



平成19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 FY2007

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

February 2009

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

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

独立行政法人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
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to
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, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2009

平成 19 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

(2008 年 12 月 9 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 19 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 FY2007

Center for Computational Science & e-Systems

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

(Received December 9, 2008)

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).

CCSE 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 FY2007.

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 19 年度計画 | 3 |
| 2. 1 中期計画 | 3 |
| 2. 2 平成 19 年度計画 | 3 |
| 3. 平成 19 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 19 年度シミュレーション工学研究予算及び人員 | 21 |
| 平成 19 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 FY2007 | 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)

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 19 年度の業務運営に関する計画（平成 19 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）。

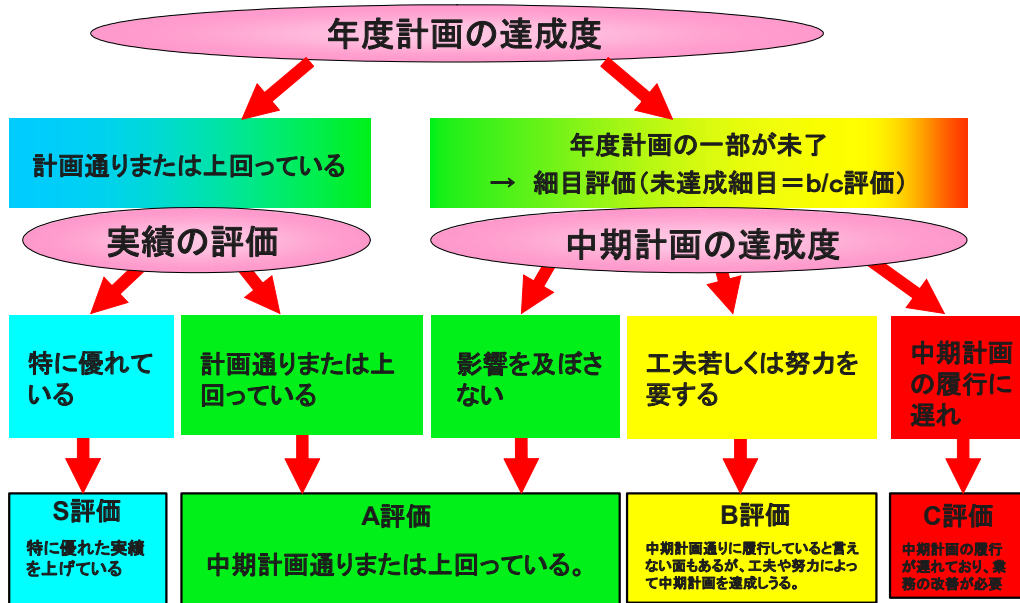


図 1. 1 機構における評価基準

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

事業進捗度の評価に加え個別の事業内容に即した視点に
立った評価を行うことにより総合的な評価体系を構築

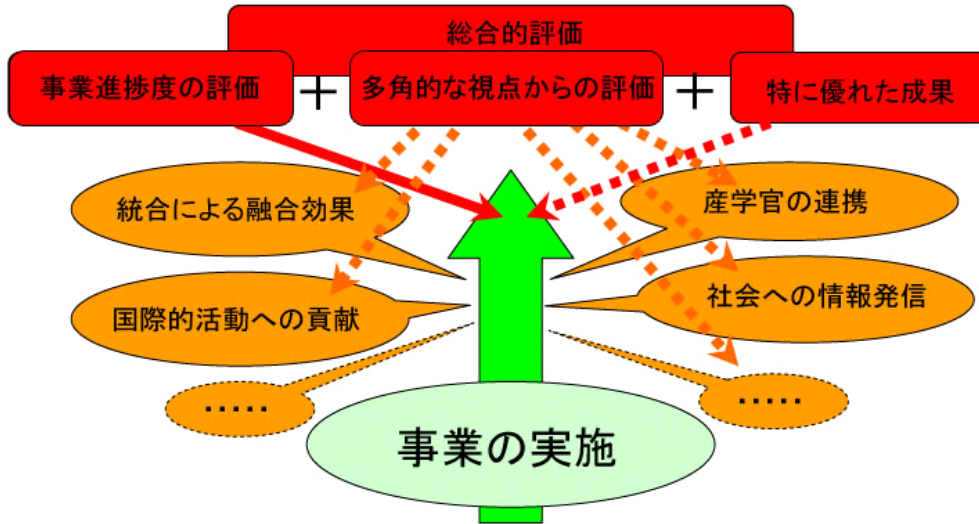


図 1. 2 機構における「評価の視点」のイメージ

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（表 1.1 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。

表 1. 1 シミュレーション工学研究における評価の視点

| | | | |
|--------------|--------|---|--|
| 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。 【加点項目】 |
| | 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？ | |
| | | ★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 | | | |

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 19 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 19 年度計画

中期計画を実現するための平成 19 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。

平成 18 年（2006 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。

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、新たに独国における研究協力を追加し、仏国および米国と研究協力を継続する。

国からの要請に基づき、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。

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

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（2006 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。

平成 18 年（2006 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、90 日以内で計算できる要素技術を開発する。

生物影響上重要なクラスター DNA 損傷の修復機構の解明のために、8-オキシグアニンと AP サイトを持つクラスター損傷と修復酵素 MutT との相互作用を明らかにする。

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、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。

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に着手する。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。

なお、平成 19 年度計画のうち「生物影響上重要なクラスター DNA 損傷の修復機構の解明のために、8-オキシグアニンと AP サイトを持つクラスター損傷と修復酵素 MutT との相互作用を明らかにする。」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 19 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 19 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 19 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 19 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 19 年度の実績を踏まえた平成 20 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 20 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19年度研究開発実績及び成果の意義等

| 中期計画 | H19年度計画 | H19実績報告 | 成果の意義 | 多角的視点、特に優れた成果等 | H20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。 | 平成18年(2006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。 | ○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、動作確認を完了した。 | ○機構のネットワーク環境において、テラバイト級のデータ転送を最適に実行可能なインターフェースを実現し、耐震性評価用仮想振動台に不可欠な機能を整備できた。これにより、仮想実験環境の基盤整備の一助となった。 | (優れた成果) ○計算科学分野における世界最大級の国際会議(SC07)で「大規模解析コンクール優秀賞(Finalist)」を受賞した。 (注)SC07:2007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。 (産学連携) ○ITBL基盤ソフトウェアの経年化にともない、当センター開発したグリッド基盤(AEGIS)がITBL基盤の後継として採用された。 | 平成19年(2007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必要とする演算処理を並列分散処理するグリッド技術の実験的環境を構築し、その動作確認実験を行う。 |
| | 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、新たに独国における研究協力を追加し、仏国および米国と研究協力を継続する。 (注)ITER: 国際熱核融合実験炉。ITER計画は、2016年頃の完成を目指し、日本・欧州連合(EU)・ロシア・米国・韓国・中国・インドの七極により推進されている。 | ○独国ドレスデン工科大学との研究協力を新たに締結した。ドイツ国家グリッドD-GRIDとの接続実験を実施した。アルゴンヌ国立研究所とのグリッド相互接続方式を設計した。仏国とは、グリッドアプリケーションを用いてグリッド接続方式の実証実験を行った。 | ○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、独国における研究力を追加し、仏国および米国と研究協力を継続し、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。 | (優れた成果) ○独グリッドとの接続実験の成果が評価され、全NEC C&Cシステムユーザー会においてユーザー事例論文佳作を受賞した。 (機構内連携、国際貢献) ○開発したグリッド技術により、核融合部門と協力し、日独JT60遠隔実験に成功しプレス発表した(ITER遠隔実験に向けた国策への貢献)。 ○次世代部門(旧JNC)と連携して、GNEP(Global Nuclear energy Partnership)日米間協議に協力し、日米国際間グリッド相互乗り入れの試験環境整備を実施した。 (外部資金獲得、国際貢献) ○日仏交流として引き続き、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接続方式の実証実験を行った。【付録8.(3)】 | | |
| | 国からの要請に基づき、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。 (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。 NAREGI: H15年度より実施された超高速コンピュータ網形成プロジェクト。国立情報学研究所がグリッドミドルウェアを開発、分子科学研究所がナノアプリケーションを用いたグリッドミドルウェアの実証研究を担当。 | ○国立情報学研究所との接続実験を実施し、ITBL-NAREGI(β2)連携が可能なグリッド・インフラを実現した。 | ○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ITBLユーザがグリッドアプリケーションを変更する必要なく、京速計算機を利用可能となる。 | (外部資金獲得) ○グリッド技術により、文科省の次世代スパコン開発利用プロジェクトに貢献した。(H19年度は75百万円を受託)【付録8.(1)】 (産学連携、ステークホルダーを意識した活動) ○ITBL協定を延長し、126機関約804名の利用者連携を継続した。15研究コミュニティが連携したITBL利活用研究コミュニティとSC07にて共同展示を実施した。 ○SC08共同展示へ向けたコミュニティ会合開催など自主的活動の活性化を支援した。 | | |

