

JAERI-Review
2005-038



JP0550508



公募型研究（計算科学技術ソフトウェア研究開発）
総括報告書
（平成9年度～平成14年度）

2005年9月

企画室
計算科学技術推進センター

日本原子力研究所
Japan Atomic Energy Research Institute

本レポートは、日本原子力研究所が不定期に公刊している研究報告書です。
入手の問い合わせは、日本原子力研究所研究情報部研究情報課（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村）あて、お申し越してください。なお、このほかに財団法人原子力弘済会資料センター（〒319-1195 茨城県那珂郡東海村日本原子力研究所内）で複写による実費頒布をおこなっております。

This report is issued irregularly.

Inquiries about availability of the reports should be addressed to Research Information Division, Department of Intellectual Resources, Japan Atomic Energy Research Institute, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken, 319-1195, Japan.

© Japan Atomic Energy Research Institute, 2005

編集兼発行 日本原子力研究所

公募型研究(計算科学技術ソフトウェア研究開発)総括報告書
(平成9年度～平成14年度)

日本原子力研究所
企画室
計算科学技術推進センター

(2005年8月3日受理)

日本原子力研究所では、公募型研究(計算科学技術ソフトウェア研究開発)を平成9年度より開始し、平成14年度をもって終了した。本報告書は、6年間の本公募型研究制度運用についての総括的報告書として、公募型研究の仕組み、応募状況、実施された研究開発課題の実績、評価結果概要、成果、課題、改善点等を取りまとめたものである。

JAERI-Review 2005-038

Summative Report of the Public Competition Research and Development on
Software for Computational Science and Engineering
in the Fiscal Year 1997 through 2002

Office of Planning
Center for Promotion of Computational Science and Engineering

Japan Atomic Energy Research Institute
Suehiro-cho, Kashiwa-shi, Chiba-ken

(Received August 3, 2005)

Japan Atomic Energy Research Institute started the public competition research and development on software for computational science and engineering in 1997, and closed it in 2002. This report describes the system of the competition research and development, application situations, R & D subjects adopted, evaluation findings, outputs produced, achievements and problems, as a summative report of practice of the system for six years.

Keywords: Competition Research and Development, Computational Science and Engineering, Ex Ante Evaluation, Annual Evaluation and Ex Post Evaluation, Evaluation Findings, Outputs, Special Committee for Evaluation, Evaluation Committee.

目次

1. はじめに	1
2. 公募型研究開発の仕組み	3
2.1 研究開発課題の公募から選定、評価、実施の流れ	3
2.2 研究開発課題の公募について	4
2.3 課題の選定及び評価について	5
2.4 研究評価委員会及び理事会の審議について	7
2.5 研究開発の実施について	9
3. 研究開発の実施実績	10
4. 研究評価の結果について	13
4.1 各年度の評価における総合所見について	13
4.2 一般向け公募研究の課題別評価結果について	21
4.3 若手研究者向け公募研究の課題別評価結果について	26
4.4 特定テーマ公募研究の課題別評価結果について	33
4.5 大学院生向け公募研究の課題別評価結果について	40
5. 公募型研究開発の成果、課題、問題点等のまとめ	50
5.1 本制度としての成果及び意義	50
5.2 本制度による主な成果発表の一覧	51
5.3 本制度による特許出願	52
5.4 制度運用の問題点及び改善点	52
6. おわりに	53
参考-1 平成11年度における応募要領	55
参考-2 平成12年度における応募要領	59
参考-3 計算科学技術ソフトウェア研究開発専門部会の構成 (平成9年度～平成15年度)	66

Contents

1. Introduction	1
2. System of the Competition Research and Development	3
2.1 Flow of the System, from Invitation, Selection, R & D, and to Evaluation	3
2.2 Invitation of Research Subjects to the Public	4
2.3 Evaluation for Selection and Ex Post Research Subjects	5
2.4 Deliberations of the Evaluation Committee and the Executive Board	7
2.5 Implementation of Research Subjects	9
3. Titles of Researches Adopted in the Competition	10
4. Results of Ex Ante and Ex Post Evaluation	13
4.1 Comprehensive Findings of Evaluations for R & D Performances	13
4.2 Evaluation Result of Each Research Subject for the General Invitation	21
4.3 Evaluation Results of Research Subjects for Younger Researcher Invitations	26
4.4 Evaluation Results of Research Subjects for Invitation of Specified Themes	33
4.5 Evaluation Results of Research Subjects for Graduate Students	40
5. Achievements and Problems of the System	50
5.1 Significant Achievements	50
5.2 List of Major Outputs	51
5.3 Patents	52
5.4 Problems and Improvements	52
6. Conclusion	53
Reference-1 Announcement of Call for Research Subjects in 1999	55
Reference-2 Announcement of Call for Research Subjects in 2000	59
Reference-3 Successive Members of Special Committee for Evaluation (Since 1997 to 2003)	66

