



JAEA-Review
2009-046

平成20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 FY2008

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

JAEA-Review

February 2010

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, 2010

平成 20 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

(2009 年 12 月 1 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 20 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 FY2008

Center for Computational Science & e-Systems

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

(Received December 1, 2009)

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 FY2008.

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 20 年度計画	3
2. 1 中期計画	3
2. 2 平成 20 年度計画	3
3. 平成 20 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 20 年度シミュレーション工学研究予算及び人員	21
平成 20 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 FY2008	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は、原子力分野の研究開発においても理論、実験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）に準じた。すなわち、機構の「平成 20 年度の業務運営に関する計画（平成 20 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）。

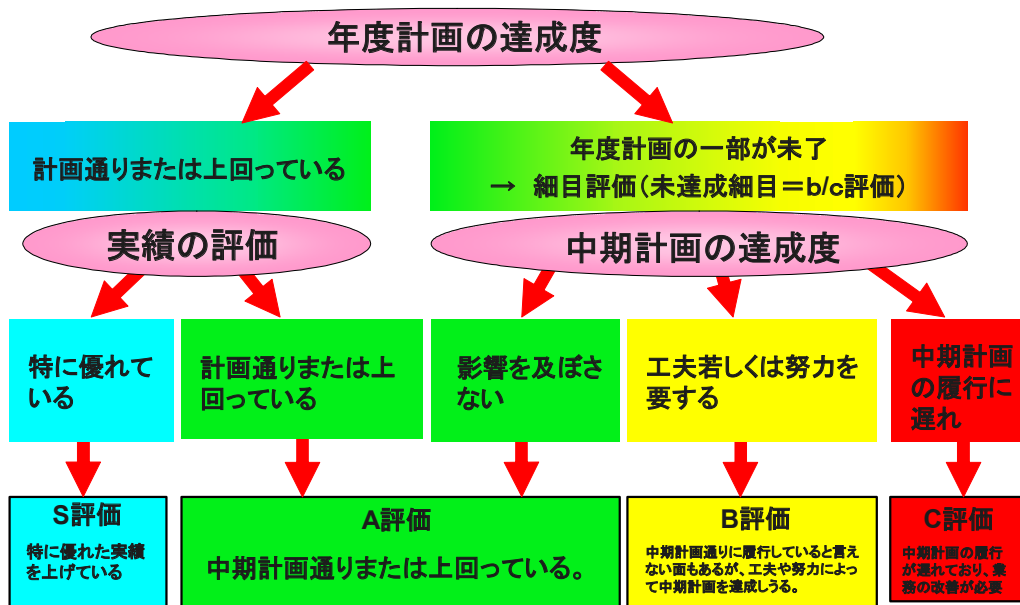


図 1. 1 機構における評価基準

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

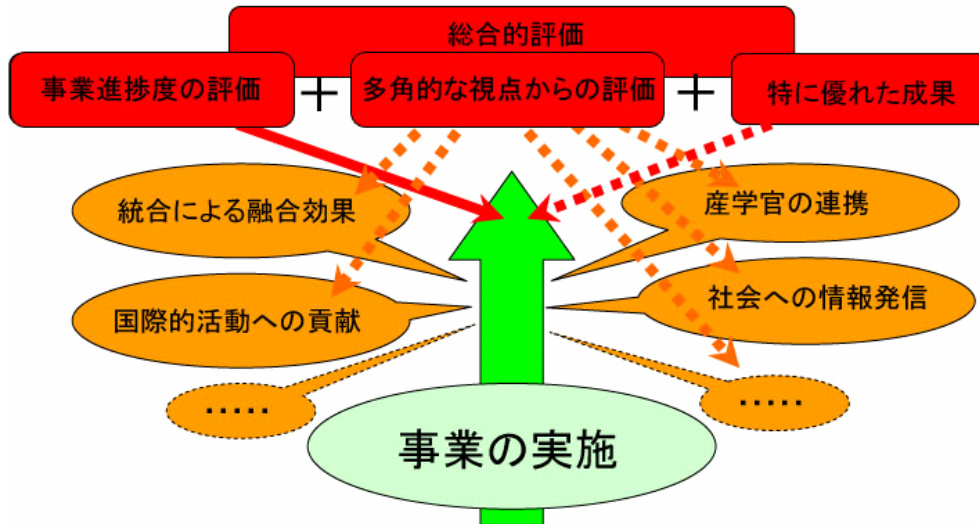


図 1. 2 機構における「評価の視点」のイメージ

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。
	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			

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 20 年度計画

2. 1 中期計画

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

グリッド技術による並列分散計算技術を開発し、原子力施設の耐震性評価用仮想振動台を構築する。原子炉材料のき裂進展、核燃料の細粒化現象の機構解明や、原子力分野におけるナノデバイスの開発に貢献するため、ミクロからマクロに至る計算手法を統合したマルチスケ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 20 年度計画

中期計画を実現するための平成 20 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 19 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。

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。

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。

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モデルとコードを開発する。

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、低線量放射線に応答する DNA 修復タンパク質を明らかにすること、及び平成 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。

細胞核条件下での放射線による DNA 損傷生成の特徴を明らかにする。8-オキシグアニンと鎖切断を持つ DNA の修復機構について調査する。人体臓器と幹細胞の階層化モデルを用いたシミュレーションに着手する。

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、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。

茨城地区スーパーコンピュータの調達手続きを実施し、機構が保有するスーパーコンピュータの整備合理化を実施する。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。

なお、平成 20 年度計画のうち「細胞核条件下での放射線による DNA 損傷生成の特徴を明らかにする。8-オキシグアニンと鎖切断を持つ DNA の修復機構について調査する。人体臓器と幹細胞の階層化モデルを用いたシミュレーションに着手する。」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 20 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 20 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 20 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 20 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 20 年度の実績を踏まえた平成 21 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 21 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20年度研究開発実績及び成果の意義等

	中期計画	H20年度計画	H20年度実績報告	成果の意義	多角的視点【注】、特に優れた成果等	H21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19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。 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。 (注)HTTR: JAEAの高温工学試験研究炉(高温ガス炉)。	○耐震性評価用仮想振動台のための実験的環境を構築し、動作確認実験を行った。 ○その結果、耐障害性機能を改善することで、一億自由度超の大規模構造解析の実行が可能となる見通しを立てた。	○演算処理を並列分散処理する技術を実現し、計算機1台では規模が大きすぎて実行できない大規模シミュレーションを実行可能とする環境を整えた。	○グリッド技術を活用した大規模シミュレーション結果解析技術が高く評価され、計算科学分野の世界最大の国際会議(SC08)で優秀賞を受賞した。 ○演算処理の並列分散処理機能の有効性が評価され、全NEC O&Cシステムユーザー会ユーザー事例で論文賞を受賞した。 ○基礎工学部門との連携の下、並列分散処理の放射線医療システム適用における実用性が評価され、FUJITSUファミリィ会で論文賞を受賞した。 ○H19年度における国家プロジェクトの完遂が評価され、理事長表彰において研究開発功労賞を受賞した。 ○国際協力として、日仏交流における外部資金(1550万/3年)獲得を継続し、仏国とのグリッド計算環境を整備した。 ○地層処分部門との連携の下、グリッド技術を活用した健全性評価技術の提案により、連携融合研究費(理事長ファンド)を獲得した。	平成20年度までに高度化したグリッド技術(並列分散データ処理機能、並列分散演算機能)を適用することでグリッド対応耐震性評価用仮想振動台を構築し、HTTRの全体解析を実現する。
			○耐震性評価用仮想振動台コードを構築し、HTTRを対象とした解析を実施した。 ○165個の実測データと計算結果の比較を行い、再現性を持つ事を確認した。一方で、計算時間のばらつきが大きく生じたため、コードの調査を実施した。連立一次方程式の解法の前処理方法の調査分析を行い、最適な前処理手段を選択することで、計算誤差の収束性を改善し、ばらつきを低減できた。さらに、安定的に演算処理を速くできた。	○HTTRは第4紀層に敷設された実験炉で、従来の岩盤上に敷設するタイプとは異なる。いわゆる砂礫層での対地震挙動を調査するためにも多くのデータが計測されており、そのデータと比較シミュレーションすることは、本課題の計算機実験にとって都合が良いだけでなく、学術的にも新規の試みである。 ○実測データとの再現性を確認し、シミュレーションの妥当性を検証した。 ○コード検証の結果、HTTRが課題としている二重管構造や吊り構造を含む構造系に関する詳細解析を実施する用意ができた。	○建設部からの要請に基づき、機構内施設(高放射性廃液貯蔵場、および、ガラス固化技術開発施設第2付属排気筒)の耐震安全性評価に協力し、計算データを提供した。 ○建設部および高温工学試験研究炉部からの要請に基づき、成果の1つであるHTTRのモデルデータを提供した(今後HTTR熱応力解析等に活用予定)。 ○外部資金「原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション」(250万円/5年)において、東京大学、東京電力等と共同研究を具体に実施し、産学官連携の基盤を確立できた。また、安全研究センターと基礎工学部門との研究連携を進めた。 ○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)において電中研と共同研究を実施し、仮想振動台の開発を加速した。 ○当該研究に関連するシミュレーション技術が、日本原子力学会計算科学技術部会CG賞を受賞した。	
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モデル手法を構築する。	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。	○鉄の粒界に対する脆化元素効果を第一原理計算から求め、その結果をマクロのき裂進展シミュレーションコードに取り込めるマルチスケールシミュレーションコードを開発した。 ○更にその開発したコードを用い、水素と酸素の脆化効果によるき裂進展を各々、シミュレーションし、実験により得られた応力腐食割れの破断応力との比較を行った。 ○細粒化メカニズムの最も有望なシナリオとされる転位ウォール形成から亜粒界形成までのシミュレーションを行い、実験データとの整合を確認した。 ○更に、実験で得られた細粒化状態の安定性を調べるため、粒界移動シミュレーションコードを開発した。	○現在、応力腐食割れ機構の仮説として、粒界酸化と水素脆化の二つのシナリオが提唱されているが、本年度の研究実績により、粒界酸化の方が応力腐食割れの原因としてより可能性が高いことが示された。 ○上記の成果は、第一原理に裏打ちされているため、信憑性は高く、このシナリオの絞込みにより、今後の実験によるシナリオ同定という機構理解も大いに期待できる。 ○転位力学による転位の秩序化シミュレーションコード及びメソスケールの亜結晶形成シミュレーションコードの開発に成功し、どちらも実験を良く再現することを確認した。これらを組み合わせることで転位の秩序化という細粒化のシナリオ同定に近づくことができる。 ○上記のコードに加え、マクロスケールの亜結晶形成後の粒界移動シミュレーションの計3つのシミュレーションをマルチスケール的に連携動作可能とするモデリングを構築した。これにより、細粒化のスケール階層性が理解可能となる。	○プロトタイプだが、き裂進展機構の解明に貢献可能なマルチスケールコードの開発に成功し、更に粒界酸化という応力腐食割れのシナリオ絞込みに成功した(中期計画に着手時、極めて困難な達成目標と考えられた)。 ○開発したマルチスケールモデリングを水素脆化研究NEDOプロジェクトにおいても応用し、プロジェクト内部において最高の評価を得た。	応力腐食割れにおけるき裂進展機構解明のため、結晶粒界の脆化元素効果に対するマイクロな計算、脆化元素の偏析効果に対するメゾ計算、及び、き裂の複雑な進展のマクロな計算を組み合わせるマルチスケール亀裂進展シミュレーションを行い、実験結果と比較する。
					○転位の運動のシミュレーションを明瞭な亜結晶が形成されるまで発展させることはシミュレーション時間という観点から極めて困難であったが、最終的に実現される微細構造を最適化法で推定する新しいモデルを開発するなど、マルチスケール化の方策に独自のアイデアを創出した。	細粒化機構解明に貢献するため、マルチスケール・シミュレーションを通して、転位ネットワーク形成から細粒化発生を再現し、粗大化バブル成長との関係を探査することで細粒化シナリオの検証を行う。

