JAEA-Review
2011-006

JAEA-Review

平成21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 FY2009

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

March 2011

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, 2011

JAEA-Review 2011-006

平成 21 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

（2011 年 1 月 12 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 21 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に評価していただいた結果をとりまとめたものである。また、平成 21 年度は第 1 期中期計画期間の最終年度に当たることから、この中期計画期間を総括した実績についても評価されたため、この結果も併せてとりまとめた。

システム計算科学センター：〒110-0015　東京都台東区東上野 6-9-3 住友不動産上野ビル 8 号館

JAEA-Review 2011-006

Review of Research on Simulation Engineering in FY2009

Center for Computational Science & e-Systems

Japan Atomic Energy Agency
Higashiueno, Taito-ku, Tokyo

（Received January 12, 2011）

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 results of the evaluation by the committee on the followings.

(1)Research and development on simulation engineering performed at CCSE/JAEA in FY2009

(2)Research and development on simulation engineering performed at CCSE/JAEA in the period of the midterm plan (October 1st, 2005 – March 31st, 2010)

Keywords: Research Evaluation, Numerical Simulation, Computer Science, Computer Grid Technology, Multi-Scale Modeling, Material Simulation, Structural Simulation, 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 21 年度計画 ････････････････ 4
　２．１　中期計画 ･･ 4
　２．２　平成 21 年度計画 ･･ 4

３．シミュレーション工学研究の実績 ･･････････････････････････････････････ 6

４．原子力計算科学研究評価専門部会による評価 ････････････････････････････ 13
　４．１　平成 21 年度評価 ･･ 13
　４．２　中期計画期間を総括した評価 ････････････････････････････････････ 13

付録１　シミュレーション工学研究・評価報告書－第 1 期中期計画期間の研究評価－ ････ 21
付録２　平成 21 年度シミュレーション工学研究予算及び人員 ････････････････････････ 27
付録３　平成 21 年度シミュレーション工学研究活動実績一覧 ････････････････････････ 28

Contents

１．Purpose and Methodology of the Evaluation ･･････････････････････････････････ 1
　１．１　Purpose ･･ 1
　１．２　Evaluation Methodology ･･ 1

２．R&D Plans for the Simulation Engineering Research of CCSE/JAEA ････････････ 4
　２．１　Midterm Plan ･･ 4
　２．２　Plan for FY2009 ･･ 4

３．The Achievements of R&D in CCSE/JAEA ･････････････････････････････････････ 6

４．Result of the Evaluation and Comments ･･･････････････････････････････････ 13
　４．１　Evaluation and Comments for FY2009 ････････････････････････････････ 13
　４．２　Evaluation and Comments for Midterm Plan ･･････････････････････････ 13

Appendix１　Evaluation and Comments for Simulation Engineering Research of
　　　　　　CCSE/JAEA in the Period of the Midterm Plan ･･････････････････････ 21
Appendix２　Budget and Human Resource ･･･････････････････････････････････････ 27
Appendix３　List of Achievements ･･･ 28

執筆者リスト

システム計算科学センター
大谷　孝之（情報システム利用推進室）
鈴木　喜雄（高度計算機技術開発室）
山口　正剛（シミュレーション技術開発室）
板倉　充洋（シミュレーション技術開発室）

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）に準じて行われた。すなわち、機構の「平成 21 年度の業務運営に関する計画（平成 21 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するよう専門部会に依頼した（図１．２参照）。

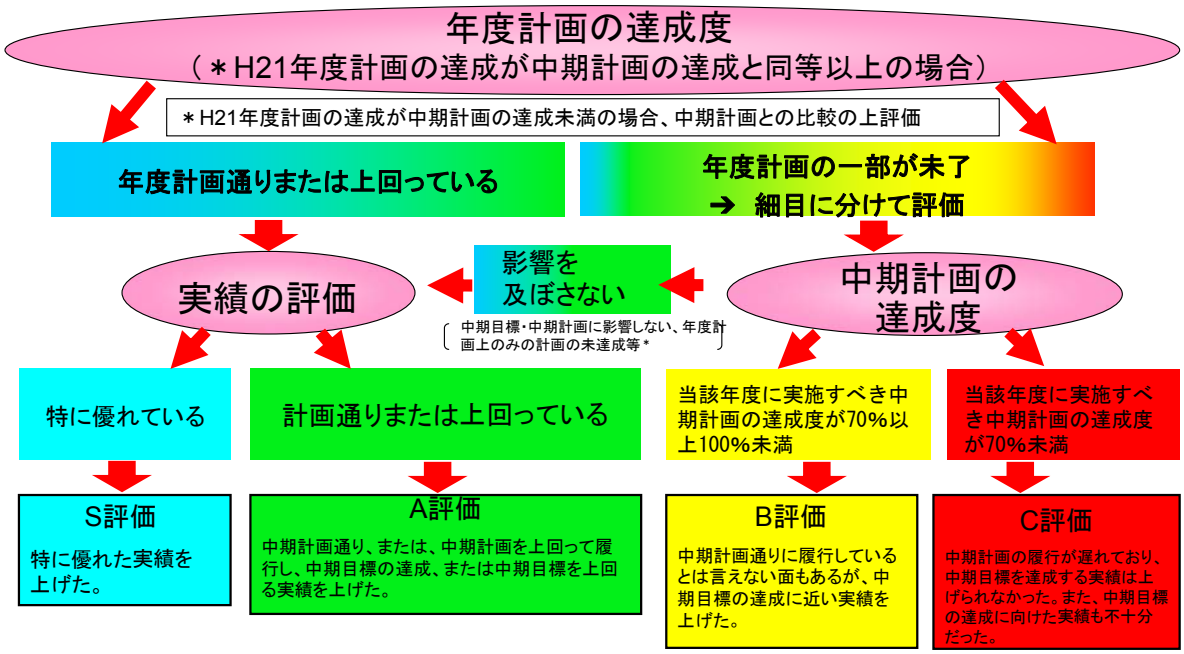

図１．１　機構における評価基準

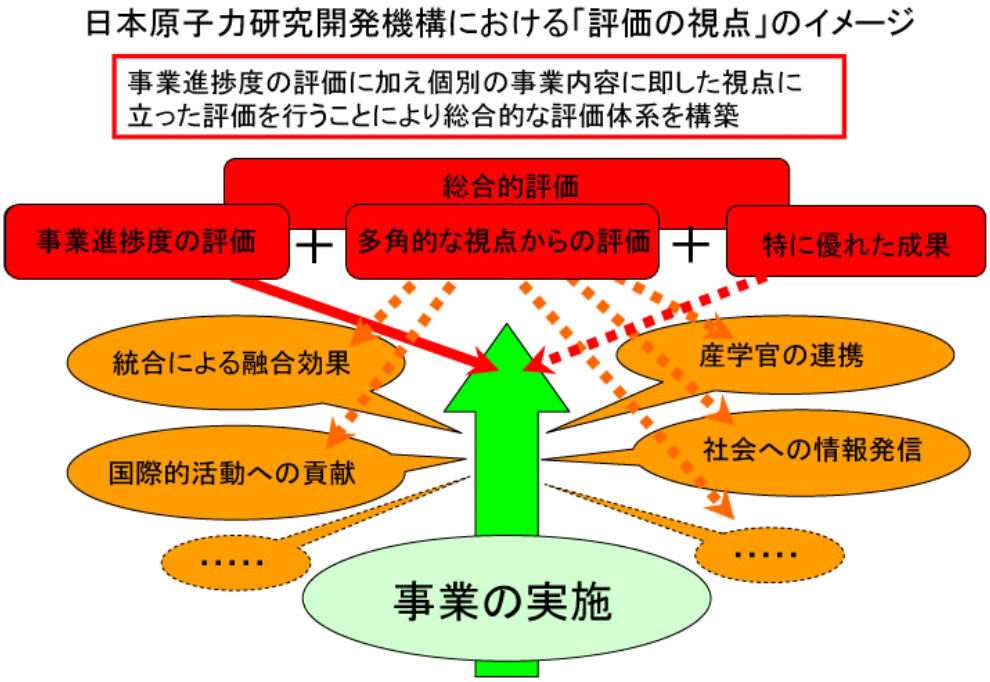

図１．２　機構における「評価の視点」のイメージ

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点が設定された（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		

また、平成 21 年度は、機構の第１期中期計画期間の最終年度に当たることから、この期間の実績を総括した評価も専門部会に依頼した。その評価の考え方及び評価の視点も機構における内部評価の方法（図１．３及び表１．２参照）に準じた。

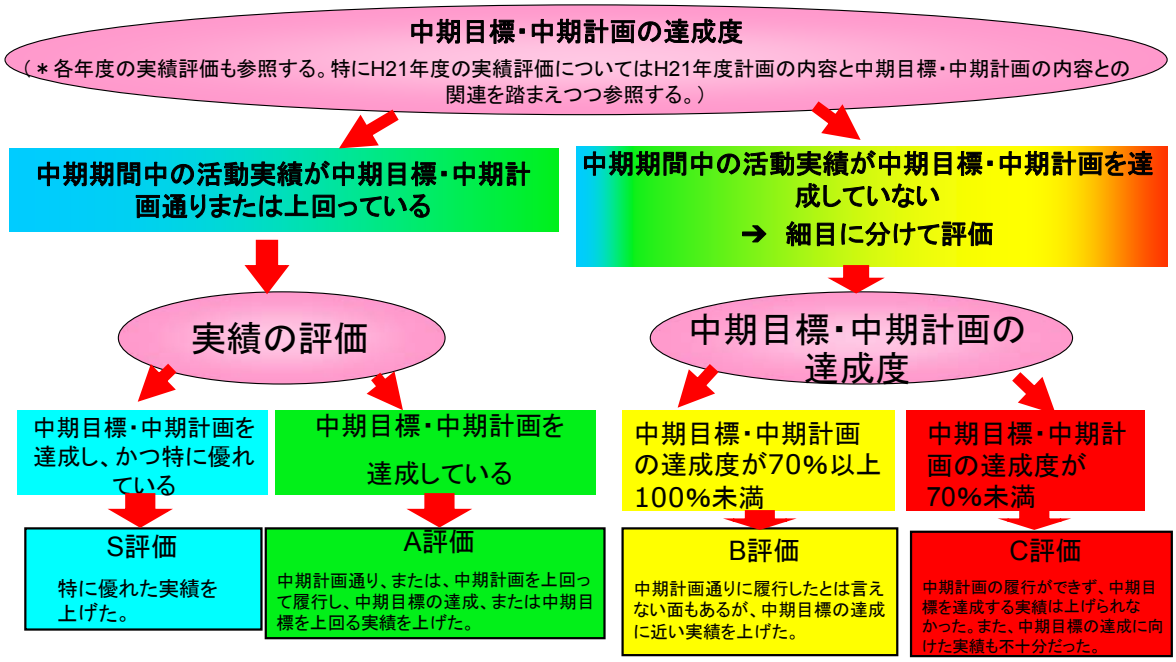

図１．３　機構における評価基準（中期計画期間を総括した評価）

表１．２　シミュレーション工学研究における評価の視点（中期計画期間を総括した評価）

シミュレーション工学研究	事業進捗度	○中期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、中期目標を達成したか。	中期計画を満足していれば、評価はA以上。
	着目点	★国民やステークホルダーへの還元・貢献に繋がる成果が得られているか。	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】
	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 21 年度計画

２．１　中期計画

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

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

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

２．２　平成 21 年度計画

中期計画を実現するための平成 21 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 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。
>
> 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ミクロな計算、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てマルチ・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。
>
> 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。
>
> 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。
>
> 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。
>
> 種類･エネルギーの異なる重イオンの飛跡構造と DNA 損傷スペクトルの関係に関する詳細解析を行う。クラスター損傷を構成する損傷の配置、個数の組合せを変えて、修復酵素との結合機構の変化を明らかにする。

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、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。

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。

なお、平成 21 年度計画のうち「種類・エネルギーの異なる重イオンの飛跡構造と DNA 損傷スペクトルの関係に関する詳細解析を行う。クラスター損傷を構成する損傷の配置、個数の組合せを変えて、修復酵素との結合機構の変化を明らかにする。」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 21 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 21 年度計画の達成度を基本とし、これに多角的視点及び特に優れた成果の観点を加えた評価を専門部会に依頼した。

３．シミュレーション工学研究の実績

中期計画及び平成 21 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、成果の意義等（システム計算科学センターによる自己評価）も記載した。

