sciences Meeting	2013/1	国際	
123	High-speed optical observation of discharge plasma structure on DBD plasma actuator in argon gas	D. Miyake, H. Nishida	51th AIAA Aerospace Sciences Meeting	2013/1	国際	
124	DBD プラズマアクチュエータ動作原理解明に向けて-続報-	藤井孝藏, 野々村拓, 青野光, 佐藤允, 焼野藍子, 浅田健吾, 関本諭志	平成24年度航空宇宙空力班シンポジウム	2013/1	国内	
125	火星探査航空機に向けた低レイノルズ数におけるフクロウ翼の空力特性	近藤勝俊, 青野光, 野々村拓, 安養寺正之, 大山聖, Tianshu Liu, 藤井孝藏, 山本誠	平成24年度宇宙航行の力学シンポジウム	2012/12	国内	
126	大迎角細長物体におけるプラズマアクチュエータを用いた非対称剥離渦制御のPIV可視化実験と数値シミュレーション	佐藤雅幸, 西田浩之, 松原暁良, 野々村拓, 鈴木幸一, 加藤裕之	平成24年度宇宙航行の力学シンポジウム	2012/12	国内	
127	LESによるフクロウ翼 (Re=23000) の空力特性評価	近藤勝俊, 青野光, 野々村拓, 安養寺正之, 大山聖, Tianshu Liu, 藤井孝藏, 山本誠	第26回数値流体力学シンポジウム	2012/12	国内	
128	シンセティックジェットによる翼周りに剥離流れの制御に関するLES: スパン方向渦の解析	阿部圭晃, 佐藤允, 野々村拓, 藤井孝藏	第26回数値流体力学シンポジウム	2012/12	国内	
129	DBDプラズマアクチュエータを用いた翼剥離制御に関する大規模パラメトリックスタディ	佐藤允, 岡田浩一, 青野光, 野々村拓, 藤井孝藏	第26回数値流体力学シンポジウム	2012/12	国内	
130	DBDプラズマアクチュエータを用いた翼剥離流れ制御の非定常流れ場解析	佐藤允, 岡田浩一, 阿部圭晃, 青野光, 野々村拓, 藤井孝藏	第26回数値流体力学シンポジウム	2012/12	国内	
131	動的で高性能な流体力学形状設計を目指して-「京」利用による初期成果-	藤井孝藏	第3回「分野4次世代ものづくり」シンポジウム	2012/12	国内	
132	Computational Fluid Dynamics (CFD) with leading-edge supercomputers	K. Fujii	Brazil-Japan Workshop in HPC Applications	2012/11	国際	○
133	Characterization of electrohydrodynamic force on dielectric-barrier-discharge plasma actuator using fluid simulation	H. Nishida, T. Nonomura, T. Abe	International Conference on Plasma Physics 2012	2012/11	国際	
134	Parametric study on separation control by DBD plasma actuator over NACA0012 and NACA0015 airfoil at Reynolds number 63,000	M. Sato, T. Nonomura, H. Aono, K. Okada and K. Fujii	63th Annual Meeting of the American Physical Society, Division of Fluid Dynamics	2012/11	国際	
135	DBD プラズマアクチュエータモデルを用いた静止気体中における誘起流れの数値解析	青野光, 野々村拓, 藤井孝藏	第90回日本機械学会流体工学部門会	2012/11	国内	

136	火星探査機に向けた低レイノルズ数における数値シミュレーションによるフクロウ翼の空力特性	近藤勝俊, 青野光, 野々村拓, 安養寺正之, 大山聖, Tianshu Liu, 藤井孝蔵, 山本誠	第56回宇宙科学連合講演会	2012/11	国内	
137	Spectral-like schemes and their application to CFD study toward product innovation	K. Fujii	Conference on Computational Physics 2012, Kobe	2012/10	国際	○
138	差分WENO法で幾何学的保存則を満たす新手法	野々村拓, 阿部圭晃, 藤井孝蔵	第25回計算力学講演会	2012/10	国内	
139	移動変形格子を用いた高次精度差分スキームにおける対称保存型メトリックの幾何学的解釈	阿部圭晃, 飯塚宣行, 野々村拓, 藤井孝蔵	第25回計算力学講演会	2012/10	国内	
140	Computational study of comparison of co-flow and counter blowing DBD plasma actuator for separation control over an airfoil	S. Sekimoto	28th International Congress of the Aeronautical Sciences	2012/9	国際	
141	A numerical study of the effects of airfoil shape on low Reynolds number aerodynamics	H. Aono, T. Nonomura, M. Anyoji, A. Oyama, K. Fujii	The Eighth International Conference on Engineering Computational Technology	2012/9	国際	
142	On the discretization of spatial metrics satisfying the GCL identities	Y. Abe, T. Nonomura, N. Iizuka, and K. Fujii		2012/9	国際	
143	翼面上剥離制御におけるDBDプラズマアクチュエータ駆動方法の比較研究	関本諭志, 浅田健吾, 安養寺正之, 野々村拓, 藤井孝蔵	日本機械学会 2012年度年次大会	2012/9	国内	
144	DBDプラズマアクチュエータにおける放電プラズマと体積力場の数値解析	西田 浩之, 野々村 拓, 安部 隆士	日本機械学会 2012年度年次大会	2012/9	国内	
145	Geometric interpretation of discretized symmetric-conservative metric for higher-order finite-difference scheme	Y. Abe, N. Iizuka, T. Nonomura and K. Fujii	The 23th International Congress on Theoretical and Applied Mechanics	2012/8	国際	
146	Symmetric-conservative metric evaluations for higher-order finite difference schemewith the GCL identities on three-dimensional moving and deforming mesh	Y. Abe, N. Iizuka, T. Nonomura and K. Fujii	International Conference on Computational Fluid Dynamics	2012/7	国際	
147	有限差分法における保存型空間メトリックの空間対称性と幾何学的解釈	阿部圭晃, 野々村拓, 飯塚宣行, 藤井孝蔵	第44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2012	2012/7	国内	
148	大迎角細長物体の横力制御におけるDBDプラズマアクチュエータ設置位置の検討	佐藤雅幸, 稲葉亮司, 西田浩之, 野々村拓, 藤井孝蔵	第44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2012	2012/7	国内	
149	DBDプラズマアクチュエータにおける体積力場の放電プラズマシミュレーションによる解析	西田浩之, 三宅大介) 野々村拓, 安部隆士	第44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2012	2012/7	国内	
150	Burst frequency effect of DBD plasma actuator on the control of separated flow over an airfoil	K. Asada and K. Fujii	6th AIAA Flow Control Conference	2012/6	国際	
151	Numerical analysis on three-dimensional body force field of DBD plasma actuator	H. Nishida, T. Nonomura, T. Abe	43rd AIAA Plasmadynamics and lasers Conference	2012/6	国際	
152	HPC/CFDによるものづくり革新を目指して-デバイス制御による新たな空力形状設計- (基調講演)	藤井孝蔵	日本計算工学会/2011年度総会記念シンポジウム	2012/5	国内	特別講演
153	Study on application of dbd plasma actuator for side force control of high-angle-of-attack slender body	H. Nishida, T. Nonomura, R. Inaba, M. Sato, S. Nonaka	13th International Space Conference of Pacific-basin Societies (ISCOPS)	2012/5	国際	

154	CFD studies with GLOPS to PFLOPS supercomputers- Past, present and future	K. Fujii	International Workshop on Future of CFD and Aerospace Sciences	2012/4	国際	○
155	後胴に設置したプラズマアクチュエータによる大迎角細長 物体の剥離流れ制御の数値解析	西田浩之, 稲葉亮司, 佐藤雅幸, 野々 村拓	第43期年会講演会	2012/4	国内	
156	Comparative study of co-flow and counter blowing DBD plasma actuators for separated flow over an airfoil	S. Sekimoto, K. Asada, M. Anyoji, T. Nonomura, K. Fujii	50th AIAA Aerospace Sciences Meeting	2012/1	国際	
157	プラズマアクチュエータのシミュレーションと体積力の空 間分布	西田浩之, 野々村拓, 安部隆士	平成23年度航空宇宙空力班シンポジウム	2012/1	国内	
158	高次精度差分スキームにおける3次元移動変形格子での幾何 学的保存則を満足するメトリックの評価方法	阿部圭晃, 飯塚宣行, 野々村拓, 藤井 孝蔵	第25回数値流体力学シンポジウム	2011/12	国内	
159	DBD プラズマアクチュエータを用いた翼剥離制御流れにお ける平均空力特性と瞬間流れ場の関係	浅田健吾, 関本諭志, 藤井孝蔵	第25回数値流体力学シンポジウム	2011/12	国内	
160	低レイノルズ数流れにおける固定翼断面形状の空力性能へ の影響	青野光, 野々村拓, 安養寺正之, 大山聖, 藤井孝蔵	第25回数値流体力学シンポジウム	2011/12	国内	
161	輸送機器・流体機器の流体制御による革新的高率化・低騒 音化に関する研究開発	藤井孝蔵	ものづくりシンポジウム	2011/12	国内	
162	Aerodynamic characteristics of Ishii airfoil at low Reynolds numbers	M. Anyoji, T. Nonomura, A. Oyama, K. Fujii, K. Nose, D. Numata, H. Nagai and K. Asai	8th International Conference on Flow Dynamics, ICFD 2011	2011/11	国際	
163	大迎角剥離流れの制御による細長物体の空力特性制御の研 究	西田浩之, 稲葉亮司, 佐藤雅幸, 野々 村拓, 浅田健吾, 藤井孝蔵	第49回飛行機シンポジウム	2011/10	国内	
164	Noise control of supersonic cavity flow with mass injections	W. Li, T. Nonomura and K. Fujii	Proceedings of Fourth Symposium on Hybrid RANS-LES Method	2011/9	国際	
165	Turbulent flow induced self-sustained oscillations in supersonic cavity flows	W. Li, T. Nonomura and K. Fujii	The 40th International Congress and Exposition on Noise Control Engineering (Inter noise 2011)	2011/9	国際	
166	Experimental study of blowing direction effects of DBD plasma actuators on separation control of flow around an airfoil	T. Nonomura, S. Sekimoto, K. Asada, A. Oyama, K. Fujii	ASME-JSME-KSME Fluids Engineering Conference 2011	2011/7	国際	
167	Computational study of aerodynamic characteristics of an airfoil with DBD plasma actuator	K. Asada and K. Fujii	ASME-JSME-KSME Fluids Engineering Conference 2011	2011/7	国際	
168	Three-dimensional wing design towards the future mars airplane	R. Kojima, D. Lee, T. Tatsukawa, T. Nonomura, A. Oyama and K. Fujii	ASME-JSME-KSME Fluids Engineering Conference 2011	2011/7	国際	
169	Computational study of flow characteristics of thick and thin airfoil with implicit large-eddy simulation at low Reynolds number	R. Kojima, T. Nonomura, A. Oyama and K. Fujii	ASME-JSME-KSME Fluids Engineering Conference 2011	2011/7	国際	
170	Effects of turbulent inflow conditions on feedback- loop mechanisms in supersonic cavity flows	W. Li, T. Nonomura and K. Fujii	International Symposium on Shock Waves 28	2011/7	国際	
171	LESによる石井翼 (Re=23,000) の空力特性解析	野々村拓, 小嶋亮次, 安養寺正之, 大山聖, 藤井孝蔵	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	2011/7	国内	
172	細長飛翔体の空力制御を目的とした大迎角剥離流れの数値 解析	稲葉亮司, 西田浩之, 野々村拓, 浅田 健吾	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	2011/7	国内	

173	Numerical study on control of separation flow over slender body using DBD plasma actuator	R. Inaba, H. Nishida, T. Nonomura, K. Asada, K. Fujii	28th International Symposium on Space Technology and Science, 2011-e-26, Okinawa, 2011	2011/6	国際	
174	Effective three-dimensional layout of imaginary body force for separation control	I. Kaneda, K. Asada and K. Fujii	49th AIAA Aerospace Sciences Meeting	2011/1	国際	

3. 受賞等

No.	名称	受賞者氏名	授賞機関(学会名等)	受賞した時期	国内・国際 の別	備考
1	Senior Scientist Award	K. Fujii	The Asian Pacific Association for Computational Mechanics (APACM)	2016/7予定	国際	
2	Fluid Science Award	K. Fujii	Fluid Science Foundation	2013/10	国際	
3	Large-scale LES simulations analysis required in real industrial applications aeo-acoustics and flow separation control as two representative examples	K. Fujii	1st TILDA Symposium & Workshop on Industrial LES & DNS, Toulouse, France	2016/11予定	国際	基調講演
4	流れを操るプラズマアクチュエータ -流体機器・輸送技術の革新を目指して-	藤井孝藏	第31回塗料・塗装研究発表会, 日本塗装技術協会	2016/3	国内	基調講演
5	小型空力制御デバイス「プラズマアクチュエータ」-空力設計のパラダイムシフト実現へ-	藤井孝藏	益財団法人 計算科学振興財団 第8回トップセミナー	2016/1	国内	基調講演
6	小型空力制御デバイス「プラズマアクチュエータ」-空力設計のパラダイムシフト実現へ-	藤井孝藏	第88回栃木航空宇宙懇談会, 月例研修会	2015/12	国内	基調講演
7	Large-scale LES simulations on K computer for the flow separation control toward aerodynamic design innovation	K. Fujii	27th International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics, Montreal, Canada	2015/5	国際	基調講演
8	Recent findings on the mechanism of flow separation control by micro devices	K. Fujii	5th International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows Nagoya	2013/10	国際	基調講演
9	Three key components of CFD for future aerodynamic design innovation-les, spectral-like schemes and data mining	K. Fujii	International Conference on Computational Fluid Dynamics Kona, Hawaii, U. S. A.	2012/7	国際	基調講演
10	CFD屋の独り言 -CFD研究の変化と後処理・可視化への期待-	藤井孝藏	第17回ビジュアライゼーションカンファレンス	2011/11	国内	基調講演
11	Role of RANS, Hybrid and LES for wing flow simulations at relatively low Reynolds numbers	K. Fujii	4th Symposium on Hybrid RANS-LES, China	2011/9	国際	基調講演
12	Toward second-era of computational fluid dynamics - From the observation from the studies in aerospace	K. Fujii	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011	2011/7	国際	基調講演

4. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

No.	名称	日付	説明	備考
1	PAシミュレーション成果データベース	3/2016予定	当該研究で得られたシミュレーションデータを利用しやすいデータベースとして整備したもの	未定
2	TBS番組「夢の扉」	5/2015	課題代表者と当該技術を取り上げた番組	空気をあやつる魔法の装置
3	分野4次世代ものづくり課題1のホームページ	2013以降	当該課題の内容を記載	http://flab.eng.isas.jaxa.jp/fddi/index.html

5. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)

No.	名称	開催日時	開催場所	参加者(人数)
1	該当無			

研究開発課題2: 次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造プロセスシミュレーションに関する研究開発

代表者 大野隆央

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会誌・雑誌名等)	発表した時期	国内・国際 の別	査読(有りの場合 ○を記入)
1	First principles study on reconstruction of 4H-SiC(0001) and (000-1)	Tomoaki Kaneko (NIMS), Nobuo Tajima (NIMS), Takahiro Yamasaki (NIMS), Takahisa Ohno (NIMS)	Surface Science, 647, 45 (2015).	2016年1月	国際	○
2	Density-functional-theory-based calculations of formation energy and concentration of the silicon monovacancy	Sholihun, SAITO Mineo, OHNO Takahisa, YAMASAKI Takahiro	Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 54/Number 4/041301-1~041301-4	2015/2	国際	○
3	Molecular dynamics simulations on the oxidation of Si(100)/SiO ₂ interface: Emissions and incorporations of Si-related species into the SiO ₂ and substrate	TAKAHASHI Norihiko, YAMASAKI Takahiro, KANETA Chioko	PHYSICA STATUS SOLIDI B-BASIC SOLID STATE PHYSICS, Vol. 251/Number 11/ Page 2169~2178	2014/9	国際	○
4	Carbon atom reactions in the initial stage of CVD graphene growth on copper: a first principles study	Nobuo Tajima, Tomoaki Kaneko, Jun Nara (NIMS, MARCEED), Takahisa Ohno (NIMS, MARCEED, Univ. of Tokyo)	Japanese Journal of Applied Physics, 53, 05FD08	2014/4	国際	○
5	Effect of surface oxidation on transport properties in graphene-metal junctions	KANEKO Tomoaki, OHNO Takahisa	Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 53/Number 5S1/05FD07-1~05FD07-4	2014/4	国際	○
6	Effect of Contact Area on Electron Transport through Graphene-Metal Interface	Liu, Hongmei、近藤恒、大野隆央	THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 139, 074703 (2013)	2013/8/20	国際	○
7	Ten-Million-Atom Electronic Structure Calculations on the K Computer with a Massively Parallel Order-N Theory	星健夫、秋山洋平、田中辰典、大野隆央	Journal of the Physical Society of Japan 82 (2013) 023710	2013/1/28	国際	○
8	Novel Linear Algebraic Theory and One-Hundred-Million-Atom Electronic Structure Calculation on The K Computer	Takeo Hoshi (Tottori University, JST-CREST), Keita Yamazaki, Yohei Akiyama (Tottori University)	JPS Conf. Proc. 1, 016004, 4pp (2014)	2013/1	国際	○
9	Planewave-based first-principles MD calculation on 80,000-node K-computer	黒田明義、南一生、山崎隆浩、奈良純、甲賀淳一朗、宇田毅、大野隆央	SC12	2012/11/10 - 2012/11/16	国際	○
10	Contact Effects of Nickel and Copper on Electron Transport through Graphene	LIU, Hongmei、近藤恒、大野隆央	PHYSICAL REVIEW B 86, 155434 (2012)	2012/10/18	国際	○
11	ニッケル表面状のCVD グラフェン成長における炭素原子の挙動: 理論的研究	田島暢夫、大野隆央	The Extended Abstract of Solid State Devices and Materials	2012/09/25 - 2012/09/27	国際	○

2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会名等）	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	First Principles Study on Bottom-up Fabrication Process of Atomically Precise Graphene Nanoribbons (ポスター)	Tomoaki Kaneko(NIMS), Nobuo Tajima(NIMS), Takahisa Ohno(NIMS)	28th International Microprocesses and Nanotechnology Conference	2015年11月	国際	
2	First-Principles Study of Electronic Structures of Graphene on Y2O3 (ポスター)	Tomoaki Kaneko(NIMS), Takahisa Ohno(NIMS)	28th International Microprocesses and Nanotechnology Conference	2015年11月	国際	
3	Multi-axis decomposition of a density functional program "PHASE/0" for strong scaling and its applications (招待講演)	Takahiro Yamasaki(NIMS)	5th International workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics - Toward exascale computing	2015/11	国際	○
4	4H-SiC中の貫通螺旋転位は分裂しているか否か (ポスター)	奈良純(NIMS, MARCEED), 山崎隆浩(NIMS, MARCEED), 甲賀信一郎(ASMS), 宇田毅(ASMS), 大野隆央(NIMS, MARCEED, IIS, Univ. Tokyo)	応用物理学会先進パワー半導体分科会 第2回講演会	2015年11月	国内	
5	SiC熱酸化により生成するSiO2/SiC界面の化学種に関する理論的研究 (ポスター)	山崎隆浩, 金子智昭, 奈良純, 大野隆央(物質材料研究機構), 田島暢夫, 加藤弘一(東京大学生産研究所), 清水達雄(東芝研究開発センター)	先進パワー半導体分科会	2015/11	国内	
6	酸素分子による4H-SiC/SiO2界面酸化の第一原理動的シミュレーション (ポスター)	Takahiro Yamasaki, Nobuo Tajima, Tomoaki Kaneko, Jun Nara, Takahisa Ohno(NIMS), Tatsuo Schimizu(Toshiba R&D center), Koichi Kato(IIS, Univ. Tokyo)	先進パワー半導体分科会第2回講演会	2015/11	国内	
7	4H-SiC中の螺旋転位の構造と電子状態 (口頭)	奈良純(NIMS)	NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2015	2015/11	国内	
8	4H-SiC(0001)/SiO2 界面欠陥準位の第一原理解析：欠陥構造の重要性 (ポスター)	金子智昭, 山崎隆浩, 大野隆央(NIMS), 田島暢夫, 加藤弘一(東京大学生産技術研究所), 清水達雄(東芝研究開発センター)	応用物理学会先進パワー半導体分科会 第2回講演会	2015/11	国内	
9	4H-SiC Surface Structures and Oxidation Mechanism Revealed by Using First-Principles and Classical Molecular Dynamics Simulations (ポスター)	Nobutaka Nishikawa(Mizuho I&R Inst. Inc.), Takahiro Yamasaki, Nobuo Tajima, Tomoaki Kaneko, Jun Nara, Takahisa Ohno(NIMS), Tatsuo Schimizu(Toshiba R&D Center), Koichi Kato(IIS, Univ. Tokyo)	ICSCRM-2015	2015/10	国際	
10	第一原理シミュレーションに基づいたSiC表面上のSi熱脱離グラフェン成長機構 (ポスター)	Takahiro Yamasaki, Jun Nara, Takahisa Ohno(NIMS), Yuki Ono(RIST)	応用物理学会秋季学術講演会	2015年9月	国内	
11	Electronic transport in graphene on defective hBN: First-principles study (ポスター発表)	Tomoaki Kaneko(NIMS), Takahisa Ohno(NIMS)	EP2DS-21/MSS-17	2015/7	国際	

12	4H-SiC酸化の第一原理／古典的分子動力学シミュレーション（口頭発表）	山崎隆浩(NIMS, MARCEED), 田島暢夫(NIMS, MARCEED), 金子智昭(NIMS, MARCEED), 西川宜孝(みずほ総研, MARCEED), 清水達雄(TOSHIBA R&D Center), 加藤弘一(TOSHIBA R&D Center), 大野隆央(NIMS, MARCEED, 東大生産研)	第62回応用物理学会春季学術講演会, 平塚市, 日本	2015/3	国内	
13	hBN 基板中の空孔のグラフェンの伝導への影響の第一原理解析（口頭発表）	金子智昭(NIMS), 大野隆央(NIMS)	第62回応用物理学会春期学術講演会, 東海大学湘南キャンパス	2015/3	国内	
14	A first principles study on CVD graphene growth on copper surface: C-C bonding reactions at graphene edges (ポスター発表)	Nobuo Tajima, Tomoaki Kaneko, Jun Nara, Takahisa Ohno(National Institute for Materials Science)	American Physical Society March Meeting, San Antonio	2015/3	国際	
15	Electronic Transport in Graphene on hBN with impurities: DFT-NEGF Study (口頭発表)	Tomoaki Kaneko(NIMS), Takahisa Ohno(NIMS)	APS March meeting, San Antonio	2015/3	国際	
16	First-Principles Simulations for the Initial Stage of Graphene Growth (口頭発表)	Youkyu ONO(RIST, MARCEED), Takahiro YAMASAKI(NIMS, MARCEED), Takahisa OHNO(NIMS, MARCEED)	APS March Meeting 2015, San Antonio, TX, USA	2015/3	国際	
17	次世代デバイス材料の第一原理シミュレーション（口頭発表）	田島暢夫(物質材料研究機構), 金子智昭(物質材料研究機構), 山崎隆浩(物質材料研究機構), 奈良純(物質材料研究機構), 大野隆央(物質材料研究機構)	HPCI戦略プログラム分野4統合ワークショップ, 東京	2015/3	国内	
18	第一原理計算プログラムPHASEの高度化（口頭発表）	山崎隆浩(NIMS)	文部科学省「HPCI戦略プログラム」分野4次世代ものづくり 第2回統合ワークショップ, 東京, 日本	2015/3	国内	
19	酸素分子による4H-SiC表面酸化の動的シミュレーションおよび第一原理解析（ポスター発表）	山崎隆浩(NIMS), 田島暢夫(NIMS), 小山洋(RIST), 奈良純(NIMS), 清水達雄(TOSHIBA R&D Center), 加藤弘一(TOSHIBA R&D Center), 大野隆央(NIMS)	先進パワー半導体分科会 第1回講演会, 名古屋市, 日本	2014/11	国内	
20	Cu 表面上のCVD グラフェン成長に関する第一原理計算（口頭発表）	田島暢夫, 金子智昭, 奈良純, 大野隆央(物質材料研究機構)	NIMSナノシミュレーションワークショップ 2014, 東京, 日本	2014/10	国内	
21	Cu表面上のCVDグラフェン成長に関する第一原理的研究（ポスター発表）	田島暢夫, 金子智昭, 奈良純, 大野隆央(物質材料研究機構)	応用物理学会秋季講演会, 札幌, 日本	2014/9	国内	
22	4H-SiC(0001)表面酸化過程の動的シミュレーションおよび第一原理解析（ポスター発表）	山崎隆浩(NIMS), 小山洋(RIST), 奈良純(NIMS), 清水達雄(TOSHIBA R&D Center), 加藤弘一(TOSHIBA R&D Center), 大野隆央(NIMS)	第75回応用物理学会秋季学術講演会, 札幌市, 日本	2014/9	国内	
23	Y2O3(111)上グラフェンの安定性についての第一原理解析（口頭発表）	金子智昭(NIMS), 大野隆央(NIMS)	第75回応用物理学会秋季学術講演会, 北海道大学, 札幌市	2014/9	国内	

24	欠陥や不純物を含んだ h-BN 上 グラフェンでの電気伝導の第一原理解析 (口頭発表)	金子智昭 (NIMS), 大野隆央 (NIMS)	日本物理学会2014年秋季大会, 中部大学, 愛知県春日井市	2014/9	国内	
25	A first principles study on CVD graphene growth on copper surface: C-C bonding reactions at graphene edges (ポスター発表)	Nobuo Tajima, Tomoaki Kaneko, Jun Nara, Takahisa Ohno (National Institute for Materials Science)	Solid State Device Materials 2014, Tsukuba, Japan	2014/9	国際	
26	PHASEシステムの概要・機能の紹介および開発状況 (口頭発表)	山崎隆浩 (NIMS)	NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2014, 千代田区, 日本	2014/9	国内	
27	First-principles study on formation of atomically precise graphene nanoribbons (ポスター発表)	Tomoaki Kaneko (NIMS), Nobuo Taima (NIMS), Takahisa Ohno (NIMS)	IEEE International Nanoelectronics Conference 2014, Hokkaido University, Sapporo, Hokkaido	2014/7	国際	
28	Cu表面上のCVDグラフェン成長における炭素原子反応: 第一原理的研究 (ポスター発表)	Nobuo Tajima, Tomoaki Kaneko, Jun Nara (NIMS, MARCEED), Takahisa Ohno (NIMS, MARCEED, Univ. of Tokyo)	日本応用物理学会春季講演会, 相模原, 日本	2014/5	国内	
29	Carbon atom reactions in CVD graphene growth on copper surface: A first principles study (ポスター発表)	Nobuo Tajima, Tomoaki Kaneko, Jun Nara (NIMS, MARCEED), Takahisa Ohno (NIMS, MARCEED, Univ. of Tokyo)	American Physical Society March Meeting, Denver, CO, USA	2014/5	国際	
30	グラフェン・ナノリボンのボトムアップ成長における 金属表面ステップの影響についての第一原理解析 / First Principles Analysis on Influence of Metal Surface Step on Bottom-up Growth of Graphene Nanoribbons (ポスター)	金子智昭, 田島暢夫, 大野隆央	第61回応用物理学会春季学術講演会	2014/03/17 - 2014/03/20	国内	
31	Al2O3下のグラフェンでの電気伝導の第一原理解析 / First principles analysis on electronic transport in graphene under Al2O3 (口頭)	金子智昭, 大野隆央	第61回応用物理学会春季学術講演会	2014/03/17 - 2014/03/20	国内	
32	4H-SiC(0001) Si 面及び(000-1) C 面、それぞれの酸化反応の動的シミュレーション / Molecular Dynamics study on oxidation processes on 4H-SiC(0001) and (000-1) surfaces (ポスター)	小山洋, 山崎隆浩, 奈良純, 清水達雄, 大野隆央	第61回応用物理学会春季学術講演会	2014/03/17 - 2014/03/20	国内	
33	Cu表面上のCVDグラフェン成長における炭素原子反応: 第一原理的研究 / Carbon atom reactions in CVD graphene growth on copper surfaces: A first principles (ポスター)	田島暢夫, 金子智昭, 奈良純, 大野隆央	第61回応用物理学会春季学術講演会	2014/03/17 - 2014/03/20	国内	
34	Cu表面上のCVDグラフェン成長における炭素原子の反応に関する理論的研究 / Carbon atom reactions in CVD graphene growth on copper surface: A first principles study (ポスター)	田島暢夫, 金子智昭, 奈良純, 大野隆央	American physical society march meeting 2014	2014/03/03 - 2014/03/07	国際	
35	グラフェンナノリボンのボトムアップ成長におけるAu 表面ステップエッジの役割: 第一原理に依る研究 / Role of Au surface step edge on bottom-up growth of atomically precise graphene nanoribbons: First-principles study (ポスター)	金子智昭, 田島暢夫, 大野隆央	American physical society march meeting 2014	2014/03/03 - 2014/03/07	国際	
36	Parallel implementation and application of planewave-based first-principles MD simulator "PHASE" on K computer (口頭)	山崎隆浩	International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Molecular Science	2014/2/4	国際	