表3. 1 平成20年度研究開発実績及び成果の意義等(つづき)

	中期計画	H20年度計画	H20年度実績報告	成果の意義	多角的視点【注】、特に優れた成果等	H21年度計画(案)
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ル手法を構築する。	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モデルとコードを開発する。	○デバイスと外部環境を統合し、両者のダイナミクスを同時に解くシミュレーションモデリングを構築した。 ○上記モデリングをシミュレーションコードとして実装し、外部環境とデバイス内部が相互に影響しあう様子を再現することに成功した。	○本年度に開発したモデリングにより、超伝導デバイスの内部で起こる非線形ダイナミクスが外部に対し、実際にどのような影響を及ぼすかをシミュレーションすることが可能となった。これにより、デバイス特性の高精度シミュレーションが実現し、シミュレーション先導型の研究開発が実践できる。	○本研究開発により得た成果を背景に科研費・特定領域の公募研究と基盤研究(C)に応募し、両者共に採択された。	超伝導放射線応答デバイス開発に貢献するため、マルチスケール・シミュレーションコードによる結果を解析し、放射線応答の応答特性とデバイス機能についての体系化を行う。
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)。	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、及び平成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。	○構築したゲノム情報解析用データベースに対し、放射線の線種・線量に関する項目を組み込むことで、さまざまな放射線に反応するDNA修復タンパク質を検索できるよう整備した。 ○開発したシミュレーション技術を用いて、DNA損傷修復過程について最低限必要とされる10万原子を超える体系に対し、100ナノ秒以上のシミュレーションを実行した。	○整備したデータベースを用いることで、ひとつのDNA修復タンパク質の研究ではなく、その複合体及び個体が持つ全DNA修復タンパク質を対象にするような網羅的な研究が可能になる。 ○100ナノ秒以上のDNA損傷修復過程のシミュレーション結果を、来年度に行うシミュレーション結果とともに解析することで、低線量放射線影響によるDNA損傷の修復メカニズムの解明に大きく貢献できる。	○開発完了したデータベースは、放射線の線種・線量を入力データとして、DNA修復タンパク質の検索を行えるなど極めてユニークな特色を持つ。 ○これまで、DNA損傷修復過程に関し、10万原子を超えるような大きな体系で100ナノ秒以上の超大規模シミュレーションにチャレンジした例はない。	ゲノム情報解析用データベースから抽出した修復タンパク質とDNAとの複合体に対し、動的構造シミュレーションを実行し、修復タンパク質が損傷DNAをどのように認識するかを明らかにする。

表3. 1 平成20年度研究開発実績及び成果の意義等(つづき)

	中期計画	H20年度計画	H20年度実績報告	成果の意義	多角的視点【注】、特に優れた成果等	H21年度計画(案)
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、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の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。	○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の演算回路の最新の試作情報を得るとともに、これを将来のシミュレータハードウェアに適用できる有力な次世代技術と位置づけた。シミュレーション手法についても、電子回路のトランジスタ数を可能な限り少なくできる格子流体法を採用し、時間発展計算における各段階での基本機能を論理演算のみで実行できることを数値シミュレーションによって確認した。 ○また、全体のプロセッサ設計については、隣接回路間のみのデータ転送でパイプライン演算処理を並列的に実行できるストリックアレイ方式を採用し、専用シミュレータ中核部の基本設計を具体的に示すとともに、その動作手順をシミュレーションで模擬確認した。さらに、演算速度と消費電力について、汎用ベクトルプロセッサとの概略比較を行い、将来の超高速コンピューティングニーズのうち実験支援等の分野で貢献できる可能性を示した。	○今回示した流体解析専用シミュレータ中核部の基本設計は、格子流体法の採用により電子回路を単純化した点で、FPGA(現場で構成を自由に変更できるゲート回路の配列)等の現状技術を活用した場合に有利であるのはもちろんのこと、スピンの演算回路に代表される将来の不揮発性演算回路の利用促進に当たって、最初の試作目標になれる具体例を示した点で意義がある。 ○また、考察の対象となっているシミュレーション体系の限られた場所の限られた時刻における実測データをフィードバックして全体系における物理量の変化をより現実的に知るといふ「計測融合シミュレーション」への応用が、本専用シミュレータの有力な活用法である点は、初期条件がわからないなど現実のシミュレーション環境での利用に有利であり、かつ、高レイノルズ数のシミュレーションが不得意とされる格子流体法の欠点を緩和する効果的な組み合わせとして意義がある。 ○以上のような超低消費電力でコンパクトな計測融合流体シミュレータは、潜在的に幅広い活用分野をもち、汎用スパコンによるマルチスケール・マルチフィジクス・まるごと設計という方向とは別の、実験支援・運転支援・医療等の現場における超高速コンピューティングニーズに貢献できる基礎になるとと思われる。	○今回の流体解析専用シミュレータ中核部の基本設計は、以下に示す機構内外・大学・産業界との連携時における意見交換・研究協力等を通じて得られたアイデアの集合体としてはじめて実現したものである。 ①東北大学電気通信研究所及び東北大学流体科学研究所との間に締結した「超高速コンピューティング分野における研究協力の推進に関する協定(平成17年4月～現在)」に基づく不揮発性演算回路のようなデバイス・電子回路レベルから、計測融合シミュレーションのような実験計測技術・アプリケーションソフトウェアまでの研究協力、 ②東北大学電気通信研究所の共同プロジェクト研究公募制度に基づく「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(平成18年4月～21年3月)」の設置と、研究会におけるハードからソフトに至る多階層でかつ原子力・海洋・航空宇宙等の分野横断型の意見交換、 ③東北大学電気通信研究所、日立製作所等8社と締結した「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(平成19年10月～現在)」に基づく知的財産取扱規程及び秘密保持取扱規程によるスピンの演算回路試作データ等の把握、 ○また、以上の活動を通じて、原子炉の研究開発分野では、実験支援や運転支援のための超高速コンピューティングニーズも高いことや、原子力分野以外では、海中航行ロボットの位置制御や音楽ホールのバーチャル試聴など、流体専用シミュレータのステークホルダーニーズがいろいろあることも把握できた。	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、マイクロプロセッサによる基本動作手順の模擬確認及びスピンの演算回路の利用を仮想した場合の演算速度と消費電力の概略推定を行うことで、専用シミュレータ中核部の基本設計を明らかにし、将来の超高速コンピューティングニーズのうち実験支援等の分野で貢献できる有用性を示す。
	茨城地区スーパーコンピュータの調達手続きを実施し、機構が保有するスーパーコンピュータの整備合理化を実施する。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。	○仕様書原案に対する意見招請手続きを完了させた。最終仕様書案を策定し、大型計算機利用委員会を経て理事懇談会の了承を得た後、入札公告の官報公示を実施した。なお、応札者辞退に伴い、再度入札公告を実施する(3月中旬官報公示予定)。 ○ネットワークの需要増に対応した信頼性向上策として、1)老朽化及び容量不足が問題となっていた機構メールサーバを更新した(平成20年7月)。2)ネットワークの耐障害性向上のため、基幹部コアスイッチ等の冗長化を図るための調達手続きを実施した。	○原子力機構では、現在2式のスーパーコンピュータシステムを運用している(計15TFLOPS)。しかしながら、この性能(規模)は原子力機構がかかえる膨大な計算需要を賄うには大きく不足している状況にある。この計算機資源不足を改善するため、これら2式のスーパーコンピュータシステムを更新し、原子力研究の高度化・効率化を推進する。 ○ネットワークに関しては、老朽化したメールサーバの更新、ネットワークの耐障害性向上のための基幹部コアスイッチ等の冗長化を図るもので、原子力機構業務の円滑な推進に大きく寄与するものである。	○スーパーコンピュータシステムを合理化しつつ性能向上 ○研究に必要なIT基盤の強化(信頼性向上)	次期茨城地区スーパーコンピュータの導入計画に合わせ、遅滞なく調達手続きを完遂し、運用に供する。また、セキュリティ対策強化やネットワーク機器の老朽化対策を柱とするネットワーク最適化を進める。	

