



JAEA-Evaluation  
2016-003

DOI:10.11484/jaea-evaluation-2016-003

## 平成 27年度計算科学技術研究実績評価報告

Review of Research on Advanced Computational Science in FY2015

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

# JAEA-Evaluation

January 2017

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは国立研究開発法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。  
本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。  
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ (<http://www.jaea.go.jp>)  
より発信されています。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 研究連携成果展開部 研究成果管理課  
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方2番地4  
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency.  
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to  
Institutional Repository Section,  
Intellectual Resources Management and R&D Collaboration Department,  
Japan Atomic Energy Agency.  
2-4 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan  
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2017

平成 27 年度計算科学技術研究実績評価報告

日本原子力研究開発機構  
システム計算科学センター

(2016 年 11 月 11 日受理)

システム計算科学センターにおいては、「国立研究開発法人日本原子力研究開発機構の中長期目標を達成するための計画（中長期計画）」に基づき、原子力分野における計算科学技術研究に関する研究開発を実施してきた。この研究開発は原子力基礎基盤研究のうちの 1 分野として位置づけられていることから、原子力基礎工学研究・評価委員会による助言と評価がなされるが、計算科学技術研究については、それを支援するために原子力基礎工学研究・評価委員会の下に計算科学技術研究専門部会が設置され、課題の詳細な内容等を評価することとなった。

本報告は、平成 27 年度にシステム計算科学センターにおいて実施された計算科学技術研究の実績と、それに対する計算科学技術研究専門部会による評価をとりまとめたものである。

Review of Research on Advanced Computational Science in FY2015

Center for Computational Science & e-Systems

Japan Atomic Energy Agency  
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received November 11, 2016)

Research on advanced computational science for nuclear applications, based on “Plan to Achieve Medium- to Long-term Objectives of the Japan Atomic Energy Agency (Medium- to Long-term Plan)”, has been performed at Center for Computational Science & e-Systems (CCSE), Japan Atomic Energy Agency.

CCSE established the committee consisting of outside experts and authorities which does research evaluation and advices for the assistance of the research and development.

This report summarizes the followings.

- (1) Results of the R&D performed at CCSE in FY 2015 (April 1st, 2015 - March 31st, 2016)
- (2) Results of the evaluation on the R&D by the committee in FY 2015 (April 1st, 2015 - March 31st, 2016)

Keywords: Research Evaluation, Numerical Simulation, Computer Science, Computational Science, Multi-scale Modeling, Material Simulation, Structural Simulation, Supercomputer, Large Scale Parallel Computing, Visualization

目 次

1. はじめに	1
2. 計算科学技術研究専門部会	2
3. 計算科学技術研究における研究計画	3
3. 1 中長期計画	3
3. 2 年度計画	3
4. 研究実績と評価意見	4
付録 平成 27 年度計算科学技術研究実績	15

Contents

1. Introduction	1
2. Evaluation Committee	2
3. R&D Plans for the Advanced Computational Science Research of CCSE/JAEA	3
3.1 Medium to Long-term Plan	3
3.2 Plan for Fiscal Year 2015	3
4. Results of the R&D and the Evaluation Comments	4
Appendix List of Achievements in FY 2015	15

This is a blank page.

## 1. はじめに

原子力に関する研究開発では、実験や観測が困難な現象のメカニズムを解明したり、進展を予測したりする必要がある。このため、原子・分子の構造や運動をはじめ、気象や環境等、生物学的・理工学的課題のシミュレーション等を行う計算科学技術は、原子力分野の研究開発において理論、実験と並び必要不可欠な研究手法となっている。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構（以下「機構」という。）においては、計算科学技術研究を原子力基礎基盤研究の重要な柱として中長期計画に盛り込み、システム計算科学センターを中心に研究開発を推進している。

この研究開発は原子力基礎基盤研究のうちの1分野として位置づけられていることから、機構の原子力基礎工学研究・評価委員会（以下「委員会」という。）によって研究に対する助言と評価がなされるが、計算科学技術研究については、委員会の助言・評価を支援するため、委員会の下に計算科学技術研究専門部会（以下「専門部会」という。）が設置され、課題の詳細な内容等の評価することとなった。また、この専門部会の評価結果は、機構における毎年度の内部評価（機構による自己評価）の際に「外部有識者の意見」としても活用されている。

本報告は、平成 27 年度にシステム計算科学センターにおいて実施された計算科学技術研究の実績と専門部会の評価結果をとりまとめたものであり、第 2 章に専門部会の構成、第 3 章に研究の計画、第 4 章に研究成果と専門部会の評価意見、さらに付録に研究開発実績が記載されている。

2. 計算科学技術研究専門部会

専門部会の構成及び開催状況をそれぞれ表2. 1及び表2. 2に示す。

表2. 1 計算科学技術研究専門部会構成（敬称略）

部会長	功刀 資彰	京都大学大学院 工学研究科 教授
専門委員	岡崎 進	名古屋大学大学院 工学研究科 教授
	小野 謙二	理化学研究所 計算科学研究機構 可視化技術研究チーム リーダー
	越塚 誠一	東京大学大学院 工学系研究科 教授
	常行 真司	東京大学大学院 理学系研究科 教授
	朴 泰祐	筑波大学大学院 システム情報工学研究科 教授

表2. 2 計算科学技術研究専門部会開催状況

回	開催日時	開催場所	主たる議題	特記事項
1	平成28年3月23日 13:30～15:30	日本原子力研究開発機構 東京事務所第5会議室 (東京都千代田区内幸 町)	・第3期中長期計画及び平 成27年度計画について ・計算科学技術の研究活動 状況・成果について	小野委員 及び朴委 員は欠席



### 3. 計算科学技術研究における研究計画

#### 3. 1 中長期計画

計算科学技術研究を含む原子力基礎基盤研究については、「国立研究開発法人日本原子力研究開発機構の中長期目標を達成するための計画（中長期計画）（平成 27 年 4 月 1 日～平成 34 年 3 月 31 日）」に次のとおり定められた。下線部が計算科学研究についての計画である。

原子力利用を支え、様々な社会的ニーズへの科学的貢献と新たな原子力利用を創出するために、原子力科学技術基盤の根幹をなす核工学・炉工学、燃料・材料工学、原子力化学、環境・放射線科学及び計算科学技術分野を体系的かつ継続的に強化する。優れた科学技術・学術的成果の創出はもとより、機構の中核的なプロジェクトの加速や社会的ニーズに対応した課題解決に貢献するテーマ設定を行う。

具体的には、核データ、燃料・材料の劣化挙動、放射性核種の環境中挙動等の知見を蓄積し、長寿命核種の定量分析や核燃料物質の非破壊測定等の測定・分析技術を開発する。また、核特性、熱流動、環境動態、放射線輸送、耐震評価、シビアアクシデント時の炉内複雑現象等のモデル開発のための基礎データの拡充並びに信頼性及び妥当性検証のための測定手法や分析手法の開発を進め、データベース及びコンピュータシミュレーション技術の開発を進める。この研究を進めることにより東京電力福島第一原子力発電所事故の中長期的課題への対応、分離変換技術等の放射性廃棄物処理処分、軽水炉を含む原子炉技術高度化、環境影響評価及び放射線防護の各分野に貢献する。

#### 3. 2 年度計画

中長期計画を実現するための平成 27 年度の年度計画は、以下のように定められた。

計算科学技術研究では、シビアアクシデント時の炉内複雑現象解析に向け、高温・高圧下における物性変化モデル開発のための基礎データの拡充を進めるとともに、エクサスケールの流体解析に向けた効率的反復行列解法を試作し、評価する。耐震評価を高精度化する上で重要となるモデル化因子を抽出する。

#### 4. 研究実績と評価意見

中長期計画及び平成 27 年度計画に沿って実施した研究開発の実績について、表 4. 1 にまとめた。また、研究開発実績（論文、受賞、産学官連携等）の詳細については、付録に一覧を掲載する。

専門部会において、表 4. 1 の内容を説明し、質疑応答等を経て議論した上で、専門委員からいただいた評価意見を表 4. 2 に記載する。

表 4. 1 平成 27 年度研究開発実績及び成果の意義等 (1 / 4)

	中長期計画	H27 年度計画	H27 の実績・成果	成果の科学的意義	機構内外のニーズへの適合・貢献	参考指標、優れた成果等
1	耐震評価、シビアアクシデント時の炉内複雑現象等のモデル開発のための基礎データの拡充(中略)コンピュータシミュレーション技術の開発を進める。	シビアアクシデント時の炉内複雑現象解析に向け、高温・高圧下における物性変化モデル開発のための基礎データの拡充を進める。	<p>○高温・高圧下での核燃料酸化物の挙動を再現し、シビアアクシデント条件下での正確な挙動予測モデルを開発するためには、燃料溶融前に起こる高温・高圧下での物性変化の基礎データの拡充が必要である。本研究では、酸化物核燃料物質として二酸化トリウムに着目し、第一原理分子動力学シミュレーションを実施することで、溶融点近傍にて詳細な物性変化の基礎データを取得した。本シミュレーションにより、溶融点直前にて熱物性が不連続に変化する相転移現象を再現することに成功し、酸素のみが単独で激しく結晶内を動き始めることがその要因であることを確認した。</p> <p>○シビアアクシデント時の高温・高圧下における燃料被覆管の挙動を予測するためには、高温・高圧下での被覆管材料の反応挙動をシミュレーションし、界面にてその物性が大きく変化する基礎データを取得する必要がある。本研究では、高温・高圧水蒸気下での被覆管酸化反応をシミュレーションするため、計算手法として化学反応分子動力学法を採用し、ジルコニウムだけでなく、次世代被覆管材と目される SiC においても、主要元素と高温・高圧の水分子との酸化反応及び酸化反応生成物の挙動を同時に被覆管界面にて追跡することに成功した。これにより、酸化反応前後の界面物性変化の基礎データを取得した。</p>	<p>○核燃料酸化物の高温・高圧下挙動の原子・分子レベルのシミュレーションでは従来、主に古典分子動力学法を用いて研究されてきたが、事前に決定する原子間ポテンシャルの形に、左記の相転移の有無や物性値の変化が依存するため、その結果の妥当性が問題となっていた。これに対し、原子間ポテンシャルを常に電子状態から計算によって求める第一原理計算手法を用いたことで、物性変化量の精度がより観測値に近づくと同時に、左記の相転移現象が現実にかかることを確認し、しかもその要因をも明らかにすることに成功した。</p> <p>○高温・高圧水蒸気下での被覆管材料の酸化反応挙動をシミュレーションするためには、従来の古典分子動力学では、化学反応を記述することが不可能であるため、材料界面の変化を追跡することは全く不可能であったが、本研究で用いた手法を用いることで、任意の高温・高圧条件下にて、上記の反応挙動を調べることが可能となり、酸化反応速度や水素発生量の温度・圧力依存性等が定量的に評価可能となった。</p>	<p>○福島第一原発で起こった原子炉のシビアアクシデント等を計算機上でシミュレーションし、事故解析を高度化するためには、核燃料の主要材料が示す高温・高圧下での物性変化を高精度に予測する計算手法を用いて機構論的知見を得ることが求められている。本研究では、現時点にて最も精度が高い計算手法と目される第一原理計算手法を用いて、一つの核燃料酸化物の高温・高圧下での挙動を再現した。本手法を適用し、他の核燃料酸化物についても同様な計算を実施することで、広範な核燃料酸化物の物性基礎データを取得できる可能性が示唆される。</p> <p>○シビアアクシデントの初期に起こる被覆管材料の酸化反応とその結果起こると想定されるカタストロフィックな挙動を機構論的にモデル化するためには、マイクロレベルで界面酸化反応を再現し、そのメゾ・マクロレベルへの影響を評価する必要がある。本研究では、酸化反応挙動と原子・分子の熱拡散挙動を同時に考慮することで、被覆管材料の界面での安定性の変化や水素の発生過程等を原子・分子レベルで初めて追跡可能とした。今後は、界面状態の変化と共にメゾ・マクロレベルでの評価に必要なパラメータの取得を次の目標とする。</p>	<p>○査読付論文: 18 (Acta Materialia (IF4.4): 2 件、Physical Review B (IF3.6) : 2 件等)</p> <p>○国際会議発表: 10</p> <p>○招待講演: 5 (金属学会、材料学会腐食部会、日本 MRS、計算科学 WS)</p> <p>○外部資金: 5 件 (34 百万) (内閣府 SIP 戦略的イノベーション創造プログラム「革新的構造材料、「界面」を通じた、構造材料における未解決課題克服のための技術構築」、JST「産学共創基礎基盤研究、革新的構造用金属材料創成を目指したヘテロ構造制御に基づく新指導原理の構築」等)</p>

