



平成18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 FY2006

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

JAEA-Review

February 2008

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っ
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

© Japan Atomic Energy Agency, 2008

平成 18 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 12 月 19 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 18 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 FY2006

Center for Computational Science & e-Systems

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

(Received December 19, 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 advices for the assistance 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 FY2006.

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 18 年度計画	3
2. 1 中期計画	3
2. 2 平成 18 年度計画	3
3. 平成 18 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	17
付録 平成 18 年度シミュレーション工学研究予算及び人員	25
平成 18 年度シミュレーション工学研究活動実績一覧	26

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 FY2006	3
3. R&D Achievements at CCSE/JAEA	5
4. Result of the Evaluation and Comments	17
Appendix Budget and Human Resource	25
R&D Achievements	26

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)

佐々 成正 (システム計算科学センター 情報システム利用推進室(兼務))

鈴木 喜雄 (システム計算科学センター 情報システム利用推進室(兼務))

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 18 年度の業務運営に関する計画（平成 18 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）。

平成18年度独法評価の評定基準		平成17年度以前の評定基準	
平成18年度評定基準		平成17年度以前の評定基準	
S	特に優れた実績を上げている	S	特に優れた業績をあげている。
A	中期計画通りまたは上回っている。(当該年度に実施すべき中期計画の達成度が100%以上)	A	計画通りに進んでいる、又は、計画を上回り、中期計画を十分に達成し得る可能性が高いと判断される。
B	中期計画通りに履行していると言えない面もあるが、工夫や努力によって中期目標を達成しうる。(当該年度に実施すべき中期計画の達成度が70%以上100%未満)	B	計画通りに進んでいるとは言えない面もあるが、工夫もしくは努力によって、中期計画を達成し得ると判断される。
C	中期計画の履行が遅れており、業務の改善が必要。(当該年度に実施すべき中期計画の達成度が70%未満)	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と判断される。
F	独立行政法人評価委員会による業務改善の勧告		

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

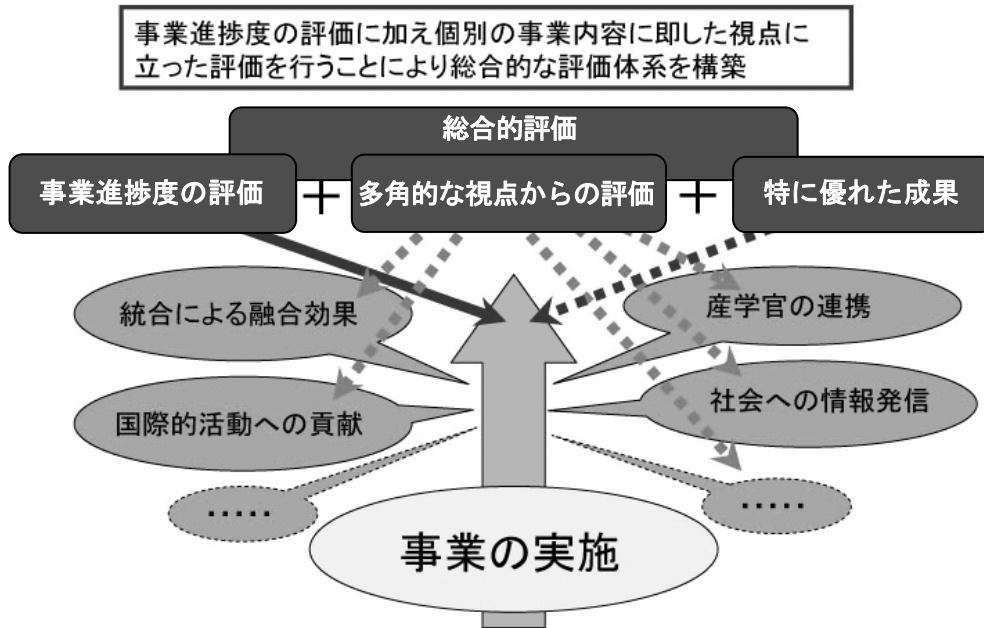


図 1. 2 機構における「評価の視点」のイメージ

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行われているか、(2)統合効果を生かし、機構内の他の部門との連携が十分行われているか、(3)成果の活用を視野に入れ、ステークホルダーを意識した研究開発活動が進められているかの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。

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。
	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行われているか？	これらの項目で優れた成果があれば、評価はSに近づく。 【加点項目】
		★統合効果を生かし、機構内の他の部門との連携が十分行われているか？	
		★成果の活用を視野に入れ、ステークホルダーを意識した研究開発活動が進められているか？	
特に優れた成果			

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 18 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、マイ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ルモデ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 18 年度計画

中期計画を実現するための平成 18 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。

原子力分野のための仮想実験環境を整備するため、国家施策(e-Japan)の下に実現した ITBL 基盤技術を基に、セキュリティ機能、高速通信機能等の高度化を進める。具体的には、認証機能の 2 重化とファイアウォールを透過した通信を 2 倍（平成 17 年（2005 年）度比）にするための技術を実証する。

ITER のような巨大実験設備の国際供用化に向け、グリッド計算環境の国際間相互乗り入れを拡大するため、新たに米国と研究協力を開始する。

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。

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。

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。

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 か月以内に完了する。

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。

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。

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。

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。

なお、平成 18 年度計画のうち「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。」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 18 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 18 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 18 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 18 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 18 年度の実績を踏まえた平成 19 年度計画（案）も記載した。

第 4 章に示す専門部会による評価においては、平成 19 年度計画（案）を参照した上で、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18年度研究開発実績及び成果の意義等

中期計画	H18年度計画	H18実績報告	成果の意義	多角的視点、特に優れた成果等	H19年度計画(案)
1	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。	原子力分野のための仮想実験環境を整備するため、国家施策(e-Japan)の下に実現したITBL基盤技術を基に、セキュリティ機能、高速通信機能等の高度化を進める。具体的には、認証機能の2重化とファイアウォールを透過した通信を2倍(平成17年(2005年)度比)にするための技術を実証する。	○原子力グリッド基盤のためのセキュリティ機能の高度化については、個人認証とマシン認証を併用することにより認証機能の2重化を実現し、グリッド技術における高速通信機能の高度化については、データ転送に係る処理数の削減などにより、ファイアウォールを透過した通信の応答速度を約4倍に向上した。	(産学連携) ○核融合科学研究所との共同研究を実施し、核融合分野におけるデータアクセスシステムの基盤としてグリッド技術による並列分散計算技術が利用された。 (機構内連携、プレス発表) ○機構イントラネットへの外部アクセスの通信基盤としての性能向上を達成したことにより、那珂核融合研究所と連携し、高度なセキュリティーで遠隔地からの核融合実験を実現可能とし、実証実験を行った。本件は「高度なセキュリティーで遠隔地からの核融合実験を実現—ITER遠隔実験の実現へ向けて大きく前進—」としてプレス発表された。	平成18年度までに高度化したセキュリティ機能・高速通信機能等と国際協力等のもとに拡充している計算機環境を連携させ、耐震性評価用仮想振動台が入出力するテラバイト級(1~100テラ)のデータを分散処理可能なシステムを実現し、仮想実験環境の基盤に資する。 外部資金により、国の京速計算機開発プロジェクトに資するナショナル・グリッド・インフラの整備を引き続き実施し、ITBL-NAREGI連携が可能なグリッド・インフラを実現することで京速計算機の利用環境を完成させる。 HTTRの全体データ、約1テラバイトを入力データとする大規模固有振動数解析技術の開発を行い、耐震性評価用仮想振動台の基本機能開発を完了する。 FBRサイクルとの連携研究については、5テーマについて着実に進める。 (注)FBR: 高速増殖炉。
	ITERのような巨大実験設備の国際供用化に向け、グリッド計算環境の国際間相互乗り入れを拡大するため、新たに米国と研究協力を開始する。	ITERのような巨大実験設備の国際供用化に向け、グリッド計算環境の国際間相互乗り入れを拡大するため、新たに米国と研究協力を開始する。	○米国との研究協力開始については、オークリッジ国立研究所との国際協力を開始することで、国際協力関係を拡大した。(国際協力テーマ「原子力分野における大規模データの高速可視化に関する共同研究」)	○原子力グリッド基盤の国際間相互乗り入れの拡大に対して、米国との協力関係の第一歩を築くことにより、ITERのような巨大実験設備の国際供用化に向けた試験環境を拡大でき、原子力研究開発者にその利用環境を体感できるようにした。	(産学連携、国際貢献) ○開発した可視化機能が商用ソフトとして本年度36本販売され、ロイヤリティ収入を得た。また、米国オークリッジ国立研究所から当該可視化機能の研究的利用の要請があり、国際協力として受け入れることにした。 (機構内連携) ○グリッド計算環境の国際間相互乗り入れが実現したことにより、計算機資源の拡充ができ、基礎工学部門や核融合部門(ともに旧原研)等における大規模データ解析の可視化に貢献した。 ○次世代炉部門(旧JNC)と連携してGNEP(Global Nuclear Energy Partnership)日米間協議に協力し、計算科学WGを立ち上げ、日米における国際間相互乗り入れによるグリッド計算環境の整備計画を立案した。 (外部資金獲得、国際貢献) ○日仏交流として外部資金「コンピュータサイエンスを含む情報通信技術」(1550万円/3年)を獲得し、仏国(リヨン大学)との国際間相互乗り入れによるグリッド計算環境を整備した。 ○平成17年度より進めていた研究協力の議論を具体化させ、仏国原子力庁(CEA)との国際協力を開始した。 ○上記の核融合遠隔実験システムの実証実験に成功し、CEA側よりITERのような巨大実験設備の国際供用化に向けたグリッド・コンピューティング環境の試験的利用を要請され、当センターの原子力グリッド基盤技術を貸与することになった。
	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。	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。	○実プラントデータによる耐震解析技術を開発し、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した。	○耐震解析計算の高速化を図ることにより、従来不可能とされたプラント全体の応答解析を実現できるようになった。これにより地震時の全体挙動を把握することが容易になった。	(機構内連携) ○次世代炉部門(旧JNC)と連携して実施した高速増殖炉の熱交換器設計において、耐震解析技術の中核技術である大規模解析手法を熱応力解析に転用することにより、従来解けなかった精度の大規模詳細解析を実現することができた。その結果、高速増殖炉の熱交換器設計仕様を確定するためのデータを提供できた。 (産学連携、外部資金獲得) ○外部資金「原子力プラント全容解析のための接合部連成モデリングの研究開発」(3000万円/3年)を獲得し、電中研と共同研究を具体に開始し、3次元仮想振動台の開発を加速した。

表3. 1 平成18年度研究開発実績及び成果の意義等(つづき)

