



JAEA-Review

2007-009



JP0750126

平成17年度シミュレーション工学研究実績評価報告

Review of Research on Simulation Engineering in FY2005

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

JAEA-Review

March 2007

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは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/index.shtml>)
より発信されています。このほか財団法人原子力弘済会資料センター*では実費による複写頒布を行つております。

〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4
日本原子力研究開発機構 研究技術情報部 研究技術情報課
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920

* 〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4 日本原子力研究開発機構内

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to
Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Department,
Japan Atomic Energy Agency
2-4 Shirakata Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920

平成 17 年度シミュレーション工学研究実績評価報告

日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター

(2007 年 1 月 18 日受理)

システム計算科学センターにおいては、「独立行政法人日本原子力研究開発機構の中期目標を達成するための計画（中期計画）」に基づき、シミュレーション工学研究に関する研究開発を実施している。この研究開発の効率的・効果的推進に資することを目的として、機構外の有識者・専門家による研究評価及び示唆を受けるため、機構の原子力コード研究委員会の下に原子力計算科学研究評価専門部会が設置された。

本報告は、平成 17 年度にシステム計算科学センターにおいて実施されたシミュレーション工学研究の実績を原子力計算科学研究評価専門部会が評価した結果をとりまとめたものである。

Review of Research on Simulation Engineering in FY2005

Center for Computational Science & e-Systems

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

(Received January 18, 2007)

Research on simulation engineering for nuclear applications, based on "the plan for meeting the mid-term goal of the Japan Atomic Energy Agency", has been performed at Center for Computational Science & e-Systems, Japan Atomic Energy Agency (CCSE/JAEA).

We established the committee consisting outside experts and authorities which does research evaluation and advice as the help of the research and development.

This report summarizes the result of the evaluation by the committee on the research on simulation engineering performed at CCSE/JAEA in FY2005.

Keywords: Research Evaluation, Numerical Simulation, Computer Science, Computer Grid Technology, Multi-Scale Modeling, Genome Information Analysis, High-speed Network Computing

目次

1. 評価の目的及び方法	1
1. 1 評価の目的	1
1. 2 評価の方法	1
2. シミュレーション工学研究における中期計画及び平成 17 年度計画	3
2. 1 中期計画	3
2. 2 平成 17 年度計画	3
3. 平成 17 年度シミュレーション工学研究の実績	5
4. 原子力計算科学研究評価専門部会による評価	13
付録 平成 17 年度シミュレーション工学研究予算及び人員	21
平成 17 年度シミュレーション工学研究活動実績一覧	22

Contents

1. Purpose and Method of the Evaluation	1
1. 1 Purpose	1
1. 2 Evaluation Method	1
2. R&D Plans for the Computational Science Research of CCSE/JAEA	3
2. 1 Midterm Plan	3
2. 2 Plan for FY2005	3
3. R&D Achievements at CCSE/JAEA	5
4. Result of the Evaluation and Comments	13
Appendix Budget and Human Resource	21
R&D Achievements	22

執筆者リスト

システム計算科学センター

- 大谷 孝之（システム計算科学センター情報システム利用推進室、評価準備チーム）
佐々 成正（システム計算科学センターシミュレーション技術開発室、評価準備チーム）
清水 大志（システム計算科学センターシミュレーション技術開発室、評価準備チーム）
鈴木 喜雄（システム計算科学センター高度計算機技術開発室、評価準備チーム）

1. 評価の目的及び方法

1. 1 評価の目的

分子・原子の運動や構造、気象、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研究は、原子力分野の研究開発においても理論研究、実験研究と並び必要不可欠な研究手法となっている。

独立行政法人日本原子力研究開発機構（以下「機構」という。）においても、シミュレーション工学研究を原子力基礎工学の重要な柱として中期計画に盛り込み、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ところである。

機構では、原子力コードの開発・整備、計算科学研究の推進及び成果の利用について、機構内外の有識者・専門家から構成される「原子力コード研究委員会」（以下「委員会」という。）を設置し、研究協力活動の場及び研究開発に対する意見・提案等をいただく場として活用している。

さらに、シミュレーション工学研究の効率的・効果的推進に役立てることを目的として、この委員会の下に「原子力計算科学研究評価専門部会」（以下「専門部会」という。）を設置し、システム計算科学センターを中心に推進しているシミュレーション工学研究について、年度毎に評価を受けることとした。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」としても活用される。

1. 2 評価の方法

評価の対象及び評価の視点等については、機構における内部評価の方法（図 1.1 参照）に準じて行った。すなわち、機構の「平成 17 年度の業務運営に関する計画（平成 17 年度計画）」に記載されたシミュレーション工学研究を対象とし、「計画に対する研究の進捗度」に加え、「多角的な視点からの評価」及び「特に優れた成果」を評価の視点とすることにより、総合的な評価を実施した（図 1.2 参照）。

多角的視点からの評価については、(1)我が国の原子力の研究、開発及び利用の基盤を形成するとの観点から産業界及び大学等との連携は十分に行われているか、(2)機構内の他の部門との連携が十分に行われているか、(3)統合を考慮した体制の整備が行われているかの 3 点を設定した（図 1.3 参照）。

なお、シミュレーション工学研究のうち一部システム計算科学センター以外の部署が主担当である研究については専門部会による評価の対象外とした。

評価の基本はA(達成)かB(未達成)

【4段階評価の評価基準】

S: 特に優れた実績を上げている。

A: 計画通り、または計画を上回り、中期計画を達成しうる可能性が高い。

B: 計画通りとは言えない面もあるが工夫もしくは努力次第で中期計画を達成しうる。

F: 遅れている、又は中期計画を達成し得ない可能性が高い。

図 1. 1 機構における評価基準

日本原子力研究開発機構における「評価の視点」のイメージ

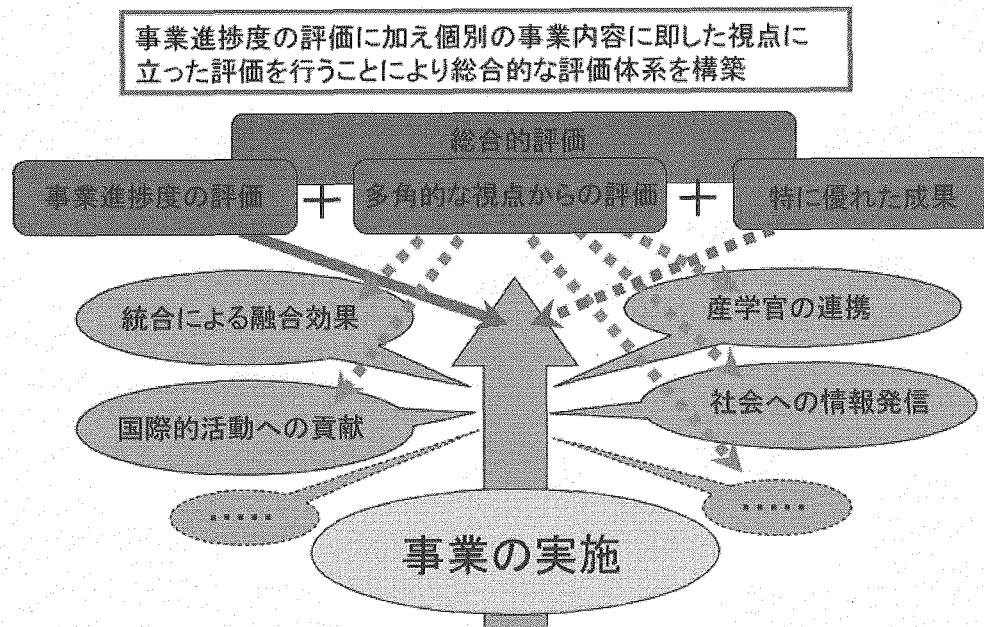


図1.2 機構における「評価の視点」のイメージ

シミュレーション工学研究	事業進捗度	○年度計画に基づき原子力研究開発の基盤を形成し、新たな原子力利用技術を創出するため原子力基礎工学研究を実施したか？	年度計画を満足していれば、評価はA以上。 これらの項目で優れた成果があれば、評価はSに近づく。
	多角的な視点	★我が国の原子力の研究、開発及び利用の基盤を形成するとの観点から産業界及び大学との連携は十分に行われているか？	
		★機構内の他の部門との連携が十分に行われているか？	
	特に優れた成果	★統合を考慮した体制の整備が行われているか？	

図1.3 シミュレーション工学研究における評価の視点

2. シミュレーション工学研究における中期計画及び平成 17 年度計画

2. 1 中期計画

シミュレーション工学研究については、「独立行政法人日本原子力研究開発機構の中期目標を達成するための計画（中期計画）」に次のとおり定められている。

グリッド技術による並列分散計算技術を開発し、原子力施設の耐震性評価用仮想振動台を構築する。原子炉材料のき裂進展、核燃料の細粒化現象の機構解明や、原子力分野におけるナノデバイスの開発に貢献するため、ミクロからマクロに至る計算手法を統合したマルチスケーリングモデル手法を構築する。低線量放射線影響の解明に貢献するため、IT を活用したゲノム情報解析用データベースを構築し、DNA 修復タンパク質の機能を解明するとともに、DNA 損傷・修復シミュレーションの高度化を進める。さらに、超高速ネットワークコンピューティングに関する技術開発と次世代ハードウェア技術による専用シミュレータ基盤技術の開発を行い、超高速コンピューティングニーズに効率的に対応できるシステムを構築する。

この中期計画の期間は、平成 17 年 10 月 1 日から平成 22 年 3 月 31 日までの 4 年 6 ヶ月である。なお、このうち「DNA 損傷・修復シミュレーションの高度化を進める。」については、システム計算科学センター以外の部署が主担当であるため、専門部会による評価の対象外とした。

2. 2 平成 17 年度計画

中期計画を実現するための平成 17 年度計画として、シミュレーション工学研究については以下のように定められた。

国際協力のもとにグリッド計算機環境の拡充を目指し、総計算機資源 50 テラフロップスを実現する。具体的には独自シェットガルト大の UNICORE システムとグリッド計算機環境を共用化するとともに、仏国原子力庁（CEA）の提案に応え、グリッド計算機環境を用いたシミュレーションや遠隔実験支援技術の研究協力をを行う。