表 4. 1 平成 27 年度研究開発実績及び成果の意義等 (2 / 4)

	中長期計画	H27 年度計画	H27 の実績・成果	成果の科学的意義	機構内外のニーズへの適合・貢献	参考指標、優れた成果等
2	耐震評価、シビアアクシデント時の炉内複雑現象等のモデル開発のための基礎データの拡充(中略)コンピュータシミュレーション技術の開発を進める。	エクサスケールの流体解析に向けた効率的な反復行列解法を試作し、評価する。	<p>○炉内複雑現象解析用の流体解析コードにおける処理の大部分を占める行列計算に関して、コードのデータ構造に特化した処理を実装し、従来の行列計算ライブラリと比較して 10 倍以上の性能向上を達成した。</p> <p>○将来のエクサスケール計算機のアーキテクチャ候補と考えられる MIC、GPU、FX100 に流体計算カーネルを移植し、コードのデータ構造とメニーコア環境の複雑なメモリーキャッシュ階層構造を適合させ、従来計算機上での性能と比較して最大 7 倍程度の高速化を実現した。</p>	<p>○原子力流体コードにおける汎用行列ライブラリを独自行列ソルバで代替したことで、今後の大規模問題向け計算手法開発に向けた環境を整備できた。</p> <p>○メニーコア環境を利用する上でボトルネックの一つとなっている複雑なメモリーキャッシュ階層構造に対する最適化技術を開発したことで、今後のメニーコア並列環境上でのエクサスケール流体解析コード開発に必要な技術的知見を蓄積できた。</p>	<p>○福島第一原発の廃炉に向けて必要とされている炉内の状況に関する詳細なデータ取得に向けて、基礎工学部門と緊密な連携の下、研究開発を推進。基礎工学部門が開発している溶融燃料移行挙動解析コード Jupiter に開発ソルバを組み込むことで、機構スパコン規模の計算機を用いた解析に十分な処理性能を達成した。</p>	<p>○査読付論文:7(年度末時点 9 件予定) (Physical Review Letters (IF7.5): 1 件、Journal of Computational Physics(IF2.4): 1 件、Parallel Computing(IF1.5):1 件等)</p> <p>○国際会議発表: 11</p> <p>○招待講演: 3 (ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015 等)</p> <p>○外部資金: 3 件(18 百万) (文科省 HPCI 戦略プログラム分野 4「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」、文科省ポスト京重点課題⑥「革新的クリーンエネルギーの実用化」等)</p> <p>○プレス発表: 1 件 核融合プラズマ中の乱流が織り成すマルチスケール相互作用 –スーパーコンピュータ「京」で得られた新発見–、日刊工業新聞(7/15)、科学新聞(7/24)</p> <p>○成果普及活動 遠隔可視化システムの公開、可視化に関する国際会議 SigGraphAsia2015 において遠隔可視化システムのハンズオンセミナー実施</p>
3	耐震評価を高精度化する上で重要となるモデル化因子を抽出する。	耐震評価を高精度化する上で重要となるモデル化因子を抽出する。	<p>○耐震評価上重要となるモデル化因子の候補の選定および、感度解析を実施し、地盤の物性(せん断波速度、減衰率)、建屋と地盤の結合条件、建屋壁の取り扱い等の違いが応答に強く影響するという知見を得た。</p>	<p>○構造物モデル化因子の抽出により、構造物のモデル化が応答解析結果に与える影響が大きい要因を特定できた。これにより、構造物のモデル化の方針を明確化する上で重点的に取り組むべき項目を明らかにした。</p>	<p>○日本機械学会委員会において実施中の「配管系の耐震安全性評価に対する弾塑性評価導入の検討」に参加。安全研究センターと連携してベンチマーク解析を実施し、配管系の弾塑性評価手法の標準化検討のために必要となる配管系の弾塑性解析結果データを提供。</p> <p>○HTTR からの要請に基づき、バックフィット解析のための HTTR 建屋および圧力容器等の 3 次元モデルデータを提供。</p>	<p>査読付論文: 14(年度末時点 15 件予定) (Nuclear Engineering Design (IF0.95):1 件等)</p> <p>○国際会議発表: 1</p> <p>○外部資金: 4 件(34 百万) (文科省 HPCI プロジェクト、分野 4 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」等)</p>



表 4. 1 平成 27 年度研究開発実績及び成果の意義等 (3 / 4)

	中長期計画	H27 年度計画	H27 の実績・成果	成果の科学的意義	機構内外のニーズへの適合・貢献	参考指標、優れた成果等
4		その他	<p><b>【空間線量率データ提供に係る連携】</b>                      ○昨年度 3 月より通行が可能となった避難指示区域内の常磐道および国道 6 号に関し、利用客の安心のため、沿線の空間線量率測定結果を公開して欲しいという依頼が NEXCO 東日本および JR 東日本からあり、福島県および福島研究開発部門と協力して高速道路巡回車および路線バスに車載型空間線量率測定器を搭載し、計測した結果を Web および路線バス車内に設置した空間線量率表示システムにて公開した。                      ○NHK および日本科学未来館より、東京電力福島第一原発事故後 5 年を経過し、どのように放射性物質の分布が変化したかを示すデータの提供を依頼され、機構環境モニタリング DB に登録されている空間線量率測定データを活用し、福島研究開発部門と連携して経時変化傾向を示すマップデータを作成、提供。NHK の特別番組で放映されたほか、日本科学未来館にて展示された。</p> <p><b>【放射性物質の環境動態に係る連携】</b>                      ○環境中放射性セシウムの土壤中粘土鉱物への吸着挙動について、米国 Pacific Northwest National Laboratory 及び University of California, Berkeley との国際共同研究を行い、次の成果を得た。1) 各種粘土鉱物基盤表面におけるセシウム吸着エネルギーを評価し、粘土鉱物ごとの吸着特性を明らかにした。2) セシウムが吸着しやすいとされている粘土鉱物のエッジ構造の化学的結合様態を明らかにした。3) 粘土鉱物の大規模モデルを構築し、エッジ表面がセシウムを選択的に吸着することを明らかにした。4) 放射線による粘土鉱物構造変異の可能性を評価し、セシウムが</p>	<p>○避難指示区域内の空間線量率分布に関する最新の情報を定常的に収集、公開した例は、他にない。また、路線バスや高速道路巡回車を活用することで測定コストを低減し、長期にわたる運用を可能とした。</p> <p>○これまで広域の空間線量率分布情報は、航空機サーベイの結果が利用されていたが、航空機サーベイの結果は地上測定結果と比較して高めの値となることが分かったことから、サーベイメータを用いた地上測定結果をベースにマップを作成。山地等、地上測定が困難な地域に関しては、航空機サーベイ結果と地上測定結果の相関に基づき内挿を行うことで、より実測値に近い線量率マップの作製に成功した。</p> <p>○除染による除去土壤の減容化技術の開発や安定な長期貯蔵に向け、放射性セシウムが、どのような形態にて土壤中粘土鉱物に吸着しているのかを明らかにすることが求められている。これまで、セシウムの吸着現象は、主に実験によって調べられてきたが、原子レベルの構造まで踏み込んだ実験的研究は殆どない。本研究により、粘土鉱物によるセシウム吸着様態には原子レベルの粘土鉱物の構造が関係していることが明らかになり、脱着のためのターゲットが明確になる等、減容化技術開発に向けて有用な</p>	<p>○避難指示区域内の基幹道の通行再開に際し、これまで培ってきたデータ処理技術を活用して迅速に対応、1 回の通行で利用者が受ける被ばく線量 0.0002 ~ 0.0005mSv 程度であることを実測で示し、利用客の安心に貢献した。</p> <p>○これまで 5 年間にわたり 4 億超の環境モニタリングデータを集約してきた実績を活かし、マスコミや展示施設等、多くの人に情報を提供する機関からの要求に的確に応え、事故後からの放射線量の減衰状況を示す情報を広く一般に提供した。</p> <p>○除染に起因する中間貯蔵施設及び最終処分場の様々な課題を解決すべく、量子ビーム部門、米国 Pacific Northwest National Laboratory、米国 Lawrence Berkeley National Laboratory と連携し、除去土壤の効果的な減容化技術開発を主な目標として、セシウムの吸着様態に対し、科学的知見を基礎から積み重ねることを続けている。得られた左記の知見は、減容化技術開発のみならず、中間貯蔵施設及び最終処分場における除去土壤の長期貯蔵の安全性担保の解析にも資する。</p>	<p>○招待講演: 1 件                      (IAEA 9th International Expert Meeting on Assessment and Prognosis in Response to a Nuclear or Radiological Emergency)                      ○外部資金: 2 件 (22 百万)                      (福島県「広域線量分布測定用装置 (KURAMA-II) データ解析・補正委託業務」、原子力規制庁「東京電力株式会社福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の分布データの集約事業」)                      ○TV 放映                      NHK「被爆(ひばく)の森～原発事故 5 年目の記録～」</p>

表 4. 1 平成 27 年度研究開発実績及び成果の意義等 (4 / 4)

	中長期計画	H27 年度計画	H27 の実績・成果	成果の科学的意義	機構内外のニーズへの適合・貢献	参考指標、優れた成果等
4		その他	<p>高濃度に局在する場合は構造変異が起こる可能性があることを明らかにした。</p> <p>○放射性セシウムで汚染された地域の空間線量計算ツールを、放射線輸送モンテカルロコードを基に開発した。開発済みツールを用いて、福島における実測値と比較し、その妥当性を確認した他、農地と公園の除染効果評価に適用し、その効果を評価した他、放射性セシウム動態解析コードと連携することで、福島における再汚染評価等を実施し、河川敷等での線量率増加の観測結果の再現等に成功した。</p> <p>【原子炉材料の脆化に係る連携】</p> <p>○ casting stainless steel のフェライト相部分は Fe-Cr 合金であり、熱時効(長期間高温状態にすること)によって脆化するが、その原因は Fe と Cr の相分離によるものであることが知られていた。本研究では、その熱時効を粒子モンテカルロ法で模擬した後、分子動力学法によってせん断変形シミュレーションを行うことにより、この現象の原子論的理解を目指した。その結果、実験で知られていた硬さと相分離指標との線形関係を再現することに成功しただけでなく、線形関係からのずれが低温にて発生するという新知見も得た。</p>	<p>基礎的知見が得られた。また、放射線による粘土鉱物構造の変異については、これまで全く考慮されておらず、除去土壌の長期貯蔵の安全評価等において考慮すべき知見が得られた可能性がある。</p> <p>○開発したツールを用いることで、福島における空間線量率減少の主たる要因が放射線の物理減衰に加えてウェザリングによる土壌流亡効果によるものであることを明らかにした。また、種々の除染方法における効率の最大値を評価し、事故後、時間が経つにつれウェザリング効果の寄与が大きくなる程、除染効果が減少することを計算で示した。この結果は、長期間放置された地域ほど、除染効果は減少することを意味しており、今後の未除染地域の除染に向け、事前の予測に必要な基礎的知見と考えられる。</p> <p>○Fe-Cr 二元合金の熱時効による脆化は昔から「475°C脆性」と呼ばれ、相分離(スピノーダル分解)によるものであることが知られていたが、定性的な理解にとどまっていた。本研究の成果の意義は、この脆化を転位と相分離構造との相互作用に基づく原子論的シミュレーションによって定量的な解析へと発展させたことであり、メカニズムの検証のみならず、実験が実施されていない条件下においても知見が得られた点にある。</p>	<p>○開発した空間線量率計算ツールは、福島における空間線量率変化の予測や観測結果の解釈等に役立つ。また、今後予定されている帰還困難区域等での除染計画策定にも有用な知見となり得る。更に土壌流亡に起因する空間線量率変化の解析は、将来のモニタリングや除染活動の計画にも有用であり、住民の被ばく低減に向けて必要な知見を提供すべく、福島研究開発部門と協力連携を強化する。</p> <p>○原子力規制庁は条件付きで現行軽水炉の 60 年までの運転延長を認めており、各電力会社はその申請をするものと考えられる。圧力容器クラディング用の casting stainless steel は経年変化によって脆化するが、今回の成果により、それを予測する計算式の構築に向けて必要とされていた脆化メカニズムの解明に成功したことで、今後は様々な条件下で本分子動力学シミュレーションを系統的に実施し、連携先の安全研究センター及び東北大の実験と照合することで、最終的な予測式構築に向けた研究を進めることができる。</p>	