	中期計画	H18年度計画	H18実績報告	成果の意義	多角的視点、特に優れた成果等	H19年度計画(案)
		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。	○ナショナル・グリッド・インフラを整備するための研究開発として、API(アプリケーションプログラミングインタフェース)のプロトタイプの開発および、相互接続システムの設計を完了した。	○ITBLの資産を次世代ナショナルグリッドインフラに継承可能な環境を実現することで、機構内を含めた利用者利便性の向上を図れる。 (注)ITBL: H13~H17年度に実施されたITによる仮想研究所構築プロジェクト。システム計算科学センターがその基盤となるグリッド技術を開発。	(優れた成果) ○ITBL計画の事後評価が実施され、「優れた成果」と評された。 (外部資金獲得) ○「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」計画に参画することで、外部資金(2.25億/年)を獲得した。 (産学連携、ステークホルダーを意識した活動) ○産学連携として、ITBL協定を延長し、91機関約1000名の利用者連携を継続した。また、13の研究開発コミュニティ(仮想研究所)の活動を啓蒙し、SC06にて共同展示を行い、約400名の来訪者を得た。これらの活動の結果、13の研究開発コミュニティを連携融合させるユーザー会に類するコミュニティが形成され、利用者による自主的なITBL利用活動を立ち上げることができた。 (注)SC06: 2006年11月に開催された世界最大の高性能計算機科学国際会議。毎年米国で開催され、後半の2桁の数字は開催年度を意味する。	
2	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ルモデル手法を構築する。	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。	○鉄粒界において、炭素が強化効果を持ち、それがリンによる脆化効果を打ち消すほど大きいこと、さらに、リンと炭素は偏析サイトを奪い合い、両者の偏析濃度によって粒界は強化されたり脆化したりすることを第一原理計算から定量的に明らかにした。 ○実験材料の結晶粒形状をモデル化し、き裂成長シミュレーションを行い、得られた外部応力と亀裂進展速度の関係について実験結果と比較することで、き裂成長シナリオを検証した。	○原子炉の高経年化対策に科学的根拠を与えるため、原子炉材料の経年劣化メカニズム解明が急務となっている。圧力容器鋼のリン偏析による粒界脆化においては、粒界強化作用を持つと言われている炭素の影響を考慮することが不可欠なため、その第一原理計算を実施し、メカニズム解明へ向け着実な一歩となるデータを得た。 ○多数の結晶粒から構成される多結晶中のき裂進展をシミュレーションした例は従来なく、さらに、実験結果と照合可能とした点は、原子炉材の経年劣化を評価する上で重要な進展と評価できる。	(優れた成果) ○原子炉の高経年化対策に、第一原理という現時点で最も精度の高いシミュレーション手法を適用し、物質、即ち元素に依拠する経年劣化に対して、一つの科学的根拠を提出した。 (産学連携) ○左記の成果を基に、き裂成長シミュレーションのマルチスケール手法開発においてカリフォルニア工科大学と国際研究協力を行うことで合意した。具体的には、カリフォルニア工科大学のマクロスケール研究手法と当室のミクロ・メゾシミュレーション手法を統合し、応力腐食割れを含む環境助長によるき裂進展のマルチスケールシミュレーション手法開発を目標とする。 (機構内連携、外部資金獲得) ○今回開発した核燃料中の気泡成長シミュレーションコードは、一般にメソスケールで固体中のバブル挙動を扱えるため、広く他分野での応用も可能である。この汎用性を活かし、次世代炉構造材料に関する文部科学省公募研究「長寿命プラント照射損傷管理技術に関する研究開発」を次世代炉部門、基礎基盤部門と協同で受託した。	き裂進展の要因の一つである粒界脆化現象のモデル構築に向けて、主たる不純物原子2種(リン、硫黄)と格子欠陥との結合エネルギーを第一原理的手法から求め、不純物原子の結晶粒界への偏析度を評価する。 燃料の細粒化における、ゼノンバブルの動的役割を推定するため燃料内ガスバブル動的挙動解析コードを開発し、64種以上の結晶粒からなる多結晶体中のバブル移動のシミュレーションを行い、電子顕微鏡観察から得られた微細構造と比較する。 中性子検出超伝導素子の研究開発については、平成18年度に試作した熱応答モデルを用いて、2種の主要動作環境(電流、温度)依存性を実験結果と照合し、更に、2種の構成要素(デバイス幅、厚さ)依存性を求め、超伝導素子の分解能向上に資する設計指針を与える。
	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。		○超伝導体を示す熱雑音さえ再現可能とする熱応答特性評価フレームワークを試作し超伝導体MgB2の核反応後の電気パルス信号を実験結果(大阪府立大と量子ビーム部門提供)と照合し、その温度変化等について実験結果を定量的に説明することに成功した。	○今年度試作した熱応答特性評価フレームワークによる放射線検出デバイスのシミュレーションでは、熱雑音と検出信号を同時に再現可能であり、検出信号が如何にして熱雑音に埋もれるかを理解できる。これにより、検出器の適用限界と分解能など、新たな検出器開発へ向け、詳細な設計指針を提供することが可能となった。	(優れた成果) ○超伝導検出器は雑音を減じることで、全く新たな応用可能性が開けると指摘されている。今年度の成果は、その雑音さえも再現可能としたことで、上記の検出器分野の最大の課題をシミュレーションにより解決できる可能性を拓いたと言える。また、その理解に至る過程で開発した量子トンネル効果の大規模シミュレーションの成果はSC06にてゴードンベル賞ファイナリストに賞された(SC05と併せて2年連続)。	

表3. 1 平成18年度研究開発実績及び成果の意義等(つづき)

	中期計画	H18年度計画	H18実績報告	成果の意義	多角的視点、特に優れた成果等	H19年度計画(案)
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。	<p>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。</p> <p>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か月以内で完了する。</p>	<p>○DNA損傷修復関連遺伝子の構造情報を集積した分散データベースを用いて、ゲノム塩基配列が判明している生物種の放射線抵抗性原因遺伝子の候補を発見するサブシステムを開発完了した。</p> <p>○分子シミュレーションをRuvAB修復酵素に適用し、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100万ステップの計算を2ヶ月以内で完了するコードを完成させた。</p>	<p>○ゲノム塩基配列が判明している生物は非常に多いが、そのゲノムにどのような遺伝子が存在するかを正しく記したデータベースは、世界中のライフサイエンス研究者の努力によって現在構築中である。ここで開発したシステムはDNA修復関連遺伝子において、世界の上記努力に貢献し、医学薬学の基礎データを提供することとなる。</p> <p>○創薬ターゲットであるDNA修復関連タンパク質の動的構造と機能解明によって、運動を妨げる部位の発見が可能となり、創薬に貢献できるようになる。生体中と類似の条件で、動的構造をシミュレーションし、自由エネルギーの高速計算を可能としたことで、タンパク質集合体の安定性やDNAとの結合能力を予測する指標を得ることができるようになった。</p>	<p>(産学連携) ○本研究の推進に当たり5件の共同研究を締結し、大学等との連携の下で研究開発を実施した。その結果、東京大学との共同研究により大規模高速生体分子シミュレーションを実現した他、名古屋大学との共同研究により放射線抵抗性原因遺伝子候補サブシステムの機能をテストし、その有効性を確認することができた。</p> <p>(産学連携、外部資金獲得、国策への貢献) ○左記研究に関連し、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」に参加し、国のプロジェクトに貢献している。</p> <p>(機構内連携) ○左記の研究成果は、量子ビーム応用研究部門生体分子シミュレーション研究グループがもつタンパク質分子シミュレーション技術との合流により実現した。</p>	<p>平成18年度までに開発した遺伝子推定技術によりゲノム情報解析用データベースを拡充し、生体高分子構造シミュレーション技術が利用できるデータを抽出可能にする。このデータを用いたDNA修復タンパク質の修復過程シミュレーションを90日以内で達成する技術を開発する。この高速化されたDNA修復タンパク質の修復過程シミュレーションを用いて、分子生物学実験と協力したDNA修復タンパク質の機能解明を、3ヶ月以内で計算できる要素技術を開発する。</p>
4	超高速ネットワークコンピュータ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、超高速コンピュータニーズに効率的に対応できるシステムを構築する。	<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、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タ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。</p>	<p>○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専用シミュレータ回路の設計を実現した。また、『新概念回路技術展開型超高速コンピュータプロジェクト研究会』を設立し、東北大学及び関係機関メンバーと協力して活動を開始した。</p> <p>○国内唯一の情報通信に関する研究を行う全国共同利用の大学附置研究所に共同プロジェクト研究会を設置し、次世代半導体デバイスや電子回路等のハードを中核とする研究者と、流体科学や原子力・海洋・航空宇宙等の分野で最先端の超高速コンピュータニーズをもつソフト系研究者等との間の意見交換の場を創設したことは、専用シミュレータの設計において、次世代ハードウェア技術から個別アプリケーションまでの全階層を見通した設計の単純化と、より広い実用的な流体シミュレーション応用分野への適用性拡大を目指した検討促進に貢献すると考えられる。</p>	<p>○プラズマ安定性解析のための専用シミュレータ電子回路について、現在のFPGA技術による行列演算回路の試作過程で見積もられた個別演算器等の実効予測性能に基づく現実的な評価により、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設計を実現したことは、ITER等核融合炉におけるプラズマの実時間制御に対して、現実的なコストで対応可能なひとつの具体的なシステム設計を提案できたという点で意義深い。</p> <p>○個人ネットワーク網利用において、電子職員証を確立し利用することで、個人を特定し、個人のネットワーク利用を認証できるようにした。これにより、職員によるネットワーク網やサーバーの部分的利用や全面的な利用にかかわる管制を行うことができるようになり、原子力機構の情報管理および情報設備やデータの利用制御が可能となる。</p>	<p>(優れた成果) ○プラズマ安定性解析のための専用シミュレータ電子回路について、現在のFPGA技術により、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設計を実現したことは、ITER等核融合炉におけるプラズマの実時間制御に専用シミュレータを用いることの有効性と実現性を現時点で示せたという点で、今後の研究開発投資の方向に重要な示唆を与える優れた成果である。</p> <p>(産学連携、機構内連携、ステークホルダーを意識した活動) ○共同プロジェクト研究会は、①東北大学電気通信研究所・流体科学研究所等のハードからソフトに至る大学研究者、②機構内の他部門にも横断的に存在する流体シミュレーション技術の原子力分野への応用研究者、③専用シミュレータのハードウェア研究成果を将来直接活用する可能性のある海洋・航空宇宙等の最先端科学技術シミュレーション研究者、等から構成しており、大学との連携、機構内の他部門との連携、成果の活用を意識した研究開発活動の促進に寄与できるよう多角的視点からの配慮を行っている。</p> <p>(機構内連携) ○電子職員証発行システムの試設計を通して、人事部と共同で電子職員証の発行と利用を制度化した。これにより、情報システムのセキュリティ確保をより堅固なものとし、電子化される組織運営業務における担当者や管理者を特定する方式の整備方針を示した。</p> <p>(費用対効果向上) ○広域イーサ化に併せて機構ネットワークの最適化計画を推進した。これにより、年間2億円近い運用経費の削減が期待できる。</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、専用シミュレータ用基本電子回路を試作・実装し、汎用計算機とのハイブリッド動作を実証する。また、次世代ハードウェア技術の開発に応用ニーズを直接反映できる連携体制を東北大学等と協力して構築する。</p> <p>機構ネットワークの利用等により生じるリスクを低減するための情報セキュリティ対策を実施する。茨城地区スーパーコンピュータの合理化を図るための政府調達手続きを着手する。汎用計算機並びに機構ネットワークのシステム最適化計画書を完成し、公開する。</p>
		<p>ネットワークコンピュータ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。</p>	<p>○ネットワークコンピュータ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した。</p>			
		<p>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。</p>	<p>○基幹ネットワークの広域イーサ化を完了するとともに、情報セキュリティ強化策として1)ウイルス対策の強化、2)危険WEBアクセス遮断システムの整備、3)e-learningによる情報セキュリティ教育を実施した。</p> <p>○関西地区スーパーコンピュータの調達仕様書については作成を完了したが、調達については経営判断により中止となった。</p>	<p>○広域イーサ化完了により、国内各地のサイト間を結ぶネットワークを統一的に整備、運用できるようになった。</p>		

表3. 1 平成18年度研究開発実績及び成果の意義等(つづき)