1. はじめに

日本原子力研究所（以下、原研）は、理論、実験に次ぐ「第3の科学技術」として期待されている“計算科学技術”を総合的に推進するための開かれた研究開発拠点として、平成7年4月に計算科学技術推進センターを発足させ、計算科学技術のための研究開発を組織的に推進するとともに、爾来原研の内外におけるこの分野の次世代を担う、優れた人材の育成に務めている。

計算科学技術ソフトウェア研究開発の公募制度は、計算科学技術ソフトウェアに関する研究開発課題を公募して競争的資金を提供することによって実施して行くものであり、平成9年度から予算が認可されて開始された。

本制度の趣旨は、広く産・学・官から先進的、独創的で、有用性が高く、将来への発展性のある、優れたアイデアを発掘し、計算科学技術研究開発の振興・推進を図ることにある。原則として、研究期間は最大限3年間とし、予算規模は一般向け公募テーマが最大1千万円/件/年、大学院生向け公募テーマが最大180万円/件/年としていた。

平成9年度の初の公募では、対象を（一般）と（大学院生）に区分し、（一般）は、計算科学技術の研究開発を幅広く推進する目的で外部機関から計算科学技術ソフトウェア研究開発の提案を公募するものであり、（大学院生）は、特に大学院生のもつ柔軟な発想と研究能力を生かし、大学院生と指導教官から構成されるグループから計算科学技術ソフトウェア研究開発の提案を公募するものであった。応募は（一般）7件、（大学院生）14件の合計21件であった。評価の結果、採択されたのは、（一般）3件、（大学院生）10件であった。4件が単年度実施で終了した。

平成10年度の公募では、予算上の制約等から大学院生を対象にしたテーマは募集できず、一般の公募のみとなった。応募は11件あり、3件の新規提案が採択され、継続と併せた実施テーマは（一般）5件、（大学院生）7件となった。平成10年度で終了したテーマは4件であった。

平成11年度の公募では、予算上の制約と過去2年間の経験や傾向を踏まえて、対象を（一般）から（若手研究者）とし、（大学院生）については継続して公募することとなった。対象が若手研究者の場合、研究期間については同じ条件で、予算規模の上限を400万円/件/年とした。応募は19件あり、（若手研究者）17件、（大学院生）2件であった。採択は、（若手研究者）5件、（大学院生）1件の合計6件であった。継続分と併せた実施テーマは14件となった。平成11年度で終了したテーマは5件であった。

平成9年度から実施してきた本公募型研究開発は、特定テーマを設定せずに計算科学技術を活用した分野、裾野を広げる役割を果たしてきた。一方、外部情勢として、科学技術振興事業団（JST）において平成10年度から、高速ネッ

トワークを活用した計算科学技術的手法による公募型研究が開始された。このような状況に鑑み、平成12年度の公募から、計算科学技術的手法により顕著な成果が期待されるテーマを特定テーマとして具体的に設定し、国内の関連する分野の研究者を糾合できる公募型研究開発を実施することにより、言わばピーク作りを目指すこととなった。平成12年度は、「マルチスケールアプローチに基づく IASCC (照射誘起応力腐食割れ) 数値予測手法の構築」と「並列分散環境対応の数値ライブラリーの開発」の2つの特定テーマに絞って公募が行われた。特定公募テーマの予算規模は2千万円/件/年とし、研究期間は最大限3事業年度で単年度毎の評価に基づき1事業年度毎に更新することとした。応募は6件あり、5件が採択された。継続分併せた実施テーマは14件であった。平成12年度で終了したテーマは6件であった。

平成13年度には、当初特定テーマとして「たんぱく質構造解析」に関連するテーマを設定して公募する予定で準備が進められたが、関西研量子生命解析グループの立上げ、予算上の制約、外部機関(JST)の公募型研究等の状況を考慮して公募を見送った。そして、文部省と科学技術庁との省庁統合により、この種の公募元は一元化すると文部科学省の指導もあって、平成14年度中の継続テーマ実施終了をもって、本公募研究制度を終了することとなった。