【注】評価軸

- 基礎基盤研究及び先端原子力科学研究の成果・取組の科学的意義は十分に大きなものであるか(独創性・革新性の高い科学的意義を有する研究成果の創出、研究者の流動化・国際化に係る研究環境整備の取組など)
- 基礎基盤研究の成果や取組は機構内外のニーズに適合し、また、それらの課題解決に貢献するものであるか(国のプロジェクトや機構内・学会・産業界からのニーズに貢献する成果の創出や成果活用促進取組など)

表 4. 2 平成 27 年度評価意見

評価項目	評価に関する意見・コメント				
	計画進捗度	成果の科学的意義	機構内外のニーズへの適合・貢献	優れた成果等	その他当該研究に関するご意見等
<p>【年度計画】</p> <p>シビアアクシデント時の炉内複雑現象解析に向け、高温・高圧下における物性変化モデル開発のための基礎データの拡充を進める。</p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>平成 27 年度計画を達成し、行列計算の高速化やシミュレーション大規模化において優れた成果を創出するなど計算科学分野の技術基盤の確立に向けて着実に進捗している。</li> <li>それらについて機構内連携等を通して原子力分野の諸課題への適用に取り組んでいる。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>物質科学として興味深い成果が得られている。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>得意とする専門性を生かして原子力工学におけるニーズをよくとらえた研究をしている。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>二酸化トリウムの第一原理 MD 計算により酸素の超イオン伝導をシミュレーションで確認。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>マルチスケールシミュレーションにより、シビアアクシデント時の炉心溶融等の解析を目指しているが、ミクロスケールの計算結果がマクロスケールの計算に及ぼす効果やその信頼性について未だ見通しが立っていない点も多く、マルチスケールシミュレーションの必要性が明確ではない。</li> <li>むしろ、システム計算科学センターが実績を有するミクロスケールシミュレーション、第一原理計算の分野で研究すべき課題・ニーズが残っているのではないか。たとえば、1F のデブリの物性予測などは重要なニーズであり、計算科学の観点から貢献できる可能性も大きいのではないか。</li> <li>(1つの課題への一気通貫の)マルチスケールシミュレーションにこだわるのではなく、第一原理計算、分子動力学計算、インフォマティクス等の多様な方法を組み合わせて機構内外のニーズに貢献していく方が成果の最大化につながるのではないか。</li> <li>計算機シミュレーションは重要な役割を果たすはずだと思うが、限界があるので、インフォマティクス手法、実験データの同化を検討してはどうか。材料開発だけでなく、破壊や劣化の研究にも利用できるのではないか。</li> </ul>
<p>エクサスケールの流体解析に向けた効率的な反復行列解法を試作し、評価する。</p>		<ul style="list-style-type: none"> <li>大規模シミュレーションの実現によって複雑流体の科学に貢献。</li> </ul>		<ul style="list-style-type: none"> <li>行列計算の高速化。</li> <li>核融合プラズマ乱流シミュレーションにおいて興味深い知見を創出している。</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>ハード開発はできないにしても、どのようなハードが望ましいかということは検討して発信してはどうか。</li> </ul>
<p>耐震評価を高精度化する上で重要となるモデル化因子を抽出する。</p>					<ul style="list-style-type: none"> <li>耐震解析と可視化の高い技術を生かして、ストレステストや活断層などの課題にも意欲的にチャレンジして欲しい。</li> </ul>
<p>その他(機構内他部署との連携)</p>		<ul style="list-style-type: none"> <li>福島研究開発部門との連携では地域住民等のニーズに貢献する成果も創出している。</li> </ul>			<ul style="list-style-type: none"> <li>セシウムの物理化学計算は福島事故からの修復に有意義。</li> </ul>

**付録**  
**平成 27 年度計算科学技術研究実績**



This is a blank page.

## 平成 27 年度 計算科学技術研究実績

## 1. 研究論文、査読付き会議論文等

室	研究論文	査読付き会議論文
システム計算科学センター	0	4
高度計算機技術開発室	7	13
シミュレーション技術開発室	13	5
合計	20	22

(平成 28 年 3 月 31 日現在)

## 【システム計算科学センター】

## &lt;査読付き会議論文&gt;

- Machida Masahiko, Nakamura Hiroki, Srinivasan S. G., Van Duin A. C. T.,  
“Comparative molecular simulation studies of oxidation reactions and hydrogen release for zirconium metals and silicon carbide under severe accident conditions”,  
Proceedings of 23rd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-23)  
(DVD-ROM), 4 pages (2015)
- 中島 憲宏, 河村 拓馬, 宮村 浩子, 川上 義明,  
「設計案の分析過程におけるデータ分析」  
第 43 回可視化情報シンポジウム講演論文集、Vol. 35, Suppl. No.1, pp.233-238 (2015)
- Nakajima Norihiro, Nishida Akemi, Kawakami Yoshiaki, Suzuki Yoshio, Matsukawa Keisuke, Oshima Masami, Izuchi Hisao,  
“Time domain response analysis for assembly by integrating components”,  
Transactions SMiRT-23, 10 pages (2015)
- Nakajima Norihiro, Nishida Akemi, Kawakami Yoshiaki, Suzuki Yoshio, Sawa Kazuhiro, Iigaki Kazuhiko,  
“Numerical modeling assistance system in finite element analysis for the structure of an assembly”,  
Proceedings of 23rd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-23)  
(DVD-ROM), 5 pages (2015)

## 【高度計算機技術開発室】

## &lt;研究論文&gt;

- 河村 拓馬, 井戸村 泰宏, 宮村 浩子, 今村 俊幸, 武宮 博,  
「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」  
システム制御情報学会論文誌、Vol.28、No.5、pp.221-227 (2015)
- Nishida Akemi, Igarashi Sayaka, Sakamoto Shigehiro, Uchiyama Yasuo, Yamamoto Yu, Muramatsu Ken, Takada Tsuyoshi,  
“Hazard-consistent ground motions generated with a stochastic fault-rupture model”,  
Nuclear Engineering and Design, Vol. 295, pp.875-886 (2015)

- Miki Kazuhiro, Idomura Yasuhiro,  
 “Finite-orbit-width effects on energetic-particle-induced geodesic acoustic mode” ,  
 Plasma and Fusion Research (Internet), Vol. 10, pp.3403068\_1-3403068\_4 (2015)
- Kushida Noriyuki,  
 “Condition Number Estimation of Preconditioned Matrices” ,  
 PLoS ONE, Vol. 10, No. 3, pp.e0122331\_1 - e0122331\_16 (2015) (出向中職員の論文)
- Maeyama Shinya, Watanabe Tomohiko, Idomura Yasuhiro, Nakata Motoki, Nunami Masanori, Ishizawa Akihiro,  
 “Improved strong scaling of a spectral/finite difference gyrokinetic code for multi-scale plasma turbulence” ,  
 Parallel Computing, Vol. 49, pp.1-12 (2015)
- Maeyama Shinya, Idomura Yasuhiro, Watanabe Tomohiko, Nakata Motoki, Yagi Masatoshi, Miyato Naoaki, Ishizawa Akihiro, Nunami Masanori,  
 “Cross-Scale Interactions between Electron and Ion Scale Turbulence in a Tokamak Plasma” ,  
 Physical Review Letters, Vol. 114, No. 5, pp.255002\_1-255002\_5 (2015)
- Ishizawa Akihiro, Maeyama Shinya, Watanabe Tomohiko, Sugama Hideo, Nakajima Noriyoshi,  
 “Electromagnetic gyrokinetic simulation of turbulence in torus plasmas” ,  
 Journal of Plasma Physics, Vol. 81, No. 02, p.435810203 (2015)

< 査読付き会議論文 >

- Idomura, Yasuhiro,  
 “Saturation mechanism of decaying ion temperature gradient driven turbulence with kinetic electrons” ,  
 Plasma and Fusion Research (Internet), Vol.11, pp.2403006\_1-2403006\_5 (2016)
- Kawamura Takuma, Idomura Yasuhiro, Miyamura Hiroko, Takemiya Hiroshi, Sakamoto Naohisa, Koyamada Koji,  
 “Remote visualization system based on particle based volume rendering” ,  
 Visualization and Data Analysis 2015 (Proceedings of SPIE Vol.9397) (Internet), pp.93970S\_1-93970S\_8 (2015)
- 西田 明美, 五十嵐 さやか, 坂本 成弘, 村松 健, 高田 毅士,  
 「原子力施設の地震リスク評価手法の高度化のための原子力施設建屋・機器の地震応答解析」  
 第8回構造物の安全性・信頼性に関する国内シンポジウム(JCOSSAR 2015)講演論文集 (CD-ROM), pp.108-113 (2015)
- 五十嵐 さやか, 坂本 成弘, 西田 明美, 村松 健, 高田 毅士,  
 「ハザード適合地震波による建物の機能損傷の試算」  
 構造物の安全性および信頼性 Vol.8 (CD-ROM), pp.535-541 (2015)

- Takada Tsuyoshi, Itoi Tatsuya, Nishida Akemi, Furuya Osamu, Muramatsu Ken,  
 “Reliability enhancement of seismic risk assessment of NPP as risk management fundamentals, 2; Quantifying epistemic uncertainty in fragility assessment using expert opinions” ,  
 Transactions of 23rd International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-23) (CD-ROM), 10 Pages (2015)
- Nishida Akemi, Choi B., Itoi Tatsuya, Takada Tsuyoshi, Furuya Osamu, Muramatsu Ken,  
 “Reliability enhancement of seismic risk assessment of NPP as risk management fundamentals, 3; Sensitivity analysis for the quantification of epistemic uncertainty on fragility assessment” ,  
 Transactions of 23rd International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-23) (USB Flash Drive), 10 pages (2015)
- Igarashi Sayaka, Sakamoto Shigehiro, Uchiyama Yasuo, Yamamoto Yu, Nishida Akemi, Muramatsu Ken, Takada Tsuyoshi,  
 “Seismic damage probability by ground motions consistent with seismic hazard” ,  
 Transactions of 23rd International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-23) (USB Flash Drive), 10 pages (2015)
- Muta Hitoshi, Muramatsu Ken, Furuya Osamu, Uchiyama Tomoaki, Nishida Akemi, Takada Tsuyoshi,  
 “Reliability enhancement of seismic risk assessment of NPP as risk management fundamentals, 1; Uncertainty analysis with the SECOM2 code” ,  
 Transactions of 23rd International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-23) (USB Flash Drive), 10 pages (2015)
- Choi B., Nishida Akemi, Itoi Tatsuya, Takada Tsuyoshi,  
 “Load Combination of Aftershocks and Tsunami for Tsunami-resistant Design” ,  
 Proceedings of 12th International Conference on Applications of Statistics and Probability in Civil Engineering, pp.1-8 (2015)
- Nishida Akemi, Iigaki Kazuhiko, Sawa Kazuhiro, Li Y.,  
 “Influence of differences between seismic safety evaluation methods for equipment and piping of a nuclear facility” ,  
 Proceedings of ASME 2015 Pressure Vessels & Piping Conference, pp.1-7 (2015)
- Nishida Akemi, Nakajima Norihiro, Kawakami Yoshiaki, Iigaki Kazuhiko, Sawa Kazuhiro,  
 “Seismic response simulation of High-Temperature Engineering Test Reactor building against 2011 Tohoku earthquake” ,  
 Proceedings of 23rd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-23) (DVD-ROM), 7pages (2015)
- Nishida Akemi, Muramatsu Ken, Takada Tsuyoshi,  
 “Seismic response analysis of reactor building and equipment with hazard consistent ground motions using a 3D-FE model” ,  
 Proceedings of Joint International Conference on Mathematics and Computation,

Supercomputing in Nuclear Applications and the Monte Carlo Method (M&C + SNA + MC 2015) (CD-ROM), pp. 1-11 (2015)