【注】多角的視点:

- 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、大学等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。

4. 原子力計算科学研究評価専門部会による評価

平成 21 年 3 月 11 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・情報学部長
	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 生命情報・DDBJ 研究センター 特任教員
	樋渡 保秋	豊田理化学研究所 フェロー
幹事	谷 正之	原子力機構 システム計算科学センター
	高柳 裕一	原子力機構 システム計算科学センター
	松本 潔	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 21 年 3 月 11 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)	・H20 年度の評価方法について ・システム計算科学センターの H20 年度研究開発実績について	小柳委員、笠原委員、樋渡委員は欠席

(注) 小柳委員、笠原委員、樋渡委員については、3 月 11 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。表中の評価コメントは委員からいただいたものを原文のとおり記載してある。

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】</p> <p>平成 19 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。</p> <p>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。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 計算機環境についてはフランス CEA と連携するトゥールーズ大学とグリッド接続を実施し、日仏協力体制を強化した。また、耐震性評価用仮想振動台実行のために、解析対象の各単位を各スパコンで実行し、全体解析を可能にした。HTTR の実測データと計算結果を比較し、再現性を確認している。全ての点で 20 年度計画はクリアしている。 大規模シミュレーションを実行可能とする環境と整えるという目的に照らして、ヨーロッパにおいて新たにグリッド接続環境の構築と動作確認を行ったことを始め、グリッド計算の研究環境整備が進んでいると評価できる。今後は、行列演算の基本的動作確認に留まらない耐震評価という実際問題の計算実行に向けての研究の進展が期待される。仮想振動台の耐震評価研究では、HTTR の実データに基づくパイロット的な計算を実施する中で新たな研究課題を発見し、日米 GNEP 計画へ参画することで地盤解析との連成問題の研究にも着手している。 計画どおりに進捗している。 ジョブ負荷分散等大きな成果が上がっている。 	<ul style="list-style-type: none"> 日仏国際協力の下にグリッド環境を整備、HTTR への仮想振動台の適用等は多角的視点での研究である。 大学との連携研究、電中研との連携などが進んでいることが評価できる。また、東京大学、東京電力などとの共同研究が進み成果が上がっていると評価できる。所内に於いても建設部からの要請にモデルデータや計算データを提供し連携を深めている。 フランストゥールーズ大、国内大学、電中研等国内外の連携も順調であり、努力が評価できます。 	<ul style="list-style-type: none"> 仮想振動台による大規模シミュレーションを可能にした点は非常に評価できる。本件では SC08 で優秀賞も獲得している。 グリッド活用による大規模計算が SC08 での優秀賞(Finalist)を獲得している。また、全 NEC C&C システムユーザー会での論文賞や、FUJITSU ファミリー会での論文賞を獲得し、さらに、所内でも理事長表象による研究開発功労賞を受賞している。可視化技術についても原子力計算科学技術部会から CG 賞を受賞している。 種々の受賞、外部連携等優れた成果をあげていると評価します。 	<ul style="list-style-type: none"> 原子力施設の耐震性評価仮想振動台については開発が順調であり、今後、原子力プラントの各サイトでの適用が大いに期待されます。地層についての情報をうまく取り入れ、原子力安全委員会、電力等で実際に使用しやすいシステム作りに向けて努力をしてください。
<p>【年度計画】</p> <p>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。</p> <p>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／</p>	<ul style="list-style-type: none"> マルチ・スケール亀裂進展シミュレーションコードに関しては第一原理計算、有限要素計算の結合が終了し、開発の主な点は終了している。実験との比較も簡単なモデルで実行された。転位ネットワーク形成に関しても燃料内の細粒化・バブル挙動モデルを計算するシミュレーションコードを開発した。原子力デバイス開発では超伝導利用の高精度検出器開発を実施し、外部環境を考慮した枠組みを構築した。全ての点で 20 年度計画はクリアしている。 鉄の脆化現象において、第一原理計算から亀裂進展の 3D 有限要素法シミュレーションまで、メゾからマクロに到るマルチスケールシミュレーション計算コードを開発し、応力腐食割れの破断実験データとの比較 	<ul style="list-style-type: none"> マルチ・スケール亀裂進展シミュレーションコードに関しては、産学連携で水素脆化研究も実施し、さらに、機構内の次世代部門との連携により高速炉材料のヘリウム脆化の手法も構築した点、評価できる。 本研究成果の物質材料研究機構や新日鐵との共同研究である NEDO のプロジェクト研究での水素による脆性化への応用で高い評価が得られている。 粒界移動の原子力クロスオーバー研究との連携が図られている。 原子力デバイス統合シミュレーションでは CREST プロジェクトや東大の T2K 利用など 	<ul style="list-style-type: none"> マルチ・スケール亀裂進展シミュレーションコードの高速炉への応用については非常に重要な課題であり、シミュレーションコードを多方面に応用していこうとする点、非常に評価する。 NEDO のプロジェクト研究でプロジェクト内部での高い評価が得られている。 	<ul style="list-style-type: none"> マルチ・スケール亀裂進展シミュレーションコードは高速炉の材料評価にとって、非常に重要なツールとなります。実用化に向い頑張ってください。 研究者の数を考慮するとよくやっている。 き裂進展シミュレーションについて、ミクロ（第一原理）の計算結果からマクロの計算へデータを渡すことでうまくマルチスケールモデリングを

<p>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。</p> <p>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モデルとコードを開発する。</p>	<p>を行うことでメゾレベルの脆性効果の主原因が粒界酸化である可能性が高いことを導き、炉心シュラウドの応力腐食割れ機構の解明につながる研究成果を得ている。粒界の移動に対する転移ネットワーク形成シミュレーションコードを幾つかの独自のアイデアに基づいて作成し材料脆化研究の基礎的シミュレーション手法を開発した。原子力デバイス開発についても、中性子衝突による超伝導破壊現象の統合シミュレーションコードを開発している。</p> <ul style="list-style-type: none"> 計画どおりに進捗している。 	<p>への展開が図られている。</p>		<p>やっている。</p> <ul style="list-style-type: none"> 核燃料細粒化における転移ネットワークの自己組織化については、ネットワーク形成の条件をシミュレーションで調べることによって、細粒化しにくく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>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、及び平成 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。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ゲノム情報解析用データベースに関しては、20 年度は放射線の線量・線種の入力を実施し、様々な放射線に反応する DNA 修復タンパク質の検索が可能になった。DNA 損傷修復過程について、100 ナノ秒以上のシミュレーションを実行している。以上の点で 20 年度の計画はクリアしている。 IT 利用のゲノム解析データベース構築の研究では、DNA 修復タンパクのデータベースの有効利用を計る検索システムを開発し、全修復タンパクを対象とする研究を可能にした。DNA 修復タンパク質の機能解明では、修復過程での DNA 修復タンパク質による DNA 認識プロセスのシミュレーションを 100 ナノ秒まで可能にする手法を確立し、可視化技術の開発も行っている。また、タンパク質の大きさに於いては、リボゾームを対象にシミュレーションを実現しており、DNA 修復機構の解明につながる研究成果であるといえる。 平成 20 年度計画を達成した。 計画どおりに進捗している。 	<ul style="list-style-type: none"> 機構内の量子ビーム部門との連携により、巨大分子への応用を実施、東京大学との共同研究も展開している。 所内では、量子ビーム部門との連携、また東大との共同研究も行われている。 産学官の連携ならびに機構内の連携を活かして、DNA 修復遺伝子並びにタンパク質の分子生物学的解析、タンパク質立体構造解析、タンパク質会合構造解析、タンパク質機能発現の動的シミュレーション解析、タンパク質立体構造予測、機能発現機構推定、DNA 修復酵素データベースの構築、シミュレーションを用いたタンパク質立体構造の再構築を総合的に進めた。 	<ul style="list-style-type: none"> 現時点での 10 万原子を超える世界最大級の DNA 修復シミュレーションを 100 ナノ秒の時間長で実現している。 DNA 修復遺伝子のデータベースは、毎年 1 月に発行される <i>Nucleic Acids Research</i> のデータベース特集号に収録される定評あるバイオデータベース群と比較しても、特徴のある DNA 修復遺伝子のデータベースの構築を継続している。 巨大な分子のシミュレーションに引き続き取り組み成果を上げている。 	<ul style="list-style-type: none"> DNA 修復シミュレーションについて、大規模な計算ができるようになったのはよいが、それで当該分野にどのような貢献ができるのかを明確にすることが大事。他方、計算技術の観点では最先端の計算機を使いこなす大規模計算技術を磨いておくという意味はある。
<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、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の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。</p> <p>茨城地区スーパーコンピュー</p>	<ul style="list-style-type: none"> 専門シミュレータの次世代技術としてスピン演算回路の最新の試作情報を入手している。流体解析のための格子流体法の計算方式を構築し、流体解析を実施している。専用シミュレータの中核部の基本設計を実施している。 格子流体モデルを基礎に論理演算のみに基づき流体現象の時間発展問題を行う高速計算方式の可能性を、数値シミュレーションを実行して確認している。 専用計算機の開発による計算の高速化については、FPGA の利用の他にも、東北大学との連携協力によりスピン演算回路を基礎においた方式の優位性について検討を行っている。 	<ul style="list-style-type: none"> 今後の研究推進にあたっては、原子力研究における専用シミュレータと汎用計算機（スパコン）の役割分担について検討する必要がある。 東北大学との連携で見るべきものがある。 東北大との連携等の努力をしている。 	<ul style="list-style-type: none"> 東北大学との有機的な連携が進んでいると評価できる。 1 年前倒しのため、当初の目指しており、特に優れた成果をあげるには至っていないように見えます。 	<ul style="list-style-type: none"> 格子ガス法については専用シミュレータが有効であるが、一般的な数値計算については必ずしも専用シミュレータが汎用計算機よりも有利であるとは限らないので注意を要する。