表3. 1 平成19年度研究開発実績及び成果の意義等(つづき)

| | 中期計画 | H19年度計画 | H19実績報告 | 成果の意義 | 多角的視点、特に優れた成果等 | H20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。 | 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。 (注)HTTR: JAEAの高温工学試験研究炉(高温ガス炉)。 | ○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プログラムを開発し、その動作実験を行い、耐震性評価用仮想振動台の基本機能開発を完了した。 耐震性評価用仮想振動台の基本機能である組立解析技術を熱問題に転用し、1000万自由度超(市販コードの約100倍)の大規模・複雑問題を解析し、次世代部門に結果を提供し完了した | ○HTTR二重管の尤度評価等、振動特性評価技術の高度化へ寄与できる技術を実証した。 ○次世代蒸気発生器の管板における破損可能性箇所を推定し、設計方針の決定に貢献した。 | (機構内連携、産学連携、外部資金獲得) ○耐震性評価用仮想振動台を核とした原子力発電所の地震耐カシミュレーションを提案し、外部資金250百万円/5年を東京電力等とともに受託した。この中で、安全研究センターと基礎工学部門の研究連携を進める。【付録8.(4)】 ○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)において、電中研と共同研究を具体に実施し、3次元仮想振動台の開発を加速した。【付録8.(2)】 (機構内連携、国際貢献) ○日米GNEP行動計画において、共同議長として計算科学WGを立ち上げ、炉心シミュレーション、耐震/構造シミュレーション、材料・燃料の物性シミュレーションの3課題を主要テーマとして研究開発を展開した。 (機構内連携) ○安全研究センターとの研究連携において、「耐震安全評価のための3次元仮想振動台の開発・適用研究」として重点安全研究計画に採択された。 | HTTRの実測データと原子力施設の耐震性評価用仮想振動台の計算結果を比較検証する。 |
| 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、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手法を構築する。 | 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。 | ○2種類の不純物原子(リン、硫黄)と格子欠陥との結合エネルギーを第一原理手法から計算し、偏析度の評価を完了した。 ○燃料内ガスバブルの動的挙動を解析するコード開発を完了し、実験結果との比較を通して、コードを検証した。 | ○格子間原子とリンの結合エネルギーの定量的評価結果を利用する高精度の照射偏析シミュレーションへの道を拓いた。 ○上記シミュレーションにより、材料試験炉の照射速度効果等を検証することが可能となる。 ○今年度の定量的評価結果は、リンの照射誘起偏析による粒界脆化が懸念される原子炉圧力容器鋼の脆化予測策定(数年後)時の重要な参考データとなる。 ○19年度は小傾角粒界を含む多結晶状態を表現するためのモジュールを開発した。これを用い、結晶粒のスケールで燃料細粒化後のバブル状態が予測可能となった。 ○実験観察で得られた粒界での微小バブルの整列状態の再現に成功し、モデルの妥当性を検証した。 ○結晶方向表現の一般化により1万種程度の多結晶が扱えるようになった。 | (産学連携、外部資金獲得) ○企業10社・12大学等と連携し、これまでの脆化シミュレーション研究成果を基に、水素脆化研究のための外部資金(NEDO)(5年総額136百万円)を獲得した。【付録8.(15)】 (産学連携) ○当該研究成果が評価され、ヘリウムバブルの形成成長シミュレーションという課題でUCLAより研究協力の打診を受けた。 | 応力腐食割れにおける、き裂進展機構解明のため、原子炉材の結晶粒界の脆化元素効果を第一原理計算から求め、そのデータを組み込んだマルチスケールき裂進展シミュレーションコードを開発し、実験結果と比較する。 細粒化機構解明に貢献するマルチスケールシミュレーションコードを開発するため、転位ネットワーク形成メソスケールシミュレーションコードとバブル/粒界の相互作用を調べるマクロスケール粒界移動シミュレーションコードを開発する。 |
| | 中性子検出超伝導素子の研究開発については、平成18年(2006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。 | ○デバイスの主要動作環境(電流・温度)依存性を実験結果と照合した他、デバイス幅及び厚さ依存性を求め、最適な幅及び厚さについての指針を得た。 ○18年度末に超伝導中性子検出の実験が行われ、中性子検出に成功した。その際、得られた電気信号の応答速度(～10ナノ秒)はシミュレーションの結果と一致した。 ○19年度は、検出成功実験の後に行われた温度及び電流依存性を再現し、シミュレーションの妥当性を完全に検証した。 ○シミュレーションでは、10ナノ秒以下の時間で原理的に応答可能であることを予測した。(これは、従来の速度比約1万倍の高速応答であり、最も高速且つ高精度な中性子検出器となりうることを示す。) | (受賞) ○当該研究に関連する地球シミュレータ上でのシミュレーション技術が日本計算工学会論文賞を受賞した。 (外部資金獲得) ○当該研究に係るシミュレーション技術を背景にJST(CREST)のベータコンアプリ開発の追加公募(3年総額3千万)に応募し採択された。【付録8.(7)】 (とくに優れた成果) ○大阪府立大、機構量子ビーム等と連携し、世界一高速で動作する超伝導中性子検出器開発に貢献した(実験に先立ち、高速動作を予言し、府立大等の検出実験を成功に導いた)。 | デバイス開発に貢献するマルチスケールシミュレーションコードを開発するため、特徴的スケールが異なる二つの系(超伝導デバイス内と外部環境)を統合し、デバイス全体の動作をシミュレーションするマルチスケールデバイス動作・シミュレーションコードを開発する。 | | |

表3. 1 平成19年度研究開発実績及び成果の意義等(つづき)