- 河村 拓馬, 井戸村 泰宏, 宮村 浩子, 武宮 博,  
「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」  
第 58 回システム制御情報学会研究発表講演会講演論文集 (CD-ROM), Vol. 28, No. 5,  
pp. 221-227 (2015)

【シミュレーション技術開発室】

<研究論文>

- Somekawa Hidetoshi, Yamaguchi Masatake, Osawa Yoshiaki, Singh A., Itakura Mitsuhiro, Tsuru Tomohito, Mukai Toshiji,  
“Material design for magnesium alloys with high deformability” ,  
Philosophical Magazine, Vol. 95, No. 8, pp.869-885 (2015)
- Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo, Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito,  
“Atomistic study on the cross-slip process of a screw a dislocation in magnesium” ,  
Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, Vol. 23, No. 6,  
pp.065002\_1-065002\_19 (2015)
- Hase Takayuki, Otagaki Tatsuya, Yamaguchi Masatake, Ikeo Naoko, Mukai Toshiji,  
“Effect of aluminum or zinc solute addition on enhancing impact fracture toughness in Mg-Ca alloys” , Acta Materialia, Vol. 104, pp.283-294 (2016)
- Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo, Yamaguchi Masatake, Okita Taira,  
“The effect of hydrogen atoms on the screw dislocation mobility in bcc iron: A first-principles study” , Acta Materialia, Vol. 61, No. 18, pp.6857-6867 (2013)
- Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Machida Masahiko,  
“Inverse coherence effects in nuclear magnetic relaxation rates as a sign of topological superconductivity” , Physical Review B, Vol. 92, No. 18,  
pp.180502\_1-180502\_5 (2015)
- Yamaguchi Masatake, Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiro,  
“Multiscale thermodynamic Analysis on hydrogen-induced intergranular cracking in an alloy steel with segregated solutes” ,  
Corrosion Reviews, Vol. 33, No. 6, pp.547-557 (2015)
- Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake,  
“Simulation of He embrittlement at grain boundaries of bcc transition metals” ,  
Journal of Nuclear Materials, Vol. 465, pp.695-701 (2015)
- Nagai Yuki, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko, Kuroki Kazuhiko,  
“First-principle study of antimony doping effects on the iron-based superconductor  $\text{CaF}(\text{Sb}_x\text{As}_{1-x})_2$ ”  
Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 84, No.9, pp.093702\_1 - 093702\_4 (2015)
- Shitade Atsuo, Nagai Yuki,  
“Orbital angular momentum in a nonchiral topological superconductor” ,

- Physical Review B, Vol. 92, No. 2, pp.024502\_1-024502\_7 (2015)
- 山口 正剛,  
「鉄鋼の粒界破壊におけるマルチスケール熱力学解析」  
まてりあ、Vol. 54, No. 3, pp.110-117 (2015)
  - Suzudo Tomoaki, Nagai Yasuyoshi, Schwen D., Caro A.,  
“Hardening in thermally-aged Fe-Cr binary alloys; Statistical parameters of atomistic configuration” ,  
Acta Materialia, Vol. 89, pp.116-122 (2015)
  - Malins A., Machida Masahiko, Saito Kimiaki,  
“Comment on “Update of 40K and 226Ra and 232Th series  $\gamma$ -to-dose conversion factors for soil” ” ,  
Journal of Environmental Radioactivity, Vol. 144, pp.179-180 (2015)
  - Nakamura Hiroki, Machida Masahiko, Kato Masato,  
“First-principles calculation of phonon and Schottky heat capacities of plutonium dioxide” ,  
Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 84, No. 5, pp.053602\_1-053602\_5 (2015)

< 査読付き会議論文 >

- Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,  
“Numerical calculations for heat capacity of actinide dioxides” ,  
Proceedings of 23rd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-23)  
(DVD-ROM), 4 pages (2015)
- Ota Yukihiro, Nagai Yuki, Machida Masahiko,  
“Theory of low-energy behaviors in topological s-wave pairing superconductors” ,  
Physica C, Vol. 518, pp.5-9 (2015)
- Iwasawa Yuzuru, Abe Yutaka, Kaneko Akiko, Kanagawa Tetsuya, Saito Shimpei, Matsuo Eiji, Ebihara Kenichi, Sakaba Hiroshi, Koyama Kazuya, Nariai Hideki,  
“Numerical study on influence of Ohnesorge number and Reynolds number on the jet breakup behavior using the lattice Boltzmann method” ,  
Proceedings of 23rd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-23)  
(CD-ROM) pp.1-7 (2015)
- Malins A., Okumura Masahiko, Machida Masahiko, Saito Kimiaki,  
“Topographic effects on ambient dose equivalent rates from radiocesium fallout” ,  
Proceedings of Joint International Conference on Mathematics and Computation,  
Supercomputing in Nuclear Applications and the Monte Carlo Method (M&C+SNA+MC 2015),  
pp.1-12 (2015)
- Yamada Susumu, Kitamura Akihiro, Kurikami Hiroshi, Machida Masahiko,  
“High performance simulation for sediment transport on rivers on Fukushima area;  
Parallelization of 2D river simulation code Nays2D” ,  
Proceedings of Joint International Conference on Mathematics and Computation,

Supercomputing in Nuclear Applications and the Monte Carlo Method (M&C + SNA + MC 2015), pp.1-9 (2015)

## 2. 国際会議、国内会議での発表等

### 【システム計算科学センター】

<査読無し論文>

- 中島 憲宏, 青木 恵子,  
「客員人工物工学研究部門」  
東京大学人工物工学研究センター2014年度研究年報、pp. 41-43 (2015)
- 中島 憲宏, 鈴木 喜雄, 宮村 浩子, 西田 明美, 川上 義明, 郭 智宏, 富山 栄治,  
「京」利用による次世代耐震シミュレーションの例証」  
計算工学、Vol. 20, No. 4, pp. 3338-3340 (2015)

<口頭発表>

- 中島 憲宏, 西田 明美, 飯垣 和彦, 沢 和弘,  
「組立構造解析技術による機器解析結果の分析」  
日本原子力学会 2016 年春の年会、(仙台、日本、2016 年 3 月 26 日～28 日)
- Kaburaki Hideo, Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake,  
“Atomistic study on the generation and gliding properties of pyramidal dislocations in magnesium” ,  
American Physical Society 2016 March Meeting, (Baltimore, U. S. A., March 14-18, 2016)
- Nakajima Norihiro,  
“Visualization and analysis for a complex machinery system” ,  
NII Shonan Meeting on Big Data Visual Analytics, (Hayama, Japan, November 8-11, 2015)
- Kaburaki Hideo, Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito,  
“A Molecular dynamics study on the generation and gliding of a non-basal dislocation and its interaction with a twin boundary in magnesium” ,  
Materials Research Society 2015 Fall Meeting, (Boston, U. S. A., November 29-December 4, 2015)
- 中島 憲宏, 西田 明美, 川上 義明, 鈴木 喜雄,  
「構造解析解の確かさ推定のための数値実験」  
日本原子力学会 2015 年秋の大会、(静岡、日本、2015 年 9 月 9 日～11 日)
- 町田 昌彦, 山田 進, 渡辺 将久,  
「福島第一原子力発電所港湾内海水環境解析: (1) 港湾内モニタリングデータ統計解析」  
日本原子力学会 2015 年秋の大会、(静岡、日本、2015 年 9 月 9 日～11 日)

### 【情報システム管理室】

<査読無し論文>

- 北村 竜明, 坂本 健作, 高瀬 和之,

「スパーサによる流路断面変化が流体挙動に及ぼす影響に関する数値シミュレーション」  
可視化情報学会誌、Vol. 35, No. Suppl. 2, pp. 59-60 (2015)

【高度計算機技術開発室】

<口頭発表>

- ・ 西田 明美, 飯垣 和彦, 沢 和弘,  
「原子力施設機器の耐震評価手法による結果影響調査」  
日本原子力学会 2016 年春の年会、(仙台、日本、2016 年 3 月 26 日～28 日)
- ・ 崔 炳賢, 西田 明美, 中島 憲宏,  
「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感度解析」  
日本原子力学会 2016 年春の年会、(仙台、日本、2016 年 3 月 26 日～28 日)
- ・ 宮村 浩子, 高橋 成雄, 井戸村 泰宏, 武宮 博,  
「環境放射線データの多変量解析のための詳細度制御」  
日本原子力学会 2016 年春の年会、(仙台、日本、2016 年 3 月 26 日～28 日)
- ・ 松岡 清吉, 井戸村 泰宏, 佐竹 真介,  
「低衝突周波数領域における新古典粘性トロイダル粘性についての大域的運動論シミュレーション研究」  
日本物理学会第 71 回年次大会、(仙台、日本、2016 年 3 月 19 日～22 日)
- ・ 佐竹 真介, 洲鎌 英雄, 菅野 龍太郎, 松岡 清吉, 井戸村 泰宏, Huang Botsz,  
「粒子コードを用いた局所近似ドリフト運動論モデルによる新古典トロイダル粘性計算法」  
日本物理学会第 71 回年次大会、(仙台、日本、2016 年 3 月 19 日～22 日)
- ・ Huang Botsz, 佐竹 真介, 菅野 龍太郎, 松岡 清吉,  
「複数の近似モデルに基づくドリフト運動論方程式を用いたヘリカルプラズマのブートストラップ電流計算の比較」  
日本物理学会第 71 回年次大会、(仙台、日本、2016 年 3 月 19 日～22 日)
- ・ 井戸村 泰宏,  
「イオン温度勾配駆動乱流の運動量輸送における運動論的電子の影響」  
日本物理学会第 71 回年次大会、(仙台、日本、2016 年 3 月 19 日～22 日)
- ・ 宮村 浩子, Wu, H.-Y., 高橋 成雄, 大坐畠 智, 中尾 彰宏,  
「階層最適化を用いたネットワークグラフィアウト」  
電子情報通信学会 2016 年総合大会、(福岡、日本、2016 年 3 月 15 日～18 日)
- ・ 河村 拓馬,  
「遠隔可視化ソフトウェア PBVR による大規模データの可視化」  
プラズマシミュレータシンポジウム 2015、(土岐、日本、2015 年 9 月 3 日～4 日)
- ・ 朝比 祐一, 井戸村 泰宏, 伊奈 拓也, Garbet Xavier, Grandgirard Virginie, Latu Guillaume,  
「Full-f ジャイロ運動論的シミュレーションのコード間ベンチマーク」  
第 5 回 IFERC-CSC 研究会、(東京、日本、2016 年 1 月 15 日)



- 井戸村 泰宏、  
「GT5DIS02 プロジェクトの研究成果」  
第 5 回 IFERC-CSC 研究会、(東京、日本、2016 年 1 月 15 日)
- 松岡 清吉, 井戸村 泰宏, 佐竹 真介,  
「新古典トロイダル粘性についての大域的運動論シミュレーション研究」  
第 5 回 IFERC-CSC 研究会、(東京、日本、2016 年 1 月 15 日)
- 松岡 清吉, 井戸村 泰宏, 佐竹 真介,  
「摂動磁場印加トカマクにおける新古典トロイダル粘性の大域的運動論シミュレーション」  
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・輸送の体系的な研究、(土岐、日本、2015 年 12 月 7 日～9 日)
- Miyamura Hiroko,  
“Big data visualization framework on HPC environment” ,  
NII Shonan Meeting, Big Data Visual Analytics, (Zushi, Japan, November 8-11, 2015)
- 井戸村 泰宏,  
「イオン温度勾配駆動捕捉電子モード乱流における臨界温度勾配と径電場形成」  
第 32 回プラズマ・核融合学会年会、(名古屋、日本、2015 年 11 月 24 日～27 日)
- 河合 智賀, 井戸村 泰宏, 前山 伸也, 小川 雄一,  
「電子乱流スペクトルのジャイロ運動論的シミュレーション」  
第 32 回プラズマ・核融合学会年会、(名古屋、日本、2015 年 11 月 24 日～27 日)
- 朝比 祐一, 井戸村 泰宏, 前山 伸也, 仲田 資季, 石澤 明宏, 渡邊 智彦,  
「電子熱輸送および粒子輸送における非捕捉電子の影響」  
第 32 回プラズマ・核融合学会年会、(名古屋、日本、2015 年 11 月 24 日～27 日)
- Asahi Yuichi, Latu G., Ina Takuya, Idomura Yasuhiro, Grandgirard V., Garbet X.,  
“Optimization of stencil-based fusion kernels on Tera-flops many-core architectures” ,  
The international Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC15), (Austin, US, November 15-20, 2015)
- 崔 炳賢, 西田 明美, 中島 憲宏,  
「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」  
日本地震工学会・大会-2015、(東京、日本、2015 年 11 月 19 日～20 日)
- Idomura Yasuhiro,  
“Testing momentum transport theories on full-f gyrokinetic simulations” ,  
15th Meeting of the ITPA Transport and Confinement topical Group, (Garching, Germany, October 22-23, 2015)
- Idomura Yasuhiro,  
“Full-f gyrokinetic simulation including kinetic electrons” ,  
the 15th International workshop on H-Mode and transport barrier physics, (Garching, Germany, October 19-21, 2015)