以下の表-1にこれまでの経緯をまとめて示す。

表一 公募型研究：計算科学技術ソフトウェア研究開発の実施推移

年度	応募件数	採択課題数	実施課題総数	予算（百万円）
平成9年度	21	13	13	18.0
一般	(7)	(3)	(3)	
大学院生	(14)	(10)	(10)	
平成10年度	11	3	12	18.0
一般	(11)	(3)	(5)	
大学院生	(公募せず)		(7)	
平成11年度	19	6	14	17.4
一般	(公募せず)		(4)	
若手研究者	(17)	(5)	(5)	
大学院生	(2)	(1)	(5)	
平成12年度	6	5	14	16.2
一般	(公募せず)		(3)	
若手研究者	(公募せず)		(5)	
大学院生	(公募せず)		(1)	
特定テーマ	(6)	(5)	(5)	
平成13年度	(公募せず)		8	16.2
若手研究者			(5)	
特定テーマ			(3)	
平成14年度	(公募せず)		3	16.2
若手研究者				
特定テーマ			(3)	
総合計	57	27	—	102.0

平成9年度から平成14年度にわたって実施してきた本公募型研究の概略の経緯を上述してきた。以下では、公募型研究開発の仕組み、各年度に実施されてきた各研究開発テーマの概要、予算規模、成果、評価等について記述する。