中期計画	H18年度計画	H18実績報告	成果の意義	多角的視点、特に優れた成果等	H19年度計画(案)
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)	○H17年度評価時のコメントの反映 (1)基盤技術とその応用の一層の明確化 (2)シミュレーションと実験データの比較による評価 (3)原子力法人の統合効果	○左記(1),(3)を踏まえ、これまでに開発された基盤技術(グリッド、ネットワークコンピューティング、耐震計算、大規模計算技術)を活用し、高速増殖炉と核燃料サイクル分野における5つのテーマについて連携研究を開始した。	○旧原研の全部門との連携研究を継続するとともに、次世代炉部門および地層処分部門(ともに旧JNC)との連携を連携研究を継続した。次世代炉部門と核燃料サイクル部門とは、新たに、計算科学活用による設計開発支援(5テーマ)連携と、GNEP日米行動計画の策定にともなう計算科学活用活動を展開した。また、敦賀本部とも計算科学連携を新たに開始した。これらの活動を通じて、理事長方針である「連携・融合活動の効果的・効率的推進」を実施できた。 ○耐震計算技術の中核技術である大規模計算技術を基に、理事長ファンドである研究開発調整予算(連携・融合研究、マッチング研究ファンド)を獲得し、次世代炉部門(旧JNC)が推進する高速増殖炉の熱交換器管板の設計において、従来できなかった大規模解析を行い、設計課題となっていた応力負荷が軽減される管板構造を立案することができた。	(国際貢献) ○高速増殖炉の課題解決において旧二法人の連携融合研究を進めた結果、GNEPにおける日米協力においても、「Both countries have a strong interest in advancing the state-of-the-art in simulation and modeling」と明記された計算科学分野の協力項目を掲げることができた。	
		○左記(1)を踏まえ、これまでに開発された基盤技術(セキュアなネットワークアクセス)を活用し、(将来のITER遠隔実験を視野に入れた)JT-60遠隔実験を実施した。	○個人認証技術を用いて、共同研究者等のネットワークによる設備利用を管制できるようにし、セキュリティを高度化しつつ、機構全体の共同研究における利用者の利便性を高めることができた。 ○原子力カグリッドによる情報基盤技術を基に、那珂核融合研究所の課題である大規模実験施設のインターネット経由での遠隔利用を可能とし、高度なセキュリティで遠隔地からの核融合実験を実現可能とし、実証実験を行うことで、核融合問題への応用を行った。 ○原子力カグリッドによる情報基盤技術を基に、電子職員証発行システムを人事部と共同で立案し、電子職員証の発行と利用方法を確立した。これにより、電子化される組織運営業務における担当者や管理者の特定手段の一つを示唆できた。	(項目1第1項に同じ)	
		○外部資金を獲得し、左記(2)の比較・評価に着手した。	○外部資金「原子力プラント全容解析のための接合部連成モデリングの研究開発」(3000万円/3年)を獲得し、電中研と共同研究を具体的に開始し、電中研が実施する実験データと当センターのシミュレーション結果を比較することで、3次元仮想振動台の開発を加速した。 ○原子力炉材料のき裂成長、核燃料の細粒化現象の機構解明および超伝導体の特性解析においても、機構内連携等により具体的実験データとの比較・照合を行い、シミュレーション結果を検証できた。 ○FBR構造材料で問題となる高速中性子照射によるスウェリングに関して、実験によって得られている温度依存性を定性的に再現することに成功した。 ○外部資金「低分解能生体超分子像からの原子構造構築技法」を獲得し、実験測定によって得られる生体超分子低分解能像を、高分解能像とし、生化学実験で得られる様々な結果と比較することで、技術開発を一層、加速させた。	(優れた成果) ○超伝導を利用した新型中性子検出器開発に際し、シミュレーション研究をいち早く実施し、検出器が数10ナノ秒という超高速応答速度を持つことを観測前に予測した。この予測結果は18年度、JRR-3での照射実験により確かめられ、シミュレーション研究が検出器の研究開発を進める上で重要な代替手段となりうることを示した。	

表 3. 1 平成 18 年度研究開発実績及び成果の意義等 (つづき)

	中期計画	H18年度計画	H18実績報告	成果の意義	多角的視点、特に優れた成果等	H19年度計画(案)
			<p>○左記(3)を踏まえ、これまでに培った材料物性に関する研究開発能力を活用し、FBR開発に関連し、アクチナイド系の物性、構造材料の脆化等の課題に対応するためのシミュレーション手法検討を次世代炉部門、基礎工学部門、先端基礎センター等と協力して進めた。</p>		<p>(外部資金獲得) ○中期計画達成のために実施しているマルチスケール手法開発のアイデアを超伝導基礎物性研究にも適用するとした研究提案が大型外部資金CREST(JST)として採択された。当センターのシミュレーション研究開発力が評価されたと判断する。</p>	

4. 原子力計算科学研究評価専門部会による評価

平成 19 年 3 月 16 日に専門部会を開催し、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	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 19 年 3 月 16 日 15:00~17:30	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)	・H18 年度の評価方法について ・システム計算科学センターの H18 年度研究開発実績について	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、H18 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成果活用を視野に入れステークホルダーを意識した活動	特に優れた成果	その他
<p>【年度計画】 原子力分野のための仮想実験環境を整備するため、国家施策(e-Japan)の下に実現した ITBL 基盤技術を基に、セキュリティ機能、高速通信機能等の高度化を進める。具体的には、認証機能の 2 重化とファイアウォールを透過した通信を 2 倍（平成 17 年（2005 年）度比）にするための技術を実証する。</p> <p>ITER のような巨大実験設備の国際供用化に向け、グリッド計算環境の国際間相互乗り入れを拡大するため、新たに米国と研究協力を開始する。</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>	<ul style="list-style-type: none"> 計画は十分クリアしており、中期計画の技術開発に大きな成果となっている。 認証機構の 2 重化については実現し、ファイアウォールを通して通信の高度化についても計画以上の性能向上を実現した。米国との研究協力についても、ORNL との協力を開始した。実プラントデータによる耐震解析技術についても高速化を実現した。 並列分散計算技術の開発については個別に技術については着実に進展しているように見受けられるが、外部に対してその成果を見える形で示すことは十分出来ているとは言えないように思われる。今後、外部批判と評価を受けて今後の研究の課題を明らかにするためにも、研究成果発表の機会を増やす努力がいつそう必要である。 耐震計算科学技術開発についても、要素基礎技術の蓄積は進んでいるように見受けられるが、最終的にどの程度の規模のシミュレーションを行うことが求められていて、それに比して現状ではどのような点で不十分であり、それを解決する研究課題は何かということを意識的に追求すべきである。関連して研究成果発表の機会をより増やす努力が必要である。今後、簡単な場合で良いから、具体的な震源データと現実の実プラントの立地条件のもとでの数値振動実験を、ひとつでも良いから、ケーススタディーとして扱った結果を見せていただけたところまで研究を進めていただきたい。 計画目標も達成されており、順調に進展しているものと考えます。 計画通り進捗している。 	<ul style="list-style-type: none"> 核融合科学研究所との共同研究、機構内の那珂研との連携を図った点評価できる。さらに、ステークホルダーとして GNEP に対するグリッド環境の整備計画を立案しており、今後の応用が非常に期待できる。 機構内の種々の部門にわたるプロジェクトであり、機構内連携として評価できる。 ①産官学連携：適切に行われていると評価できる。 ②機構内連携：連携をとって活動していると思われる。 ③ステークホルダーを意識した活動：現時点では特に意識的に追求しているようには見受けられない。まずは、ステークホルダー（研究成果の受益者、受益権利者）の対象を明確にするべきであろう。それなくしては、意識の仕様が無いししたがって評価も出来ない。 核融合科学研究所、米国オークリッジ国立研究所、フランスリヨン大学等との連携、外部資金なども獲得し積極的な活動が行われていると判断致します。 可視化機能、グリッド計算環境ならびに大規模解析手法とモデリングの特長が活かされており、多角的視点からも評価できる。 	<ul style="list-style-type: none"> ファイアウォールを透過する通信の応答速度を 4 倍にし、計画を 2 倍も上回った成果は非常に優れている。 遠隔実験を実施したことの意義は今後の世界的規模での共同研究の必要性に鑑みて非常に大きい。 開発した可視化機能が商用ソフトウェアとして販売されロイヤリティ収入を得たということは特筆に値すると思います。 ITBL の成果を継承発展させるコミュニティの形成。 	<ul style="list-style-type: none"> 海外の研究期間との共同研究を進めるには、グリッド技術の動向を把握していることが重要である、特にグリッドの標準化について動向を調べるとともに、日本からも情報を発信していくことが必要である。 今後、"京"速計算機の開発にどのように関わっていくかを明確にして欲しい。
<p>【年度計画】 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</p>	<ul style="list-style-type: none"> H18 年度計画は十分クリアしている。 圧力容器材料の第一原理分子動力学計算によって、炭素の強化効果と、リンの脆化効果を定量的に明らかにし、亀裂成長のシナリオを明確化したことは計画を十分に実行している。今後圧力容器の脆化予測式の見直 	<ul style="list-style-type: none"> 海外との国際研究協力、機構内連携により研究面をより広くしている点評価できる。特に次世代構造材料に関しては文科省の公募型研究を受託しており、ステークホルダーを意識した活動と評価できる。 	<ul style="list-style-type: none"> 圧力容器鋼粒界でのリンの脆化効果を第一原理シミュレーションにより定量的に評価し、基礎データを取得した成果は非常に優れている。 	<ul style="list-style-type: none"> 今後、上記の優れた成果を国の政策等への適用に、よりアピールすることを期待する。