- ・ 朝比 祐一, 井戸村 泰宏, 伊奈 拓也,  
「GPUにおける核融合プラズマ乱流コードの最適化」  
GTC Japan 2015、(東京、日本、2015年9月18日)
- ・ 河合 智賀, 井戸村 泰宏, 前山 伸也, 小川 雄一,  
「電子乱流スペクトルのジャイロ運動論的シミュレーション」  
日本物理学会 2015年秋季大会(物性)、(吹田、日本、2015年9月16日～19日)
- ・ 井戸村 泰宏,  
「Full-f ジャイロ運動論シミュレーションにおける運動論的電子モデルの開発」  
日本物理学会 2015年秋季大会(物性)、(吹田、日本、2015年9月16日～19日)
- ・ 前山 伸也, 渡邊 智彦, 井戸村 泰宏, 仲田 資季, 石澤 明宏, 沼波 政倫,  
「ジャイロ運動論的マルチスケール相互作用における三波相互作用」  
日本物理学会 2015年秋季大会(物性)、(吹田、日本、2015年9月16日～19日)
- ・ 西田 明美, 高田 毅士, 村松 健,  
「地震リスク評価の信頼度向上のための建屋の感度解析」  
日本原子力学会 2015年秋の大会、(静岡、日本、2015年9月9日～11日)
- ・ 村松 健, 牟田 仁, 古屋 治, 藤本 滋, 高田 毅士, 糸井 達哉, 西田 明美, 内山 智曜,  
「リスクマネジメント基盤技術としての地震リスク評価の信頼度向上に関する研究(10)  
新たな数学的枠組みの検討」  
日本原子力学会 2015年秋の大会、(静岡、日本、2015年9月9日～11日)
- ・ 高田 毅士, 糸井 達哉, 村松 健, 西田 明美,  
「リスクマネジメント基盤技術としての地震リスク評価の信頼度向上に関する研究(12)  
フラジリティ評価における認識論的不確実性の検討」  
日本原子力学会 2015年秋の大会、(静岡、日本、2015年9月9日～11日)
- ・ 古屋 治, 藤本 滋, 村松 健, 牟田 仁, 西田 明美,  
「リスクマネジメント基盤技術としての地震リスク評価の信頼度向上に関する研究-(13)  
機器/配管系の検討」  
日本原子力学会 2015年秋の大会、(静岡、日本、2015年9月9日～11日)
- ・ 宮村 浩子, 川上 義明, 鈴木 喜雄, 河村 拓馬, 中島 憲宏,  
「2次元情報可視化による多変量データ解析」  
日本原子力学会 2015年秋の大会、(静岡、日本、2015年9月9日～11日)
- ・ 崔 炳賢, 糸井 達哉, 高田 毅士,  
「南海トラフ地震を対象とした余震と津波の荷重組み合わせ係数の提案」  
2015年度日本建築学会大会、(平塚、日本、2015年9月4日～6日)
- ・ 五十嵐 さやか, 坂本 成弘, 西田 明美, 村松 健, 高田 毅士,  
「震源特性の不確定性が地震動強さや建物応答に及ぼす影響」  
2015年度日本建築学会大会、(平塚、日本、2015年9月4日～6日)
- ・ 西田 明美, 坂本 成弘, 五十嵐 さやか, 村松 健, 高田 毅士,  
「ハザード適合地震波による建物機能損傷の試算その1地震波および建物応答の周期間相  
関特性」  
2015年度日本建築学会大会、(平塚、日本、2015年9月4日～6日)

- 坂本 成弘, 五十嵐 さやか, 西田 明美, 村松 健, 高田 毅士,  
「ハザード適合地震波による建物機能損傷の試算その2 関連の違いが機能損傷に及ぼす影響」  
2015 年度日本建築学会大会、(平塚、日本、2015 年 9 月 4 日～6 日)
- Asahi Yuichi, Latu G., Ina Takuya, Idomura Yasuhiro, Virginie G., Garbet X.,  
“Optimization of fusion plasma codes” ,  
US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on Innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing, (Nagoya, Japan, August 20-21, 2015)
- Idomura Yasuhiro,  
“Full-f gyrokinetic simulations at the Exa-scale” ,  
US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on Innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing, (Nagoya, Japan, August 20-21, 2015)
- Kawamura Takuma, Idomura Yasuhiro, Miyamura Hiroko, Takemiya Hiroshi,  
“Remote visualization of massive data using particle-based volume rendering” ,  
US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on Innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing, (Nagoya, Japan, August 20-21, 2015)
- Idomura Yasuhiro, Maeyama Shinya, Nakata Motoki, Nunami Masanori, Ishizawa Akihiro, Watanabe Tomohiko,  
“Optimization of extreme scale fusion plasma turbulence code for improved strong scaling toward million cores” ,  
the ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015, (Seoul, Korea, July 26-31, 2015)
- Asahi Yuichi, Ishizawa Akihiro, Watanabe Tomohiko, Sugama Hideo, Tsutsui Hiroaki, Iio Shunji,  
“The influence of Trapped Electron Mode driven zonal flow on Electron Temperature Gradient driven turbulence” ,  
8th Festival de Theorie, (Aix-en-Provence, France, July 6-24, 2015)
- 五十嵐 さやか, 坂本 成弘, 高田 毅士, 西田 明美, 村松 健,  
「震源特性の不確定性を含む地震波群による建築物の応答評価」  
日本建築学会関東支部構造専門研究委員会、(東京、日本、2015 年 2 月)
- 宮村 浩子, 井戸村 泰宏, 武宮 博, 櫻井 大督, Wu, H.-Y., 高橋 成雄,  
「環境放射線データの適応的可視化アプローチ」  
日本原子力学会 2014 年秋の大会、(京都、日本、2014 年 9 月 8 日～10 日)

【シミュレーション技術開発室】

<査読無し論文>

- Kawa Tomoaki, Yamaguchi Masatake, Ikeo Naoko, Mukai Toshiji,

- “Effect of solute segregation on fracture behavior of Mg alloy,  
Magnesium Technology 2015, pp.197-200 (2015)
- Nordlund K., Sand A. E., Granberg F., Zinkle S. J., Stoller R., Averback R. S., Suzudo Tomoaki, Malerba L., Banhart F., Weber W. J., Willaime F., Dudarev S., Simeone D.,  
“Primary radiation damage in materials”,  
NEA/NSC/DOC, Vol. 9, pp.1-86 (2015)

<口頭発表>

- 鈴木 知明,  
「原子力材料研究における第一原理計算・分子動力学シミュレーションと実験的エビデンス」  
第 28 回 CCSE ワークショップ、(柏、日本、2016 年 3 月 29 日)
- 町田 昌彦, 山田 進, 渡辺 将久,  
「福島第一原子力発電所港湾内海水環境評価, 1; モニタリングデータの分析と核種濃度の推移」  
日本原子力学会 2016 年春の年会、(仙台、日本、2016 年 3 月 26 日～28 日)
- 山田 進, 町田 昌彦, 渡辺 将久,  
「福島第一原子力発電所港湾内海水環境評価, 2; 3 次元シミュレーションによる港湾内流動解析」  
日本原子力学会 2016 年春の年会、(仙台、日本、2016 年 3 月 26 日～28 日)
- 板倉 充洋, 沖田 泰良,  
「ジルコニウム中水素化物の第一原理計算」  
日本原子力学会 2016 年春の年会、(仙台、日本、2016 年 3 月 26 日～28 日)
- 中村 博樹, 町田 昌彦,  
「第一原理計算による二酸化アクチニドの熱伝導率評価」  
日本原子力学会 2016 年春の年会、(仙台、日本、2016 年 3 月 26 日～28 日)
- 鈴木 知明, 長谷川 晃,  
「タンゲステン中のレニウムおよびオスミウム格子間原子の拡散 KMC シミュレーション」  
日本原子力学会 2016 年春の年会、(仙台、日本、2016 年 3 月 26 日～28 日)
- 鬼塚 貴志, 大久保 学, 鈴木 知明, 福元 謙一,  
「分子動力学シミュレーションを用いた純 Fe 中のらせん転位とボイドの相互作用の研究 (2)」  
日本金属学会 2016 年春期講演大会、(東京、日本、2016 年 3 月 23 日～25 日)
- 永井 佑紀, 星野 晋太郎, 太田 幸宏,  
「二次元トポロジカル s 波超伝導体の秩序変数の安定性」  
日本物理学会第 71 回年次大会、(仙台、日本、2016 年 3 月 19 日～22 日)
- 小林 恵太, 太田 幸宏, 奥村 雅彦, 山田 進, 町田 昌彦,  
「多軌道冷却フェルミ原子気体における  $\eta$ -paring の DMRG 解析」  
日本物理学会第 71 回年次大会、(仙台、日本、2016 年 3 月 19 日～22 日)
- 鈴木 知明, 藪内 聖皓,

- 「第一原理・分子動力学を用いた材料劣化シミュレーション」  
第5回 IFERC-CSC 研究会、(東京、日本、2016年1月15日)
- Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko, Sassi M., Rosso K.,  
“Adsorption properties of cesium to micaceous clay minerals: Molecular modeling using density functional theory calculations”,  
2015 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (PACIFICHEM 2015),  
(Honolulu, U. S. A., December 15-20, 2015)
  - Malins A., Sakuma Kazuyuki, Kurikami Hiroshi, Machida Masahiko, Kitamura Akihiro,  
“Modelling evolution of air dose rates in river basins in Fukushima Prefecture affected by sediment-sorbed radiocesium redistribution”,  
American Geophysical Union 2015 Fall Meeting (AGU 2015), (San Francisco, U. S. A.,  
December 14-18, 2015)
  - 山口 正剛, 海老原 健一, 板倉 充洋,  
「モバイル水素による鉄鋼の粒界水素脆性; 第一原理計算」  
第25回日本MRS年次大会、(横浜、日本、2015年12月8日~12月10日)
  - 永井 佑紀,  
「ポイントノードを持つトポロジカル超伝導体の磁場回転比熱測定の理論的解析」  
第23回渦糸物理国内会議、(福岡、日本、2015年12月7日~9日)
  - 志賀 基之, Ruiz-Barragan Sergio,  
「水溶液中におけるグリーンな有機合成反応の理論的研究」  
第29回分子シミュレーション討論会、(新潟、日本、2015年11月30日~12月2日)
  - 太田 幸宏, Ruiz Barragan, S., 町田 昌彦, 志賀 基之,  
「半経験的分子軌道法を利用した有機分子におけるイオン吸着サイトの全探索」  
第29回分子シミュレーション討論会、(新潟、日本、2015年11月30日~12月2日)
  - Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo, Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito,  
“Novel Cross-slip behavior of the pyramidal screw dislocations in Mg  
Materials”,  
Research Society 2015 Fall Meeting, (Boston, U. S. A., November 29-December 4, 2015)
  - 海老原 健一, 鈴木 知明, 山口 正剛,  
「第一原理計算に基づくキネティックモンテカルロによる $\alpha$ 鉄中におけるリン拡散の考察」  
東北大学金属材料研究所ワークショップ「原子力材料研究に関する実験・計算技術の新展望」、(仙台、日本、2015年11月16日~18日)
  - 鈴木 知明,  
「照射材料の計算科学技術; LAMMPSを用いたMDシミュレーション」  
東北大学金属材料研究所ワークショップ「原子力材料研究に関する実験・計算技術の新展望」、(仙台、日本、2015年11月16日~18日)
  - 鬼塚 貴志, 大久保 学, 福元 謙一, 鈴木 知明,  
「MD計算によるBCC金属中のボイドとらせん転位の動的相互作用解析」  
東北大学金属材料研究所ワークショップ「原子力材料研究に関する実験・計算技術の新展