原子力発電プラントの耐震性を評価するための統合システムを試作し、部品点数 1 千点規模までの検証を行う。

原子炉材料では、粒界脆化機構について 10 種以上の不純物と溶質元素に対し偏析による脆化度を比較する。また、多結晶体のき裂の分岐形状を再現する粒界割れモデルを開発する。新規ナノデバイス開発の一環として、中性子検出の時間分解能を従来比約 10 倍の精度で求める数値モデルを決定する。

一つのゲノム配列から放射線抵抗性原因遺伝子候補を 24 時間以内に推定できる解析手法を開発する。さらに、分子シミュレーションを RuvA 修復酵素に適用し、約 20 万原子から構成される系の生体高分子シミュレーション 100 万ステップの計算を 1 ヶ月以内で終了するコードを開発する。また、DNA 損傷過程として重要な中性子による生体内の電離・励起分布を解明するためのコード開発を終了し、解析の準備を整える。胃壁の被ばく線量を適切に評価できる幹細胞の近似モデルを開発し、放射線影響上重要な幹細胞部分への線量を評価する。

超高速ネットワークコンピューティングの技術開発については、グリッドミドル・ソフトウェアにおける TCP/IP 高速ネットワーク通信処理技術の開発を進め、ファイアウォールを透過した通信の速度を 2 倍にする。

次世代ハードウェア技術による専用シミュレータ基盤技術の開発については、従来の 100 倍以上高速な流体計算アルゴリズムを開発し、現行汎用計算機（128CPU）を用いて 1 秒以下の計算実行を達成する。

なお、平成 17 年度計画のうち「また、DNA 損傷過程として重要な中性子による生体内の電離・励起分布を解明するためのコード開発を終了し、解析の準備を整える。胃壁の被ばく線量を適切に評価できる幹細胞の近似モデルを開発し、放射線影響上重要な幹細胞部分への線量を評価する。」は、システム計算科学センター以外の部署が主担当であるため、専門部会による評価の対象外とした。

平成 17 年度におけるシミュレーション工学研究の評価に当たっては、既に前節で記述したとおり、この平成 17 年度計画の達成度を基本とし、さらに多角的視点及び特に優れた成果の観点を加えて評価を実施した。

3. 平成 17 年度シミュレーション工学研究の実績

中期計画及び平成 17 年度計画に沿って実施した研究開発の実績について、表 3. 1 にまとめた。

表 3. 1 には、研究開発の実績の記述に加えて、成果の意義（システム計算科学センターによる自己評価）及び平成 17 年度の実績を踏まえた平成 18 年度計画も記載した。

専門部会による評価においては、平成 18 年度計画を参考した上で、今後の研究開発の方向性についてもコメントがあれば記載することとした。

なお、研究開発資源（人員及び予算）と、研究開発実績（論文、受賞、産学官連携等）の詳細については、付録にそれぞれの一覧を掲載する。

This is a blank page.

表3.1 平成17年度研究開発実績及び成果の意義等

中期計画	H17年度計画	H17実績報告	成果の意義	多角的視点、特に優れた成果等	H18年度計画
1	<p>グリッド技術による並列分散計算技術を開発し、原子力施設の耐震性評価用仮想振動台を構築する。</p> <p>原子力発電プラントの耐震性を評価するための統合システムを試作し、部品点数1千点規模までの検証を行う。</p>	<p>国際協力のもとにグリッド計算機環境の拡充を目指し、総計算機資源50テラフロップスを実現する。具体的には独国シュツットガルト大のUNICOREシステムとグリッド計算機環境を共用化するとともに、仏国原子力庁(CEA)の提案に応え、グリッド計算機環境を用いたシミュレーションや遠隔実験支援技術の研究協力をを行う。</p> <p>○CEAからの協力提案については、遠隔実験、計算科学の原子力応用に関する協力の具体的な内容について詳細提案を提示し、研究協力を進めた。</p> <p>○原子力施設の耐震性評価用仮想振動台の構築については、高温ガス炉(HTTR)の冷却系を対象に統合システムの試作及び解析を実施し、部品1千点規模の解析ができるることを実証した。</p>	<p>○グリッド技術による並列分散計算技術の開発については、シュツットガルト大と連携を進め、機構が開発したITBLシステムとUNICOREシステムとの接続並びに上位レベルでの相互運用機能の検証を完了し、これにより総計算機資源50テラフロップスを実現した。</p> <p>○CEAからの協力提案については、遠隔実験、計算科学の原子力応用に関する協力の具体的な内容について詳細提案を提示し、研究協力を進めた。</p> <p>○原子力施設の耐震性評価用仮想振動台の構築については、高温ガス炉(HTTR)の冷却系を対象に統合システムの試作及び解析を実施し、部品1千点規模の解析ができるることを実証した。</p>	<p>○遠隔にある多種多様な計算機(18機種)をあたかも1つの巨大なスーパーコンピュータとして使うことができる計算機環境実現への道を拓いた。(項目番号4のTCP/IP通信の高速化の成果を含む)</p> <p>○原子力施設耐震解析において、実験炉の主要機器の解析に必要な部品数1千点規模の解析を実現したことは、原子力施設の耐震性評価用仮想振動台を構築するという中期目標に向けて着実な一歩を踏み出したと言える。また、その過程において、複雑な構造物を部品に分割し、部品ごとに単純なメッシュを用いる方法により複雑なメッシュを用いなくても高精度な解を得ることに成功したことは、原子力施設全容解析に向けた課題の一つを解決したことを意味する。</p>	<p>○グリッド技術による耐震性評価研究の成果は、世界最大のスーパーコンピュータ国際会議SC05にてHonorable Mention賞を受賞した。</p> <p>○産学官の連携の観点では、シュツットガルト大の他に国内の5つの大学(7サイト、10計算機)、5つの独法(7サイト、16計算機)の接続により総計算機資源50テラフロップスを実現したことを始め、7件の共同研究及び14件の協力研究を締結し、民間企業及び大学等との連携の下で研究開発を実施した。</p> <p>○実プラントデータによる耐震解析技術の実証を進めるため、解析時間を半減(平成17年(2005年)度比)できる高速化技術を実証する。</p> <p>外部資金の導入を条件に、国の京速計算機開発プロジェクトに参画し、ナショナル・グリッド・インフラ整備に着手する。</p>
2	<p>原子炉材料のき裂進展、核燃料の細粒化現象の機構解明や、原子力分野におけるナノデバイスの開発に貢献するため、ミクロからマクロに至る計算手法を統合したマルチスケーリングモデル手法を構築する。</p>	<p>原子炉材料では、粒界脆化機構について10種以上の不純物と溶質元素について分析完了し、偏析と強度の相関に対する理論的根拠を提出した。</p> <p>○原子炉材料(多結晶体)のき裂進展の機構解明のためのマルチスケールモデリング手法を構築するために、分岐形状を再現する粒界割れモデルを開発し、中性子検出の時間分解能を従来比約10倍の精度で求める数値モデルを決定する。</p> <p>○原子力分野において有用な新規ナノデバイス開発のため、中性子検出シミュレーションにおいてデバイス応答の時間分解能を高精度(従来比10倍以上)で計算可能とする数値モデルを決定した。</p>	<p>○不純物偏析による圧力容器鋼の粒界脆化度を10種の不純物と溶質元素について分析完了し、偏析と強度の相関に対する理論的根拠を提出した。</p> <p>○原子炉材料(多結晶体)のき裂進展の機構解明のためのマルチスケールモデリング手法を構築するために、分岐形状を再現する粒界割れモデルを開発し、ミクロとの接続を考慮したメソスケールモルディングの最適化を完了した。</p> <p>○原子力分野において有用な新規ナノデバイス開発のため、中性子検出シミュレーションにおいてデバイス応答の時間分解能を高精度(従来比10倍以上)で計算可能とする数値モデルを決定した。</p>	<p>○原子炉の高経年化に伴い、圧力容器鋼の照射脆化予測式は粒界割れを考慮した見直しが国の主導のもとで今後行われる予定である。現在の原子炉の圧力容器鋼は約10種の合金元素および不純物元素から構成されており、それらの粒界への影響を解明したことは、照射脆化予測式の見直しの際の基礎データとなる。</p> <p>○応力腐食割れによるき裂分岐形状を定性的に再現できる(力学的な)粒界割れメソスケールモデルの開発に成功した。さらに、マルチスケールモデルの構築に向け、ミクロなモデルの計算結果を組み込むのに最適なメソスケールモデルを決定した。</p> <p>○超伝導体の放射線照射後の変化は速く、その変化過程の全貌を明らかにするためには、数値シミュレーションモデルの改良によりシミュレーションを従来比10倍以上の精度(時間進展を1/10以下に詳細化)で高速に実行する必要がある。今回の成果は、この要求を満たし、リアルな変化過程を再現することを可能にしたと位置づけられる。</p>	<p>○新規ナノデバイス開発のための高精度計算の成果は、SC05において、ゴードンベル賞ファイナリストに選出された。</p> <p>○「摂氏300度でも超伝導状態を理論計算で確認」(朝日新聞夕刊2005.11.15掲載)</p> <p>○産学官の連携の観点では、本研究の推進に当たり、4件の共同研究及び10件の協力研究を締結し、民間企業及び大学等との連携の下で研究開発を実施した。</p> <p>○圧力容器鋼の粒界において、炭素の強化効果とリンの脆化効果を定量化し、炭素とリンの競合関係を明らかにする。き裂成長のシミュレーション結果を具体的な実験結果と照合し、き裂成長シナリオを検証する。燃料棒の粗大化気泡成長のシミュレーションを具体的な実験結果と照合し、成長機構のシナリオを構築する。原子力デバイス開発のため、超伝導体の熱応答特性を評価する数値モデルを試作する。</p>

表3. 1 平成17年度研究開発実績及び成果の意義等(つづき)