<p>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>	<p>しが予定されており、それに寄与することが期待される。</p> <ul style="list-style-type: none"> また、燃料棒の粗大化気泡成長についても、実験結果と一致するシミュレーションを可能としたことも大きな成果である。 MgB2 の高温超伝導を用いた中性子検出器の開発も、今後の発展が見込まれる。これに対するシミュレーションの完成は、今後の検出器の実用化に大きく寄与する。 亀裂進展問題では、ナノからメゾを經由してマクロへと向かうシミュレーション技術の開発が順調に進展していると評価できる。今後はマクロからくる境界条件をより適切にナノ、ミクロのシミュレーションに反映させ、現象の総合的な解明に向かうことが期待される。 計画に定量的な目標が明記されていないため目標の達成レベルの判断が難しい面もあるが、概ね順調に進行していると判断できる。 計画通り進捗している。 	<ul style="list-style-type: none"> 亀裂成長について、海外の研究機関との共同研究を行っており、これは高く評価される。また、燃料棒中の気泡成長に関するシミュレーション技術を次世代炉に応用して、文部科学省の研究を受託したことは評価できる。 ①産官学連携：適切に行えていると評価できる。 ②機構内連携：特段の問題は無い。 ③ステークホルダーを意識した活動：まだ、意識的に活動しているとは見受けられない。 カリフォルニア大学との連携などを進めると共に、文部科学省公募研究なども受託しており努力が認められる。 マルチスケール手法の可能性を示すことによって、国際共同研究の実現や外部資金を獲得しており、今後の展開に期待できる。 	<ul style="list-style-type: none"> マルチスケール・シミュレーションを実用の段階にまで持ってきたことは優れた成果であり、社会的な意義も大きい。 高温超伝導を用いた中性子検出器については、応答時間や量子雑音の効果まで再現できたことは、今後の性能向上に寄与することが期待できる。 ナノからマクロにいたる総合的なシミュレーション技術の開発に目覚しい物がある。 SC06にて、量子トンネル効果の大規模シミュレーションの成果、がゴードンベル賞ファイナリストに2年連続選ばれたことは高く評価できる。 ゴードン賞ファイナリストに選出されたこと。 	
<p>【年度計画】 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か月以内で完了する。</p>	<ul style="list-style-type: none"> H18年度の計画目標である、計算を2ヶ月以内で完了することをクリアした点で進捗度は十分である。 DNA 損傷修復関連遺伝子のゲノム情報、構造情報、機能部位情報、相互作用情報を統合的に集めたデータベースにより、ゲノム塩基配列が判明している生物種の放射線抵抗性原因遺伝子の候補を発見するシステムを開発できたことは、計画が予定通り進捗していることを示す。分子動力学シミュレーションを RuvAB 修復酵素に適用し、50万原子の系のシミュレーション100万ステップを2ヶ月で完了するコードを量子ビーム部門との連携により開発できた。 分子シミュレーションにおいては、シミュレーションが可能な分子数を着実に増やすことで、予測能力の向上が図られている。研究成果も適切に公表がされている。 目標をクリアしており、順調な進捗が認められる。 計画通り進捗している。 	<ul style="list-style-type: none"> 大学との共同研究、文科省のプロジェクトへの参加、機構内連携を実施しており評価できる。 この研究のために、大学等と5件の共同研究をおこない、研究を一層進展できたことは優れた成果である。また、国家的プロジェクトである「タンパク3000」に参加したことも評価に値する。機構内では、量子ビーム応用研究部門との連携が有効であった。 ①産官学連携：いくつかの大学と連携が見られる。より一層の共同研究の展開が望まれる。 ②機構内連携：適切に行われている。 ③ステークホルダーを意識した活動：これからの課題である。 東京大学、名古屋大学との連携、高エネルギー加速器研究機構物質構造科学研究所からの研究の受託、機構内連携など積極的な努力が認められる。 植物育種や放射線治療の精密な基盤形成のために、計算機科学によって放射線の利用と影響を分子レベルで解明していく取組みは重要である。 	<ul style="list-style-type: none"> DNA修復遺伝子に関する基礎データを提供できた点、非常に優れている研究である。 50万原子規模の高分子について1ns~1μsの素過程シミュレーションを可能としたこと。 	<ul style="list-style-type: none"> 順調に研究が進んでおり、今後の要素技術開発が期待できる。 計算科学技術推進専門部会において放射線生物学WGが計算生物科学WGに改称された方向性も踏まえて、機構内連携を核として、機構外の研究グループと協力して、大規模かつ緻密な生体シミュレーションに取り組んでいくことを期待する。

<p>【年度計画】</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、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。</p> <p>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。</p> <p>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。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 計画は順調に進んでいる。汎用計算機と同レベルの計算速度の専用シミュレータ回路の設計に成功している。但し、予算面で関西地区スーパーコンピュータの調達は中止された。 LU分解専用計算ボードがFPGAを用いて動作し、所定の計算速度と計算精度を実現したことは評価できる。 個人認証システムを試作し、所内で実証実験を行ったことは評価できるが、その詳細は不明なのでその意義や将来方向については十分な検討が必要と思われる。 基幹ネットワークの広域イーサネット化とセキュリティ対策は実現し、運用経費節減を実現したとのことであり、これは一つの成果である。 関西地区スーパーコンピュータ調達については、経営判断により中止されたとのことであり、やむを得ないであろう。 ITERの開発における重要課題を設定して基礎的な研究を開始していると評価されるが、まだ、基礎技術の確立を図っている段階の様に見受けられる。FPGAボードを用いることの有用性の検証を行い、プラズマ実時間制御の実現に向けた道筋が見えてきたのではないかと期待も持てる。今後の、新たに開始した共同プロジェクト研究会の活動の活発化が望まれる。 計画における目標が回路設計の実現、個人認証システムの試設計など到達レベルを判断しにくいものとなっているが概ね順調に進んでいるものと判断できる。 計画通り進捗している。 	<ul style="list-style-type: none"> ネットワークに関しては米国ORNLとの国際協力を開始しており、これまでのCEA等とのネットワークに加え、原子力研究、特に核融合炉関連のネットワークがしっかりとってきている。また、専用シミュレータの開発によるステークホルダーが広がっている。 東北大学電子通信研究所等と共同プロジェクト研究を行ったことは意義が高い。 FPGAによる専用ボードも共同研究によるものとのことであり、機構外との情報交換は非常に重要である。 ①産官学連携：東北大学との連携が進んでいる。 ②機構内連携：核融合グループとしての独自の活動と位置づけられている？ ③ステークホルダーを意識した活動：国家プロジェクト研究であり、ステークホルダーの定義は難しいが、人類史的視点で考えて良いと思われる。勿論、国家としてのエネルギー問題解決からの観点も国家予算の使用という観点からは大切である。 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等と立ちあげる等、努力が認められる。 2法人で異なっていたネットワークの統一によって費用対効果比を向上させた。 共同プロジェクト研究会の活用に期待できる。 	<ul style="list-style-type: none"> 国内及び国際的超高速ネットワークのシステム作りができた点は非常に評価できる。 FPGAを用いて汎用計算機並みの性能を実現したことで今後の専用計算に設計への目処をつけることに成功している。 	<ul style="list-style-type: none"> LU分解専用ボードの将来性については若干疑問がある。当面、このような技術を開発しておくことは意味がないわけではないが、LU分解の高速化には、汎用プロセッサのマルチコア化、GPGPUのような汎用のアクセラレータ機構、ClearSpeedのような汎用の高速化ボード、SH-4のような省電力の組み込み型プロセッサなど多くの技術が急速に発展しつつある。今後は、自分たちでハードウェアまで作るのではなく、FPGAで身につけた技術を、これらの商用の製品に適用するという方向も十分考えられる。今後は、先見性のある判断が必要となるであろう。 FPGA技術による高速化の可能性を示したことは評価できます。今後大規模データ処理に対応したメモリ系を含めた評価結果がでるとさらに興味深い結果がでるのではないかと考えます。
<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"> ネットワークシステム作りの基盤がしっかりとってきた点は非常に評価できます。このシステムを生かし、今後はITER、GNEP(高速炉)に具体的に適用するにはどのように研究を進めるべきかについて産官学との連携、国際協力も含め、しっかり進めてほしい。 シミュレーションによる原子炉材料、燃料の研究は優れた成果を出している。この成果を是非、実際の原子炉の応用、規制等に生かしてもらいたい。そのためには考慮された以外の条件、例えば温度分布等についても今後検討されることが望ましい。 実績報告全体について感じられることであるが、自分たちがいかに苦労して何々を実現したという記述が多い。さらに重要なのは、それが世界の該当分野での現在のレベルからみてどうなのかということである。それを意識した書き方が望まれる。最先端を行っているならばもちろんよい。最先端を追いかけている段階ならば、それはそれで必要なプロセスであるが、そのことを認識すべきであり、他の研究でない要素を見いだしてそこで勝負するという方策も考えられる。 JAEAの中での計算科学研究センターの位置づけと役割の重要性は言うまでもないことであるが、計算科学という新しい科学の発展にとっても、計算科学技術の実践の場としてJAEAにおける研究活動はきわめて有意義である。 産学連携、外部資金獲得、国際連携などに積極的努力が認められます。今後もさらに発展させて戴ければと思います。 シミュレーション(モデリング)においては、中期計画の年度が進むにつれて、その解析結果や予測結果と実験結果との比較対照から、より一層手法の評価が深まり精度が高まっていくことが望まれる。 			

付録 平成 18 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 206,043 千円（技術協力員等の人件費を含む）
- ・ シミュレーション技術開発室 81,504 千円（技術協力員等の人件費を含む）

(b)外部資金

- ・ 科研費（代表者 5 件：6,900 千円、協力者 6 件：2,800 千円）
- ・ 原子力安全基盤機構の競争的資金（1 件：3,600 千円）
- ・ 科学技術振興機構の競争的資金（4 件：62,900 千円）
- ・ 文部科学省の競争的資金（1 件：10,000 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：4,300 千円）
- ・ 文部科学省より研究受託（2 件：236,366 千円）
- ・ 科学技術振興機構より研究受託（2 件：16,859 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 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	4	1	1	4	0	0	0	0	0	0	0	0	3	1	14
シミュレーション技術 開発室	11	0	0	1	1	0	0	0	0	0	1	0	1	0	15
合計	15	1	1	5	1	0	0	0	0	0	1	0	4	1	29

(平成 19 年 3 月 1 日現在)

※ 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、21 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 18 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	査読付き会議論文
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	1 (1)	0 (0)
	耐震計算科学技術開発	1 (0)	1 (0)
	専用シミュレータ基盤技術開発	1 (0)	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	18 (4)	6 (7)
	生命情報解析技術開発	6 (0)	1 (1)
合計		27 (5)	8 (8)

※平成 19 年 3 月末現在、括弧内は投稿中（論文誌・予稿集作成中を含む）の数字を表す

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発】

- Y. Shu, K. Furuta
“An Inference Method of Team Situation Awareness Based on Mutual Awareness, Cognition”
Technology and Work, Vol.7, No.4 PP.272-287
- 鈴木喜雄、大野暢亮、呉田昌俊、小瀬裕男、中島憲宏
“没入型 VR 装置用高速ボリュームレンダリングの研究開発”
可視化情報学会論文集（投稿中）

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】

- A. Nishida
“Wave propagation properties of frame structures; Formulation for three-dimensional frame structures”
JSME International Journal (Series B), Vol.49, No.2 PP.360-367
- 宮崎明美
“3次元フレーム構造物の波動伝播特性に関する研究；チモシェンコ梁理論の導入”
第52回構造工学シンポジウム 構造工学論文集 52B PP.119-124

【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, Vol.175, No.4 PP.269-289

【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 and S. Sakai

- “Unified theory for magnetic and electric field coupling in multistacked Josephson junctions”
Physical Review B, Vol.70, No.14 PP.144520_1-144520_6
- M. Machida and T. Koyama
“Structure of a quantized vortex near the BCS-BEC crossover in atomic fermi gas”
Physical Review Letters, Vol.94, No.14 PP.14041_1-14041_4
 - G. J. Carty, M. Machida and D. P. Hampshire
“Numerical studies on the effect of normal-metal coatings on the magnetization characteristics of type-II superconductors”
Physical Review B, Vol.71, No.14 PP.144507_1-144507_9
 - A. Hayashi, M. Shiga and M. Tachikawa
“Ab initio path integral molecular dynamics simulation study on the dihydrogen bond of $\text{NH}_4^+\cdots\text{BeH}_2$ ”
Chemical Physics Letters, Vol.410 PP.54-58
 - M. Tachikawa and M. Shiga
“Geometrical H/D isotope effect on hydrogen bonds in charged water clusters”
Journal of the American Chemical Society, Vol.127, No.34 PP.11908-11909
 - M. Machida
“Effects of edge boundaries on Josephson vortices in finite-size layered high-Tc superconductors”
Physical Review Letters, Vol.96, No.9 PP.097002_1-097002_4
 - 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 PP.218902_1-218902_5
 - K. Ebihara
“Dynamical pressure anisotropy in liquid-gas model of lattice-gas”
International Journal of Modern Physics C, Vol.17, No.1 PP.53-64
 - F. Shimizu, S. Ogata and J. Li
“Yield point of metallic glass”
Acta Materialia, Vol.54, No.16 PP.4293-4298
 - K. Ebihara, and H. Kaburaki
“Lattice boltzmann simulation of solution chemistry for crevice corrosion”
Mathematics and Computers in Simulation, Vol.72 PP.117-123
 - K. Muraoka et al.
“A Model for striation formation in ac PDP discharges”
Journal of Physics D: Applied Physics, Vol.39 No.10 PP.2135-2139
 - M. Machida and T. Koyama
“Time-dependent ginzburg-landau theory for atomic fermi gasses near the BCS-BEC crossover”