37	4H-SiC中の貫通螺旋転位の様々な構造(ポスター)	山崎隆浩, 奈良純, 甲賀淳一郎, 宇田毅, 黒田明義, 南一生, 大野隆央	第19回ゲートスタック研究会	2014/01/24 - 2014/01/25	国内	
38	4H-SiC(0001)面の酸化過程の動的シミュレーション: Si面とC面 / Molecular dynamics simulations for oxidation processes of 4H-SiC(0001): Si and C surfaces(ポスター)	小山洋, 山崎隆浩, 奈良純, 清水達雄, 大野隆央	第19回ゲートスタック研究会	2014/01/24 - 2014/01/25	国内	
39	Cu-CVDグラフェン生成系におけるC-C結合反応に関する第一原理的解析 / first principles analyses of C-C bonding reactions in Cu-CVD graphene production(ポスター)	田島暢夫, 金子智昭, 奈良純, 大野隆央	「グリーン・ナノエレクトロニクスのコア技術開発」最終成果報告会	2013/12/17	国内	
40	ナノリボンのボトムアップ成長に関する第一原理解析 / First-principles analysis on bottom-up growth of nanoribbons(ポスター)	金子智昭, 田島暢夫, 大野隆央	「グリーン・ナノエレクトロニクスのコア技術開発」最終成果報告会	2013/12/17	国内	
41	4H-SiC中の貫通螺旋転位の構造と電子状態 / Geometric and Electronic Structures of Threading-Screw-Dislocations in 4H-SiC(ポスター)	山崎隆浩, 奈良純, 甲賀淳一郎, 宇田毅, 黒田明義, 南一生, 大野隆央	SiC及び関連半導体研究 第22回講演会	2013/12/09 - 2013/12/10	国内	
42	4H-SiC(0001)及び(000-1)表面の酸化反応の動的シミュレーション / Molecular Dynamics simulations of oxidation on 4H-SiC(0001) and (000-1) surfaces(ポスター)	小山洋, 山崎隆浩, 奈良純, 大野隆央	SiC及び関連半導体研究 第22回講演会	2013/12/09 - 2013/12/10	国内	
43	第一原理計算による3C-SiC(1-10)及び4H-SiC(11-20)表面の電子状態について / First-principles study of the 3C-SiC(1-10) and 4H-SiC(11-20) surface electronic states(ポスター)	小山洋, 奈良純, 大野隆央	IGSCRM 2013	2013/09/29 - 2013/10/04	国際	
44	Si(110)-(16x2)表面五員環構造の起源 / Origin of pentagonal STM images on Si(110)-(16x2) surface(口頭)	山崎隆浩, 加藤弘一, 宇田毅, 大野隆央	日本物理学会 2013秋季大会	2013/09/25 - 2013/09/28	国内	
45	4H-SiC Screw Dislocations and Their Electronic Structures(ポスター)	山崎隆浩, 小山洋, 奈良純, 甲賀淳一郎, 宇田毅, 黒田明義, 南一生, 大野隆央	International Conference on Solid State Devices and Materials 2013	2013/09/24 - 2013/09/27	国際	
46	Si(110)-(16x2)のさまざまな安定表面構造 / Various stable surface structures on the Si(110)-(16x2)(口頭)	山崎隆浩, 加藤弘一, 宇田毅, 大野隆央	第74回応用物理学会秋季学術講演会	2013/09/16 - 2013/09/20	国内	
47	Cu表面上のCVDグラフェン成長における炭素原子結合プロセスに関する理論的研究 / Carbon atom bonding processes in CVD graphene growth on copper surface: A first principles study(口頭)	田島暢夫, 金子智昭, 奈良純, 大野隆央	2013 JSAP-MRS Joint Symposia	2013/09/16 - 2013/09/20	国際	
48	DFT-NEGFによるグラフェンと金属電極間の接触抵抗の研究: 酸素挿入の影響 / DFT-NEGF Study of Contact Resistance between Graphene and Metal Electrodes: Effect of Oxygen Intercalation(ポスター)	金子智昭, 大野隆央	2013 JSAP-MRS Joint Symposia	2013/09/16 - 2013/09/20	国際	
49	3C-SiC(1-10)及び4H-SiC(11-20)表面における電子状態とその安定性 / 3C-SiC(1-10) and 4H-SiC(11-20) surface electronic states and their stability(口頭)	小山洋, 奈良純, 大野隆央	日本応用物理学会秋期学術講演会	2013/09/16 - 2013/09/20	国内	
50	Planewave Based First-Principles Calculations on the 83,000 Nodes K-Computer Applied to SiC Screw Dislocations(口頭)	山崎隆浩, 奈良純, 甲賀淳一郎, 宇田毅, 黒田明義, 南一生, 大野隆央	2013 JSAP-MRS Joint Symposia	2013/09/16 - 2013/09/20	国際	

51	DFT-NEGF によるグラフェンと M 電極 (M=Co, Ni, Cu, Al, Ti, Pd, Ag, Pt and Au) 間の接触抵抗 / DFT-NEGF Study of Contact Resistance between Graphene and M Electrodes (M=Co, Ni, Cu, Al, Ti, Pd, Ag, Pt and Au) (ポスター)	金子智昭、大野隆央	Recent Progress in Graphene Research (RPGR2013)	2013/09/09 - 2013/09/13	国際	
52	SiO ₂ 内の不純物による SiO ₂ 上のグラフェンの電荷パドル形成への影響 / Effect of Impurities in SiO ₂ on Charge Puddle Formation in Graphene on SiO ₂ Surface (ポスター)	金子智昭、大野隆央	Recent Progress in Graphene Research (RPGR2013)	2013/09/09 - 2013/09/13	国際	
53	第一原理計算によるシリコンカーバイド表面の電子状態 / First-principles DFT calculations of the SiC surface electronic states (口頭)	小山洋、奈良純、大野隆央	NIMSナノシミュレーションワークショップ2013	2013/9/2	国内	
54	第一原理計算によるグラフェンデバイスの低接触抵抗への設計指針 (ポスター)	金子智昭、大野隆央	グリーン・ナノエレクトロニクスのコア技術開発 2013年 成果報告会	2013/3/13	国内	
55	銅表面上のCVDグラフェン成長における炭素原子間結合生成過程 : 第一原理的研究 (口頭)	田島暢夫、金子智昭、奈良純、大野隆央	American physical society march meeting 2013	2013/03/18 - 2013/03/22	国際	
56	グラフェン-金属電極間の接触抵抗の第一原理による研究 (口頭)	金子智昭、大野隆央	American physical society march meeting 2013	2013/03/18 - 2013/03/22	国際	
57	グラフェン-金属電極の接合の伝導 : DFT-NEGF による研究 (ポスター)	金子智昭、大野隆央	nanoPHYS' 12	2012/12/17 - 2012/12/19	国際	
58	超並列でFFTは高速に動かせるか? --- スーパーコンピュータ「京」上でのPHASEの性能最適化を通じて (招待講演)	黒田明義、南一生、山崎隆浩、奈良純、甲賀淳一朗、宇田毅、大野隆央	第3回CMSI研究会 ~超並列計算が拓く新しい計算物質科学~	2012/12/03 - 2012/12/05	国内	○
59	Planewave - based first - principles MD calculation on 80,000 - node K - computer (ポスター)	黒田明義、南一生、山崎隆浩、奈良純、甲賀淳一朗、宇田毅、大野隆央	SC12	2012/11/10 - 2012/11/16	国際	
60	Planewave - based first - principles MD calculation on 80,000 - node K - computer (ポスター)	黒田明義、南一生、山崎隆浩、奈良純、甲賀淳一朗、宇田毅、大野隆央	SC12	2012/11/10 - 2012/11/16	国際	
61	ニッケル表面上のCVDグラフェン成長に関する理論計算 (口頭)	田島暢夫、大野隆央	NIMSナノシミュレーションワークショップ2012	2012/10/29	国内	
62	ASCOT によるグラフェン-金属電極間の接触抵抗の計算 (口頭)	金子智昭、大野隆央	NIMSナノシミュレーションワークショップ2012	2012/10/29	国内	
63	ニッケル表面上のCVDグラフェン成長に関する理論計算 (口頭)	田島暢夫、大野隆央	NIMSナノシミュレーションワークショップ2012	2012/10/29	国内	
64	金属電極からグラフェンへの電流注入における電極構造の影響 : DFT-NEGF による研究 (ポスター)	金子智昭、大野隆央	CCP2012	2012/10/14 - 2012/10/18	国際	
65	シリコンカーバイド3C及び4H表面の電子状態と安定性 (ポスター)	小山洋、奈良純、大野隆央	CCP2012	2012/10/14 - 2012/10/18	国際	
66	SiCのステップ端におけるグラフェンの核形成過程に関する第一原理計算 (ポスター)	小寺満、小野裕己、奈良純、大野隆央	CCP2012	2012/10/14 - 2012/10/18	国際	
67	ニッケル表面上でのCVDグラフェン生成における炭素原子クラスタリングとクラスタ成長 : 理論的研究 (ポスター)	田島暢夫、大野隆央	CCP2012	2012/10/14 - 2012/10/18	国際	

68	Ten-Million-Atom Electronic Structure Calculations with Novel Linear-Algebraic Algorithm and the K Computer (招待講演)	星健夫、山元進、藤原毅夫、曾我部知広、張紹良、秋山洋平、大野隆央	Int. Symposium on Computics, Quantum Simulation and design	2012/10/11 - 2012/10/13	国際	○
69	ニッケル表面状のCVD グラフェン成長における炭素原子の挙動：理論的研究(ポスター)	田島暢夫、大野隆央	International Conference on Solid State Devices and Materials	2012/09/25 - 2012/09/27	国際	
70	並列化大規模電子状態計算によるナノ構造シミュレーション(口頭)	星健夫、秋山洋平、大野隆央	日本物理学会2012年秋季大会	2012/09/18 - 2012/09/21	国内	
71	ナノ材料第一原理分子動力学プログラムPHASE の京速コンピュータ「京」上の計算性能最適化(口頭)	黒田明義、長谷川幸弘、寺井優晃、井上俊介、市川真一、小松秀美、大井憲行、安藤琢也、山崎隆浩、大野隆央、南一生	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(HPCS2012)論文集, pp.144-152 (2012).	2012/1/26	国内	
72	次世代半導体集積素子におけるカーボン系ナノ構造モデシミュレーションに関する研究開発(口頭)	大野隆央	HPC1戦略プログラム 分野4、第2回「次世代ものづくり」シンポジウム	2011/12/9	国内	
73	ポータルサイト、ユーザコミュニティの紹介(口頭)	奈良純	NIMSナノシミュレーションワークショップ2011	2011/11/25	国内	
74	NIMS理論計算科学研究の概要(口頭)	大野隆央	NIMS-AIST(NRI) 計測・計算シミュレーション合同ワークショップ	2011/10/2	国内	
75	第一原理計算とナノ機能材料探索(口頭)	大野隆央	東京大学生産技術研究所基礎系部門セミナー	2011/9/14	国内	○

3. 受賞等

No.	名称	受賞者氏名	授賞機関(学会名等)	受賞した時期	国内・国際 の別	備考
1	該当無					

4. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

No.	名称	日付	説明	備考
1	NIMSナノシミュレーションソフトウェアポータルサイト	2015/10/27	PHASE/0リリース	PHASE/0 2015. 01
2	NIMSナノシミュレーションソフトウェアポータルサイト	2015/6/3	PHASE/0リリース	PHASE/0 2014. 03. 01
3	NIMSナノシミュレーションソフトウェアポータルサイト	2015/6/24	PHASE Systemリリース	CIAO 2014. 422
4	日刊工業新聞	2015/4/20	SiCパワー半導体課題解決	5面
5	NIMSナノシミュレーションソフトウェアポータルサイト	2014/12/1	PHASE/0リリース	PHASE/0 2014. 03
6	NIMSナノシミュレーションソフトウェアポータルサイト	2014/7/28	PHASE/0リリース	PHASE/0 2014. 02

5. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)

No.	名称	開催日時	開催場所	参加者(人数)
1	PHASE/0 利用講習会：基礎編(HPC/PFコース)	2016/1/19	計算科学振興財団 高度計算科学研究支援センター	15
2	NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2015	2015/11/27	一橋講堂中会議場	65
3	PHASE/0 利用講習会：基礎編	2015/8/26	東京大学生産技術研究所	20
4	PHASE/0 利用講習会：応用編(反応)	2015/5/27	東京大学生産技術研究所	10

5	PHASE/0 利用講習会：基礎編	2014/12/3	計算科学振興財団 高度計算科学研究支援センター	19
6	NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2014	2014/9/29	一橋講堂中会議場	86
7	PHASE/0 利用講習会：基礎編	2014/8/20	東京大学生産技術研究所	17
8	PHASE/0 利用講習会：基礎編	2014/6/24	東京大学生産技術研究所	28
9	NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2013	2013/9/12	一橋講堂中会議場	72
10	NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2012	2012/10/29	一橋講堂中会議場	72
11	NIMS ナノシミュレーション ワークショップ 2011	2011/11/25	一橋講堂中会議場	48

研究開発課題3:乱流の直接計算に基づく次世代流体設計システムの研究開発

代表者 加藤千幸

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌名等）	発表した時期	国内・国際 の別	査読（有りの場合 ○を記入）
1	計算機の進歩と大規模流体シミュレーションの進展	加藤千幸	RRR vol.72 No.12, pp.4-9, 公益財団法人鉄道総合技術研究所	2015/12/1	国内	
2	Large-eddy simulation of pulverized coal jet flame - Effect of oxygen concentration on NOx formation	Masaya Muto(Kyoto University), Hiroaki Watanabe(Central Research Institute of Electric Power Industry), Ryoichi Kurose(Kyoto University), Satoru Komori(Kyoto University), Saravanan Balusamy(University of Cambridge), Simone Hochgreb(University of Cambridge)	Fuel, 142, 152-163	2014/11/1	国際	
3	次期スパコン・「ポスト京」の産業応用に対する期待と課題	加藤千幸	一般社団法人日本動力協会発行機関誌「エネルギーと動力」No.283 (H26年, 秋季号)	2014/11/1	国内	
4	直接シミュレーションによる乱流解析	加藤千幸	ターボ機械第24巻第5号, pp.290-296, 2014.5	2014/5/1	国内	
5	Effects of ambient pressure, gas temperature and combustion reaction on droplet evaporation	T. Kitano, J. Nishio, R. Kurose, S. Komori	Combustion and Flame, 161, 551-564	2014	国際	
6	Fictitious particle method: a numerical model for flows including dense solids with large size difference	T. Tsuji, K. Higashida, Y. Okuyama, T. Tanaka	AIChE Journal, 60, 1606-1620	2014	国際	
7	高圧条件下における燃料液滴の蒸発および燃焼	黒瀬良一, 北野智朗, 小森悟	日本燃焼学会誌, 56, 31-38	2014	国内	

8	自動車の高速操舵走行時の安定性に寄与する車体周りの非定常流れ特性	岡田義浩, 農沢隆秀, 坪倉誠, 中島卓司	日本機械学会論文集, 第80巻, 809号, transjsme. 2014fe0009, pp. 1-17	2014	国内	
9	均質媒体モデルを用いたキャビテーション解析の問題	鈴木貴之, 加藤千幸	日本機械学会論文集 (B 編) 79 巻 808 号 (2013-12) p. 2743-2758	2013/12/4	国内	○
10	Development of a CFD software for large-scale computation: An approach to grid generation for arbitrary complex geometries using hierarchical blocks	Junya Onishi (Institute of Industrial Science, the University of Tokyo), Kenji Ono (Advanced Institute for Computational Science, RIKEN)	Proceedings of the 12th International Symposium on Fluid Control, Measurements and Visualization (FLUCOME 2013), Paper No. 0S16-02-2	2013/11/1	国際	
11	LES解析を用いた斜流ポンプの不安定特性発生メカニズムの解明	萩谷功, 長原孝英, 深谷征史 (株式会社日立製作所), 加藤千幸 (東京大学生産技術研究所), 山出吉伸 (みずほ情報総研株式会社)	第91期機械学会流体工学部門講演会講演論文集 USB, No. 0407	2013/11/1	国内	
12	混相燃焼のモデリングと数値シミュレーション	黒瀬良一 (京都大学)	ターボ機械協会誌, 38, 679-686	2013年11月	国内	
13	Effects of ambient pressure and precursors on soot formation in spray flames	H. Watanabe, R. Kurose, M. Hayashi, T. Kitano, S. Komori	Advanced Powder Technology	in press	国際	
14	2 Box 車の空気抵抗低減に関する研究 -後流と表面圧力の検証及び車両後流渦と空気抵抗との関係-	忠津雅也, 山村淳, 田中博, 安木剛, 高山務, 山出吉伸, 鈴木康方, 加藤千幸	自動車技術会論文集Vol.44, No.5, pp. 1287-1294	2013年9月2日	国内	
15	CFDによる流体騒音の予測	加藤千幸	一般社団法人日本フルパワードシステム, フルパワードシステム, Vol. 44, No. 5, pp. 5-9	2013年9月	国内	
16	2 Box 車の空気抵抗低減に関する研究 -後流と表面圧力の検証及び車両後流渦と空気抵抗との関係-	忠津雅也, 山村淳, 田中博, 安木剛, 高山務, 山出吉伸, 鈴木康方, 加藤千幸	自動車技術会論文集Vol. 44, No. 5, September 2013, pp. 1287-1294	2013年9月	国内	○
17	京の産業利用を加速するために	加藤千幸	一般社団法人高度情報科学技術研究機構 RIST NEWS, No. 55 (2013), pp. 1-2	2013年7月19日	国内	
18	Unsteady Aerodynamics Simulation of a Road Vehicle Running with Cyclic Yaw and Side-Slip Motions	Takuji Nakashima, Yoshihiro Okada, Takahide Nouzawa, Makoto Tsubokura	31st AIAA Applied Aerodynamics Conference (24-27 June 2013, Sheraton San Diego, San Diego, CA), AIAA-2013-3041	Jul-13	国際	
19	Automatically optimized core mapping to subdomains of domain decomposition method on multicore parallel environments		Computer & Fluids (掲載誌)	2013年6月	国際	○
20	並列モデル細分化による大規模有限要素解析の効率化	加藤千幸	第1回フォトニックデバイス・応用技術研究会, 機械振興会館, 光産業技術振興協会	2013年5月29日	国内	
21	Large Eddy Simulations of 2D and Open-Tip Airfoils Using Voxel Meshes	Dulini Yasara Mudunkotuwa Mudunkotuwe Hitiwadi Vidanelage, Chisachi Kato (Institute of Industrial Science, the University of Tokyo)	Procedia Engineering vol. 61 (2013), pp. 32-39	2013年5月	国際	
22	並列モデル細分化による大規模有限要素解析の効率化	吉村忍, 徳永健一, 杉本振一郎, 奥田洋司, 末光啓二, 加藤千幸, 山出吉伸, 吉村英人	日本計算工学会論文集, Vol. 2013 (2013) p. 20130012, 2013. 5. 24	2013年5月	国内	○

23	京の産業応用に対する期待と戦略分野4「次世代ものづくり」の取り組み	加藤千幸	計算工学, 日本計算工学会, Vol.18, No.1, pp.11-14, 2013.02	2013年2月	国内	
24	Two dimensional direct numerical simulation of spray flames. Part 1: Effects of equivalence ratio, fuel droplet size and radiation, and validity of flamelet model	A. Fujita, H. Watanabe, R. Kurose, S. Komori	Fuel, Vol. 104, pp. 515-525	2013	国際	
25	Aerodynamic Pitching Stability of Sedan-Type Vehicles Influenced by Pillar-Shape Configurations	Cheng, S.Y., Tsubokura, M., Okada, Y., Nakashima, T., Nouzawa, T	2013 SAE World Congress, (16-18 April, 2013, Gobo Center, Detroit, Michigan, USA), 2013-01-1258, pp.203-212	2013	国際	
26	車両運動時に発生する非定常空気力と流れ場に関する研究	中江雄亮, 池田準, 安木剛, 田中博, 山下太郎, 坪倉誠, 中島卓司	自動車技術会論文集, vol.44, No.6, pp.1471-1476	2013	国内	
27	自動車横風突風遭遇時の非定常空気力応答と車体形状の影響について	池田準, 坪倉誠, 長谷川巧, 小森谷徹, 中島卓司	日本機械学会論文集(B編), 第79巻, 806号, pp.2077-2092	2013	国内	
28	Aerodynamic Stability of Road Vehicles in Dynamic Pitching Motion	Seeyuan Cheng, Makoto Tsubokura, Yoshihiro Okada, Takahide Nouzawa, Takuji Nakashima, and Deog Hee Doh	Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, vol.122, pp.146-156	2013	国際	
29	自動車のホイール回転が車両空気に及ぼす影響に関するLES解析	池田準, 坪倉誠, 小林竜也, 長谷川巧, 小森谷徹	ながれ32(2013), pp.107-111	2013	国内	
30	Two-dimensional direct numerical simulation of spray flames. Part 2: Effect of ambient pressure and lift, and validity of flamelet model	T. Kitano, R. Kurose, S. Komori	Fuel, Vol. 104, pp. 526-535	2013	国際	
31	Large-eddy simulation of turbulent spray combustion in a subscale aircraft jet engine combustor- Predictions of NO and soot concentrations	H. Moriai, R. Kurose, H. Watanabe, Y. Yano, F. Akamatsu, S. Komori	Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, 135, 091503	2013	国際	
32	Effects of internal pressure and inlet velocity disturbances of air and fuel droplets on spray combustion field	T. Kitano, R. Kurose, S. Komori	Journal of Thermal Science and Technology, 8, 269-280	2013	国際	
33	Effect of a wall on flow with dense particles	T. Tsuji, E. Narita, T. Tanaka	Advanced Powder Technology, 24, 565-574	2013	国際	
34	A Numerical Analysis of Unsteady Aerodynamics of Road Vehicle during Lane-Change Maneuvering	Jun Iketa, Makoto Tsubokura, Yusuke Nakae, Takuji Nakashima, Jun Yamamura, Hiroshi Tanaka, Tsuyoshi Yasuki	Proceedings of the ASME 2013 Fluids Engineering Summer Meeting, FEDSM2013-16447 (7-11 July, Hyatt Regency Lake Tahoe Resort, Spa & Casino, Incline Village, Nevada, USA)	2013	国際	
35	Large eddy simulation of the flow-field around a full-scale heavy-duty truck	Prasanjit Das, Makoto Tsubokura, Tomofuyu Matsuuki, Nobuyuki Oshima, Kozo Kitoh	Procedia Engineering, vol.56, pp.521-530 (Presented at the 5th BSME International Conference on Thermal Engineering, 21-23 Dec 2012, Dhaka)	2012/12	国際	
36	Application of Fully-resolved Large Eddy Simulation to KVLCC2 -Bare Hull Double Model at Model Ship Reynolds Number-	Tatsuo Nishikawa, Yoshinobu Yamade, Masaru Sakuma, Chisachi Kato	日本船舶海洋工学会論文集, Vol. 16 (2012), pp. 1-9.	2012/12	国内	○
37	円筒型サイクロンセパレータの粒子分離メカニズム (第1報, LES解析の精度検証と流れ構造の詳細検討)	秋山修, 加藤千幸, 河手大輔	日本機械学会論文集 B 編, Vol. 78, No. 795 (2012), pp. 1886-1902.	2012/11	国内	○
38	円筒型サイクロンセパレータの粒子分離メカニズム (第2報, 粒子追跡の精度検証と粒子運動の詳細検討)	秋山修, 加藤千幸, 河手大輔	日本機械学会論文集 B 編, Vol. 78, No. 795 (2012), pp. 1903-1918	2012/11	国内	○

39	CFDに基づくターボ機械の騒音予測	加藤千幸	ターボ機械, 第40巻第1号, pp. 27-35	2012/01	国内	
40	噴流噴霧火炎におけるすす生成過程の数値解析	渡邊裕章, 黒瀬良一, 矢野裕, 牧野尚夫, 小森 悟	粉体工学会誌, Vol. 49, pp. 467-477	2012	国内	
41	噴霧火炎操作条件が微小カーボン粒子の生成特性に及ぼす影響	渡邊裕章, 黒瀬良一, 林雅人, 北野智朗, 牧野尚夫, 小森 悟	スマートプロセス学会誌, Vol. 1, pp. 229-236	2012	国内	
42	戦略分野4: 次世代ものづくり	加藤千幸	日本物理学会誌, Vol. 66, No. 7, pp. 542-547, 2011年7月号	2011/07	国内	
43	21世紀のものづくりにおけるCFDへの期待と課題 Prospects and Problems with Computational Fluid Dynamics applied to Industrial Design in the 21st Century	加藤千幸	ながれ30 (2011), pp. 57-60, 20115	2011/05	国内	

2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果 (発表題目、口頭・ポスター発表の別)	発表者氏名	発表した場所 (学会名等)	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	大規模DESによる遷音速遠心圧縮機サージ点近傍の非定常流動解析	山田和豊 (九大), 神崎大 (IHI), 古川雅人 (九大), 岡本篤樹 (九大院)	第29回数値流体力学シンポジウム	2015年12月15日~17日	国内	
2	INDUSTRIAL APPLICATIONS OF LARGE-SCALE FLUID FLOW ANALYSIS - Present status and future perspectives -	Chisachi Kato	3rd International Conference on Computational Design in Engineering, 2015. 12. 14., 東大生研	2015/12	国際	○
3	Parareal法による拡散方程式の時間並列計算	小野謙二, 加藤千幸	日本流体力学会第29回数値流体力学シンポジウムCFD2015, 2015. 12. 15-17., 九州大学筑紫キャンパス	2015/12	国内	
4	大規模数値シミュレーションが実現する技術革新	加藤千幸	鉄道総研講演会, 2015. 11. 6, 有楽町朝日ホール	2015/11	国内	○
5	大規模流体解析の産業応用事例 Industrial Applications of Large-scale Fluid Flow Simulation	加藤千幸	日本船舶海洋工学会秋季講演会, 2015. 11. 6, 生研	2015/11	国内	○
6	HPCを利用した次世代ものづくり一京を用いた先導事例	加藤千幸, 藤井孝蔵	日本計算工学会, 計算工学 Vol. 20, No. 4 2015, pp. 5, 2015. 11	2015/11	国内	
7	京を用いた大規模流体解析の産業応用	加藤千幸	日本計算工学会, 計算工学 Vol. 20, No. 4 2015, pp. 6-9, 2015. 11	2015/11	国内	
8	大規模乱流解析プログラム FrontFlow/blue の概要と最新の成果事例	加藤千幸	VINAS users conference 2015. 10. 14, 東京コンファレンスセンター・品川	2015/10	国内	○
9	空調用多翼ファンにおける流れ場と空力騒音の計算	岩瀬拓, 尾原秀司, 山出吉伸, 郭陽, 加藤千幸	日本機械学会 2015年度年次大会, 2015. 9. 13-16, 北海道大学	2015/09	国内	
10	スクロールつき遠心送風機内部流れの大規模LES解析	山出吉伸, 岩瀬拓, 太田有, 郭陽, 加藤千幸	日本機械学会2015年度年次大会, 2015. 9. 13-16, 北海道大学	2015/09	国内	