中期計画	H17年度計画	H17実績報告	成果の意義	多角的視点、特に優れた成果等	H18年度計画
3 低線量放射線影響の解明に貢献するため、ITを活用したゲノム情報解析用データベースを構築し、DNA修復タンパク質の機能を解明する(とともに、DNA損傷・修復シミュレーションの高度化を進める)。	一つのゲノム配列から放射線抵抗性原因遺伝子候補を24時間以内に推定できる解析手法を開発する。さらに、分子シミュレーションをRuvA修復酵素に適用し、約20万原子から構成される系の生体高分子シミュレーション100万ステップの計算を1ヶ月以内で終了するコードを開発する。	○放射線抵抗性原因遺伝子データを蓄積し、データ探索を高速化し、一つのゲノム配列から放射線抵抗性原因遺伝子候補を24時間以内に推定できる解析手法を開発した。また、高速化に伴い精度劣化等がないことを確認した。 ○分子シミュレーションをRuvA修復酵素に適用し、約20万原子から構成される系の生体高分子シミュレーション100万ステップの計算を1ヶ月以内で終了するコードを開発し、分子機能探索を開始した。	○異種の放射線抵抗性細菌のゲノム塩基配列の類似性及び近縁種の細菌であって放射線に対する抵抗性が異なる生物種のゲノム塩基配列の差異を可視化することにより、ゲノム塩基配列の類似部分と異なる部分を同定することに成功した。このような手法の開発は放射線抵抗性の原因遺伝子を究明する上で重要な手法である。 ○修復関連タンパク質の機能解明を目指すシミュレーションシステムの開発において、クーロン相互作用を高精度で計算するPPPM法(particl-particle particle-mesh法)を用いて、自由エネルギーの計算を可能とした。これにより、タンパク質の安定性やDNAとの結合能力を予測する上で重要な指標を求めることが可能となる。	○産学官の連携の観点では、本研究の推進に当たり、2件の共同研究及び8件の協力研究を締結し、民間企業及び大学等との連携の下で研究開発を実施した。 ○左記研究に関連して、高エネルギー加速器研究機構物質構造化学研究所から研究を受託する形で、文部科学省の「タンパク3000プロジェクト」にも参加しており、国のプロジェクトにも貢献している。	タンパク質の構造情報から機能を解析する手法を適用した結果を分散したデータベースに格納し、放射線抵抗性原因遺伝子をグリッド基盤上で発見できるようにする。さらに分子シミュレーションを、約50万原子から構成される系の生体高分子シミュレーション100万ステップを2ヶ月内で完了する。生物影響上重要なDNA二本鎖切断の修復の第1段階に働くKuタンパク質が、二本鎖切断部位と安定な複合体を形成する機構を解明する。
4 超高速ネットワークコンピューティングに関する技術開発と次世代ハードウェア技術による専用シミュレータ基盤技術の開発を行い、超高速コンピューティングニーズに効率的に対応できるシステムを構築する。	超高速ネットワークコンピューティングの技術開発については、グリッドミドル・ソフトウェアにおけるTCP/IP高速ネットワーク通信処理技術の開発を進め、ファイアウォールを透過して通信処理を行うソフトの軽量化並びに安定化処理の実装を完了し、従来比2倍の通信速度を実証した。 次世代ハードウェア技術による専用シミュレータ基盤技術の開発については、従来の100倍以上高速な流体計算アルゴリズムを開発し、現行汎用計算機(128CPU)を用いて1秒以下の計算実行を達成する。	○超高速ネットワークコンピューティングの技術開発については、グリッドミドル・ソフトウェアにおけるTCP/IP高速ネットワーク通信処理技術の開発を進め、ファイアウォールを透過して通信処理を行うソフトの軽量化並びに安定化処理の実装を完了し、従来比2倍の通信速度を実証した。 ○次世代ハードウェア技術による専用シミュレータ基盤技術の開発については、プラズマ安定性解析に関する流体専用計算について、従来の100倍以上高速な計算アルゴリズムの開発を達成し、現行汎用計算機による1秒以下の計算実行を達成した。	○プラズマ安定性解析に関する流体専用計算について、従来の100倍以上高速な計算アルゴリズムの開発を達成し、現行汎用計算機による1秒以下の計算実行を達成したことは、次世代ハードウェア技術による専用シミュレータが将来の超高速コンピューティングニーズに現実的なコストで対応可能であることを重要な1分野で示唆するもので、ITER等、核融合炉におけるプラズマの実時間制御へ向けた専用シミュレータの有効性を裏付けるものである。	○産学官の連携の観点では、本研究の推進に当たり、各1件の協力研究及び委託研究を締結し、独法及び大学との連携の下で研究開発を実施した。	次世代ハードウェア技術による専用シミュレータ基盤技術の開発については、専用シミュレータ用基本電子回路の試作を通じ、汎用計算機と同レベルの1秒以下の計算速度を達成できる回路の設計を実現する。また、機構内外との研究連携拠点機能を発揮する『新概念回路技術展開型超高速コンピューティングの創造開拓共同プロジェクト研究会』を東北大学及び関係機関メンバーと協力して開始する。 ネットワークコンピューティングの実効性能を維持しながらセキュリティを強化できる個人認証システムを試設計する。 基幹ネットワークの広域イーサネット化を完了するとともに、セキュリティ強化策を実施する。また、関西地区スーパーコンピュータの調達仕様書を作成し、入札手続きを実施する。

表3. 1 平成17年度研究開発実績及び成果の意義等（つづき）

	中期計画	H17年度計画	H17実績報告	成果の意義	多角的視点、特に優れた成果等	H18年度計画
5	(計画には明記されていないが、シミュレーション工学研究全体を通して)		<p>○研究推進体制の観点では、重要な研究インフラである旧2法人の大型計算機システムについて、統一的運用方針を定め、一元的管理を実施するとともに、原子力機構内に大型計算機利用委員会を設置し、計算機資源の適正かつ計画的な配分を実施することにより、計算機資源の効率的な利用を図った。また、日本原子力学会をはじめとする学会活動とも連携しつつ、研究を推進する体制(原子力コード研究委員会等)を整備した。</p> <p>○学術的成果としては、13の研究論文、21の研究発表・講演、3つの研究・技術報告書が刊行されており、その他に10の研究論文を投稿した。</p>	<p>○シミュレーション工学研究に不可欠な計算機資源について、計画的・効率的な利用を実施するための枠組みを整備した。また、シミュレーション工学研究の計画策定や成果普及について、有識者の意見、示唆を参考にしつつ、研究を推進する体制を整備した。</p>	<p>○学会活動への貢献が顕著であったとして、日本原子力学会計算科学技術部会功労賞を受賞した。</p> <p>○ITBL基盤技術を活用した「出張電子決裁システム」の開発では、グリッド技術の業務システムへの適用による業務の効率化が評価され、文部科学大臣表彰創意工夫功労者賞を受賞した。</p> <p>○原子力機構としての統合効果を發揮し、研究開発を効率的・効果的に推進する観点から、22件に及ぶ機構内連携を実施した。</p>	

4. 原子力計算科学研究評価専門部会による評価

平成 18 年 3 月 30 日、平成 18 年 4 月 25 日の 2 回にわたり専門部会を開催し、第 1 章に示した評価方法に則り、「計画に対する研究の進捗度」に加え、「多角的な視点からの評価」及び「特に優れた成果」を評価の視点として総合的な評価を実施した。専門部会の委員構成及び開催状況を表 4. 1 及び表 4. 2 に示す。

表 4. 1 原子力計算科学研究評価専門部会構成

部会長	竹田 敏一	大阪大学大学院教授
専門委員	小柳 義夫	東京大学教授（平成 18 年 4 月 1 日より工学院大学教授）
	加古 孝	電気通信大学教授
	笠原 博徳	早稲田大学教授
	菅原 秀明	情報・システム研究機構国立遺伝学研究所教授
	樋渡 保秋	金沢大学名誉教授
幹事	谷 正之	原子力機構システム計算科学センター
	渡邊 勉	原子力機構システム計算科学センター
	大谷 孝之	原子力機構システム計算科学センター

表 4. 2 専門部会の開催状況

回	開催日時	開催場所	主たる議題	特記事項
1	平成 18 年 3 月 30 日 15:00～17:00	日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター（台東区上野）	・原子力機構における評価 について ・システム計算科学センターの事業計画について	樋渡委員 欠席
2	平成 18 年 4 月 25 日 15:30～17:30	日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター（台東区上野）	・システム計算科学センターの H17 年度研究実績について	樋渡委員 欠席

(注) 樋渡委員については、専門部会欠席のため、H17 年度については評価コメントなし。

専門部会の各委員からの評価コメントを表 4. 3 に示す。

This is a blank page.