- Physical Review A, Vol.74 No.3 PP.033603_1-033603_6
- M. Machida, Y. Ohashi and T. Koyama
 “Microscopic structure of a quantized vortex core in atomic fermi gases”
 Physical Review A, Vol.74 No.2 PP.023621_1-023621_5
 - 山田進、今村俊幸、町田昌彦
 “量子大規模固有値問題における共役勾配法の収束性；適応的シフト前処理の収束性の評価”
 日本計算工学会論文集（インターネット）2006 巻 27 号
 - T. Kuchitsu, M. Tachikawa and M. Shiga
 “Attosecond electron dynamics with linear combination of floating Gaussian type basis function”
 Chemical Physics Letters, Vol.433 PP.193-198
 - A. Hayashi, M. Shiga and M. Tachikawa
 “H/D isotope effect on the dihydrogen bond of $\text{NH}_4^+\cdot\text{BeH}_2$ by ab initio path integral molecular dynamics simulation”
 Journal of Chemical Physics, Vol.125 No.20 PP.204310_1-204310_7
 - M. Yamaguchi, M. Shiga and H. Kaburaki
 “Grain boundary decohesion by sulfur segregation in ferromagnetic iron and nickel; A First-principles study”
 Materials Transactions, Vol.47 No.11 PP.2682-2689
 - M. Machida et al.
 “Direct numerical simulations for non-equilibrium superconducting dynamics and related neutron detection in MgB_2 ”
 Physica C, Vol.426-431 No.1 PP.169-173
 - M. Machida et al.
 “Josephson half-quantized vortices in long square π junctions around d-dot”
 Physica C, Vol.426-431 No.2 PP.1566-1571
 - M. Machida et al.
 “Direct numerical simulation on non-equilibrium superconducting dynamics after neutron capture in MgB_2 superconductor”
 Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, Vol.559 No.2 PP.594-596
 - M. Machida, T. Koyama and Y. Ohashi
 “Vortex structure from BCS to BEC Superfluid”
 Physica C, Vol.437-438 PP.190-194
 - S. Yamada, T. Imamura and M. Machida
 “16.447 Tflops and 159-billion-dimensional exact-diagonalization for trapped fermion-hubbard model on the earth simulator”
 Proceedings of International Conference for High Performance Computing, Networking and Storage (SC '05) (CD-ROM)
 - S. Ogata et al. (F. Shimizu)

- “Atomistic simulation of shear localization in Cu-Zr bulk metallic glass”
Intermetallics, Vol.14 PP.1033-1037
- M. Machida et al.
“On-site pairing and microscopic inhomogeneity in confined lattice fermion systems”
Physical Review A, Vol.74, No.5 PP.053621_1-053621_6
 - T. Kadoyoshi et al.
“Molecular dynamics study on the formation of stacking fault tetrahedra and unfaulthing of Frank loop in FCC metals”
Acta Materialia (in press, *Available online 7 March 2007*)
 - T. Suzudo et al.
“A Three-dimensional computer meso-scale modeling for helium bubble growth in metals”
Journal of Nuclear Materials (投稿中)
 - A. Hayashi, M. Shiga and M. Tachikawa
“H/D isotope effect of dihydrogen bond by ab initio path integral molecular dynamics simulation”
Molecular Simulation (投稿中)
 - M. Shiga and M. Tachikawa
“Ab initio quantum mechanical/molecular mechanical molecular dynamics using multiple-time-scale approach and perturbation theory”
Molecular Simulation (投稿中)
 - T. Watanabe
“Oscillation and rotation of levitated liquid droplet”
Proceedings of European Conference on Computational Fluid Dynamics (投稿中)
 - M. Machida, T. Koyama and Y. Ohashi
“Vortex microscopic structure in BCS to BEC fermi superfluids”
Physica C (投稿中)
 - M. Machida and T. Koyama
“Collective dynamics of macroscopic quantum tunneling in layered high-Tc superconductors”
Superconductor Science and Technology (投稿中)
 - M. Machida and T. Koyama
“Collective macroscopic tunneling in intrinsic josephson junctions”
Physica C (投稿中)
 - F. Shimizu, S. Ogata and J. Li
“Theory of yield point in metallic glass and molecular dynamics calculations”
Materials Transactions (投稿中)
 - S. Yamada et al.
“Strong pairing and microscopic inhomogeneity of lattice fermion systems”

Physica C (投稿中)

- M. Machida and T. Koyama
“Theory for collective macroscopic tunneling in high-Tc intrinsic Josephson junctions”
Physica C (投稿中)

【シミュレーション技術開発室・生命情報解析】

- K. Yura et al.
“Alternative splicing in human transcriptome; Functional and structural influence on proteins”
Gene, Vol.380, No.2 PP.63-71
- J. Takeda et al.
“Large-scale identification and characterization of alternative splicing variants of human gene transcripts using 56 419 completely sequenced and manually annotated full-length cDNAs”
Nucleic Acids Research, Vol34, No.14 PP.3917-3928
- K. Yura, S. Yamaguchi and M. Go
“Coverage of whole proteome by structural genomics observed through protein homology modeling database”
Journal of Structural and Functional Genomics, Vol17, No.2 PP.65-76
- A. Matsumoto and W. K. Olson
“Effects of sequence, cyclization, and superhelical stress on the internal motions of DNA”
Normal Mode Analysis; Theory and Applications to Biological and Chemical Systems
PP.187-211
- O. T. P. Kim, K. Yura and N. Go
“Amino acid residue doublet propensity in the protein-RNA interface and its application to RNA interface prediction”
Nucleic Acids Research, Vol.34, No.22 PP.6450-6460
- H. Ishida et al.
“Conformational analysis of the structure of ribosome fit into electron microscopy density maps with normal mode analyses and molecular dynamics simulations”
Proceeding of 16th International Microscopy Congress
- A. Matsumoto and W. K. Olson
“Predicted effects of local conformational coupling and external restraints on the torsional properties of single DNA molecules”
Multiscale Modeling & Simulation, Vol.5 No.4 PP.1227-1247
- M. Go, K. Yura and M. Shionyu
“Contribution of computational biology and structural genomics to understand genome and transcriptome”

Proceedings of International Symposium on Frontiers of Computational Science (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】

- 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及びデータセキュリティ管制手段”
東洋大学文部科学省対私学プロジェクト； 計算力学研究センター外部評価会
- 鈴木喜雄ほか
“原子力プラントのための耐震情報管制システム構想, 1； 原子力グリッド基盤(AEGIS)の構築”
日本原子力学会 2006 年秋の大会
- 井戸村泰宏
“Large scale simulations of turbulent fusion plasmas”
21st International Supercomputer Conference (ISC 2006)
- N. Kushida et al.
“Interoperability establishment between UNICORE and ITBL”
9th HLRS Metacomputing and Grid Workshop/10th Anniversary of HLRS
- J. Suzuki (T. Aoyagi 他 7 名)
“Object oriented data analysis environment for neutron scattering”
6th New Opportunities for Better User Group Software (NOBUGS 2006)

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】

- 中島憲宏
“ITBL を利用した大規模地震を想定した原子力プラントの耐震シミュレータ”
日本原子力学会 2006 年春の年会
- 井田真人
“気泡間相互作用の効果について”
キャピテーションに関するシンポジウム (第 13 回)
- 井田真人、大島伸行
“フィルタード・ナヴィエ・ストークス方程式の数値不安定性について”
第 11 回日本計算工学講演会
- R. Tian
“Part/component-based large-scale finite element analysis; Discontinuous meshes stitching up”
7th World Congress on Computational Mechanics (WCCM-2006)
- 中島憲宏
“原子力機構におけるシミュレーション研究； 3次元仮想振動台の研究開発を中心とし

て”

第 25 回原子力委員会定例会議

- 井田真人
“体積振動する気泡の位相特性と相互作用力に関する補足的検討”
日本流体力学会年会 2006
- 宮崎明美、鈴木喜雄、松原仁、Tian, R.、羽間収、谷正之、中島憲宏
“原子力プラントのための耐震情報管制システム構想, 2 ; 組立構造解析による 3 次元仮想振動台の構築”
日本原子力学会 2006 年秋の大会
- N. Nakajima et al.
“Deployment of computational science in nuclear engineering and science with HPC and network technology”
International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC '06)
- M. Ida
“On the transition frequencies of acoustically coupled gas bubbles”
2006 APS Division of Fluid Dynamics 59th Annual Meeting (DFD '06)
- 篠原主勲、奥田洋司、伊東聰、中島憲宏、井田真人
“揚力を最大化するための随伴変数法による形状最適化”
第 20 回数値流体力学シンポジウム

【高度計算機技術開発室・専用シミュレータ基盤技術開発】

- 松岡浩、菊池範子
“パッケージフローモデルによる原子炉システム過渡挙動の直感的理解法”
日本機械学会 2006 年度年次大会

【シミュレーション技術開発室・材料シミュレーション】

- J. Li, F. Shimizu, S. Ogata and H. Kaburaki
“Approaching the universal yield point of bulk metallic glasses from molecular dynamics simulations”
135th Annual Meeting & Exhibition (TMS 2006)
- M. Shiga and M. Tachikawa
“Accelerating combined quantum mechanical/molecular mechanical molecular dynamics using multiple-time-scale approach combined with perturbation theory”
Symposium on Progress and Future Prospects in Molecular Dynamics Simulation
- 海老原健一、鈴木知明、蕪木英雄、高井健一
昇温脱離法による水素放出プロファイルの数値モデリング
「材料中の水素状態分析法標準化の基盤構築」フォーラム
- 山田進、今村俊幸、町田昌彦
“固有値計算に対する適応的シフト前処理付き共役勾配法の収束性”

日本応用数学会環瀬戸内応用数理研究部会第10回シンポジウム

- 渡辺正
“液滴の振動周波数に及ぼす振幅と回転の影響”
日本機械学会 2006 年度年次大会
- H. Kaburaki et al.
“Microscopic simulations on the hardening and embrittlement of materials”
International Symposium on Fusion Reactor Materials Development
- T. Suzudo et al.
“Three-dimensional meso-scale Monte-Carlo simulation of the growth of bubbles”
International Symposium on Fusion Reactor Materials Development
- 山口正剛
“第一原理計算による粒界脆化の研究”
日本金属学会 2006 年秋期（第 139 回）大会
- 山口正剛、志賀基之、蕪木英雄
“第一原理計算による金属における粒界脆化の研究”
日本原子力学会 2006 年秋の大会
- M. Shiga
“Accelerating QM/MM molecular dynamics using multiple-time-scale approach and perturbation theory”
Gordon Research Conference on Computational Chemistry
- 志賀基之、立川仁典
“多重時間スケール法を取り入れた ab initio QM/MM 分子動力学”
日本化学会分子構造総合討論会（2006）
- M. Machida
“Confinement effects for Josephson vortices in layered high-Tc superconductors”
International Workshop on Mesoscopic Superconductivity and Magnetism (MesoSuperMag 2006)
- 蕪木英雄
“格子欠陥の分子動力学”
第 55 期第 2 回日本材料学会分子動力学部門委員会
- 町田昌彦、山田進、大橋洋士、松本秀樹
“フェルミオン光学格子で普遍的に見られる非一様な基底状態”
日本物理学会 2006 年秋季大会（物性）
- 町田昌彦、小山富男
“高温超伝導体・固有ジョセフソン接合における巨視的トンネル効果；集団的特性，1”
日本物理学会 2006 年秋季大会（物性）
- 清水大志、尾方成信、J. Li
“金属ガラスにおけるせん断帯進展の大規模分子動力学シミュレーション”
第 50 回日本学術会議材料工学連合講演会
- 山口正剛、西山裕孝、蕪木英雄

“Iron grain boundary decohesion by phosphorous segregation; A First-principles study”

13th Meeting of the International Group on Radiation Damage Mechanisms in Pressure Vessel Steels (IGRDM-13)

- 佐々成正

“極低温原子気体における非線形ダイナミクス”

九州大学応用力学研究所平成 18 年度共同利用研究集会「非線形波動現象における基礎理論、数値計算及び実験のクロスオーバー」

- S. Yamada et al.