| | 中期計画 | H19年度計画 | H19実績報告 | 成果の意義 | 多角的視点、特に優れた成果等 | H20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)。 | 平成18年(2006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、90日以内で計算できる要素技術を開発する。 | ○90日以内で修復タンパク質の修復過程シミュレーションを達成できる技術開発を完了した。 | ○90日以内でMutS修復タンパク質の修復過程シミュレーションを達成できる技術開発を完了した。尚、当該技術は高精度の時間更新アルゴリズムの開発と計算の高度な並列化を達成した結果得られた成果であり、従来のシミュレーション時間を約4倍上回る。 ○上記開発技術(DNA修復タンパク質の修復過程を90日以内でシミュレーションする)を用いると分子生物学実験と進捗歩調を合わせたDNA修復タンパク質の機能解明が可能となる。 | (外部資金獲得) ○当該研究で開発したシミュレーション技術が広くライフサイエンス研究に応用可能な技術にまで発展し、外部資金「文部科学省・ターゲットタンパク研究プログラム」の獲得に成功した。【付録8.(14)】 (とくに優れた成果) ○名古屋大学と連携し、DNA補修酵素の要となるアミノ酸の発見に貢献(DNA光補修酵素のDNA補修における特定アミノ酸の関与を名大が理論計算で突き止め、実際にあらゆる生物のDNA光補修酵素においても今回特定したアミノ酸が同じ位置に100%存在することを機構チームが確認した。) | 構築したゲノム情報解析用データベースを用いて、さまざまな放射線に対するDNA修復タンパク質を検索できるようにし、低線量放射線に反応するDNA修復タンパク質を明らかにすること、および平成19年度までに開発したシミュレーション技術を用いてDNA損傷の修復過程シミュレーションを実行することで、低線量放射線影響の解明に貢献できることを検証する。 |
| 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。 | 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。 | ○現在利用可能なFPGAを用いて固有値問題における基本演算回路を試作し、汎用計算機とのハイブリッド動作の実証した。 ○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協定等の締結決定によって実現した。 | ○ITER等核融合炉におけるプラズマの安定性の実時間制御へ向けた専用計算機の基盤技術の開発が完了し、今後、那珂研で行われる設計検討の基礎となるという点で意義が高い。また、産業界への貢献の観点でも、倍精度行列専用演算機のハイブリッド動作の実現は、わが国における計算機技術(アクセラレータ)開発に貢献する。 ○東北大学電気通信研究所に設置した「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」において行ってきた、次世代半導体デバイス・電子回路等のハードウェア技術から流体科学・原子力・海洋・航空宇宙等の超高速コンピューティングアプリケーションまでの全階層を見通した意見交換を通じて、「不揮発性演算回路を利用した微小整数型格子流体法による計測融合シミュレーションの実現技術」が、将来の応用展開の幅を左右する基盤技術を多く含む点で、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として今後数年間で行う価値のあるひとつの具体的な開発目標となりうることを認識できたとともに、本開発の技術評価に直接必要なスピン演算回路等の試作と性能データの入手を可能にする産学官連携体制を連携協定等の締結によって構築できた。 | (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では、前年度に引き続き、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、等の構成員の協力により、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意見交換を推進するとともに、特に今年度は、東北大学電気通信研究所及び民間企業6者とともに、「高機能・超低消費電力スピンデバイス・ストレージ基盤技術の開発」に関する連携協定等を締結して産学官連携体制を強化した。 | 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、東北大学等との連携協力によって超低消費電力でコンパクトなスピン演算回路の最新の開発成果を導入し、当該次世代技術による専用シミュレータで実現可能な基本機能を数値シミュレーション等で確認する。 |
| | | 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に着手する。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。 | ○情報セキュリティ対策として、15拠点に検疫ネットワーク(隔離)を整備完了(2月)。外来者用ネットについては3拠点整備完了。 ○予定通り政府調達手続きに着手。仕様書原案を取り纏め供給業者に開示した(2月)。 ○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、6月に公開した。 | ○外部機関との研究交流促進に不可欠な情報セキュリティ対策強化を進めた。 ○急増が予想される計算需要に応えるためのスパコン導入手続きを着実に進めた。 | (産学連携、機構内連携、ステークホルダーを意識した活動) ○検疫ネットワーク(隔離)は、ウイルス感染拡大をすばやく防止できるため、サイバーテロ時においても事業継続が期待できる。 | 茨城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。また、基幹ネットワークの需要増に対応した信頼性向上策を実施する。 |

4. 原子力計算科学研究評価専門部会による評価

平成 20 年 3 月 14 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 |
| | 大関 好之 | 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 20 年 3 月 14 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) | ・H19 年度の評価方法について ・システム計算科学センターの H19 年度研究開発実績について | 小柳委員、樋渡委員は欠席 |

(注) 小柳委員、樋渡委員については、3 月 14 日の専門部会欠席のため、後日専門部会と同様の内容を説明し、評価コメントをいただいた。

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】 平成 18 年（2006 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。</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、新たに独国における研究協力を追加し、仏国および米国と研究協力を継続する。</p> <p>国からの要請に基づき、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。</p> <p>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。</p> | <ul style="list-style-type: none"> 耐震性評価用仮想振動台のテラバイト級のデータを分散処理できるシステムの実現・確認が完了しており、さらに、ITBL-NAREGI 連携が可能なグリッド・インフラを実現する等、19 年度計画をクリアしている。 ITBL の運用実績に基づき AEGIS への展開が計られつつある。また、ドイツからの長距離遠隔実験を実現した。更に、京速計算機の利用に向けたインフラの整備が進展している。仮想数値振動台に関する研究では要素計算技術の確立をもとに蒸気発生器全体系のシミュレーションに向けた研究が進展を背景にして、東電等との共同研究課題に対する資金を JST(CREST) から獲得している。総じて各課題の要素技術に進展が見られ、今後の全体連成系のシミュレーションに向けた準備が整ってきていると判断できる。 テラバイト級のデータ転送を可能とするインターフェイスの開発、スーパーコンピュータに関する国際会議として最大の SC07 において大規模解析コンクール Finalist に選ばれる、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、市販コードの 100 倍大規模な解析を可能とするなど、順調な研究進展が認められる。 | <ul style="list-style-type: none"> AEGIS が ITBL の後継基盤として ITBL 協力者により認定された点、産学連携の観点から大いに評価できる。 機構内連携は順調に進んでいるように見受けられる。また、東北大学との連携、東電等との連携、JST 資金の獲得など産官学との連携も進んでいると評価できる。 ドイツ、フランス、アメリカとの連携、ITBL、NAREGI を通じた大学等研究機関との連携など積極的な活動をされていると考えます。 | <ul style="list-style-type: none"> グリッド計算環境の国際供用化が進み、独からの JT-60 遠隔実験、GNEP 日米協議のための体制を確立したことは、今後の日本の世界に対する貢献度を高めた。 3 次元仮想振動台が原子力安全委員会の重点安全研究計画に採択されたことは今後、国としての安全評価に用いられる可能性が大であり、多いに評価できる。 仮想振動台入出力に関するテラバイト級のインターフェイスを実現し、SC07 における Finalist にノミネートされた。 マックスプランク研究所との間で世界初の長距離遠隔実験に成功し、ITER における遠隔実験の可能性を実証した。サテライト装置としての JT60 の存在意義にも繋がる成果といえる。 特に優れた成果としては SC07 において大規模解析コンクール Finalist が挙げられます。 | <ul style="list-style-type: none"> AEGIS が 2007 年の国際会議 SC07 で優秀賞を受賞しており、その成果が世界に認められており、評価できる。 仮想振動台入出力とグリッド技術の結び付けに関しては、これからの課題として残されているように思われる。また、産業界との本格的なタイアップはこれからの課題であるように思われる。 |
| <p>【年度計画】 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</p> | <ul style="list-style-type: none"> 材料の亀裂進展、核燃料の細粒化現象、ナノデバイスの開発のための 19 年度計画は達成している。 マルチスケール計算をボトムアップ的に実現しつつある。特に、メソスケールでのシミュレーションで興 | <ul style="list-style-type: none"> 脆化研究の実績により水素脆化研究の NEDO 予算を産学連携が獲得した点は評価できる。 NEDO への申請課題が採択されこれからの進展が期待される。 | <ul style="list-style-type: none"> メソスケールでのシミュレーションで顕著な成果が挙げられている。これは、モデルの多角的検討に基づく第一原理計算による | <ul style="list-style-type: none"> 圧力容器鋼の脆化予測式の見直しに、取得したデータをどのように生かしていくかの計画も準備しておいて下さい。 |