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２及び付録３にそれぞれの一覧を掲載する。

さらに、第１期中期計画期間を総括した実績及びシステム計算科学センターによる自己評価を表３．２にまとめた。

表３．１　平成 21 年度研究開発実績及び成果の意義等

	中期計画	H21年度計画	H21実績報告	成果の意義	多角的視点【注】、特に優れた成果等
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。 *(注)HTTR:　JAEAの高温工学試験研究炉(高温ガス炉)。*	○グリッド技術を仮想振動台コードに適用することにより、複数の計算機上の仮想振動台コードの実行を自動制御し、指定時刻ステップまで自動的に計算処理を行えるグリッド対応耐震性評価用仮想振動台を構築した。 ○構築した仮想振動台を用いて、圧力容器、建屋を含む一次・二次冷却系およびそれらを繋ぐ配管系から構成されるHTTR全体（1.5億自由度規模）を対象とした構造解析を実施し、10日間に及ぶ自動実行を実現して、HTTRの全体解析に成功した。 ○構築した耐震性評価用仮想振動台を用いてHTTRの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し、実測データとの比較を行った結果、仮想振動台の計算結果が、耐震性評価に必要な卓越周波数等について再現性を持つことを確認した。	○計算規模が大きく、かつ、計算時間が長いために、計算機1台、計算処理1回では終了しない大規模・長時間シミュレーションに対して、利用者が複数の計算機を長時間監視しなくとも自動的に計算処理が完了される環境を整えた。 ○原子力施設全体規模を対象とした耐震性評価に必要な大規模構造解析を実行可能とする環境を整えた。 ○実測データの再現性を確認し、モデリングおよびシミュレーションの妥当性を確認した。 ○高温工学試験研究炉部がHTGRの設計やHTTRのバックチェックにおける参照データとして活用できるようなシミュレーション結果を提供した。	○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、全NEC C&Cシステムユーザー会論文賞、FUJITSUファミリ会奨励論文賞を受賞した。また、構造と流体の連成計算を用いた流体励起振動に関する論文がAIAAの最優秀論文賞を獲得した。（その他、日本原子力学会計算科学技術部会奨励賞、次年度FUJITSUファミリ会論文賞の受賞も内定） ○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上でマトリクスソルバー予測システムが動作する環境を整えた。 ○敦賀本部からの要請に基づき、機構内施設もんじゅの耐震安全性評価に対し技術協力を実施した。 ○外部資金「原子力プラント全容解析のための接合部連成モデリングの研究開発」（3000万円／3年）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。 ○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」（250百万円／5年）において、東京大学、東京電力等と共同研究を実施し、産学連携の基盤を確立できた。 ○那珂核融合部門のとの共同研究の一環として、開発したグリッド技術を核融合統合シミュレーションコードに適用し、既存コードを変更することなく複数の計算機上で連携実行することに成功し、原子力分野の大規模シミュレーションコードに対する開発技術の高い適用可能性を示した。 ○仮想振動台構築の一環として開発を進めていたグリッド技術に関し、電気新聞1面に「原子力機構　研究資源を統合活用　国際連携で基盤整備」という記事が掲載された。 ○グリッド技術を活用して原子力計算科学の研究コミュニテイ活性化に努め、文部科学省「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム」実施可能性調査実施機関に、東大生研とJAXAと共に選定された。
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、ミクロからマクロに至る計算手法を統合したマルチスケーリングモデル手法を構築する。	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ミクロな計算、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てマルチ・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。	○様々な脆化元素効果をミクロな量子計算で定量評価するとともに、重要な脆化元素については量子計算を基に開発した分子動力学ポテンシャルを使用しメゾスケールの結晶粒界偏析・き裂進展を行い実験と直接比較可能な破壊強度の計算に成功した。 ○さらにこの結果をマクロな有限要素計算に取り込むことで応力の発散を回避し従来の1000倍のサイズの計算が可能となった。 ○実験と比較した結果、差異は1桁以内であった。空間スケールが5桁異なっていることを考慮すると十分な精度と言える	○これまで漠然と強化元素、脆化元素と分類されていた不純物元素の影響を量子計算で定量的に同定したことにより、原子力材料の安全性評価において、注力すべき元素の選び出しが科学的知見に基づき可能となった。これは、人的、金銭的なコスト削減につながる成果でもある。 ○上記ミクロレベルの定量的評価を反映させたマルチスケールコードの開発により、実験と直接比較できる破壊強度を計算できたことは、極めて難しいき裂進展モデリングの妥当性を直接確認できることを意味している。また、開発したマルチスケールコードが取り扱い可能とするモデルの計算可能なサイズは、現実の結晶粒界と同程度の大きさにまで到達し、これにより、初めて実用的な有限要素計算が可能となった。	○ミクロ、メゾ、マクロそれぞれのスケールで得られた鉄の粒界と脆化元素の相互作用に関する知見はいずれも空間スケール、時間スケールなどの問題から実験で直接観察することができない一方、それらはき裂進展機構解明に対して鍵となる重要なものであり、シミュレーションにより初めて、それらの知見を得ることができた。 ○実験研究において、従来用いられてきた適当な仮定に対し、科学的根拠を与えた。その具体的成果としては、今回得られた知見を共同研究を行っている物材機構、鉄鋼メーカーなどに提供することで、実験側は仮説を取捨選択し、適切な実験を計画するに至っている。
		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。	○開発済みのバブルモデルと亜粒界モデルの統合を完了し、バブルと転位の自己組織化によって形成された亜粒界との相互作用の解析が可能になった。 ○実験で観測される細粒化発生を定量的に再現する転位シミュレーションに成功し、細粒化シナリオを検証できた。	○バブル・亜粒界モデルにより、現実的な高燃焼度燃料のメゾスケールシミュレーションが可能となった。具体には、バブルが成長して亜粒界の移動を阻害するシミュレーション結果が得られ、FPガスのバブルにより、細粒化状態の粒が成長せずより安定に存在できることが示された。 ○上記転位シミュレーションの結果は、実験的に予測されている細粒化のメカニズム（転位の組織化による亜粒界形成）を裏付けるものとなった。	○粒界移動のメゾスケールシミュレーションはポッツモデルやフェーズフィールド法など以前から存在していたが、バブル成長・移動と同時に扱える方法はなかった。今回、ポッツモデルと同じ枠組みで実行できるバブルモデルを開発したことは、高燃焼度燃料だけでなく様々な希ガス原子を含んだ材料の微細構造発達シミュレーションに貢献できると考える。 ○転位シミュレーションでは転位の移動が困難なUO2等の蛍石構造でも細粒化につながる転位組織形成が起きることを初めて示すことができた。

表３．１　平成 21 年度研究開発実績及び成果の意義等（つづき）

	中期計画	H21年度計画	H21実績報告	成果の意義	多角的視点・特に優れた成果等
2	原子炉材料のき裂進展、核燃料の細粒化現象の機構解明や、原子力分野におけるナノデバイスの開発に貢献するため、ミクロからマクロに至る計算手法を統合したマルチスケーリングモデル手法を構築する。	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。	○超伝導理論の枠内で、どのようなメカニズムにより、超伝導放射線応答が体系化できるかを明らかにした。具体には、シミュレーションに用いた現象論的方程式を検出デバイス材料に当るMgB2等の物質の電子状態から導出できることを確かめた。 ○上記の導出により、その超高速な応答特性の電子状態での起源を明らかにした他、高速性能の原理的な限界も明らかにした。	○放射線検出デバイスとして、超伝導を用いると精度が桁違いに向上することを現象論的方程式（複数の実験パラメータを含む理論的に自己無撞着な式）の大規模シミュレーションにより予言し、実験による実証を既に得ていたが、微視的な超伝導材料の電子状態との関係が不明瞭であった。これに対し、H21年度は、その高速応答特性を物質の電子状態を基に理解できることを理論的に明らかにした。 ○この研究成果により、様々な超伝導物質に対し、第一原理計算の結果から応答特性を原理的に予測可能とするなど、理論的体系化を大きく進展させた。	○中性子検出器開発を進めた超伝導体MgB2は複数の超伝導波動関数を有する等の特徴を持ち、微視的な電子状態に対する理論的取り扱いが一般に困難であるとされてきたが、その困難さを経路積分法を用いることで理論の見通しを良くし、現象論的方程式を導出することに成功した。 ○上記の成果は、放射線応答のメカニズムを微視的状態と関連づけただけでなく、最近、発見された鉄系超伝導体（MgB2と同様に複数の超伝導波動関数を有する）にも適用可能であるため、実際に導出した現象論的方程式を用いて、臨界電流密度の向上に必要な条件等を提案するなど、副次的成果も得られ、量子ビーム部門と協力して獲得したTRIP(JST)プロジェクトの成果創出にも貢献した。
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）。	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。	○H20年度までに開発したシミュレーション技術を用いて、DNA損傷修復過程についてシミュレーションを継続して実行した。具体には、ゲノム情報解析用データベースから抽出したDNA修復関連タンパク質MutSとDNAとの複合体に対して、シミュレーションを実行した。 ○得られたシミュレーション結果をH20年度までに開発した可視化手法を用いて解析することにより、DNA修復タンパク質による損傷DNA認識過程のモデルを立てることができた。	○DNA修復タンパク質MutSと損傷DNAとの複合体の静的立体構造は、実験（X線結晶構造解析法）により明らかとなっていたが、その構造情報だけでは、MutSがどのようにDNA損傷を認識するかを推測することは困難であった。これに対し、シミュレーションによる複合体の動的立体構造解析、さらに、実験では立体構造がわかっていないMutSと正常DNAの複合体に対するシミュレーションによる動的立体構造解析により、正常および損傷DNAに対するMutSの反応の違いを明らかにすることができた。 ○上記研究成果を基に、DNA修復関連タンパク質MutSによるDNA損傷認識がどのように行われるかのモデルを初めて立案することに成功した。	○本研究では、約20万原子系もの大規模シミュレーションながら0．5マイクロ秒という世界でも例がない大規模長時間シミュレーションを実行した。これによりMutSとDNAの結合のしやすさに関する実験データとよく一致するシミュレーション計算結果を得ることができた。 ○本研究に得た知見と経験により、将来実施する新たな系においても、どれだけの長時間シミュレーションが必要となるのか前もって見積もることができるようになり、計画的な研究実施が可能となった。 ○また、DNA認識機構は、損傷修復タンパク質だけでなく、多くのタンパク質が持っており、我々が提示する損傷DNA認識過程のモデルは、ほかのタンパク質によるDNA認識機構の解明にも貢献しうる。
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、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。	○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シ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した。 ○演算回路の動作手順に忠実な３次元格子ガス法FCHCモデルのプログラムをPC上に作成し、１６並列で格子点計算を実行することにより、回路の動作手順の妥当性をシミュレーションで模擬確認した。 ○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。 （以上、H20年度にほぼ前倒しで実施済）	○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。	○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・産業界との連携を通じて得られたものである。 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～平成22年3月）」 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～平成21年3月）」 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デバイス・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～平成22年3月）」
		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。	○次期茨城地区スーパーコンピュータの調達手続きを完遂し、平成22年3月1日に運用を開始する。 ○下記を基本理念とするネットワーク最適化計画を策定し、これに基づき、老朽機器の一部更新、ウィルス対策ソフトの統一等を実施した。 ・信頼性の確保 ・情報セキュリティ対策の強化 ・利便性の向上	○現行の約14倍となる200TFLOPS強の性能を有するシステムを導入し、機構の計算ニーズに効率的に対応した。これにより、機構の研究開発の推進に大きく貢献すると期待される。 ○ネットワーク障害リスクの低減、ユーザサイドにおける情報セキュリティの強化により、機構業務のライフラインとして相応しいITインフラの確立が期待される。	