“High-performance computing for exact numerical approaches to quantum many-body problems on the earth simulator”

International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC '06)

- 山田進、今村俊幸、町田昌彦

“量子多体問題における自由度の壁とそれを越える並列対角化アルゴリズムの開発；地球シミュレータ上での超並列量子計算の現状”

京都大学数理解析研究所研究集会「数値シミュレーションを支える応用数理」

- J. Li, F. Shimizu and S. Ogata

“Size effects in metallic glass”

Materials Research Society 2006 Fall Meeting

- M. Machida

“Numerical simulations for Abrikosov and Josephson vortices”

International Autumn Seminar on Nanoscience and Engineering in Superconductivity for Young Scientists

- M. Yamaguchi et al.

“The Effects of various segregated solutes on the embrittlement of bcc Fe grain boundaries by the first-principles calculation”

Materials Research Society 2006 Fall Meeting

- T. Suzudo, H. Kaburaki and M. Itakura

“Mesoscopic simulation of fuel-material behaviors under irradiation; A Computer modeling on the bubble growth in UO₂ fuel”

New Cross-over Project Workshop-3

- J. Li, F. Shimizu and S. Ogata

“Yield point of metallic glass”

136th Annual Meeting & Exhibition (TMS 2007)

- F. Shimizu, S. Ogata and J. Li

“Large-scale molecular dynamics simulation of shear band propagation in metallic glass”

136th Annual Meeting & Exhibition (TMS 2007)

- 山口正剛、西山裕孝、蕪木英雄

“BCC 鉄粒界のリン偏析による凝集エネルギー低下”

軽水炉材料研究会

【シミュレーション技術開発室・生命情報解析】

- 安達基泰、玉田太郎、佐藤勝也、由良敬、鳴海一成、黒木良太
“放射線抵抗性細菌ダイノコッカス由来の新規な DNA 修復促進蛋白質 PprA の DNA との相互作用解析”
第 6 回日本蛋白質科学会年会
- O. T. P. Kim, K. Yura and N. Go
“Structure-based bioinformatics analyses and a prediction method of protein-RNA interfaces”
20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress
- M. Shionyu et al.
“Systematic detection of protein regions affected by alternative splicing”
20th IUBMB International Congress of Biochemistry and Molecular Biology and 11th FAOBMB Congress
- 由良敬
“生体超分子構成タンパク質にみられる相互作用の様式”
第 6 回日本蛋白質科学会年会
- 安達基泰、玉田太郎、佐藤勝也、由良敬、鳴海一成、黒木良太
“放射線抵抗性細菌ダイノコッカス由来の新規な DNA 修復促進蛋白質 PprA の DNA との相互作用解析”
第 6 回日本蛋白質科学会年会
- 由良敬
“タンパク質立体構造情報にもとづく機能推定； RNA 結合タンパク質推定を中心に”
文部科学省タンパク 3000 プロジェクト； 第 5 回産学連携フォーラム in 仙台
- 由良敬、郷通子
“真核生物遺伝子産物の多様性を生み出している選択的スプライシングのタンパク質立体構造への影響”
日本進化学会 2006 年大会
- 松本淳
“生体超分子の電子顕微鏡像への X 線結晶構造のあてはめ手法の開発”
特定領域研究「生体超分子の構造形成と機能制御の原子機構」第 2 回ワークショップ
- 松本淳
“電子顕微鏡像に基づくリボソームの立体構造解析”
特定領域研究「生体超分子の構造形成と機能制御の原子機構」第 2 回公開シンポジウム
- A. Matsumoto
“Predicted effects of local conformational coupling and external restraints on the torsional properties of single DNA molecules”

5th East Asian Biophysics Symposium ¥& 44th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan

- O. Kim, K. Yura and N. Go
“Computational analyses of amino acid residue propensity in protein-RNA interfaces and prediction methods for the interfaces”
5th East Asian Biophysics Symposium ¥& 44th Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan
- K. Nakamura, K. Yura and N. Go
“Prediction of metal-binding sites from high-throughput metalloproteomics data”
Pacific Symposium on Biocomputing 2007 (PSB 2007)
- A. Matsumoto
“Structural analysis of ribosome based on the elastic network normal mode analysis”
Biophysical Society 51th Annual Meeting

3. 研究報告書・技術報告書等

- 志賀基之
“水の比熱；経路積分分子動力学法によるアプローチ”
アンサンブル、7巻、2号
- 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ー年報
- 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ー年報
- 由良敬
“生体関連分子，タンパク質，タンパク質の構造変化，RNA，DNA，コンタクトマップ，DALI，
組合せ拡張法”
バイオインフォマティクス辞典
- 中島憲宏、新谷文将、平山俊雄
“原子力機構における計算科学の展開；進むシミュレーション研究開発”
原子力 eye、52巻、10号
- 町田昌彦、小山富男
“Vortex structure and dynamics in fermi superfluids; From weakly BCS to strongly-coupled BEC superfluid”
Proceedings of Ryukoku Workshop on Mathematical Aspects of Pattern Formation and Dynamics in Dissipative Systems
- 羽間収、鈴木喜雄、松原仁、Tian, R.、西田明美、谷正之、中島憲宏
“Towards construction of a numerical testbed for nuclear power plants”
Proceedings of 7th MpCCI User Forum

- 山口正剛、西山裕孝、志賀基之、蕪木英雄、松澤寛
“Impurity-induced decohesion in iron grain boundary; A First-principles study”
Proceedings of 3rd International Conference on Multiscale Materials Modeling
- 篠原主勲、奥田洋司、伊東聰、中島憲宏、井田真人
“随伴変数法による配管形状最適化”
日本応用数学会 2006 年度年会講演予稿集
- 篠原主勲、奥田洋司、伊東聰、中島憲宏、井田真人
“Shape optimization using an adjoint variable method in ITBL grid environment”
Proceedings of 14th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-14)
(CD-ROM)
- 高瀬和之、吉田啓之、柴田光彦、北村竜明、久米悦雄、Zhe, X.
“液膜挙動に及ぼす燃料棒曲がりの影響”
日本機械学会流体工学部門講演会講演論文集
- Y. Suzuki et al.
“Interoperability between UNICORE and ITBL”
Proceedings of 7th International Meeting on High Performance Computing for
Computational Science (VECPAR’ 06)/Workshop on Computational Grids and Clusters
(WCGC’ 06) (CD-ROM)

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- 2006 年 8 月 8 日
“高度なセキュリティーで遠隔地からの核融合実験を実現－ITER 遠隔実験の実現へ向けて大きく前進－”

5. 特許の出願及び登録

- 登録番号 3845710 (登録日：H18 年 9 月 1 日)
“ベクトル計算機上での間接アドレス参照を含む加算の高速処理方法、プログラム及びそれを用いたベクトル計算機”
- 登録番号 3845711 (登録日：H18 年 9 月 1 日)
“ベクトル計算機上での間接アドレス参照を含む加算の高速処理方法、プログラム及びそれを用いたベクトル計算機”
- 登録番号 3891338 (登録日：H18 年 12 月 15 日)
“物質の精密構造解析方法”

6. 研究発表会等の開催

- 第 14 回 CCSE ワークショップ (H18 年 6 月 30 日)
“HPC を実現する高速アルゴリズムと計算モデル” (参加者：機構外 53 名、機構内 27 名)

- ・ 第15回 CCSE ワークショップ (H19年3月1日)
“FBR サイクル研究への計算科学の活用” (参加者: 機構外 21 名、機構内 29 名)
- ・ 量子生命情報解析チームセミナー (計 22 回開催)
H18年4月12日: 及川雅隆 (特別研究生) 講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
4月19日: 河野秀俊 (量子ビーム応用研究部門) 講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
5月10日: 徳久淳師 (量子ビーム応用研究部門) 及び中川洋 (量子ビーム応用研究部門) 講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
5月17日: 由良敬 (研究副主幹) 講演及び福原直志 (奈良先端大学院大学博士課程) 招待講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
5月24日: 堤遊 (JST 博士研究員) 招待講演及びChai Li-Hong (MEXT 交換研究員) 講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
6月7日: 松本淳 (研究員) 及び中村建介 (任期付研究員) 講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
6月14日: 石田恒 (量子ビーム応用研究部門) 講演及び川端猛 (奈良先端大学院大学助教授) 招待講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
6月21日: 及川雅隆 (特別研究生) 講演及び米谷佳晃 (CREST 博士研究員) 招待講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
6月28日: 徳久淳師 (量子ビーム応用研究部門) 及び由良敬 (研究副主幹) 講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
7月5日: 堤遊 (CREST 博士研究員) 招待講演及び福原直志 (奈良先端大学院大学博士課程) 招待講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
7月12日: 中村建介 (任期付研究員) 及びChai Li-Hong (MEXT 交換研究員) 講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
7月19日: 松本淳 (研究員) 及び河野秀俊 (量子ビーム応用研究部門) 講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
7月26日: 川端猛 (奈良先端大学院大学助教授) 招待講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
8月21日: Jose-Maria Carazo (CREST 招聘研究員) 招待講演 (参加者: 機構内 11 名、外 6 名)
9月13日: 森林健悟 (量子ビーム応用研究部門) 及び福田祐仁 (量子ビーム応用研究部門) 講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
9月20日: 石田恒 (量子ビーム応用研究部門) 講演及び米谷佳晃 (CREST 博士研究員) 招待講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
9月27日: 及川雅隆 (特別研究生) 及び徳久淳師 (量子ビーム応用研究部門) 講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
10月4日: 由良敬 (研究副主幹) 講演及び福原直志 (奈良先端大学院大学博士課程) 招待講演 (参加者: 機構内 11 名、外 5 名)
10月11日: Lars Meinhold (ドイツハイデルベルグ大学研究員) 招待講演 (参加者: 機構内 11 名、外 6 名)

- 10月18日：Marin van Heel（英国帝国大学ロンドン教授）招待講演（参加者：機構内11名、外6名）
- 10月25日：Chai Li-Hong（MEXT 交換研究員）講演（参加者：機構内11名、外5名）
- 11月1日：堤遊（JST 博士研究員）招待講演及び中村建介（任期付研究員）講演（参加者：機構内11名、外5名）

7. 受賞等

- ・ 国際会議 SuperComputing SC06 にて、ゴードンベル賞ファイナリスト選出
S. Yamada, T. Imamura, T. Kano and M. Machida
“High-Performance Computing for Exact Numerical Approaches to Quantum Many-Body Problems on the Earth Simulator”
SC|06 (11-17 November 2006, Tampa, USA)
- ・ 日本原子力学会計算科学技術部会賞部会業績賞受賞
西田明美、鈴木喜雄、松原仁
「分散並列計算機環境における原子力プラントのための3次元仮想振動台システムの構築」
日本原子力学会、名古屋、平成19年3月29日

8. 外部資金の獲得に関連する事項

●研究の受託

室	予算額(千円) (件数)
高度計算機技術開発室	238,366 (3)
シミュレーション技術開発室	19,159 (2)