- 望]、(仙台、日本、2015年11月16日～18日)
- 志賀 基之, Masia, M.,  
 “QM/MM Molecular Dynamics of Diffusive Open Boundary Systems”,  
 Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, (Kashiwa,  
 Japan, November 9-11, 2015)
  - Ebihara Kenichi, Kaburaki Hideo, Takai Kenichi,  
 “Size Effect on Evaluation of Detrapping Rate Constants for Hydrogen in Thermal  
 Desorption Analysis of Ferritic Steels”,  
 FEMS EUROMAT2015 European Congress and Exhibition on Advanced Materials and  
 Processes, (Warsaw, Poland, September 20-24, 2015)
  - 太田 幸宏, 永井 佑紀, 町田 昌彦,  
 「3次元ディラック分散上の超伝導に対するギンツブルグ-ランダウ方程式: $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ への  
 適用」  
 日本物理学会 2015年秋季大会、(吹田、日本、2015年9月16日～19日)
  - 永井 佑紀, 太田 幸宏, 町田 昌彦,  
 「核磁気緩和率における逆コヒーレンス効果:トポロジカル超伝導体  $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$  の理論解  
 析」  
 日本物理学会 2015年秋季大会、(吹田、日本、2015年9月16日～19日)
  - 永井 佑紀,  
 「ノードを持つトポロジカル超伝導体候補  $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$  の磁場回転比熱・熱伝導率の理論解  
 析」  
 日本物理学会 2015年秋季大会、(吹田、日本、2015年9月16日～19日)
  - 志賀 基之, Ruiz Barragan Sergio, 石村 和也,  
 「第一原理分子動力学計算の階層的並列化」  
 分子科学討論会、(東京、日本、2015年9月16日～19日)
  - 鈴木 知明, 山口 正剛,  
 「BCC 遷移金属の粒界ヘリウム偏析および脆化; 第一原理計算によるモデル化」  
 日本金属学会 2015年秋期(第157回)講演大会、(福岡、日本、2015年9月16日～18日)
  - 藪内 聖皓, 木村 章彦, 鈴木 知明,  
 「BCC 鉄中に形成したファセットボイドと転位との相互作用」  
 日本金属学会 2015年秋期(第157回)講演大会、(福岡、日本、2015年9月16日～18日)
  - 山口 正剛, 海老原 健一, 板倉 充洋,  
 「金属材料の水素脆化」  
 日本金属学会 2015年秋期(第157回)講演大会、(福岡、日本、2015年9月16日～18日)
  - 大久保 学, 鬼塚 貴志, 福元 謙一, 鈴木 知明,  
 「分子動力学シミュレーションを用いた純Fe中のらせん転位とボイドの動的相互作用」  
 日本金属学会 2015年秋期(第157回)講演大会、(福岡、日本、2015年9月16日～18日)
  - Malins A., Sakuma Kazuyuki, Kurikami Hiroshi, Machida Masahiko, Kitamura Akihiro,  
 “Sediment Redistribution and Air Dose Rate Changes in River Basins in Eastern  
 Fukushima Prefecture”

- 2015 年度日本地球化学会年会、(横浜、日本、2015 年 9 月 16 日～18 日)
- 太田 幸宏, セルジオ ルイズ バラガン, 町田 昌彦, 志賀 基之,  
「半経験論分子軌道法を利用した反応経路自動探索ツールの開発」  
化学反応経路探索のニューフロンティア 2015(SRPS2015)、(東京、日本、2015 年 9 月 15 日)
  - 山田 進, 町田 昌彦, 渡辺 将久,  
「福島第一原子力発電所港湾内海水環境解析(2)港湾内シミュレーション解析」  
日本原子力学会 2015 年秋の大会、(静岡、日本、2015 年 9 月 9 日～11 日)
  - 中村 博樹, 町田 昌彦,  
「第一原理分子動力学による二酸化アクチニドの高温挙動の解析」  
日本原子力学会 2015 年秋の大会、(静岡、日本、2015 年 9 月 9 日～11 日)
  - Malins A., 操上 広志, 中間 茂雄, 北村 哲浩, 町田 昌彦,  
「福島長期環境動態研究, 15; Tool for calculating air dose rates from arbitrary radiocesium depth profiles and spatial distributions for Fukushima Prefecture」  
日本原子力学会 2015 年秋の大会、(静岡、日本、2015 年 9 月 9 日～11 日)
  - 佐々 成正,  
「逆離散化(補間)によるポアンカレ不変量の構成」  
日本応用数理学会 2015 年度年会、(金沢、日本、2015 年 9 月 9 日～11 日)
  - 佐々 成正, 山田 進, 町田 昌彦, 椋木 大地, 今村 俊幸,  
「FFT を使った時間発展問題における累積誤差」  
日本応用数理学会 2015 年度年会、(金沢、日本、2015 年 9 月 9 日～11 日)
  - 鈴木 知明,  
「第一原理計算・分子動力学を用いた材料劣化モデリング」  
核融合炉工学・炉材料モデリング研究作業会、(京都、日本、2015 年 8 月 31 日)
  - Nagai Yuki,  
“Quasiparticle excitations in a three-dimensional nodal topological superconductor” ,  
Materials and Mechanisms of Superconductivity 2015 (M2S2015), (Geneva, Switzerland, August 23-28, 2015)
  - Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,  
“Density Functional Studies for Cesium Adsorption to Micaceous Clay Minerals: Low and High Density Situations” ,  
Goldschmidt 2015, (Prague, Czech Republic, August 16-21, 2015)
  - Suzudo Tomoaki,  
“Modeling of Fusion Materials Degradation” ,  
US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on Innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing, (Nagoya, Japan, August 20-21, 2015)
  - Sasa Narimasa,  
“Momentum conservation law in symplectic integrators for PDEs” ,



Computational and Geometric Approaches for Nonlinear Phenomena, (Tokyo, Japan, August 5-7, 2015)

- 志賀 基之,  
「分子系におけるレアイベントの概念、理論、応用計算」  
津田沼フォーラム、(千葉、日本、2015年07月)
- Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki, Sasa Narimasa, Machida Masahiko,  
“High Performance Quad-Precision Eigenvalue Solver: QPEigenK” ,  
ISC High Performance, (Frankfurt, Germany, July 12-16, 2015)
- 山田 進, 町田 昌彦, 渡辺 将久,  
「東京電力福島第一原子力発電所港湾内での放射性物質の移流拡散過程のシミュレーション」  
福島の復興に向けての放射線対策に関するこれからの課題、(福島、日本、2015年5月30日～31日)
- Nagai Yuki,  
“Quasiparticle excitations in a nodal topological superconductor: Application to superconducting topological insulator  $Cu_xBi_2Se_3$ ” ,  
VORTEX2015, (El Escorial, Spain, May 10-15, 2015)
- Yamada Susumu, Kitamura Akihiro, Kurikami Hiroshi, Machida Masahiko,  
“Radioactive sediment transport on Ogaki dam reservoir in Fukushima evacuated zone; Numerical simulation studies by 2-D river simulation code” ,  
European Geosciences Union General Assembly 2015, (Vienna, Austria, April 12-17, 2015)

#### 【情報システム利用推進室】

<口頭発表>

- 伊奈 拓也, 朝比 祐一, 井戸村 泰宏,  
「テラフロップス級メニーコアアーキテクチャにおけるステンシル計算の最適化手法の開発」  
第152回ハイパフォーマンスコンピューティング研究会、(札幌、日本、2015年12月1日～17日)

### 3. 技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

- システム計算科学センター  
「平成26年度大型計算機システム利用による研究成果報告集」  
JAEA-Review 2015-028 (2016), 222p.
- システム計算科学センター  
「第2期中期目標期間計算科学技術研究実績評価報告」  
JAEA-Evaluation 2015-015 (2016), 182p.
- システム計算科学センター、東京大学人工物工学研究センター、  
「平成25年度大規模施設の構造を計算科学手法により評価するための基盤技術に関する



共同研究開発(共同研究)」

JAEA-Review 2015-011 (2015), 72p.

#### 4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- 2015年7月8日  
“核融合プラズマ中の乱流が織り成すマルチスケール相互作用 –スーパーコンピュータ「京」で得られた新発見–”  
(7月15日日刊工業新聞、7月24日科学新聞に掲載)
- 2016年1月29日(理化学研究所よりプレス発表)  
“鉄系超伝導体のフォノンと磁性–磁気秩序に伴うフォノンエネルギー分裂の観測に初めて成功–”
- 2016年3月6日放映(2015年12月NHK取材)  
NHKスペシャル“被曝の森～原発事故5年目の記録～”(福島研究開発部門と連携して解析した空間線量率の変遷を番組内で紹介)

#### 5. 研究発表会等の開催

- 第18回原子力計算科学セミナー(2015年12月19日)  
「耐震解析技術と可視化、京とバッチモード可視化」
- 第19回原子力計算科学セミナー(2016年3月8日)  
「大規模データによる解析は何を導くのか」
- 第20回原子力計算科学セミナー(2016年3月30日)  
「地盤解析と構造解析の連携」
- 第27回人工物コロキウム/CCSE ワークショップ(2015年7月14日)  
「人工物と環境のシステム」
- 第28回CCSE ワークショップ(2016年3月29日)  
「原子力材料における計算科学研究と原子スケールモデリングによる新展開」
- シミュレーション技術開発室セミナー  
2015年8月16日:井辺 洋平(京都大学大学院理学研究科)  
「Weyl 半金属における カイラル磁気効果」  
2015年11月20日:川島 雪生(理化学研究所計算科学研究機構)  
「Tackling Nuclear Quantum Effect in Quantum Chemistry: Path  
Integral Molecular Dynamics Simulation」  
2016年1月28日:荒木 優希(神戸大学理学部)  
「FM-AFM によるモンモリロナイトの表面・界面構造の原子スケール  
その場観察」

#### 6. 受賞等

- 平成27年度日本原子力学会計算科学技術部会 部会功績賞  
中島 憲宏  
(日本原子力学会計算科学技術部会、平成28年3月)

7. 特許等の状況

(1)特許の出願及び登録

なし。

(2)成果の活用（利用許諾）による収入

件名（成果の内容）	契約先（販売者）	権利／契約種別	今年度収入額
並列分子動力学ステンシル 他 2 件	株式会社 JSOL	プログラム著作 権／利用許諾	2,527,965 円

8. 外部資金の獲得に関連する事項

室	予算額(千円) (件数)
高度計算機技術開発室	76,453 ( 9)
シミュレーション技術開発室	45,202 (12)

【高度計算機技術開発室】

- (1) 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（次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム） 27,770 千円
- (2) 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化（分担課題：核融合炉の炉心設計）（東京大学） 3,389 千円
- (3) 原子力プラントの包括的安全性向上のための地震時クリフエッジ回避技術の開発（文部科学省） 3,597 千円
- (4) 高温ガス炉の確率論的安全評価手法の開発（文部科学省） 4,015 千円
- (5) ペタスケール乱流シミュレーションによる異常輸送の同位体効果に関する研究（日本学術振興会：科研費(基盤C)） 780 千円
- (6) 建築物の耐衝撃設計における人的被害低減と構造安全性維持のためのアプローチ（日本学術振興会：科研費(基盤C)） 110 千円
- (7) 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（東京大学）（核融合研究開発部門受託に参加） 13,500 千円
- (8) 広域線量分布測定用装置（KURAMA-II）データ解析・補正委託業務（福島県） 12,462 千円
- (9) 東京電力株式会社福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の分布データの集約事業（原子力規制庁） 10,830 千円

【シミュレーション技術開発室】

- (10) 高効率 TRU 燃焼を可能とする革新的水冷却炉 RBWR の研究開発（文部科学省） 308 千円
- (11) 京都大学構造材料元素戦略研究拠点（金属材料中の水素の状態と挙動に関するシミュレーション）（京都大学） 1,300 千円
- (12) 「界面」を通じた、構造材料における未解決課題克服のための技術構築（分担課題：第一原理からの水素脆性メカニズム解明）（科学技術振興機構） 14,799 千円
- (13) 構造用六方晶金属における固溶元素の影響に関する計算科学研究（自動車メーカー） 3,240 千円
- (14) 転位バイアス因子の理論的解明（日本学術振興会：科研費(基盤C)） 408 千円
- (15) 第一原理に基づく計算科学による LPSO 構造の電子論と構造科学の構築（日本学術振興会：