<p>タの調達手続きを実施し、機構が保有するスーパーコンピュータの整備合理化を実施する。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。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ 格子法にはその妥当性について議論があるところであるが、実測データを利用したフィードバックによるモデルの調整を視野に入れており今後の進展が期待される。 ・ 計画どおりに進捗している。 ・ 1年前倒しの研究となっているため、チップの実現等は出来ていないが、電力の1/4削減が可能であることを確かめるなど一定の成果を挙げていると評価します。 			
<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"> ・ 各研究チームの研究が相互に緩やかな関連を見せ始めているという印象を持った。今後、より意識的に相互の研究成果を利用した統合研究へと発展させる取り組みを期待したい。 			

付録 平成 20 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 178,738 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 71,407 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 6 件：5,366 千円、協力者 5 件：1,710 千円）
- ・ 文部科学省（2 件：8,654 千円）
- ・ 原子力安全基盤機構（1 件：587 千円）
- ・ 科学技術振興機構（4 件：87,598 千円）
- ・ (財)金属系材料研究開発センター（1 件：21,374 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	7	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	2	2	14
シミュレーション技術開発室	8	1	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	4	1	0	16
合計	15	1	0	3	1	0	0	0	1	0	0	0	4	3	2	30

(平成 21 年 3 月 2 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 20 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	4	6
	耐震計算科学技術開発	8	2
	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	16	10
	生命情報解析技術開発	3	0
合計		31	18

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発等】

<研究論文>

- ・ 櫛田 慶幸
“システム改変なしの GRID 相互連携技術の開発”
FUJITSU ファミリー会論文集(Internet), PP.10
- ・ 鈴木喜雄
“グリッド環境利用のためのアプリケーションプログラミングインタフェースの研究開発”
FUJITSU ファミリー会論文集(Internet), PP.15
- ・ 木野千晶他
“認識能力を備えたデータ解析システムの概念設計；有限要素法を用いた耐震解析への適用”
日本計算工学会論文集(インターネット), Vol.2008, No.18 PP.8
- ・ Y. Suzuki et al.
“Development of three-dimensional virtual plant vibration simulator on grid computing environment ITBL-IS/AEGIS”
Journal of Power and Energy Systems (Internet), Vol.3, No.1 PP.60-71

<査読付き会議論文>

- ・ Y. Suzuki et al.
“Research and development of fusion grid infrastructure based on Atomic Energy Grid InfraStructure (AEGIS)”
Fusion Engineering and Design, Vol.83, No.2-3 PP.511-515
- ・ Y. Suzuki et al.
“Development of three-dimensional virtual plant vibration simulator on grid computing environment ITBL-IS/AEGIS”
Proceedings of 16th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-16)
(CD-ROM)

- Y. Suzuki et al.
“Interoperation between Atomic Energy Grid Infrastructure (AEGIS) and other grids”
High Performance Computing on Vector Systems 2008, PP.65-77
- N. Kushida et al.
“Toward an international sparse linear algebra expert system by interconnecting the ITBL Computational Grid with the Grid-TLSE platform”
Proceedings of 8th International Meeting on High Performance Computing for Computational Science (VECPAR '08) (CD-ROM), PP.424-429
- Y. Tsujita et al. (Y. Suzuki and H. Kimura)
“Building an application-specific grid computing environment using ITBL for nuclear material engineering”
Proceedings of 16th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-16) (CD-ROM)
- Y. Caniou, N. Kushida and N. Teshima (N. Kushida and N. Teshima)
“Implementing interoperability between the AEGIS and DIET GridRPC middleware to build an international sparse linear algebra expert system”
Proceedings of 2nd International Conference on Advanced Engineering Computing and Applications in Sciences (ADVCOMP 2008) (CD-ROM), PP.205-210

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】

< 研究論文 >

- T. Watanabe
“Numerical simulation of oscillations and rotations of a free liquid droplet using the level set method”
Computers & Fluids, Vol.37, No.2 PP.91-98
- T. Watanabe
“Zero frequency shift of an oscillating-rotating liquid droplet”
Physics Letters A, Vol.372, No.4 PP.482-485
- N. Kushida and Y. Okuda
“Optimization of the parallel finite element method for the earth simulator”
Journal of Computational Science and Technology (Internet), Vol.2, No.1 PP.81-91
- 西田明美
“加振方法と計測方法”
シエル・空間構造の減衰と応答制御, PP.7-15
- M. Ida
“Bubble-bubble interaction; A Potential source of cavitation noise”
Physical Review E, Vol.79, No.1 PP.016307_1- 016307_7
- M. Ida, T. Naoe and M. Futakawa
“On the effect of microbubble injection on cavitation bubble dynamics in liquid mercury”

- Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, Vol.600, No.2 PP.367-375
- T. Yamada et al.
“Proposal of vibration table in an extended world by grid computing technology for assembled structures”
Theoretical and Applied Mechanics Japan, Vol.57 PP.81-87
 - K. Shinohara et al. (M. Ida and N. Nakajima)
“Shape optimization using adjoint variable method for reducing drag in Stokes flow”
International Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol.58, No.2 PP.119-159
<査読付き会議論文>
 - T. Watanabe
“Parallel computations of droplet oscillations”
Proceedings of International Conference on Parallel Computational Fluid Dynamics (ParCFD 2007) (CD-ROM)
 - C. Kino et al.
“Development of cognitive methodology based data analysis system”
High Performance Computing on Vector Systems 2008, PP.89-97

【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>

- M. Machida et al.
“Correlation effects on atom-density profiles of one- and two-dimensional polarized atomic fermi gases loaded on an optical lattice”
Physical Review A, Vol.77, No.5 PP. 053614_1- 053614_8
- M. Machida, M. Okumura and S. Yamada
“Stripe formation in fermionic atoms on a two-dimensional optical lattice inside a box trap; Density-matrix renormalization-group studies for the repulsive Hubbard model with open boundary conditions”
Physical Review A, Vol.77, No.4 PP. 043601_1- 043601_6
- M. Okumura et al.
“Hole localization in the one-dimensional doped anderson-hubbard model”
Physical Review Letters, Vol.101, No.1 PP. 016407_1- 016407_4
- H. Kaburaki et al.
“Dynamical thermal conductivity of argon crystal”
Journal of Applied Physics, Vol.102, No.4 PP. 043514_1- 043514_6
- 山口正剛
“粒界凝集エネルギーの第一原理計算; bcc Fe σ (111)粒界における溶質元素の偏析と脆化及び強化効果”
日本金属学会誌, Vol.72, No.9 PP.657-666
- 海老原 健一他
“純鉄及び共析鋼の昇温脱離分析による水素放出プロファイルのモデリング”

鉄と鋼, Vol. 94, No. 11 PP. 62-71

- Y. Nagai et al. (N. Hayashi)

“Kramer-Pesch approximation for analyzing field-angle-resolved measurements made in unconventional superconductors; A Calculation of the zero-energy density of states”

Physical Review Letters, Vol. 101, No. 9 PP. 097001_1- 097001_4
- K. Suzuki, M. Shiga and M. Tachikawa (M. Shiga)