11	NUMERICAL PREDICTION OF NOISE FROM THE INTERNAL FLOW IN A CENTRIFUGAL BLOWER	Yang GUO, Chisachi KATO, Yoshinobu YAMADE, Yutaka OHTA, Taku IWASE, Ryo TAKAYAMA	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015(AJK2015-FED), 2015.7.26-31, Seoul, Korea	2015/07	国際	○
12	PREDICTION OF PRESSURE FLUCTUATION ON A VEHICLE BY LARGE EDDY SIMULATIO	Yoshinobu Yamade, Chisachi Kato, Akiyoshi Iida, Shinobu Yoshimura, Keiichiro Iida	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015(AJK2015-FED), 2015.7.26-31, Seoul, Korea	2015/07	国際	○
13	京による最新の大規模流体シミュレーション	加藤千幸	第47回流体力学講演会/第33回航空宇宙数値シミュレーション技術シンポジウム, 2015.7.2, 東大生研	2015/07	国内	○
14	APPLICATIONS OF FULLY-RESOLVED LARGE EDDY SIMULATION TO THE PREDICTIONS OF TURBOMACHINERY FLOWS AND AEROACOUSTICS	Chisachi Kato	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015(AJK2015-FED), 2015.7.26-31, Seoul, Korea	2015/07	国際	○
15	NUMERICAL PREDICTION OF THE PRESSURE PULSATION IN A DRAFT TUBE FOR PART LOAD AND FULL LOAD CONDITIONS USING THE LES APPROACH	Olivier Pacot, Yang GUO, Chisachi KATO, Yoshinobu YAMADE	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015(AJK2015-FED), 2015.7.26-31, Seoul, Korea	2015/07	国際	○
16	CLARIFICATION OF PERFORMANCE CURVE INSTABILITY MECHANISM BY LARGE EDDY SIMULATION OF INTERNAL FLOW IN MIXED-FLOW PUMP	ISAO HAGIYA, CHISACHI KATO, YOSHINOBU YAMADE, TAKAHIDE NAGAHARA, MASASHI FUKAYA	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015(AJK2015-FED), 2015.7.26-31, Seoul, Korea	2015/07	国際	○
17	LARGE-SCALE COUPLING ANALYSIS OF UNSTEADY FLOW, STRUCTURAL VIBRATION AND ACOUSTICS FOR PREDICTION OF FLOW-INDUCED NOISE OF AUTOMOBILE CABIN	Akiyoshi Iida, Chsachi Kato, Shinobu Yoshimura, Keiichiro Iida, Yoshimitsu Hashizume, Yoshinobu Yamade, Hiroshi Akiba, Kunizou Onda	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015(AJK2015-FED), 2015.7.26-31, Seoul, Korea	2015/07	国際	○
18	Larg Eddy Simulation of Unsteady Vorticities in a Pump Sump	Yoshinobu Yamade, Chisachi Kato, Takahide NAGAHARA, Jun MATSUI	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015(AJK2015-FED), 2015.7.26-31, Seoul, Korea	2015/07	国際	○
19	遷音速遠心圧縮機のサージ点近傍における逆流の成長過程に関する大規模DES解析	山田和豊(九大), 神崎大(九大院), 古川雅人(九大), 岡本篤樹(九大院)	第73回ターボ機械協会総会講演会	2015/05/09	国内	
20	大規模流体解析の現状と今後の展望	加藤千幸	ターボ機械協会第10回プロペラ分科会, 2015.4.7, 海上技術安全研究所	2015/04	国内	○
21	大規模流体解析の現状と将来展望	加藤千幸	重点課題6-C解析研究会, 2015.3.17, 九州大学応用力学研究所	2015/03	国内	
22	Large Eddy Simulation による車体表面圧力変動分布の予測	山出吉伸, 加藤千幸, 飯田明由, 吉村忍, 飯田桂一郎	生産研究, 第67巻, 第1号, pp. 59-63, 2015.1	2015/01	国内	
23	Evaluation of a LES cavitation model to simulate the vortex rope phenomenon	Olivier PACOT, Chisachi KATO, Yang GUO, Yoshinobu YAMADE	生産研究, 第67巻, 第1号, pp. 65-70, 2015.1	2015/01	国内	
24	部門流量における遠心送風機の内部流れの騒音の数値シミュレーション	郭陽, 山出吉伸, 加藤千幸, 太田有, 岩瀬拓, 高山糧	生産研究, 第67巻, 第1号, pp. 71-75, 2015.1	2015/01	国内	
25	「京」による遠心圧縮機のサージ点近傍における非定常流れ場の大規模DES解析	古川雅人(九大), 神崎大(九大院), 山田和豊(九大)	第28回数値流体力学シンポジウム	2014年12月9~11日	国内	
26	乱流の直接計算に基づく次世代数値曳航水槽の開発(口頭発表)	西川達雄(一般財団法人 日本造船技術センター)	第5回「分野4次世代ものづくり」シンポジウム, 神戸	2014/12	国内	

27	CFD研究開発事業について（口頭発表）	西川達雄（一般財団法人 日本造船技術センター）	平成26年度SRCセミナー，広島	2014/12	国内	
28	流れに起因する自動車車内騒音の予測	飯田明由（豊技科大），加藤千幸（東大生研），吉村忍（東大），飯田桂一郎（スズキ），橋爪祥光（スズキ），山出吉伸（みずほ），秋葉博（アプライド），恩田邦藏（アプライド）	日本流体力学会第28回数値流体力学シンポジウム（CFD2014），2014.12.9-11，タワーホール船堀（東京，江戸川区）	2014/12	国内	
29	遷音速遠心圧縮機のサージ点近傍における非定常流動現象の大規模DES解析	神崎大（九大院），西澤崇（九大院），古川雅人（九大），山田和豊（九大）	第42回日本ガスタービン学会定期講演会	2014年10月22日～23日	国内	
30	部分流量における遠心送風機内部流れのLES解析 Large Eddy Simulation of a centrifugal fan at flow rate conditions	山出吉伸，岩瀬拓，太田有，加藤千幸，郭陽	日本機械学会流体工学部門講演会，2014.10.25-26，富山大学	2014/10	国内	
31	大規模数値解析 -最新の話-	加藤千幸	本田技術研究所風洞見学・講演会，2014.9.2，栃木	2014/09	国内	○
32	数値解析による流体騒音予測の現状と今後の課題	加藤千幸	日本機械学会2014年度年次大会，2014.9.8，東京電機大学東京千住キャンパス，講演番号F091005	2014/09	国内	○
33	乱流の直接シミュレーションの現状と今後の展望	加藤千幸	風洞シンポジウム2014，2014.10.24，日産自動車テクニカルセンター（厚木）	2014/09	国内	○
34	Engineering applications of fully-resolved LES -present status and future perspectives-	Chisachi Kato	ICCFD8，2014.7.14-15.，中国成都	2014/07	国際	○
35	スーパーコンピュータの産業利用の促進について	加藤千幸	経団連スパコン紹介・意見交換会，2014.6.13，経団連会館	2014/06	国内	○
36	Engineering applications of fully-resolved LES (招待講演)	Chisachi Kato(The University of Tokyo)	Japan - France Extreme Performance Computational Science	2014/04	国際	○
37	Present status and future prospects of large-scale computational fluid dynamics for industrial applications	Chisachi Kato	日仏 Extreme Performance Computational Science カンファレンス，フランス大使館，2014.4.15	2014/04	国際	○
38	微粉炭旋回噴流火炎のLarge-Eddy Simulation -酸化剤酸素濃度がNOx生成に及ぼす影響-	武藤昌也，渡邊裕章，黒瀬良一，小森悟	日本機械学会関西支部第89期定時総会講演会，大阪府立大学中百舌鳥キャンパス	2014.03.18-19	国内	
39	遷音速遠心圧縮機のサージ点近傍における非定常流れ場のDES解析	古川雅人（九大）	文部科学省「HPCI戦略プログラム」分野4 次世代ものづくり 第1回統合ワークショップ「流体・伝熱・燃焼」部門	2014/03/06	国内	
40	大規模な流体解析の現状と今後の課題	加藤千幸	東芝熱流体基盤技術委員会 CFD講習会，東芝横浜事業所	2014/01/28	国内	○
41	スパコン「京」の産業利用成果	坪倉誠	HPC産業利用スクール「京」特別コース（スパコン技術産業応用協議会主催）	2014/01/15	国内	○
42	スパコン『京』と社会との関わり	加藤千幸	先端技術講演会，釜石高校	2013/12/19	国内	○

43	Industrial applications of very-large-scale LES by using FrontFlow/blue	加藤千幸	Japan-Korea CFD Workshop 2013, Nagoya University	2013/12/17	国内	○
44	空力・構造振動・音響連成解析による自動車車室内騒音の予測	飯田明由, 加藤千幸, 吉村忍, 飯田桂一郎, 橋爪祥光, 山出吉伸, 秋葉博, 恩田邦藏	第27回数値流体力学シンポジウム, 名古屋大学東山キャンパス豊田講堂	2013/12/17	国内	
45	遠心ファン騒音の数値予測	郭陽, 加藤千幸, 山出吉伸, 太田有, 岩瀬拓, 高山糧	第27回数値流体力学シンポジウム, 名古屋大学東山キャンパス豊田講堂	2013/12/17	国内	
46	チャネル乱流場におけるフラッシュバックの直接数値シミュレーション	辻 堯文, 北野智朗, 黒瀬良一, 小森悟	第27回数値流体力学シンポジウム, 名古屋大学東山キャンパス	2013. 12. 17-19	国内	
47	自動車レーンチェンジ運動中の空力安定性に関するLES解析	池田隼, 坪倉誠, 中江雄亮, 中島卓司, 山中淳, 田中博, 安木剛	第27回数値流体力学シンポジウム	2013年12月17~19日	国内	
48	サーキット走行を模擬したフォーミュラカーの空力シミュレーション	奈良康平, 坪倉誠, 池田隼, 竹本豊和, 大西慶治, 中島卓司, 佐々木良浩	第27回数値流体力学シンポジウム	2013年12月17~19日	国内	
49	「京」コンピュータが可能にする未来の自動車空力シミュレーション	坪倉誠	スーパーコンピュータ「京」を知る集いin盛岡(理化学研究所主催)	2013/12/07	国内	○
50	分野4 次世代ものづくりのトピックスから	加藤千幸	第4回「分野4 次世代ものづくり」シンポジウム, 独立行政法人理化学研究所計算科学研究機構	2013/12/06	国内	
51	圧縮性流体解析プログラムUPACSのターボ機械開発への適用、口頭	高木亮治	第4回「分野4次世代ものづくり」シンポジウム	2013/12/06	国内	
52	Flamelet法を用いた木質バイオマスガス化ガスの部分燃焼改質過程のLarge-Eddy Simulation	中塚記章, 宮奥俊介, 渡邊裕章, 黒瀬良一	第51回燃焼シンポジウム, 大田区産業プラザPio	2013. 12. 4-6	国内	
53	大規模熱・流体・構造連成解析の最新成果と今後の課題	加藤千幸	日本機械学会材料力学部門平成25年第1回「マルチフィジックスの実験/計算技術の高度化に関する研究会」, 東京大学	2013/12/04	国内	○
54	Flamelet/progress-variable法による管状火炎バーナの数値解析	堀司, 柴垣大貴, 長崎茜, 白神洋輔, 毛笠明志, 西家隆行, 渡邊裕章, 黒瀬良一	第51回燃焼シンポジウム, 大田区産業プラザPio	2013. 12. 4-6	国内	
55	航空エンジン用燃焼器内噴霧乱流燃焼場のLarge-Eddy Simulation—燃焼振動の予測に向けて—	齋藤欣也, 黒瀬良一, 立花 繁, 山本武, 牧田光正	第51回燃焼シンポジウム, 大田区産業プラザPio	2013. 12. 4-6	国内	
56	ガスタービン燃焼器内乱流噴霧燃焼場のLarge-Eddy Simulation	西家隆行, 岩井保憲, 伊東正雄, 張会来, 黒瀬良一	第51回燃焼シンポジウム, 大田区産業プラザPio	2013. 12. 4-6	国内	
57	HPC/PFの開発とアウトリーチ活動への展開	小野謙二(理化学研究所計算科学研究機構)	文部科学省 HPCI戦略プログラム 第4回「分野4 次世代ものづくり」シンポジウム、神戸	2013/12/01	国内	
58	分野4 次世代ものづくりのトピックスから	加藤千幸	第4回「分野4 次世代ものづくり」シンポジウム, 2013. 12. 6, 独立行政法人理化学研究所計算科学研究機構	2013/12	国内	

59	スパコン『京』と社会との関わり	加藤千幸	先端技術講演会, 2013.12.19, 釜石高校	2013/12	国内	
60	大規模熱・流体・構造連成解析の最新成果と今後の課題	加藤千幸	日本機械学会材料力学部門平成25年第1回「マルチフィジックスの実験/計算技術の高度化に関する研究会」, 2013.12.4, 東京大学	2013/12	国内	○
61	遠心ファン騒音の数値予測	郭陽(東大生研) 加藤千幸(東大生研) 山出吉伸(みずほ情報総研) 太田有(早大理工) 岩瀬拓(日立日研) 高山糧(みずほ情報総研)	第27回数値流体力学シンポジウム, 2013.12.17-18, 名古屋大学東山キャンパス豊田講堂	2013/12	国内	
62	空力・構造振動・音響連成解析による自動車車室内騒音の予測	飯田明由(豊橋技科大) 加藤千幸(東大生研) 吉村忍(東大) 飯田桂一郎(スズキ) 橋爪祥光(スズキ) 山出吉伸(みずほ情報総研) 秋葉博(アライド) 恩田邦藏(アライド)	第27回数値流体力学シンポジウム, 2013.12.17-18, 名古屋大学東山キャンパス豊田講堂	2013/12	国内	
63	Industrial applications of very-large-scale LES by using FrontFlow/blue	加藤千幸	Japan-Korea CFD Workshop 2013, December 17-18, 2013, Nagoya University	2013/12	国際	○
64	流動層中で浮沈挙動する粗大物体に働く力について	奥山佳那, 東田恭平, 辻拓也, 田中敏嗣	第19回流動化・粒子プロセッシングシンポジウム, 桐生市市民文化会館	2013.11.28-29	国内	
65	Large-eddy simulation of pulverized coal swirl jet flame	M. Muto, H. Watanabe, R. Kurose, S. Komori, S. Balusamy, S. Hochgreb	APS, 66th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics, Pittsburgh, Pennsylvania, USA	Nov. 24-26, 2013	国際	
66	Large-eddy simulation of spray combustion in high pressure environment	R. Kurose, T. Kitano, J. Nishio, S. Komori	13th Three Asian University Thermal Engineering Conference, Tsinghua University, China	Nov. 16-17, 2013	国際	
67	ガスタービン燃焼器内乱流燃焼場の数値予測	黒瀬良一	第91期日本機械学会流体工学部門講演会, 九州大学伊都キャンパス	2013.11.9-10	国内	
68	液滴群の蒸発に及ぼす雰困気圧力の影響	北野智朗, 西尾 淳, 黒瀬良一, 小森悟	第91期日本機械学会流体工学部門講演会, 九州大学伊都キャンパス	2013.11.9-10	国内	
69	実車数値風洞の開発	坪倉誠	実車数値風洞の開発	2013年11月9日~10日	国内	
70	自動車ホイール形状が車体空力抵抗に与える影響について	坪倉誠, 小林竜也, 岡峯慎治, 劉金山, 大沼敏男, 貴家伸尋	日本機械学会第91期流体工学部門講演会	2013年11月9日~10日	国内	
71	Motion of a large solid in bubbling fluidized bed	T. Tsuji, Y. Okuyama, K. Higashida, T. Tanaka	2013 AIChE annual meeting, San Francisco, California, USA	Nov. 3-8, 2013	国際	
72	Microscopic numerical investigation of dense gas-solid flows near a solid wall (Effects of wall on the behavior of particles)	S. Fujihara, T. Tsuji & T. Tanaka	2013 AIChE annual meeting, San Francisco, California, USA	Nov. 3-8, 2013	国際	
73	微粉炭旋回噴流火炎のLarge-Eddy Simulation-酸化剤酸素濃度の影響-	武藤昌也, 渡邊裕章, 黒瀬良一, 小森悟	日本機械学会 第26回計算力学講演会, 佐賀大学	2013.11.2-4	国内	

74	LES解析を用いた斜流ポンプの不安定特性発生メカニズムの解明	萩谷功, 加藤千幸, 山出吉伸, 長原孝英, 深谷征史	第91期機械学会流体工学部門講演会, 第91期機械学会流体工学部門講演会講演論文集0407, 2013. 11. 9-10, 九州大学伊都キャンパス	2013/11	国内	
75	流動層中に存在する粗大物体の浮沈挙動	奥山佳那, 東田恭平, 辻拓也, 田中敏嗣	粉体工学会2013年度秋期研究発表会, 大阪南港ATC	2013. 10. 8-9	国内	
76	燃焼数値シミュレーションは実機の開発設計に役立つか?	黒瀬良一	日本機械学会関西支部第14回秋季技術交流フォーラム, 大阪大学 吹田キャンパス コンベンションセンター	2013. 10. 27	国内	○
77	自動車の旋回および滑り運動により生じる空気力について	中島卓司, 岡田義浩, 坪倉誠, 農沢隆秀, 土井康明	自動車技術会2013年秋季大会	2013年10月23日~25日	国内	
78	Unsteady aerodynamics of a road vehicle with transient yaw angle change	Daiki Matsumoto, Makoto Tsubokura, Keiji Onishi, Takuji Nakashima, Thomas Indinger, Johannes Wojciak	自動車技術会2013年秋季大会	2013年10月23日~25日	国内	
79	液体燃料を用いるガスタービン燃焼器へのLarge-Eddy Simulationの適用	岩井保憲, 西家隆行, 黒瀬良一, 張会来, 伊東正雄	第41回日本ガスタービン学会定期講演会, 沖縄産業支援センター	2013. 10. 16-17	国内	
80	FrontFlow/Blueによる大規模な実用計算の最新成果	加藤千幸	VINAS Users Conference 2013, 東京コンファレンスセンター品川	2013/10/10	国内	○
81	ものづくりのパラダイムシフトへ向けた道具だて	小野謙二(理化学研究所計算科学研究機構)	HPC産業応用オータムスクール, 東京	2013/10/01	国内	
82	設計利用のためのユービキタなアプリケーション開発	小野謙二(理化学研究所計算科学研究機構)	VINAS Users Conference 2013, 東京	2013/10/01	国内	
83	Effect of surface heating on the boundary separation at critical Reynolds number	M. Muto, H. Watanabe, R. Kurose, M. Tsubokura	The 4th International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows, Nagoya University, Aichi, Japan	Sep. 17-21, 2013	国際	
84	Effect of ambient pressure on spray jet flame structure	T. Kitano, T. Tsuji, R. Kurose, S. Komori	The 4th International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows, Nagoya University, Aichi, Japan	Sep. 17-21, 2013	国内	
85	高圧条件下における噴流火炎の数値解析-非灰色ガスによる輻射伝熱を考慮した検討-	原拓海, 林 雅人, 北野智朗, 黒瀬良一, 小森悟	日本流体力学会年会2013, 東京農工大学小金井キャンパス	2013. 9. 12-14	国内	
86	壁面近傍における高濃度固気混相流の直接数値計算(粒子群運動に対する壁面の影響)	藤原忍, 辻拓也, 田中敏嗣	日本流体力学会年会2013, 東京農工大学小金井キャンパス	2013. 9. 12-14	国内	
87	自動車が旋回および滑り運動時に生じる流体力の曳航水槽模型実験	藤原創太, 中島卓司, 土井康明, 岡田義浩, 農沢隆秀, 坪倉誠	日本流体力学会年会2013	2013年9月12日~14日	国内	
88	NOx effects of dilution airflow balance and cooling flow location in a RQL combustor	H. Moriai, R. Kurose, S. Komori	The 21st International Symposium on Air breathing Engines (ISABE 2013), BEXCO, Busan, Korea	Sep. 9-13, 2013	国際	
89	大規模計算の産業応用	坪倉誠	日本機械学会2013年度年次大会ワークショップ「CFDの産業活用における方向性」W011001	2013年度9月9日~11日	国内	
90	高圧条件下における乱流噴霧燃焼のlarge-eddy simulation	北野智朗, 辻 堯文, 黒瀬良一, 小森悟	日本機械学会2013年度年次大会, 岡山大学津島キャンパス	2013. 9. 8-11	国内	

91	微粉炭旋回噴流火炎のlarge-eddy simulation	武藤昌也, 渡邊裕章, 黒瀬良一	日本機械学会2013年度次大会, 岡山大学津島キャンパス	2013. 9. 8-11	国内	
92	HPC-LESによる自動車の次世代非定常空力解析	坪倉誠, 大西慶治, 中島卓司	日本機械学会2013年度年次大会	2013年9月8日~11日	国内	
93	Fully Resolved Large Eddy Simulation as Alternative to Towing Tank Resistance Tests - 32 Billion Cells Computation on K computer	Tatsuo Nishikawa, Yoshinobu Yamade, Masaru Sakuma, Chisachi Kato	16th Numerical Towing Tank Symposium (NuTTS' 13), Duisburg, Germany	2013/09/01	国際	
94	高性能並列流体計算のための大規模格子生成手法の開発	鶴沢 憲(東京大学生産技術研究所), 大西 順也(東京大学生産技術研究所), 小野 謙二(理化学研究所計算科学研究機構)	日本機械学会2013年度年次大会, 岡山	2013/09/01	国内	
95	液体燃料の蒸発および燃焼に関する数値解析	黒瀬良一	伝熱学会関西支部第2回講演討論会, 神戸大学六甲台キャンパス	2013. 07. 30	国内	○
96	Calculation of Aerodynamic Noise for Centrifugal Fan of Air-conditioner	Taku Iwase, Hideshi Obara, Hiroyasu Yoneyama, Yoshinobu Yamade, Chisachi Kato	ASME2013 Fluids Engineering Division Summer Meeting, Nevada, U.S.A.	2013/07/11	国際	
97	マルチブロック構造格子におけるNURBS Volumeを用いた自動細分化ツールの開発, 口頭	松村洋祐, 堤誠司, 高木亮治, 山本一臣, 伊藤浩之, 竹川国之	第45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2013	2013/07/04	国内	
98	Calculation of Aerodynamic Noise for Centrifugal Fan of Air-conditioner	Taku Iwase, Hideshi Obara, Hiroyasu Yoneyama, Yoshinobu Yamade, Chisachi Kato	ASME2013 Fluids Engineering Division Summer Meeting, July7-11, Nevada, U.S.A.	2013/07	国際	○
99	京による大規模流体解析の最新の成果 Latest results of large-scale fluid flow computations by using "K" computer	加藤千幸	第1回フォトニックデバイス・応用技術研究会, 機械振興会館, 光産業技術振興協会	2013/05/29	国内	○
100	Validation study of a numerical model for the flows including dense solids with large size difference	T. Tsuji, K. Higashida, Y. Okuyama, T. Tanaka	8th International Conference on Multiphase Flow, Jeju, Korea	May 26-31, 2013	国際	
101	Effect of wall on the flow with dense solid particles	S. Fujihara, T. Tsuji, T. Tanaka	8th International Conference on Multiphase Flow, Jeju, Korea	May 26-31, 2013	国際	
102	自動車や船の周りの流れ解析: 京を利用した最新成果	加藤千幸	「京」シンポ, イイノカンファレンスセンター, 主催: 機構・RIST 後援: 文科省	2013/05/13	国内	
103	京による大規模流体解析の最新の成果 Latest results of large-scale fluid flow computations by using "K" computer	加藤千幸	第1回フォトニックデバイス・応用技術研究会, 2013. 5. 29, 機械振興会館, 光産業技術振興協会	2013/05	国内	○
104	Large Eddy Simulations of 2D and Open-Tip Airfoils Using Voxel Meshes	Dulini Yasara Mudunkotuwa Mudunkotuwe Hitiwadi Vidanelage, Chisachi Kato	25th International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics ParCFD2013, May 20-24, Hunan University, China, Procedia Engineering vol. 61 (2013), pp. 32-39	2013/05	国際	○
105	Large-Eddy Simulation of a Pulverized Coal Combustion Field in a Furnace with a Realistic Strong Swirling Burner	H. Watanabe, K. Tanno, R. Kurose	Fourteenth International Conference on Numerical Combustion (NC13), Holiday Inn San Antonio-Riverwalk, San Antonio, Texas, USA	Apr. 8-10, 2013	国際	

106	熱流体計算ソフトウェアの新展開と京での計算	小野謙二, 大西順也, 岩田正子, 鶴沢憲, 川鍋友宏	VCADシステム研究会第33回定例研究会、和光	2013/04/01	国内	
107	ものづくりの大規模シミュレーション支援に向けた取り組み	小野謙二	第9回創成シンポジウムスーパーコンピュータ京でせまる最先端の科学技術	2013/03	国内	
108	Large-scale Computation of the Pump-Turbine Rotating Stall	Olivier PACOT, François AVELLAN, Chisachi KATO	生産研究65巻1号(2013)	2013/03	国内	
109	均質媒体モデルを用いたキャビテーション解析の問題	鈴木貴之, 加藤千幸	生産研究65巻1号(2013)	2013/03	国内	
110	角柱を対象とした音響解析における流体解析精度の影響の調査	益田直樹, 加藤千幸, 鈴木康方	生産研究65巻1号(2013)	2013/03	国内	
111	文部科学省HPCI戦略プログラム 分野4次世代ものづくりの概要	加藤千幸	「京」を中核とするHPCIシステム利用研究課題中間報告会, 2013. 3. 14, 霞が関イノベーションセンター, 主催: 一般財団法人高度情報科学技術研究機構	2013/03	国内	
112	スーパーコンピュータによるものづくりの新しい展開	加藤千幸	長崎県工業技術センター 講演会, 2013. 2. 27, 長崎商工会議所	2013/02	国内	○
113	大規模数値流体解析の現状と今後の展望	加藤千幸	京大 数理解析研究所 共同研究会, 2013. 1. 10, 京大 数理解析研究所	2013/01	国内	○
114	噴流噴霧燃焼挙動に与える雰囲気圧力の影響	北野智朗, 辻堯文, 黒瀬良一, 渡邊裕章, 小森悟	第50回燃焼シンポジウム, 愛知県産業労働センターウインクあいち	2012. 12. 5-7	国内	
115	噴霧火炎内すす生成挙動に及ぼす前駆体の影響	渡邊裕章, 林雅人, 北野智朗, 黒瀬良一, 小森悟	第50回燃焼シンポジウム, 愛知県産業労働センターウインクあいち	2012. 12. 5-7	国内	
116	噴流噴霧火炎中のすす生成に及ぼす雰囲気圧力の影響 (Flameletモデルによる検討)	林雅人, 渡邊裕章, 北野智朗, 黒瀬良一, 小森悟	第26回数値流体力学シンポジウム, 国立オリンピック記念青少年総合センター	2012. 12. 18-20	国内	
117	分野4 次世代ものづくりの概要	加藤千幸	「文部科学省 HPCI戦略プログラム 第3回分野4 次世代ものづくりシンポジウム 講演集」, 2012. 12. 7, pp. 13-pp. 20 東大生研革新センター発行	2012/12	国内	
118	乱流の直接シミュレーションによる熱流体設計の革新を目指して	加藤千幸	「文部科学省 HPCI戦略プログラム 第3回分野4 次世代ものづくりシンポジウム 講演集」, 2013. 12. 7, pp. 21-pp. 32 東大生研革新センター発行	2012/12	国内	
119	Issues and approach for large-scale CFD on K computer	Kenji Ono	International Workshop on Future of CFD and Aerospace Sciences	2012/12	国際	○
120	気液2相流れ解析における圧力ポアソン方程式の解法に関する検討 (第2報: MultiGrid法を前処理としたCG法の有効性について)	大西順也, 小野謙二	第26回数値流体力学シンポジウム	2012/12	国内	
121	京による最新計算事例の紹介	加藤千幸	第26回数値流体力学シンポジウム, 2012. 12. 18-20, 東京	2012/12	国内	○
122	スパコン京の産業利用	加藤千幸	HPC産業スクール(入門・討議)特別コース, 2012. 11. 1, 東大生研, pp. 55-81	2012/11	国内	