表３．２　中期計画期間を総括した自己評価

中期計画	具体的な研究課題と達成目標	自己評価	
		評価	達成内容と評価理由
Ⅰ．国民に対して提供するサービスその他の業務の質の向上に関する目標を達成するためとるべき措置			
5. 原子力の研究、開発及び利用に係る共通的科学技術基盤の高度化			
(1)原子力基礎工学			
8) シミュレーション工学研究	8)シミュレーション工学研究		
グリッド技術による並列分散計算技術を開発し、原子力施設の耐震性評価用仮想振動台を構築する。	原子力施設耐震性評価用仮想振動台技術の開発 ・大規模かつ複雑な施設のモデル化技術の確立 ・グリッド環境上でのHTTR全体の耐震性解析（地震応答解析）の実現 ・解析結果と計測データの比較による妥当性の検証		【達成内容】 ・巨大施設を部品単位で集積し解析できる組立構造物解析手法を確立するともに、膨大な部品間をまたがる振動伝播モデルを考案した。 ・ITBL計画で築いたグリッド技術の高度化と上記モデル化技術の活用により、グリッド環境上に耐震性評価用仮想振動台を構築し、HTTR全体の耐震性解析（1億自由度規模弾性解析による地震応答解析）に成功した。 ・計測データのある一次冷却系機器を対象に解析結果と比較し、妥当性を確認した。 ・国の次世代スパコン計画「グリッドミドル利活用技術の研究開発」及び「戦略プログラム」に採用された他、原子力安全委員会「原子力の重点安全研究計画」、日米首脳会談「日米クリーン・エネルギー技術協力に関する合意」においても実施すべき事項として採用されるなど国の施策に貢献している。 ・開発したグリッド技術は、仮想振動台に必要な「複数の計算機上のコード実行の自動制御」及び「テラバイト級の大規模データ解析」等を実現した他、ITER遠隔実験に向けた基盤技術としても活用された。 ・開発した耐震性解析技術は、次世代高速増殖炉の蒸気発生器管板部に関する設計指針の提供、従来困難であった二重管の振動解析、HTGR設計やHTTRのバックチェックにおける参照データとして活用できるデータの提供により、FBR実用化研究及び高温ガス炉研究に貢献している。 ・計算科学分野で世界最大級の国際会議SCにおける受賞3件（2005年、2007年、2008年）を含め、国内外で13件の賞を受賞した。
原子炉材料のき裂進展、核燃料の細粒化現象の機構解明や、原子力分野におけるナノデバイスの開発に貢献するため、ミクロからマクロに至る計算手法を統合したマルチスケーリングモデル手法を構築する。	原子力研究のためのマルチスケーリングモデル手法の開発 〇原子炉材料のき裂進展シミュレーション手法開発 ・マルチスケール計算手法の開発 〇核燃料細粒化現象シミュレーション手法開発 ・マルチスケール計算手法の開発 〇新型中性子検出装置開発のためのシミュレーション手法開発 ・マルチスケール計算手法の開発		・原子炉材料き裂進展の機構解明に対し、第一原理計算から得られたデータをマクロなシミュレーションに反映する手法を開発し、従来、困難とされた破壊強度の実験との比較検討を初めて可能とした。また、従来の1000倍のサイズ（有限要素法によるき裂シミュレーションとの比較において）の計算を実現可能とした。 ・さらに、特にミクロスケールシミュレ-ションにおいて、粒界での不純物による脆化及び強化効果について定量的データを世界で初めて導出し、安全研究に対して科学的基盤に立脚したデータを提供することで国の安全基準策定に貢献した。 ・核燃料細粒化のマルチスケール・シミュレーション手法を開発し、メゾレベルのシミュレーションによる粒界バブル形成、および転位理論による亜結晶粒形成を再現することに初めて成功した。 ・原子力デバイス開発では、膨大な年月と労力が必要とされる新型材料によるデバイスの革新に対し、超伝導中性子検出器のマルチスケールシミュレーション手法を開発し、高精度予測によって実験条件の大幅な絞り込みを実現し、開発期間を大幅に短縮させ、世界一高速な中性子検出器の開発を成功に導いた。開発された中性子検出器は、従来法に比べ3桁以上も高速で動作するなど画期的な精度を誇る。 ・計算科学分野で世界最大級の国際会議SCにおけるゴードンベル賞のファイナリスト2年連続受賞（2005年、2006年）を含め、国内外で3件の賞を受賞した。
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	ゲノム情報解析用データベースを活用したDNA損傷修復シミュレーション研究 ・ゲノム情報解析用データベースの構築 ・大規模分子シミュレーションの高速化 ・DNA修復タンパク質によるDNA損傷認識過程シミュレーションの実現		・DNA修復関連タンパク質の遺伝情報、立体構造情報及び放射線種線量情報を収録するデータベースを構築し、様々な放射線に応答するDNAタンパク質を検索可能にした。 ・DNA修復シミュレーションの大規模化、高速化を行い、10万原子超の体系で100ナノ秒以上のシミュレーションを実施した（2008年度）。従来この規模のシミュレーション（巨大分子に対する長時間のシミュレーションという観点において）を実施した例はない。 ・開発した上記技術を連携することにより、ゲノム情報解析用データベースより複数の修復タンパク質及び関連タンパク質を抽出し、その情報を基に分子シミュレーションを行い、修復タンパク質のDNA損傷部位の認識過程を原子・分子のダイナミクスとして捉えることに成功した。 ・名古屋大学との連携により、DNA補修酵素の要となるアミノ酸を世界で初めて発見した（2008年3月発表）。これは「DNA補修にアミノ酸は関与しない」という従来の定説に大きな修正を加える成果であった。
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。	超高速コンピューティングニーズに対応する技術の研究 〇計算資源の効率的利用技術 ・現中期計画期間のニーズに対応する計算資源の整備 ・セキュアかつ高速なネットワークコンピューティング技術開発 〇将来のニーズに対応し得る専用シミュレータ基盤技術の開発 ・次世代ハードウェアによる専用シミュレータ設計・性能評価		・機構外連携や国際協力の下、総計50TFlopsのグリッド計算機環境を整備（2005年度）するとともに、機構スパコンとして214TFlopsの計算資源を整備（2009年度）した。 ・セキュアかつ高速なネットワークコンピューティングについてはセキュリティ機能の二重化及び通信速度の従来比4倍を実現（2006年度）し、核融合実験装置の国際遠隔実験等に活用された。 ・上記に加え、計算機・ネットワークの最適化により約3億円／年の運用経費を削減し、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計算機システム・ネットワークシステムを構築した。 ・将来のコンピューティングニーズに対応し得る専用シミュレータ基盤技術開発としては、FPGA技術による核融合プラズマ安定解析シミュレータの基本電子回路設計・試作及びスピン演算回路による流体解析専用シミュレータの演算速度と消費電力の予測評価を行い、実験解析における有用性を確認した。
シミュレーション工学研究の評価		S	【評価理由】 ・中期計画を全て達成した。 ・耐震性評価用仮想振動台技術は、従来の解析規模の限界を打破し原子力施設全体の弾性解析を実現したことで、健全性解析に関する国策に貢献している他、ITER計画、FBR実用化研究、高温ガス炉研究にも貢献している。 ・マルチスケーモデリング手法開発では、き裂進展機構解明に対し、第一原理計算から得られたデータをマクロなシミュレーションに反映する手法を開発したことで、従来、困難とされた破壊強度の実験との比較検討を初めて可能とした。細粒化機構解明では、実際に一つの細粒化シナリオに対し、シミュレーションによる検証を実現した。原子力デバイス開発では、従来よりも高精度な解析が可能となり、世界一（従来より3桁）高速な中性子検出器開発をシミュレーションにより先導した。 ・き進展機構解明では、粒界での不純物による脆化及び強化効果について定量的データを世界で初めて導出し、国の安全基準策定に貢献した。 ・原子力デバイス開発では、膨大な年月と労力が必要とされる新型材料によるデバイスの革新に対し、開発期間を大幅に短縮させた（僅か数年にてデバイスの系統的評価まで実施）。 ・DNA修復シミュレーションでは、従来にない大規模なDNA修復シミュレーションを実現するとともに、DNA補修酵素の要となるアミノ酸を世界で初めて発見し、「DNA補修にアミノ酸は関与しない」という従来の定説に大きな修正を加える成果を挙げた。 ・計算科学分野で世界最大級の国際会議SCにおける5回の受賞を含め、国内外で16件の賞を受賞している。

４．原子力計算科学研究評価専門部会による評価

平成 22 年 2 月 10 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追加し、専門部会に総合的な評価を実施していただいた。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（敬称略）

部会長	竹田　敏一	福井大学付属国際原子力工学研究所 所長
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 22 年 2 月 10 日 13:30～17:00	日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター（台東区上野）	・H21 年度の評価方法について ・システム計算科学センターの H21 年度研究開発実績について ・中期計画期間の評価について	小 柳 委員、加古委員は欠席

（注）小柳委員、加古委員については、2 月 10 日の専門部会欠席のため、平成 22 年 2 月 15 日に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。

４．１　平成 21 年度評価

専門部会の各委員からの平成 21 年度実績に対する評価コメントを表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。

４．２　中期計画期間を総括した評価

第 1 期中期計画期間を総括した評価については、評価報告書としてまとめていただいたので、これを付録 1 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
【年度計画】 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。	・ 計画通り成果は充分出しているので、進捗度は 100%以上である。 ・ 年度計画を達成した。大規模・長時間シミュレーションの計算機環境を構築して、１億 4700 万自由度の HTTR 全体規模の解析を実現した。 ・ 計画以上の成果が出ているものと考えます。 ・ 計画通り進捗している。耐震性評価を 4 機関を結ぶグリッド基盤で行う構想は評価できる。ジョブの自動継続、故障回避、条件分岐などを含むワークフロー制御を実現した。また、日仏の国際協力も行った。 ・ グリッド接続環境を構築し、グリッド技術を仮想振動台に適用できることを確認している。具体的には、仮想振動台の耐震評価研究において、外部地震動の入力データの下での地盤－建屋－機器－熱核反応とつながる地震動伝播の連成計算を可能にした。さらに、HTTR に特有の配管構造を考慮した振動解析や、第４紀地層立地の安全性評価に適用可能なデータの提供を可能にしている。また、米国 LLNL との連携でより高度な連成解析を目指す研究を開始している。	・ 産学官、機構内での連携もよく取れている。 ・ 国家プロジェクト「次世代スパコン戦略プログラム」への FS を開始しており、評価できる。 ・ グリッド技術を現在建設中の次世代スーパーコンピュータの高並列計算技術に活用できないか？グリッド計算技術の分散並列メモリ稼動技術の基本が次世代スーパーコンピュータのプログラムコードの並列化技術に生かすことが出来ないか？今後の研究課題に取り入れてほしい。 ・ 大規模シミュレーションが第３者によっても評価され、機構内外ならびに国内外との共同研究を展開した。 ・ 産学官という観点からは産の関与は比較的少ないようですが、学・官または国際的な連携という意味では優れた活動をされていると考えます。 ・ 国内および海外とのグリッド構築は、他機関連携としても評価できる。 ・ HTTR のシミュレーションを行い、高温工学試験研究炉との共同研究を行ったことは機構内連携として評価できる。 ・ 各種の論文賞や奨励賞を獲得するとともに、日仏協力の外部資金獲得や、電力中研、東京大学、東京電力などとの共同研究を実施するとともに、機構内部でも、那珂研の核融合シミュレーションコードへのグリッド技術の適用などを行っている。さらに、国民的関心事である次世代スパコンの実施可能性調査実施機関に選ばれている。	・ HTTR の解析を出し、原子力プラントの安全性に果たした役割を高く評価する。 ・ グリッド技術を用いた HTTR 全体規模解析等、グリッド基盤の構築、仮想振動台コードの並列分散化等優れた成果を残していると考えます。 ・ もんじゅの耐震安全性評価において、地盤との連成解析を行った。また、原子力施設の全体解析技術が評価され、原子力学会から賞を受けた。 ・ 耐震シミュレーションの実績評価に基づき、国民的関心事である次世代スパコンの実施可能性調査実施機関に選ばれている。構造と流体の連成計算による流体励起振動に関する論文が AIAA の国際会議で最優秀論文賞を獲得している。	
【年度計画】 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ミクロな計算、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	・ 応力腐食割れのマルチスケールコード開発が完了しており、進捗度は 100%以上である。 ・ 年度計画を達成した。量子計算と分子動力学計算から有限要素計算までのスケールでのシミュレーションを実現した。 ・ 予定通り進捗していると考えます。き裂進展の	・ 鉄の応力腐食割れに対する結果を金属学会、機械学会で発表しており、他分野への発展をしている点を高く評価する。 ・ (1)本マルチスケールモデリングの適用限界を明らかにすること。(2)「1000 倍のサイズの計算を可能にした」とあるが、この数値の意味するところを説	・ 応力腐食割れのマルチスケール手法を確立した点、さらにその応用を高く評価する。 ・ 本件の如く、異なるスケールを繋ぐマルチ・スケール・シミュレーション手法は現実的かつ信頼性が高い	・ 今後はマクロからミクロへの境界条件などを通したフィードバックや、材料設計へつながるパラメータサーベ