| | | | | |
|---|--|--|---|--|
| <p>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。</p> <p>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。</p> <p>中性子検出超伝導素子の研究開発については、平成18年(2006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。</p> | <p>味深い知見が得られている。</p> <ul style="list-style-type: none"> 格子間原子とリンの結合エネルギーの定量的評価が行われており、おおむね順調に研究が進められていると考えます。 | <ul style="list-style-type: none"> 企業20社、12大学と共同で、水素脆化に関する外部資金(NEDO)を獲得するなど、努力が認められます。 | <p>シミュレーション技術の高度化によるものと評価できる。実験結果との対応についても良好な結果が得られている。</p> <ul style="list-style-type: none"> 地球シミュレータ上でのシミュレーション技術に関する日本計算工学会論文賞の受賞が挙げられる。 | <ul style="list-style-type: none"> 研究者の数を考慮するとよくやっている。問題の設定も明確になっている。 今後ヘリウムや水素のように軽い原子について解析する場合には量子効果について慎重に検討すべきと考える。 現状は偏析により材料が劣化する過程を解析しているが、逆に偏析しないようにするにはどうしたら良いかを予測することも考えてみてはどうか。 |
| <p>【年度計画】</p> <p>平成18年(2006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、90日以内で計算できる要素技術を開発する。</p> | <ul style="list-style-type: none"> 19年度の計画であるDNA修復タンパク質の修復シミュレーションの計算時間の短縮、機能解明の技術開発の目標は達成されている。 計算時間の長時間化(2~4倍)を実現することで、新しい現象を発見しており、DNA修復過程のシミュレーションに繋がる知見が得られている。背景に、解析時間を短縮する新しい基盤技術の開発がある。 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の開発を完了する等順調に進捗しているものと考えます。 計画通り順調に進んでいる。 | <ul style="list-style-type: none"> 機構内の量子ビーム応用研究部門との連携によりシミュレーションコードの実問題への適用を実現している点は評価できる。 量子ビーム部門との連携、名古屋大学とのデータベース利用での共同研究などが進展している。 文部科学省ターゲットタンパク研究プログラムの獲得、名古屋大学との連携によりタンパク質修復の要となるアミノ酸の発見への貢献等積極的な活動が認められる。 機構内で研究開発されてきたシミュレーションソフトを活用して機構内連携を活かすとともに、名古屋大学との連携やタンパク3000の後継プロジェクトであり競争的資金でもあるターゲットタンパク研究プログラムへの参画により他機関との連携も進んでいる。 | <ul style="list-style-type: none"> DNA補修酵素タンパク質の発見と同定を行い、修復過程の生物における普遍性を示唆することで従来説に修正を迫る成果を挙げている。 左記アミノ酸の発見において、大学の理論計算と、機構による検証のような産学連携により重要な発見とその正当性の評価を行えたことは高く評価できます。 修復タンパク質について従来に比較して約4倍の長時間にわたる修復過程のシミュレーションを実現し、また、DNA補修酵素の要となるアミノ酸を世界で初めて特定した。 | <ul style="list-style-type: none"> DNA修復タンパク質の機能解明は成果も着実にあげており、今後の発展が期待できる。 |
| <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</p> | <ul style="list-style-type: none"> 19年度計画であるハイブリッド動作の実証、連携体制の構築、セキュリティ対策等の目標は達成している。 | <ul style="list-style-type: none"> 東北大学との研究連携は効果的に実施されており、評価できる。 東北大学と共同研究において密接な連携が図 | <ul style="list-style-type: none"> 大規模固有値計算における計算基盤技術の完成を見て、ITER等の核融合炉におけるプラズマ | <ul style="list-style-type: none"> 今後、連携協定等を生かして成果を広く用いられるようにしてほしい。 |

| | | | | |
|---|---|--|---|--|
| <p>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に着手する。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> | <ul style="list-style-type: none"> 逆ベキ法に基づく大規模行列に対する高速固有値ソルバーのハードウェアレベルでの実装において、汎用+専用のハイブリッド方式での基盤技術を確立した。 格子流体モデルに基づく専用シミュレータの応用に関して研究の見通しについて健闘している。 FPGAを用いた固有値計算の基本演算回路を開発し、汎用プロセッサとのハイブリッド動作を実証する等着実な努力が行われています。また、連携においても協定を締結するなど計画通りに進展しているものと思われま。また情報セキュリティ対策についても計画通り進捗していると考えます。 | <p>られている。</p> <ul style="list-style-type: none"> 東北大との積極的な協力、機構へのサイバーテロ時にも有益な検疫ネットワークの構築などが評価できる。 | <p>の実時間制御へ向けて大きな可能性を示した。</p> <ul style="list-style-type: none"> 現在世界の注目を集めている汎用プロセッサとアクセラレータを集積したヘテロジニアスマルチコアにも有益なハイブリッド計算に早期に取り組んだ点は高く評価できます。 | <ul style="list-style-type: none"> 今後のITER等への応用における固有値ソルバーの有用性に関する実証的研究の進展が期待される。また、他分野への応用については今後の具体的な成果も期待したい。 FPGAの利点は書き換え可能である点だが、核融合プラズマの安定性解析に利用するのであればFPGA以外の高速化技術の方が有望と思えるので、今後那珂研で行われる設計検討においては今回のFPGAの知見に加え、他の技術についてもサーベイしてはどうか。 |
| <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"> 全体的に中期計画を目指して19年度は実りある成果が得られたと判断します。今後、より多角的な視点から成果をあげていただきたい。特に、関係する機構内の各分野での連携、計算機による物理現象の解明、原子力界への応用についてますます進展させることを期待します。 全体系について総合的なシミュレーションを、プロトタイプ的な場合についてでも良いので行うことも必要ではないかと思われる。それによる、要素技術の更なる開発の必要性が生まれてくることもあるのではないか。 ステークホルダーに関して、記述をもう少し明確に出来ないだろうか。何となく曖昧さが残るような感じを持った。 | | | |

付録 平成 19 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 179,006 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 65,290 千円（技術協力員等の人件費を含む）

(b)外部資金（内訳は付録「平成 19 年度シミュレーション工学研究活動実績一覧」の 8. を参照）

- ・ 科研費（代表者 5 件：6,200 千円、協力者 2 件：1,600 千円）
内訳：代表者 5 件は付録 8. (5), (16)～(19)、協力者 2 件は付録 8. (6), (20)
- ・ 文部科学省（3 件：28,304 千円）
- ・ 原子力安全基盤機構（1 件：2,185 千円）
- ・ 科学技術振興機構（7 件：62,129 千円）
- ・ 情報・システム研究機構国立情報学研究所（1 件：75,737 千円）
- ・ (財)金属系材料研究開発センター（1 件：2,350 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 | 特 定 課 題 推 進 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 | 6 | 0 | 0 | 3 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 2 | 2 | 13 |
| シミュレーション技術開発室 | 10 | 1 | 0 | 1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 3 | 1 | 0 | 18 |
| 合計 | 16 | 1 | 0 | 4 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 1 | 0 | 3 | 3 | 2 | 31 |

（平成 20 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、25 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 19 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、計算技術 | 6 | 1 |
| | 耐震計算科学技術開発 | 3 | 1 |
| | 専用シミュレータ基盤技術開発 | 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 | 10 | 8 |
| | 生命情報解析技術開発 | 6 | 1 |
| 合計 | | 25 | 11 |

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発等】

<研究論文>

- R. Tian, G. Yagawa
 “Non-matching mesh gluing by meshless interpolation; An Alternative to Lagrange multipliers”
 International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 71, No. 4 PP. 473-503
- R. Tian, G. Yagawa
 “Allman’s triangle, rotational DOF and partition of unity”
 International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 69, No. 4 PP. 837-858
- R. Tian, H. Matsubara and G. Yagawa
 “Advanced 4-node tetrahedrons”
 International Journal for Numerical Methods in Engineering, Vol. 68, No. 12
 PP. 1209-1231
- M. Ida, T. Naoe and M. Futakawa
 “Direct observation and theoretical study of cavitation bubbles in liquid mercury”
 Physical Review E, Vol. 75, No. 4 PP. 046304_1-046304_7
- M. Ida, T. Naoe and M. Futakawa
 “Suppression of cavitation inception by gas bubble injection; A Numerical study focusing on bubble-bubble interaction”
 Physical Review E, Vol. 76, No. 4 PP. 046309_1-046309_10
- N. Kushida and Y. Okuda
 “Convergence acceleration of parallel CG-FEM with controlled domain decomposition for singularity problems”
 Journal of Computational Science and Technology (Internet), Vol. 1, No. 1 PP. 2-13

<査読付き会議論文>

- 松原仁、矢川元基

“Patch by Patch 型混合法における基底関数の応用とその精度”
応用力学論文集, Vol.10 PP.201-209

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】

<研究論文>

- Y. Shu
“Inference of power plant quake-proof information based on interactive data mining approach”
Advanced Engineering Informatics, Vol.21, No.3 PP.257-267
- 西田明美他
“原子カプラントのための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”
日本原子力学会和文論文誌, Vol.6, No.3 PP.376-382
- A. Nishida
“Effect of Timoshenko coefficient in wave propagation analysis of a three-dimensional frame structure”
Theoretical and Applied Mechanics Japan, Vol.56 PP.57-65

<査読付き会議論文>

- M. Tani et al.
“A Methodology of structural analysis for nuclear power plant size of assembly”
Proceedings of Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computations and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C+SNA 2007) (CD-ROM)

【シミュレーション技術開発室・材料シミュレーション】

<研究論文>

- F. Shimizu et al.
“First-principles calculation on screw dislocation core properties in BCC molybdenum”
Journal of the Earth Simulator, Vol.7 PP.17-21
- T. Kadoyoshi et al.
“Molecular dynamics study on the formation of stacking fault tetrahedra and unfauling of Frank loops in FCC metals”
Acta Materialia, Vol.55, No.9 PP.3073-3080
- M. Yamaguchi, Y. Nishiyama and H. Kaburaki
“Decohesion of iron grain boundaries by sulfur or phosphorous segregation; First-principles calculations”
Physical Review B, Vol.76, No.3 PP.035418_1-035418_5
- K. Ebihara et al.
“Modeling of hydrogen thermal desorption profile of pure iron and eutectoid steel”
ISIJ International, Vol.47, No.8 PP.1131-1140