表4. 3 評価コメント

評価項目	評価に関する意見・コメント			
	計画進捗度	多角的視点： ①産学官連携、②機構内連携、③統合を考慮した体制整備	特に優れた成果	その他
【年度計画】 国際協力のもとにグリッド計算機環境の拡充を目指し、総計算機資源 50 テラフロップスを実現する。具体的には独国シュツットガルト大の UNICORE システムとグリッド計算機環境を共用化するとともに、仏国原子力庁 (CEA) の提案に応え、グリッド計算機環境を用いたシミュレーションや遠隔実験支援技術の研究協力をを行う。 原子力発電プラントの耐震性を評価するための統合システムを試作し、部品点数 1 千点規模までの検証を行う。	<ul style="list-style-type: none"> 所期の年度計画は達成されたと思われる。大規模問題を比較的に独立性の高い複数の問題に分割して高度分散処理を行う技術は、今後ますます重要になると思われ、グリッド環境でのシミュレーションや遠隔実験支援のための技術を開発することは、今後の大きな方向性である。 システムの基本的な要素開発は順調に進展しているように見受けられる。 計画通り進行中と考えます。 年度計画を充分に満足しています。 	<ul style="list-style-type: none"> フランスとの共同研究を実現したことは評価できる。今後、このグリッド計算環境を、原子力計算科学における多くの分野のテーマに適用することを期待する。 ①「産」との連携についてはこれからという感じを持った。「学」について言えば、土木工学分野との連携について良くわからなかつた。 国際連携が着実に進んでいると考えます。 シュツットガルト大学のグリッドの環境の拡大を進めており、多角的協力が充分進められている。 	<ul style="list-style-type: none"> 耐震性評価は、複雑な構造物の振る舞いを解析する必要があり、構造／流体／熱などの諸要素を連成して解析しなければならない。その実現可能性への端緒を開いたことは大きな成果である。 国際的な連携が進捗している。 ドイツ・シュツットガルト大 UNICORE システムとの国際協力を進めている点。 S C O 5 で Honorable Mention 賞受賞しており、非常に優れている。→評価は S と判断 	<ul style="list-style-type: none"> 地盤との連成解析や、震源予測などと関連も視野に入れるべきであろう。 各国のグリッドシステムの接続後、研究者にどのようなサービスを提供することにより当該分野の研究をどのように促進するのか（どのような技術を新規に構築し、どのように研究に役立てるか）のビジョンがより明確になるとよいと思います。 H18 年度以降は旧サイクル機構との統合による協力体制を出してほしい。 耐震性評価については、今後実験との比較もできるような計画を考えてほしい。
【年度計画】 原子炉材料では、粒界脆化機構について 10 種以上の不純物と溶質元素に対し偏析による脆化度を比較する。また、多結晶体のき裂の分岐形状を再現する粒界割れモデルを開発する。新規ナノデバイス開発の一環として、中性子検出の時間分解能を従来比約 10 倍の精度で求める数値モデルを決定する。	<ul style="list-style-type: none"> マルチスケールモデルによる原子炉材料の物性研究は、機構にとって重要な課題であるが、計算科学的手法により、多くの不純物の偏析による脆化を扱うことができたことは、高い進捗度である。また、多結晶体の亀裂の確率的シミュレーションでも重要な結果がでている。 基礎解析技術の開発は進んでいる。また、現実の具体的な問題を想定した技術的问题の検討に向けて道筋を付けつつある。 計画通り順調に進行中と考えます。 原子炉材料の研究では、不純物元素の粒界への影響を検討するための基礎データを確立し、粒界割れのメソスケールモデルを開発している。ナノデバイス開発についても数値モデルを開発しており、年度計画は充分に満足されている。 	<ul style="list-style-type: none"> 現在、基礎的な手法を確立している段階であり、直ちに実用上の応用ができるわけではないが、今後、シミュレーションにより、原子炉材料設計において、機構内の他部署と新しい連携ができるようになると期待される。 サイクル機構との統合がシナジーをもたらしかどうかは現段階では明確なものはない。 ②実験データとの付きあわせを行い、解析モデルへのフィードバックを行う作業をより進めるべき。 数多くの共同研究、協力研究を実施している点が評価できる。 	<ul style="list-style-type: none"> 中性子検出の新しい技術にまで発展したことは特記に値する。今後の精密化が必要である。 粒界割れモデルの構築とそれに基づく計算の実行に新味を感じる。 ナノデバイス開発の一環として、地球シミュレータ上 5 0 0 ノード (4 0 0 0 プロセッサ) 上で、シミュレーション時間を従来に比べ 10 倍高速化し、ゴーダンベル賞のファイナリストに選出されたこと。 ゴーダンベル賞ファイナリストに選出された点、評価できる。 	<ul style="list-style-type: none"> 18 年度は、旧サイクル機構との協力を進めてほしい。

<p>【年度計画】</p> <p>一つのゲノム配列から放射線抵抗性原因遺伝子候補を 24 時間以内に推定できる解析手法を開発する。さらに、分子シミュレーションを RuvA 修復酵素に適用し、約 20 万原子から構成される系の生体高分子シミュレーション 100 万ステップの計算を 1 ヶ月以内で終了するコードを開発する。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ゲノム配列の解析技術と、分子シミュレーションの両方においても、所期の計画を実現したものと思われる。 ・計画通り進捗中と考えます。 ・中期計画に準じて、平成 17 年度計画通りの研究開発を実現した。 ・17 年度計画は充分に満足している。 	<ul style="list-style-type: none"> ・放射線影響は、機構内の多くの部署で重要なテーマであり、計算科学的手法と、生物学的研究との一層の連携が期待される。 ・①MD の研究は、現在さまざまな応用を目指して「産」「官」で進んでいるが、それら各分野での研究との関係が今ひとつ見えないような感じであった。 ・ワークフローの構築ツールの利用に加えて、微生物のスクリーニングから実証実験との連携が試みられており、機構内連携の実を挙げている。 ・多くの共同研究、協力研究を実施しており、評価できる。 	<ul style="list-style-type: none"> ・DNA 損傷を修復するタンパク質の機能を、現実的な時間内にシミュレーションで追いかけることに成功したことは大きな成果であり、今後、いろいろな角度から検討する必要がある。 ・従来の研究との対比理解が十分できなかったが、従来は 1 ヶ月では 10 万原子から構成される系のシミュレーションしかできなかつたが、17 年度の研究により 20 万原子が構成される系の生体高分子シミュレーションが可能となったという理解で正しければ、この結果は優れた成果と言えると考えます。 ・比較的短時間での放射線抵抗性原因遺伝子候補を同定可能とするワークフローを確立したこと。 ・巨大な生体高分子のシミュレーション実現への道を示したこと。 ・ゲノム情報解析用データベースの構築を完了された点、評価できる。 	<ul style="list-style-type: none"> ・専門外なので、特に質問をせず推移したのでピントが外れているかもしれないが、この研究の JAEA の中の位置づけをもう少し説明して欲しかった。 ・すでに公になっている 350 種類以上の微生物菌株のゲノム配列の生物学的意味の解明への挑戦が続いている。例えば、1997 年にゲノムシークエンシングが完了した大腸菌ゲノムについてさえ、2005 年の国際ワークショップを経て配列データの解釈（アノテーション）が改訂された状況である。したがって、特定の機能をもたらす遺伝子を同定し、しかもその動的な振舞いを比較的長い時間にわたりシミュレーション可能とする技術は重要である。 ・次年度以降、低線量放射線影響を実際に解明するには、どの程度の規模の分子シミュレーションをすればよいかについて検討してほしい。
<p>【年度計画】</p> <p>超高速ネットワークコンピューティングの技術開発については、グリッドミドル・ソフトウェアにおける TCP/IP 高速ネットワーク通信処理技術の開発を進め、ファイアウォールを透過した通信の速度を 2 倍にする。</p> <p>次世代ハードウェア技術による専用シミュレータ基盤技術の開発については、従来の 100 倍以上高速な流体計算アルゴリズムを開発し、現行汎用計算機（128CPU）を用いて 1 秒以下の計算実行を達成する。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・グリッド環境における分散処理は、これまで研究が進められてきたが、本年度においても、所期の計画を達成したものと思われる。 ・モデル解析に基づく計算高速化のアイデアが生まれた段階で、次のステップを模索している状況であると思われる。 ・計画通り進行中と考えます。 ・17 年度計画は充分に満足しています。研究内容はしっかりとっています。 	<ul style="list-style-type: none"> ・専用シミュレータがこのような高速計算にどこまで有効かは議論のあるところであります、大学や他の独立法人等の機構外の研究機関とも連携をとって検討を進めいくことが必要であろう。 ・①専用シミュレータについては、IC チップメーカーとの連携を進める必要があるのではないか。 ・②TCP/IP 高速通信技術と専用シミュレータの有機的な関連について不明である。 ・協力研究、委託研究を実施されていますが、今後、ITER の国際協力を目指し、他のシミュレーションセンターとの協力を目指してほしい。 	<ul style="list-style-type: none"> ・並列化とアルゴリズムの改良により、流体シミュレーションにおいて、大きな高速化を達成したことは優れた成果である。 ・解析モデルの構築と計算手法の提案に独創性がある。 ・地球シミュレータの高度な利用技術実績（ゴードンベル賞ノミネート） ・従来の ERATOJ 方式（1 プロセッサ）に比べ、MARG2D 方式（64 プロセッサ）で 100 倍以上の高速化を達成した点。 ・安定性の判定方式に対した成果は優れている。 	<ul style="list-style-type: none"> ・次世代ハードウェア技術による専用シミュレータ基盤技術の開発において、FPGA、新メモリデバイスの利用というキーワードをお聞きしましたが、計画通り、低コスト、小サイズ、低消費電力を達成するシミュレータを構築するためには、可能な限り早い時点でシステムアーキテクチャを考案していくことが必要と考えます。 ・導出された成果を基に、海外との協力を目指してほしい。
<p>中期計画・年度計画にとらわれず、全体を通じて、当該分野の研究開発についてコメント（今後の方向性、改善点、その他）があればご記入の程お願いします。</p>				<ul style="list-style-type: none"> ・システム計算科学センターでは、総体として大きな計算資源を有しております、これは大きなパワーであるが、計算機の発達は日進月歩であり、今後の方向性をみすえて将来計画を立てておくことが必要

				<p>であろう。専用プロセッサも一つの方向であるが、その利点と欠点などを分析し、「京速コンピュータ」時代に備えることが必須であろう。</p> <ul style="list-style-type: none">・動燃でも計算科学的手法についてはかなりの研究が行われていたが、サイクル機構になって実務中心になり、研究的側面が後退したと思われる。もし、そのような芽が残っているなら、今回統合を考慮した体制整備として、このような分野の人材を再発掘し、研究体制の再構築を行なってもよいのではないか。・基礎技術とその応用の間の関係がより明確になるように研究を計画し進められると良いが、理学的な興味からの研究と、工学的な創造性の追求を両立させることはなかなか難しい課題である。計算科学センターにおいて、この点について両者の好ましい相互関係の構築を期待したい。・グリッド、次世代ハードウェア技術による専用シミュレータ基盤技術等の情報系の研究においては、技術動向の把握、目標の設定等、情報系研究者との意見交換をさらに充実させると、さらに早期に役立つ研究・開発になるのではないかと考えます。・グリッド技術、シミュレーション技術の開発については、順調に進んでいます。・但し、今後実験データとの比較によるシミュレーションの検証が必要と考えます。
--	--	--	--	---

付録 平成17年度シミュレーション工学研究予算及び人員

①研究開発の予算（業務費、施設運転費等を除く）

(a)原子力機構予算

- 高度計算機技術開発室 105,535千円（技術協力員等の入件費を含む）
- シミュレーション技術開発室 53,114千円（技術協力員等の入件費を含む）

(b)外部資金

- 科研費（4件、3,540千円）
- 原子力安全基盤機構の競争的資金（1件、1,800千円）
- 科学技術振興機構の競争的資金（3件、69,650千円）
- 高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所より研究受託（1件、4,950千円）

②実施体制・従事人員

室	プロパ ー職員		出 向 職 員	技 術 協 力 員	客 員 研 究 員	定 年 後 嘱 託	臨 時 要 職 員	常 勤 職 員	人 材 派 遣	請 負 作 業 員	特 別 研 究 生	特 別 研 究 員	任 期 付 研 究 員	博 士 研 究 員	合 計
	機 構 内 勤 務	外 部 出 向													
高度計算機技術開発室	5	1	1	5	0	0	0	0	0	0	1	0	4	2	19
シミュレーション技術開発室	12	0	0	1	1	0	0	0	0	0	1	0	1	1	17
合計	17	1	1	6	1	0	0	0	0	0	2	0	5	3	