“Temperature and isotope effects on water cluster ions with path integral molecular dynamics based on the fourth order Trotter expansion”

Journal of Chemical Physics, Vol. 129, No. 144 PP. 144310_1- 144310_8
- T. Takayanagi et al. (M. Shiga)

“Molecular dynamics simulations of small glycine-(H₂O)_n (n=2-7) clusters on semiempirical PM6 potential energy surfaces”

Journal of Molecular Structure (THEOCHEM), Vol. 869, No. 1-3 PP. 29-36
- H. Motegi et al. (M. Shiga)

“Path-integral molecular dynamics simulations of BeO embedded in helium clusters; Formation of the stable HeBeO complex”

Chemical Physics, Vol. 354, No. 1-3 PP. 38- 43
- T. Nishio et al. (N. Hayashi)

“Superconducting Pb island nanostructures studied by scanning tunneling microscopy and spectroscopy”

Physical Review Letters, Vol. 101, No. 16 PP. 167001_1- 167001_4
- Y. Nagai et al. (N. Hayashi, N. Nakai, H. Nakamura, M. Okumura and M. Machida)

“Nuclear magnetic relaxation and superfluid density in Fe-pnictide superconductors; An Anisotropic $\pm s$ -wave scenario”

New Journal of Physics (Internet), Vol. 10, No. 10 PP. 103026_1-103026_17
- A. Ramasubramaniam et al. (M. Itakura)

“Effect of atomic scale plasticity on hydrogen diffusion in iron; Quantum mechanically informed and on-the-fly kinetic Monte Carlo simulations”

Journal of Materials Research, Vol. 23, No. 10 PP. 2757-2773
- M. Kamaya and M. Itakura

“Simulation for intergranular stress corrosion cracking based on a three-dimensional polycrystalline model”

Engineering Fracture Mechanics, Vol. 76, No. 3 PP. 386-401
- T. Ichinomiya et al. (M. Itakura)

“Temperature accelerated dynamics study of migration process of oxygen defects in UO₂”

Journal of Nuclear Materials, Vol. 384, No. 3 PP. 315-321

<査読付き会議論文>
- M. Okumura, S. Yamada and M. Machida

- “DMRG studies for 1-D random Hubbard chain close to the half-filling”
Journal of Physics and Chemistry of Solids, Vol.69, No.12 PP.3324-3326
- S. Yamada et al.
“On-site pairing interaction and quantum coherence in strongly correlated systems”
Journal of Physics and Chemistry of Solids, Vol.69, No.12 PP.3395-3397
 - N. Hayashi et al.
“Josephson effect between conventional and non-centrosymmetric superconductors”
Journal of Physics and Chemistry of Solids, Vol.69, No.12 PP.3225-3227
 - N. Hayashi et al.
“Josephson effect between conventional and Rashba superconductors”
Physica C, Vol.486, No.7-10 PP.844-847
 - S. Yamada, M. Okumura and M. Machida
“Parallel computing of directly-extended density-matrix renormalization group to two-dimensional strongly correlated quantum systems”
Proceedings of IASTED International Conference on Parallel and Distributed Computing and Networks (PDCN 2008), PP.175-180
 - S. Yamada, M. Okumura and M. Machida
“High performance computing for eigenvalue solver in density-matrix renormalization group method; Parallelization of the hamiltonian matrix-vector multiplication”
Proceedings of 8th International Meeting on High Performance Computing for Computational Science (VECPAR '08) (CD-ROM), PP.448-454
 - M. Machida et al.
“Quantum synchronization effects in intrinsic Josephson junctions”
Physica C, Vol.468, No.7-10 PP.689-694
 - S. Yamada et al.
“Vortex core structure in strongly correlated superfluidity”
Physica C, Vol.468, No.15-20 PP.1237-1240
 - M. Itakura et al.
“Multi-scale modeling of crack propagation”
High Performance Computing on Vector Systems 2008, PP.145-152
 - M. Okumura et al.
“Hole localization in strongly correlated and disordered systems; DMRG studies for 1-D and 3-leg ladder random Hubbard models”
Physica C, Vol.468, No.15-20 PP.1241-1244

【シミュレーション技術開発室・生命情報解析】

< 研究論文 >

- A. Matsumoto et al.
“Key interactions in integrin ectodomain responsible for global conformational change detected by elastic network normal-mode analysis”

Biophysical Journal, Vol.95, No.6 PP.2895-2908

- C. Yamasaki et al. (K. Yura)
“The H-Invitational Database (H-InvDB); A Comprehensive annotation resource for human genes and transcripts”
Nucleic Acids Research, Vol.36, Database PP.D793-D799
- A. Srinivasan et al. (A. Matsumoto)
“Properties of the nucleic-acid bases in free and Watson-Crick hydrogen-bonded states; Computational insights into the sequence-dependent features of double-helical DNA”
Biophysical Reviews, Vol.1, No.1 PP.13-20

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】

- N. Nakajima et al.
“Deployment of nuclear science simulations and IT infrastructure”
International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC '08)
- G. Kim et al.
“Hybrid method combining atomic model and continuum”
International Conference on Quantum Simulators and Design 2008 (QSD 2008)
- 中島康平
“原子力グリッド基盤 AEGIS を用いた核融合分野での実験施設・計算機資源の遠隔利用”
第7回核融合エネルギー連合講演会
- 鈴木喜雄
“原子力研究のためのポスト処理; 大規模データ可視化から思考的データ解析へ”
平成20年度名古屋大学太陽地球環境研究所研究集会「ペタスケールコンピューティング検討会」& 「太陽地球/惑星系統合型モデル・シミュレータ構築に向けた研究集会」
- 中島康平他
“シミュレーション結果評価過程支援システムにおけるデータ調査システム”
第27回日本シミュレーション学会大会
- Y. Suzuki et al.
“Cerebral methodology based computing for estimating validity of simulation results”
International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC '08)
- H. Takemiya et al.
“Using heterogeneous multi-core processors for MHD stability analysis”
International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC '08)
- N. Teshima et al.

“AEGIS; Atomic Energy Grid InfraStructure”

International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC '08)

- 木野千晶他
“認識能力を備えたデータ解析システムの概念設計”
日本原子力学会 2009 年春の年会
 - 木野千晶他
“認識能力を備えたデータ解析システム”
情報処理学会
 - 中島康平他
“原子力研究のための大容量データストレージ手法の研究開発”
日本原子力学会 2009 年春の年会
 - 宮村浩子、満倉靖恵
“球面投影による医用画像データの可視化”
電気学会 産業計測制御研究会
- 【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】
- 西田明美他
“GNEP における原子力耐震解析技術への取り組み; WS 報告”
第 17 回 CCSE ワークショップ
 - A. Nishida, M. Kondo
“Towards our French-Japan collaboration”
2nd Meeting of REDIMPS
 - 櫛田慶幸他
“グリッド相互連携機能を用いた線形ソルバーエキスパートシステムの実現”
日本原子力学会 2008 年春の年会
 - 井田真人
“高エネルギー科学におけるキャビテーション問題; その抑制手法と結合振動子モデルを用いた解析”
京都駅前セミナー; 非線形現象の数理を考える
 - 中島憲宏他
“原子力施設規模の振動シミュレーションの実現に向けて”
日本原子力学会 2008 年秋の大会
 - 西田明美
“配管系構造の衝撃応答解析への SEM の適用”
日本原子力学会 2008 年秋の大会
 - 西田明美
“原子力機構における 3 次元仮想振動台の研究開発”
GASST 研究会
 - A. Nishida et al.
“Wave propagation analysis of three-dimensional frame structures”

- International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC '08)
- N. Kushida et al.
“AEGIS-DIET interconnection using message translation”
International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC '08)
 - T. Yamada
“Construction of vibration table in an extended world for safety assessment of nuclear power plants”
9th Teraflop Workshop
【シミュレーション技術開発室・材料シミュレーション】
 - S. Yamada et al.
“Tera-flops quantum simulation for superconducting nano-device; High-performance eigenvalue solver on the earth simulator”
7th Teraflop Workshop
 - S. Yamada et al.
“High performance computing for eigenvalue solver to coupled Josephson junctions on the earth simulator”
3rd Asian-Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM '07) & 11th International Conference on Enhancement and Promotion of Computational Method in Engineering and Science (EPMESC-11)
 - 山田進、奥村雅彦、町田昌彦
“三角格子ハバードモデルに対する 2 次元 DMRG 法の開発”
日本物理学会第 63 回年次大会
 - 山田進、奥村雅彦、町田昌彦
“2 次元ハバードモデルに対する密度行列繰り込み群の並列アルゴリズム”
第 37 回数値解析シンポジウム
 - N. Hayashi
“Josephson effect between conventional and Rashba superconductors”
Workshop on Non-centrosymmetric Superconductors
 - 林伸彦
“渦運動によるホール効果の TDGL シミュレーション及び熱容量の磁場方向依存性測定に対する新しい解析手法”
第 5 回「超伝導ナノサイエンスと応用」研究会
 - M. Machida
“Quantum synchronization and electromagnetic wave emission in intrinsic Josephson junctions”
International Conference on Theoretical Physics (Dubna Nano-2008)
 - M. Machida
“Quantum dynamics, synchronization, and electromagnetic wave emission in intrinsic