- S. Yamada et al.
 “Ultra large-scale exact-diagonalization for confined fermion-Hubbard model on the Earth Simulator; Exploration of superfluidity in confined strongly-correlated systems”
 Journal of the Earth Simulator, Vol.7 PP.23-35
 - A. Hayashi, M. Shiga and M. Tachikawa
 “H/D isotope effect on the dihydrogen bond by *ab initio* path integral molecular dynamics simulation”
 Molecular Simulation, Vol.33, No.1-2 PP.185-188
 - T. Kobayashi et al. (M. Shiga)
 “*Ab initio* study of ultrafast photochemical reaction dynamics of phenol blue”
 Journal of the American Chemical Society, Vol.129, No.20 PP.6405-6424
 - C. Iniotakis et al. (N. Hayashi)
 “Andreev bound states and tunneling characteristics of a noncentrosymmetric superconductor”
 Physical Review B, Vol.76, No.1 PP.012501_1-012501_4
 - E. Fukuyama et al. (M. Okumura)
 “Condition for the existence of complex modes in a trapped Bose-Einstein condensate with a highly quantized vortex”
 Physical Review A, Vol.76, No.4 PP.043608_1-043608_11
 - Y. Nagai et al. (N. Hayashi)
 “Calculated positions of point nodes in the gap structure of the borocarbide superconductor $\text{YNi}_2\text{B}_2\text{C}$ ”
 Physical Review B, Vol.76, No.21 PP.214514_1-214514_8
- <査読付き会議論文>
- M. Machida, T. Koyama and Y. Ohashi
 “Vortex structure in weak to strong coupling superconductors; Crossover from BCS to BEC”
 Physica C, Vol.445-448 PP.194-197
 - M. Machida et al.
 “Novel pairing in the Hubbard model with confinement potential”
 Physica C, Vol.445-448 PP.90-93
 - M. Machida, T. Koyama and Y. Ohashi
 “Vortex microscopic structure in BCS to BEC Fermi superfluids”
 Physica C, Vol.460-462, No.1 PP.275-276
 - M. Machida and T. Koyama
 “Collective dynamics of macroscopic quantum tunneling in layered high-Tc superconductors”
 Superconductor Science and Technology, Vol.20, No.2 PP.S23-S27
 - M. Machida and T. Koyama

- “Collective macroscopic tunneling in intrinsic Josephson junctions”
Physica C, Vol.460-462, No.1 PP.289-292
- S. Yamada et al.
“Strong pairing and microscopic inhomogeneity of lattice fermion systems”
Physica C, Vol.463-465 PP.103-106
 - S. Yamada et al.
“High-performance computing for exact numerical approaches to quantum many-body problems on the earth simulator”
Proceedings of International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC '06) (CD-ROM)
 - M. Machida and T. Koyama
“Theory for collective macroscopic tunneling in high-Tc intrinsic Josephson junctions”
Physica C, Vol.463-465 PP.84-88

【シミュレーション技術開発室・生命情報解析】

<研究論文>

- 斎藤公明他
“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”
情報処理, Vol.48, No.10 PP.1081-1088
- H. Deloar et al. (K. Saito)
“Investigations of different kilovoltage X-ray energy for three-dimensional converging stereotactic radiotherapy system; Monte Carlo simulations with CT data”
Medical Physics, Vol.33, No.12 PP.4635-4642
- X. Gong, K. Nakamura, K. Yura and N. Go
“BAAQ; An Infrastructure for application integration and knowledge discovery in bioinformatics”
IEEE Transactions on Information Technology in Biomedicine, Vol.11, No.4 PP.428-434
- M. Mizutani et al. (K. Nakamura)
“Starting point to molecular design; Efficient automated 3D model builder Key3D”
Chemical & Pharmaceutical Bulletin, Vol54, No.12 PP.1680-1685
- J. Shiina et al. (K. Nakamura)
“Synthesis of pinguisane-type sesquiterpenoids acutifolone A, pinguisenol, and bisacutifolones by a Diels-Alder dimerization reaction”
European Journal of Organic Chemistry, Vol.2007, No.31 PP.5190-5197
- Y. Miyazawa et al. (K. Yura)
“Discrimination of class I cyclobutane pyrimidine dimer photolyase from blue light photoreceptors by single methionine residue”
Biophysical Journal, Vol.94, No.6 PP.2194-2203

<査読付き会議論文>

- M. Go, K. Yura and M. Shionyu
“Contribution of computational biology and structural genomics to understand genome and transcriptome”
Frontiers of Computational Science PP.75-80

2. 国際会議、国内会議での発表等

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発等】

- 平山俊雄他
“Computational science and engineering for simulation and data processing in nuclear science and engineering”
International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC07)
- 井田真人他
“水銀中キャビテーションに対する計算科学的アプローチ；マイクロバブルを用いた壊食抑制技術をめざして”
日本原子力学会 2007 年春の年会
- 木野千晶他
“原子炉大規模数値解析におけるデータ考察システムの開発”
日本原子力学会 2007 年秋の大会
- 櫛田慶幸
“One approach of new parallel architecture for real space discretization methods”
1st Workshop REDIMPS (Research and Development of International Matrix Prediction System on French-Japan International Grid Computing Environment)
- 渡辺正
“液滴の振動周波数への振幅と回転の非線形効果”
日本機械学会 2007 年度年次大会
- 羽間収
“Transient thermal stress analysis of a spherically curved tubesheet”
1st Workshop REDIMPS (Research and Development of International Matrix Prediction System on French-Japan International Grid Computing Environment)
- 鈴木喜雄、林幸子
“大規模シミュレーションのための分散並列可視化システム”
第 13 回ビジュアライゼーションカンファレンス
- 木野千晶、櫛田慶幸、鈴木喜雄、中島憲宏
“Cognitive methodology based data analysis system for large scale data”
International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC07)
- 鈴木喜雄、林幸子
“原子力機構での大規模データ可視化への取り組み”

「新生」第1回金沢コンピュータグラフィックス談話会

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】

- 西田明美
“原子カプラントのための3次元仮想振動台の構築”
「シェル・空間構造物の応答制御と減衰に関する研究」ワークショップ
- 西田明美、鶴秀生
“配管系構造の衝撃応答解析における Timoshenko 理論の適用性”
日本原子力学会 2007 年春の年会
- 西田明美他
“組立構造解析による3次元仮想振動台の構築；原子カプラント冷却系構造物の大規模動弾性解析への適用”
日本原子力学会 2007 年秋の大会
- 鈴木喜雄、木野千晶、櫛田慶幸、中島憲宏
“原子カプラントの3次元仮想振動台のための大規模可視化”
日本原子力学会 2007 年秋の大会

【シミュレーション技術開発室・材料シミュレーション】

- 板倉充洋、門吉朋子、蕪木英雄
“Molecular dynamics and quasi-two dimensional dislocation dynamics simulations on the Orowan pinning mechanism of a mixed dislocation in FCC metals”
Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computations and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C+SNA 2007)
- 一宮尚志、西浦廉政、板倉充洋、木下幹康
“ UO_2 中の酸素欠陥の挙動の数値シミュレーション”
日本原子力学会 2007 年秋の大会
- 山田進、今村俊幸、叶野琢磨、町田昌彦
“High-performance parallel diagonalization for huge matrices in quantum lattice-fermion problems”
1st Workshop REDIMPS (Research and Development of International Matrix Prediction System on French-Japan International Grid Computing Environment)
- 志賀基之
“Ab initio path integral ring polymer molecular dynamics”
CECAM (Centre Europeen de Calcul Atomique et Moleculaire); Theoretical and Experimental Studies of Quantum Dynamics in Condensed Phase Chemical Systems
- 小林恵太、峰真如、奥村雅彦、山中由也
“光学格子中 Bose-Einstein 凝縮における動的不安定性の場の理論的解析”
日本物理学会第 62 回年次大会
- 奥村雅彦、山田進、町田昌彦
“箱形ポテンシャル内の光学格子上フェルミ原子気体の強相関効果”
日本物理学会第 62 回年次大会
- 山田進、今村俊幸、叶野琢磨、町田昌彦