2. 公募型研究開発の仕組み

2.1 研究開発課題の公募から選定、評価、実施の流れ

平成X年を例として課題の公募から選定、評価、実施等の一連の流れを以下の図2-1に示す。

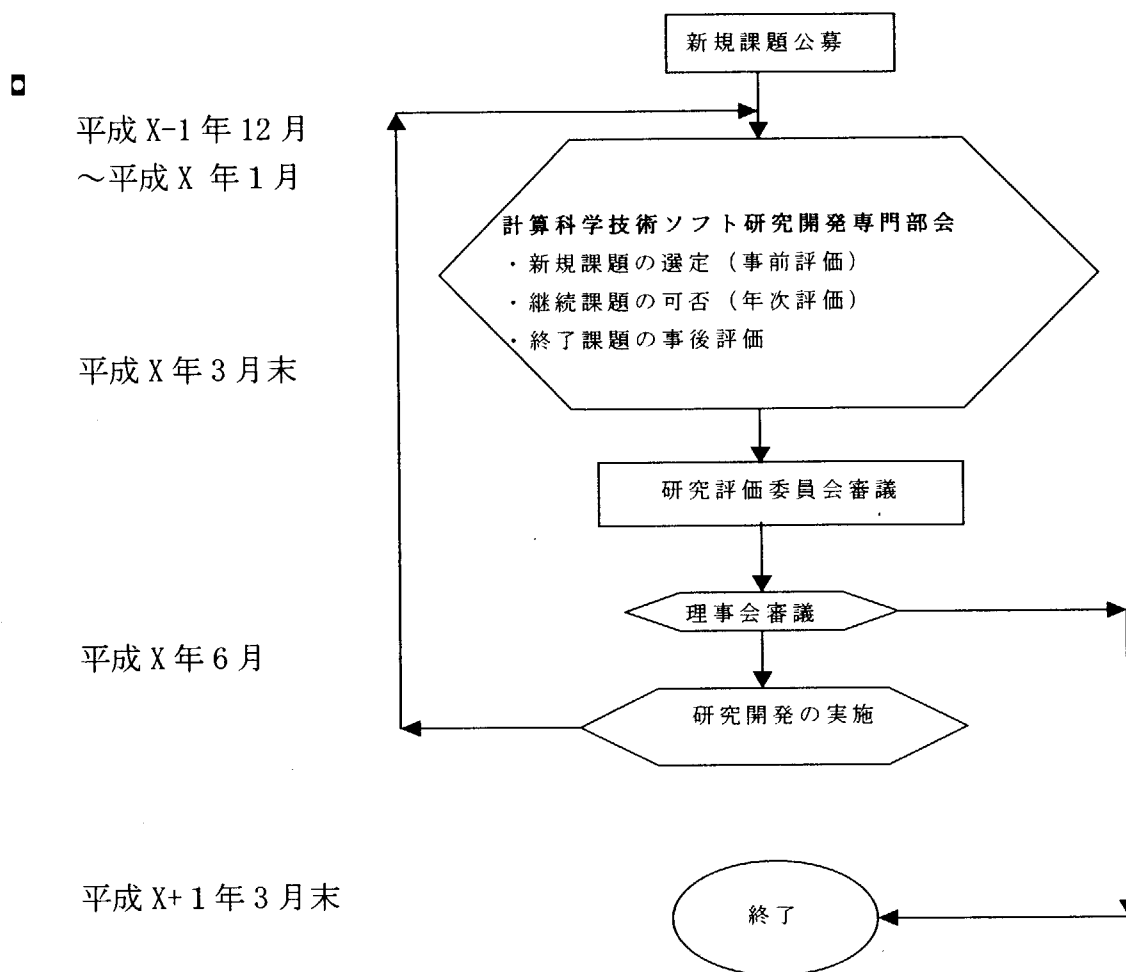


図 2-1 流れ図

2.2 研究開発課題の公募について

例えば平成 X 年度実施予定の新規課題の公募については、通常上図にあるように平成 X 年の 1 月ないしは前年の 12 月に公募を開始する。平成 X 年度計算科学技術ソフトウェア研究開発応募要領を公示するとともに、関連機関や学会に印刷物を配布する。また、学会誌、関連雑誌、ホームページ等を利用して広報活動に務めている。参考として平成 11 年度及び 12 年度の応募要領を巻末の参考-1 及び参考-2 に示す。応募要領には、背景、研究目的、応募資格、対象分野及び領域、選定予定テーマ数、研究の実施方法、成果の取扱い、選考方法、応募方法等を記載している。

2.3 課題の選定及び評価について

2.3.1 課題の選定・評価のための専門部会

(1) 専門部会の目的

計算科学技術ソフトウェア研究開発専門部会は、当該研究開発公募制度に基づいて、平成 X 年度に終了した課題の事後評価及び平成 X+1 年度に継続予定の課題の年次評価並びに平成 X+1 年度からの新規公募研究課題の選考（事前評価）を実施する。

(2) 専門部会の構成

以下の平成 12 年度における専門部会構成に示すように、委員会の規模は外部委員 6 名、原研の内部委員 2 名、部会長を含めて合計 8 名であった。平成 9 年度からの歴代の専門部会構成の推移を巻末の参考-3 に示す。

部会長	矢川 元基	東京大学大学院工学系研究科教授
専門委員	小柳 義夫	東京大学理学部情報科学科教授
	河村 洋	東京理科大学理工学部機械工学科教授
	木寺 詔紀	京都大学理学研究科助教授
	佐藤 三久	技術研究組合新情報処理開発機構超並列研究部 超並列パフォーマンス研究室長
	竹田 辰興	電気通信大学通信学部教授
	秋元 正幸	日本原子力研究所計算科学技術推進センター長
	蕪木 英雄	日本原子力研究所計算科学技術推進センターグループリーダー

2.3.2 評価の方法

(1) 新規課題の選定

1) 評価のプロセス

課題の評価においては、先ず、全委員が応募者から提出された申請書（研究計画書等）を事前に査読し、下記の評価項目及び評価基準により評価を行う。その結果を計算科学技術ソフト研究開発専門部会において討議し、評価をまとめ、課題選考を行う。

2) 評価項目及び評価基準

評価項目は以下の通りである。

- ① 研究開発の目的・目標の妥当性
- ② 研究開発の手法の妥当性
- ③ 研究の先進性及び独創性
- ④ 研究実施体制の妥当性（実現可能性）
- ⑤ 研究スケジュールの妥当性

⑥ 研究の有用性及び波及効果（期待される成果、発展性）

⑦ 総合評価、研究開発課題の採択・不採択

なお、平成 X+1 年度新規公募において「特定公募分野」に対応して応募された研究課題については、その趣旨との整合性を考慮する。

また、評価の基準は以下の通りである。

申請書の事前査読において、上記①～⑦の個別評価項目に対して、3段階評価 [A (極めて良い)、B (普通)、C (不十分)] を行うとともに所見を記す。また、これらを総合して、⑦総合評価においては、2段階評価 [採択、不採択] を行うとともに、所見（研究計画内容の特徴、実施に当たっての提言等）を記す。なお、参考とする点数換算はA（5点）、B（3点）、C（1点）とする。

専門部会においては、上記の各委員の評価結果を総合的に評議し、採択研究課題を選考する。

（2）年次評価（研究開発継続の可否）

1) 評価のプロセス

前記の事後評価と同じ方法とする。

2) 評価項目及び評価基準

評価項目は以下の通りである。

① 研究開発の進捗状況の妥当性

② 研究開発課題の目的・目標、進め方、資源配分等の見直しの必要性

③ 総合評価、研究開発課題の継続の妥当性

また、評価の基準は以下の通りである。

①の評価項目に対して、3段階評価 [A (極めて良い)、B (普通)、C (不十分)]、②の評価項目に対して、2段階評価 [必要なし、必要あり]、③の総合評価に対して、2段階評価 [継続して良い、中止すべき] とともに、所見（研究及び結果の特徴、継続の可否、条件及び提言等）を記す。なお、参考とする点数換算はA（5点）、B（3点）、C（1点）とする。