※ 研究開発を担当する室は高度計算機技術開発室及びシミュレーション技術開発室である。実質研究開発人員としては、26名（外部出向中職員、技術協力員、客員研究員、特別研究生を除く）。

付録 平成17年度シミュレーション工学研究活動実績一覧

1. 研究論文、査読付き会議論文等

室	研究内容	研究論文	研究発表・講演
高度計算機技術開発室	グリッド技術開発、超高速ネットワーク技術開発	2 (2)	3 (1)
	耐震計算科学技術開発	3 (4)	2 (0)
	専用シミュレータ基盤技術開発	0 (3)	0 (0)
シミュレーション技術開発室	材料シミュレーション技術開発	8 (7)	1 (0)
	生命情報解析技術開発	6 (1)	0 (0)
合計		19 (17)	6 (1)

※括弧内は投稿中の数字を表す

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発】

- ・ 中島憲宏、大野暢亮、鈴木喜雄、呉田昌俊
 「没入型 VR 装置における並列ボリュームレンダリング」
 電気学会論文誌 C、Vol. 124、No. 10、2197-2198
- ・ 鈴木喜雄、竹島由里子、大野暢亮、小山田耕二
 「球面サンプリング法を用いたボリュームレンダリングの没入型 VR 装置への適用」
 日本バーチャルリアリティ学会論文誌、Vol. 10、No. 2, 231-240
- ・ 樋口健二、大谷孝之、長谷川幸弘、鈴木喜雄、山岸信寛、木村和幸、青柳哲雄、中島憲宏、
 福田正大、今村俊幸、矢川元基
 “Development of a virtual research environment in ITBL project”
 International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications
- ・ Y. Shu, N. Nakajima
 “Development of a quake-proof information inference system by using data mining technology”
 11th International Conference on Human-Computer Interaction (HCI International 2005)
- ・ Y. Shu, N. Nakajima
 “Building plant quake-proof information inference system based on hybrid data mining approach”
 1st International Workshop on Risk Management System with Intelligent Data Analysis
 (RMDA 2005) in Conjunction with 19th Annual Conference of the Japanese Society for
 Artificial Intelligence (JSAI 2005)
- ・ Y. Shu, K. Furuta
 “An Inference Method of Team Situation Awareness Based on Mutual Awareness”
 Cognition, Technology and Work, Vol. 7, No. 4
- ・ Y. Shu

“Analysis of Power Plant Quake-Proof Information based on Hybrid Data Mining Method”
Advanced Engineering Informatics (submitted for publication)

- Y. Suzuki, T. Minami, M. Tani, and N. Nakajima
“Interoperability UNICORE and ITBL”
WCGC2006 Conference (submitted for publication)

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】

- M. Ida
“Avoided crossings in three coupled oscillators as a model system of acoustic bubbles”
Physical Review E, Vol. 72, No. 3
- M. Ida
“Phase properties and interaction force of acoustically interacting bubbles; A Complementary study of the transition frequency”
Physics of Fluids, Vol. 17, No. 9
- 宮崎明美、川口健一
「ラチス構造物の波動伝播特性に関する実験的研究」
日本建築学会構造系論文集、Vol. 597、69-76
- 伊波あかね、松原仁、伊良波繁雄、神田康行
「三次元有限要素法を用いたアンカー擁壁の設計」
コンクリート工学年次大会 2005
- 篠原主勲、奥田洋司、中島憲宏、井田真人
「パラメータサーベイ型並列随伴変数法による形状最適化」
日本機械学会第 17 回計算力学講演会、仙台、2005 年 11 月
講演論文集 561-562 (2005)
- A. Nishida
“WAVE PROPAGATION PROPERTIES OF FRAME TRUCTURES -Formulation for Three Dimensional Frame Structures-”
JSME International Journal (Series B) (submitted for publication)
- 西田明美、松原仁、田栄、羽間収、鈴木喜雄、中島憲弘、谷正之
「原子力プラントのための 3 次元仮想振動台の構築—組立構造解析法による巨大施設解析システムの提案ー」
日本原子力学会和文論文誌 (投稿中)
- 松原仁、羽間収、田栄、西田明美、中島憲宏、谷正之
「原子力プラントの組立構造解析 第 1 報：組立構造解析の提案」
日本計算工学会論文集 (投稿中)
- 羽間収、松原仁、田栄、西田明美、中島憲宏、谷正之
「原子力プラントの組立構造解析 第 2 報：組立構造解析の実現」
日本計算工学会論文集 (投稿中)

【高度計算機技術開発室・専用シミュレータ基盤技術開発】

- N. Aiba, S. Tokuda, T. Ishizawa, M. Okamoto
“Extension of the Newcomb equation into the vacuum for the stability analysis of tokamak edge plasmas”
Computer Physics Communications (submitted for publication)
- N. Aiba, S. Tokuda, et al.
“Analysis of an aspect ratio effect on the stability of external MHD modes in tokamaks with Newcomb equation”
Accepted to J. Plasma Phys.
- M. Furukawa, D. Sakata, Z. Yoshida, S. Tokuda
“Energy transfer among coupled oscillators representing a ballooning mode in toroidally rotating tokamak”
Accepted to J. Plasma Phys.

【シミュレーション技術開発室・材料シミュレーション】

- M. Shiga, W. Shinoda
“Calculation of heat capacities of light and heavy water by path integral molecular dynamics”
Journal of Chemical Physics, Vol. 123, No. 13 (2005) 134502-134509
- T. Watanabe, K. Ebihara
“Numerical simulation of droplet flows and evaluation of interfacial area”
Journal of Fluids Engineering, Vol. 124, No. 3, 576-583
- M. Itakura, H. Kaburaki, et al
“Branching mechanism of intergranular crack propagation in three dimensions”
Physical Review E, Vol. 71, No. 5, 0551021-0551024
- M. Machida, S. Yamada, Y. Ohashi and H. Matsumoto
“Novel superfluidity in a trapped gas of fermi atoms with repulsive interaction loaded on an optical lattice”
Physical. Review Letters. Vol. 93, No. 20
- M. Yamaguchi, M. Shiga, H. Kaburaki
“Response to comment on "Grain Boundary Decohesion by Impurity Segregation in a Nickel-Sulfur System”
Science, Vol. 309, No. 5741
- 山田進、町田昌彦、今村俊幸
「強相関フェルミ原子ガスの量子物性； 物性予測への新しいアプローチ」
応用数理、Vol. 15、No. 2、153-158
- 佐々成正、山田進、町田昌彦、荒川忠一
「代数的多重格子法による超伝導 Ginzburg-Landau 方程式の解法」
日本計算工学会論文集、Vol. 7、83-87
- 山田進、今村俊幸、町田昌彦、荒川忠一

「共有分散メモリ型並列計算機における新規通信手法」

日本計算工学会論文集、Vol. 7、243-252

- T. Watanabe
“Numerical simulation of droplet dynamics using level set method”
11th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-11)
- M. Machida, S. Yamada, Y. Ohashi and H. Matsumoto
“Reply to comment on “Novel superfluidity in a trapped gas of fermi atoms with repulsive interaction loaded on an optical lattice””
Physical Review Letters, Vol. 95, No. 21
- S. Yamada, T. Imamura and M. Machida
“16.447Tflops and 159-Billion-dimensional Exact-diagonalization for Trapped Fermion-Hubbard Model on the Earth Simulator”
SuperComputing SC05
- M. Machida, T. Koyama and Y. Ohashi
“Vortex structure in weak to strong coupling superconductors: Crossover from BCS to BEC”
18-th International Symposium on Superconductivity Physica C
- M. Shiga and M. Tachikawa
“Accelerating combined quantum mechanical /molecular mechanical molecular dynamics using multiple-time scale approach”
Journal of Chemical Physics (submitted for publication)
- A. Machida, S. Yamada, Y. Ohashi and H. Matsumoto
“Edge Boundary Effect for Josephson Vortices in Finite-size Layered High-Tc Superconductors”
Physical Review Letters (submitted for publication)
- A. Machida, S. Yamada, Y. Ohashi and H. Matsumoto
“Novel Pairing in the Hubbard Model with Confinement Potential”
Physica C (submitted for publication)
- K. Ebihara
“Dynamical Pressure Anisotropy in Liquid-gas Model of Lattice-Gas”
International Journal of Modern Physics C

【シミュレーション技術開発室・生命情報解析】

- S. Matsugi, et al
“Sequence analysis of the gliding protein Gli349 in Mycoplasma mobile”
Biophysics, Vol. 1, 33-43
- Y. Yonetani
“A severe artifact in simulation of liquid water using a long cut-off length: appearance of a strange layer structure”
Chemical physics letters, Vol. 406 46-53 (2005)

- K. Nakamura and N. Go
“Function and molecular evolution of multicopper blue proteins”
Cellular and Molecular Life Science, Vol. 62, No. 18 2050-2060 (2005)
- A. Matsumoto, et al
“Normal-mode analysis of circular DNA at the base-pair level, 1; Comparison of computed motions with the predicted behavior of an ideal elastic rod”
Journal of Chemical Theory and Computation, Vol. 1, No. 1, 117-129
- A. Matsumoto, et al
“Normal-mode analysis of circular DNA at the base-pair level, 2; Large-scale configurational transformation of a naturally curved molecule”
Journal of Chemical Theory and Computation, Vol. 1, No. 1, 130-142
- S. Metsugi
“Influence of multidimensionality on convergence of sampling in protein simulation”
Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 74, No. 6, 1865-1870
- 由良敬、山口晶大、郷通子
「全ゲノムを対象とした蛋白質立体構造データベースの公開」
蛋白質核酸酵素（投稿中）