- 科研費(新学術領域) 3,120 千円
- (16) マルチバンド超伝導体に対する擬ポテンシャルを用いた次元縮約有効理論の構築と応用  
(日本学術振興会:科研費(若手B)) 1,300 千円
- (17) 水素結合型強誘電体における同位元素効果の分子論的起源(日本学術振興会:科研費(挑戦的萌芽研究)) 150 千円
- (18) 異常な電子-格子相互作用のモデルフリー観測の試み(日本学術振興会:科研費(基盤C)) 125 千円
- (19) 水素分配制御によるアルミニウム合金の力学特性最適化(科学技術振興機構) 14,300 千円
- (20) 量子多体問題に対するアクセレータを用いた高速化・並列化手法の研究開発(日本学術振興会:科研費(基盤C)) 1,300 千円
- (21) イオン伝導体によるリチウム同位体分離技術に関する研究(自動車メーカー) 4,852 千円

### 9. 産学官との連携に関する事項

室	共同研究	委託研究	受託研究	研究協定
高度計算機技術開発室	6	1	7	0
シミュレーション技術開発室	6	0	3	0
両室共通	0	0	0	1
合計	12	1	10	1

#### ●共同研究

##### 【高度計算機技術開発室】

- ・ 大規模複雑流体シミュレーション技術の研究開発(東京大学)
- ・ 超並列遠隔可視化システムの機能強化のための研究開発(一般財団法人高度情報科学技術研究機構)
- ・ 次世代スーパーコンピュータ用プラズマ流体解析技術の研究(名古屋大学、自然科学研究機構核融合研究開発機構)
- ・ 微分トポロジーを用いた大規模データ解析(会津大学)
- ・ 複雑環境システムシミュレーションのための大規模連立方程式解法の高度化に関する研究(東京大学)
- ・ 原子力施設の地震リスク評価手法の高度化に関する研究(東京都市大学、東京大学、シー・エス・エー・ジャパン、大成建設)

##### 【シミュレーション技術開発室】

- ・ 構造用六方晶金属における固溶元素の影響に関する計算科学研究(自動車メーカー)
- ・ 水素分配制御によるアルミニウム合金の力学特性最適化(九州大学、富山大学)
- ・ 「界面」を通じた、構造材料における未解決課題克服のための技術構築(九州大学、北見工業大学、京都大学、大阪大学)
- ・ 超並列計算機シミュレーションによるトリチウム水の生体機能への影響に関する研究(自然科学研究機構分子科学研究所)

- ・ 大規模並列計算用ライブラリの研究開発（理化学研究所）
- ・ イオン伝導体によるリチウム同位体分離技術に関する研究（自動車メーカー）
- 委託研究
  - 【高度計算機技術開発室】
  - ・ 統計的手法を用いた環境モニタリングデータの統合に関する研究（北海道大学）
- 受託研究
  - 【高度計算機技術開発室】
  - ・ 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（次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム）（東京大学）
  - ・ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化（分担課題：核融合炉の炉心設計）（東京大学）
  - ・ 原子力プラントの包括的安全性向上のための地震時クリフエッジ回避技術の開発（文部科学省）
  - ・ 高温ガス炉の確率論的安全評価手法の開発（文部科学省）（原子力科学研究部門受託に参加）
  - ・ 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（東京大学）（核融合研究開発部門受託に参加）
  - ・ 広域線量分布測定用装置（KURAMA-II）データ解析・補正委託業務（福島県）（福島研究開発部門受託に参加）
  - ・ 東京電力株式会社福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の分布データの集約事業（原子力規制庁）（福島研究開発部門受託に参加）
  - 【シミュレーション技術開発室】
  - ・ 京都大学構造材料元素戦略研究拠点（金属材料中の水素の状態と挙動に関するシミュレーション）（京都大学）
  - ・ 「界面」を通じた、構造材料における未解決課題克服のための技術構築（科学技術振興機構）
  - ・ 水素分配制御によるアルミニウム合金の力学特性最適化（科学技術振興機構）
- 研究協定
  - ・ 「国立大学法人東京大学と独立行政法人日本原子力研究開発機構との間における連携協力の推進に係る協定書」に基づく「国立大学法人東京大学と独立行政法人日本原子力研究開発機構との計算科学研究協力に関する覚書」（東京大学）

## 10. 原子力機構内の他部門との連携に関連する事項

研究の実施にあたっては、機構としての統合効果を発揮し、研究開発を効率的・効果的に推進する観点から、以下のとおり 26 件に及ぶ機構内連携を実施した。

- (1) 放射線量等測定データの収集および管理に関する技術協力
  - 部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）
  - 概要：福島第一原子力発電所事故に伴い放出された放射性物質の測定結果を収集する技術および、収集データを登録、公開するデータベースの構築技術を確立する。
- (2) 福島県空間線量率測定データの情報発信
  - 部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）
  - 概要：福島県下を走行する路線バスを活用することで得られる、地域住民に密着した空

間線量率分布データを可視化し、迅速に公開する。

- (3) 土壌粘土鉱物への放射性セシウム吸着の解析  
 部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）、原子力科学研究部門（量子ビーム応用研究センター）  
 概要：粘土鉱物に対する吸着化学形態を量子ビームと計算科学の両面から解明する。
- (4) ゼオライトへの放射性セシウム吸着の解析  
 部署：原子力科学研究部門（先端基礎研究センター、原子力基礎工学研究センター）  
 概要：ゼオライトのセシウム吸着性状について計算科学の観点から評価する。
- (5) 河口及び沿岸でのセシウム長期輸送解析  
 部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）、原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）、バックエンド研究開発部門（東濃地科学センター）  
 概要：福島長期環境予測に資するため、河口及び沿岸での2/3次元のセシウム長期輸送解析システムを開発する。
- (6) 土壌有機物におけるセシウム吸着特性の評価  
 部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）、原子力科学研究部門（量子ビーム応用研究センター）  
 概要：有機物におけるセシウムの吸着形態や輸送特性を原子・分子レベルから評価する。
- (7) 福島第一原子力発電所港湾内放射性核種動態シミュレーション  
 部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）  
 概要：福島第一原子力発電所の港湾内の放射性核種の動態をシミュレーションにより評価する。
- (8) 損傷頻度評価  
 部署：安全研究・防災支援部門（安全研究センター）  
 概要：3次元モデルを用いる大規模耐震解析システムを活用し、建屋および機器の地震時応答解析を高精度化。
- (9) 高温工学試験炉の耐震解析に関する研究  
 部署：原子力科学研究部門（大洗研究開発センター高温工学試験研究炉部）  
 概要：大規模耐震解析システムやモデルデータを提供し、施設の耐震性評価を支援。
- (10) 施設の耐震評価支援  
 部署：建設部  
 概要：耐震強度解析および評価への協力により機構内施設建家の耐震バックフィットを支援。
- (11) 原子炉圧力容器鋼の高経年化対策研究(照射脆化予測)  
 部署：安全研究・防災支援部門（安全研究センター）  
 概要：脆化予測に必要な基礎的知見を提供するため、第一原理計算や、それに基づくレート方程式シミュレーションを実施。
- (12) 応力腐食割れ、照射材料の数値シミュレーション研究  
 部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）  
 概要：応力腐食割れのいくつかの仮説メカニズムを検証、選択（脆化元素＝酸素 or 水素）するためシミュレーションを行う。

- (13) 中性子検出器開発に関わるシミュレーション研究と実験による検証  
 部署：原子力科学研究部門（量子ビーム応用研究センター、J-PARC センター）  
 概要：実験及び開発研究を先導（設計支援を含む）するため、高精度シミュレーションを行い、データを提供する。
- (14) 構造材料照射に関わる材料強度等の物性評価シミュレーション研究  
 部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）  
 概要：材料強度基礎パラメータの導出し提供するためモデリング及びシミュレーションを行う。
- (15) Fe 中における He の拡散と結合状態に関する原子論的モデリング  
 部署：核融合研究開発部門  
 概要：核融合環境化での長期の中性子照射による材料組織変化を予測するモデルを確立。
- (16) 六方晶金属の機械的性質の計算科学研究  
 部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）  
 概要：計算モデリングが進んでおらず、基礎的な機械的性質についてもよくわかっていない六方晶金属（燃料被覆管 Zr 合金、自動車用軽量金属）について、第一原理計算にもとづいたモデリング手法を開発する。
- (17) シンクロ型 LPSO 構造の材料科学  
 部署：原子力科学研究部門（J-PARC センター）  
 概要：熊本大学で開発された LPSO（長周期積層構造）をもつマグネシウム合金の基本的な物性を解明する。
- (18) 分子動力学計算と実験による MA 含有 MOX 燃料の熱物性と微視的構造の評価  
 部署：原子力科学研究部門（先端基礎研究センター、原子力基礎工学研究センター）、高速炉研究開発部門（次世代高速炉サイクル研究開発センター）  
 概要：マイナーアクチニドを含有する MOX 燃料の物性評価のため、高精度シミュレーション手法を確立し、実験結果の予測やその解釈を行う。
- (19) 転位バイアス因子の理論的解明  
 部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）  
 概要：照射スウェリングの原因である転位バイアス因子の理論の構築。
- (20) セシウムの生体内移行の検討  
 部署：原子力科学研究部門（量子ビーム応用研究センター）  
 概要：生体内での放射性セシウムの化学形態変化と動的輸送過程の解析。
- (21) ストロンチウム吸着材チタン酸化合物の開発  
 部署：福島研究開発部門（核燃料サイクル工学研究所環境技術開発センター）  
 概要：ストロンチウム吸着材チタン酸化合物の開発に対し、計算科学的手法を援用し、開発を加速させる。
- (22) ガラス熔融固化シミュレーション高速化  
 部署：バックエンド研究開発部門（核燃料サイクル工学研究所）  
 概要：ガラス固化プロセスの温度や流量等の運転パラメータの最適化をするために膨大な計算を効率化する。
- (23) J-PARC における中性子散乱実験の結果の解析



部署：原子力科学研究部門（量子ビーム応用研究センター）

概要：鉄系高温超伝導体の超伝導発現機構の解明のために量子ビーム応用研究部門により実施された J-PARC における中性子散乱実験結果の理論解析を行う。

(24) ペタスケール核融合シミュレーションコード開発

部署：核融合研究開発部門

概要：京コンピュータ、Helios 等におけるペタスケール核融合シミュレーションを目的として超並列処理技術等の開発を実施。

(25) 燃料溶融複雑系の解析に関する技術協力

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

概要：燃料溶融複雑系の大規模シミュレーションデータの解析作業を効率化するために高速可視化処理ツールを開発する。

(26) 地質環境解析に関する技術協力

部署：バックエンド研究開発部門（東濃地科学センター）

概要：ボリュームレンダリング可視化処理ツールを適用し、地質環境シミュレーションデータの解析作業を効率化する。

## 1 1. 国際協力

国際協力の一覧を以下に示す。

(1) 原子力庁（CEA）：仏国

“フランス原子力庁と日本原子力研究開発機構との原子力研究開発分野における協力に関するフレームワーク協定”（この協定中の一つのテーマとして計算科学が位置づけられている）

（2006 年度～）

(2) カリフォルニア大学バークレー校（UCB）：米国

“地層処分及び燃料サイクルに関する共同研究契約”（この共同研究の一環として、計算科学の観点から協力している）

（2008 年度～、システム計算科学センターの協力は 2011 年度～）

(3) パシフィックノースウェスト国立研究所（PNNL）：米国

“環境汚染の評価及び浄化に係る共同研究契約”（この共同研究の一環として、計算科学の観点から協力している）

（2011 年度～）

(4) 国際原子力機関（IAEA）

“国際協力研究事業（食糧・農業に影響を及ぼす原子力災害への対策）「食糧・農業モニタリングデータの収集、管理および提供のためのソフトウェアプラットフォームの研究開発」”（IAEA 主導のもと 8 ヶ国が参加）