（3）事後評価（終了課題の評価）

1) 評価のプロセス

研究実施者から提出された報告書（要約）を評価用資料として事前に査読するとともに、“計算科学技術ソフトウェア研究開発報告会”において、研究実施者による発表を聴取して下記の評価項目及び評価基準により評価を行う。報告会後の計算科学技術ソフト研究開発専門部会で総合的な評価のまとめを行う。

2) 評価項目及び評価基準

評価項目は以下の通りである。

- ① 研究開発課題の目的達成度
- ② 研究手法及び進捗の妥当性
- ③ 研究成果の先進性及び独創性
- ④ 研究成果の有用性及び波及効果
- ⑤ 総合評価、将来への研究開発の展開

また、評価の基準は以下の通りである。

上記①～④の個別評価項目に対して、3段階評価[A(極めて良い)、B(普通)、C(不十分)]を行う。また、これらを総合して、⑤総合評価においても同様の3段階評価を行うとともに、所見(研究及び結果の特徴、将来への研究開発の展開の提言等)を記す。なお、参考とする点数換算はA(5点)、B(3点)、C(1点)とする。

2.4 研究評価委員会及び理事会の審議について

2.4.1 研究評価委員会審議について

原研における研究評価では、「国の研究開発全般に共通する評価の実施方法の在り方についての大綱的指針」(平成9年8月 内閣総理大臣決定)及び「国の研究開発評価に関する大綱的指針」(平成13年11月 内閣総理大臣決定)に基づいて、研究所の機関運営及び研究開発課題について自己点検(内部)評価と外部評価を行っている。図2-2に原研における研究評価システム構成の概要を示す。「研究所評価委員会」においては機関評価を行い、「研究評価委員会」においては研究開発課題、研究支援業務課題及び公募型研究開発課題の事前評価、中間評価(年次評価)及び事後評価を行っている。

実際の研究開発評価では、研究評価委員会の下に専門部会を設けて各課題のピアレビューを実施し、評価結果を研究評価委員会が会合を開いて審議することとなっている。公募型研究開発については、専門部会の評価結果報告書を各研究評価委員が査読して意見・コメントを反映させるプロセス(書類審議)を経る。これらの審議を経た評価結果が、研究評価委員会委員長から原研の理事長に答申される。