123	次世代ものづくりへの挑戦—数値シミュレーションの果たす役割と展望・課題—	加藤千幸	ニュートンワークス(株)主催「非線形解析フォーラム2012」, 2012.11.9, 東京コンファレンスホール	2012/11	国内	○
124	Very Large-Scale Fluid-Flow and Aeroacoustical Simulations for Engineering Applications Performed on Supercomputer “K”	Chisachi Kato	SC12, Salt Lake City, Utah, U.S.A., Salt Palace Convention Center, November 10-16, 2012	2012/11	国内	○
125	空調用遠心ファンにおける空力騒音の計算	岩瀬拓, 尾原秀司, 米山裕康, 山出吉伸, 加藤千幸	日本機械学会流体工学部門講演会(2012/11/17-18, 同志社大学)	2012/11	国内	
126	簡易HVACモデルの内部流れから発生する音の計算	郭陽, 加藤千幸, 山出吉伸, トバグスノーフアル, ハエダル, 高山務	日本機械学会流体工学部門講演会(2012/11/17-18, 同志社大学)	2012/11	国内	
127	音響解析における流体解析精度の影響の調査	益田直樹, 加藤千幸, 鈴木康方	日本機械学会流体工学部門講演会(2012/11/17-18, 同志社大学)	2012/11	国内	
128	ボクセルメッシュ計算による2次元翼から発生する空力騒音の解析	吉村英人, 加藤千幸, 郭陽, 山出吉伸	日本機械学会流体工学部門講演会(2012/11/17-18, 同志社大学)	2012/11	国内	
129	CFDによるキャビテーション流れ解析の課題	加藤千幸	第16回キャビテーションシンポジウム, 2012.11.24, 金沢大学	2012/11	国内	○
130	均質媒体モデルを用いたキャビテーション解析の問題	鈴木貴之, 加藤千幸	第16回キャビテーションシンポジウム, 2012.11.24, 金沢大学	2012/11	国内	
131	乱流噴霧燃焼のラージ・エディ・シミュレーション	黒瀬良一, 林雅人, 森合秀樹, 渡邊裕章, 小森悟	第40回日本ガスタービン学会定期講演会, 釧路市観光国際交流センター	2012.10.17	国内	○
132	輻射を考慮した部分予混合燃焼のLarge-Eddy Simulation	西家隆行, 黒瀬良一, 渡邊裕章, 張会来, 小森悟	第40回日本ガスタービン学会定期講演会, 釧路市観光国際交流センター	2012.10.17-18	国内	
133	Automatic Grid Generation over 10 Billion Scale and Visualization	小野謙二	VINAS user group meeting	2012/10	国内	○
134	Technology that joins product design and simulation—Construction of HPC/PF and its application scenario	小野謙二	JSME 25th Computational Mechanics Division Conference	2012/10	国内	
135	2 Box車の空気抵抗低減に関する研究—後流と表面圧力の検証及び車両後流渦と空気抵抗との関係—	忠津雅也, 山村淳, 田中博, 安木剛, 高山務, 山出吉伸, 鈴木康方, 加藤千幸	自動車技術会 2012年秋季大会, 2012.10.3-5, 大阪国際会議場, 自動車技術会論文集44巻5号 2013年 pp.1287-1294	2012/10	国内	
136	京と次世代ものづくり Supercomputer “K” and next-generation industrial design	加藤千幸	日本機械学会 第25回計算力学講演会 (CMD2012), 神戸, 2012.106-9	2012/10	国内	○
137	Industrial applications of large-scale fluid-dynamics simulations	Chisachi Kato	CCP2012, 理化学研究所計算科学研究機構, 2012.10.14-18	2012/10	国内	
138	Effect of disturbance of inlet spray velocity on flame structure	T. Kitano, R. Kurose, S. Komori	In Proc. of 12th Triennial International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems (ICLASS 2012), Heidelberg, Germany	Sep. 2-6, 2012	国際	
139	大規模流体計算へのチャレンジ	小野謙二	戦略分野4 燃焼コンソーシアム研究会	2012/09	国内	

140	大規模なLES解析の現状と今後の展望	加藤千幸	日本機械学会年次大会P-SCD366：噴流、後流、およびはく離流れの基礎と先進的応用に関する研究分科会講演，2012.9.9，金沢マウンテンホテル	2012/09	国内	○
141	ものづくりとシミュレーション、その動向と数学者に求められるもの	加藤千幸	早稲田数学・産業界連携セミナー，2012.9.28，早稲田大学	2012/09	国内	
142	Sharp界面モデルを用いた気液二相流解析の精度検証	大西順也、小野謙二	日本混相流学会年会講演会2012	2012/08	国内	
143	クラウドコンピューティング時代の大規模解析を実現するFrontFlow/blue	加藤千幸	FFBセミナー，2012.8.22，	2012/08	国内	
144	Large-eddy simulation of multiphase combustion	H. Watanabe, R. Kurose	In Proc. of Thirty-Fourth International Symposium on Combustion, Abstracts of Work-In-Progress Posters, Warsaw University of Technology, Warsaw, Poland	Jul. 29-Aug. 3, 2012	国際	
145	HPC/PF - High Performance Computing Platform: An Environment that Accelerates Large-Scale Simulations	Kenji Ono	VEGPAR 2012	2012/07	国際	○
146	ものづくり分野におけるスパコン「京」の活用	加藤千幸	「都市政策」'12.7月号，第148号，pp.4-10，公益社団法人神戸都市問題研究所	2012/07	国内	
147	クラウドコンピューティング時代の大規模解析を実現するFrontFlow/blue	加藤千幸	FFBセミナー，2012.7.13，	2012/07	国内	
148	HPCによるものづくりの革新	加藤千幸	京コンピュータ・シンポジウム2012および第2回戦略プログラム5分野合同ワークショップ，神戸大学，2012.6.14-15	2012/06	国内	
149	噴霧火炎中のすす生成・成長に及ぼす燃料液滴径および霧団気圧力の影響	林雅人，北野智朗，黒瀬良一，小森悟，渡邊裕章，牧野尚夫	粉体工学会 2012年度春期研究発表会	2012.5.22-23	国内	
150	Development of a parallel Poisson equation solver for two-phase flow simulations	Junya Onishi, Kenji Ono	MASCOT and ISGG 2012	2012/05	国際	
151	Development of technology for very-large-scale voxel generation and its interface for simulators	Kenji Ono	Proceedings of the Conference on Computational Engineering and Science	2012/05	国内	
152	An Efficient Data Structure of Building-Cube Method for Large-Scale Computation	Kenji Ono	Proceedings of the Conference on Computational Engineering and Science	2012/05	国内	
153	A Software Framework of the Building-Cube Method for a Large-scale Computation	Soichirou Suzuki, Kenji Ono, Takanobu Ogawa, Junya Onishi	MASCOT and ISGG 2012	2012/05	国際	
154	Expected breakthroughs with large-scale computations for next-generation industrial design	Chisachi Kato	15th Workshop on Sustained Simulation Performance (15th WSSP)	2012/03	国内	
155	LESの工学的実用化に向けて	加藤千幸	TSFDシンポジウム，2012.3.5，東大生研	2012/03	国内	
156	Expected breakthroughs with large-scale computations for next-generation industrial design -Applications of large-scale CFD and other areas-	Chisachi Kato	15th Workshop on Sustained Simulation Performance (15th WSSP)，東北大学，2012.3.22	2012/03	国内	○

157	ものづくり分野で次世代HPC技術を普及させるための戦略	加藤千幸	第3回スーパーコンピューティングセミナー, 2012. 2. 16, トスラブ市ヶ谷	2012/02	国内	○
158	航空機ガスタービンエンジン燃焼器のサブスケールモデル内部における噴霧乱流燃焼場のLarge-eddy simulation, 口頭	矢野裕, 黒瀬良一, 小森悟, 森合秀樹, 渡邊裕章, 赤松史光	第25回数値流体力学シンポジウム, 大阪大学 コンベンションセンター (吹田キャンパス)	Dec. 19, 2011	国内	
159	噴流および再循環流中の噴霧火炎におよぼす雰囲気圧力の影響, 口頭	北野智朗, 中谷友昭, 黒瀬良一, 小森 悟	第49回燃焼シンポジウム, 慶應義塾大学 日吉 キャンパス (横浜市)	Dec. 5-7, 2011	国内	
160	噴霧燃焼のLARGE-EDDY SIMULATION, ポスター	矢野 裕, 渡邊裕章, 黒瀬良一, 小森 悟	第49回燃焼シンポジウム, 慶應義塾大学 日吉 キャンパス (横浜市)	Dec. 5-7, 2011	国内	
161	強旋回バーナ微粉炭燃焼火炎のlarge-eddy simulation, ポ スター	渡邊裕章, 丹野賢二, 黒瀬良一	第49回燃焼シンポジウム, 慶應義塾大学 日吉 キャンパス (横浜市)	Dec. 5-7, 2011	国内	
162	迎角0度の角柱から発生する広帯域騒音予測のためのLES解 析	益田直樹, 加藤千幸, 鈴木康方	第25回数値流体力学シンポジウム, 大阪大 学, 2011.12.19-21	2011/12	国内	
163	Effect of ambient pressure on spray jet flame behavior, 口頭	T. Kitano, T. Nakatani, R. Kurose, S. Komori	The International Gas Turbine Congress 2011, Osaka International Convention Center, Osaka,	Nov. 13-18, 2011	国際	
164	Large-eddy simulation of a spray combustion field in a scaled sector model for a jet engine combustor, 口 頭	H. Moriai, R. Kurose, S. Komori, F. Akamatsu	The International Gas Turbine Congress 2011, Osaka International Convention Center, Osaka,	Nov. 13-18, 2011	国際	
165	Analysis and flamelet modeling for spray combustion in high ambient pressure condition, 口頭	T. Kitano, R. Kurose, S. Komori	The Eleventh Seoul National-Kyoto-Tsinghua University Thermal Engineering Conference, Shineville Resort in Jeju Island, Korea	Nov. 2-4, 2011	国際	
166	超大規模熱流体計算のための階層的直交格子生成と 車両の熱・空力解析への応用	小野謙二(理化学研究所計算科学研究機 構)	日本機械学会流体工学部門講演会、福岡	2011/11/01	国内	
167	スーパーコンピューティングとこれからのものづくり	加藤千幸	第25期CAMMフォーラム 本例会	2011/11	国内	
168	Petascale Innovative Simulation Software for Manufacturing / Quantum Bio / Nano Device Systems	Chisachi Kato	SC11, Nov. 15, Seattle, USA, 2011	2011/11	国際	○
169	乱流燃焼数値シミュレーションは「ものづくり」に如何に 貢献するか	黒瀬良一	(財) 計算科学振興財団 (神戸市)	2011/10/28	国内	○
170	Large-eddy simulation and experimental validation of spray flame, ポスター	R. Kurose, H. Watanabe, F. Akamatsu, J. Hayashi, H. Moriai, S. Komori	2nd Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Spray Combustion (TCS2), Chia Laguna Conference Centre, Sardinia, Italy	Sep. 15, 2011	国際	
171	Numerical simulation and validation of a spray combustion field in a scaled sector model for a jet engine combustor, 口頭	H. Moriai, R. Kurose, S. Komori, F. Akamatsu	International Society for Air Breathing Engines 2011, Gothenburg, Sweden	Sep. 12-16, 2011	国際	
172	角柱から発生する広帯域騒音の数値解析	益田直樹(日大), 加藤千幸(東大生 研), 鈴木康方(日大)	日本機械学会2011年度年次大会	2011/09	国内	

173	スーパーコンピューティングと産業イノベーション	加藤千幸	計算科学振興財団, 高度計算科学研究支援センター開設記念シンポジウム, 2011.9.7., 高度計算科学研究支援センター	2011/09	国内	○
174	角柱から発生する広帯域騒音の数値解析	益田直樹 (日大), 加藤千幸 (東大生研), 鈴木康方 (日大)	日本機械学会2011年度年次大会, 2011.9.11-14, 東工大	2011/09	国内	
175	FrontFlow/Blue: Open-Source CFD Solvers for the prediction of complicated turbulent flows and aeroacoustics with parallel computing capability of up to 1 million cores and 100 billion grids	Yoshinobu Yamade, et al.	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2012	2011/08	国内	
176	Applications of fully-resolved large eddy simulation to unsteady fluid-flow and aeroacoustics predictions	Chisachi Kato	2011TSFP	July 28 - 31, 2011	国際	○
177	Industry-university collaborative project on numerical predictions of cavitating flows in hydraulic machinery	Chisachi Kato	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011, July 24-29, 2011, Hamamatsu, Japan	2011/07	国際	○
178	Numerical analysis of WING-TIP flows and aerodynamic sound generated from the flows	Kazuaki YAMASARI, Yasumasa SUZUKI, Chisachi KATO, Masaaki OHNISHI, Kentaro YATUDUKA, Taneyuki TAIRA, Hajime FUJITA	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011, July 24-29, 2011, Hamamatsu, Japan	2011/07	国際	○
179	FrontFlow/Blue: Open-Source CFD Solvers for the prediction of complicated turbulent flows and aeroacoustics with parallel computing capability of up to 1 million cores and 100 billion grids	Yoshinobu Yamade, et al.	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011, July 24-29, 2011, Hamamatsu, Japan	2011/07	国際	○
180	Applications of fully-resolved large eddy simulation to unsteady fluid-flow and aeroacoustics predictions	Chisachi Kato	2011TSFP, July 28 - 31, 2011 Ottawa, Canada	2011/07	国際	○
181	Large-eddy simulation on a pulverized coal combustion furnace with a complex swirl burner, 口頭	H. Watanabe, K. Tanno, R. Kurose, S. Komori	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011 (AJK2011-FED), ACT CITY congress center, Hamamatsu, Japan	Jun. 24-29, 2011	国際	
182	Large-eddy simulations of pulverized-coal and spray combustion, 口頭	H. Watanabe, R. Kurose	ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2011 (AJK2011-FED), ACT CITY congress center, Hamamatsu, Japan	Jun. 24-29, 2011	国際	
183	HPC (High Performance Computing) 概要	加藤千幸	HPC産業利用スクール入門関西コース, 2011.6.30, 神戸	2011/06	国内	
184	ものづくりにおけるスーパーコンピューティング技術の推進検討小委員会」から提言	加藤千幸	学術会議主催 第2回計算科学シミュレーションシンポジウム, 2011年4月20日, 日本学術会議	2011/04	国内	

3. 受賞等

No.	名称	受賞者氏名	授賞機関(学会名等)	受賞した時期	国内・国際 の別	備考
1	該当無					

4. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

No.	名称	日付	説明	備考
1	産経新聞朝刊	2014年2月3日	「23億個の空間で奏功 衝突時の空気のみ予測…効率的に新車開発」	

2	日本経済新聞	2014/1/9(木)	スパコン「京」でものづくり トヨタは車設計 大規模実験不要に	夕刊1面
3	神戸新聞	2013/12/7(土)	スパコン「京」活用へ ものづくりの実践例を 発表 研究者や技術者ら	10面
4	日経産業新聞	2013/11/25(月)	サーチャライト 製造業に広がるシミュレーショ ン 日本発製品「京」から育てる	朝刊5面
5	取材/日本経済新聞社 草塩拓郎 氏	2013年11月1日	日本経済新聞で「京」の成果をまとめる記事を 掲載するため、その一環として12月6日に HPCI戦略プログラム「分野4 次世代ものづく り」のシンポジウムで講演する「HPC/PF の開発とアウトリーチ活動への展開」について 事前に研究取材を受けた。	神戸、日本/小野謙二(理化学研究所計算科学研究機構)
6	日本経済新聞	2013/9/24(火)	スパコン「京」で開発費減 東大は車燃費向上 で成果	朝刊11面
7	東京新聞	2013/6/21(金)	スパコン「京」 4位でも「最先端なんです」	朝刊25面
8	神戸新聞	2013/6/18(火)	スパコン性能 中国が1位に 「京」4位気にし ない 関係者「実用度世界トップ」	朝刊27面
9	日刊工業新聞	2013/5/24(金)	次世代スパコン 効率活用できる設計に 消費 電力削減がカギ 中小向け解析サービス期待	19面
10	NHKおはよう日本	2013/5/9(木)	スパコン開発に関するインタビュー	
11	神戸新聞	2013/5/8(金)	計算科学振興財団 東大生産研と連携協定締結 「京」の産業利用増へ	朝刊
12	マイナビニュース	2013/5/7(火)	東大生産研など、FMO計算法を強化してナノ-バ イオ複合系に適用	
13	日経バイオテックONLINE	2013/5/1(水)	立教大、みずほ情報、東大生産研、半導体の表 面に結合するペプチドをシミュレート	
14	YAHOO! ニュース	2012/3/28(水)	東大など、医薬品候補化合物とタンパク質の相 互作用解析の新技术を開発	
15	日経産業新聞	2012/3/28(水)	兵庫県経済広告特集 高度産業クラスターづ くり	14面
16	日経産業新聞	2012/3/28(水)	兵庫県経済広告特集 最先端科学技術拠点か ら	15面
17	マイナビニュース	2012/3/28(水)	東大など、医薬品候補化合物とタンパク質の相 互作用解析の新技术を開発	
18	日刊工業新聞	2012/3/27(火)	たんぱく質・医薬候補物質の相性 高速・高 精度に解析 東大生研などツール開発	28面

19	CCSNEWS2	2012/3/27 (火)	東大などが薬物とたんぱく質との相互作用解析で 新手法 フラグメント展開を4体まで拡張し た新FMO法、地球シミュレータで実証計算	
20	日経バイオテクONLINEアカデミック版	2012/3/27 (火)	東大生研、立教大、みずほ情報総研、スーパー コンピューターを用いて詳細に薬物設計できる 手法を開発	
21	WEB新聞/化学工業日報WEB版	2012/3/27 (火)	立教大、みずほ情報総研など、創薬支援の新手法 開発	
22	日刊工業新聞Business Line	2012/3/27 (火)	東大生研など、たんぱく質・医薬候補物質の相 性解析するツール開発	
23	WEB新聞/日経プレリリース	2012/3/27 (火)	東京大学生産技術研究所など、医薬品候補化合 物とタンパク質の相互作用解析の高分解能化に 成功—スパコンを用いたフラグメント分子軌道 法による超高速計算—	
24	読売新聞	2012/3/20(火)	列島再生 第2部「新たな国土づくり」 企業誘致「京」の引力 第2章「成長支える 頭脳」④	14面
25	日本経済新聞	2012/2/17 (金)	「京」で抗がん剤開発 中外製薬・興和など 初の商業利用	1面
26	日経産業新聞	2011/9/13 (火)	第1部変わる研究現場① ITが導く 医の進化 論 スパコン創薬「京」の号砲	1面
27	日経産業新聞	2011/9/13 (火)	化合物、治験前に精度向上 仮想臓器で病状予 測も	16面
28	日刊工業新聞	2011/9/8 (木)	東大生研 神戸に利用促進拠点 スパコンソフト ト産業向けに拡大	朝刊19面
29	日経産業新聞	2011/9/8 (木)	東大 企業に「京」利用促す 神戸にスパコン 体感拠点	11面
30	神戸新聞	2011/9/8 (木)	スパコン「京」、東大が神戸に拠点 企業の競 争力向上図る 加藤教授会見 新薬開発など支 援	朝刊10面 (地域経済)
31	朝日新聞	2011/9/8 (木)	スパコン・京 お試しを 神戸に企業向け拠 点	朝刊8面 (総合)
32	毎日新聞	2011/9/8 (木)	東大が神戸にスパコン拠点	朝刊29面 (社会)
33	読売新聞	2011/9/8 (木)	「京」隣接地に産業界活性拠点 東大などが開 設	朝刊30面 (地域)
34	日本経済新聞	2011/9/8 (木)	スパコン「京」 利用希望企業を支援 東大・ 富士通など 神戸の拠点開設	朝刊9面 (企業総合)
35	日本経済新聞	2011/9/8 (木)	スパコン「京」の産業利用を促進 東大、神戸 に拠点	朝刊31面 (近畿経済・兵庫)
36	産経新聞	2011/9/8 (木)	スパコン「京」を使いこなせ 神戸に研究支援 拠点 東大生産技術研究所など開設	朝刊21面 (兵庫)

37	神戸新聞	2011/9/7 (水)	スパコンソフト普及へ 東大、神戸に拠点開設 ポータル2期	夕刊8面
----	------	--------------	---------------------------------	------

5. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)

No.	名称	開催日時	開催場所	参加者(人数)
1	該当なし			

研究開発課題4: 多目的設計探査による設計手法の革新に関する研究開発

代表者 大山聖

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会誌・雑誌名等)	発表した時期	国内・国際 の別	査読(有りの場合 ○を記入)
1	スーパーコンピュータ京を用いた大規模集団サイズでの多数目的進化計算	立川智章, 渡辺毅, 大山聖(JAXA)	進化計算学会論文誌 Vol. 6 (2015) No. 3 p. 126-136	2015/11	国内	○
2	評価値空間と設計変数空間の線形関係の非対応性指標と遺伝的演算へのフィードバック	吉田徹, 吉川大弘(名古屋大学)	進化計算学会論文誌 Vol.6 (2015) No.2 pp.82-89	2015/10	国内	○
3	A Study on Many-Objective Optimization Using the Kriging-Surrogate-Based Evolutionary Algorithm Maximizing Expected Hypervolume Improvement	Chang Luo, Koji Shimoyama, and Shigeru Obayashi (Tohoku University)	Mathematical Problems in Engineering, Vol. 2015, 2015, Article ID 162712.	2015/10	国際	○
4	Analysis of Pareto Solutions Based on Non-Correspondence in Spread Between Objective Space and Design Variable Space	Toru Yoshida, Tomohiro Yoshikawa(Nagoya Univ.)	Journal of Advanced Computational Intelligence and Intelligent Informatics (JACIII), Vol.19 No.5 pp. 681-687	2015/9	国際	○
5	reference lineに基づくユーザの嗜好方向探索手法の提案	岸上利裕(名古屋大学), 吉川大弘(名古屋大学)	進化計算学会論文誌 Vol. 6, No. 1, p. 31-41	2015/4	国内	○
6	空力音響多目的設計探査 -ロケット射点形状設計への適用-	大山聖, 立川智章, 野々村拓, 藤井孝蔵(JAXA)	ターボ機械 42(5), 305-309, 2014-05	2014/5	国内	
7	Distribution Search on Evolutionary Many-Objective Optimization: Selection Mappings and Recombination Rate	Hernan Aguirre, Kiyoshi Tanaka(Shinshu Univ.), Akira Oyama(JAXA)	Evolution, Complexity and Artificial Life, ISBN 978-3-642-37576-7, Editors S. Cagnoni, M. Mirolli, M. Villani, Springer, pp.241-259, 2014.	2014/3	国際	○
8	ロケット射点形状の空力音響多目的設計探査	大山聖(JAXA)	日本機械学会 計算力学部門 CMDニュースレター No.51	2013/12	国内	
9	Updating Kriging Surrogate Models Based on the Hypervolume Indicator in Multi-Objective Optimization	Koji Shimoyama, Koma Sato, Shinkyu Jeong, and Shigeru Obayashi,	Journal of Mechanical Design, Transactions of the ASME, Vol. 135, No. 9, September 2013, pp. 094503-1-7.	2013/9	国際	○
10	Knowledge Extraction from Pareto Solutions in Multi-objective Engineering Design Problem based on Geodetic Distance between Objective Space and Design Variable Space	Fumiya Kudo, Tomohiro Yoshikawa	International Journal of Computer Science and Artificial Intelligence, Vol.3, No.2	2013/6	国際	○
11	GPを用いた非劣解からの設計情報の抽出	立川智章, 大山聖, 藤井孝蔵	進化計算学会論文誌, Vol. 3, No. 3, p. 133-142	2012/12	国内	○

12	多数目的最適化におけるPSOを用いた2段階探索法の提案	平野博之, 吉川大弘	進化計算学会論文誌, Vol. 3, No. 3, p. 163-172	2012/12	国内	○
13	多目的最適化におけるKriging応答曲面法のためのサンプル追加指標の比較	下山幸治, 鄭信圭, 大林茂	進化計算学会論文誌, Vol. 3, No. 3, pp. 173-184.	2012/12	国内	○
14	宇宙工学分野での進化型計算の利用	大山聖	電気学会誌	2012/4	国内	
15	太陽極域観測衛星軌道設計の多目的設計探索	大山聖, 川勝康弘, 萩原和子	電気学会学会誌, 4月号 Vol. 132 (2012) No. 4 P 208-211	2012/4	国内	
16	Design Optimization of a Sport Shoe Sole Structure by Evolutionary Computation and Finite Element Method Analysis	Koji Shimoyama, Kazuya Seo, Tsuyoshi Nishiwaki, Shinkyu Jeong, and Shigeru Obayashi	Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part P: Journal of Sports Engineering and Technology	2011/12	国際	○
17	多目的設計探索と宇宙工学への利用	大山聖	システム/制御/情報 Vol. 55, No. 9, pp374-381	2011/9	国内	

2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果（発表題目、口頭・ポスター発表の別）	発表者氏名	発表した場所（学会名等）	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	Evolutionary Computation on Supercomputer K	Akira Oyama (JAXA)	ACALCI2016 (Canberra, Australia)	2016/2	国際	○
2	Design Exploration of a Low-Thrust Space Trajectory Problem for DESTINY Mission	Takeshi Watanabe, Tomoaki Tatsukawa, Takayuki Yamamoto, Akira Oyama, Yasuhiro Kawakatsu (JAXA)	AIAA SciTech 2016 (San Diego, CA, USA)	2016/1	国際	
3	Parallelization Impact on Many-Objective Optimization for Space Trajectory Design	Martin Schlueter, Chit Hong Yam, Takeshi Watanabe, Akira Oyama (JAXA)	ICOA12015 (2015 2nd International Conference on Artificial Intelligence), Amsterdam, Netherlands	2015/12	国際	
4	Many-Objective Optimization with Very Restricted Evaluation Budgets	Martin Schlueter, Takeshi Watanabe, Akira Oyama (JAXA)	進化計算シンポジウム2015 (愛知県西尾市)	2015/12	国内	
5	京コンピュータを用いた空力音響最適化問題の多目的設計探索	立川智章 (東京理科大学)	第5回計算力学シンポジウム (東京都港区)	2015/12	国内	○
6	多目的最適化問題における Chebyshev Achievement Function に基づく解の優劣評価の効果	内野良寛, 立川智章, 藤井孝蔵 (東京理科大学)	進化計算シンポジウム2015 (愛知県西尾市)	2015/12	国内	
7	生き残り続けた解が探索方向を考慮した $A \in S \in H$ に与える影響	矢澤佑記, アギレ エルナン (信州大学), 大山聖 (JAXA), 田中清 (信州大学)	進化計算シンポジウム2015 (愛知県西尾市)	2015/12	国内	
8	需要水量変化に対応する配水ネットワーク多目的最適化	大野泰嗣, アギレエルナン, 田中清 (信州大学)	進化計算シンポジウム2015 (愛知県西尾市)	2015/12	国内	
9	更新幅を用いた局所重み付けによる評価値の不平等性軽減についての検討	岸上利裕, 吉川大弘 (名古屋大学)	進化計算シンポジウム2015 (愛知県西尾市)	2015/12	国内	
10	モノづくりにおける車体構造最適化システムの設計と課題	小平剛央, 鈿持寛正, 厚井省吾, 鐵本雄一, 岡沢恭久, 木崎勇, 金本俊介 (マツダ), 大山聖, 渡辺毅 (JAXA), 立川智章 (東京理科大学)	SSI2015 (計測自動制御学会システム・情報部門学術講演会), 北海道函館市	2015/11	国内	