- Josephson junctions”
6th International Symposium on Intrinsic Josephson Effect and Plasma Oscillations
in High-Tc Superconductors (Plasma 2008)
- 志賀基之
“ONIOM 法を用いた経路積分分子動力学”
第 2 回分子科学討論会
 - T. Shiga
“*Ab initio* path integral molecular dynamics using ONIOM method”
World Association of Theoretical and Computational Chemists Conference 2008 (WATOC
2008)
 - T. Shiga
“*Ab initio* path integral molecular dynamics simulations; Nuclear quantum effect”
11th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-11)
 - M. Itakura et al.
“Coupled simulation of grain boundary decohesion and hydrogen segregation”
4th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM 2008)
 - N. Hayashi
“New theoretical method for analyzing the field-angle-dependent measurements made
in unconventional superconductors”
Joint ESF-JSPS International Workshop on Nanostructured Superconductors; From
fundamentals to applications
 - 山田進他
“超並列固有値計算手法の開発; 大規模量子計算への応用”
先駆的科学計算に関するフォーラム 2008; 線形計算を中心に
 - 山田進、町田昌彦、奥村雅彦
“周期系モデルに対する新規 DMRG 法の開発”
日本物理学会 2008 年秋季大会
 - M. Okumura, S. Yamada and M. Machida
“Ground states of cold neutral fermions in 2-dimensional optical lattices; Effects
of strong correlation in square and triangular lattices”
21th International Conference on Atomic Physics (ICAP 2008)
 - 奥村雅彦他
“鉄化合物超伝導体のミニマムモデルと DMRG によるその基底状態探索”
日本物理学会 2008 年秋季大会
 - 奥村雅彦他
“密度行列繰り込み群による光学格子中 p バンドフェルミオンの解析”
日本物理学会 2008 年秋季大会
 - H. Nakamura et al.
“Effects of magnetic ordering on phonon spectra in iron-based superconductors; First
principle calculation and theoretical analysis”

American Physical Society 2009 March Meeting

- 太田幸宏他
“2ギャップ固有ジョセフソン接合におけるプラズマモードとジョセフソン渦”
東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究会「超伝導計算機の基礎と応用に関する研究」
- 中村博樹他
“第一原理計算による鉄系超伝導体のフォノン構造の研究”
研究会「鉄ニクタイト物質系における超伝導ペア対称性と超伝導状態」
- M. Okumura et al.
“Magnetism localization and hole localization in fermionic atoms loaded on optical lattice”
American Physical Society 2009 March Meeting
- 中村博樹、山田進、町田昌彦
“二酸化プルトニウムにおける酸素欠損の影響の第一原理計算による評価”
日本物理学会 2008 年秋季大会
- N. Nakai, N. Hayashi and M. Machida
“TDGL simulation for the driven vortex-lattice in an amorphous superconductor”
International Workshop on Nanostructured Superconductors: From fundamentals to applications
- N. Nakai et al.
“2ギャップ系における磁束構造の研究”
研究会「鉄ニクタイト物質系における超伝導ペア対称性と超伝導状態」
- 中井宣之、林伸彦、町田昌彦
“渦糸格子フローのシミュレーション研究”
第 16 回渦糸物理国内会議
- 中井宣之、林伸彦、町田昌彦
“渦糸フロー横電圧の符号反転に対する TDGL シミュレーション”
日本物理学会 2008 年秋季大会
- 中井宣之、林伸彦、町田昌彦
“アモルファス超伝導体の渦糸フロー状態に対する TDGL シミュレーション”
日本物理学会 2008 年秋季大会
- 太田幸宏他
“異なるバンド数をもつ超伝導体間におけるジョセフソン効果”
日本物理学会第 64 回年次大会
- 奥村雅彦他
“トラップ中光学格子上フェルミ原子気体の動的性質の解析”
日本物理学会第 64 回年次大会
- 中井宣之他
“マルチギャップ超伝導体の渦糸ピンングに対する TDGL シミュレーション”
日本物理学会第 64 回年次大会

- 中村博樹他
 “鉄系超伝導体のフォノン分散における磁気秩序の影響の第一原理計算による評価”
 日本物理学会第 64 回年次大会
- 奥村雅彦、山田進、町田昌彦
 “n-leg 光学格子上フェルミ原子気体の密度行列繰り込み群法による解析”
 京都大学基礎物理学研究所研究会「密度行列繰り込み群法を用いた物性研究の新展開」
- M. Okumura et al.
 “Spin and charge dynamics in atomic fermions loaded on optical lattice”
 American Physical Society 2009 March Meeting
- M. Okumura, S. Yamada and M. Machida
 “Parallelized DMRG studies for atomic Fermi gas loaded on optical lattice”
 Supercomputing in Solid State Physics 2009
- 蕪木英雄、津崎兼彰
 “マルテンサイト組織の水素脆化破壊限界”
 日本鉄鋼協会第 155 回春季講演大会
- 蕪木英雄
 “原子スケールの破壊シミュレーション”
 豊田理化学研究所特定課題研究会「ぬれ・接着・破壊の物理」
- M. Yamada and H. Kaburaki
 “First principles calculation on iron grain boundary embrittlement due to impurity segregation”
 IEA Fusion Modeling Meeting
- H. Kaburaki et al.
 “Modeling of the mechanism of delayed fracture initiation”
 NIMS Conference 2008
- 山口正剛他
 “ニッケル中のリン原子の移動メカニズム；第一原理計算による研究”
 九州大学応用力学研究所平成 20 年度共同利用研究集会「材料照射効果基礎過程の解明」
- 海老原健一他
 “水素放出プロファイルにおける水素拡散の影響；数値シミュレーションによる考察”
 日本鉄鋼協会第 156 回秋季講演大会
- 鈴木知明他
 “新クロスオーバー研究 (NX0), 8；高燃焼度燃料細粒化の 3 次元メゾスケールシミュレーション”
 日本原子力学会 2008 年秋の大会
- 山口正剛他
 “粒界凝集エネルギーの第一原理計算；水素の脆化効果”
 日本金属学会 2008 年秋期 (第 143 回) 大会
- T. Suzudo, M. Itakura and H. Kaburaki
 “Modeling study of grain sub-division observed at high burnup nuclear fuel”

4th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM 2008)

- 鈴木知明他
 “長寿命プラント照射損傷管理技術に関する研究開発, 7; ヘリウム-空孔型クラスター成長シミュレーション”
 日本原子力学会 2009 年春の年会
- 山口正剛
 “Al, Cu 粒界の水素トラップによる粒界凝集エネルギー低下: 第一原理計算による研究”
 日本金属学会 2009 年春期大会
- 一宮尚志他 (板倉充洋)
 “UO₂ 金属格子欠陥存在下の酸素原子の動力学シミュレーション”
 日本原子力学会 2008 年秋の大会
- 永井佑紀、林伸彦 (林伸彦)
 “磁場回転比熱の新しい解析手法; 渦コア準粒子の寄与の考慮”
 京都大学基礎物理学研究所研究会「不均一超伝導超流動状態と量子物理」
- 永井佑紀、林伸彦 (林伸彦)
 “磁場回転比熱の新しい解析手法; 渦コア準粒子の寄与の考慮”
 第 16 回渦糸物理国内会議
- Y. Chen 他 (鈴木知明、板倉充洋)
 “新クロスオーバー研究 (NX0), 9; 高燃焼度燃料細粒化・リム組織形成シミュレーション研究の現状と成果”
 日本原子力学会 2008 年秋の大会

【シミュレーション技術開発室・生命情報解析】

- A. Matsumoto
 “Structural analysis of ribosome based on the elastic network normal mode analysis and fitting technique”
 Japan-UK symposium on conformational changes in proteins and nucleic acids which constitute biological macro-molecules
- 松本淳
 “細胞間接着関連タンパク質インテグリンの起き上がり機構の解明”
 大阪大学蛋白質研究所セミナー「蛋白質の構造変化の仕組みを探る」
- 松本淳他
 “エラスティックネットワークモデルの基準振動解析により発見されたインテグリンの活性化のための留め金領域”
 日本生物物理学会第 45 回年会
- 中村建介
 “遷移金属結合サイトデータベースの構築”
 第 8 回日本蛋白質科学会年会
- A. Matsumoto and H. Ishida
 “Structural analysis of ribosome based on the elastic network normal mode analysis and fitting technique”

日本生物物理学会第 46 回年会

- A. Matsumoto and H. Ishida
“Structural analysis of ribosome based on the elastic network normal mode analysis and fitting technique”
6th Asian Biophysics Association (ABA) Symposium/27th Hong Kong Society of Neuroscience Annual Meeting