合わせてマルチ・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。 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。 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。	マルチスケールシミュレーションの結果がいかに現実の現象と合っているかを明確に示していただけるとさらに高い評価が得られると思います。 ・ 亀裂進展や細流化機構について、量子計算、分子動力学、有限要素法と、ミクロからマクロまでの手法を統合したモデリングを実現した。水素等の脆化機構を実験に近いところまで解明した。 ・ 量子計算から始まり、分子動力学、脆性効果を取り入れたマクロな有限要素構造計算までのマルチスケールの計算を実行し、脆化元素ごとの亀裂進展の速度を求め、実験とも比較して計算の妥当性を検証している。また、転位ネットワークの形成による細粒化の発生の再現をマルチスケールシミュレーションで実現し、細粒化のシナリオを裏付ける結果を得ている。さらに、鉄系の高温超伝導体の中性子衝突による超伝導破壊現象のシミュレーションを実施し、その応用として高感度の中性子検出器の可能性を見出している。	明してほしい。(3)本阻止化モデルの応用と一般性についての検討を望む。サイズの異なる粒界のシミュレーションは本件が対象としている結晶粒のみならず、溶岩や硫石などの自然災害現象などにも類似なものが多い。 ・ き裂進展機構、細粒化の機構ならびに超電導体放射線応答のマルチスケール・シミュレーションが、実験の効率化に貢献する可能性を示した。事実、機構内外にシミュレーション結果をデータとして提供した。 ・ 学官連携に関しては説明をいただいたが、産との連携に関しては十分な情報が得られなかった。 ・ 今回得られた知見を、物材機構や鉄鋼メーカーとの共同研究に生かしたことは、機構外との連携として評価できる。また鉄鋼中の He バブルのメソスケールモデリングを ORNL と連携したことは国際的な連携として評価できる。 ・ 実験では直接観測が困難な、鉄の脆化のミクロ、メゾ、マクロを通したメカニズムの解明につながる重要な知見を得ており、実験サイドが仮説を選択する際の貴重なデータを提供している。これにより、共同研究者である物質材料研究機構や鉄鋼メーカーに有用な知見が得られている。	有用な方法である。具体的な成功例として優れている。 ・ き裂進展解析のためのマルチスケールシミュレーション手法の開発は、大変興味深い優れた成果と考えます。 ・ 転位組織形成のメカニズムを、種々の物質に適用できることを見出したことは大きな成果である。 ・ MgB2 の超伝導を利用した中性子検出装置は、大変画期的であり、実用化が望まれる。 ・ 脆化現象のミクロからマクロにいたるマルチスケールのシミュレーションを実現したことの意義はきわめて大きいと評価できる。	イの研究の展開が期待される。
【年度計画】 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。	・ 動的構造シミュレーションを実施し、新たな学問的知見が得られており、進捗度は 100%以上である。 ・ 年度計画を達成した。ゲノム情報解析用データベースから抽出した立体構造未知の DNA 修復タンパク質 MutS と正常 DNA との複合体と、立体構造既知の MutS と損傷 DNA の複合体の双方について動的振る舞いのシミュレーションに成功し、MutS が DNA 損傷を認識するモデルを提唱した。 ・ DNA 損傷修復過程の長時間シミュレーションを実現し、放射線影響の解明に寄与した。計画は十分進捗した。 ・ DNA 損傷修復過程についての従来の規模を超える世界最大規模の長時間シミュレーションを実現している。また、計算結果の可視化により損傷 DNA の修復メカニズムの力学的な直感的把握を助けることに成功している。	・ タンパク質の如き巨大分子系のシミュレーションは計算精度の観点から信頼性に乏しい。従って、数例のシミュレーションデータから早計に結論めいた議論は危険である。計算結果の十分な精査と注意深い検討を望みたい。 ・ 機構内量子ビーム部門の実験データによりモデルの妥当性を検証することができた。 ・ 量子ビーム部門の実験チームとこのシミュレーションの機構内連携は、今後の発展が期待される。 ・ 開発したシミュレーション技術は、リボゾームの立体構造解明や組み換えタンパク質の機能解明に使われブレークスルーを生み出している。また、量子ビーム応用研究部門との連携を深めている。	・ X 線解析によって 20 年余りを経てようやくその構造が決定された巨大分子複合体リボソームを対象に電子顕微鏡像を生成したことは、X 線解析の手法とは異なる電子顕微鏡によるタンパク質構造解析技術の進展に貢献すると思われる。 ・ 世界で例の無い規模での、約２０万原子系での大規模シミュレーションを 0.5 マイクロ秒という、これも世界的に例の無い長時間実行し、MutS と DNA との相互作用について、実験と良く合うシミュレーション結果を得ることに成功している。	

【年度計画】 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。 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。	・ 専門シミュレータ中核部の基本設計については、シストリックアレイ方式に基づく専用シミュレータの設計をすでに明らかにしており、100%の進捗度である。 ・ 年度計画を達成した。 ・ 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開発に関しては、処理性能･消費電力に関し実証デモ等ができるレベルまで進むとよかったと思います。 ・ 専用シミュレータについて基礎的なデータを収集し、いかなる状況で優位を出しうるかを示した。ハードウェアの発展は著しいので、今後は、得られた知見を生かして、最適なハードを選択する手法を現実の場に生かして欲しい。計画はほぼ実現した。 ・ スーパーコンピュータ導入についても計画どおり運用を行った。 ・ シストリックアレイ方式の専用シミュレータの中核部の基本設計をH20年度に前倒しで実現している。これをもとに、３次元格子ガス法による計算をPC上で実行することに成功している。	・ 機構内での連携を高く評価する。 ・ 大学との連携は良く行われたと考えます。 ・ 左記の成果をもとに、東北大における学際的公募研究に採択されている。	・ 本研究は H20 年度に殆ど実施済みであり、計画以上の成果を挙げている。	
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。	・ H21 年度で中期計画が終了し、高い成果が得られている。 ・ 今後、この成果をいかに活用していくかが問題であり、引き続き計算科学の研究を頑張ってもらいたい。 ・ シミュレーション技術は未発達な科学分析手法であるとの自覚をもっと持つべきである。シミュレーションで得られた結果から一般的な考察を行う場合注意を喚起する。シミュレーションは正しい結果も出すが、時として自然の成り立ちとは異なった架空のデータを出す危険性もはらんでいる。シミュレーションから得られた結果は多方面からの検討を加えて始めて真実に迫れるのである。 ・ H21 全体として大変良い成果がでていると思います。仮想振動台、マルチスケールシミュレーション等重要なテーマですので、今後とも積極的に推進していただければと思います。 ・ いろいろ成果を上げているが、その成果の学問的意義、あるいは産業的意義について、より広い立場からの検討が望まれる。			

付録1

シミュレーション工学研究・評価報告書
－第 1 期中期計画期間の研究評価－

2010 年 3 月

原子力計算科学研究評価専門部会

This is a blank page.

１．はじめに

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研究の重要な柱の一つとして中期計画（平成 17 年 10 月～平成 22 年 3 月）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きた。

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。

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､この委員会の下に機構外の専門家のみから構成される「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、年度毎に評価を実施してきた。平成 22 年 2 月 10 日には、第 6 回原子力計算科学研究評価専門部会を開催し､平成 17 年 10 月から平成 22 年 3 月まで 4 年半の第 1 期中期計画期間中の研究成果について、総括的な評価を実施した。

本評価では、システム計算科学センターから提出された資料と説明に基づき、中期計画とその到達目標に照らして、研究開発の達成状況を評価した。第 6 回専門部会開催後、委員の意見を集約し、報告書案を作成した。その後、報告書案に対する委員全員のレビューを行い、これらを踏まえて、本報告書を完成させた。

本専門部会による評価結果が、今後のシミュレーション工学研究の更なる進展と、機構の独立行政法人評価及び次期中期計画に向けた研究マネジメントの一助となることを願っている。

なお、本専門部会の委員各位には、多忙を極める中で、熱心に評価活動を進めていただいた。そのご尽力に対して、ここに深甚なる謝意を表する。

平成 22 年 3 月 10 日
原子力計算科学研究評価専門部会
部会長　竹田　敏一

２．評価の対象

2.1　評価の対象

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。

> Ⅰ．国民に対して提供するサービスその他の業務の質の向上に関する目標を達成するため取るべき措置
> 5. 原子力の研究、開発及び利用に係る共通的科学技術基盤の高度化
> (1)原子力基礎工学
> 8)シミュレーション工学研究
> グリッド技術による並列分散計算技術を開発し、原子力施設の耐震性評価用仮想振動台を構築する。原子炉材料のき裂進展、核燃料の細粒化現象の機構解明や、原子力分野におけるナノデバイスの開発に貢献するため、ミクロからマクロに至る計算手法を統合したマルチスケーリングモデル手法を構築する。低線量放射線影響の解明に貢献するため、IT を活用したゲノム情報解析用データベースを構築し、DNA 修復タンパク質の機能を解明するとともに、DNA 損傷・修復シミュレーションの高度化を進める。さらに、超高速ネットワークコンピューティングに関する技術開発と次世代ハードウェア技術による専用シミュレータ基盤技術の開発を行い、超高速コンピューティングニーズに効率的に対応できるシステムを構築する。

この中期計画のうちシステム計算科学センターで実施された研究が対象となる。すなわち、上記のうち「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。

また、評価の対象期間は、平成17年10月から、平成22年3月までであるため、達成見込みの成果も考慮して、評価を行った。

2.2　評価の基準

評価基準は、独立行政法人評価の基準に従い、以下のとおりとしている。

S:　特に優れた実績を上げている。
A:　中期計画を達成、または中期計画を上回る実績を上げた。
B:　中期目標は達成されなかったが、目標達成に近い実績を上げた。
C:　中期目標は達成されなかった。また、目標達成に向けた実績も不十分だった。

委員には、各項目について、評価（S/A/B/C）と評価理由の記入をお願いした。また、特に個別項目に意見がある場合は、ご意見等の記載もお願いした。

３．評価結果

3.1 各委員の評価

専門部会の委員構成を別表 1 に示す。第 6 回専門部会を欠席された 2 名の委員については、後日（平成 22 年 2 月 15 日）専門部会と同じ内容の説明を行い、評価をお願いした。

6 名の方々の評価結果は以下のとおりである。

評価項目						
原子力基礎工学 8)シミュレーション工学研究	S	S	S	S	A	A

3.2 評価結果

以上の各委員からの評価結果に基づき、原子力計算科学研究評価専門部会として以下のとおり報告する。

評価結果	S

3.3 総合所見

(1) 評価所見

中期計画は全て達成されている。さらに原子力研究における計算科学のニーズ・重要性がますます高まる中、少人数にもかかわらずその要求に応え、日本の原子力プラントの高度化を進めるための基礎を構築した点、高く評価する。とりわけ耐震性評価用仮想振動台の構築とマルチスケーリングモデル手法の確立は、計算科学技術の高度化とその応用の両面において顕著な成果を挙げており、非常に高く評価できる。また、国際連携、受賞など第三者からも高く評価されている。各課題に対する所見は以下のとおり。

グリッド技術の高度化に基づく耐震性評価用仮想振動台の構築は、原子力プラントの耐震に係る安全性評価にとって非常に重要であり、HTTR で実施した本研究の成果を高く評価する。また、ITER 計画に向けた遠隔実験の成功にも貢献しており、今後、原子力施設の安全性評価や核融合研究をはじめとして国際的な原子力施策に貢献していくことが期待できる。

マルチスケーリングモデル手法構築については、原子炉材料のき裂進展、核燃料の細粒化現象は、原子力プラントの高度化（高燃焼度、長期運転）にとって重要な課題であり、マルチスケールモデルの確立は高く評価できる。また、開発した技術の応用である新たな中性子検出器の開発は特筆すべき成果である。これらの研究レベルの高さは、2 回にわたるゴードンベル賞ファイナリストという評価にも現われている。

IT を活用したゲノム情報解析用データベース構築と DNA 損傷・修復シミュレーションの高度化では、DNA タンパク質の遺伝情報のデータベース構築、修復シミュレーションの大規模化など研究の基盤となる成果を得たほか、DNA 損傷部位の認識に対する新しい発見もあった。とくにシミュレーションを通して、DNA 修復過程へのアミノ酸の関与という、従来の定説に修正を加える新たな知見を得たことは高く評価できる。

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構築では、機構内のニーズに応える計算資源の整備、ネットワークの高度化を実現した。これらは縁の下の仕事であるが、機構全体のポテンシャル向上に貢献している。