11	インタラクティブ散布図行列可視化ツールiSPMの開発	立川智章(東京理科大学), 大山聖, 渡辺毅(JAXA), 小平剛央, 鈿持寛正(マツダ), 宮地英生(東京都市大学)	SSI2015 (計測自動制御学会システム・情報部門学術講演会), 北海道函館市	2015/11	国内	
12	多目的最適化問題における最大値/最小値による正規化範囲についての検討	岸上利裕, 吉川大弘(名古屋大学)	SSI2015 (計測自動制御学会 システム・情報部門学術講演会) 北海道函館市	2015/11	国内	
13	DESTINY軌道計画	山本高行, 川勝康弘, Chit Hong Yam, Campagnola Stefano, 杉本理英, 大山聖, 渡辺毅, 廣瀬史子, 池永敏憲(JAXA), 立川智章(東京理科大学), 萩原和子(MSS), 小倉聡司(東京大学), 中宮賢樹(TU Darmstadt/ESOC)	第59回宇宙科学技術連合講演会(鹿児島県鹿児島市)	2015/10	国内	
14	Real-World Design Exploration Using Supercomputer K	Akira Oyama(JAXA)	KSME-JSME Joint Symposium on Computational Mechanics and CAE 2015 (Shinjuku-ku, Tokyo)	2015/10	国際	
15	イブシロンロケットによる高エネルギー軌道への投入	佐藤峻介, 山本高行, 川勝康弘, 大山聖(JAXA), 萩原和子(MSS), 立川智章(東京理科大学)	第59回宇宙科学技術連合講演会(鹿児島県鹿児島市)	2015/10	国内	
16	スーパーコンピュータ「京」を用いた複数車種の車両構造同時設計最適化	大山聖(JAXA), 小平剛央, 鈿持寛正(マツダ), 立川智章, 渡辺毅(JAXA)	第28回 計算力学講演会(CMD2015), 神奈川県横浜市	2015/10	国内	
17	多目的最適化を用いた着陸地点の選定手法	西山万里(東京大学), 大嶽久志, 星野健, 橋本樹明, 渡辺毅(JAXA), 立川智章(東京理科大学), 大山聖(JAXA)	第59回宇宙科学技術連合講演会, 鹿児島県鹿児島市	2015/10	国内	
18	Traffic Signal Optimization : Minimizing Travel Time and Fuel Consumption	Rolando Armas, Hernan Aguirre, Saul Zapotecas and Kiyoshi Tanaka (Shinshu Univ.)	EA2015 (International Conference in Artificial Evolution 2015), Lyon, France	2015/10	国際	
19	Approaches for Many-objective Optimization : Analysis and Comparison on MNK-landscapes	Hernan Aguirre, Saul Zapotecas Martinez, Arnaud Liefoghe, Sebastien Verel and Kiyoshi Tanaka (Shinshu Univ.)	EA2015 (International Conference in Artificial Evolution 2015), Lyon, France	2015/10	国際	
20	多数目的最適化を用いた衛星軌道設計問題のパレート解集合の解析	矢澤佑記, Hernan Aguirre(信州大学), 大山聖(JAXA), 秋本洋平, 田中清(信州大学)	平成27年度電子情報通信学会信越支部大会(新潟県柏崎市)	2015/10	国内	
21	進化計算による配水ネットワーク多目的最適化の基礎検討	大野泰嗣, Hernan Aguirre, 秋本洋平, 田中清(信州大学)	平成27年度電子情報通信学会信越支部大会(新潟県柏崎市)	2015/10	国内	
22	多目的問題における評価値の正規化に対する問題点の検討	岸上利裕, 吉川大弘(名古屋大学)	第9回進化計算学会研究会(兵庫県神戸市)	2015/9	国内	
23	多目的最適化問題における混雑距離を用いた均一性評価指標の提案	丸山翔平(東京理科大学), 渡辺毅, 大山聖(JAXA), 立川智章, 藤井孝藏(東京理科大学)	第9回進化計算学会研究会(兵庫県神戸市)	2015/9	国内	
24	実数値GA における設計変数の有効桁数の影響評価	近藤俊樹, 立川智章(東京理科大学), 大山聖, 渡辺毅(JAXA), 藤井孝藏(東京理科大学)	第9回進化計算学会研究会(兵庫県神戸市)	2015/9	国内	

25	A study on Non-Correspondence in Spread between Objective Space and Design Variable Space and Application to Genetic Search	Tomohiro Yoshikawa, Toru Yoshida, Toshihiro Kishigami (Nagoya Univ.)	PDPTA 2015, The 21st International Conference on Parallel and Distributed Processing Techniques and Applications (Las Vegas, Nevada, USA)	2015/7	国際	
26	Many-Objective Optimization for Space Mission Analysis	Martin Schlueter, Takeshi Watanabe, Tomoaki Tatsukawa, Akira Oyama (JAXA)	ISTS 30th (Kobe, Japan)	2015/7	国際	
27	Comprehensive Space Mission Analysis via Many-Objective Optimization	Martin Schlueter, Takeshi Watanabe (JAXA), Tomoaki Tatsukawa (Tokyo Univ. of Science), Akira Oyama (JAXA)	25th Workshop on Astrodynamics and Flight Mechanics (神奈川県相模原市)	2015/7	国内	
28	DESTINYのスパイラル軌道上昇の多目的最適化とデータマイニング	渡辺毅 (JAXA), 立川智章 (東京理科大学), 山本高行, 大山聖, 川勝康弘 (JAXA)	2015年度アストロダイナミクスシンポジウム (神奈川県相模原市)	2015/7	国内	
29	Multi-Objective Optimization of Interplanetary Space Mission Trajectories	Chit Hong YAM, Martin SCHLUETER, Takeshi WATANABE, Akira OYAMA, Yasuhiro KAWAKATSU (JAXA)	25th Workshop on Astrodynamics and Flight Mechanics (神奈川県相模原市)	2015/7	国内	
30	Many Objective Optimization of Interplanetary Space Mission Trajectories	Martin Schlueter, Yam Chit Hong, Takeshi Watanabe, and Akira Oyama (JAXA)	IEEE CEC 2015 (Congress on Evolutionary Computation), Sendai, Japan	2015/5	国際	
31	On the fast hypervolume calculation method	Takeshi Watanabe, Tomoaki Tatsukawa, and Akira Oyama (JAXA)	IEEE CEC 2015 (Congress on Evolutionary Computation), Sendai, Japan	2015/5	国際	
32	Effects of the Number of Design Variables on Performances in Kriging-Model-Based Many-Objective Optimization	Chang Luo, Koji Shimoyama, and Shigeru Obayashi (Tohoku Univ.)	IEEE CEC 2015 (Congress on Evolutionary Computation), Sendai Japan	2015/5	国際	
33	Evolutionary many-objective optimization using dynamic ϵ -Hoods and Chebyshev function	Yuki Yazawa, Hernán E. Aguirre, Akira Oyama, Kiyoshi Tanaka	IEEE CEC 2015 (Congress on Evolutionary Computation), Sendai, Japan	2015/5	国際	
34	リファレンスラインを用いたユーザーの嗜好方向探索に関する研究	岸上利裕, 吉川大弘 (名古屋大学)	2015年度 人工知能学会全国大会 (北海道函館市)	2015/5	国内	
35	A Proposal of User's Preference Direction Search based on Reference Lines	Toshihiro Kishigami, Tomohiro Yoshikawa (Nagoya Univ.)	IEEE CEC 2015 (Congress on Evolutionary Computation), Sendai, Japan	2015/5	国際	
36	Nozzle-to-Ground Distance Effect on Nondominated Solutions of Multiobjective Aeroacoustic Flame Deflector Design Problem	Tomoaki Tatsukawa, Taku Nonomura, Akira Oyama, Kozo Fujii (JAXA)	AIAA Aviation, 21st AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference (Dallas, Texas, USA)	2015/5	国際	
37	A Ranking Method Based on Two Preference Criteria: Chebyshev Function and ϵ -Indicators	Antonio Lopez (Metropolitan Autonomous Univ.), Akira Oyama, Kozo Fujii (JAXA)	Proceedings of 2015 IEEE Congress on Evolutionary Computation, pp. 2827-2834	2015/5	国際	
38	Selection of Landing Sites for Future lunar Missions with Multi-Objective Optimization	Mari Nishiyama (Univ. of Tokyo), Hisashi Otake, Takeshi Hoshino, Tatsuaki Hashimoto, Takeshi Watanabe, Tomoaki Tatsukawa, Akira Oyama (JAXA)	46th Lunar and Planetary Science Conference 2015 (The Woodlands, Texas, USA)	2015/3	国際	
39	リファレンスラインに基づくユーザの嗜好方向探索手法の提案	岸上利裕, 吉川大弘 (名古屋大学)	第8回進化計算学会研究会 (東京都八王子市)	2015/3	国内	

40	散布図行列可視化ツール「iSPM」を用いた多次元データの分析支援	立川智章 (JAXA)	第66回CG・可視化研究会 (CAVE研究会), 東京都立川市	2015/2	国内	○
41	月周回衛星「かがや」のデータを用いた多目的最適化による月着陸最適候補地の選定	西山万里 (東京大学), 大嶽久志, 星野健, 橋本樹明, 渡辺毅, 立川智章, 大山聖 (JAXA)	平成26年度 宇宙科学情報解析シンポジウム (神奈川県相模原市)	2015/2	国内	
42	DESTINY軌道計画	山本高行, Yam Chit Hong, Campagnola Stefano, 杉本理英, 大山聖, 立川智章, 渡辺毅, 廣瀬史子, 池永敏憲, 川勝康弘 (JAXA), 萩原和子 (MSS), 小倉聡司, Srali Bruno (東京大学), 中宮賢樹 (TU Darmstadt/ESOC), 佐藤峻介 (JAXA)	第15回宇宙科学シンポジウム, 神奈川県相模原市	2015/1	国内	
43	Multiobjective design exploration of a many-objective space trajectory problem for low-thrust spacecraft using MOEA with large populations	Tomoaki Tatsukawa, Takeshi Watanabe, Akira Oyama, Kozo Fujii (JAXA)	AIAA SciTech2015, Kissimmee, Florida, USA	2015/1	国際	
44	Design exploration of a DBD plasma actuator for massive separation control	Takeshi Watanabe, Hikaru Aono, Tomoaki Tatsukawa, Taku Nonomura, Akira Oyama, Kozo Fujii (JAXA)	AIAA SciTech2015, Kissimmee, Florida, USA	2015/1	国際	
45	京コンピュータを用いた大規模多目的最適設計	立川智章 (JAXA)	第26回関東CAE懇話会 (東京都新宿区)	2015/1	国内	○
46	A Parallelized ACO Framework for Many-Objective Optimization	Martin Schlueter, Takeshi Watanabe, Akira Oyama (JAXA)	進化計算シンポジウム2014, 広島県廿日市市	2014/12	国内	
47	DBDプラズマアクチュエータの駆動パラメータに対する多目的設計探査	渡辺毅 (JAXA)	日本機械学会分科会 (RC-D15 産業界におけるCFD利用の高度化に関する研究分科会), 東京都新宿区	2014/12	国内	○
48	DESTINY軌道設計の多目的設計探査	渡辺毅, 立川智章, Chit Hong Yam, 大山聖, 川勝康弘 (JAXA), 萩原和子 (MSS), Federico Zuiani (Univ. of Glasgow)	日本機械学会第11回最適化シンポジウム (OPTIS2014), 石川県金沢市	2014/12	国内	
49	スーパーコンピュータ「京」を用いた大規模多目的設計探査	大山聖, 立川智章, 渡辺毅 (JAXA)	日本機械学会第11回最適化シンポジウム (OPTIS2014), 石川県金沢市	2014/12	国内	
50	ハイパーボリュームの並列高速計算	渡辺毅, 立川智章, 大山聖 (JAXA)	進化計算シンポジウム2014 (広島県廿日市市)	2014/12	国内	
51	多数目的進化計算における集団サイズの超大規模化に関する一検討	立川智章, 渡辺毅, 大山聖 (JAXA)	進化計算シンポジウム2014 (広島県廿日市市)	2014/12	国内	
52	超並列蟻コロニー最適化法による多数目的最適化	Schlueter Martin, Watanabe Takeshi, Oyama Akira (JAXA)	日本機械学会第11回最適化シンポジウム (OPTIS2014), 石川県金沢市	2014/12	国内	
53	超大規模集団サイズを用いた多数目的最適化に向けた進化計算手法の開発	立川智章, 渡辺毅, 大山聖 (JAXA)	日本機械学会第11回最適化シンポジウム (OPTIS2014), 石川県金沢市	2014/12	国内	
54	Extending AeSeH from Many-objective to Multi-objective Optimization	Hernan Aguirre, Yuki Yazawa, Kiyoshi Tanaka (Shinshu Univ.), Akira Oyama (JAXA)	SEAL 2014 (The Tenth International Conference on Simulated Evolution And Learning), Dunedin, New Zealand	2014/12	国際	

55	ものづくりのための多目的設計探査	大山聖 (JAXA)	第5回「分野4次世代ものづくり」シンポジウム「先端アプリ・共通基盤・PF」部門 (兵庫県神戸市)	2014/12	国内	
56	ピッチング翼周りの動的失速流れ制御におけるDBDプラズマアクチュエータ設置位置の影響	福本浩章, 浅野兼人 (東京大学), 青野光, 渡辺毅, 野々村拓, 大山聖, 藤井孝藏 (宇宙航空研究開発機構), 田中元史, 松田寿, 大迫俊樹 (株) 東芝	第28回数値流体力学シンポジウム (東京都江戸川区)	2014/12	国内	
57	ポスト京に向けた取り組みについて	小野謙二 (理研), 大山聖 (JAXA)	第5回「分野4次世代ものづくり」シンポジウム「先端アプリ・共通基盤・PF」部門 (兵庫県神戸市)	2014/12	国内	
58	評価値空間と設計変数空間の線形関係の非対応性指標に基づく遺伝的演算へのフィードバック	吉田徹, 吉川大弘 (名古屋大学)	進化計算シンポジウム2014 (広島県廿日市市)	2014/12	国内	
59	高効率EHVI計算を用いたKrigingモデルベース多数目的最適化	Luo Chang, 下山幸治, 大林茂 (東北大学)	日本機械学会 第27回計算力学講演会 (CMD2014), 岩手県盛岡市	2014/11	国内	
60	スパイラル軌道上昇と軌道計画	山本高行, 川勝康弘, Yam Chit Hong, Campagnola Stefano, 杉本理英, 大山聖, 立川智章, 渡辺毅, 廣瀬史子, 池永敏憲 (JAXA), 萩原智子 (MSS), 小倉聡司 (東京大学), 中宮賢樹 (TU Darmstadt/ESOC)	第58回宇宙科学技術連合講演会 (長崎県長崎市)	2014/11	国内	
61	超大規模集団サイズの進化計算を用いた多数目的最適化	立川智章, 渡辺毅, Lopez Antonio, 大山聖, 藤井孝藏 (JAXA)	日本機械学会 第27回計算力学講演会 (CMD2014), 岩手県盛岡市	2014/11	国内	
62	大規模設計最適化問題の多目的設計探査	立川智章 (JAXA)	日本機化学会計算力学部門 第6回設計情報学研究会 (宮城県仙台市)	2014/10	国際	
63	スーパーコンピュータ「京」を用いた多目的設計探査の革新	大山聖 (JAXA)	第4回知能工学部会研究会「賢さの先端研究会」 / 第51回システム工学部会研究会	2014/8	国内	○
64	分布領域の非対応性指標を用いた頑健なパレート解の獲得に関する検討	吉田徹, 吉川大弘 (名古屋大学)	第7回進化計算学会研究会 (大阪府東大阪市)	2014/8	国内	
65	Many-objective evolutionary computation for optimization of separated-flow control using a DBD plasma actuator	Takeshi Watanabe, Tomoaki Tatsukawa, Antonio Lopez Jaimes, Hikaru Aono, Taku Nonomura, Akira Oyama, Kozo Fujii (JAXA)	IEEE CEC2014 (Beijing, China)	2014/7	国際	
66	Kriging model based many-objective optimization with efficient calculation of expected hypervolume improvement	Chang Luo, Koji Shimoyama, Shigeru Obayashi (Tohoku Univ.)	IEEE CEC2014 (Beijing, China)	2014/7	国際	
67	A Study on Non-Correspondence in Spread between Objective Space and Design Variable Space for Trajectory Designing Optimization Problem	Toru Yoshida, Tomohiro Yoshikawa	IEEE CEC2014 (Beijing, China)	2014/7	国際	
68	線形重回帰分析を用いた評価値空間と設計変数空間との非対応領域抽出法に関する検討	吉田徹, 吉川大弘 (名古屋大学)	2014年度人工知能学会全国大会 (愛媛県松山市)	2014/5	国内	
69	ハイブリッドロケットエンジンの概念設計及び衛星軌道設計最適化問題に関するパレート解の解析支援	吉川大弘 (名古屋大学)	第58回システム制御情報学会研究発表講演会 (SCI'14) 京都府京都市	2014/5	国内	○

70	最適解データベースを可視化する	立川智章(JAXA)	日本計算工学会 第7回S & V (Simulation & Visualization) 研究会 (東京都文京区)	2014/4	国内	
71	多数の目的関数を持つ設計最適化手法の効率的解法	大山聖(JAXA)	分野4次世代ものづくり 第1回統合ワークショップ「共通基盤・先端アプリ・PF」部門 (東京都目黒区)	2014/3	国内	
72	多目的最適化により得られたパレート最適解集合の解析に関する一検討	佐川美也子, 秋本洋平, エルナンアギレ, 田中清, 小石正隆	2014年電子情報通信学会総合大会 ISS特別企画学生ポスターセッション (新潟県新潟市)	2014/3	国内	
73	評価値空間と設計変数空間の線形関係の非対応性に関する検討	吉田徹, 吉川大弘	第6回進化計算学会研究会 (東京都調布市)	2014/3	国内	
74	京コンピュータで可能になった多目的設計探索の新展開 - 空力音響多目的設計最適化と多数目的設計最適化-	大山聖(JAXA)	ターボ機械協会 第112 回セミナー「CFD 最新動向と最適化技術の新展開」 (東京都新宿区)	2014/2	国内	○
75	A Subspace Extraction Strategy for Many-Objective Space Partitioning Optimization	Makoto Takahashi, Youhei Akimoto, Hernan Aguirre, and Kiyoshi Tanaka	Learning and Intelligent Optimization Conference (LION8) Gainesville, Florida USA	2014/2	国際	
76	Many-objective Optimization of Trajectory Design for DESTINY Mission	Yutaka Nishio, Akira Oyama, Youhei Akimoto, Hernan Aguirre, Kiyoshi Tanaka	Learning and Intelligent Optimization Conference (LION8) Gainesville, Florida USA	2014/2	国際	
77	ロケット射点火炎偏向板の空力音響多目的設計探索	大山聖, 立川智章, 野々村拓, 藤井孝藏(JAXA)	平成25年度航空宇宙空力シンポジウム (北海道登別市)	2014/1	国内	
78	Multiobjective Design Exploration of an Aero-Acoustic Rocket Launch Site Design Problem with Evolutionary Computation and Large Eddy Simulations	Tomoaki Tatsukawa, Yuki Nagata, Taku Nonomura, Akira Oyama, Kozo Fujii, Makoto Yamamoto	AIAA SciTech2014 (National Harbor, Maryland, USA)	2014/1	国際	
79	ハイブリッドロケットエンジンの概念設計最適化問題におけるパレート解の解析支援	吉川大弘(名古屋大学)	日本機械学会東海支部 第123回講習会 (京都府京都市)	2014/1	国内	○
80	LESを用いたロケット射点形状の多目的空力音響設計探索	大山聖(JAXA)	第4回「分野4次世代ものづくり」シンポジウム (兵庫県神戸市)	2013/12	国内	
81	PSOを用いた2段階探索法の非線形・制約付き問題への適用における検討 -問題点の解決-	平野博之, 吉川大弘	進化計算シンポジウム2013 (鹿児島県霧島市)	2013/12	国内	
82	評価値空間と設計変数空間の分布領域の非対応性に基づく設計変数解析支援	吉田徹, 吉川大弘	進化計算シンポジウム2013 (鹿児島県霧島市)	2013/12	国内	
83	高対立サブ空間探索による多数目的最適化の一検討	高橋誠, 秋本洋平, アギレエルナン, 田中清	進化計算シンポジウム2013 (鹿児島県霧島市)	2013/12	国内	
84	ものづくりを考慮した実問題多数目的最適化とPOS 解析の一検討	佐川美也子, 秋本洋平, アギレエルナン, 田中清, 小石正隆	進化計算シンポジウム2013 (鹿児島県霧島市)	2013/12	国内	
85	衛星軌道設計問題にAeSeH を適用して得られたPOSに関する一考察	西尾豊, 大山聖, 秋本洋平, アギレエルナン, 田中清	進化計算シンポジウム2013 (鹿児島県霧島市)	2013/12	国内	
86	実問題を用いた多数目的最適化における進化的アルゴリズムの性能比較 -衛星軌道設計問題を題材に-	立川智章, Antonio Lopez Jaimes, 大山聖, 藤井孝藏	進化計算シンポジウム2013 (鹿児島県霧島市)	2013/12	国内	

87	A Ranking Method Based on Two Preference Criteria: Chebyshev Function and ϵ -Indicators	Antonio Lopez, Akira Oyama, and Koza Fujii	進化計算シンポジウム2013 (鹿児島県霧島市)	2013/12	国内	
88	多数目的進化アルゴリズムによって得られたPOS の評価値空間と設計変数空間における分布の解析	加納 翔, 秋本洋平, エルナン アギレ 田中清	平成25年度電子情報通信学会 Student Branch 論文発表会 (長野県長野市)	2013/12	国内	
89	ロケット射点形状に関する空力音響多目的設計問題の非劣解データベースの分析	立川智章、長田裕樹、山本誠、野々村拓、大山聖、藤井孝藏	日本機械学会 第26回計算力学講演会 (佐賀県佐賀市)	2013/11	国内	
90	進化計算とLESを用いたロケット射点形状の空力音響多目的設計探査	立川智章、長田裕樹、山本誠、野々村拓、大山聖、藤井孝藏	日本機械学会 流体工学部門講演会 (福岡県福岡市)	2013/11	国内	
91	スパコンによる流体設計の新展開	立川智章 (JAXA)	日本機械学会 第91期流体工学部門講演会フォーラム (福岡県福岡市)	2013/11	国内	
92	スーパーコンピュータ「京」を用いた多目的設計探査による設計手法の革新とJAXAでの試み	大山聖 (JAXA)	システム制御情報学会セミナー2013「実問題のための多目的設計探査 -家庭から宇宙まで-」 (京都府京都市)	2013/11	国内	○
93	多数目的最適化向け多目的進化アルゴリズムの研究	田中清、エルナン・アギレ (信州大学)	システム制御情報学会セミナー2013「実問題のための多目的設計探査 -家庭から宇宙まで-」 (京都府京都市)	2013/11	国内	○
94	設計変数空間と評価値空間を考慮した近傍交叉を用いた多数目的進化アルゴリズムの基礎検討	加納翔, 秋本洋平, Hernan Aguirre, 田中清	平成25年度電子情報通信学会 信越支部大会 (新潟県長岡市)	2013/10	国内	
95	衛星軌道設計問題解法で得られたPOSに関する一考察	西尾 豊, 大山聖, 秋本洋平, アギレエルナン, 田中清	平成25年度電子情報通信学会 信越支部大会 (新潟県長岡市)	2013/10	国内	
96	AEScHの衛星軌道設計問題における探索性能	西尾 豊, 大山聖, 秋本洋平, アギレエルナン, 田中清	平成25年度電子情報通信学会 信越支部大会 (新潟県長岡市)	2013/10	国内	
97	目的サブ空間抽出多目的進化アルゴリズムに関する一検討	高橋誠, 秋本洋平, アギレ エルナン, 田中清	平成25年度電子情報通信学会 信越支部大会 (新潟県長岡市)	2013/10	国内	
98	ものづくりを考慮した多数目的最適化におけるPOSのビジュアルな解析	佐川美也子, 秋本洋平, アギレ エルナン, 田中清, 小石正隆	平成25年度電子情報通信学会 信越支部大会 (新潟県長岡市)	2013/10	国内	
99	PSOを用いた2段階探索法の非線形問題への適用における検討 —問題点の抽出—	平野博之, 吉川大弘	第5回進化計算学会研究会 (北海道室蘭市)	2013/9	国内	
100	評価値空間と設計変数空間における分布領域の非対応性に関する検討	吉田徹, 吉川大弘	第5回進化計算学会研究会 (北海道室蘭市)	2013/9	国内	
101	ロケットの射点設計に向けた空力音響最適化問題の多目的設計探査	立川智章、長田裕樹、山本誠、野々村拓、大山聖、藤井孝藏	日本機械学会 2013年度年次大会 (岡山県岡山市)	2013/9	国内	
102	個体間距離の順位相関に基づく評価値空間と設計変数空間の非対応領域の抽出	吉田徹, 吉川大弘	第29回ファジィシステムシンポジウム (大阪府枚方市)	2013/9	国内	

103	Evolutionary Multi-Objective Optimization To Attain Practically Desirable Solutions	Natsuki Kusuno, Hernan Aguirre, Kiyoshi Tanaka, Masataka Koishi	Proc. Genetic and Evolutionary Computation Conference 2013 (GECCO 2013) Amsterdam, Netherlands	2013/7	国際	
104	Visualization of Pareto Optimal Solutions for Knowledge Extraction	Tomohiro Yoshikawa	Seventeenth International Conference on Intelligent System Application to Power System (ISAP 2013) (明治大学)	2013/7	国際	○
105	Kriging-Surrogate-Based Optimization Considering Expected Hypervolume Improvement in Non-Constrained Many-Objective Test Problems	Koji Shimoyama, Shinkyu Jeong, and Shigeru Obayashi	2013 IEEE Congress on Evolutionary Computation, Cancun, Mexico	2013/6	国際	
106	多数目的最適化における収束性向上のための多群移動型手法の検討	平野博之, 吉川大弘	2013年度人工知能学会全国大会 (富山県富山市)	2013/6	国内	
107	評価値空間と設計変数空間における個体間の距離関係に基づく相関非対応性の導出	吉田徹, 吉川大弘	2013年度人工知能学会全国大会 (富山県富山市)	2013/6	国内	
108	A study on Two-Step Search based on PSO to improve Convergence and Diversity for Many-objective Optimization Problems	Hiroyuki Hirano, Tomohiro Yoshikawa	2013 IEEE Congress on Evolutionary Computation, Cancun, Mexico	2013/6	国際	
109	Knowledge Extraction from Pareto Solutions in Multi-objective Optimization Problem using Visualization Tool "ADVICE"	Tomohiro Yoshikawa	Japan-Finland Joint Seminar (室蘭工業大学)	2013/6	国際	○
110	PSOを用いた2段階探索法における効果的なアーカイブ保存法に対する検討	平野博之, 吉川大弘	第4回進化計算学会研究会 (神奈川県横須賀市)	2013/3	国内	
111	Adaptive epsilon-Sampling and epsilon-Hood for Evolutionary Many-Objective Optimization	Hernan E. Aguirre (Shinshu Univ.), Akira Oyama (JAXA), and Kiyoshi Tanaka (Shinshu Univ.)	The 7th International Conference on Evolutionary Multi-Criterion Optimization	2013/3	国際	
112	A New Multiobjective Genetic Programming for Extraction of Design Information from Non-Dominated Solutions	Tomoaki Tatsukawa (JAXA), Taku Nonomura (JAXA), Akira Oyama (JAXA), and Kozo Fujii (JAXA)	The 7th International Conference on Evolutionary Multi-Criterion Optimization	2013/3	国際	
113	An Alternative Preference Relation to Deal with Many-Objective Optimization Problems	Antonio Lopez (JAXA), Carlos A. Coello Coello (CINVESTAV-IPN), Akira Oyama (JAXA), and Kozo Fujii (JAXA)	The 7th International Conference on Evolutionary Multi-Criterion Optimization	2013/3	国際	
114	並列NSGA-IIによる衛星軌道設計問題解法の一検討	西尾豊, 大山聖, エルナンギレ, 田中清	2013年電子情報通信学会総合大会 (岐阜県岐阜市)	2013/3	国内	
115	目的空間分割多目的進化アルゴリズムに関する一検討	高橋誠, エルナンギレ, 田中清	2013年電子情報通信学会総合大会 (岐阜県岐阜市)	2013/3	国内	
116	Effects of Population Size on MOEAS's Selection and Scalability to Many-objective Optimization	Hernan E. Aguirre, Arnaud Liefvooghe, Sebastien Verel, and Kiyoshi Tanaka	LION 7 (Catania, Italy)	2013/1	国際	
117	Practically Desirable Solutions Search on Multi-Objective Optimization	Natsuki Kusuno, Hernan E. Aguirre, Kiyoshi Tanaka, and Masataka Koishi	LION 7 (Catania, Italy)	2013/1	国際	