2. 国際会議、国内会議での発表等

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発】

- 鈴木喜雄
「核融合グリッドへの ITBL の適用」
核融合実験のデータ処理に関する次世代システム技術の検討研究会、岐阜、2006 年 3 月

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】

- M. Ida
“Multibubble Dynamics: Phase, Sift, Transition Frequency and Avoided Crossing”
THE 2005 APS Division of Fluid Dynamics 58th Annual meeting, (20-22, November 2005 Chicago, U.S.A) Bulletin of The American Physical Society, DFD 2005, Vol. 50, No. 9 249 (2005)
- O. Hazama, H. Matsubara, R. Tian, A. Nishida, Y. Suzuki, M. Tani and N. Nakajima
“Towards Construction of a Numerical Testbed for Nuclear Power Plants”
7th MpCCI User Forum, (21-22, February 2006 Sankt Augustin, Germany) Proceedings of 7th MpCCI User Forum (in press) (2006)
- 篠原主勲、奥田洋司、伊東聰、中島憲宏、井田真人
「随伴変数法による形状最適化技術」
第 19 回数値流体力学シンポジウム、東京、2005 年 12 月
Web 講演論文集 214 (2005)
- 篠原主勲、奥田洋司、伊東聰、中島憲宏、井田真人

「随伴変数法による形状最適化とその ITBL グリッド環境への適用」
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、東京、2006年1月
HPCS2006 ポスター論文集 46 (2006)

【高度計算機技術開発室・専用シミュレータ基盤技術開発】

- N. Aiba, S. Tokuda, et al
“Ideal MHD stability code MARG2D for the analysis of external MHD modes in JT-60U plasma”
47th APS Division of Plasma Physics Meeting (24-27, Oct. Denver USA).
- S. Tokuda
“Extension of the MARG2D code for external MHD mode analysis”
MHD 不安定性に関する日米ワークショップ、那珂研、2006年2月

【シミュレーション技術開発室・材料シミュレーション】

- M. Machida
“Numerical Experiments for Non-equilibrium Superconducting Dynamics at the Transition Edge in MgB2”
Nano-Virtual-Labs Joint Workshop on Superconductivity (NVLS2005) (Awaji-shima, Dec. 19-22 2005)
- M. Machida, Y. Ohashi and T. Koyama
“Vortex Structure and Dynamics in Fermi Superfluid Gas”
2006 American Physical Society Marchi Meeting, 13-17, March 2006, Baltimore U.S.A.
- T. Suzudo, M. Itakura and H. Kaburaki
“Meso-Scale Approaches to the Simulation of the Microstructure Formation Observed at Higi-Burnup UO2 fuel”
Innovative Nanoscale Approach to Dynamic Studies of Materials (Okinawa, Jan. 9-14 2006)
- F. Shimizu, S. Ogata, H. Kaburaki, and J. Li
“Approaching the Universal Yield Point of Bulk Metallic Glasses from Molecular Dynamics Simulations”
Materials Research Society 2005 Fall Meeting, Nov. 2005, Boston MA, U.S.A. 665 (2005) (Z16.1)
- K. Ebihara and H. Kaburaki
“Lattice boltzmann simulation of solution chemistry for crevice corrosion”
The 14th International conference on discrete simulation of fluid dynamics in complex systems (Aug. 2005)
- H. Kaburaki, et al
“Macroscopic simulations on the evolution of system of dislocations in the presence of a grain boundary”
Micromechanics and microstructure evolution conference (Sep. 2005)

- T. Suzudo, et al
“Meso-Scale Approaches to the Simulation of the Microstructure Formation Observed at High-Burnup UO₂ fuel”
New Crossover Workshop-2 (Oct. 2005)
- 海老原健一
「格子ボルツマン法による水平層二相流の界面成長及び変形に関する研究」
日本原子力学会秋季セミナー「Dr. フォーラム」、2005年9月
- T. Suzudo, et al
“Cellular automaton model of fission gas behavior in nuclear fuel”
Micromechanics and microstructure evolution conference (Sep. 2005)
- H. Kaburaki, et al
“Molecular dynamics and quasi-two dimensional dislocation dynamics simulations on the hardening mechanism of FCC metals”
Materials Research Society 2005 Fall Meeting, Nov. 2005, Boston MA, U.S.A. 665 (2005)
- H. Kaburaki, et al
“First-principles calculations on the embitterment mechanism of bcc iron grain boundaries by impurity segregation”
Materials Research Society 2005 Fall Meeting, Nov. 2005, Boston MA, U.S.A. 665 (2005)
- 鈴土知明、板倉充洋、蕪木英雄
「バブル形成および成長のモンテカルロシミュレーション」
(財)電力中央研究会 軽水炉材料の照射損傷機構に関する研究会、2005年10月
- 山口正剛、志賀基之、蕪木英雄
「リン偏析による鉄の粒界脆化—第一原理計算による研究—」
(財)電力中央研究会 軽水炉材料の照射損傷機構に関する研究会、2005年10月
- 山田進、今村俊之、町田昌彦
「地球シミュレータを用いた世界最大の固有値計算への挑戦」
日本機械学会第18回計算力学講演会、筑波、2005年11月
講演論文集 Vol. 5, No. 2, 235-236 (2005)
- 小山富男、町田晶彦、松本秀樹
「銅酸化物接合における固有ジョセフソン効果」
固体物理、Vol. 40, 107 (2005)
- 町田昌彦
「固有ジョセフソン接合における集団的巨視的量子トンネル現象」
東北大通研第17回ナノ・スピニ工学研究会、東北大通研、2006年1月
- 鈴土知明、板倉充洋、蕪木英雄、若井栄一
「バブル形成・成長の3次元モンテカルロシミュレーション」
日本原子力学会春の年会、2006年3月
- 町田昌彦、大橋洋士、小山富男
「フェルミ原子ガスにおける渦糸構造とダイナミクス」
日本物理学会春の大会、松山市 愛媛大学、2006年3月

【シミュレーション技術開発室・生命情報解析】

- ・ 米谷佳晃

「生体分子シミュレーションにおける長距離相互作用の扱いについて」

日本物理学会 2005 秋季大会、2005 年 9 月

- ・ 由良敬

「立体構造情報を取り込んだタンパク質機能推定-DNA 修復関連タンパク質を中心に-」

日本バイオインフォマティクス学会第一回プロテイン・インフォマティクスワークショッピング in 九州 10 月 9-10 日（招待講演）

- ・ M. Shionyu, K. Yura, A. Hijikata, T. Nakahara, K. Shinoda, A. Yamaguchi, K. Takahashi and M. Go

“Roles of alternative splicing for diversification of protein structure and function- Relationship between alternatively spliced regions and structural units -”

日本生物物理学会年会 生物物理 Vol. 45, Supplement 1 (2005) S23

- ・ Kim Oanh、由良敬、郷信広

「立体構造にもとづくタンパク質-RNA 相互作用面のデータベース解析」

日本生物物理学会第 43 回年会、北海道、2005 年 11 月

- ・ 松本淳

“The effect of local nucleotide structure on the global flexibility of circular DNA deduced from normal mode analysis”

日本生物物理学会第 43 回年会、北海道、2005 年 11 月

- ・ 由良敬

「低分解能生体超分子像からの原子構造構築技法の開発－知識ベースによるアプローチ」

日本生物物理学会第 43 回年会、北海道、2005 年 11 月

3. 研究報告書・技術報告書等

- ・ 中島 憲宏

「ネットワークコンピューティングにおけるデータ操作と効率的通信手段の考察」

東洋大学計算力学研究計算センタ一年報

- ・ 中島 憲宏

「ネットワークコンピューティングにおけるデータセキュリティ管制手段の考察」

東洋大学計算力学研究計算センタ一年報

- ・ 蕪木英雄

「放射線照射に伴う材料の物性変化と破壊の微視的シミュレーション」

平成 17 年度地球シミュレータ利用成果報告会、地球シミュレータセンター、2006 年 1 月

- ・ 町田昌彦

「超伝導ナノファブリケーションによる新奇物性と中性子検出デバイス開発のための超伝導ダイナミクスの研究」

平成 17 年度地球シミュレータ利用成果報告会、地球シミュレータセンター、2006 年 1 月

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- ・ 2005年11月15日(火)朝日新聞夕刊7面
「セ氏300度でも超伝導のまま 原子力機構など予測」
- ・ 2005年12月9日(金)科学新聞4面
「数値シミュレーション成果国際コンクールで受賞」

5. 研究発表会等の開催

- ・ 量子生命情報解析チームセミナー(計20回開催)
 - 10月4日:喜多恵子(京都大学農学研究科教授) 招待講演(機構内11名、機構外6名)
 - 10月11日:中川 洋(生体物質ダイナミクス研究グループ博士研究員) 招待講演(機構内11名、機構外5名)
 - 10月25日:八尾 徹(理化学研究所ゲノム科学総合研究センター研究員)(機構内10名、機構外6名)
 - 11月1日:宮 秀軍(奈良先端科学技術大学院研究員) 招待講演(機構内11名、機構外6名)
 - 11月8日:松本 淳(研究員) 講演(機構内11名、機構外5名)
 - 11月15日:森 一樹(長岡技術科学大学 生物系博士課程) 招待講演(機構内11名、機構外6名)
 - 11月27日:Florence Tama(アリゾナ大学生物物理学科助教授) 招待講演(機構内11名、機構外7名)
 - 12月6日:宮下 治(アリゾナ大学生物物理学科助教授) 招待講演(機構内11名、機構外7名)
 - 12月13日:福原直志(奈良先端科学技術大学院博士課程) 招待講演(機構内11名、機構外6名)
 - 12月20日:堤 遊(JST) 招待講演(機構内11名、機構外6名)
 - 1月10日:Wolfgang Doster(ミュンヘン工科大学教授) 招待講演(機構内11名、機構外6名)
 - 1月17日:Chai Li-Hong(Visitor by MEXT Nuclear Researchers Exchange Program) 講演(機構内11名、機構外5名)
 - 1月31日:中村建介(任期付研究員) 講演(機構内11名、機構外5名)
 - 2月7日:萩行正憲(大阪大学教授) 招待講演(機構内11名、機構外7名)
 - 2月14日:鈴木陽子(明星大学講師) 招待講演(機構内11名、機構外6名)
 - 2月21日:松本 淳(研究員) 出張報告講演(機構内9名、機構外5名)
 - 2月28日:湯淺 智(三菱スペースソフトウエア) 開発DB報告講演(機構内11名、機構外6名)
 - 3月7日:川端 猛(奈良先端科学技術大学院助教授) 招待講演(機構内11名、機構外6名)
 - 3月14日:石田 恒(量子ビーム応用研究部門研究員) 講演(機構内11名、機構外6名)

- 3月28日：Wilma K. Olson (Rutgers大学教授) 招待講演（機構内11名、機構外7名）
- 第13回CCSEワークショップ
2006年2月24日：「原子力分野における長時空・大規模計算」（機構内33名、機構外19名）