3. 技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

- 中島憲宏他
“シミュレーション結果評価過程支援システムにおけるデータ調査システム”
第 27 回日本シミュレーション学会大会発表論文集
- T. Watanabe
“Oscillation frequency and deformation of levitated droplets”
Proceedings of 22nd International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (ICTAM 2008) (CD-ROM)
- 井田真人他
“マイクロバブル注入によるキャビテーション抑制の数値的検証”
日本流体力学会年会 2008 拡張要旨集 (CD-ROM)
- 井田真人他
“気泡注入による水銀中キャビテーションの抑制”
日本機械学会第 21 回計算力学講演会論文集 (CD-ROM)
- 中島憲宏
“日本原子力研究所計算科学技術推進センターの研究環境”
計算工学
- 辻田祐一他 (鈴木喜雄、木村英雄)
“ITBL クライアント API を用いた原子力材料シミュレーション実行環境構築”
情報処理学会研究報告 2008-ARC-177, 2008-HPC-114
- N. Nakajima et al.
“A Large scale simulation for impact and blast loading issues”
Proceedings of International Symposium on Structures under Earthquake, Impact, and Blast Loading 2008
- 西田明美
“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”
第 2 回原子力システム研究開発事業成果報告会資料集
- 中島憲宏他
“組立構造解析手法に基づく 3 次元仮想振動台の展開”
第 57 回理論応用力学講演会講演論文集
- O. Hazama et al.
“Integrated framework for simulating behaviors of nuclear power plants under earthquakes”

Proceedings of 9th MpCCI User Forum

- 西田明美
“原子力施設の大規模 3 次元地震応答解析と地震観測記録との比較”
日本建築学会 2008 年度大会学術講演梗概集
- A. Nishida
“Impact analysis of three-dimensional frame structures; An Application for piping structures of a nuclear power plant”
Proceedings of International Symposium on Structures under Earthquake, Impact, and Blast Loading 2008
- 山田知典
“大規模有限要素法解析におけるコースグリッド修正法の収束性について”
日本機械学会第 21 回計算力学講演会論文集 (CD-ROM)
- 蕪木英雄、鈴木知明、板倉充洋
“核融合炉材料のメソスケールシミュレーション”
日本原子力学会誌
- 山口正剛他
“水素脆化の表面エネルギー低下説; 第一原理計算による研究”
日本機械学会第 21 回計算力学講演会論文集 (CD-ROM)
- サイエнтиフィック・システム研究会大規模 SMP 運用 WG (菅谷寿男)
“大規模 SMP 運用 WG 成果報告書”
大規模 SMP 運用 WG 成果報告書(インターネット)

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- 2008 年 9 月 5 日 (読売新聞報道)
“高知工科大で原子力学会開幕”
特別講演「耐震設計とスーパーコンピューティング技術」では、JAEA (日本原子力研究開発機構) システム計算科学センターの中島憲宏次長が登壇。原子力発電施設の振動耐性評価について、一つのモノとして考えると大規模な計算機が必要となるが、部品ごとでは分散計算が可能で、計算効率の向上が期待できるとし、施設を一体的ではなく部品ごとに分けて考えることを提唱した。
- 2008 年 11 月 21 日
“原子力機構システム計算科学センターが国際会議 SC07・SC08 大規模解析技術コンクールにおいて二年連続で優秀賞を受賞”
- 2008 年 11 月 27 日
“耐震安全性の計算機シミュレーション技術のワークショップを開催 (お知らせ) -耐震安全性に向けて計算科学の活用を-”
- 2009 年 1 月 14 日
“鉄系高温超伝導体に関する国際研究集会の開催について (お知らせ)”

5. 研究発表会等の開催

- 第 18 回 CCSE ワークショップ (H20 年 4 月 22 日)
 “Computational technologies supporting development of future applications” (参加者：国外 8 名、機構外 (国内) 15 名、機構内 19 名)
- SC08 会場シンポジウム (H20 年 11 月 18-20 日)
 (発表件数：12 件)
- 第 19 回 CCSE ワークショップ (H20 年 12 月 3 日)
 “原子力耐震計算科学による挑戦” (参加者：機構外 73 名、機構内 28 名)
- 研究会「鉄ニクタイト物質系における超伝導ペア対称性と超伝導状態」(H21 年 1 月 24 日)
 (参加者数：60 名、発表件数：19 件)
- 鉄系高温超伝導体に関する国際研究集会 (IRiSes2009) (H21 年 1 月 25 日)
 (参加者数：81 名、発表件数：21 件)
- マテリアルチーム・CREST 特定課題推進チーム合同セミナー (計 2 回開催)
 H20 年 4 月 8 日：坂井徹 (量子ビーム応用研究部門) 講演
 「密度行列繰り込み群法による三角スピントラップの解析」
 6 月 18 日：Yury Shukrinov (Bogoliubov Theoretical Institute, Russia) 講演
 「Breakpoint Phenomenon and Creation of Longitudinal Plasma Waves in Layered Superconductors」
- CREST 特定課題推進チームセミナー (計 4 回開催)
 H20 年 5 月 24 日：CREST ワークショップ (招待講演者：14 名)
 11 月 14 日：中村和磨 (東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻) 講演
 「Ab initio downfolding 法による低エネルギー有効モデル導出：鉄砒素系超伝導体への応用」
 12 月 26 日：奥西巧一 (新潟大学理学部物理学科) 講演
 「Wilson 型実空間くりこみ群と量子スピン鎖の低エネルギー励起」
 H21 年 1 月 24 日：CREST 研究会「鉄ニクタイト物質系における超伝導ペア対称性と超伝導状態」(講演者：17 人)
- 量子生命情報解析チームセミナー (計 45 回開催)
 H20 年 4 月 2 日：及川雅隆 (量子ビーム応用研究部門特別研究生) 講演
 4 月 9 日：中村建介 (任期付研究員) 講演
 4 月 16 日：川端猛 (奈良先端大学院大学准教授) 招待講演
 4 月 23 日：石田恒 (量子ビーム応用研究部門研究員) 講演
 4 月 30 日：中村龍史 (X-FEL 課題特定課題推進員) 講演
 5 月 7 日：甲斐健師 (X-FEL 課題特定課題推進員) 講演
 5 月 14 日：高潤一郎 (X-FEL 課題特定課題推進員) 講演
 5 月 21 日：河野秀俊 (量子ビーム応用研究部門研究主幹) 講演
 5 月 28 日：松本淳 (シミュレーション技術開発室研究員) 講演
 6 月 4 日：米谷佳晃 (日本学術振興会研究員) 講演、
 郷 信広 (生命科学研究統括・特別研究員) 講演
 6 月 18 日：徳久淳師 (量子ビーム応用研究部門博士研究員) 講演

- 6月25日：及川雅隆（量子ビーム応用研究部門特研究生）講演
 7月2日：川端猛（奈良先端大学院大学准教授）招待講演
 7月9日：Lee Wei Yang（東京大学博士研究員）招待講演
 7月16日：中村建介（シミュレーション技術開発室研究員）講演
 7月23日：石田恒（量子ビーム応用研究部門研究員）講演
 8月28日：楽娜（お茶の水女子大研修生(生体分子グループ受入)）研究成果報告
 9月3日：中村龍史（X-FEL 課題特定課題推進員）講演
 9月10日：甲斐健師（X-FEL 課題特定課題推進員）講演
 9月17日：高潤一郎（X-FEL 課題特定課題推進員）講演
 9月25日：金枝直子（お茶の水女子大大学院生）招待講演
 10月2日：栢沼愛（お茶の水女子大大学院生）招待講演
 10月8日：河野秀俊（量子ビーム応用研究部門研究主幹）講演
 10月15日：Yungok Ihm（理化学研究所博士研究員）招待講演
 10月22日：松本淳（シミュレーション技術開発室研究副主幹）講演
 10月29日：米谷佳晃（量子ビーム応用研究部門任期付研究員）講演
 11月5日：L. W. Yang（東京大学博士研究員）招待講演
 11月12日：徳久淳師（量子ビーム応用研究部門博士研究員）講演
 11月19日：及川雅隆（量子ビーム応用研究部門特研究生）講演
 11月28日：Florence Tama（アリゾナ州立大学准教授）招待講演、
 宮下治（アリゾナ州立大学准教授）招待講演
 12月10日：川端猛（奈良先端大学院大学准教授）招待講演
 12月17日：中村建介（奈良先端大学院大学研究員）招待講演
 H21年 1月7日：石田恒（量子ビーム応用研究部門研究員）講演
 1月14日：甲斐健師（X-FEL 課題特定課題推進員）講演
 1月21日：高潤一郎（X-FEL 課題特定課題推進員）講演
 1月28日：河野秀俊（量子ビーム応用研究部門研究主幹）講演
 2月4日：松本淳（シミュレーション技術開発室研究副主幹）講演
 2月20日：L. W. Yang（東京大学博士研究員）招待講演
 3月11日：米谷佳晃（量子ビーム応用研究部門任期付研究員）講演
 3月18日：徳久淳師（量子ビーム応用研究部門博士研究員）講演
- 他部門との連携
- H20年 6月5日：中性子生命科学研究所ユニット第1回タンパク質研究交流会（原科研）
 9月18日～19日：量子生命フロンティア特定ユニット勉強会（原科研）
- H21年 3月24日～25日：理研のメンバーとXFELに関する交流会（関西研）
 3月26日：原子力機構生命科学シンポジウム2009（新橋・内幸町ホール）
 3月27日：量子生命フロンティア特定ユニット勉強会（上野）

6. 受賞等

- 国際会議 SC08 にて、「2008年度大規模解析コンクール優秀賞(Finalist)」受賞
 Yoshio Suzuki, Akemi Nishida, Tomonori Yamada, Fumimasa Araya, Sachiko Hayashi,