118	A Study on Neighborhoods for Survival and Mating Selection for Many-objective Optimization	Hernan E. Aguirre, Akira Oyama, Kiyoshi Tanaka	進化計算シンポジウム2012 (長野県軽井沢町)	2012/12	国内	
119	A Study on Mappings for Evolutionary Many-objective Distribution Search	Hernan E. Aguirre, Akira Oyama, Kiyoshi Tanaka	進化計算シンポジウム2012 (長野県軽井沢町)	2012/12	国内	
120	Evaluating Two Evolutionary Approaches to Solve a Many-objective Space Trajectory Design Problem	Antonio Lopez Jaimes, Akira Oyama, Kozo Fujii	進化計算シンポジウム2012 (長野県軽井沢町)	2012/12	国内	
121	多目的最適化における実用的所望解探索に関する一検討	楠野夏樹, 佐川美也子, エルナンギレ, 田中清, 小石正隆	進化計算シンポジウム2012 (長野県軽井沢町)	2012/12	国内	
122	測地距離の混雑度への反映と実問題への応用	工藤文也, 吉川大弘	進化計算シンポジウム2012 (長野県軽井沢町)	2012/12	国内	
123	PSOを用いた2段階探索法における切り替え世代数に対する検討	平野博之, 吉川大弘	進化計算シンポジウム2012 (長野県軽井沢町)	2012/12	国内	
124	Applications of multiobjective design exploration in JAXA	Akira Oyama	MODE workshop 2012 (長野県軽井沢町)	2012/12	国際	
125	Objective Space Partitioning for Solving Many-objective Optimization Problems	Antonio Lopez Jaimes, Hernan E. Aguirre, Kiyoshi Tanaka, Carlos A. Coello Coello	MODE workshop 2012 (長野県軽井沢町)	2012/12	国際	
126	Updating Kriging Response Surface Models Based on the Hypervolume Indicator in Multi-Objective Optimization	Shigeru Obayashi, Koji Shimoyama, Jeong Shinkyu	MODE workshop 2012 (長野県軽井沢町)	2012/12	国際	
127	Feature Analysis of Pareto Solutions based on Visualization	Tomohiro Yoshikawa	MODE workshop 2012 (長野県軽井沢町)	2012/12	国際	
128	Development of Evolutionary Algorithms for Many-objective Design-variables Optimization	Hernan E. Aguirre, Kiyoshi Tanaka	MODE workshop 2012 (長野県軽井沢町)	2012/12	国際	
129	A study on Two-Step Search using Global-Best in PSO for Multi-objective Optimization Problems	Hiroyuki Hirano, Tomohiro Yoshikawa	SCIS&ISIS2012	2012/11	国内	
130	適応 ϵ -Box支配を用いたMOEAにおける近傍交叉の一検討	西尾豊, 大山聖, エルナンギレ, 田中清	2012年度電子情報通信学会信越支部大会	2012/10	国内	
131	目的空間分割を用いた多目的進化アルゴリズムの一検討	高橋誠, エルナンギレ, 田中清	2012年度電子情報通信学会信越支部大会	2012/10	国内	
132	目的関数の優位性を考慮した多目的最適化の一検討	楠野夏樹, 佐川美也子, エルナンギレ, 田中清	2012年度電子情報通信学会信越支部大会	2012/10	国内	
133	Analysis on Population Size and Neighborhood Recombination on Many-Objective Optimization	Naoya Kowatari, Akira Oyama, Hernan E. Aguirre, and Kiyoshi Tanaka	PPSN 2012 (Taormina, Italy)	2012/9	国際	
134	多目的最適化問題における評価値空間と設計変数空間による測地距離を用いた演算手法の検討	工藤文也, 吉川大弘	第28回ファジィシステムシンポジウム (愛知県名古屋市)	2012/9	国内	
135	多数目的最適化に対するPSOを用いた2段階探索法の適用	平野博之, 吉川大弘	第28回ファジィシステムシンポジウム (愛知県名古屋市)	2012/9	国内	
136	多数目的最適化における収束性向上のための2段階探索法の検討	平野博之, 吉川大弘	第3回進化計算学会研究会 (広島県東広島市)	2012/9	国内	
137	測地距離の概念を用いた評価値空間と設計変数空間情報の遺伝的演算への反映	工藤文也, 吉川大弘	第3回進化計算学会研究会 (広島県東広島市)	2012/9	国内	

138	PSOのg-bestに基づく2段階探索進化計算手法の検討	吉田徹, 平野博之, 吉川大弘	電気関係学会東海支部連合大会	2012/9	国内	
139	Comparison of the Criteria for Updating Kriging Response Surface Models in Multi-Objective Optimization	Koji Shimoyama, Koma Sato, Shinkyu Jeong, and Shigeru Obayashi	IEEE CEC 2012 (Brisbane, Australia)	2012/6	国際	
140	Knowledge Extraction in Multi-objective Optimization Problem based on Visualization of Pareto Solutions	Fumiya Kudo, Tomohiro Yoshikawa	IEEE CEC 2012 (Brisbane, Australia)	2012/6	国際	
141	Data mining of Pareto-Optimal solutions of a Solar Observatory Trajectory Design Problem	Akira Oyama	Infotech Aerospace 2012 (California, USA)	2012/6	国際	
142	Extraction of Design Information from Pareto-Optimal Solutions using Genetic Programming: A First Report	Tomoaki Tatsukawa, Taku Nonomura, Akira Oyama and Kozo Fujii	International Workshop on Future of CFD and Aerospace Sciences	2012/4	国内	
143	ハイブリッドロケットエンジンの概念設計最適化問題におけるパレート解の解析に関する一考察	工藤文也, 吉川大弘, 古橋武	日本人工知能学会誌, Vol.27, No.2	2012/3	国内	○
144	多目的最適化問題に対するパレート解の可視化に基づく知識抽出	工藤文也, 吉川大弘	電子情報通信学会総大会2012 (岡山大学)	2012/3	国内	
145	Adaptive ϵ -Ranking and Distribution Search on Evolutionary Many-objective Optimization	Hernan Aguirre, Akira Oyama, and Kiyoshi Tanaka	Italian Workshop on Artificial Life and Evolutionary Computation, Parma, Italy	2012/2	国際	
146	A study on Large Population MOEA Using Adaptive Epsilon-Box Dominance and Neighborhood Recombination ofr Many-Objective Optimization	Naoya Kowatari, Akira Oyama, Hernan Aguirre, and Kiyoshi Tanaka	Learning and Intelligent Optimization Conference (LION) 6, Paris France	2012/1	国際	
147	Problem Understanding with Data Mining of Pareto-Optimal Designs in Space Engineering	Akira Oyama	Dagstuhl Seminar 12041 Learning in Multiobjective Optimization	2012/1	国際	
148	多数目的最適化における集団サイズと交叉の効果に関する検討	古渡直哉, 大山聖, エルナンアギレ, 田中清	進化計算シンポジウム2011, 宮城県, 岩沼市	2011/12	国内	
149	パレート最適解からの設計知見抽出のための多目的遺伝的プログラミングの提案と再使用観測ロケット空力設計問題での実証	立川智章, 野々村拓, 大山聖, 藤井孝藏	進化計算シンポジウム2011, 宮城県, 岩沼市	2011/12	国内	
150	MELOS1に向けた火星探査飛行機の多目的設計探査	大山聖, 米本浩一, 竹内伸介, 得竹浩, 永井大樹, 砂田茂, 大槻真嗣	平成23年度宇宙航行の力学シンポジウム	2011/12	国内	
151	再使用観測ロケット計上の多目的空力設計探査	立川智章, 野々村拓, 大山聖, 藤井孝藏	平成23年度宇宙航行の力学シンポジウム	2011/12	国内	
152	進化計算によるレゾネータ設計の最適化と大振幅時の減衰特性の検討	堀暖, 清水太郎, 北村圭一, 大山聖	第49回燃焼シンポジウム, 神奈川県, 横浜市	2011/12	国内	
153	評価値空間情報を利用した設計変数空間の可視化手法の多目的実問題への応用	工藤文也, 吉川大弘	進化計算シンポジウム2011 (宮城県岩沼市)	2011/12	国内	
154	火星探査飛行機の多目的設計探査	大山聖, 米本浩一, 竹内伸介, 得竹浩, 永井大樹, 砂田茂, 大槻真嗣	第55回宇宙科学技術連合講演会, 愛媛県, 松山市	2011/11	国内	
155	再使用観測ロケットの多目的空力設計探査	立川智章, 野々村拓, 大山聖, 藤井孝藏	第55回宇宙科学技術連合講演会, 愛媛県, 松山市	2011/11	国内	

156	太陽極域観測衛星軌道設計の多目的設計探査	大山聖, 川勝康弘, 萩原和子	進化計算シンポジウム2011, 宮城県, 岩沼市	2011/11	国内	
157	MOEAにおける集団サイズ増加の効果	古渡直哉, 大山聖, エルナンアギレ, 田中清	平成23年度電子情報通信学会信越支部大会, 新潟県, 柏崎市	2011/10	国内	
158	大集団MOEAにおける適応 ϵ -Box支配の効果	古渡直哉, 大山聖, エルナンアギレ, 田中清	平成23年度電子情報通信学会信越支部大会, 新潟県, 柏崎市	2011/10	国内	
159	適応 ϵ -Box支配を用いた大集団MOEAにおける近傍交叉の効果	古渡直哉, 大山聖, エルナンアギレ, 田中清	平成23年度電子情報通信学会信越支部大会, 新潟県, 柏崎市	2011/10	国内	
160	ハイブリッドロケットの概念設計検討法と非劣解データのモード解析法	大山聖	日本機械学会2011年度年次大会「先端技術フォーラム」, 目黒区, 東京都	2011/9	国内	○
161	適応 ϵ -Box支配と近傍交叉を用いた大集団MOEAの基礎検討	古渡直哉, 大山聖, エルナンアギレ, 田中清	第1回進化計算学会研究会/第7回進化計算フロンティア研究会合同研究会, 東京都, 文京区	2011/9	国内	
162	Data Mining for Performance Map Construction in Centrifugal Diffuser Design	Koji Shimoyama, Shinkyu Jeong, Shigeru Obayashi, and Kazuyuki Sugimura	EUROGEN 2011: Evolutionary and Deterministic Methods for Design, Optimization and Control with Applications to Industrial and Societal Problems (Capua, Italy)	2011/9	国際	
163	多目的最適化問題におけるパレート解の設計変数解析	工藤文也, 吉川大弘	第27回ファジシステムシンポジウム(福井大学)	2011/9	国内	
164	Aerodynamic Design Exploration for Reusable Launch Vehicle Using Multi-Objective Genetic Programming	Tomoaki Tatsukawa, Taku Nonomura, Akira Oyama, and Kozo Fujii	ASME 2011 International Design Engineering Technical Conferences & Computers and Information in Engineering Conference, Washington, DC	2011/8	国際	
165	Multiobjective Design Exploration of Airplane for Mars Exploration	Akira Oyama	21st Workshop on Astrodynamics and Flight Mechanics, Sagamihara, Kanagawa,	2011/7	国際	
166	Application of Multiobjective Design Exploration to Solar-C orbit Design	Akira Oyama, Yasuhiro Kawakatsu, and Kazuko Hagiwara	AAS 11-616, the 2011 AAS/AIAA Astrodynamics Specialist Conference, Girdwood, Alaska	2011/7	国際	
167	Slit Resonator Design and Damping Estimation in Linear and Non-linear Ranges	Taro Shimizu, Dan Hori, Keiichi Kitamura, Yu Daimon, and Akira Oyama	AIAA-2001-3261, 41st AIAA Fluid Dynamics Conference and Exhibit, Honolulu, Hawaii	2011/6	国際	
168	Aerodynamic Design Exploration for Reusable Launch Vehicle Using Genetic Algorithm with Navier-Stokes Solver	Tomoaki Tatsukawa, Taku Nonomura, Akira Oyama, and Kozo Fujii	The 28th International Symposium on Space Technology and Science, Ginowan, Japan,	2011/6	国際	
169	Kriging/RBF-Hybrid Response Surface Method for Highly Nonlinear Functions	Nobuo Namura, Koji Shimoyama, Shinkyu Jeong, and Shigeru Obayashi	2011 IEEE Congress on Evolutionary Computation (New Orleans, LA, USA)	2011/6	国際	
170	Aerodynamic Design Exploration of flapping motion for development of Mars Aircraft	Seiya Ugajin, Akira Oyama, Taku Nonomura, Masaya Suzuki, Makoto Yamamoto, and Kozo Fujii	CFD & Optimization, Antalya, Turkey	2011/5	国際	

3. 受賞等

No.	名称	受賞者氏名	授賞機関(学会名等)	受賞した時期	国内・国際 の別	備考
1	多目的設計探査とその応用に関する研究	大林茂	文部科学大臣表彰 科学技術賞 研究部門	2014/04	国内	
2	フロンティア業績賞	大山聖	日本機械学会 設計工学・システム部門	2012/09	国内	

4. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

No.	名称	日付	説明	備考
1	横浜ゴム(株)ニュースリリース	2015年10月15日	横浜ゴム、タイヤのエアロダイナミクス技術をさらに進化 車の空気抵抗低減に加え、車両のリフト(浮き上がり)抑制に貢献	
2	youtubeでの成果の公開	2013年10月28日	youtubeにてロケット射点の空力音響多目的設計探査の研究の成果を発表。2016年1月現在約6000人の視聴あり。	https://www.youtube.com/watch?v=Y2bo5CbXQ3w
3	ウェブサイトでの情報公開	2012年5月1日	研究開発課題4の成果の公開	http://flab.eng.isas.jaxa.jp/monozukuri/mode/
4	日刊工業新聞 Business&Technology	2011年5月24日	シミュレーションソフト 東大が20本公開 来月はじめ	

5. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)

No.	名称	開催日時	開催場所	参加者(人数)
1	実問題のための多目的設計探査ワークショップ2012	2012年12月16日-17日	長野県軽井沢市	50

研究開発課題5:原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発

代表者氏名 中島憲宏

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文(発表題目)	発表者氏名	発表した場所(学会誌・雑誌名等)	発表した時期	国内・国際 の別	査読(有りの場合 ○を記入)
1	Hazard-consistent ground motions generated with a stochastic fault-rupture model	Akemi Nishida, Sayaka Igarashi, Shigehiro Sakamoto, Yasuo Uchiyama, Yu Yamamoto, Ken Muramatsu, Tsuyoshi Takada	Nuclear Engineering and Design, 295, pp.875-886, 2015	2015年9月	国際	○
2	TIME DOMAIN RESPONSE ANALYSIS FOR ASSEMBLY BY INTEGRATING COMPONENTS	Norihiro Nakajima, Akemi Nishida, Yoshiaki Kawakami, Yoshio Suzuki (JAEA), Keisuke Matsukawa, Masami Oshima, Hisao Izuchi (Chiyoda Cooperation)	Transactions of 23rd International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-23), 2013, SMiRT23-377, pp1-10	2015/8	国際	○
3	PETASCALE COUPLED SIMULATIONS OF REAL WORLD'S COMPLEX STRUCTURES	Shinobu Yoshimura, Tomonori Yamada, Hiroshi Kawai, Tomoshi Miyamura, Masao Ogino, Ryuji Shioya	IACM Expression, No. 37, pp.9-13	2015/7	国際	
4	Seismic response simulation of High-Temperature Engineering Test Reactor building against 2011 Tohoku earthquake	Akemi Nishida, Yoshiaki Kawakami, Norihiro Nakajima, Kazuhiko Iigaki, Kazuhiro Sawa (JAEA)	Proceedings of 23th International Conference on Nuclear Engineering, ICONE23	2015年5月	国際	○

5	NUMERICAL MODELING ASSISTANCE SYSTEM IN FINITE ELEMENT ANALYSIS FOR THE STRUCTURE OF AN ASSEMBLY	Norihiro Nakajima, Akemi Nishida, Yoshiaki Kawakami, Yoshio Suzuki, Kazuhiro Sawa, Kazuhiko Iigaki (JAEA)	Proceedings of 23th International Conference on Nuclear Engineering, ICONE23-1136, pp1-5	2015/5	国際	○
6	4次元データ解析のための2次元投影可視化	宮村(中村)浩子、河村拓馬、鈴木喜雄、井戸村泰宏、武宮博	情報処理学会論文誌、Vol. 55, No. 9, pp. 2216-2224	2014/9	国内	○
7	設計計算モデリングの動的支援技法	中島憲宏、西田明美、川上義明、鈴木喜雄(日本原子力研究開発機構)	日本機械学会第24回設計工学・システム部門講演会講演論文集 2420, pp. 1-9	2014/9	国内	
8	STRUCTURAL ANALYSIS FOR ASSEMBLY BY INTEGRATING PARTS	Norihiro Nakajima, Akemi Nishida, Yoshiaki Kawakami, Tatsuokada, Osamu Tsuruta, Kazuhiro Sawa, Kazuhiko Iigaki (JAEA)	Proceedings of 22nd International Conference on Nuclear Engineering, ICONE22-30251, pp1-9	2014/7	国際	○
9	大型プラントの次世代耐震シミュレーション	中島憲宏、西田明美、川上義明、岡田達夫、鶴田理、沢和弘、飯垣和彦(独)日本原子力研究開発機構)	ターボ機械、第42巻、第5号	2014/5	国内	
10	Assembly structure analysis system	Norihiro Nakajima, Akemi Nishida, Yoshio Suzuki, Kazuhiro Sawa, Kazuhiko Iigaki (JAEA), Hitoshi Matsubara (Ryukyuu Univ.), Osamu Hazama (CTC)	Transactions of 22nd International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-22)	2013/6	国際	○
11	京コンピュータの活用と期待(大型プラントの耐震シミュレーション)	山田知典	日本機械学会CMDニュースレター	2011, Nov	国内	
12	原子力発電施設の大規模耐震シミュレーションの進展	山田知典	日本シミュレーション学会誌	2011, Jun	国内	

2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果(発表題目、口頭・ポスター発表の別)	発表者氏名	発表した場所(学会名等)	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	3次元有限要素モデルによる原子力施設の地震観測シミュレーションのためのパラメトリックスタディ	崔炳賢、西田明美、中島憲宏	日本地震工学会年次大会-2015	2015/11	国内	
2	2次元情報可視化による多変量データ解析	宮村(中村)浩子、川上義明、鈴木喜雄、河村拓馬、中島憲宏	日本原子力学会 2015秋の大会、静岡	2015/9	国内	
3	TIME DOMAIN RESPONSE ANALYSIS FOR ASSEMBLY BY INTEGRATING COMPONENTS	Norihiro Nakajima, Akemi Nishida, Yoshiaki Kawakami, Yoshio Suzuki (Japan Atomic Energy Agency), Keisuke Matsukawa, Masami Oshima, Hisao Izuchi (Chiyoda Cooperation)	SMiRT-23	2015/8	国際	
4	NUMERICAL MODELING ASSISTANCE SYSTEM IN FINITE ELEMENT ANALYSIS FOR THE STRUCTURE OF AN ASSEMBLY	Norihiro Nakajima, Akemi Nishida, Yoshiaki Kawakami, Yoshio Suzuki, Kazuhiro Sawa, Kazuhiko Iigaki (Japan Atomic Energy Agency)	ICONE23	2015/5	国際	
5	ROLE OF PETASCALE SIMULATION OF REAL WORLD'S COMPLEX STRUCTURE ATTACKED BY STRONG EARTHQUAKE (Plenary Lecture)	Shinobu Yoshimura, Tomonori Yamada, Tomoshi Miyamura, Hiroshi Kawai	COMPDYN2015, Crete Island, Greece	2015/5	国際	

6	原子力施設の耐震シミュレーションの V&V に向けた観測データの取り扱い 観測された加速度データの計測誤差の検討 (口頭発表)	鈴木喜雄	HPCI戦略プログラム分野4次世代ものづくり統合ワークショップ	2015/3	国内	
7	原子力施設の耐震シミュレーションの V&V に向けた観測データの取り扱い (口頭発表)	鈴木喜雄, 川上義明, 中島憲宏 (独) 日本原子力研究開発機構	日本原子力学会 2015春の年会, 日立市	2015/3	国内	
8	構造解析解の確かさ推定 (口頭発表)	中島憲宏, 西田明美, 川上義明, 鈴木喜雄 (独) 日本原子力研究開発機構	日本原子力学会 2015春の年会, 日立市	2015/3	国内	
9	PEYASCALE FINITE ELEMENT SIMULATION OF REAL WORLD'S COMPLEX STRUCTURE WITH BILLIONS DOFS MODEL (Plenary Lecture)	Shinobu Yoshimura, Tomoshi Miyamura, Tomonori Yamada, Kohei Murotani, Hiroshi Kawai	2015 SIAM Conference on CSE, Salt Lake City, USA	2015/3	国際	
10	原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発	中島憲宏	HPCI戦略プログラム 第5回「分野4次世代ものづくり」シンポジウム	2014/12	国内	
11	可視化におけるHPC活用	中島憲宏	第20回ビジュアルリゼーションカンファレンス	2014/11	国内	
12	大規模科学的データ解析のための情報可視化	宮村(中村)浩子, 河村拓馬, 鈴木喜雄, 井戸村泰宏, 武宮博	日本機械学会 第27回計算力学講演会	2014/11	国内	
13	組立構造解析手法による時刻歴応答解析 (口頭発表)	中島憲宏, 西田明美, 川上義明, 鶴田理, 鈴木喜雄	日本原子力学会 2014秋の大会, 京都	2014/9	国内	
14	設計計算モデリングの動的支援技法 (口頭発表)	中島憲宏, 西田明美, 川上義明, 鈴木喜雄 (独) 日本原子力研究開発機構	日本機械学会 第24回 設計工学・システム部門講演会, 徳島	2014/9	国内	
15	可視化におけるHPC活用	中島憲宏	日本学術会議公開シンポジウム	2014/9	国内	
16	Structural Analysis for Assembly by Integrating Parts (口頭発表)	N. Nakajima, A. Nishida, Y. Kawakami, T. Okada, O. Tsuruta, K. Sawa, K. Iigaki(JAEA)	Proceedings of the 2014 22nd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE22), Prague, Czech Republic	2014/7	国際	
17	PETASCALE SIMULATION BASED INVESTIGATION OF STRUCTURAL INTEGRITY OF NUCLEAR POWER PLANT ATTACKED BY STRONG EARTHQUAKE (Semi-Plenary Lecture)	Shinobu Yoshimura, Tomonori Yamada, Tomoshi Miyamura, Hiroshi Kawai, Kohei Murotani	WCCM XI, Barcelona, Spain	2014/7	国際	
18	TOWARD A HIGH PERFORMANCE SEISMIC SIMULATION ON PETASCALE SUPERCOMPUTERS	Tomonori Yamada, Shinobu Yoshimura	KSME-JSME Joint Symposium on CM & CAE 2014, Jeju, Korea	2014/5	国際	
19	組立構造解析を用いた固有値解析	中島憲宏	日本原子力学会 2014年春の年会 (東京)	2014/3	国内	
20	東北地方太平洋沖地震におけるHTTR建屋の地震観測シミュレーション	西田明美, 川上義明, 中島憲宏, 飯垣和彦, 沢和弘	日本原子力学会 2014年春の年会 (東京)	2014/3	国内	
21	大型プラントにおける耐震シミュレーション	中島憲宏	第4回「分野4次世代ものづくり」シンポジウム	2013/12	国内	
22	組立構造解析手法における部品集積解析	中島憲宏, 西田明美, 川上義明, 岡田達夫, 鶴田理, 鈴木喜雄	日本原子力学会 2013年秋の大会 (青森)	2013/9	国内	
23	巨大地震下における原子力施設全体の挙動解析	鈴木喜雄, 坂本健作, 中島憲宏	日本原子力学会 2013年秋の大会 (青森)	2013/9	国内	

24	Assembly Structural Analysis System	Norihiro Nakajima (JAEA)	SMiRT22	2013/8	国際	
25	FULL SCALE SEISMIC RESPONSE SIMULATION OF NUCLEAR POWER PLANT USING K-COMPUTER (Plenary Lecture)	Shinobu Yoshimura, Hiroshi Kawai, Shin-ichiro Sugimoto, Kohei Murotani, Tomoshi Miyamura, Tomonori Yamada	COMPdyn2013, Kos Island, Greece	2013/6	国際	
26	組立構造解析手法における部品結合技法	中島憲宏、岡田達夫、川上義明	日本原子力学会 2013年春の年会 (近畿大)	2013年3月26日～28日	国内	
27	A Scalable and High Performance Implementation of the Domain Decomposition Method	荻野正雄、塩谷隆二	4th International Conference on Computational Methods	2012年11月25日～28日	国際	
28	Industrial Innovation (Monozukuri) with “K computer”	中島憲宏、吉村忍	The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis (SC12)	2012年11月12日～15日	国際	
29	PETASCALE SIMULATION OF NUCLEAR POWER PLANT SUBJECTED TO STRONG EARTHQUAKE	Shinobu Yoshimura	The 2nd International Symposium on Large-scale Computational Science and Engineering, Tokyo	2012/11	国内	
30	Performance Evaluation of ADVENTURE on K Computer	河合浩志、荻野正雄、塩谷隆二、吉村忍	Propagation of Ultra-large-scale Computation by the Domain-decomposition-method for Industrial Problems 2012	2012年10月12日～13日	国際	
31	A Massively Parallel Structural Analysis Code on Peta-scale Supercomputer Based on Domain Decomposition Method Using Local Schur Complement	河合浩志、荻野正雄、塩谷隆二、吉村忍	Propagation of Ultra-large-scale Computation by the Domain-decomposition-method for Industrial Problems 2012	2012年10月12日～13日	国際	
32	MPI-OpenMPハイブリッド並列領域分割法による100億自由度規模有限要素解析	荻野正雄、塩谷隆二	日本機械学会第25回計算力学講演会	2012年10月6日～9日	国内	
33	逆行列アプローチによるBDDコースグリッド修正の高速化	河合浩志、荻野正雄、塩谷隆二、吉村忍	日本機械学会第25回計算力学講演会	2012年10月6日～9日	国内	
34	TOWARDS EXASCALE SIMULATION OF NUCLEAR POWER PLANTS SUBJECTED TO STRONG EARTHQUAKE (Invited Lecture)	Shinobu Yoshimura	2012 International Workshop on CO-DESIGN, Beijing, China	2012/10	国際	
35	時空間特徴解析に基づく部分モデル選択抽出アプローチ	宮村 (中村) 浩子、武宮博	日本原子力学会 2012年秋の大会 (広島)	2012年9月19日～21日	国内	
36	Performance Tuning of Parallel Structural Analysis Code Based on Hierarchical Domain Decomposition Method for K Supercomputer	河合浩志、荻野正雄、塩谷隆二、吉村忍	KSME-JSME Joint Symposium on CM & CAE 2012	2012年9月12日	国際	
37	A DDM Implementation Using Local Schur Complement Approach on Peta-scale Supercomputer	河合浩志、荻野正雄、塩谷隆二、吉村忍	10th World Congress on Computational Mechanics	2012年7月8日～13日	国際	
38	東日本大震災での原子力発電所事故とシミュレーション	山田知典	第17回計算工学講演会	2012年5月29日～31日	国内	
39	ADV_Kのチューニング状況報告	河合浩志	第17回計算工学講演会	2012年5月29日～31日	国内	
40	領域分割法に基づくローカルソルバーの京コンピュータでの性能評価	河合浩志、荻野正雄、塩谷隆二、吉村忍	第17回計算工学講演会	2012年5月29日～31日	国内	
41	機能設計のための最適設計案群の利活用	手塚明	日本計算工学会	2012, Jan	国内	○