- “ジョセフソン量子素子シミュレーションにおける固有値計算手法；前処理付共役勾配法の収束性”
日本応用数理学会 2007 年度年会
- 山田進、町田昌彦、奥村雅彦
“DMRG を 2 次元へ拡張するための並列化アルゴリズムとその効果”
日本物理学会第 62 回年次大会
 - 林伸彦
“空間反転対称性のない物質における渦糸系の物理”
日本物理学会第 62 回年次大会
 - 林伸彦、C. Iniotakis、M. Sigrist
“Josephson current between conventional and non-centrosymmetric superconductors”
2007 Swiss Workshop on Materials with Novel Electronic Properties (MaNEP SWM 2007)
 - 須永知夏他
“Analytic expression of the condition for the existence of complex modes for a trapped Bose-Einstein condensate with a highly quantized vortex”
5th 21st Century COE Symposium on Physics of Self-Organization Systems
 - 中村祐介、峰真如、奥村雅彦、山中由也
“Bogoliubov-de Gennes 方程式における複素固有値出現条件の解析”
日本物理学会第 62 回年次大会
 - 峰真如、奥村雅彦、須永知夏、山中由也
“Complex eigenvalues associated with trapped BEC and field theoretical description of unstable behavior”
QuAMP 2007; An International Conference on Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics
 - 林伸彦
“空間反転対称性のない超伝導体のジョセフソン効果およびトンネル伝導特性”
金属材料研究所ワークショップ「ナノ構造超伝導体とその応用」
 - 蕪木英雄、田島俊樹
“Recent progress of supercomputing research in nuclear fields in Japan”
Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computations and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C+SNA 2007)
 - 蕪木英雄、J. Li、S. Yip、君塚肇
“Dynamical properties of lattice thermal conduction”
Conference on Computational Physics 2007 (CCP 2007)
 - 蕪木英雄
“熱伝導、破壊現象の大規模分子動力学シミュレーション”
平成 19 年度統計数理研究所乱数重点型共同研究第 2 回研究会
 - 鈴木知明他
“高燃焼度燃料における細粒化組織変化のメゾスコピックシミュレーション”
日本原子力学会 2007 年秋の大会

- 山口正剛、海老原健一、鈴木知明、蕪木英雄
“長寿命プラント照射損傷管理技術に関する研究開発, 8; 第一原理計算による He 粒界脆化の研究”
日本原子力学会 2007 年秋の大会
- 山口正剛
“第一原理計算による粒界脆化のモデリング”
日本原子力学会 2007 年秋の大会
- 山口正剛
“鉄における溶質元素の粒界偏析エネルギー及び析出エネルギーの第一原理計算”
日本金属学会 2007 年秋期(第 141 回)大会
- 海老原健一他
“結晶粒界に対する水素放出ピークの分離シミュレーション”
日本鉄鋼協会第 154 回秋季講演大会
- 鈴木知明他
“Modeling studies of recovery process induced by fission/ion truck in UO₂/CeO₂”
New Cross-over Project International Workshop-4
- 山口正剛
“粒界凝集エネルギー(2 γ)の第一原理計算”
日本金属学会 2008 年春期大会

【シミュレーション技術開発室・生命情報解析】

- 斎藤公明
“放射線治療遠隔支援のための線量計算システム”
JST 基礎研究シーズ報告会
- 斎藤公明他
“Verification of the dose calculation system IMAGINE for providing benchmark X-ray therapy doses through computer networks”
10th EFOMP Congress; 1st European Conference on Medical Physics
- 斎藤公明
“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”
科学技術振興機構第 3 回「シミュレーション技術の革新と実用化基盤の構築」領域シンポジウム
- 斎藤公明他
“X 線治療遠隔支援のためのモンテカルロ線量計算システム IMAGINE の開発”
日本放射線腫瘍学会第 20 回学術大会
- 由良敬
“タンパク質立体構造情報と分子進化情報に基づく RNA 結合部位の推定”
バイオインフォマティクスの基礎とフロンティア
- 中村建介、由良敬、郷信広
“Prediction of metal-binding sites for high-throughput metalloproteomics data”

7th European Symposium of the Protein Society

- 松本淳
“電子顕微鏡像へのフィッティングによるリボソームの構造変化の解析”
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3回ワークショップ
- 由良敬、塩生真史、郷通子
“真核生物の遺伝子構造とタンパク質立体構造・機能の関係”
日本進化学会 2007 年大会
- 由良敬、郷通子
“植物オルガネラ mRNA におけるエディティング部位とタンパク質立体構造の関係”
第30回日本分子生物学会年会/第80回日本生化学会大会合同大会(BMB 2007)
- 由良敬、O. Kim、郷信広
“Prediction of interfaces on biomolecules based on protein sequences and 3D structures”
日本生物物理学会第45回年会

3. 技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

- 鈴木喜雄他
“原子力機構におけるグリッド・コンピューティング技術研究開発への取り組み”
原子力 eye
- 南貴博他
“原子力分野におけるグリッド・コンピューティング技術を核とした研究基盤構築への取り組み”
FAPIG
- 櫛田慶幸他
“異なるグリッド環境の相互接続法”
全 NEC C&C システムユーザー会平成 19 年度論文集(CD-ROM)
- 鈴木喜雄
“日本原子力研究開発機構システム計算科学センターにおけるグリッド・コンピューティング技術の研究開発”
RIST News
- 西田明美他
“3次元仮想振動台の開発・適用研究”
安全研究フォーラム 2008 参考資料集
- 辻田祐一他
“ITBL を用いた原子力材料シミュレーション環境構築の取り組み”
近畿大学工学部研究報告
- 井田真人
“気泡間相互作用の効果について”
キャビテーションに関するシンポジウム(第13回)講演論文集(CD-ROM)

- 西田明美
“Wave propagation behavior of a multi-connected structure”
Proceedings of 13th International Congress on Sound and Vibration (ICSV-13) (CD-ROM)
- 鈴木喜雄、松本伸子、井戸村泰宏、谷正之
“原子力分野におけるグリッド環境での可視化システム”
可視化情報
- 井田真人、大島伸行
“フィルタード・ナビエ・ストークス方程式の数値不安定性について”
計算工学講演会論文集
- 井戸村泰宏、井田真人、徳田伸二、L. Villard
“Conservative gyrokinetic Vlasov simulation using Morinishi scheme”
Europhysics Conference Abstracts (CD-ROM)
- 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 講演要旨集 (CD-ROM)
- 篠原主勲
“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講演要旨集 (CD-ROM)
- 鈴木喜雄
“グリッド環境の大規模可視化システム”
第 56 回理論応用力学講演会論文集
- 井田真人、井戸村泰宏、徳田伸二
“保存型ジャイロ運動論的 Vlasov コードの開発とその核融合プラズマ乱流シミュレーションへの応用”
第 22 回生研 TSFD シンポジウム講演論文集
- 宮村倫司他
“ITBL クライアント API による ADVENTURE_Opt の ITBL 環境への実装”
計算工学講演会論文集
- 宮崎明美、鶴秀生
“梁の波動伝播解析における Timoshenko 係数効果”
第 56 回理論応用力学講演会講演論文集
- 羽間収、新谷文将
“高速炉の直管型 2 重管蒸気発生器管板の熱応力評価, 2; 大規模詳細熱応力解析”
日本機械学会 2007 年度年次大会講演論文集, Vol. 1
- 井田真人、直江崇、二川正敏
“Numerical study of gas and cavitation bubble dynamics in liquid mercury under negative pressure”
Proceedings of 5th Joint ASME/JSME Fluids Engineering Conference (FEDSM2007) (CD-ROM)
- 井田真人、井戸村泰宏、徳田伸二
“核融合プラズマ乱流のジャイロ運動論的シミュレーション, 1; モデリングと計算手法”