(2) 次期中期計画に向けた提言

平成 21 年度で中期計画が終了し、高い成果が得られているが、今後この成果をいかに活用していくかが問題であり、引き続き計算科学の研究を積極的に推進してもらいたい。

グリッド技術の高度化に基づく耐震性評価用仮想振動台構築の研究過程では、さらなる高度化に向けた新たな課題が見出されており、地盤振動との連成問題や各部品間の接続部分の詳細な解析や連成系の共鳴を含んだ振動の取扱いなども今後取り組みを進めていただきたい。また、得られた知見をグリッド技術そのものへフィードバックすることも期待する。

マルチスケーリングモデル手法構築については、今後はマクロからミクロへの境界条件などを通したフィードバックや、材料設計へつながるパラメータサーベイの研究の展開が期待される。さらに、サイズの異なる粒界のシミュレーションは、結晶粒のみならず溶岩や硫石などの自然災害現象などにも類似なものが多いため、マルチスケールモデリングの応用と一般性（適用限界）についての検討も望む。

DNA 損傷・修復シミュレーションの高度化では、MutS が DNA 損傷を認識するモデルを提唱しており、これについてはさらなる計算結果の精査と注意深い検討を望みたい。また、X 線解析によって巨大分子複合体リボソームを対象に電子顕微鏡像を生成したことは、X 線解析の手法とは異なる電子顕微鏡によるタンパク質構造解析技術の進展に貢献すると思われる。

FPGA を使った専用シミュレータは、開発の時間と汎用デバイスの進歩とを考えると、優位性は限定されるが、ハードウェアまで視野に入れてシミュレーションを実行するという考え方は、今後のシミュレーション技術に生かして欲しい。

別表１　原子力計算科学研究評価専門部会委員構成

	氏　名	所　属・職　位
部会長	竹田　敏一	福井大学付属国際原子力工学研究所 所長
委　員	小柳　義夫	工学院大学 情報工学部 学部長
委　員	加古　孝	電気通信大学 電気通信学部 情報工学科 教授
委　員	笠原　博徳	早稲田大学 理工学術院 基幹理工学部 情報理工学科 教授
委　員	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 特任教授
委　員	樋渡　保秋	豊田理化学研究所　フェロー

（委員氏名は五十音順）

付録２　平成 21 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　　161,872 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　64,312 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 7 件：15,920 千円、協力者 5 件：1,624 千円）
- 原子力安全基盤機構（1 件：1,110 千円）
- 科学技術振興機構（3 件：100,622 千円）
- （財)金属系材料研究開発センター（1 件：24,898 千円）

②実施体制・従事人員

室	プロパー職員		出向職員	技術開発協力員	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	5	0	0	2	0	0	0	0	1	0	0	0	0	3	3	14
シミュレーション技術開発室	9	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	5	1	1	18
合計	14	0	0	2	1	0	0	0	2	0	0	0	5	4	4	32

（平成 22 年 1 月 8 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、27 名（外部出向中職員、技術開発協力員、客員研究員、人材派遣を除く）。

付録３　平成 21 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	３	３
	耐震計算科学技術開発	４	３
	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	２３	８
	生命情報解析技術開発	２	０
合計		３２	１４

（平成 22 年 3 月 31 日現在）

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発等】

＜研究論文＞

・ 斎藤公明、手島直哉、鈴木喜雄、中島憲宏、齋藤秀俊、国枝悦夫、藤崎達也
“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 ファミリ会論文集(Internet), PP.20

・ 宮村浩子、品野勇治、宮代隆平、斎藤隆文
“分枝限定法における分枝戦略選択のための計算過程の可視化”
情報処理学会論文誌; 数理モデル化と応用, Vol.2, No.2 PP103-112

・ 木野千晶、鈴木喜雄、宮村浩子、武宮博、中島憲宏
“物理的意味の認識を可能とするデータ解析システムのための科学概念語彙モデルの提案”
日本計算工学会論文集(インターネット), Vol.2009, No.22 PP.12

＜査読付き会議論文＞

・ 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; シームレス API の提案とアプリケーションへの適応”
全 NEC C&C システムユーザー会平成 20 年度論文集(CD-ROM), PP.13

・ G. Kim, Y. Suzuki and N. Teshima
“Network computing infrastructure to share tools and data in GNEP”
Proceedings of 17th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-17) (CD-ROM), PP.8

・ G. Kim, Y. Suzuki, N. Teshima, A. Nishida, T. Yamada, F. Araya, H. Takemiya, N. Nakajima, and M. Kondo, ” Script Generator API of AEGIS for Full-Scale 3D Vibration Simulator for an Entire Nuclear Power Plan”
Proceedings of 1st International Conference on Parallel, Distributed and Grid Computing for Engineering (PARENG 2009) (CD-ROM), PP.12

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】

＜研究論文＞

・ 山田知典、長嶋利夫
“構造格子を用いたメッシュフリー有限要素解析における境界要素積分手法”
日本計算工学会論文集(インターネット), Vol.2009, No.6 PP.7

・ 山田知典、荻野正雄、吉村忍
“バランシング領域分割法の最適領域分割数の予測とその数値検証”
日本計算工学会論文集(インターネット), Vol.2009, No.14 PP.7

・ 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3回原子力システム研究開発事業平成20年度成果報告会資料集(CD-ROM), PP.2

・ 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2009資料集, PP.25-29

＜査読付き会議論文＞

・ T. Yamada
“Parallel distributed seismic analysis of an assembled nuclear power plant”
Parallel, Distributed and Grid Computing for Engineering, PP.439-454

・ A. Nishida
“Wave propagation analysis of piping structures”
Proceedings of 17th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-17) (CD-ROM), PP.7

・ N. Kushida
“High speed eigenvalue solver on the Cell cluster system for controlling nuclear fusion plasma”
Proceedings of 18th Euromicro International Conference on Parallel, Distributed and Network-Based Computing (PDP 2010), PP.482-488

【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＞

・ N. Ishida, Y. Ota and Y. Yamamoto (Y. Ota)
“Generation and application of multi-path cat states of light”
New Journal of Physics (Internet), Vol.11, PP. 033007_1-033007_15

・ M. Okumura et al.
“Magnetic localization in the spin-polarized one-dimensional Anderson-Hubbard model”
Physical Review B, Vol.79, No.18 PP.184417_1-184417_5

・ J. Ribas-Arino, M. Shiga and D. Marx (M. Shiga)
“Understanding covalent mechanochemistry”
Angewante Chemie International Edition, Vol.48, No.23 PP.4190-4193

- A. Kaczmarek, M. Shiga D. Marx (M. Shiga)
  “Quantum effects on vibrational and electronic spectra of hydrazine studied by ″on-the-fly″ ab initio ring polymer molecular dynamics”
  Journal of Physical Chemistry A, Vol.113, No.10 PP.1985-1994
- A. Kakizaki et al. (M. Shiga)
  “Path-integral molecular dynamics simulations of small hydrated sulfuric acid clusters $H_2SO_4.(H_2O)_n$(n=1-6) on semiempirical PM6 potential surfaces”
  Journal of Molecular Structure (THEOCHEM), Vol.901, No.1-3 PP.1-8
- T. Takayanagi et al. (M. Shiga)
  “Path-integral molecular dynamics simulations of hydrated hydrogen chloride cluster $HCl(H_2O)_4$ on a semiempirical potential energy surface”
  Chemical Physics, Vol.358, No.3 PP.196-202
- A. Witt et al. (M. Shiga)
  “On the applicability of centroid and ring polymer path integral molecular dynamics for vibrational spectroscopy”
  Journal of Chemical Physics, Vol.130, No.19 PP.194510_1-194510_15
- Y. Ota et al.
  “Theory of heterotic superconductor-insulator-superconductor Josephson junctions between single- and multiple-gap superconductors”
  Physical Review Letters, Vol.102, No.23 PP.237003_1-237003_4
- M. Okumura et al.
  “Polarization plateau in an atomic Fermi gas loaded on a three-leg triangular optical lattice”
  Physical Review A, Vol.79, No.6 PP.061602_1-061602_4
- A. Ramasubramaniam, M. Itakura and E. A. Carter
  “Interatomic potentials for hydrogen in $¥alpha$-iron based on density functional theory”
  Physical Review B, Vol.79, No.17 PP.174101_1-174101_13
- 山田進、今村俊幸、町田昌彦
  “マルチコアクラスタのネットワーク構造を考慮した並列密度行列繰り込み群法の通信手法”
  日本計算工学会論文集(インターネット), Vol.2009, No.15 PP.12
- S. Yamada, M. Okumura and M. Machida
  “Direct extension of density-matrix renormalization group to two-dimensional quantum lattice systems; Studies of parallel algorithm, accuracy, and performance”
  Journal of the Physical Society of Japan, Vol.78, No.9 PP.094004_1-094004_5
- Takao Morinari, Hiroki Nakamura, Masahiko Machida and Takami Tohyama
  “Effect of Fermi surface topology on inter-layer magnetoresistance in layered multiband systems; Application to LaFeAsO{1-x}Fx”
  Journal of the Physical Society of Japan、Vol.78, No.11 PP.114702_1-114702_7

- Y. Ota, M. Machida and T. Koyama
  “Intergrain Josephson currents in multigap superconductors; Microscopic origin of low intergrain critical current and its recovery potential in iron-pnictide materials”
  Journal of the Physical Society of Japan, Vol.78, No.10 PP.103701_1-103701_4
- Hiroki Nakamura and Masahiko Machida
  “First-principles calculations of the effect of pressure on the iron-based superconductor LaFeAsO”
  Physical Review B, Vol.80, No.16, PP.165111_1-165111_5
- A. Nakayama, T. Taketsugu and M. Shiga (M. Shiga)
  “Speed-up of ab initio hybrid Monte Carlo and ab initio path integral hybrid Monte Carlo simulations by using an auxiliary potential energy surface”
  Chemistry Letters, Vol.38, No.10 PP.976-977
- J. Ribas-Arino, M. Shiga and D. Marx (M. Shiga)
  “Unravelling the mechanism of force-induced ring-opening of benzocyclobutenes”
  Chemistry; A European Journal, Vol.15, No.48 PP.13331-13335
- T. Takayanagi et al. (M. Shiga)
  “Path-integral molecular dynamics simulations for water anion clusters $(H_2O)_5^-$ and $(D_2O)_5^-$”
  Chemical Physics Letters, Vol.482, No.4-6 PP.195-200
- T. Yoshikawa et al. (M. Shiga)
  “Path-integral molecular dynamics simulations of glycine-$(H_2O)_n$(n=1-7) clusters on semi-empirical PM6 potential energy surfaces”
  Chemical Physics, Vol.365, No.1-2 PP.60-68
- H. Nakamura and M. Machida
  “Highly two-dimensional electronic structure and strong fermi-surface nesting of the iron-based superconductor Sr$_2$ScFePO$_3$; A First-principles study”
  Journal of the Physical Society of Japan, Vol.79, No.1, PP.013705_1-013705_4
- H. Nakamura
  “First-principles study for the anisotropy of iron-based superconductors toward power and device applications”
  Journal of the Physical Society of Japan, Vol.78, No.12, PP.123712_1-123712_4
- Y. Ota, et al.,
  “Theory of vortex structure in Josephson junctions with multiple tunneling channels; Vortex enlargement as a probe of ±s-wave superconductivity”
  Physical Review B, Vol.81, No.1, PP.014502_1-014502_5
- K. Ebihara et al.
  “A Numerical study on the validity of the local equilibrium hypothesis in modeling hydrogen thermal desorption spectra”
  ISIJ International, Vol.49, No.12, PP.1907-1913