Norihiro Nakajima, and Toshio Hirayama

“Cerebral methodology based computing for estimating validity of simulation results”

SC08 (15-21 November 2008, Austin, USA)

- ・ 全 NEC ユーザ事例論文「入選」
中島康平、鈴木喜雄、手島直哉、杉本振一郎、吉村忍、中島憲宏
「グリッドを意識しないグリッド利用法」
全 NEC C&C システムユーザー会、平成 20 年 11 月
- ・ 日本原子力学会計算科学技術部会 部会 CG 賞受賞
西田明美他
「配管系構造の衝撃応答解析への SEM の適用」
日本原子力学会計算科学技術部会、平成 21 年 1 月
- ・ FUJITSU ファミリー論文 (2008) 奨励論文賞受賞
手島直哉他
「放射線治療遠隔支援のための線量計算システム IMAGINE のグリッド化」
FUJITSU ファミリー会、平成 21 年 1 月
- ・ 日本機械学会 計算力学部門 優秀講演賞受賞
井田真人他
「気泡注入による水銀中キャビテーションの抑制」
日本機械学会 計算力学部門、平成 21 年 2 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 (H21 年 2 月末現在)

件名 (成果の内容)	契約先 (販売者)	権利/契約種別	H20 年度収入額
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	311,850 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	1,137,885 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	38,523 (6)
シミュレーション技術開発室	86,766 (13)

【高度計算機技術開発室】

(1) 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) 6,567 千円

- (2) 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
- (3) 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） 25,220 千円
- (4) 液体金属中キャビテーションに関する理論シミュレーション研究（文部科学省：科研費（若手B）） 1,170 千円
- (5) 高次元ボリュームマップ生成～高次元データの探索ナビゲーションシステム～（文部科学省：科研費（若手B）） 1,016 千円
- (6) マイクロバブルによる陽子線励起圧力波低減メカニズムの解明（日本学術振興会：科研費（基盤B）） 50 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（科学技術振興機構） 57,639 千円
- (8) 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） 239 千円
- (9) 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） 2,087 千円
- (10) 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）） 587 千円
- (11) 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） 21,374 千円
- (12) 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
- (13) 量子多体問題に対する並列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）） 550 千円
- (14) 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）） 1,430 千円
- (15) 超伝導やBEC現象の数理モデルにおける分岐構造と遷都ダイナミクス解明（日本学術振興会：科研費（基盤B）） 130 千円
- (16) 微細加工超伝導検出器アレーによる中性子イメージング（日本学術振興会：科研費（基盤A）） 130 千円
- (17) 量子ゆらぎと熱ゆらぎを考慮した高次系生体分子クラスターの分子論的解明（文部科学省：科研費（特定領域）） 700 千円
- (18) ハイブリッドQM/MM経路積分法による核の量子効果を考慮した溶媒和機構の解明（文部科学省：科研費（若手B）） 700 千円
- (19) 量子多体問題に対する並列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）） 100 千円

9. 産学官との連携に関する事項

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	8	0	1	1
	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	1	0	0	2
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	1	0
	生命情報解析	6	0	1	0
合計		17	0	5	3

●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）
- ・ 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 における研究コミュニティ・システムに関する研究（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）
- ・ 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・建屋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）

【高度計算機技術開発室・専用シミュレータ基盤技術開発】

- ・ 「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（東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究）

【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】

- ・ 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）（長岡技術科学大学工学部生物系）

- ・ 計算科学を用いた生命情報解析研究 (D) (御茶ノ水女子大学大学院人間文化創成科学研究科)

- ・ DNA・RNA とタンパク質の相互作用計算法の研究 (神戸大学大学院自然科学研究科)

●受託研究

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発等】

- ・ 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の実施 (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】

- ・ 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・グリッド技術開発等】

- ・ ITBL 研究開発に関する協力協定 (物質・材料研究機構、防災科学技術研究所、宇宙航空研究開発機構、理化学研究所)

【高度計算機技術開発室・専用シミュレータ基盤技術開発】

- ・ 超高速コンピューティング分野における研究協力の推進に関する東北大学電気通信研究所、東北大学流体科学研究所及び日本原子力研究所の間の協定書 (東北大学電気通信研究所、東北大学流体科学研究所)
- ・ 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 33 件に及ぶ機構内連携を実施した。

(1) 日米 GNEP におけるシミュレーション&モデリング WG PhaseI 活動

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 サイクル技術の実用化を計算科学的側面から支援するため、次世代部門、基礎工学部門とともに、FBR 設計に必要なとなるシミュレーション技術を調査する。

(2) ガラス溶融固化シミュレーション高速化

部署：(東海)核燃料サイクル研究開発部門

概要：ガラス固化プロセスの温度や流量等の運転パラメータの最適化をするために膨大な計算を効率化する。

(3) 損傷頻度評価

- 部署：(東海)安全研究センター
概要：3次元モデルを用いる大規模耐震解析システムを提供し、建屋および機器の地震時応答解析を高精度化。
- (4) 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：解析プログラムや可視化ソフト等の実行環境を整備し、安全評価コードの検証作業を支援。
- (5) 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：キャビテーションを抑制する手法の効果を裏付けるために、数値シミュレーションによる評価を実施。
- (6) 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：エネルギーの保存に関する新規計算手法を提案し、核融合乱流シミュレーションを高精度化。
- (7) 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：大規模耐震解析システムやモデルデータを提供し、HTTRの耐震性評価を支援。
- (8) 液体金属ジェットの特性解明
部署：(大洗)次世代原子力システム研究開発部門、(東海)量子ビーム応用研究部門
概要：液体ジェットによる局所衝撃を定量的に評価するために、液体ジェットの最高速度を計算する解析評価モデルを開発
- (9) 施設の耐震強度評価
部署：(本部)建設部
概要：機構内実験施設の耐震強度解析および評価
- (10) 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：データの妥当性評価及び有用データの自動抽出を行うシステムを提供し、振動実験データの解析を効率化。
- (11) 原子炉内の熱流動解析に関する技術協力
部署：(東海)原子力基礎工学研究部門、(東海)安全研究センター
概要：異なる解析間のデータの授受を実現するシステムを提供し、炉内構造物と炉内核熱・熱流動との解析を連成化。
- (12) 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：複数の計算機を同時に利用可能とする基盤システムを提供し、汚染物質の拡散シミュレーションの実行を高速化。
- (13) 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：並列可視化システムおよび妥当性評価支援システムを提供し、沸騰流シミュレーション

ョンの出力結果解析を効率化。

(14) 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：センターの持つセキュリティに関する知見及びノウハウを提供し、ネットワークシステム設計を支援。

(15) 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：セキュリティを考慮したネットワーク基盤システムを提供し、核融合遠隔実験システムの通信路の安全化。

(16) 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：可視化システムを提供し、連成振動解析プログラムの出力結果の解析を効率化。

(17) 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：日仏交流の一環として、対象とする問題に最適な解法を選択可能とするシステムを構築。

(18) 並列分散技術の IMAGINE システムへの適用

部署：(東海)原子力基礎工学部門

概要：分散して設置された計算機群の同時利用を可能とする基盤システムを提供し、線量計算の実行を効率化。

(19) 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：脆化予測に必要な基礎パラメータを提供するため、第一原理計算にて定量的な計算を実施。

(20) 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：実験家(理論家)の仮説メカニズムを検証するためメゾシミュレーションのモデリングと計算を実施。

(21) 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：実験結果を解釈し、新たな実験を提案するため、メゾシミュレーションを行う。

(22) 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：応力腐食割れのいくつかの仮説メカニズムを検証、選択(脆化元素=酸素 or 水素)するためシミュレーションを行う。

(23) 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：実験結果の再現とその現象機構の解明ため、原子レベルのシミュレーションを行う。

(24) 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：実験及び開発研究を先導（設計支援を含む）するため、高精度シミュレーションを行い、データを提供する。
- (25) 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：シミュレーションコード開発という目的に対し、並列手法開発に関連した技術支援を行う。
- (26) 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、(東海)原子力基礎工学研究部門、(東海)先端基礎研究センター
概要：物性評価のため、高精度並列シミュレーション手法の構築と実験結果の説明及び予測の実施を行う。
- (27) 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：材料強度基礎パラメータの導出し提供するためモデリング及びシミュレーションを行う。
- (28) 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：燃料及び材料照射効果評価に必要な基礎パラメータ導出し提供するためのシミュレーション。
- (29) 分子動力学計算と実験によるMA含有MOXの熱物性と微視的構造の評価
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、(東海)先端基礎研究センター
概要：MA含有MOX燃料の物性評価のため、高精度シミュレーション手法を確立し、実験結果の予測やその解釈を行う
- (30) 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：ウランに結合する能力のあるタンパク質をゲノムデータベースを用いて探索する
- (31) 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
概要：DNA修復機構解明に利用するデータベースを開発するため、機能改良等の作業を共同で実施。
- (32) 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：細菌 *Deinococcus-Thermophilus* のゲノム解読を実施するに当たり、当方のデータベースを基に解析する。
- (33) 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：シミュレーションコード開発を目標として、機能改良等を共同(分担して)で行う。

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) 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
“環境支援型き裂進展のマルチスケールモデル開発と原子力材料における多結晶粒界割れへの応用に関する研究取決め”
(2007年～)

This is a blank page.