- 日本流体力学会年会 2007 講演論文集 (CD-ROM)
- 西田明美、塩見忠彦
“CAD データを活用した原子力施設の大規模 3 次元地震応答解析”
日本建築学会 2007 年度大会学術講演梗概集
 - 今村俊幸、山田進、町田昌彦
“疎行列固有値ソルバーの自動チューニング LOBPCG の量子多体問題への応用を中心に”
情報処理学会研究報告 2007-HPC-111
 - 山口正剛、蕪木英雄
“First-principles calculations on the grain boundary decohesion of iron and nickel by oxygen”
Proceedings of Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computations and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C+SNA 2007) (CD-ROM)
 - 鈴木知明、蕪木英雄、若井栄一
“A Three-dimensional meso-scale modeling for helium bubble growth in metals”
Proceedings of Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computations and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C+SNA 2007) (CD-ROM)
 - 町田昌彦、小山富男、立木昌
“Direct numerical experiments on electromagnetic wave emission by flux flow in layered high-Tc superconductors”
Proceedings of SPIE's 1998 Annual Meeting, Vol. 3480
 - 海老原健一、渡辺正
“非理想気体格子ボルツマン法における二相の界面挙動について”
日本機械学会第 14 回計算力学講演会講演論文集

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- 2007 年 12 月 13 日
“1 万キロメートル離れた欧州から日本での核融合実験に成功—イーター・サテライトトカマク計画での遠隔実験への適用性を実証—”
- 2008 年 2 月 29 日 (大阪府立大学よりプレス発表)
“府立大学・JST のナノバーチャルラボ CREST チーム 世界一高速で動作する超伝導中性子検出器の開発に成功!”
- 2008 年 3 月 12 日
“DNA 補修酵素のかなめとなるアミノ酸を世界で初めて発見”

5. 研究発表会等の開催

- 第 16 回 CCSE ワークショップ (H19 年 4 月 23 日)
“High Performance Computing on Vector Based Architectures -Recent Achievements and Future Directions-” (参加者：機構外 22 名、機構内 19 名)

- ・ 第1回 REDIMPS (Research and Development of International Matrix Prediction System on French-Japan International Grid Computing Environment) ワークショップ (H19年5月29日)

(参加者: 機構外12名、機構内10名)
- ・ 第17回 CCSE ワークショップ (H20年3月6日)

“FBR サイクル実用化研究開発 (FaCT) への計算科学の活用” (参加者: 機構外9名、機構内22名)
- ・ マテリアルチームセミナー (計5回開催)

H19年8月2日: 板倉充洋 (シミュレーション技術開発室) 講演 (参加者: 機構内10名)

10月19日: Dr. Kent Irwin (National Institute of Standards and Technology Leader, Quantum Sensors Project) 講演 (機構内10名、機構外5名)

10月23日: Prof. Yuriy Bunkov (Centre de Recherches sur les Tres Basses Temperatures of Centre National de la Recherche Scientifique in Grenoble) 講演 (機構内12名、機構外5名)

12月25日: 亀田純 (ペンシルバニア大) 講演 (参加者: 機構内5名)

H20年2月27日: 蕪木英雄 (システム計算科学センター)、鈴木知明 (シミュレーション技術開発室)、實川資朗 (耐照射性原子力材料開発グループ) 講演 (機構内9名、機構外1名)
- ・ CREST 特定課題推進チームセミナー (計5回開催)

H19年6月15日: 飯田圭 (高知大学) 講演 (参加者: 機構内8名)

7月18日: 柳瀬陽一 (東大理学部) 講演 (参加者: 機構内4名、機構外1名)

11月14日: 田仲由喜夫 (名大工学部) 講演 (参加者: 機構内8名、機構外2名)

12月7日: Huiqiu Yuan (LANL, USA) 講演 (参加者: 機構内4名、機構外0名)

H20年3月5日: 土屋俊二 (慶応大理工学部)
- ・ 量子生命情報解析チームセミナー (計42回開催)

H19年4月4日: 及川雅隆 (特別研究生) 講演 (参加者: 機構内9名、機構外3名)

4月11日: 由良敬 (研究副主幹) 講演 (参加者: 機構内9名、機構外3名)

4月18日: 中村建介 (任期付研究員) 講演 (参加者: 機構内9名、機構外3名)

4月25日: 河野秀俊 (量子ビーム応用研究部門研究副主幹) 講演 (参加者: 機構内9名、機構外3名)

5月9日: 松本淳 (研究員) 講演 (参加者: 機構内9名、機構外3名)

5月16日: 村上洋 (量子ビーム応用研究部門) 講演 (参加者: 機構内10名、機構外3名)

5月23日: 郷信広 (生命科学研究統括・特別研究員) 講演 (参加者: 機構内9名、機構外3名)

5月30日: 須山幹太 (京都大学医学研究科准教授) 講演 (参加者: 機構内9名、機構外4名)

6月6日: 高田彰二 (京都大学理学研究科准教授) 講演 (参加者: 機構内9名、機構外6名)

6月13日: 川端猛 (奈良先端大学院大学准教授) 講演 (参加者: 機構内9名、機構

- 外 3 名)
- 6 月 20 日 : 石田恒 (量子ビーム応用研究部門研究員) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 3 名)
- 6 月 27 日 : 米谷佳晃 (日本学術振興会特別研究員) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 3 名)
- 7 月 4 日 : 徳久淳師 (量子ビーム応用研究部門博士研究員) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 3 名)
- 7 月 18 日 : 及川雅隆 (特別研究生) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 3 名)
- 7 月 25 日 : 由良敬 (研究副主幹) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 3 名)
- 9 月 5 日 : 中村建介 (任期付研究員) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 3 名)
- 9 月 12 日 : 戸田充 (福井大学遠赤外領域開発研究センター研究員) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 4 名)
- 9 月 19 日 : 河野秀俊 (量子ビーム応用研究部門研究主幹) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 3 名)
- 9 月 25 日 : Steven Hayward (英国東アングリア大学講師) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 4 名)
- 10 月 3 日 : 松本淳 (研究員) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 3 名)
- 10 月 10 日 : 川端猛 (奈良先端科学技術大学院大学准教授) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 3 名)
- 10 月 17 日 : 米谷佳晃 (日本学術振興会特別研究員) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 3 名)
- 10 月 24 日 : 藤博幸 (九州大学生体防御医学研究科教授) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 5 名)
- 10 月 31 日 : 徳久淳師 (量子ビーム応用研究部門生体分子シミュレーション博士研究員) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 3 名)
- 11 月 14 日 : 吉井悠喜 (奈良先端科学技術大学院大学修士課程 2 年) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 4 名)
- 11 月 21 日 : 及川雅隆 (特別研究生) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 3 名)
- 11 月 28 日 : 由良敬 (研究副主幹) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 3 名)
- 12 月 5 日 : 土田敦子 (お茶の水女子大学博士過程 3 年) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 4 名)
- 12 月 17 日 : Dr. Robert Gilbert (Univ. Oxford 教授) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 5 名)
- 12 月 17 日 : Dr. Elena V. Orlova (Birkbeck College 教授) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 5 名)
- 12 月 26 日 : 中村建介 (任期付研究員) 講演 (参加者 : 機構内 9 名、機構外 3 名)
- H20 年 1 月 9 日 : 郷信広 (生命科学研究統括・特別研究員) 講演 (参加者 : 機構内 10 名、機構外 3 名)
- 1 月 23 日 : 栗崎以久男 (神戸大学大学院博士課程 2 年生) 講演 (参加者 : 機構内 11 名、機構外 4 名)

- 1月30日：中村龍史（X-FEL 課題特定課題推進員）講演（参加者：機構内11名、機構外3名）
- 2月6日：甲斐健師（X-FEL 課題特定課題推進員）講演（参加者：機構内11名、機構外3名）
- 2月13日：宮久保博幸（奈良先端科学技術大学院院修士課程生）講演（参加者：機構内11名、機構外3名）
- 2月20日：石田恒（量子ビーム応用研究部門研究員）講演（参加者：機構内11名、機構外3名）
- 2月27日：河野秀俊（量子ビーム応用研究部門研究主幹）講演（参加者：機構内11名、機構外3名）
- 3月5日：松本淳（研究員）講演（参加予定者：機構内11名、機構外3名）
- 3月12日：米谷佳晃（日本学術振興会特別研究員）講演（参加予定者：機構内11名、機構外3名）
- 3月19日：徳久淳師（量子ビーム応用研究部門生体分子シミュレーション博士研究員）講演（参加予定者：機構内11名、機構外3名）
- 3月26日：及川雅隆（特別研究生）講演（参加予定者：機構内9名、機構外3名）