＜査読付き会議論文＞

- M. Okumura et al.
  “Exact diagonalization studies on two-band minimal model for iron-based superconductors”
  Physica C, Vol.469, No.15-20 PP.932-935
- H. Nakamura et al.
  “First-principle electronic structure calculations for magnetic moment in iron-based superconductors; An LSDA + negative U study”
  Physica C, Vol.469, No.15-20 PP.908-911
- H. Nakamura et al.
  “First-principle calculation for the phonon structure on iron-based superconductors”
  Physica C, Vol.469, No.15-20 PP.1024-1026
- N. Nakai, N. Hayashi and M. Machida
  “Simulation study for the orientation of the driven vortex lattice in an amorphous superconductor”
  Physica C, Vol.469, No.15-20 PP.1106-1109
- N. Nakai, N. Hayashi and M. Machida
  “Ginzburg-Landau simulation for a vortex around a columnar defect in a superconducting film”
  Journal of Physics and Chemistry of Solids, Vol.69, No.12 PP.3301-3303
- N. Nakai, N. Hayashi and M. Machida
  “Simulation studies for the vortex depinning dynamics around a columnar defect in superconductors”
  Physica C, Vol.468, No.15-20 PP.1270-1273
- K. Ebihara et al.
  “Rate theory modeling of irradiation-induced phosphorus segregation in FCC nickel using first principles calculations”
  Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol.1125, PP.133-138
- K. Ebihara et al.
  “Numerical simulation of irradiation-induced grain-boundary phosphorous segregation in reactor pressure vessel steels using rate theory model with first-principles calculations”
  Proceedings of 2009 ASME Pressure Vessels and Piping Division Conference (PVP 2009) (CD-ROM), PP.8

【シミュレーション技術開発室・生命情報解析】

＜研究論文＞

- G. P. Poornam at al. (A. Matsumoto and H. Ishida)
  “A Method for the analysis of domain movements in large biomolecular complexes”

Proteins: Structure, Function, and Genetics, Vol.76, No.1 PP.201-212

・ A. Matsumoto and H. Ishida
"Global conformational changes of ribosome observed by normal mode fitting for 3D cryo-EM structures"
Structure, Vol.17, No.12 PP.1605-1613

２．国際会議、国内会議での発表等

室	研究内容	講演件数
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	１８
	耐震計算科学技術開発	１３
	専用シミュレータ基盤技術開発	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	７６
	生命情報解析技術開発	２
合計		１２３

(平成 22 年 3 月 31 日現在)

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発等】

・ Guehee Kim et al.
"Development of APIs for desktop supercomputing"
9th Teraflop Workshop

・ 鈴木喜雄、林幸子、宮村浩子
"シミュレーション結果の妥当性評価のための思考的コンピューティング"
第 14 回日本計算工学講演会

・ 宮村浩子、鈴木喜雄、武宮博
"時空間マップによる時系列データの可視化"
第 14 回日本計算工学講演会

・ 木野千晶、鈴木喜雄、武宮博
"科学概念語彙モデルを用いた物理シミュレーションにおける意味情報処理"
平成 21 年(2009 年)電気学会電子・情報・システム部門大会

・ Takayuki Tatekawa et al.
"Development of simple orchestration application framework and its application to burning plasma simulation"
11th Teraflop Workshop

・ Guehee Kim et al.
"3D virtual plant vibration simulator on simple orchestration application framework"
11th Teraflop Workshop

・ Hiroko N. Miyamura et al.
"Visualization system for the evaluation of numerical simulation results"
International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and

Analysis (SC09)

- Hiroko N. Miyamura et al.
  “Visualization system for the evaluation of numerical simulation results”
  Mini-Symposium in SC09
- Takayuki Tatekawa et al.
  “Simple orchestration application framework on AEGIS”
  Mini-Symposium in SC09
- Yoshio Suzuki
  “Interoperation between grid infrastructures "AEGIS" and "DIET" for an international sparse linear algebra expert system”
  Mini-Symposium in SC09
- Hiroshi Takemiya
  “Supercomputers in Japan Atomic Energy Agency”
  Mini-Symposium in SC09
- 立川崇之、中島康平、金奎希、手島直哉、鈴木喜雄、武宮博
  “統合シミュレーションの連携実行フレームワークの開発と、燃焼プラズマシミュレーションへの応用”
  日本原子力学会 2010 年春の年会
- 金奎希、中島康平、立川崇之、手島直哉、鈴木喜雄、武宮博
  “総合シミュレーションの連携実行フレームワークの 3 次元仮想振動台への適用”
  日本原子力学会 2010 年春の年会
- 鈴木喜雄
  “ITBL 基盤ソフトウェアの現状報告と ITBL コミュニティ紹介”
  平成 21 年度 ITBL シンポジウム
- 宮村浩子、大坐畠智、中尾彰宏、川島幸之助、鈴木喜雄
  “重要ノードに着目した大規模ネットワークの可視化システム”
  電子情報通信学会 NS 研究会
- 宮村浩子、大坐畠智、中尾彰宏、川島幸之助、鈴木喜雄
  “重要ノード発見のための大規模ネットワークの可視化”
  信学技報, Vol.109, No.188, PP85-90
- 宮村浩子、大坐畠智、中尾彰宏、川島幸之助、鈴木喜雄
  “対話的操作を用いた重要ノード発見のためのネットワークの可視化”
  電気学会産業計測制御研究会
- Chiaki Kino
  “Design of scientific concept vocabulary for annotation method of visualization system”
  Proceedings of Asia Simulation Conference 2009 (JSST 2009) (CD-ROM)

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】

- T. Yamada

“Recent advances in seismic simulation of nuclear power plant in its entirety”
Workshop on Seismic Simulations in Nuclear Science and Engineering

・ 山田知典、新谷文将
“原子力施設規模の振動シミュレーションの実現に向けた解析プラットフォームの構築”
日本原子力学会 2009 年秋の大会

・ T. Yamada and T. Nagashima
“A Simple and efficient hybrid numerical quadrature scheme for structured extended FEM”
10th US National Congress on Computational Mechanics (USNCCM-10)

・ 酒井理哉他（西田明美、新谷文将、櫛田慶幸）
“機器配管系の支持構造部の地震挙動評価”
日本原子力学会 2009 年秋の大会

・ 西田明美他
“機器配管系の支持構造部に着目した接合部連成モデリング”
日本原子力学会 2009 年秋の大会

・ 西田明美他
“原子力施設の機器・配管群の振動シミュレーション”
PD09

・ 西田明美
“原子力施設の配管網の振動シミュレーション”
近未来型の建築構造解析に関するワークショップ(GA09)

・ 酒井理哉他（西田明美、新谷文将、櫛田慶幸）
“機器配管系の支持構造部に着目したハイブリッド地震応答試験”
日本原子力学会 2008 年秋の大会

・ 西田明美他
“音響周波数コム(ACROSS)による減衰計測方法”
シンポジウム「シェル・空間構造の応答制御と減衰; 最近の取り組みと将来」

・ N. Kushida
“Eigenvalue solution on the heterogeneous multi-core(Cell processor) for International Thermo-nuclear Experimental Reactor (ITER) monitoring system”
Mini-Symposium in SC ’09

・ 高瀬和之、村松壽晴、関暁之、北村竜明、町田啓
“レーザー照射による材料溶接シミュレーションに関する予備的検討”
日本機械学会熱工学コンファレンス 2009 講演論文集 PP.217-218

・ 山田知典
“巨大アセンブリ構造解析のためのマトリクス連成フレームワークの基礎的検討”
計算工学講演会論文集, Vol.14, No.1, PP.247-248

・ Tadashi Watanabe
“Accurate measurement of surface tension using a levitated liquid droplet”
Proceedings of 6th International Conference on Electromagnetic Processing of

Materials (EPM 2009) PP.403-406

【シミュレーション技術開発室・材料シミュレーション】

- Y. Ota et al.
  “Theory of Josephson junctions between single- and two-gap superconductors; Identification of $¥pm$ s-wave symmetry via basic Josephson effects”
  International Workshop on the Search for New Superconductors; Frontier and Future
- H. Nakamura et al.
  “Crystalline and magnetic structures of iron-based superconductors; A First-principle study”
  International Workshop on the Search for New Superconductors; Frontier and Future
- 志賀基之
  “ab initio 経路積分ハイブリッドモンテカルロ法”
  第 12 回理論化学討論会
- 志賀基之
  “経路積分分子動力学法の基礎”
  理研セミナー
- M. Shiga
  “Ab initio path integral simulations; Nuclear quantum effect”
  13th International Congress of Quantum Chemistry (ICQC-13)
- R. Igarashi et al.
  “Partial order of frustrated Potts model”
  International Conference on Magnetism 2009 (ICM 2009)
- M. Shiga
  “Ab initio path integral simulations; Nuclear quantum effect”
  7th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering 2009 (ICCMSE 2009)
- Y. Ota et al.
  “Leggett’s modes in multi-band superconductors”
  New Developments in Theory of Superconductivity
- Y. Ota et al.
  “Heterotic Josephson junctions between single- and two-gap superconductors; Identification of ±s-wave in iron-based superconductors”
  「新規材料による高温超伝導基盤技術」第 2 回領域会議
- S. Yamada, M. Okumura and M. Machida
  “Parallelization of dynamical DMRG for n-leg Hubbard model”
  Supercomputing in Solid State Physics 2009
- 山田進、奥村雅彦、町田昌彦
  “並列計算による DMRG の大規模シミュレーション手法の開発; 2 次元モデルに対する動的 DMRG 法の並列化”

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」

- 山田進、奥村雅彦、町田昌彦
  “動的 DMRG 法を用いた 2 次元フェルミ光学格子系の一粒子励起スペクトル”
  日本物理学会第 64 回年次大会
- H. Nakamura et al.
  “Crystalline and electronic structures of iron-based superconductors; A First-principle study”
  New Developments in Theory of Superconductivity
- 山田進他
  “マルチコアクラスタ向け通信手法を用いた密度行列繰り込み群法の並列化”
  2009 年並列/分散/協調処理に関する「仙台」サマー・ワークショップ(SWoPP 仙台 2009)
- M. Okumura et al.
  “Non-equilibrium dynamics of spin-imbalanced fermions in optical lattice”
  New Developments in Theory of Superconductivity
- Y. Ota et al.
  “Peculiar Josephson vortex structure for ±s-wave in Josephson junctions with multiple tunneling channels”
  New directions of superconducting nanostructures 2009 (NDSN 2009)
- N. Nakai et al.
  “Direct numerical simulations for the time-dependent Ginzburg-Landau equation in the vortex-flow stage of a two-gap superconductor”
  Nanoscience and Engineering in Superconductivity
- N. Nakai et al.
  “Temperature dependence of specific heat and nuclear magnetic relaxation rate for multi-gap superconductors”
  New Developments in Theory of Superconductivity
- M. Machida and Y. Ota
  “Theory of Josephson vortices and collective modes in multi-bands superconductors”
  12th International Workshop on Vortex Matter in Superconductors
- 五十嵐亮他
  “Heisenberg 模型の 1 次元化の解析”
  日本物理学会 2009 年秋季大会(物性)
- 太田幸宏他
  “多バンド超伝導体におけるジョセフソン渦”
  日本物理学会 2009 年秋季大会(物性)
- 太田幸宏、町田昌彦、小山富男
  “多結晶鉄砒素超伝導体における粒間臨界電流の評価”
  日本物理学会 2009 年秋季大会(物性)
- 中村博樹、町田昌彦
  “第一原理計算による鉄系超伝導物質の異方性の解析”

日本物理学会 2009 年秋季大会(物性)

- 中井宣之他
  “マルチギャップ超伝導体に対する電子比熱の温度依存性”
  日本物理学会 2009 年秋季大会(物性)
- 中井宣之、町田昌彦
  “正方格子ピン止め配置の渦糸侵入シミュレーション”
  日本物理学会 2009 年秋季大会(物性)
- 奥村雅彦
  “光学格子系における金属・絶縁体・超流動相の非平衡ダイナミクス”
  日本物理学会 2009 年秋季大会(物性)
- 山田進、奥村雅彦、町田昌彦
  “超並列動的密度行列繰り込み群法の開発; ラダー系への直接拡張と高速化”
  日本物理学会 2009 年秋季大会(物性)
- 奥村雅彦他
  “光学格子系における引力フェルミ原子気体の重心運動”
  日本物理学会 2009 年秋季大会(物性)
- Y. Ota et al.
  “Holonomic quantum computing in a dimer-chain model via Ising-type interaction”
  2nd International Workshop on Dynamics and Manipulation of Quantum Systems 2009
- 太田幸宏、近藤康
  “幾何学的位相ゲートとしてのコンポジットパルス”
  第 21 回量子情報技術研究会(QIT-21)
- M. Itakura et al.
  “Multiscale simulation of hydrogen segregation and decohesion”
  Materials Research Society 2009 Fall Meeting
- S. Yamada et al.
  “Next-generation quantum many-body simulation project toward petaflops computing; Density matrix renormalization group method on massively parallel computer”
  Mini-Symposium in SC ’09
- Y. Ota et al.
  “Shapiro steps in heterotic SIS multi-tunneling-channel Josephson junctions: Identification of ±s-wave in iron-pnictide superconductors”
  東北大学電気通信研究所共同プロジェク研究会「環境負荷低減に資する超伝導計算機技術に関する研究」
- Y. Ota et al.
  “Theory of Josephson Effects in Heterotic S-I-S Junctions with Iron-pnictide Superconductors”
  「新規材料による高温超伝導基盤技術」第 3 回領域会議
- 中井宣之、太田幸宏、林伸彦、町田昌彦
  “2 バンド模型 TDGL シミュレーションの磁束フロー電圧”