42	1DCAE & Kotodukuri	手塚明	Design Engineering Workshop 2011	2011, Dec	国際	○
43	領域ソルバー並列性の強化 (口頭)	河合浩志	日本機械学会CMC	2011, Oct	国内	
44	ペタスケールコンピューティングと原子力施設の耐震性評価 (口頭)	山田知典	LCES 2011	2011, Oct	国際	
45	マルチコア向け領域ソルバーの機能強化 (口頭)	河合浩志	USNCCM	2011, Jul	国際	
46	複雑形状問題におけるバランシング領域分割法ソルバー収束性の検討 (口頭)	山田知典	USNCCM	2011, Jul	国際	
47	次世代スーパーコンピュータ京における固体有限要素法解析の基礎的検討 (口頭)	山田知典	日本計算工学会	2011, May	国内	
48	領域ソルバーのOpenMP並列化 (口頭)	河合浩志	日本計算工学会	2011, May	国内	

3. 受賞等

No.	名称	受賞者氏名	授賞機関(学会名等)	受賞した時期	国内・国際 の別	備考
1	ICCES Distinguished Achievement Award	Shinobu Yoshimura	ICCES (国際計算実験理工学会議)	2015/7	国際	
2	ICCES Distinguished Fellow	Shinobu Yoshimura	ICCES (国際計算実験理工学会議)	2015/7	国際	
3	日本機械学会計算力学部門功績賞	吉村忍	日本機械学会計算力学部門	2014/11	国内	
4	IACM Fellow Award	Shinobu Yoshimura	IACM (国際計算力学連合)	2014/7	国際	
5	APACM Computational Mechanics Award	Shinobu Yoshimura	APACM (アジア太平洋計算力学連合)	2013/12	国際	

4. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

No.	名称	日付	説明	備考
1	日刊工業新聞	2015/2/11	プラント骨組構造の耐震性 実形状でシミュレート	中島憲宏/ 13面
2	化学工業日報	2015/2/10	「京」用い石油精製設備の耐震性評価	中島憲宏/ 1面
3	神戸新聞	2012/10/4	スパコン「京」活用 世界一の仮想振動台構築へ	山田知典/ 1面

5. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)

No.	名称	開催日時	開催場所	参加者(人数)
1	課題5成果可視化報告会	2015/12/1	TKP新宿カンファレンスセンター 5階5A	15
2	第17回原子力計算科学セミナー	2014/11/11	東京大学柏の葉キャンパス駅前 サテライト	25
3	第16回原子力計算科学セミナー	2014/8/7	東京大学柏キャンパス	15
4	第15回原子力計算科学セミナー	2014/6/30	東京大学柏キャンパス	18

5	第14回原子力計算科学セミナー	2014/2/25	東京大学柏キャンパス	25
6	第13回原子力計算科学セミナー	2013/12/9	東京大学柏キャンパス	20
7	第12回原子力計算科学セミナー	2013/8/30	東京大学柏キャンパス	13
8	第11回原子力計算科学セミナー	2013/8/7	東京大学柏キャンパス	13
9	第10回原子力計算科学セミナー	2013/7/17	東京大学柏キャンパス	16
10	第9回原子力計算科学セミナー	2013/2/20	東京大学柏キャンパス	13
11	第8回原子力計算科学セミナー	2012/12/3	東京大学柏キャンパス	12
12	第7回原子力計算科学セミナー	2012/11/20	東京大学柏キャンパス	24
13	第6回原子力計算科学セミナー	2012/8/23	東京大学柏キャンパス	23
14	第5回原子力計算科学セミナー	2012/5/18	東京大学柏キャンパス	18

術推進体制構築

代表者 畑田敏夫

1. 学会誌・雑誌等における論文掲載

No.	掲載した論文（発表題目）	発表者氏名	発表した場所（学会誌・雑誌名等）	発表した時期	国内・国際 の別	査読（有りの場合 ○を記入）
1	Cross-Scale Interactions between Electron and Ion Scale Turbulence in a Tokamak Plasma	S. Maeyama (JAEA), Y. Idomura (JAEA), T.-H. Watanabe (Nagoya Univ.), M. Nakata (JAEA), M. Yagi (JAEA), N. Miyato (JAEA), A. Ishizawa (NIFS), M. Nunami (NIFS)	Physical Review Letters, Vol. 114, 255002	2015/7	国際	○
2	Finite-orbit-width effects on energetic-particle-induced geodesic acoustic mode	K. Miki (JAEA) and Y. Idomura (JAEA)	Plasma Fusion Research, Vol.10, 3403068	2015/7	国際	○
3	Improved strong scaling of a spectral/finite difference gyrokinetic code for multi-scale plasma turbulence	S. Maeyama (JAEA), T.-H. Watanabe (Nagoya Univ.), Y. Idomura (JAEA), M. Nakata (JAEA), M. Nunami (NIFS), A. Ishizawa (NIFS)	Parallel Computing, Vol. 49, 1	2015/6	国際	○
4	Development of Linearized Collision Operator for Multiple Ion Species in Gyrokinetic Flux-tube Simulations	M. Nunami (NIFS), M. Nakata (NIFS), T.-H. Watanabe (Nagoya Univ.), H. Sugama (NIFS)	Plasma Fusion Research, Vol.10, 1403058	2015/5	国際	○

5	Turbulent transport of heat and particles in a high ion temperature discharge of the Large Helical Device	A. Ishizawa (NIFS), T.-H. Watanabe (Nagoya Univ.), H. Sugama (NIFS), M. Nunami (NIFS), K. Tanaka (NIFS), S. Maeyama (JAEA), N. Nakajima (NIFS)	Nuclear Fusion, Vol. 55, 043024	2015/4	国際	○
6	Modeling of hydroxyapatite - peptide interaction based on fragment molecular orbital method	K. Kato (Mizuho IR), K. Fukuzawa (Nihon Univ., IIS Univ. of Tokyo), Y. Mochizuki (Rikkyo Univ., IIS Univ. of Tokyo)	Chemical Physics Letters, In Press, Accepted Manuscript, Vol. 629, 58-64.	2015/3	国際	
7	Remote Visualization System based on Particle Based Volume Rendering	T. Kawamura (JAEA), Y. Idomura (JAEA), H. Miyamura (JAEA), H. Takemiya (JAEA), N. Sakamoto (Kyoto U.), K. Koyamada (Kyoto U.)	Visualization and Data Analysis 2015, Proc. of SPIE-IS&T Electronic Imaging, Vol. 9397, 93970S	2015/2	国際	○
8	粒子ベースボリュームレンダリングを利用した遠隔可視化システム	河村拓馬 (JAEA), 井戸村泰宏 (JAEA), 宮村浩子 (JAEA), 武宮博 (JAEA)	日本シミュレーション学会論文誌, Vol. 6, p. 15	2014/9	国内	○
9	ハイパフォーマンスコンピューティングの進展によるプラズマ乱流研究のブレークスルー	前山伸也 (JAEA)	RIST NEWS, No. 57, p15	2014/8	国内	
10	Exploring phase space turbulence in magnetic fusion plasmas	T.-H. Watanabe (Nagoya Univ.), Y. Idomura (JAEA), S. Maeyama (JAEA), M. Nakata (JAEA), H. Sugama (NIFS), M. Nunami (NIFS), A. Ishizawa (NIFS)	CCP2013 Proceedings in Journal of Physics: Conference Series, Vol. 510, p. 012045	2014/5	国際	○
11	Comparison between kinetic-ballooning-mode-driven turbulence and ion-temperature-gradient-driven turbulence	S. Maeyama (JAEA), A. Ishizawa (NIFS), T.-H. Watanabe (NIFS), M. Nakata (JAEA), N. Miyato (JAEA), M. Yagi (JAEA), Y. Idomura (JAEA)	Physics of Plasmas, Vol. 21, p. 052301	2014/5	国際	○
12	Electron-correlated fragment-molecular-orbital calculations for biomolecular and nano systems	S. Tanaka (Kobe Univ), Y. Mochizuki (Rikkyo Univ., IIS The Univ. of Tokyo), Y. Komeiji (AIST), Y. Okiyama (IIS, the Univ. of Tokyo), K. Fukuzawa (Mizuho IR, IIS The Univ. of Tokyo)	Physical Chemistry Chemical Physics, Physical Chemistry Chemical Physics, Vol. 16, 10310-10344	2014/4	国際	
13	Local gyrokinetic Vlasov simulations with realistic tokamak MHD equilibria	M. Nakata (JAEA), A. Matsuyama (JAEA), N. Aiba (JAEA), S. Maeyama (JAEA), M. Nunami (NIFS), T.-H. Waranabe (NIFS)	Plasma Fusion Research, Vol. 9, p. 1403029	2014/4	国際	○
14	Progress of Full-f Gyrokinetic Simulation Toward Reactor Relevant Numerical Experiments	Y. Idomura (JAEA), M. Nakata (JAEA), S. Jolliet (EPFL)	Plasma Fusion Research, Vol. 9, p. 3503028	2014/4	国際	○
15	将来のHPCIシステムのあり方の調査研究 - アプリケーション分野	望月祐志	計算科学ロードマップ	2014/3/31	国内	
16	Electron-correlated fragment-molecular-orbital calculations for biomolecular and nano systems	S. Tanaka, Y. Mochizuki, Y. Komeiji, Y. Okiyama, K. Fukuzawa	PCCP	2014/3/25	国際	
17	Accuracy of the fragment molecular orbital (FMO) calculations for DNA: Total energy, molecular orbital, and inter-fragment interaction energy	K. Fukuzawa, C. Watanabe, I. Kurisaki, N. Taguchi, Y. Mochizuki, T. Nakano, S. Tanaka, Y. Komeiji	Comp. Theor. Chem.	2014/2/17	国際	

18	Improved description of the orbital relaxation effect by practical use of the self-energy	M. Saitow, T. Ida, Y. Mochizuki	J. Quant. Chem	2014/2/4	国際	
19	Plasma Size and Power Scaling of Ion Temperature Gradient Driven Turbulence	Y. Idomura(JAEA), M. Nakata(JAEA)	Physics of Plasmas, Vol.21, p.020706	2014/2	国際	○
20	Full-f gyrokinetic simulation over a confinement time	Y. Idomura(JAEA)	Physics of Plasmas, Vol.21, p.022517	2014/2	国際	○
21	Kinetic Ballooning Mode Turbulence Simulation based on Electromagnetic Gyrokinetics	S. Maeyama(JAEA), A. Ishizawa(NIFS), T.-H. Watanabe(NIFS), M. Nakata(JAEA), N. Miyato(JAEA), Y. Idomura(JAEA)	Plasma Fusion Research, Vol.9, p.1203020	2014/2	国際	○
22	Communication overlap techniques for improved strong scaling of gyrokinetic Eulerian code beyond 100k cores on the K-computer	Y. Idomura(JAEA), M. Nakata(JAEA), S. Yamada(JAEA), M. Machida(JAEA), T. Imamura(RIKEN-AICS), T.-H. Watanabe(NIFS), M. Nunami(NIFS), H. Inoue(Fujitsu), S. Tsutsumi(Fujitsu), I. Miyoshi(Fujitsu), N. Shida(Fujitsu)	International Journal of High Performance Computing Applications, Vol.28, p.73	2014/1	国際	○
23	ABINIT-MP/BioStation によるFMO 法の創薬への適用	福澤薫(みずほ情報総研), 渡邊千鶴(東京大学生産技術研究所)	日本化学会情報化学部会誌 Vol.31, pp.89-94	2013/11	国内	
24	Computation-communication overlap techniques for parallel spectral calculations in gyrokinetic Vlasov simulations	S. Maeyama(JAEA), T.-H. Watanabe(NIFS), Y. Idomura(JAEA), M. Nakata(JAEA), M. Nunami(NIFS), A. Ishizawa(NIFS)	Plasma Fusion Research, Vol.8, p.1403150	2013/11	国際	○
25	フラグメント分子軌道法による分子内・分子間相互作用解析	中野達也、田中成典、冲山佳生、瀬川勝智	日本化学会・情報部会誌	2013/10/19	国内	
26	FMO法における電子相関計算	望月祐志	日本化学会・情報部会誌	2013/10/19	国内	
27	Plasma size and collisionality scaling of ion-temperature-gradient-driven turbulence	M. Nakata(JAEA), Y. Idomura(JAEA)	Nuclear Fusion, Vol.53, p.113039	2013/10	国際	○
28	フラグメント分子軌道法によるインフルエンザウイルス表面タンパク質の大規模量子化学計算	福澤薫、望月祐志、中野達也、田中成典	CBI学会誌	2013/7/31	国内	
29	Structure-based drug designを指向した新規フラグメント分割法に基づく4体補正フラグメント分子軌道(FMO4)計算	渡邊千鶴、福澤薫、冲山佳生、望月祐志、塚本貴志、加藤昭史、田中成典、中野達也	CBI学会誌	2013/7/31	国内	
30	Numerical techniques for parallel dynamics in electromagnetic gyrokinetic Vlasov simulations	S. Maeyama(JAEA), A. Ishizawa(NIFS), T.-H. Watanabe(NIFS), N. Nakajima(NIFS), S. Tsuji-Iio(TIT), H. Tsutsui(TIT)	Computer Physics Communications, Vol.184, p.2462	2013/6	国際	○
31	Modeling of peptide - silica interaction based on four-body corrected fragment molecular orbital (FMO4) calculations	Yoshio Okiyama, Takayuki Tsukamoto, Chiduru Watanabe, Kaori Fukuzawa, Shigenori Tanaka, Yuji Mochizuki*	Chemical Physics Letters, 566 (2013) 25.	2013/4	国際	

32	Vlasovシミュレーションのコーディング技法	渡邊智彦(NIFS), 井戸村泰宏(JAEA)	Plasma Fusion Research, Vol. 89, p.171	2013/4	国内	
33	Three- and four-body corrected fragment molecular orbital method with novel subdividing fragmentation applicable to structure-based drug design	Chiduru Watanabe*, Kaori Fukuzawa, Yoshio Okiyama, Takayuki Tsukamoto, Akifumi Kato, Shigenori Tanaka, Yuji Mochizuki, Tatsuya Nakano	Journal of Molecular Graphics and Modelling, 41 (2013) 31.	41334	国際	
34	Statistical correction to effective interactions in the fragment molecular orbital method	Shigenori Tanaka, Chiduru Watanabe, Yoshio Okiyama	Chemical Physics Letters, 556 (2013) 272.	2013/1/29	国際	
35	Optimal damping algorithm for unrestricted Hartree-Fock calculations	Jun-ichi Yamamoto & Yuji Mochizuki*	Chem-Bio Informatics Journal	2013年	国内	
36	実践的シミュレーションソフトウェア開発演習	居駒幹夫	スーパーコンピューティングニュース, Vol. 14, No. 6	2011/11	国内	
37	Performance evaluations of gyrokinetic Eulerian code GT5D on massively parallel multi-core platforms	Y. Idomura(JAEA), S. Jolliet(JAEA)	Proceedings of SC11, p.1-9	2011/11	国際	○

2. 学会等における口頭・ポスター発表

No.	発表した成果 (発表題目、口頭・ポスター発表の別)	発表者氏名	発表した場所 (学会名等)	発表した時期	国内・国際 の別	招待講演 (○を記入)
1	電子熱輸送および粒子輸送における非捕捉電子の影響	朝比祐一 (JAEA), 井戸村泰宏 (JAEA), 前山伸也 (名大), 仲田資季 (NIFS), 石澤明宏 (京大), 渡邊智彦 (名大)	第32回プラズマ・核融合学会 年会, 名古屋, 日本	2015/11	国内	
2	Multivariate Volume Rendering Using Transfer Function Synthesizer implemented in Remote Visualization System PBVR	T. Kawamura(JAEA), Y. Idomura(JAEA), H. Miyamura(JAEA), H. Takemiya(JAEA)	SIGGRAPH ASIA 2015 Symposium On Visualization In High Performance Computing, Kobe, Japan	2015/11	国際	
3	Optimization of stencil-based fusion kernels on Teraflops many-core architectures	Y. Asahi(JAEA), G. Latu(CEA), T. Ina(JAEA), Y. Idomura(JAEA), V. Grandgirard(CEA), X. Garbet(CEA)	SC15, Austin, USA	2015/11	国際	
4	GPUにおける核融合プラズマ乱流コードの最適化	朝比祐一 (JAEA), 伊奈拓也 (JAEA), 井戸村泰宏 (JAEA)	GTC Japan 2014, 東京, 日本	2015/9	国内	○
5	Optimization of fusion plasma codes	Y. Asahi(JAEA), G. Latu(CEA), Y. Idomura(JAEA), T. Ina(JAEA), V. Grandgirard(CEA), X. Garbet(CEA)	US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on Innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing, Nagoya, Japan	2015/8	国際	
6	Remote visualization of massive data using particle-based volume rendering	T. Kawamura(JAEA), Y. Idomura(JAEA), H. Miyamura(JAEA), H. Takemiya(JAEA)	US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on Innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing, Nagoya, Japan	2015/8	国際	
7	ジャイロ運動論的マルチスケール乱流における三波結合相互作用	前山伸也(名大), 渡邊智彦(名大), 井戸村泰宏(JAEA), 仲田資季(JAEA), 石澤明宏(NIFS), 沼波政倫(NIFS)	日本物理学会2015年秋季大会, 大阪, 日本	2015/8	国内	
8	Optimization of extreme scale fusion plasma turbulence code for improved strong scaling toward million cores	Y. Idomura(JAEA), S. Maeyama(Nagoya Univ.), M. Nakata(NIFS), M. Nunami(NIFS), A. Ishizawa(NIFS), T.-H. Watanabe(Nagoya Univ.)	the ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015, Seoul, Korea	2015/7	国際	○

9	核融合プラズマにおける電子ノイオンスケール乱流	前山伸也(名大)	博多ワークショップ, 博多, 日本	2015/6	国内	○
10	アパタイト結晶に対するフラグメント分子軌道法の試み #2 (口頭発表)	加藤幸一郎(みずほ情報総研), 福澤薫(日本大学, 東京大学生産技術研究所), 望月祐志(立教大学, 東京大学生産技術研究所)	2015年第62回応用物理学学会春季学術講演会, 平塚, 日本	2015/3	国内	
11	ABINIT-MPIによるFMO計算のものづくり分野への展開 (口頭発表)	望月祐志(立教大学, 東京大学生産技術研究所)	文部科学省「HPCI戦略プログラム」分野4次世代ものづくり 第2回統合ワークショップ, 東京, 日本	2015/3	国内	
12	フラグメント分子軌道法でナノ-バイオ界面を見る (招待講演)	望月祐志(立教大学, 東京大学生産技術研究所), 福澤薫(日本大学, 東京大学生産技術研究所)	2015年第62回応用物理学学会春季学術講演会	2015/3	国内	○
13	粒子ベースボリュームレンダリングを利用したマルチフィジックスデータ向け可視化のための粒子生成手法	河村拓馬(JAEA), 井戸村泰宏(JAEA), 宮村浩子(JAEA), 武宮博(JAEA)	日本原子力学会2015年春の年会, 日立, 日本	2015/3	国内	
14	Remote Visualization System based on Particle Based Volume Rendering	T. Kawamura (JAEA), Y. Idomura (JAEA), H. Miyamura(JAEA), H. Takemiya (JAEA), N. Sakamoto (Kyoto U.), K. Koyamada (Kyoto U.)	Visualization and Data Analysis (VDA2015), San Francisco, USA	2015/2	国際	
15	粒子ベースボリュームレンダリングを用いた大規模複雑流体データの遠隔可視化	河村拓馬(JAEA)	第26回CCSEワークショップ, 柏, 日本	2015/2	国内	
16	「京」を用いたマルチスケール核融合プラズマ乱流シミュレーション	前山伸也 (JAEA)	第26回CCSEワークショップ, 柏, 日本	2015/2	国内	
17	Gyrokinetic simulation study on the energetic-particle-induced geodesic acoustic mode and chirping modes	K. Miki (JAEA), Y. Idomura(JAEA)	24th International Toki Conference, Toki, Japan	2014/11	国際	
18	Multi-scale simulations of electron- and ion-scale turbulence in magnetic fusion plasma	S. Maeyama(JAEA)	Plasma Conference 2014, Niigata, Japan	2014/11	国内	○
19	Multi-scale interactions between electron- and ion-scale turbulence and their effects on turbulent transport	S. Maeyama (JAEA), T.-H. Watanabe (Nagoya Univ.), Y. Idomura (JAEA), M. Nakata (JAEA), M. Yagi (JAEA), N. Miyato (JAEA), M. Nunami (NIFS), A. Ishizawa (NIFS)	Plasma Conference 2014, Niigata, Japan	2014/11	国内	
20	Gyrokinetic simulation study on energetic-particle-induced geodesic acoustic mode	K. Miki (JAEA), Y. Idomura(JAEA)	Plasma Conference 2014, Niigata, Japan	2014/11	国内	
21	Isotope effect in ion temperature gradient driven turbulence	Y. Idomura (JAEA)	Plasma Conference 2014, Niigata, Japan	2014/11	国内	
22	LHD高イオン温度放電における乱流熱・粒子輸送	石澤明宏(NIFS), 渡邊智彦(名大), 洲鎌英雄(NIFS), 沼波政倫(NIFS), 前山伸也(JAEA), 中島徳嘉(NIFS)	Plasma Conference 2014, Niigata, Japan	2014/11	国内	
23	粒子ベースボリュームレンダリングを利用した遠隔可視化システムにおける多変量データ向け粒子生成処理の高速化	河村拓馬(JAEA), 宮村浩子(JAEA), 井戸村泰宏(JAEA), 武宮博(JAEA)	第27回計算力学講演会(CMD2014), 盛岡, 日本	2014/11	国内	

24	ABINIT-MPによる京での性能について (招待講演)	望月祐志(立教大学, 東京大学生産技術研究所), 沖山佳生, 渡邊千鶴(東京大学生産技術研究所), 野口孝明(RIST), 福澤薫(日本大学, 東京大学生産技術研究所), 田中成典(神戸大学)	CBI学会2014年大会	2014/10	国内	○
25	Multi-Scale ITG/TEM/ETG Turbulence Simulations with Real Mass Ratio and Beta Value	S. Maeyama (JAEA), Y. Idomura (JAEA), M. Nakata (JAEA), M. Yagi (JAEA), N. Miyato (JAEA)	25th IAEA Fusion Energy Conference, St. Petersburg, Russia	2014/10	国際	
26	Electromagnetic Gyrokinetic Analysis of Turbulent Transport in Finite-Beta LHD Plasmas	A. Ishizawa (NIFS), T.-H. Watanabe (Nagoya U.), H. Sugama (NIFS), K. Tanaka (NIFS), N. Nakajima (NIFS)	25th IAEA Fusion Energy Conference, St. Petersburg, Russia	2014/10	国際	
27	Gyrokinetic simulation study on the energetic-particle-induced geodesic acoustic mode	K. Miki (JAEA), Y. Idomura (JAEA)	56th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, New Orleans, USA	2014/10	国際	
28	Gyrokinetic analysis of turbulent heat and particle transport on JT-60U plasmas	M. Nakata (JAEA), M. Honda (JAEA), M. Yoshida (JAEA), H. Urano (JAEA), S. Maeyama (JAEA), M. Nunami (NIFS), T.-H. Watanabe (Nagoya Univ.)	25th IAEA Fusion Energy Conference, St. Petersburg, Russia	2014/10	国際	
29	Gyrokinetic turbulence simulation activities on JT-60U plasmas	M. Nakata (JAEA), M. Honda (JAEA), M. Yoshida (JAEA), H. Urano (JAEA), S. Maeyama (JAEA), M. Nunami (NIFS), T.-H. Watanabe (Nagoya Univ.)	13th International Tokamak Physics Activity (ITPA) Transport and Confinement Topical Group Meeting, Cadarache, France	2014/10	国際	
30	HPC Applications to Manufacturing in Aerospace Fields	Ryoji Takaki (JAXA)	5th International Industrial Supercomputing Workshop	2014/10	国際	○
31	Extreme scale fusion plasma simulations for ITER	Y. Idomura (JAEA)	2014 Smoky Mountains Computational Sciences and Engineering Conference and U.S./Japan Exascale Applications Workshop, Gatlinberg, USA	2014/9	国際	
32	Multi-scale plasma turbulence simulations based on electromagnetic gyrokinetics	S. Maeyama (JAEA)	2014 Smoky Mountains Computational Sciences and Engineering Conference and U.S./Japan Exascale Applications Workshop, Gatlinberg, USA	2014/9	国際	
33	Numerical Simulation Reactor Research Project in NIFS	M. Nunami (NIFS)	2014 Smoky Mountains Computational Sciences and Engineering Conference and U.S./Japan Exascale Applications Workshop, Gatlinberg, USA	2014/9	国際	
34	Interactions between neoclassical effects and turbulence in toroidal momentum transport, and comparison between flux driven and gradient driven simulations	Y. Idomura (JAEA)	Joint EU-US TTF meeting 2014, Culham, UK	2014/9	国際	○
35	粒子ベースボリュームレンダリングを利用したスーパーコンピュータ上の大規模可視化技術	河村拓馬 (JAEA), 宮村浩子 (JAEA), 井戸村泰宏 (JAEA), 武宮博 (JAEA)	第4回回流体力学講演会, 弘前, 日本	2014/7	国内	
36	ITG 乱流とETG 乱流のマルチスケール相互作用	前山伸也 (JAEA), 渡邊智彦 (名大), 井戸村泰宏 (JAEA), 仲田資季 (JAEA), 矢木雅敏 (JAEA), 宮戸直亮 (JAEA), 沼波政倫 (NIFS), 石澤明宏 (NIFS)	平成26年度閉じ込め・輸送研究会「高自律燃焼プラズマ中の輸送の理解に向けたトロイダルプラズマにおける閉じ込め・輸送の体系的研究」, 土岐, 日本	2014/7	国内	