（2013 年度～）

(5) ローレンス・バークレイ国立研究所(LBNL)：米国

“2011 年に発生した福島事故による Cs の広域放出を経験した福島地域の環境復興に関する委託研究”（この研究の一環として、計算科学の観点から協力している）（2015 年度～）

# 国際単位系 (SI)

表1. SI 基本単位

基本量	SI 基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質량	モル	mol
光度	カンデラ	cd

表2. 基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

組立量	SI 組立単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m <sup>2</sup>
体積	立方メートル	m <sup>3</sup>
速度	メートル毎秒	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s <sup>2</sup>
波数	毎メートル	m <sup>-1</sup>
密度, 質量密度	キログラム毎立方メートル	kg/m <sup>3</sup>
面積密度	キログラム毎平方メートル	kg/m <sup>2</sup>
比体積	立方メートル毎キログラム	m <sup>3</sup> /kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m <sup>2</sup>
磁界の強さ	アンペア毎メートル	A/m
量濃度 <sup>(a)</sup> , 濃度	モル毎立方メートル	mol/m <sup>3</sup>
質量濃度	キログラム毎立方メートル	kg/m <sup>3</sup>
輝度	カンデラ毎平方メートル	cd/m <sup>2</sup>
屈折率 <sup>(b)</sup>	(数字の)	1
比透磁率 <sup>(b)</sup>	(数字の)	1

(a) 量濃度 (amount concentration) は臨床化学の分野では物質濃度 (substance concentration) ともよばれる。  
 (b) これらは無次元量あるいは次元1をもつ量であるが、そのことを表す単位記号である数字の1は通常は表記しない。

表3. 固有の名称と記号で表されるSI組立単位

組立量	SI 組立単位			
	名称	記号	他のSI単位による表し方	SI基本単位による表し方
平面角	ラジアン <sup>(b)</sup>	rad	1 <sup>(b)</sup>	m/m
立体角	ステラジアン <sup>(b)</sup>	sr <sup>(e)</sup>	1 <sup>(b)</sup>	m <sup>2</sup> /m <sup>2</sup>
周波数	ヘルツ <sup>(d)</sup>	Hz		s <sup>-1</sup>
力	ニュートン	N		m kg s <sup>-2</sup>
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m <sup>2</sup>	m <sup>-1</sup> kg s <sup>-2</sup>
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N m	m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup>
仕事率, 工率, 放射束	ワット	W	J/s	m <sup>2</sup> kg s <sup>-3</sup>
電荷, 電気量	クーロン	C		s A
電位差 (電圧), 起電力	ボルト	V	W/A	m <sup>2</sup> kg s <sup>-3</sup> A <sup>-1</sup>
静電容量	ファラド	F	C/V	m <sup>2</sup> kg <sup>-1</sup> s <sup>4</sup> A <sup>2</sup>
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	m <sup>2</sup> kg s <sup>-3</sup> A <sup>-2</sup>
コンダクタンス	ジーメン	S	A/V	m <sup>2</sup> kg <sup>-1</sup> s <sup>3</sup> A <sup>2</sup>
磁束	ウェーバ	Wb	Vs	m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup> A <sup>-1</sup>
磁束密度	テスラ	T	Wb/m <sup>2</sup>	kg s <sup>-2</sup> A <sup>-1</sup>
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup> A <sup>-2</sup>
セルシウス温度	セルシウス度 <sup>(e)</sup>	°C		K
光照射量	ルーメン	lm	cd sr <sup>(e)</sup>	cd
放射線量	グレイ	Gy	J/kg	m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup>
放射性核種の放射能 <sup>(f)</sup>	ベクレル <sup>(d)</sup>	Bq		s <sup>-1</sup>
吸収線量, 比エネルギー分与, カーマ	グレイ	Gy	J/kg	m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup>
線量当量, 周辺線量当量, 方向性線量当量, 個人線量当量	シーベルト <sup>(g)</sup>	Sv	J/kg	m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup>
酸素活性化	カタール	kat		s <sup>-1</sup> mol

(a) SI接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはやコヒーレントではない。  
 (b) ラジアンとステラジアンは数字の1に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号である数字の1は明示されない。  
 (c) 測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。  
 (d) ヘルツは周期現象についてのみ、ベクレルは放射性核種の統計的過程についてのみ使用される。  
 (e) セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。セルシウス度とケルビンの単位の大きさは同一である。したがって、温度差や温度間隔を表す数値はどちらの単位で表しても同じである。  
 (f) 放射性核種の放射能 (activity referred to a radionuclide) は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。  
 (g) 単位シーベルト (PV, 2002, 70, 205) についてはCIPM勧告2 (CI-2002) を参照。

表4. 単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI 組立単位		
	名称	記号	SI 基本単位による表し方
粘力のモーメント	パスカル秒	Pa s	m <sup>-1</sup> kg s <sup>-1</sup>
表面張力	ニュートンメートル	N m	m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup>
角速度	ニュートン毎メートル	N/m	kg s <sup>-2</sup>
角加速度	ラジアン毎秒	rad/s	m m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> = s <sup>-1</sup>
熱流密度, 放射照度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s <sup>2</sup>	m m <sup>-1</sup> s <sup>-2</sup> = s <sup>-2</sup>
熱容量, エントロピー	ワット毎平方メートル	W/m <sup>2</sup>	kg s <sup>-3</sup>
比熱容量, 比エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup> K <sup>-1</sup>
比エネルギー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup> K <sup>-1</sup>
熱伝導率	ジュール毎キログラム	J/kg	m <sup>2</sup> s <sup>-2</sup>
体積エネルギー	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s <sup>-3</sup> K <sup>-1</sup>
電界の強さ	ジュール毎立方メートル	J/m <sup>3</sup>	m <sup>-1</sup> kg s <sup>-2</sup>
電荷密度	ジュール毎立方メートル	J/m <sup>3</sup>	m kg s <sup>-3</sup> A <sup>-1</sup>
電表面積	クーロン毎立方メートル	C/m <sup>3</sup>	m <sup>-3</sup> s A
電束密度, 電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m <sup>2</sup>	m <sup>-2</sup> s A
誘電率	クーロン毎平方メートル	C/m <sup>2</sup>	m <sup>-2</sup> s A
透磁率	ファラド毎メートル	F/m	m <sup>3</sup> kg <sup>-1</sup> s <sup>4</sup> A <sup>2</sup>
モルエネルギー	ヘンリー毎メートル	H/m	m kg s <sup>-2</sup> A <sup>-2</sup>
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル	J/mol	m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup> mol <sup>-1</sup>
照射線量 (X線及びγ線)	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup> K <sup>-1</sup> mol <sup>-1</sup>
吸収線量率	クーロン毎キログラム	C/kg	kg <sup>-1</sup> s A
放射線強度	グレイ毎秒	Gy/s	m <sup>2</sup> s <sup>-3</sup>
放射輝度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m <sup>4</sup> m <sup>-2</sup> kg s <sup>-3</sup> = m <sup>2</sup> kg s <sup>-3</sup>
酵素活性濃度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	W/(m <sup>2</sup> sr)	m <sup>2</sup> m <sup>-2</sup> kg s <sup>-3</sup> = kg s <sup>-3</sup>
	カタール毎立方メートル	kat/m <sup>3</sup>	m <sup>3</sup> s <sup>-1</sup> mol

表5. SI 接頭語

乗数	名称	記号	乗数	名称	記号
10 <sup>24</sup>	ヨタ	Y	10 <sup>1</sup>	デシ	d
10 <sup>21</sup>	ゼタ	Z	10 <sup>2</sup>	センチ	c
10 <sup>18</sup>	エクサ	E	10 <sup>3</sup>	ミリ	m
10 <sup>15</sup>	ペタ	P	10 <sup>6</sup>	マイクロ	μ
10 <sup>12</sup>	テラ	T	10 <sup>9</sup>	ナノ	n
10 <sup>9</sup>	ギガ	G	10 <sup>12</sup>	ピコ	p
10 <sup>6</sup>	メガ	M	10 <sup>-15</sup>	フェムト	f
10 <sup>3</sup>	キロ	k	10 <sup>-18</sup>	アト	a
10 <sup>2</sup>	ヘクト	h	10 <sup>-21</sup>	ゼプト	z
10 <sup>1</sup>	デカ	da	10 <sup>-24</sup>	ヨクト	y

表6. SIに属さないが、SIと併用される単位

名称	記号	SI 単位による値
分	min	1 min=60 s
時	h	1 h=60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86 400 s
度	°	1°=(π/180) rad
分	'	1'=(1/60)°=(π/10 800) rad
秒	"	1"=(1/60)'=(π/648 000) rad
ヘクタール	ha	1 ha=1 hm <sup>2</sup> =10 <sup>4</sup> m <sup>2</sup>
リットル	L, l	1 L=1 l=1 dm <sup>3</sup> =10 <sup>3</sup> cm <sup>3</sup> =10 <sup>-3</sup> m <sup>3</sup>
トン	t	1 t=10 <sup>3</sup> kg

表7. SIに属さないが、SIと併用される単位で、SI単位で表される数値が実験的に得られるもの

名称	記号	SI 単位で表される数値
電子ボルト	eV	1 eV=1.602 176 53(14)×10 <sup>-19</sup> J
ダルトン	Da	1 Da=1.660 538 86(28)×10 <sup>-27</sup> kg
統一原子質量単位	u	1 u=1 Da
天文単位	ua	1 ua=1.495 978 706 91(6)×10 <sup>11</sup> m

表8. SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

名称	記号	SI 単位で表される数値
バール	bar	1 bar=0.1MPa=100 kPa=10 <sup>5</sup> Pa
水銀柱ミリメートル	mmHg	1 mmHg=133.322Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1nm=100pm=10 <sup>-10</sup> m
海里	M	1 M=1852m
バイン	b	1 b=100fm <sup>2</sup> =(10 <sup>12</sup> cm <sup>2</sup> ) <sup>2</sup> =10 <sup>-28</sup> m <sup>2</sup>
ノット	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネーパ	Np	SI単位との数値的関係は、 対数量の定義に依存。
ベレル	B	
デシベル	dB	

表9. 固有の名称をもつCGS組立単位

名称	記号	SI 単位で表される数値
エルグ	erg	1 erg=10 <sup>-7</sup> J
ダイン	dyn	1 dyn=10 <sup>-5</sup> N
ポアズ	P	1 P=1 dyn s cm <sup>-2</sup> =0.1Pa s
ストークス	St	1 St=1cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> =10 <sup>-4</sup> m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup>
スチルブ	sb	1 sb=1cd cm <sup>-2</sup> =10 <sup>4</sup> cd m <sup>-2</sup>
フオト	ph	1 ph=1cd sr cm <sup>-2</sup> =10 <sup>4</sup> lx
ガリ	Gal	1 Gal=1cm s <sup>-2</sup> =10 <sup>-2</sup> ms <sup>-2</sup>
マクスウェル	Mx	1 Mx=1 G cm <sup>2</sup> =10 <sup>-8</sup> Wb
ガウス	G	1 G=1Mx cm <sup>-2</sup> =10 <sup>-4</sup> T
エルステッド <sup>(a)</sup>	Oe	1 Oe <sub>e</sub> =(10 <sup>3</sup> /4π)A m <sup>-1</sup>

(a) 3元系のCGS単位系とSIでは直接比較できないため、等号「△」は対応関係を示すものである。

表10. SIに属さないその他の単位の例

名称	記号	SI 単位で表される数値
キュリー	Ci	1 Ci=3.7×10 <sup>10</sup> Bq
レントゲン	R	1 R=2.58×10 <sup>-4</sup> C/kg
ラド	rad	1 rad=1cGy=10 <sup>-2</sup> Gy
レム	rem	1 rem=1 cSv=10 <sup>-2</sup> Sv
ガンマ	γ	1 γ=1 nT=10 <sup>-9</sup> T
フェルミ	f	1 フェルミ=1 fm=10 <sup>-15</sup> m
メートル系カラット		1 メートル系カラット=0.2 g=2×10 <sup>-4</sup> kg
トル	Torr	1 Torr=(101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm=101 325 Pa
カロリ	cal	1 cal=4.1858J (「15°C」カロリ), 4.1868J (「IT」カロリ), 4.184J (「熱化学」カロリ)
マイクロン	μ	1 μ=1μm=10 <sup>-6</sup> m