2.4.2 理事会の審議について

研究評価を受けた研究開発課題については、実施計画を含めて理事会審議を行い、承認された課題について実施の諸手続きが開始される。

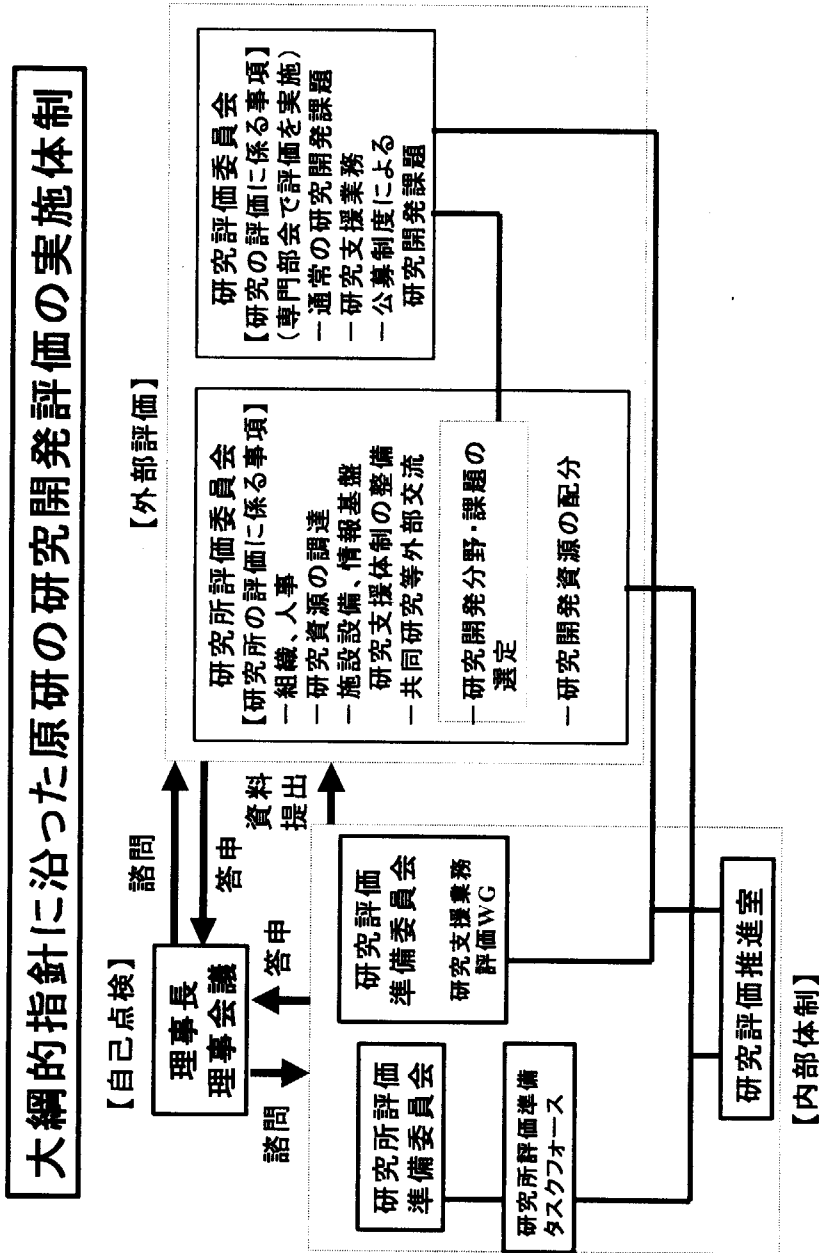


図 2-2 原研における研究評価システムの概要

2.5 研究開発の実施について

実施が認められた研究開発課題については、まず、原研側メンバーと研究開発課題実施者側が協力して、それぞれの課題に対応した研究グループを形成する。次に原研は、研究グループと委託研究契約、または協力研究契約を締結する。委託研究か協力研究かは、研究開発課題実施者側の組織の性質に依存する。原研の規定では、協力研究は大学に限定され、学科の教授と原研の業務課長との間で契約を締結する。具体的には、大学院生向けの公募研究の実施は協力研究契約である。一般向け及び特定テーマ公募研究の実施では、対象が大学、国立試験研究機関、特殊法人、民間企業等に所属する研究者または研究グループであるので、委託研究契約及び協力研究契約の両方があり得る。

研究実施期間は、1事業年度毎の更新で最大限3年間としている。年間の研究開発費用は、一般対象では1課題当たり最高1千万円程度、若手研究者対象では1課題当たり最高400万円程度、大学院生対象では1課題当たり180万円程度、特定テーマでは1課題当たり最高2千万円を限度としている。

研究開発の実施場所は、応募者の所属機関とするが、原研に来て実施することも可としている。施設の利用として、原研の計算科学技術推進センターの複合並列計算機を無償で利用できる。

研究開発実施に関する事務手続きの庶務等は計算科学技術推進センターが担当した。また、研究評価に関する庶務等は企画室研究評価推進室が担当した。

3. 研究開発の実施実績

平成9年度から平成14年度までの実施課題数の推移を以下の表3-1に示す。

表3-1 実施課題数の年度毎の推移

平成 年度	9年度	10年度	11年度	12年度	13年度	14年度
一般	3	5	4	3	—	—
若手研究者	—	—	5	5	5	—
大学院生	10	7	5	1	—	—
特定テーマ	—	—	—	5	3	3

また、研究開発課題は以下のとおりである。

(1) 一般向け公募研究 (6 課題)

表3-2 一般向け公募課題の実施実績一覧

課題名	研究実施者(所属機関)	研究期間
並列版全球大気モデル(NCAR コミュニティモデル)計算結果のファイングリッドへの転換プログラムの開発	丸山康樹 ((財)電力中央研究所)	平成9年度
自動並列化システムの開発	野木達夫 (京都大学 教授)	平成9～10年度
事象駆動型モンテカルロコードなどデータ並列になじまない大規模計算の自動並列化	津田孝夫 (広島大学 教授)	平成9～11年度
CIP法による6次元位相空間ソルバーの開発	矢部 孝 (東京工業大学 教授)	平成10～12年度
全電子第一原理計算プログラムの並列化とその原子吸着シリコン表面の再構築に関する大規模シミュレーションへの適用	川添良幸 (東北大学金属材料研究所 教授)	平成10～12年度
分子シミュレーションにおける並列計算技法の開発と応用	樋渡保秋 (金沢大学 教授)	平成10～12年度

(2) 若手研究者向け公募研究 (5 課題)