6. 受賞等

- ・ 日本計算工学会「平成18年度論文賞」受賞
山田進
「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、平成19年5月22日
- ・ 国際会議 SC07 にて、「2007年度大規模解析コンクール優秀賞(Finalist)」受賞
Chiaki Kino, Noriyuki Kushida, Yoshio Suzuki and Norihiro Nakajima
“Cognitive methodology based Data Analysis System for Large Scale Data”
SC07 (10-16 November 2007, Reno, USA)
- ・ 全 NEC C&C システムユーザー会「平成19年度ユーザー事例論文 佳作」受賞
櫛田慶幸、青柳哲雄、鈴木喜雄、中島憲宏、南貴博
「異なるグリッド環境の相互接続法」
全 NEC C&C システムユーザー会、平成19年12月

7. 特許等の状況

- (1) 特許の出願及び登録
なし。

(2) 成果の活用（利用許諾）による収入

| 件名（成果の内容） | 契約先（販売者） | 権利／契約種別 | H19 年度収入額 |
|------------------------|-------------------|---------------|-----------|
| 並列計算機の通信基盤ソフトウェア 他 1 件 | 日立東日本ソリューションズ株式会社 | プログラム著作権／利用許諾 | 31,500 円 |
| AVS/Express 並列化支援ツール | 株式会社ケイ・ジー・ティ | プログラム著作権／利用許諾 | 789,600 円 |
| 並列分子動力学ステンシル 他 2 件 | 株式会社日本総研ソリューションズ | プログラム著作権／利用許諾 | 220,500 円 |

8. 外部資金の獲得に関連する事項

| 室 | 予算額(千円) (件数) |
|---------------|--------------|
| 高度計算機技術開発室 | 93,184 (6) |
| シミュレーション技術開発室 | 85,321 (14) |

【高度計算機技術開発室】

- (1) 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—(国立情報学研究所) 75,737 千円
- (2) 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) 10,397 千円
- (3) 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) 4,500 千円
- (4) 原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション(科学技術振興機構) 650 千円
- (5) 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)) 900 千円
- (6) 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)) 1,000 千円

【シミュレーション技術開発室】

- (7) 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) 52,534 千円
- (8) ナノ構造超伝導体数値モデルの構築と数値的研究によるデバイス提案(科学技術振興機構) 865 千円
- (9) 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) 400 千円
- (10) 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)) 1,510 千円
- (11) 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)) 1,670 千円

- (12) 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） 6,524 千円
- (13) 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)） 2,185 千円
- (14) ターゲットタンパク研究プログラム—タンパク質の複合体構造を推定するための構造バイオインフォマティクス—（文部科学省） 11,383 千円
- (15) 水素による原子レベルの粒界き裂発生に関する計算科学的研究開発（財団法人金属系材料研究開発センター） 2,350 千円
- (16) 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
- (17) 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)） 1,400 千円
- (18) 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)） 1,500 千円
- (19) 遷移金属を結合する蛋白質の探査と機能予測（日本学術振興会：科研費(基盤C)） 1,300 千円
- (20) 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 | 研究協定 |
|---------------|----------------|------|------|------|------|
| 高度計算機技術開発室 | グリッド技術開発等 | 14 | 0 | 2 | 0 |
| | 耐震計算科学技術開発 | 1 | 0 | 2 | 0 |
| | 専用シミュレータ基盤技術開発 | 0 | 0 | 0 | 1 |
| 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 | 5 | 0 |
| | 生命情報解析 | 7 | 0 | 1 | 0 |
| 合計 | | 23 | 0 | 10 | 1 |

●共同研究

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発等】

- ・ 産学官連携計算ポータル・サービス・モデル構築のための技術的・制度的基盤に関する調査研究（株式会社情報数理研究所）
- ・ 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（株式会社ケイ・ジー・ティービジュアルゼーション部）
- ・ 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)

- ・ 統合型津波情報解析システムの研究 (東北大学大学院工学研究科附属災害制御研究センター)
- ・ 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)
- ・ 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)
- ・ 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)
- ・ グリッドを利用したコミュニティ・システム開発に関する研究 -核融合研究分野への展開- (九州大学応用力学研究所)
- ・ 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 (株式会社竹中工務店)
- 【シミュレーション技術開発室・材料シミュレーション】
- ・ 水素による原子レベルの粒界き裂発生に関する計算科学的研究開発 (財団法人金属系材料研究開発センター)
- 【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 (C) (長岡バイオ大学バイオサイエンス学部)
- ・ 計算科学を用いた生命情報解析研究 (D) (長岡技術科学大学工学部生物系)

●受託研究

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発等】

- ・ サイエンスグリッド NAREGI プログラムの研究開発 (情報・システム研究機構国立情報学研究所)
- ・ 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)

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】

- ・ 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)
- ・ 原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション (科学技術振興機構)

【シミュレーション技術開発室・材料シミュレーション】

- ・ 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（科学技術振興機構）
- ・ ナノ構造超伝導体数理モデルの構築と数値的研究によるデバイス提案（科学技術振興機構）
- ・ 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）
- ・ 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）
- ・ 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）

【シミュレーション技術開発室・生命情報解析】

- ・ ターゲットタンパク研究プログラム—タンパク質の複合体構造を推定するための構造バイオインフォマティクス—（文部科学省）

●研究協定

【高度計算機技術開発室・専用シミュレータ基盤技術開発】

- ・ 高機能・超低消費電力スピンドバイス・ストレージ基盤技術の開発に関する連携協定（東北大学電気通信研究所、株式会社日立製作所、富士通株式会社、株式会社東芝、富士電機デバイステクノロジー株式会社、株式会社アルバック、株式会社三菱総合研究所）

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 28 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およびデータ考察による解析
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大規模データの可視化および解析。
- (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) 炉内核熱連成振動解析の可視化
部署：(東海)安全研究センター
概要：炉内各熱連成振動解析から出力されるデータの可視化に貢献する。
- (14) 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
部署：(東海)原子力基礎工学研究部門、(大洗)大洗研究開発センター、(本部)国際部
概要：日本側のグリッドコンピューティング技術および仏国側のマトリクスソルバー予測技術を組み合わせ、各アプリケーションに最適なソルバーを日仏に跨って予測可能なシステムの実現を目指す。
- (15) 並列分散技術のIMAGINE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：放射線治療(IMAGINE)システムに対して、分散計算環境を用いてシステムを構築。
- (16) 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、システム計算科学センターでは理論シミュレーショ

ンによる支援を行っている。

- (17) 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。
- (18) 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)先端基礎研究センター
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。
- (19) 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。
- (20) 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、システム計算科学センター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。
- (21) 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。
- (22) 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。
- (23) 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。
- (24) 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：キネティックモンテカルロ法を使って ODS 鋼の酸化物析出シミュレーションを行う。
- (25) 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。
- (26) 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。

(27)放射線抵抗性細菌デインコッカス・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

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。

(28)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。

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ます)

(2006年～)

(5)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～)

(6)エネルギー省 (DOE)：米国

“日米原子力エネルギー共同行動計画”

(2007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”

(2007年～)

(8) カリフォルニア工科大学 (Caltech) : 米国

(2007年～)

This is a blank page

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 |
| 面積密度 | キログラム毎平方メートル | kg/m ² |
| 比体積 | 立方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 |
| 量濃度 ^(a) , 濃度 | モル毎立方メートル | mol/m ³ |
| 質量濃度 | キログラム毎立方メートル | kg/m ³ |
| 輝度 | カンデラ毎平方メートル | cd/m ² |
| 屈折率 ^(b) | (数字の) | 1 |
| 比透磁率 ^(b) | (数字の) | 1 |

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

表3. 固有の名称と記号で表されるSI組立単位

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

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

表4. 単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

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

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6. SIに属さないが、SIと併用される単位

| 名称 | 記号 | SI単位による値 |
|-------|------|---|
| 分 | min | 1 min=60 s |
| 時 | h | 1 h=60 min=3600 s |
| 日 | d | 1 d=24 h=86 400 s |
| 度 | ° | 1°=(π/180) rad |
| 分 | ' | 1'=(1/60)°=(π/10800) rad |
| 秒 | " | 1"=(1/60)'=(π/648000) rad |
| ヘクタール | ha | 1 ha=1 hm ² =10 ⁴ m ² |
| リットル | L, l | 1 L=1 l=1 dm ³ =10 ³ cm ³ =10 ⁻³ m ³ |
| トン | t | 1 t=10 ³ kg |

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

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

表8. SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

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

表9. 固有の名称をもつCGS組立単位

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

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

表10. SIに属さないその他の単位の例

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