37	イオン温度勾配駆動乱流の装置サイズ・加熱パワー・同位体依存性	井戸村泰宏 (JAEA)	平成26年度閉じ込め・輸送研究会「高自律燃焼プラズマ中の輸送の理解に向けたトロイダルプラズマにおける閉じ込め・輸送の体系的研究」, 土岐, 日本	2014/7	国内	○
38	EGAMのジャイロ運動論シミュレーション	三木一弘 (JAEA), 井戸村泰宏 (JAEA)	平成26年度閉じ込め・輸送研究会「高自律燃焼プラズマ中の輸送の理解に向けたトロイダルプラズマにおける閉じ込め・輸送の体系的研究」, 土岐, 日本	2014/7	国内	
39	Gyrokinetic Vlasov simulations of ITG-TEM driven turbulent transport on realistic tokamak equilibrium	M. Nakata (JAEA), M. Honda (JAEA), M. Yoshida (JAEA), H. Urano (JAEA), S. Maeyama (JAEA), M. Nunami (NIFS), T. H. Watanabe (Nagoya Univ.)	Asia Pacific Plasma Theory Conference 2014, Jeju, Korea	2014/7	国際	○
40	大規模並列計算機に対する粒子ベースボリュームレンダリングを利用したクライアント・サーバ型遠隔可視化システムの構築	河村拓馬 (JAEA), 宮村浩子 (JAEA), 井戸村泰宏 (JAEA), 武宮博 (JAEA)	第19回計算工学講演会, 広島, 日本	2014/6	国内	
41	プラズマ乱流のマルチスケールシミュレーション研究	前山伸也 (JAEA)	第10回核融合エネルギー連合講演会, つくば, 日本	2014/6	国内	○
42	電子/イオン系マルチスケール乱流シミュレーションによる電子熱輸送解析	前山伸也 (JAEA), 渡邊智彦 (名大), 井戸村泰宏 (JAEA), 仲田資季 (JAEA), 矢木雅敏 (JAEA), 宮戸直亮 (JAEA), 沼波政倫 (NIFS), 石澤明宏 (NIFS)	第10回核融合エネルギー連合講演会, つくば, 日本	2014/6	国内	
43	ITER/DEMOを見据えた実平衡トカマクプラズマの第一原理乱流輸送シミュレーション	仲田資季 (JAEA), 本多充 (JAEA), 吉田麻衣子 (JAEA), 浦野創 (JAEA), 前山伸也 (JAEA), 沼波政倫 (NIFS), 渡邊智彦 (名大)	第10回核融合エネルギー連合講演会, つくば, 日本	2014/6	国内	
44	粒子ベースボリュームレンダリングによる大規模データの可視化技術	河村拓馬 (JAEA), 宮村浩子 (JAEA), 井戸村泰宏 (JAEA), 武宮博 (JAEA)	第58回システム制御情報学会研究発表講演会, 京都, 日本	2014/5	国内	
45	マルチスケール・プラズマ乱流のジャイロ運動論的シミュレーション	渡邊智彦 (名大), 朝比祐一 (東工大), 前山伸也 (JAEA), 仲田資季 (JAEA), 井戸村泰宏 (JAEA), 石澤明宏 (NIFS), 沼波政倫 (NIFS), 洲鎌英雄 (NIFS)	日本地球惑星科学連合 2014年大会, 横浜, 日本	2014/4	国内	
46	Extreme scale fusion plasma simulations for ITER	井戸村泰宏 (JAEA)	Extreme Performance Computational Science French-Japanese Conference, 東京, 日本	2014/4	国際	
47	ナイロンオリゴマー分解酵素基質複合体の相互作用に対するアミノ酸変異導入の効果 (口頭発表)	安東寛之, 馬場剛史, 重田育照, 渡邊千鶴, 沖山佳生, 望月祐志, 中野雅由	日本化学会2014春季年会, 名古屋	2014/3/27	国内	
48	ABINIT-MPによる京でのフラグメント分子軌道計算 (口頭発表)	沖山佳生, 渡邊千鶴, 望月祐志*, 坂倉耕太, 山本純一, 野口孝明, 小久保達信, 新宮哲, 古明地勇人, 福澤薫, 中野達也, 田中成典	日本化学会	2014/3/27	国内	
49	FMO電子状態計算によるX線結晶構造の精密化の検討 (口頭発表)	福澤薫, 渡邊千鶴, 塚本貴志, 加藤昭史, 沖山佳生, 田中成典, 望月祐志	日本化学会2014春季年会, 名古屋	2014/3/27	国内	
50	逆相液体クロマトグラフィー系の分離挙動に関する計算化学的研究 (口頭発表)	永田大樹, 豊島輝, 沖山佳生, 都築誠二, 宮部寛志, 望月祐志	応用物理学会春季年会2014, 相模原	2014/3/19	国内	

51	フラグメント分子軌道法による生体高分子の量子化学計算 (依頼講演)	福澤薫	新化学技術推進協会 ライフサイエンス技術部 会・反応分科会 講演会, 東京	2014/3/17	国内	○
52	フラグメント分子軌道法プログラムABINIT-MPの京への導入 (依頼講演)	望月祐志	HPCI戦略プログラム分野4ものづくりワーク ショップ, 東京	2014/3/13	国内	○
53	イオン温度勾配駆動乱流のプラズマサイズ および加熱パ ワー依存性	井戸村泰宏 (JAEA), 仲田資季 (JAEA)	日本物理学会第69回年次大会, 平塚, 日本	2014/3	国内	
54	full-f静電ジャイロ運動論を用いた高粒子駆動測地音波 モード (EGAM) のシミュレーション研究	三木一弘 (JAEA), 井戸村泰宏 (JAEA)	日本物理学会第69回年次大会, 平塚, 日本	2014/3	国内	
55	高速流体解析プログラムUPACSの高度化と普及展開	高木亮治 (JAXA)	第1回統合ワークショップ「先端アプリ・共通 基盤・PF」部門	2014/3	国内	
56	フラグメント分子軌道法による大規模量子化学計算 (依頼 講演)	福澤薫	第27期CAMMフォーラム本例会, 東京	2014/2/7	国内	○
57	Explicit solvation modulates intra- and inter- molecular interactions within DNA: electronic aspects revealed by the ab initio Fragment Molecular Orbital (FMO) method	福澤薫 栗崎以久男 渡邊千鶴 冲山佳 生 望月祐志 田中成典 古明地 勇人	58th annual meeting of biophysical society, San Francisco	2014/2/15-19	国際	
58	1次元モデルにおけるL-H, H-L遷移の時空間発展	三木一弘 (JAEA), P. H. Diamond (UCSD), L. Schmitz (UCLA), D/ McDonald (JET- EFDA), O. D. Gurcan (Ecole Polytechnique), G. R. Tynan (UCSD)	「燃焼プラズマでの輸送特性の包括的理解に向 けたトロイダルプラズマの閉じ込め・輸送に関 する体系的研究」及び「閉じ込め・輸送サプ クスター会合」合同研究会, 土岐, 日本	2014/1	国内	
59	京コンピュータを用いたFMO 電子密度解析による生体分子 構造の高精度化の検討”第36回日本分子生物学会年会 (ポス ター)	渡邊千鶴, 福澤薫, 冲山佳生, 加藤昭 史, 塚本貴志, 田中成典, 望月祐志	第36回日本分子生物学会年会, 神戸	2013/12/5	国内	
60	フラグメント分子軌道法プログラムABINIT-MP/BioStation による生体高分子の大規模電子状態計算 (口頭発表)	福澤薫	第36回日本分子生物学会年会ワークショップ, 神戸	2013/12/4	国内	
61	Fragment Molecular Orbital Study for Biomolecular Systems (invited talk)	Kaori Fukuzawa	5th JCS International Symposium on Theoretical Chemistry, Nara	2013/12/3	国際	○
62	京コンピュータにより実現された磁場閉じ込めプラズマに おける電子/イオン系乱流シミュレーション	前山伸也 (JAEA)	日本学術会議第3回計算科学シンポジウム, 東 京, 日本	2013/12	国内	○
63	ペタスケール流体計算を支える基盤技術開発	井戸村泰宏 (JAEA)	第4回次世代ものづくりシンポジウム, 神戸, 日本	2013/12	国内	
64	テトラシアニド白金錯体-メチルビオロゲン複合系におけ る電子状態解析と構造予測 (ポスター)	小嶋亮平, 上之原和佳, 松下信之, 森 寛敏, 望月祐志	錯体化学討論会, 沖縄	2013/11/2	国内	
65	ナフチリジンを架橋配位子とするRu-Ru錯体の電子状態に 関する理論解析 (ポスター)	小嶋亮平, 瀬戸根直希, 和田亨, 望月 祐志	錯体化学討論会, 沖縄	2013/11/2	国内	
66	Progress of full-f gyrokinetic simulation toward reactor relevant numerical experiments	Y. Idomura (JAEA)	23rd International Toki Conference on Large-scale Simulation and Fusion Science, 土岐, 日本	2013/11	国際	○

67	Optimizations of a spectral/finite difference gyrokinetic code for improved strong scaling toward million cores	S. Maeyama (JAEA), T.-H. Watanabe (NIFS), Y. Idomura (JAEA), M. Nakata (JAEA), M. Nunami (NIFS), A. Ishizawa (NIFS)	SC13, Denver, USA	2013/11	国際	
68	電磁的ジャイロ運動論に基づく高ベータプラズマ乱流シミュレーション	前山伸也 (JAEA), 石澤明宏 (NIFS), 渡邊彦彦 (NIFS), 仲田資季 (JAEA), 宮戸直亮 (JAEA), 井戸村泰宏 (JAEA)	プラズマ・核融合学会第30回年会, 東京, 日本	2013/11	国内	○
69	閉じ込め時間スケールのfull-fジャイロ運動論シミュレーション	井戸村泰宏 (JAEA)	プラズマ・核融合学会第30回年会, 東京, 日本	2013/11	国内	
70	ABINIT-MP/BioStationによるFMO法の創薬への適用 (依頼講演)	福澤薫	第6回CBI学会FMO研究会, 東京	2013/10/31	国内	○
71	FMO calculations for nano-biotechnology (Poster)	Y. Mochizuki, Y. Okiyama, K. Fukuzawa, C. Watanabe, K. Kato, T. Tsukamoto, T. Nakano, S. Tanaka	CBI conference, Tokyo	2013/10/28	国際	
72	FMO-based electron density analysis to protein structure refinement (Poster)	C. Watanabe, K. Fukuzawa, Y. Okiyama, A. Kato, T. Tsukamoto, S. Tanaka, Y. Mochizuki	CBI conference, Tokyo	2013/10/28	国際	
73	FMO-based cluster analysis for drug design by multi-dimensional scaling (Poster)	R. Kurauchi, S. Tanaka, K. Fukuzawa, A. Kato, C. Watanabe, Y. Okiyama, Y. Mochizuki, T. Nakano	CBI conference, Tokyo	2013/10/28	国際	
74	Refinement of Crystal Structures Using Partial Geometry Optimization and Electron Density Calculations Based on the Fragment Molecular Orbital Method (Poster)	K. Fukuzawa, N. Watanabe, C. Watanabe, Y. Okiyama, S. Tanaka, Y. Mochizuki	CBI conference, Tokyo	2013/10/28	国際	
75	FMO calculations with ABINIT-MP on K-computer (Poster)	Y. Okiyama, C. Watanabe, K. Fukuzawa, S. Tanaka, Y. Mochizuki	CBI conference, Tokyo	2013/10/28	国際	
76	エクサスケールコンピューティングが拓く流体シミュレーション-航空宇宙工学における期待-	高木亮治 (JAXA)	第7回名古屋工業大学-核融合科学研究所連携事業協同セミナー	2013/10	国内	○
77	ホウ素系阻害剤とEGFRチロシンキナーゼの相互作用 (依頼講演)	福澤薫	第342回CBI研究講演会, 東京	2013/9/5	国内	○
78	ABINIT-MPにおけるナノバイオ系への展開 (依頼講演)	福澤薫	第5回CBI学会FMO研究会, 神戸	2013/9/18	国内	○
79	フラグメント分子軌道計算に基づくペプチド-シリカの相互作用解析 (口頭発表)	望月祐志, 沖山佳生, 渡邊千鶴, 塚本貴志, 福澤薫, 田中成典	応用物理学会秋季年会2013, 京田辺	2013/9/17	国内	
80	ABINIT-MPプログラムの現状の機能紹介と今後の展開 (依頼講演)	望月祐志	スーパーコンピューティング技術産業応用協議会セミナー, 東京	2013/9/12	国内	○
81	ABINIT-MP/BioStation によるFMO 法の創薬への適用 (依頼講演)	福澤薫	スーパーコンピューティング技術産業応用協議会セミナー, 東京	2013/9/12	国内	○
82	Gyrokinetic simulations of multi-scale turbulence on the K computer	S. Maeyama (JAEA), T.-H. Watanabe (NIFS), Y. Idomura (JAEA), M. Nakata (JAEA), M. Nunami (NIFS), A. Ishizawa (NIFS)	23rd International Conference on Numerical Simulation of Plasmas, Beijing, China	2013/9	国際	○

83	Optimizations of the gyrokinetic Vlasov simulation code GKV for the K computer	S. Maeyama (JAEA), T. -H. Watanabe (NIFS), Y. Idomura (JAEA), M. Nakata (NIFS), M. Nunami (NIFS), A. Ishizawa (NIFS)	JSST2013 International Conference on Simulation Technology, 東京, 日本	2013/9	国際	
84	Plasma size scan of ITG turbulence simulations on the K-computer	Y. Idomura (JAEA), M. Nakata (JAEA)	23rd International Conference on Numerical Simulation of Plasmas, Beijing, China	2013/9	国際	
85	Physics of stimulated and spontaneous L-H transitions	K. Miki (JAEA), P. H. Diamond (UCSD), S. H. Hahn (NFRI), W. W. Xiao (NFRI), O. D. Gurcan (Ecole Polytechnique), G. R. Tynan (UCSD)	14th International Workshop on H-mode Physics and Transport Barriers, 春日, 日本	2013/9	国際	
86	L-H遷移の時空間構造研究の新展開	三木一弘 (JAEA)	日本物理学会2013年秋季大会, 徳島, 日本	2013/9	国内	○
87	ベタスケール計算機における核融合プラズマ乱流コードの最適化	井戸村泰宏 (JAEA)	プラズマシミュレータシンポジウム2013, 土岐, 日本	2013/9	国内	○
88	大域及び局所ジャイロ運動論モデルに基づく固定勾配/固定熱流駆動ITG乱流シミュレーション	仲田資季 (JAEA)	プラズマシミュレータシンポジウム2013, 土岐, 日本	2013/9	国内	○
89	粒子ベースボリュームレンダリングを利用した原子力分野における大規模有限要素シミュレーション結果向けのクライアント/サーバ可視化システム	河村拓馬 (JAEA), 宮村浩子 (JAEA), 井戸村泰宏 (JAEA), 武宮博 (JAEA)	日本原子力学会2013年秋の年会, 八戸, 日本	2013/9	国内	
90	フラグメント分子軌道計算プログラムABINIT-MPの開発と応用事例 (依頼講演)	望月祐志	新化学技術推進協議会-先端化学・材料技術部会-研究会, 東京	2013/8/5	国内	○
91	Exploring phase space turbulence in magnetic fusion plasmas	T. -H. Watanabe (NIFS)	CCP2013 Conference on Computational Physics, Moscow, Russia	2013/8	国際	○
92	フラグメント分子軌道 (FMO) 計算の現状と今後 (依頼講演)	望月祐志	新学術領域「分子ロボティクス」研究会, 東京	2013/7/26	国内	○
93	Modeling of silica-peptide interaction based on the fragment molecular orbital (FMO) calculations (Oral)	Y. Mochizuki, K. Fukuzawa, Y. Okiyama, C. Watanabe	ISAM 4 Conference, Tokyo	2013/7/22	国際	
94	粒子ベースボリュームレンダリングにおける粒子生成処理のGPGPUによる高速化	河村拓馬 (JAEA), 宮村浩子 (JAEA), 井戸村泰宏 (JAEA), 武宮博 (JAEA)	可視化情報シンポジウム2013, 東京, 日本	2013/7	国内	
95	Fixed-gradient and fixed-flux full-f simulations of global ion temperature gradient driven turbulent transport	M. Nakata (JAEA), Y. Idomura (JAEA)	40th EPS Conference on Plasma Physics, Espoo, Finland	2013/7	国際	
96	Full-f gyrokinetic simulation over a confinement time	Y. Idomura (JAEA)	40th EPS Conference on Plasma Physics, Espoo, Finland	2013/7	国際	
97	Comparison between kinetic-ballooning-mode-driven turbulence and ion-temperature-gradient-driven one	S. Maeyama (JAEA), A. Ishizawa (NIFS), T. -H. Watanabe (NIFS), M. Nakata (JAEA), Y. Idomura (JAEA)	40th EPS Conference on Plasma Physics, Espoo, Finland	2013/7	国際	
98	ABINIT-MP/BioStationによるFMO法の創薬への応用	福澤薫	構造活性フォーラム2013, 横浜	2013/6/28	国内	○
99	フラグメント分子軌道計算の現状と今後	望月祐志	蛋白質科学会年会, 鳥取	2013/6/12	国内	○
100	エクサスケールコンピューティングが拓く計算工学-航空宇宙工学での期待-	高木亮治, 堤誠司 (JAXA)	第18回計算工学講演会、特別企画 エクサスケールに向けた計算工学の取り組み	2013/6	国内	

101	テトラシアニド白金(II)錯体-メチルピオロゲン複合系における電荷移動励起の理論的研究 (ポスター)	小嶋亮平、森寛敏、望月祐志、上ノ原和佳、松下信之、松尾健司	日本化学会第93春季年会, 大津	2013/3/23	国内	
102	量子化学計算による水素原子位置の決定と水素結合の評価 (講演)	福澤薫	第334回CBI学会研究講演会、東京大学山上会館、東京	2013/2/15	国内	
103	Acceleration of Particle Generation of Particle-based Volume Rendering for Client-Server Visualization System	T. Kawamura(JAEA), Y. Idomura(JAEA), H. Miyamura(JAEA), H. Takemiya(JAEA)	3rd AIGS International Symposium, 神戸, 日本	2013/2	国際	
104	プラズマ乱流シミュレーションにおける通信マスク手法開発	井戸村泰宏 (JAEA), 仲田資季 (JAEA), 山田進 (JAEA), 町田昌彦 (JAEA), 今村俊幸 (RIKEN-AIGS), 渡邊智彦 (NIFS), 沼波政倫 (NIFS), 井上晃 (Fujitsu), 堤重信 (Fujitsu), 三吉郁夫 (Fujitsu), 志田直之 (Fujitsu)	HPCS2013, 東京, 日本	2013/1	国内	
105	京におけるジャイロ運動論的シミュレーションコードGKVの超並列スペクトル計算	前山伸也 (JAEA), 渡邊智彦 (NIFS), 井戸村泰宏 (JAEA), 仲田資季 (JAEA), 沼波政倫 (NIFS), 石澤明宏 (NIFS)	HPCS2013, 東京, 日本	2013/1	国内	
106	粒子ベースボリュームレンダリングを用いたクライアントサーバ可視化システム	河村拓馬 (JAEA), 井戸村泰宏 (JAEA), 宮村浩子 (JAEA), 武宮博 (JAEA)	HPCS2013, 東京, 日本	2013/1	国内	
107	将来のスーパーコンピューティングの在り方について-G8エクサスケールソフトウェアプロジェクトの事例から-	井戸村泰宏 (JAEA)	第3回次世代ものづくりシンポジウム, 神戸, 日本	2012/12	国内	
108	圧縮性流体解析プログラムUPACSの推進状況	高木亮治、山本一臣 (JAXA)	第2回「次世代ものづくり」シンポジウム	2012/12	国内	
109	Communication overlap techniques for improved strong scaling of gyrokinetic Eulerian code beyond 100k cores on the K-computer	Y. Idomura(JAEA), M. Nakata(JAEA), S. Yamada(JAEA), M. Machida(JAEA), T. Imamura(RIKEN-AIGS), T.-H. Watanabe(NIFS), M. Nunami(NIFS), H. Inoue(Fujitsu), S. Tsutsumi(Fujitsu), I. Miyoshi(Fujitsu), N. Shida(Fujitsu)	SC12, Salt Lake City, USA	2012/11	国際	
110	Remote Visualization for Large-scale Simulation using Particle-based Volume Rendering	T. Kawamura(JAEA), Y. Idomura(JAEA), H. Miyamura(JAEA), H. Takemiya(JAEA)	SC12, Salt Lake City, USA	2012/11	国際	
111	ベタスケールジャイロ運動論シミュレーションの通信マスク手法の開発	井戸村泰宏 (JAEA), 仲田資季 (JAEA), 山田進 (JAEA), 町田昌彦 (JAEA), 今村俊幸 (RIKEN-AIGS)	プラズマ・核融合学会第29回年会, 春日, 日本	2012/11	国内	
112	固定熱流および固定勾配駆動ITG乱流の大域的ジャイロ運動論シミュレーション	仲田資季 (JAEA), 井戸村泰宏 (JAEA)	プラズマ・核融合学会第29回年会, 春日, 日本	2012/11	国内	
113	京における局所的ジャイロ運動論的シミュレーションコードGKVの並列化	前山伸也 (JAEA), 渡邊智彦 (NIFS), 井戸村泰宏 (JAEA), 仲田資季 (JAEA), 沼波政倫 (NIFS), 石澤明宏 (NIFS)	プラズマ・核融合学会第29回年会, 春日, 日本	2012/11	国内	
114	プラズマ乱流シミュレーションにおける通信マスク手法開発	井戸村泰宏, 仲田資季, 山田進, 町田昌彦 (原子力機構), 今村俊幸 (理研), 渡邊智彦, 沼波政倫 (核融合研), 井上晃, 堤重信, 三吉郁夫, 志田直之 (富士通)	プラズマ・核融合学会第25回年会, 春日, 日本	2012/11	国内	

115	Development and application of ab initio fragment molecular orbital method for bio-macromolecules (Invited speaker)	Kaori Fukuzawa	Conference on Computational Physics (CCP2012), Kobe, Japan	2012年10月14日～18日	国内	
116	Interaction analysis in implicit solvent with ionic effect using fragment molecular orbital method (ポスター)	Yoshio Okiyama, Chiduru Watanabe, Kaori Fukuzawa, Shigenori Tanaka, Tatsuya Nakano and Yuji Mochizuki	生命医薬情報学連合大会、タワーホール船堀、東京	2012年10月14日～17日	国内	
117	Demonstrated examples of the four-body corrected fragment molecular orbital calculations (ポスター)	Chiduru Watanabe, Kaori Fukuzawa, Yoshio Okiyama, Yoji Umezawa, Motohiro Nishio, Shigenori Tanaka, Tatsuya Nakano and Yuji Mochizuki	生命医薬情報学連合大会、タワーホール船堀、東京	2012年10月14日～17日	国内	
118	FMOプログラムABINIT-MP(X)の開発と応用 (招待講演)	望月祐志	生命医薬情報学連合大会、タワーホール船堀、東京	2012年10月14日～17日	国内	
119	Plasma size and collisionality scaling of ion temperature gradient driven turbulent transport	M. Nakata(JAEA), Y. Idomura(JAEA)	24th IAEA Fusion Energy Conference, San Diego, USA	2012/10	国際	
120	Computational challenges in petascale fusion plasma simulations	Y. Idomura(JAEA)	CCP2012 Conference on Computational Physics, 神戸, 日本	2012/10	国際	○
121	New Fragmentation of Fragment Molecular Orbital Method Applicable to Fragment Based Drug Design (口頭発表)	Chiduru Watanabe, Kaori Fukuzawa, Yoshio Okiyama, Takayuki Tsukamoto, Akifumi Kato, Shigenori Tanaka, Tatsuya Nakano and Yuji Mochizuki	JSST 2012 Interbational Conference on Simulation Technology, Port Island, Kobe, Japan	2012年9月27日～28日	国内	
122	ABINIT-MP(X)によるFMO計算の最近の展開 (口頭発表)	望月祐志、福澤薫、沖山佳生、古明地 勇人、渡邊千鶴、塚本貴志、中野達也	第6回分子科学討論会2012東京、東京大学本郷キャンパス、東京	2012年9月18日～21日	国内	
123	ABINIT-MP/BioStation によるFMO応用計算事例 (口頭発表)	福澤薫、渡邊千鶴、沖山佳生、塚本貴志、中野達也、田中成典、望月祐志	第6回分子科学討論会2012東京、東京大学本郷キャンパス、東京	2012年9月18日～21日	国内	
124	ABINIT-MP(X)による京でのFMO計算 (ポスター)	沖山佳生、望月祐志、福澤薫、古明地 勇人、森寛敏、渡邊千鶴、田中成典	第6回分子科学討論会2012東京、東京大学本郷キャンパス、東京	2012年9月18日～21日	国内	
125	Grb2 SH2ドメイン-阻害剤間の結合親和性のFMO4法と新規フラグメント分割に基づくCH/ π 相互作用解析 (ポスター)	渡邊千鶴、福澤薫、望月祐志、中野達也、梅沢洋二、西尾元宏	第6回分子科学討論会2012東京、東京大学本郷キャンパス、東京	2012年9月18日～21日	国内	
126	テトラシアニド金属錯体とメチルピオロゲンからなる結晶の吸収スペクトル解析 (ポスター)	小嶋亮平、森寛敏、望月祐志、上ノ原和佳、松下信之	第6回分子科学討論会2013東京、東京大学本郷キャンパス、東京	2012年9月18日～22日	国内	
127	Development of numerical techniques toward extreme scale fusion plasma turbulence simulations	Y. Idomura(JAEA), M. Nakata(JAEA), S. Yamada(JAEA), M. Machida(JAEA), T. Imamura(RIKEN-AICS), T.-H. Watanabe(NIFS), M. Nunami(NIFS), H. Inoue(Fujitsu), S. Tsutsumi(Fujitsu), I. Miyoshi(Fujitsu), N. Shida(Fujitsu)	JSST2012 International Conference on Simulation Technology, 神戸, 日本	2012/9	国際	
128	Parallelization of a local gyrokinetic Vlasov simulation code for peta-scale computing	S. Maeyama(JAEA), T.-H. Watanabe(NIFS), Y. Idomura(JAEA), M. Nakata(JAEA), M. Nunami(NIFS), A. Ishizawa(NIFS)	JSST2012 International Conference on Simulation Technology, 神戸, 日本	2012/9	国際	
129	核融合プラズマシミュレーションコードGT5Dに現れる線形方程式に対するクリロフ部分空間法の収束性	山田進 (JAEA), 井戸村泰宏 (JAEA), 今村俊幸 (RIKEN-AICS), 町田昌彦 (JAEA)	日本応用数学会2012年度年会, 稚内, 日本	2012/8	国内	

130	京における超並列核融合プラズマシミュレーションのための通信マスク手法開発	井戸村泰宏 (JAEA)	第4回HPCI戦略プログラム合同研究交流会, 神戸, 日本	2012/7	国内	
131	エクサフロップス級計算機に向けたプログラミングモデルに関する一考察	高木亮治、堤誠司 (JAXA)	第44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2012	2012/7	国内	
132	High performance Krylov subspace methods for asymmetric linear system on fusion plasma simulation code GT5D	S. Yamada (JAEA), Y. Idomura (JAEA), T. Imamura (RIKEN-AICS), M. Machida (JAEA)	7th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA2012), London, UK	2012/6	国際	
133	ベタスケール計算機における核融合プラズマ乱流シミュレーション	井戸村泰宏 (JAEA)	第9回核融合エネルギー連合講演会, 神戸, 日本	2012/6	国内	○
134	FM0計算プログラムABINIT-MP(X)の新しい機能 (ポスター)	沖山佳生、渡邊千鶴、福澤薫、望月祐志、中野達也、田中成典	第15回理論化学討論会、仙台市福祉プラザ、仙台	2012年5月24日～26日	国内	
135	FM04法と新規フラグメント分割に基づくGrb2 SH2 ドメイントリペプチド複合体のCH/ π 相互作用解析 (ポスター)	渡邊千鶴、福澤薫、中野達也、望月祐志、梅沢洋二、西尾元宏	第15回理論化学討論会、仙台市福祉プラザ、仙台	2012年5月24日～26日	国内	
136	FM04法に基づく分子間相互作用の高性能解析 (ポスター)	福澤薫、渡邊千鶴、沖山佳生、中野達也、田中成典、望月祐志	第15回理論化学討論会、仙台市福祉プラザ、仙台	2012年5月24日～26日	国内	
137	シス・トランス-プラチンのスピン軌道作用に基づいた励起状態計算(口頭発表)	小嶋亮平、森寛敏、望月祐志、松下信之、上ノ原和佳	第16回理論化学討論会、仙台市福祉プラザ、仙台	2012年5月24日～27日	国内	
138	Optimization of GT5D code on peta-scale machines	Y. Idomura (JAEA)	17th NEXT Workshop, 柏, 日本	2012/3	国際	
139	ものづくりにおける先端シミュレーション活用基盤の構築戦略	畑田敏夫	STF (科学技術者フォーラム) セミナー	2012/2/6	国内	○
140	Convergence property of Krylov subspace methods for asymmetric linear system on fusion plasma simulation code GT5D	S. Yamada (JAEA), Y. Idomura (JAEA), T. Imamura (RIKEN-AICS), M. Machida (JAEA)	JSST2012 International Conference on Simulation Technology, 神戸, 日本	2012	国際	
141	体制構築課題「次世代計算科学ソフトウェアの革新的アルゴリズムの創生と核融合プラズマ流体解析への応用」の進捗状況	井戸村泰宏 (JAEA)	第2回次世代ものづくりシンポジウム, 神戸, 日本	2011/12	国内	
142	Performance evaluations of gyrokinetic Eulerian code GT5D on massively parallel multi-core platforms	Y. Idomura (JAEA), S. Jolliet (JAEA)	SC11, Seattle, USA	2011/11	国際	

4. メディアへの情報発信、ウェブサイト等での情報公開

No.	名称	日付	説明	備考
1	Remote Visualization System PBVR	2015年4月	遠隔可視化システムPBVRをオープンソースソフトウェアとして公開	http://ccse.jaea.go.jp/ja/download/software_eng.html

5. 広報活動等(ワークショップ・研究会等の開催)

No.	名称	開催日時	開催場所	参加者(人数)
1	該当無			

該当なし