表 3-3 若手研究者向け公募課題の実施実績一覧

課題名	研究実施者 (所属機関)	研究期間
密度汎関数法並列化プログラミングによるメゾスコピック系の超高速計算ソフトウェアの開発	武次徹哉 (お茶の水女子大学 助教授)	平成 11~13 年度
第一原理計算と MEM 構造解析を融合した並列処理電子構造解析・可視化システムの構築	田中宏志 (島根大学 助教授)	平成 11~13 年度
非定常乱流の高精度シミュレータの開発	森西洋平 (名古屋工業大学 助教授)	平成 11~13 年度
モンテカルロ及びランジュバン法を用いた並列計算による高温超伝導体の磁氣的相図の探索	菅野量子 (株)日立製作所基礎研究所)	平成 11~13 年度
計算科学ソフトウェアのための WWW アーカイブサイトの実現	山本晋一郎 (愛知県立大学 助教授)	平成 11~13 年度

(3) 特定テーマ公募研究 (5 課題)

表 3-4 特定テーマ公募課題の実施実績一覧

課題名	研究実施者 (所属機関)	研究期間
マルチスケールアプローチに基づく IASCC (照射誘起効力腐食割れ) 数値予測計算手法の構築	内田俊介 (東北大学大学院 教授)	平成 12~14 年度
粒界近傍の原子輸送と変形に関するマルチスケール・シミュレーション	北村隆行 (京都大学 教授)	平成 12 年度
照射誘起偏析・粒界マイクロ組織変化と応力複合効果作用のモデル化による IASCC 挙動予測への計算科学的アプローチ	高橋平七郎 (北海道大学エネルギー先端工学研究センター 教授)	平成 12~14 年度
照射下粒界マイクロ過程のダンベル移動変換モデルとマイクロ磁場逆解析による戦略的解明	関村直人 (東京大学大学院 教授)	平成 12 年度
並列分散環境対応の数値計算ライブラリの開発	萩原一郎 (東京工業大学大学院 教授)	平成 12~14 年度

(4) 大学院生院生向け公募研究 (11 課題)

表 3-5 大学院生向け公募課題の実施実績一覧

課題名	研究実施者 (所属機関)	研究期間
差分可視化ツール WINDIFFS の JAVA 環境上での実現と評価	池谷九美 (お茶の水女子大学)	平成 9 年度
異機種計算機を結合したパーティクル・メタ・スーパーコンピュータ環境の構築	久野章則 (京都大学)	平成 9 年度
並列計算機による角柱まわりの大規模 LES 解析のための流出環境条件の検討	嶋田 哲 (工学院大学)	平成 9 年度
偏微分方程式求解における大規模連立一次方程式に対する前処理及び求解の並列計算法の開発	伊藤洋司 (筑波大学)	平成 9 ~ 11 年度
多自由度系分散相のダイナミックスの並列解析	瀧口智志 (大阪大学)	平成 9 ~ 11 年度
非定型問題における並列計算のための動的負荷分散機構の研究	大内拓実 (東京大学)	平成 9 ~ 10 年度
多次元的な自働領域分割法を用いた適応格子法の並列計算	古山彰一 (北陸先端科学技術大学院大学)	平成 9 ~ 10 年度
分散共有メモリを用いた並列プログラミング支援環境	金山二郎、斉木雅弘 (成蹊大学)	平成 9 ~ 10 年度
ベクトル並列 TreeSPH による銀河形成シミュレーション	河田大介 (茨城大学・東北大学)	平成 9 ~ 11 年度
磁場中成形解析のための異形粒子及びコセラ理論によるシミュレーション	北原治倫 (京都大学)	平成 9 ~ 11 年度
非定常キャビテーション流れの翼列全周解析	沖田浩平 (大阪大学)	平成 11 ~ 12 年度

4. 研究評価の結果について

4.1 各年度の評価における総合所見について

(1) 平成10年度評価における専門部会の総合所見

1) 終了テーマの事後評価

一般向け公募研究で1テーマ、大学院生向け公募研究で3テーマが終了した。総合評価結果はBからCであった。{A(極めて良い)、B(十分良い)、C(中程度、普通)、D(不十分、悪い)の4段階評価}

2) 継続予定テーマの年次評価

一般向け公募研究で2テーマ、大学院生向け公募研究で7テーマの継続を承認した。しかし、大学院生のテーマに対しては、2年目の研究計画を調整・見直して原研が再確認して充実させること、2年目の研究内容・進展によっては3年目に進めないことなどを伝えること。

3) 事前評価(平成10年度実施予定テーマの採択)

財源の事情が許す範囲内で、一般向け公募研究では11の新規応募テーマから総合評価結果の上位3テーマを採択することが望ましい。なお、平成10年度は予算上の制約等から大学院生向け公募研究は募集できなかった。