【高度計算機技術開発室】

- ・ サイエンスグリッド NAREGI プログラムの研究開発—グリッドミドル利活用技術の研究開発—(文部科学省) 224,681 千円
- ・ 原子力プラント全容解析のための接合部連成モデリングの研究開発(文部科学省) 11,685 千円
- ・ 日仏間国際グリッドコンピューティング環境と国際的マトリクスソルバー予測システムの構築に関する研究開発(科学技術振興機構) 2,000 千円

【シミュレーション技術開発室】

- ・ ミクロ・メゾ・マクロの各スケールのシミュレーション研究基礎の構築、各スケールに跨るマルチスケール・マルチフィジックス研究の実施、及び研究全般の統括(科学技術振興機構) 14,859 千円
- ・ 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) 4,300 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	2,300 (2)
シミュレーション技術開発室	83,900 (14)

【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)) 1,000 千円
- ・ 浮遊液滴の非線形ダイナミクスに関する研究 (日本学術振興会:科研費(基盤B)) 1,300 千円

【シミュレーション技術開発室】

- ・ 量子渦糸乱流の大規模シミュレーションによる研究 (文部科学省:科研費(特定領域)) 1,100 千円
- ・ 量子原子気体に対する新規数値シミュレーション手法の研究開発 (日本学術振興会:科研費(基盤C)) 2,000 千円
- ・ 量子流体および超伝導体中の量子渦糸ダイナミクス (日本学術振興会:科研費(基盤C)) 1,800 千円
- ・ 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 千円相当 (旅費・物品等の支給)
- ・ 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)) 300 千円相当 (旅費・物品等の支給)
- ・ 平成 18 年度高照射量領域の照射脆化予測一粒界・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)) 3,600 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 千円相当 (旅費・物品等の支給)
- ・ ナノ超伝導の新奇渦糸状態の相互作用 (日本学術振興会:科研費(基盤C)) 300 千円相当 (旅費・物品等の支給)
- ・ 長寿命プラント照射損傷管理技術に関する研究開発 (科学技術振興機構:革新技術開発研究) 9,400 千円
- ・ 照射・高線量領域の材料挙動制御のための新しいエンジニアリング (文部科学省:原子力新クロスオーバー) 10,000 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)) 22,900 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)) 30,000 千円
- ・ ダイナミ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)) 1,000 千円
- ・ 選択的スプライシングを受けたタンパク質の立体構造モデリングによる機能解析 (日本学術振興会:科研費(基盤B)) 600 千円相当 (旅費・物品等の支給)

9. 産学官との連携に関連する事項

室	研究内容	共同研究	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	15	0	0
	耐震計算科学技術開発	1	0	0
	専用シミュレータ基盤技術開発	0	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	1	0	0
	生命情報解析	6	0	1
合計		23	0	1

●共同研究

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発】

- ・ グリッド環境における地殻解析システムの構築（理化学研究所）
- ・ 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）
- ・ グリッドコンピューティング環境に最適な可視化システム構築（㈱ケイ・ジー・ティービジュアルイノベーション部）
- ・ グリッド環境におけるメカトロニクス設計支援に関する研究（㈱日立製作所機械研究所）
- ・ 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（京都大学学術情報メディアセンター）
- ・ 複数のスーパーコンピュータを利用したナノテクシミュレーション環境の構築（東北大学金属材料研究所計算材料学センター）
- ・ 統合シミュレーション技術を用いた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情報科学センター）
- ・ 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（東京大学大学院工学系研究科）
- ・ グリッド環境における 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、近畿大学）
- ・ 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（電気通信大学電気通信学部情報工学科）
- ・ 核融合研究における研究コミュニティ・システム開発に関する研究（九州大学応用力学研究所）
- ・ 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（京都大学大学院工学研究科）
- ・ グリッド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（山口大学メディア基盤センター）
- ・ 核融合研究遠隔実験・解析システム開発に関する研究（大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 核融合科学研究所）
- ・ グリッド環境における物性解析・材料設計シミュレーション（大阪大学産業科学研究所）

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】

- ・ 基礎・建家の耐震シミュレーションに関する研究（株竹中工務店）
【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）
【シミュレーション技術開発室・生命情報解析】
- ・ 放射線治療高度化のための超並列シミュレーションの開発（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）
- ・ 生体物質分子運動のシミュレーションシステム開発（東京大学分子生物学研究所）
- ・ 計算科学を用いた生命情報解析研究（A）（名古屋大学大学院理学研究科）
- ・ 計算科学を用いた生命情報解析研究（B）（東京大学分子生物学研究所）
- ・ 計算科学を用いた生命情報解析研究（E）（長岡技術科学大学工学部生物系）

●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）

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、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 27 件に及ぶ機構内連携を実施した。

(1) 損傷頻度評価

部署：(東海)安全研究センター

概要：開発中の耐震解析技術を用いて損傷頻度評価に貢献する。

(2) ROSA 計画に関する実験と解析

部署：(東海)安全研究センター

概要：OECD/NEA ROSA プロジェクトにおける実験の計画とデータ処理及び可視化支援、解析コード整備等を担当する。

(3) 水銀ターゲット内キャビテーションの解析

部署：(東海)量子ビーム応用研究部門

概要：J-PARC 水銀ターゲット内で起こるキャビテーションの抑制を目指した解析を行う。

(4) トカマク乱流シミュレーションの計算手法開発

部署：(那珂)核融合研究開発部門

概要：トカマク乱流シミュレーションの開発に必要な高精度計算手法の提案・共同開発を行う。

(5) 耐震解析技術に関する研究開発

部署：(大洗)高温工学試験研究炉部、(東濃)地層処分研究開発部門

概要：開発中の耐震解析技術による大規模耐震解析システムの構築を行う。

(6) 大規模解析技術の管板構造への適用

- 部署：(大洗)次世代原子力システム研究開発部門
概要：次世代 FBR の蒸気発生器開発における熱応力解析を行う。
- (7) 化学反応を伴う流れのシミュレーション
部署：(大洗)次世代原子力システム研究開発部門、(東海)原子力基礎工学研究部門
概要：FBR 開発に関連し、ナトリウム-水反応を伴う流れのモデリングおよび解析を行う。
- (8) 地下構造物の振動解析に関する技術協力
部署：(東濃)地層処分研究開発部門
概要：放射性廃棄物処分場の健全性評価に必要な振動解析に関する技術協力を行う。
- (9) 並列分散技術の数値環境システムへの適用
部署：(東海)原子力基礎工学研究部門
概要：原子力事故等の緊急時対応に資するため、分散計算環境を用いてシステムを構築。
- (10) 沸騰流の並列分散可視化
部署：(東海)原子力基礎工学研究部門
概要：次世代水冷却原子炉の沸騰流のボイド率分布の VR 装置での高速な可視化の実現。
- (11) JPARC 情報システムにおける個人認証セキュリティ技術
部署：(東海)量子ビーム応用研究部門
概要：J-PARC 一般ネットワークの整備、認証、データベース、セキュリティの方針検討。
- (12) ITER のための核融合遠隔実験支援システム開発
部署：(那珂)核融合研究開発部門
概要：核融合研究における遠隔実験、遠隔解析システムの構築。
- (13) レーザーEUV 光源開発のための連携シミュレーションにおけるグリッド技術利活用
部署：(関西)量子ビーム応用研究部門
概要：EUV 光源プラズマ物理の解明、実用化へ向け、グリッド技術を活用し、有効性を評価する。
- (14) 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：(東海)安全研究センター
概要：H17 年度より、安全研究センター主体で JNES 受託研究「高照射量領域の照射脆化予測」が行われており、CCSE では理論シミュレーションによる支援を行っている。
- (15) 照射燃料に関する数値シミュレーション研究
部署：(東海)安全研究センター
概要：新クロスオーバー研究の計画に従い、核分裂下での Xe バブルの挙動シミュレーションを行っている。
- (16) 超伝導ナノ構造物性のシミュレーション研究と実験による検証
部署：(東海)先端基礎研
概要：シミュレーションにより、超伝導体中の磁束渦糸等の構造を明らかにし、新奇

応用デバイス提案を共同で行う。

- (17) 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：(東海)原子力基礎工学研究部門
 概要：応力腐食割れ及び照射材料の硬化、脆化特性を数値的に予測、理解するため、ミクロからマクロまでのシミュレーション手法を開発し、数値実験を行う。
- (18) 自由電子レーザーによるシリコン同位体の分離と熱伝導シミュレーション
 部署：(東海)量子ビーム応用研究部門
 概要：高濃縮同位体の熱的特性を予測するため、CCSE では熱伝導率を数値シミュレーションする手法の開発を実施している。
- (19) 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：(東海)量子ビーム応用研究部門
 概要：シミュレーションにより、中性子検出等の非平衡過程を実験に先駆けて予測する一方、実験事実の再現を行う。
- (20) 高温中性子照射、SiC半導体性能向上、第一原理計算の並列化手法の研究
 部署：(高崎)量子ビーム応用研究部門
 概要：地球シミュレータプロジェクトを通して、大規模シミュレーション技術等の利用技術の共有化を計る。
- (21) アクチニド化合物の基礎物性値評価シミュレーション研究
 部署：(大洗)次世代原子力システム研究開発部門
 概要：H18年度よりアクチニドを含む化合物の電子構造計算についての協力を開始。当初は、大規模シミュレーション化等についての研究調査を担当する。
- (22) 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：(大洗)次世代原子力システム研究開発部門
 概要：JST 公募の計画に従い、ヘリウム脆化に関する第一原理計算やメソスケールシミュレーションの計算を行う。
- (23) 燃料及び材料照射に関わる基礎物質構造評価シミュレーション研究
 部署：(大洗)次世代原子力システム研究開発部門
 概要：今後協力できる内容を検討中、特に ODS 鋼での酸化物の析出や残留 α 相出現のシミュレーションを検討中。
- (24) 酵母がもつウラン結合タンパク質の探索
 部署：(東海)先端基礎研究センター
 概要：酵母ゲノムにコードされている全タンパク質から、ウランに配位するタンパク質の推定。
- (25) 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
 部署：(東海)量子ビーム応用研究部門、(高崎)量子ビーム応用研究部門、(関西)量子ビーム応用研究部門、量子ビーム応用研究部門量子生命フロンティア研究特定ユニット
 概要：DNA 修復促進タンパク質 PprA の立体構造予測と DNA 相互作用予測。
- (26) 放射線抵抗性細菌 *Deinococcus-Thermophilus* のゲノム解読とゲノムデータベース

の開発

部署：(高崎)量子ビーム応用研究部門、(関西)量子ビーム応用研究部門

概要：ゲノム塩基配列のアノテーション。

(27)生体分子シミュレーションコード開発

部署：(関西)量子ビーム応用研究部門

概要：生体分子シミュレーションソフトウェア SCUBA の開発。

連携している機構内組織については次のとおり。

計算科学に関する原子力機構内連携体制 (7部門/1部/2センター連携)

- ◆ 総ての研究開発部門との間で、支援・連携研究を推進
- ◆ 各研究部門における計算科学的研究の底上げを実施

	東海		那珂	高崎	大洗	関西	東濃				
	安全研究センター	先端基礎研究センター	原子力基礎工学研究部門	量子ビーム応用研究部門	核融合研究開発部門	量子ビーム応用研究部門	量子ビーム応用研究部門	高温工学試験研究炉部	次世代原子力システム研究開発部門	量子ビーム応用研究部門	地層処分研究開発部門
高度計算機技術開発室	① ②		③ ⑨ ⑩	④ ⑪	⑤ ⑫		⑥	⑦ ⑧		⑬	⑭ ⑮
シミュレーション技術開発室	⑯ ⑰	⑱ ⑲	⑳ ㉑ ㉒ ㉓	㉔ ㉕ ㉖		㉗ ㉘	㉙ ㉚	㉛ ㉜	㉝ ㉞	㉟ ㊱	㊲ ㊳