第 17 回磁束線物理国内会議

- 中井宣之、中村博樹、太田幸宏、永井佑紀、林伸彦、町田昌彦
  “鉄砒素系超伝導物質の超伝導状態に対する考察~現象論的アプローチ~”
  「新規材料による高温超伝導基盤技術」第 3 回領域会議
- 太田幸宏、町田昌彦、小山富男、青木秀夫
  “多バンド超伝導体における集団励起モード”
  第 17 回磁束線物理国内会議
- 蕪木英雄、山口正剛、板倉充洋、海老原健一、門吉朋子、鈴土知明
  “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”
  鉄鋼材料の革新的高強度・高機能化基盤研究開発第 1 回シンポジウム
- T. Kadoyoshi et al.
  “Hydrogen embrittlement of a grain boundary in alpha-iron; A Molecular dynamics study”
  14th International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM-14)
- H. Kaburaki et al.
  “Molecular dynamics simulation on the grain boundary embrittlement of iron crystal”
  第 19 回日本 MRS 学術シンポジウム
- T. Kadoyoshi et al.
  “A Molecular dynamics study on hydrogen embrittlement of a grain boundary in alpha-iron”
  Materials Research Society 2009 Fall Meeting
- 山口正剛他
  “照射誘起粒界リン偏析の素過程に関する第一原理計算”
  九州大学応用力学研究所平成 21 年度共同利用研究集会「材料照射効果基礎過程の解明; 軽水炉高経年化技術の向上を目指して」
- 海老原健一他
  “原子炉圧力容器鋼における照射誘起粒界リン偏析の第一原理計算を用いた反応速度論による数値シミュレーション”
  九州大学応用力学研究所平成 21 年度共同利用研究集会「材料照射効果基礎過程の解明; 軽水炉高経年化技術の向上を目指して」
- 鈴土知明、蕪木英雄、板倉充洋
  “Computational study of recovery process in UO$_{2}$/CeO$_{2}$”
  5th International Workshop of New Crossover Project
- 鈴土知明
  “メゾスコピック計算科学と原子力材料微細組織発達への応用”
  日本原子力学会 2009 年度軽水炉燃料・材料・水化学夏期セミナー
- M. Yamaguchi
  “First-principles study on the decohesion of iron (Fe) grain boundary by solute (B, C, P, S) segregation”
  International Symposium on Stress Corrosion Cracking in Stractural Materials at

Ambient Temperatures

- M. Yamaguchi et al.
  “First-principles study on the decohesion of grain boundaries in metals by hydrogen trapping”
  International Symposium on Stress Corrosion Cracking in Stractural Materials at Ambient Temperatures
- 山口正剛、海老原健一、板倉充洋、鈴土知明、蕪木英雄、門吉朋子
  “粒界凝集エネルギーの第一原理計算,2; 鉄の水素脆性”
  日本金属学会 2009 年秋期(第 145 回)大会
- M. Yamaguchi et al.
  “First-principles calculations of the formation and migration energies of defect-phosphorous complexes in bcc Fe and fcc Ni”
  15th Meeting of the International Group on Radiation Damage Mechanisms in Pressure Vessel Steels (IGRDM-15)
- 山口正剛
  “溶質元素の粒界偏析とその脆化・強化効果; 第一原理計算による研究”
  第 140 回超塑性研究会
- 山口正剛、宇田川豊、阿部弘亨、関村直人
  “Zr-Nb 合金の水素化及び照射効果に関する研究,4; モデル化; 格子欠陥エネルギーの第一原理計算”
  日本原子力学会 2010 年春の年会
- 鈴土知明、山口正剛、蕪木英雄
  “第一原理・キネティックモンテカルロ法によるヘリウム偏析シミュレーション”
  日本金属学会 2010 年春期(第 146 回)大会
- 山田進他
  “密度行列繰り込み群法における大規模固有値計算の並列化”
  平成 21 年度 RIMS 研究集会「数値解析と数値計算アルゴリズムの最近の展開」
- 五十嵐亮他
  “並列 DMRG 法のスピンラダー系への応用”
  物性研究所短期研究会計算物理学
- 中井宣之、中村博樹、太田幸宏、永井佑紀、林伸彦、町田昌彦
  “鉄砒素超伝導体に対する超流動密度の温度依存性”
  日本物理学会第 65 回年次大会
- 中井宣之、町田昌彦、林伸彦
  “ギンツブルグ - ランダウ理論を用いた渦糸ダイナミクスシミュレーション”
  日本物理学会第 65 回年次大会
- Y. Ota, et al.,
  “Theory of ac Josephson effects in multiple tunneling junctions; A Probe of ± s-wave in iron-based superconductors”
  American Physical Society 2010 March Meeting

- Y. Ota, et al.,
  “Leggett's collective modes in multi-band superconductors; Multiple dynamical classes”
  American Physical Society 2010 March Meeting
- 太田幸宏、町田昌彦、小山富男、青木秀夫
  “多バンド超伝導/超流動におけるレゲット・モードとその dynamical class”
  日本物理学会第 65 回年次大会
- 山田進、今村俊幸、奥村雅彦、五十嵐亮、町田昌彦
  “ペタフロップスマシンに向けた密度行列繰り込み群法の大規模並列化手法”
  スーパーコンピューターワークショップ 2010
- 奥村雅彦、山田進、町田昌彦、青木秀夫
  “密度行列繰り込み群による梯子状光学格子上の冷却フェルミ原子-スピン偏極構造”
  日本物理学会第 65 回年次大会
- 山田進、奥村雅彦、五十嵐亮、町田昌彦
  “準 2 次元ハバードモデルに対する動的 DMRG 法の高速アルゴリズム”
  日本物理学会第 65 回年次大会
- 宮下通泰、樋口克彦、樋口雅彦
  “制限無しハートレー・フォック方程式の新しい解法”
  日本物理学会第 65 回年次大会
- Motoyuki Shiga
  “Ab initio path integral simulations”
  69th Okazaki Conference on ″New Frontier in Quantum Chemical Dynamics″
- 五十嵐亮、奥村雅彦、山田進、町田昌彦
  “大規模並列 DMRG 法によるスピンチューブ系のギャップの評価”
  文部科学省「最先端・高性能汎用スーパーコンピュータの開発利用」プロジェクト; 次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発第 4 回公開シンポジウム
- 五十嵐亮、奥村雅彦、山田進、町田昌彦
  “スピンチューブ系のギャップの系統的調査”
  日本物理学会第 65 回年次大会
- R. Igarashi, et al.
  “Ground state phase diagram of the asymmetric spin tube up to 6 legs”
  American Physical Society 2010 March Meeting
- 五十嵐亮、奥村雅彦、山田進、町田昌彦
  “大規模並列 DMRG 法によるスピンチューブ系のギャップの評価”
  次世代スパコン物性科学分野研究会「新物質とエネルギー」
- 町田昌彦、宮下通泰、中村博樹
  “第一原理計算による鉄砒素系超伝導体の電子・磁気構造”
  日本物理学会 2009 年秋季大会(物性)
- 町田昌彦
  “構造材及び燃料に対する計算科学によるアプローチ”

日本原子力学会 2009 年秋の大会

- 町田昌彦、佐々成正
  “量子乱流におけるエネルギーカスケードのボトルネック効果”
  日本物理学会第 65 回年次大会
- 中村博樹、町田昌彦
  “第一原理計算によるペロブスカイト型ブロック層を持つ鉄系超伝導体の電子状態の解析”
  日本物理学会第 65 回年次大会
- H. Nakamura, et al.,
  “Electronic structure of iron-based superconductors with thick perovskite-blocking layers”
  American Physical Society 2010 March Meeting
- 町田昌彦、佐々成正
  “量子乱流の大規模シミュレーション「エネルギー散逸ボトルネック効果」”
  第 17 回磁束線物理国内会議
- 奥村雅彦、大西弘明、山田進、町田昌彦
  “光学格子系におけるモット相の破壊と緩和”
  京都大学基礎物理学研究所研究会「相関電子系における光誘起現象」
- H. Ota, et al.,
  “Propagation and reflection properties of external electromagnetic waves in Josephson Junctions”
  1st JST-DFG Workshop on Terahertz Superconductor Electronics

【シミュレーション技術開発室・生命情報解析】

- A. Matsumoto
  “STRUCTURAL ANALYSIS OF BOUND MOLECULES TO RIBOSOME BY EM-FITTING”
  Biophysical Society 54th Annual Meeting
- H. Ishida
  “Analysis of dynamic properties of DNA repair protein MutS and DNA complexes using molecular dynamics simulations”
  Biophysical Society 54th Annual Meeting

３．技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

- 西田明美、吉中進
  “第 7 回新「シェル・空間構造」セミナー; 応答制御技術が開く空間構造デザインの可能性 2008”
  建築雑誌, Vol.128, No.1581, PP.053-054
- Tomonori Yamada and Fumimasa Araya
  “Construction of vibration table in an extended world for safety assessment of nuclear power plants”

High Performance Computing on Vector Systems 2009, PP.223-232

４．メディアへの情報発信及び新聞報道等

・ 2009 年 5 月 26 日（火）電気新聞 1 面
「原子力機構　研究資源を統合活用　国際連携で基盤整備」

５．研究発表会等の開催

・ 第 20 回 CCSE ワークショップ（H21 年 4 月 24 日）
“ペタフロップスに向けた先進的計算技術”（参加者：国外 5 名、機構外（国内）20 名、機構内 23 名）
・ 第 21 回 CCSE ワークショップ（H22 年 1 月 25 日）
“原子力耐震計算科学の可能性”（参加者：機構外 69 名、機構内 32 名）
・ 研究会「鉄系高温超伝導体研究の最前線」（H21 年 11 月 28 日）
“メカニズムおよび物性のレビューと展望”（参加者数：80 名、発表件数：11 件）
・ マテリアルチームセミナー（計 5 回開催）
H21 年 4 月 22 日：芳賀芳範（原子力機構 先端基礎研究センター)講演
「アクチナイド系化合物の磁性と超伝導」
5 月 27 日：大西弘明(原子力機構 先端基礎研究センター)講演
「Cluster DMFT」
6 月 5 日：田中良巳（北海道大学）講演
「Probe of strongly correlated state through noise correlation, from non-equilibrium physics to d-wave pair detection in ultracold atoms」
7 月 2 日：永井佑紀（東京大学）講演
「Dual Fermion DMFT and continuous time QMC」
7 月 8 日：鈴木通人（ウプサラ大学）講演
「アクチナイド化合物の多彩な基底状態と物性の電子状態計算」
9 月 1 日：富安啓輔（東北大学）講演
「機能性材料の中性子非弾性散乱研究に向けた開発紹介」
・ CREST 特定課題推進チームセミナー（計 4 回開催）
H21 年 6 月 9 日：北川拓也（Harvard Univ.）講演
「Probe of strongly correlated state through noise correlation, from non-equilibrium physics to d-wave pair detection in ultracold atoms」
6 月 11 日：湯浅一哉（早稲田大学）講演
「超伝導状態におけるエンタングルメント」
11 月 13 日：奥村雅彦（原子力機構システム計算科学センター）講演
「時間依存密度行列繰り込み群法の現状」
11 月 20 日：五十嵐亮（原子力機構システム計算科学センター）講演
「密度行列繰り込み群法の応用の現状」