6. 受賞等

- 国際会議 SuperComputing SC05 にて、ゴードンベル賞ファイナリスト選出
S. Yamada, T. Imamura, M. Machida
“16.447Tflops and 159-Billion-dimensional Exact-diagonalization for Trapped Fermion-Hubbard Model on the Earth Simulator”
SC|05 (14-17 November 2005, Seattle, USA)
- 国際会議 SuperComputing SC05 の大規模解析技術コンクールにて、Honorable Mention 賞を受賞
N. Nakajima, A. Miyazaki, H. Matsubara, N. Yamagishi, T. Minami and Y. Nakajima
“Large-Scale Numerical Analysis of Nuclear Power Plant in Distributed Computational Environment”
SC|05 HPC Analytics Challenge Honorable Mention (14-17 November 2005, Seattle, USA)

7. 外部資金の獲得に関する事項

● 研究の受託

【シミュレーション技術開発室】

- 細胞内輸送と翻訳後修飾のバイオインフォマティクス（高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所） 4,950千円

● 競争的資金

室	予算額(千円) (件数)
高度計算機技術開発室	1,500 (1)
シミュレーション技術開発室	73,490 (7)

【高度計算機技術開発室】

- キャビテーション気泡群のための大規模シミュレータの開発及び理論解析（文部科学省：科研費（若手B）） 1,500千円

【シミュレーション技術開発室】

- 微細高温超電動構造におけるボルテックスの観察と操作（日本学術振興会：科研費（基盤B）） 300千円
- 量子原子気体における BEC/BCS 状態の理論的研究（日本学術振興会：科研費（基盤C）） 640千円
- 平成18年度高照射量領域の照射脆化予測—粒界・粒内照射損傷組織と確率論的健全性評価手法の調査（原子力安全基盤機構(JNES)） 1,800千円
- ナノファブリケーションによる新奇物性とその応用（科学技術振興機構：JST(CREST)） 600

千円

- 放射線治療の高度化のための超並列シミュレーションシステムの開発（科学技術振興機構：JST(CREST)） 40,400 千円
- 低分解生体超分子像からの原子構造構築技法（科学技術振興機構：JST(CREST)） 28,650 千円
- ダイナミックスと進化情報の融合による DNA 修復関連タンパク質の機能アミテーション（日本学術振興会：科研費(基盤C)） 1,100 千円

8. 産学官との連携に関する事項

室	研究内容	共同研究	協力研究	委託研究	受託研究
高度計算機技術開発室	グリッド技術開発	6	14	0	0
	耐震計算科学技術開発	0	0	0	0
	専用シミュレータ基盤技術開発	0	1	0	0
シミュレーション技術開発室	材料シミュレーション	4	11	0	0
	生命情報解析	2	8	0	1
情報システム利用推進室（成果の利用推進）		7	12	0	0
合計		19	46	0	1

● 共同研究

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発】

- 超高速コンピュータ網の形成に関する研究（情報・システム研究機構）
- ADVENTURE およびその機能強化版 ADVC を用いた ITBL 環境での大規模解析に関する研究（(株) アライドエンジニアリング）
- ITBL を使ったメカトロニクス設計支援に関する研究（(株) 日立製作所）
- グリッド基盤技術の効果的利用による高品位流体解析システムの実現に関する研究（宇宙航空研究開発機構）
- AVS/Express 並列化支援ツール開発に関する研究（(株) ケイ・ジー・ティー）
- 地盤解析におけるメッシュジェネレータ及び可視化システムに関する研究開発（理化学研究所）

【シミュレーション技術開発室・材料シミュレーション】

- 超伝導ナノファブリケーションによる新奇秩序とその応用に関する研究（科学技術振興機構）
- 数値実験環境による破壊の分子動力学シミュレーションの研究（(株)日本総合研究所）
- 粒界脆化シミュレーションのための超並列分子動力学の研究（産業技術総合研究所）

- 分子動力学法による金属材料の水素脆化割れ機構の研究（産業技術総合研究所）

【シミュレーション技術開発室・生命情報解析】

- 放射線治療の高度化のための超並列シミュレーションシステムの開発（科学技術振興機構）
- 低分解能生体超分子像からの原子構造構築技法（科学技術振興機構）

【情報システム利用推進室】

- 非優対角行列解法の開発及び行列ソルバーの ITBL 環境への移植と検証に関する研究（㈱ヴァイナス）
- ITBL 環境下における最新グラフィックス機能を使った超高速没入型可視化技術の開発に関する研究（㈱シリコンスタジオ）
- ITBL 環境を利用した Spring-8 での実験データベース共有化の検討 ((財) 高輝度放射光研究センター)
- ITBL 環境を利用したバイオ分野におけるビジネスモデルの検討（日本電気㈱）
- けいはんな地域におけるベンチャー育成のための ITBL 技術の利用普及の検討 ((財) 関西文化学術研究都市推進機構）
- ITBL 環境利用を目指した声道内気流の計算力学シミュレーション（㈱国際電気通信基礎技術研究所（ATR））
- ITBL を利用した管群内乱流の大規模数値シミュレーション（原子燃料工業㈱）

● 協力研究

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発】

- データベースとルールベースを用いたグリッドコンピューティングフロントエンドの開発（九州大学）
- 複数のスーパーコンピューターを利用したナノテクシミュレーション環境の構築（東北大金属材料研究所）
- 統合型津波情報解析システムの研究（東北大学災害制御研究センター）
- ネットワークコンピューティングのための最適なユーザインターフェースの概念設計（京都大学）
- 分散計算環境下での固有値問題の理論と実問題への応用に関する研究（電気通信大学）
- ネットワークコンピューティング環境へのアプリケーション適用性の検証（東京大学生産技術研究所）
- FrontFlow/Red を用いた ITBL 環境下での大規模流体解析に関する研究（北海道大学）
- 統合シミュレーション技術を用いた ITBL 環境下における生体シミュレーションに関する研究（北陸先端科学技術大学院大学）
- ADVENTURE を用いた ITBL 上の研究コミュニティ・システム開発に関する研究（東京大学）
- JAERI-MESH を用いた並列有限要素解析とその HPC 教育への取り組みに関する研究（東京大学）
- 核融合研究における ITBL 上の研究コミュニティ・システム開発に関する研究（九州大学）

- ・ バーチャルリアリティ装置を用いた可視化システムに関する研究開発（京都大学）
- ・ ITBL システムを利用した Pu 含有燃料の MD 法による大規模材料シミュレーション（九州大学）
- ・ ITBL を活用した先進的大規模計算解析システム開発に関する研究（山口大学）

【高度計算機技術開発室・専用シミュレータ基盤技術開発】

- ・ 核融合プラズマにおける大規模行列の専用並列計算とその応用に関する研究（核融合科学研究所）

【シミュレーション技術開発室・材料シミュレーション】

- ・ MHD (Magnetohydrodynamics) コードの並列化と性能評価の研究（名古屋大学太陽地球環境研究所）
- ・ 応用分野におけるメッセージパッシングによる並列プログラミング手法の研究（東京大学）
- ・ 並列数値計算ライブラリ PARCEL の性能の評価及び向上に関する研究（筑波大学、九州大学）
- ・ 壁乱流の数値計算アルゴリズム及び乱流モデルの研究（名古屋工業大学）
- ・ 数値流体力学の超並列化・ベクトル化に関する研究（東京大学）
- ・ 超伝導体新奇秩序状態に関する数値シミュレーション技法の開発（東北大学金属材料研究所）
- ・ 超伝導体新奇秩序状態に関する数値シミュレーション技法の開発（大阪府立大学）
- ・ フラグメント分子軌道法を用いた第一原理分子動力学法の開発と応用（立教大学）
- ・ 分子動力学法による塑性現象の研究（帝京科学大学）
- ・ ハイブリッド分子動力学法による破壊の研究（東京大学）
- ・ 格子流体法の大規模システムへの適用に関する研究（東北大学電気通信研究所）

【シミュレーション技術開発室・生命情報解析】

- ・ 生物体質分子運動のシミュレーションシステム開発（東京大学分子細胞生物学研究所）
- ・ ITBL を利用した生命情報解析研究(A)（岡崎国立共同研究機構分子科学研究所）
- ・ ITBL を利用した生命情報解析研究(B)（東京大学分子細胞生物学研究所）
- ・ ITBL を利用した生命情報解析研究(C)（総合研究大学院大学）
- ・ ITBL を利用した生命情報解析研究(D)（長浜バイオ大学）
- ・ ITBL を利用した生命情報解析研究(E)（名古屋大学）
- ・ ITBL を利用した生命情報解析研究(F)（長岡技術科学大学）
- ・ ITBL を応用したタンパク質高度解析システムの研究（奈良先端科学技術大学院大学）

【情報システム利用推進室】

- ・ ITBL 利用を目指した *in silico* Human Hip Joint における股関節の有限要素法開発（大阪大学）
- ・ ITBL 環境を利用した HPC ミドルウェアの開発に関する研究（東京大学）
- ・ ITBL 環境における非圧縮性流体解析手法に関する研究（京都工芸繊維大学）
- ・ ITBL 環境でのミクローマクロ統合流動シミュレーション技術の研究（京都工芸繊維大学）

- ・ ITBL 環境を利用した超並列大規模非線形挙動解析に関する研究（大阪市立大学）
- ・ ITBL 環境を利用した第一原理計算による水素貯蔵の物性解析（大阪大学）
- ・ ITBL 環境における光量子解析コード群の共有化整備（大阪大学）
- ・ ITBL 環境における大規模熱流動シミュレーション（京都大学）
- ・ ITBL 環境における物性解析・材料設計コード群の共有化整備（大阪大学）
- ・ グリッドシステムとしての ITBL 環境に対する性能評価検討（京都大学・奈良女子大・関西大学）
- ・ ITBL 環境における分子軌道法コード群の共有化の検討（大阪大学）
- ・ スーパーコンピュータの協調利用に関する基盤ソフトウェアの研究（京都大学）