①	損傷頻度評価
②	ROSA計画に関する実験と解析
③	化学反応を伴う流れのシミュレーション
④	水銀ターゲット内キャビテーションの解析
⑤	トカマク乱流シミュレーションの計算手法開発
⑥	耐震解析技術の実問題への適用
⑦	大規模解析技術の管板構造への適用
⑧	地下建造物の振動解析に関する技術協力
⑨	並列分散技術の数値環境システムへの適用
⑩	沸騰流の並列分散可視化
⑪	JPARC情報システムにおける個人認証セキュリティ技術
⑫	ITERのための核融合遠隔実験支援システム開発
⑬	レーザーEUV光源開発のための連携シミュレーションにおけるグリッド技術活用
⑭	原子炉圧力容器鋼の高経年化対策研究(照射脆化予測)
⑮	照射燃料に関する数値シミュレーション研究
⑯	超伝導ナノ構造物性のシミュレーション研究と実験による検証
⑰	応力腐食割れ、照射材料の数値シミュレーション研究
⑱	自由電子レーザーによるシリコン同位体の分離と熱伝導シミュレーション
⑲	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
⑳	高温中性子照射、SiC半導体性能向上、第一原理計算の並列化手法の研究
㉑	アクチノイド化合物の基礎物性評価シミュレーション研究
㉒	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
㉓	燃料及び材料照射に関わる基礎物質構造評価シミュレーション研究
㉔	酵母がもつウラン結合タンパク質の検索
㉕	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
㉖	放射線抵抗性細菌デイクラス・グランディスのゲノム解読とゲノムデータベースの開発
㉗	生体分子シミュレーションコード開発

1.1. 国際協力

国際協力の一覧を以下に示す。

(1) フラウンホファー研究機構スカイ研究所 (SCAI)：独国

“計算科学技術の研究開発における計算科学技術の研究開発における協力に関するフラウンホファー研究機構の科学計算アルゴリズム研究所(SCAI)との間の取決め”

(1998年～)

(2) シュツットガルト大学高度計算機センター (HLRS)：独国

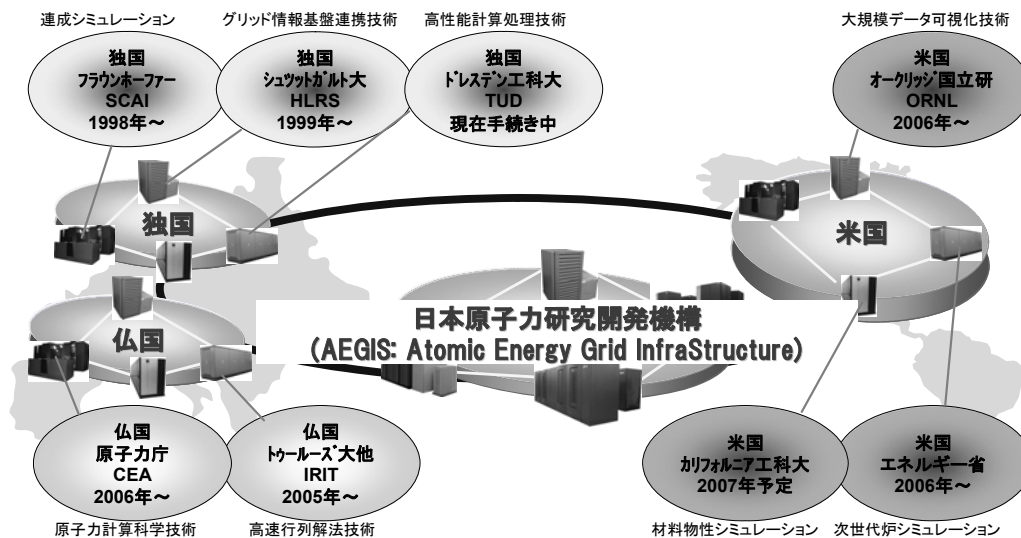
“計算科学技術の分野における協力に関する日本原子力研究開発機構とシュツットガルト大学との間の取決め”

(1999年～)

- (3) トゥールーズ情報研究所 (IRIT)、欧州計算科学推進研究センター (CERFACS)、ボルドー情報研究所 (LaBRI)、並列情報学研究所 (LIP) : 仏国
 “ハイパフォーマンス疎行列解法ツールの研究開発協力に関する日本原子力研究所と欧州計算科学推進研究センター、トゥールーズ情報研究所、ボルドー情報研究所、並列情報学研究所との間の覚書”
 (2005年～)
- (4) 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～)
- (5) エネルギー省 (DOE) : 米国
 “核不拡散・保障措置分野での研究開発協力取決め” (この中で計算科学の協力を推進)
 (2006年～)
- (6) オークリッジ国立研究所 (ORNL) : 米国
 “日本原子力研究開発機構とオークリッジ国立研究所 (ORNL) との間の原子力分野における大規模データの高速可視化に関する共同研究”
 (2006年～)
- (7) ドレスデン工科大学 (TUD) : 独国
 “大規模並列アルゴリズムの性能解析に関するドレスデン工科大学との間の共同研究” (締結手続き中)
- (8) カリフォルニア工科大学 (Caltech) : 米国
 (2007年予定)

AEGIS による原子力国際インフラ整備

国際連携により、原子力研究のための国際的な情報基盤の構築を目指す



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
物質の量	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
体積	立方メートル	m ³
速度	メートル毎秒	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s ²
波数	毎メートル	m ⁻¹
密度 (質量密度)	キログラム毎立方メートル	kg/m ³
質量体積 (比体積)	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
(物質量の) 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 ²⁴	ヨタ	Y	10 ⁻¹	デシ	d
10 ²¹	ゼタ	Z	10 ⁻²	センチ	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	ゼプト	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	SI基本単位による表し方
平面角	ラジアン ^(a)	rad		m ⁰ ・m ⁻¹ =1 ^(b)
立体角	ステラジアン ^(a)	sr ^(c)		m ² ・m ⁻² =1 ^(b)
周波数	ヘルツ	Hz		s ⁻¹
力	ニュートン	N		m ⁰ ・kg ¹ ・s ⁻²
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m ²	m ⁻¹ ・kg ¹ ・s ⁻²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N・m	m ² ・kg ¹ ・s ⁻²
工率, 放射束	ワット	W	J/s	m ² ・kg ¹ ・s ⁻³
電荷, 電気量	クーロン	C		s ¹ ・A
電位差 (電圧), 起電力	ボルト	V	W/A	m ² ・kg ¹ ・s ⁻³ ・A ⁻¹
静電容量	ファラド	F	C/V	m ⁻² ・kg ⁻¹ ・s ⁴ ・A ²
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	m ² ・kg ¹ ・s ⁻³ ・A ⁻²
コンダクタンス	ジーメン	S	A/V	m ⁻² ・kg ⁻¹ ・s ³ ・A ²
磁束密度	ウェーバ	Wb	V・s	m ² ・kg ¹ ・s ⁻² ・A ⁻¹
磁束	テスラ	T	Wb/m ²	kg ¹ ・s ⁻² ・A ⁻¹
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	m ² ・kg ¹ ・s ⁻² ・A ⁻²
セルシウス温度	セルシウス度 ^(d)	°C		K
光照射	ルーメン	lm	cd・sr ^(e)	m ² ・m ⁻² ・cd=cd
(放射性核種の) 放射能	ルクス	Lx	lm/m ²	m ² ・m ⁻² ・cd=m ² ・cd
吸収線量, 質量エネルギー一分与, カーマ線量当量, 周辺線量当量, 方向性線量当量, 個人線量当量, 組織線量当量	グレイ	Gy	J/kg	s ⁻¹
	シーベルト	Sv	J/kg	m ² ・s ⁻²

- (a) ラジアン及びステラジアンの使用は、同じ次元であっても異なった性質をもった量を区別するときの組立単位の表し方として利点がある。組立単位を形成するときのいくつかの用例は表4に示されている。
- (b) 実際には、使用する時は記号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“1”は明示されない。
- (c) 測光学では、ステラジアンの名称と記号srを単位の表し方の中にそのまま維持している。
- (d) この単位は、例としてミリセルシウス度m°CのようにSI接頭語を伴って用いても良い。

表4. 単位の中に固有の名称とその独自の記号を含む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 ⁻¹ ・kg ¹ ・s ⁻¹
表面張力	ニュートンメートル	N・m	m ² ・kg ¹ ・s ⁻²
角速度	ニュートン毎メートル	N/m	kg ¹ ・s ⁻²
角加速度	ラジアン毎秒	rad/s	m ⁰ ・m ⁻¹ ・s ⁻¹ =s ⁻¹
熱流密度, 放射照度	ラジアン毎平方秒	rad/s ²	m ⁰ ・m ⁻¹ ・s ⁻² =s ⁻²
熱容量, エントロピー	ワット毎平方メートル	W/m ²	kg ¹ ・s ⁻³
質量熱容量 (比熱容量), 質量エントロピー	ジュール毎キログラム	J/kg	m ² ・kg ¹ ・s ⁻² ・K ⁻¹
質量エネルギー (比エネルギー)	ジュール毎キログラム	J/kg	m ² ・s ⁻² ・K ⁻¹
熱伝導率	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m・K)	m ⁰ ・kg ¹ ・s ⁻³ ・K ⁻¹
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ⁻¹ ・kg ¹ ・s ⁻²
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	m ⁰ ・kg ¹ ・s ⁻³ ・A ⁻¹
体積電荷	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ⁻³ ・s ¹ ・A
電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² ・s ¹ ・A
誘電率	ファラド毎メートル	F/m	m ⁻³ ・kg ⁻¹ ・s ⁴ ・A ²
透磁率	ヘンリー毎メートル	H/m	m ⁰ ・kg ¹ ・s ⁻² ・A ⁻²
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mol	m ² ・kg ¹ ・s ⁻² ・mol ⁻¹
モルエントロピー	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol・K)	m ² ・kg ¹ ・s ⁻² ・K ⁻¹ ・mol ⁻¹
照射線量 (X線及びγ線)	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ ・s ¹ ・A
吸収線量	グレイ	Gy	m ² ・s ⁻²
放射線強度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m ⁴ ・m ⁻² ・kg ¹ ・s ⁻³ =m ² ・kg ¹ ・s ⁻³
放射輝度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	W/(m ² ・sr)	m ² ・m ⁻² ・kg ¹ ・s ⁻³ =kg ¹ ・s ⁻³

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
ネーパ	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	海里	1海里=1852m
ノット	ノット	1ノット=1海里毎時=(1852/3600)m/s
アール	a	1a=1 dam ² =10 ² 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	1Å=0.1nm=10 ⁻¹⁰ m
バイン	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
ポアズ	P	1 P=1 dyn・s/cm ² =0.1Pa・s
ストークス	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 ³ Wb
スチルブ	sb	1 sb=1cd/cm ² =10 ⁴ cd/m ²
ホト	ph	1 ph=10 ⁴ lx
ガリ	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
キュリー	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 hm
ジャンマー	y	1 y=1 nT=10 ⁻⁹ T
ジャンスキー	Jy	1 Jy=10 ⁻²⁶ W・m ⁻² ・Hz ⁻¹
フェルミ	fm	1 fermi=1 fm=10 ⁻¹⁵ m
メートル系カラット	metric carat	1 metric carat = 200 mg = 2×10 ⁻⁴ 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	
マイクロン	μ	1 μ=1μm=10 ⁻⁶ m