・ 量子生命情報解析チームセミナー（計 32 回開催）

H21 年 4 月 8 日（水）及川雅隆（量子ビーム応用研究部門特研生）講演
4 月 15 日（水）川端猛（奈良先端大学院大学准教授）招待講演
4 月 22 日（水）石田恒（量子ビーム応用研究部門研究員）講演
5 月 13 日（水）金枝直子（量子ビーム応用研究部門博士研究員）講演
5 月 20 日（水）甲斐健師（X-FEL 課題特定課題推進員）講演
5 月 27 日（水）高潤一郎（X-FEL 課題特定課題推進員）講演
6 月 3 日（水）河野秀俊（量子ビーム応用研究部門研究主幹）講演
6 月 9 日（火）Gautam Basu（Bose Institute 教授）講演
6 月 17 日（水）村上洋（量子ビーム応用研究部門研究員）講演
6 月 24 日（水）松本淳（シミュレーション技術開発室研究副主幹）講演
7 月 1 日（水）米谷佳晃（量子ビーム応用研究部門任期付研究員）講演
7 月 8 日（水）石田恒（量子ビーム応用研究部門研究副主幹）講演
7 月 22 日（水）徳久淳師（量子ビーム応用研究部門博士研究員）講演
7 月 29 日（水）及川雅隆（量子ビーム応用研究部門特研生）講演
9 月 2 日（水）川端猛（奈良先端大学院大学准教授）招待講演
9 月 9 日（水）金枝直子（量子ビーム応用研究部門博士研究員）講演
9 月 16 日（水）甲斐健師（X-FEL 課題特定課題推進員）講演
9 月 30 日（水）高潤一郎（X-FEL 課題特定課題推進員）講演
10 月 14 日（水）河野秀俊（量子ビーム応用研究部門研究主幹）講演
10 月 21 日（水）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 28 日（水）Edy Giri Rachman Putra（National Nuclear Energy Agency of Indonesia, MEXT 原子力研究交流制度で滞在中）講演
11 月 4 日（水）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 11 日（水）宮田雄輔（奈良先端大学院大学学生）講演
11 月 18 日（水）徳久淳師（量子ビーム応用研究部門博士研究員）講演
11 月 25 日（水）及川雅隆（量子ビーム応用研究部門特研生）講演
12 月 3 日（水）前島一博（国立遺伝学研究所教授）招待講演
12 月 10 日（水）及川雅隆（量子ビーム応用研究部門特研生）講演
12 月 17 日（水）川端猛（奈良先端大学院大学准教授）招待講演

H22 年 1 月 13 日（水）金枝直子（量子ビーム応用研究部門博士研究員）講演
1 月 27 日（水）石田恒（量子ビーム応用研究部門研究員）講演
2 月 3 日（水）甲斐健師（X-FEL 課題特定課題推進員）講演
2 月 10 日（水）高潤一郎（X-FEL 課題特定課題推進員）講演

６．受賞等

・ AIAA Liquid Propulsion Best Paper 受賞

N. Yamanishi, M. Nishimoto, S. Hori, K. Okita, C. Kato, S. Yoshimura, T.Yamada, H Kure

「Numerical Analysis of Flow-Induced Structural Vibration in the LE-7A Liquid

Hydrogen Pump」
AIAA (American Institute of Aeronautics and Astronautics)、平成 21 年 8 月

・ 全 NEC C&C システムユーザ会ユーザ事例論文 (2009)「入選」受賞
宮村 (中村) 浩子、中島康平、鈴木喜雄、林幸子、武宮博、中島憲宏
「シミュレーション結果の評価支援のためのデータ調査システム～Focus+Context 技術～」
全 NEC C&C システムユーザ会、平成 21 年 11 月

・ FUJITSU ファミリ会論文 (2009) 奨励論文賞受賞
宮村 (中村) 浩子、林幸子、鈴木喜雄、武宮博
「時系列データを眺める技術 ～データの時間変化を見逃さないためにはどうしたらいいか～」
FUJITSU ファミリ会、平成 22 年 1 月 (授賞式は 5 月)

・ 日本原子力学会計算科学技術部会「奨励賞」受賞
山田知典
「大規模有限要素法解析技術による原子力施設耐震計算科学の推進」
日本原子力学会計算科学技術部会、平成 22 年 3 月

7．特許等の状況

(1)特許の出願及び登録

なし。

(2)成果の活用 (利用許諾) による収入

件名 (成果の内容)	契約先 (販売者)	権利／契約種別	H21 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	456,750 円
並列分子動力学ステンシル	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	467,933 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	55,850 (6)
シミュレーション技術開発室	88,324 (11)

【高度計算機技術開発室】

(1)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

(2)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)　40,430 千円

(3)国際熱核融合実験炉ＩＴＥＲのリアルタイムモニタリングシステムの開発 (文部科学省:科研費(若手 B))　3,380 千円

(4)大規模時系列ボリュームデータ解析・可視化のための高次元データポケットの生成 (文部科学省：科研費(若手 B))　3,250 千円

(5)自己重力系・長距離系の準平均進化（文部科学省：科研費(若手 B)） 3,900 千円
(6)大規模分散環境を用いた P2P ネットワーク流通ファイル制御システムの研究（日本学術振興会：科研費(基盤 B)） 390 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） 55,692 千円
(8)高照射量領域の照射脆化予測（原子力安全基盤機構(JNES)） 1,110 千円
(9)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） 24,898 千円
(10)量子渦糸乱流の大規模シミュレーションによる研究Ⅱ（文部科学省：科研費(特定領域)） 1,100 千円
(11)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)） 1,820 千円
(12)粒子描像による固体の熱伝導機構の解明（日本学術振興会:科研費(基盤 C)） 1,170 千円
(13)浮遊液滴の回転振動特性と内部･外部流動に関する金級（日本学術振興会:科研費(基盤 C)） 1,300 千円
(14)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の解明（日本学術振興会:科研費(基盤 B)） 130 千円
(15)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)） 104 千円
(16)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)） 800 千円
(17)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)） 200 千円

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	9	0	1	1
	耐震計算科学技術開発	1	0	1	0
	専用シミュレータ基盤技術開発	1	0	0	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	2	0
	生命情報解析	6	0	0	0
合計		１８	0	4	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）
・ 統合シミュレーション技術を用いた生体シミュレーションに関する研究（北陸先端科学技

術大学院大学情報科学センター)
- ADVENTURE を用いた ITBL 上の研究コミュニティ・システム開発に関する研究（東京大学大学院工学系研究科)
- グリッド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)
- 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)
- 大容量データの遠隔可視化に関する研究（京都大学)
- 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)
- 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)
- 核融合シミュレーションにおける大容量データ処理技術に関する研究（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)

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】
- 大規模有限要素シミュレーションの結果可視化に関する研究（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)
- 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)
- 高照射量領域の照射脆化予測（原子力安全基盤機構)

●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デバイス・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 25 件に及ぶ機構内連携を実施した。

(1)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。

(2)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。

(3)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。

(4)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、施設の耐震性評価を支援。

(5)施設の耐震強度評価

部署：敦賀本部、(大洗) 次世代部門

概要：機構内実験施設の耐震強度解析および評価

(6)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。

(7)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。

(8)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の出力結果解析を効率化。

(9)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。

(10)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。

(11)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。

(12)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。

(13)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。

(14)原子炉圧力容器鋼の高経年化対策研究(照射脆化予測)

部署：(東海)安全研究センター

概要：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。

(15)燃料被覆管ジルコニウム合金の水素脆化に関する研究

部署：(東海) 安全研究センター

概要：高燃焼度燃料被覆管材 Zr 合金の実機適用性の評価のために、最新の理論計算手法を導入し、材料の腐食、水素化、照射による劣化挙動を解明し、高燃焼度燃料としての実機適用性および安全基準の合理化に対して技術的知見を供する。

(16)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。

(17)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)先端基礎研究開発センター

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。

(18)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。

(19)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。

(20)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、J-PARC センター

概要：実験及び開発研究を先導（設計支援を含む）するため、高精度シミュレーションを行い、データを提供する。

(21)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。

(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､(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。

(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：(東海)原子力基礎工学研究部門

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。

(24)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

(25)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。

１１．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.

国際単位系（SI）

表１．SI 基本単位

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

表２．基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

組立量	SI 基本単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m^2
体積	立法メートル	m^3
速さ，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	キログラム毎立法メートル	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	1
比透磁率(b)	（数字の） 1	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}
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	ジーメンス	S	A/V	$m^{-2}\ kg^{-1}\ s^3\ A^2$
磁束	ウエーバ	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)	℃		K
光束	ルーメン	lm	cd sr(c)	cd
照度	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}
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	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および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
粘度	パスカル秒	Pa s	$m^{-1}\ kg\ s^{-1}$
力のモーメント	ニュートンメートル	N m	$m^2\ kg\ s^{-2}$
表面張力	ニュートン毎メートル	N/m	$kg\ s^{-2}$
角速度	ラジアン毎秒	rad/s	$m\ m^{-1}\ s^{-1}=s^{-1}$
角加速度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s^2	$m\ m^{-1}\ s^{-2}=s^{-2}$
熱流密度，放射照度	ワット毎平方メートル	W/m^2	$kg\ s^{-3}$
熱容量，エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	$m^2\ kg\ s^{-2}\ K^{-1}$
比熱容量，比エントロピー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	$m^2\ s^{-2}\ K^{-1}$
比エネルギー	ジュール毎キログラム	J/kg	$m^2\ s^{-2}$
熱伝導率	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	$m\ kg\ s^{-3}\ K^{-1}$
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m^3	$m^{-1}\ kg\ s^{-2}$
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	$m\ kg\ s^{-3}\ A^{-1}$
電荷密度	クーロン毎立方メートル	C/m^3	m^{-3} sA
表面電荷	クーロン毎平方メートル	C/m^2	m^{-2} sA
電束密度，電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m^2	m^{-2} sA
誘電率	ファラド毎メートル	F/m	$m^{-3}\ kg^{-1}\ s^4\ A^2$
透磁率	ヘンリー毎メートル	H/m	$m\ kg\ s^{-2}\ A^{-2}$
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mol	$m^2\ kg\ s^{-2}\ mol^{-1}$
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	$m^2\ kg\ s^{-2}\ K^{-1}\ mol^{-1}$
照射線量（X線及びγ線）	クーロン毎キログラム	C/kg	kg^{-1} sA
吸収線量率	グレイ毎秒	Gy/s	$m^2\ s^{-3}$
放射強度	ワット毎ステラジアン	W/sr	$m^4\ m^{-2}\ kg\ s^{-3}=m^2\ kg\ s^{-3}$
放射輝度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	$W/(m^2\ sr)$	$m^2\ m^{-2}\ kg\ s^{-3}=kg\ s^{-3}$
酵素活性濃度	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=60s
時	h	1h =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	$1ha=1hm^2=10^4m^2$
リットル	L, l	$1L=11=1dm^3=10^3cm^3=10^{-3}m^3$
トン	t	$1t=10^3$ 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	$1eV=1.602\ 176\ 53(14)\times10^{-19}J$
ダルトン	Da	$1Da=1.660\ 538\ 86(28)\times10^{-27}kg$
統一原子質量単位	u	1u=1 Da
天文単位	ua	$1ua=1.495\ 978\ 706\ 91(6)\times10^{11}m$

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=0.1MPa=100kPa=10^5Pa
水銀柱ミリメートル	mmHg	1mmHg=133.322Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1nm=100pm=10^{-10}m
海里	M	1 M=1852m
バーン	b	$1\ b=100fm^2=(10^{-12}cm)2=10^{-28}m^2$
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	$1\ P=1\ dyn\ s\ cm^{-2}=0.1Pa\ s$
ストークス	St	$1\ St=1cm^2\ s^{-1}=10^{-4}m^2\ s^{-1}$
スチルブ	sb	$1\ sb=1cd\ cm^{-2}=10^4cd\ m^{-2}$
フォト	ph	$1\ ph=1cd\ sr\ cm^{-2}\ 10^4lx$
ガル	Gal	$1\ Gal=1cm\ s^{-2}=10^{-2}ms^{-2}$
マクスウェル	Mx	$1\ Mx = 1G\ cm^2=10^{-8}Wb$
ガウス	G	$1\ G =1Mx\ cm^{-2} =10^{-4}T$
エルステッド(c)	Oe	1 Oe ≙ $(10^3/4\pi)$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	$1\ Ci=3.7\times10^{10}Bq$
レントゲン	R	$1\ R = 2.58\times10^{-4}C/kg$
ラド	rad	$1\ rad=1cGy=10^{-2}Gy$
レム	rem	$1\ rem=1\ cSv=10^{-2}Sv$
ガンマ	γ	$1\ \gamma=1\ nT=10\text{-}9T$
フェルミ		1フェルミ=1 fm=10-15m
メートル系カラット		1メートル系カラット = 200 mg = 2×10-4kg
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	1cal=4.1858J（「15℃」カロリー），4.1868J（「IT」カロリー）4.184J（「熱化学」カロリー）
ミクロン	μ	$1\ \mu=1\mu m=10^{-6}m$

（第8版，2006年改訂）

この印刷物は再生紙を使用しています