● 受託研究

【シミュレーション技術開発室・生命情報解析】

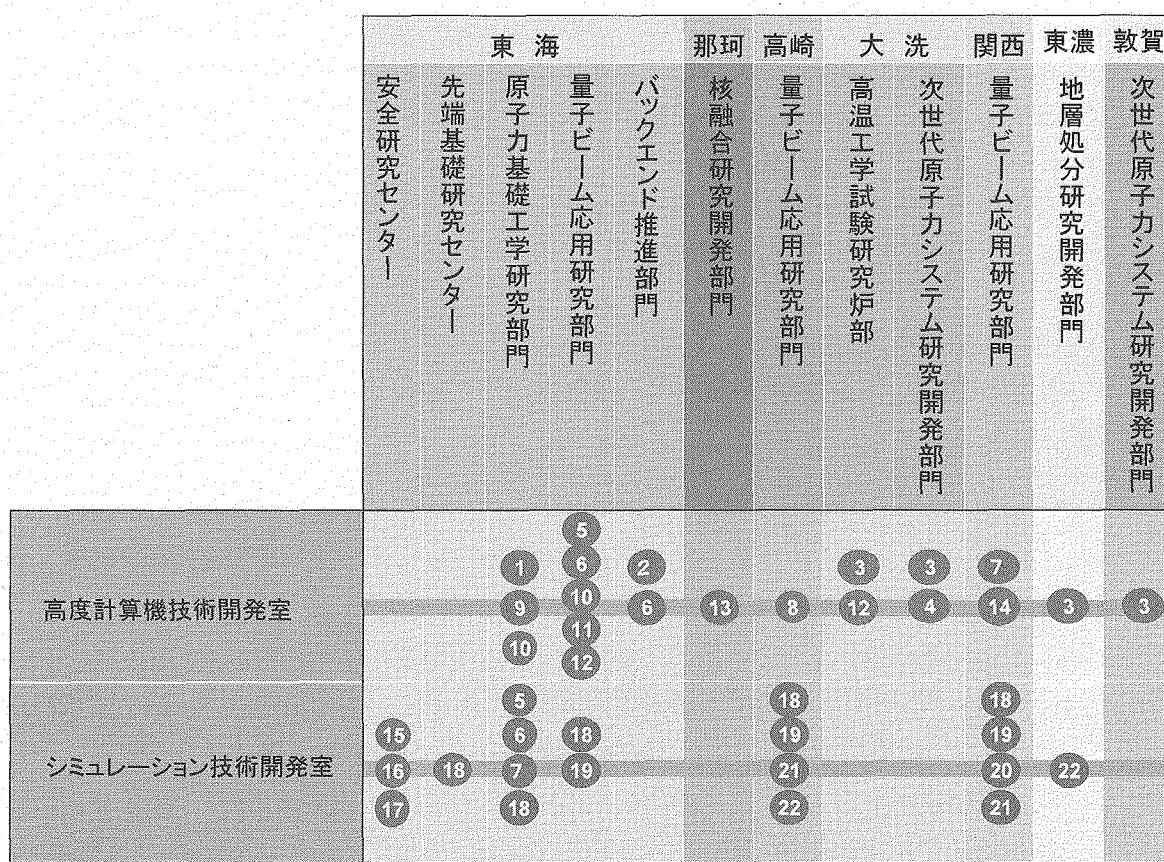
- ・ 細胞内輸送と翻訳後修飾のバイオインフォマティクス（高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所）

9. 原子力機構内の他部門との連携に関する事項

研究の実施にあたっては、原子力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 22 件に及ぶ機構内連携を実施した。

① 損傷頻度評価	⑫ J-PARCビームライン解析コードの整備
② JPDRの情報データ化	⑬ ITBLを用いた核融合遠隔実験
③ 耐震解析	⑭ 光量子解析コード群の共有化整備
④ 水素製造	⑮ 照射硬化と破壊に関する数値シミュレーション研究
⑤ 水銀ターゲットの熱、構造解析	⑯ 照射燃料に関する数値シミュレーション研究
⑥ 応力腐食割れ、照射材料の数値シミュレーション研究	⑰ ROSA計画に関する実験と解析
⑦ 自由電子レーザーによるシリコン同位体の分離	⑱ 低レベル放射線のDNAへの影響観察とシミュレーション、タンパク質への影響シミュレーション
⑧ 高温中性子照射、Si-C 半導体性能向上、第一原理計算の並列化手法の研究	⑲ DNA修復タンパク質機能発現機構解明、タンパク質機能予測、DNA修復関連タンパク質データベース開発
⑨ 数値環境システムをITBL上に構築	⑳ 生体分子シミュレーションコード開発
⑩ 沸騰流のボリュームレンダリング可視化	㉑ 放射線抵抗性細菌デノコッカス・グラントディスのゲノム解読とゲノムデータベースの開発
㉑ 情報システムの設計	㉒ 新種放射線抵抗性細菌の地殻内生物圏からの分離同定

連携している機構内組織については次のとおり。



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
物質量	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 基本単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m ²
立体	積立法メートル	m ³
速度	メートル毎秒	m/s
加速速度	メートル毎秒毎秒	m/s ²
波数	メートル毎メートル	m ⁻¹
密度(質量密度)	キログラム毎立法メートル	kg/m ³
質量体積(体積)	立法メートル毎キログラム	m ³ /kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m ²
磁界の強さ	アンペア毎メートル	A/m
(物質量)濃度	モル毎立方メートル	mol/m ³
輝度	カンデラ毎平方メートル	cd/m ²
屈折率	(数の)1	1

表5. SI 接頭語

乗数	接頭語	記号	乗数	接頭語	記号
10 ²¹	ヨタ	Y	10 ⁻¹	デシ	d
10 ²¹	ゼタ	Z	10 ⁻²	セント	c
10 ¹⁸	エクサ	E	10 ⁻³	ミリ	m
10 ¹⁵	ペタ	P	10 ⁻⁶	マイクロ	μ
10 ¹²	テラ	T	10 ⁻⁹	ナノ	n
10 ⁹	ギガ	G	10 ⁻¹²	ピコ	p
10 ⁶	メガ	M	10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ³	キロ	k	10 ⁻¹⁸	アト	a
10 ²	ヘクト	h	10 ⁻²¹	ゼット	z
10 ¹	デカ	da	10 ⁻²⁴	ヨクト	y

表3. 固有の名称とその独自の記号で表される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
平面角	ラジアン ^(a)	rad	
立体角	ステラジアン ^(a)	sr ^(c)	
周波数	ヘルツ	Hz	
压力	ニュートン	N	
エネルギー、仕事、熱量	パスカル	Pa	N/m ²
工作效率、放射束	ワット	W	N·m
電荷、電気量	クーロン	C	J/s
電位差(電圧)、起電力	ボルト	V	W/A
静電容量	フアード	F	C/V
電気抵抗	オーム	Ω	m ⁻² ·kg ⁻¹ ·s ⁴ ·A ²
コンダクタンス	スイメンス	S	V/A
磁束密度	テスラ	T	A/V
インダクタンス	ヘンリイ	H	wb/m ²
セルシウス温度	セルシウス度 ^(d)	°C	Wb/A
光束度	ルーメン	lm	kg ⁻² ·A ⁻¹
(放射性核種の)放射能	ベクレル	Bq	cd·sr ^(c)
吸収線量、質量エネルギー	グレイ	Gy	lm/m ²
ギ一分与、カーマ			cd ² ·m ⁻²
線量当量、周辺線量当量			cd·m ⁻²
方向性線量当量、個人線量当量、組織線量当量	シーベルト	Sv	J/kg
			m ² ·s ⁻²

表6. 国際単位系と併用されるが国際単位系に属さない単位

名称	記号	SI 単位による値
分	min	1 min=60s
時	h	1h = 60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86400 s
度	°	1° = (π/180) rad
分	'	1' = (1/60)° = (π/10800) rad
秒	"	1" = (1/60)' = (π/648000) rad
リットル	l, L	1l=1 dm ³ =10 ⁻³ m ³
トン	t	1t=10 ³ kg
ネーバ	Np	1Np=1
ベル	B	1B=(1/2)ln10(Np)

表7. 国際単位系と併用されこれに属さない単位で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 単位であらわされる数値
電子ボルト	eV	1eV=1.60217733(49)×10 ⁻¹⁹ J
統一原子質量単位	u	1u=1.6605402(10)×10 ⁻²⁷ kg
天文単位	ua	1ua=1.49597870691(30)×10 ¹¹ m

表8. 国際単位系に属さないが国際単位系と併用されるその他の単位

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
海里	里	1海里=1852m
ノット	ト	1ノット=1海里毎時=(1852/3600)m/s
アール	a	1a=1 dam ² =10 ⁴ m ²
ヘクタール	ha	1ha=1 hm ² =10 ⁴ m ²
バール	bar	1bar=0.1MPa=100kPa=1000hPa=10 ⁵ Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1nm=10 ⁻¹⁰ m
バン	b	1b=100fm ² =10 ⁻²⁸ m ²

表9. 固有の名称を含むCGS組立単位

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
エルグ	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J
ダイン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N
ボアズ	P	1 P=1 dyn·s/cm ² =0.1Pa·s
ストーカス	St	1 St=1cm ² /s=10 ⁻⁴ m ² /s
ガウス	G	1 G=10 ⁻⁴ T
エルステッド	Oe	1 Oe=(1000/4π)A/m
マクスウェル	Mx	1 Mx=10 ⁻⁸ Wb
チルブ	sb	1 sb=1cd/cm ² =10 ⁴ cd/m ²
ホタル	ph	1 ph=10 ¹² lx
ガル	Gal	1 Gal=1cm/s ² =10 ⁻² m/s ²

表10. 国際単位に属さないその他の単位の例

名称	記号	SI 単位であらわされる数値
キュリ	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq
レントゲン	R	1 R=2.58×10 ⁻⁴ C/kg
ラド	rad	1 rad=1cGy=10 ⁻² Gy
レム	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv
X線単位	X unit	1X unit=1.002×10 ⁻⁴ nm
ガンマ	γ	1 γ=1 nT=10 ⁻⁴ T
ジアンスキー	Jy	1 Jy=10 ⁻²⁶ W·m ² ·Hz ⁻¹
フェルミ	1 fermi=1 fm=10 ⁻¹⁵ m	
メートル系カラット	1 metric carat=200 mg=2×10 ⁻⁴ kg	
トル	Torr	1 Torr=(101325/760) Pa
標準大気圧	1 atm	1 atm=101325 Pa
カロリ	cal	1 cal=1J/m ² s=10 ⁻² m ² /s ²
ミクロ	μ	1 μ=1pm=10 ⁻⁶ m