4) その他の所見

- ・若手研究者を育成するという意味では、大学院生に対する助成より、むしろ専任講師、助教授レベルの若手研究者に対する助成を考えた方が効果的と思われる。
- ・大学院生の中でも修士1年の研究テーマの採択は難しいものがある。修士1年ではまだ研究が何かよく分からない者も多く、今後の大学院生のテーマの採択においてこの点を考慮した方がよい。

(2) 平成11年度評価における専門部会の総合所見

1) 終了テーマの事後評価

一般向け公募研究1課題及び大学院生向け公募研究3課題の総合評価結果はB+、B、C+又はCでありA、Dの評価を受けた課題はなかった。平成10年度で終了した研究課題の内容的な達成度については、いずれの研究もある程度の成果は得られているが、更に第2ステップとして、あるいは実用化に向けての課題が残されており、各研究者において継続、発展させることが期待されている。

2) 継続予定テーマの年次評価

一般向け公募研究4課題及び大学院生向け公募研究4課題の全ての平成11年度継続予定課題の継続を承認する、との評価結果を得た。

昨年度の報告会及び専門部会において、いくつかの(大学院生)の課題

については専門委員から研究計画の見直し等のクレームがつけられたが、平成10年度の研究課題の実施においてこれらの各大学院生はともに頑張った後がみられ、研究が進展したとの今回の評価を得た。また、継続8課題のそれぞれについて専門委員からの提言等が出されたが、これらが研究実施において活用されるよう期待したい。

3) 事前評価(平成11年度実施予定テーマの採択)

専門部会における選考に当たっては、各委員が事前に検討して付けた評価・評点を参考としつつ、新規課題に充当できる予算、基盤技術研究分野の課題の重要性等を含めて検討した。この結果、本研究開発担当部説明の予算の範囲内で、若手研究者向け公募研究については17課題の新規応募課題の中から5課題を採択すること、また(大学院生)については、2課題の新規応募課題の中から1課題を採択すること、との結論に至った。

4) その他の所見

昨年度の専門部会における専門委員の意見・助言に基づき、若手研究者を育成するという趣旨で、平成11年度の公募において新たに(若手研究者)の部門を設け公募を行ったことは応募課題も多く成功であったと思われる。本公募制度は3年度目を迎えているが、現在のところ1課題に充当できる予算は限定されるが、一般及び若手研究者からは応募件数が多くなっている。また、応募要領には研究分野として、基礎研究分野、基盤技術研究分野及び応用研究分野に区分しているが、更に特定領域の課題を重点的に募集対象とするにはもう少し時期を待つべきであろう。

以上のように、平成11年度には8課題を継続とし、6課題を新規に採択することとなった。終了課題の一部も含めて、前述の評価結果の所見に記したように、それぞれの研究開発について専門委員からの研究実施上の提言等が出されている。これらについて本研究開発の運営の中で効果的に実施されるよう特に希望する。

(3) 平成12年度評価における専門部会の総合所見

1) 終了課題の事後評価

本計算科学技術ソフトウェア開発の結果について2,3の総括的所見を述べる。まず、自動並列化は今後の大規模計算プログラムの実装に当たっての重要な課題であるが、津田孝夫氏の研究により、幾つかのデータ集合形態についての取り扱い方策が見出されている。その適用性の実証と実用化に向けて、この分野の研究を進展させることが期待される。

大学院生の研究はいずれも3カ年の研究で、それぞれに特徴のある計算プログラムを開発し、また、特に先駆的な成果を得ているものもある。そ

れらを基本として、更に具体的問題の解析に向けての拡張と実用化への努力を期待したい。

2) 継続予定課題の年次評価

結果として、(一般)3課題(平成10年度開始)、(若手研究者)5課題(平成11年度開始)及び(大学院生)1課題(平成11年度開始)の全てを平成12年度に継続して実施できることとした。

全体として、それぞれの研究年次計画に沿って順調に研究を進展させているといえる。若干の研究課題については、今後の進め方等についての専門委員の提言がある。これらを参考として目標達成への努力を期待する。

3) 事前評価(平成12年度実施予定テーマ)

①全般的な評価結果

特定テーマ1「マルチスケールアプローチに基づく IASCC の数値予測手法の構築」についての5件については、それぞれの研究提案の成果目標については特徴が認められるものの、それぞれの目標とする範囲については、公募要領において期待した IASCC 数値予測手法の全体的目標としたものとはなっていない。このような研究提案の内容を踏まえて、当専門部会としては、研究課題の選定に関して、現実的かつより効果的な対応策を討議した。以下にその討議による結果を記す。

次に、特定テーマ2「並列分散環境対応の数値計算ライブラリの開発」については1件の研究提案も計画内容が十分とは認められないと判断した(総合評価点 3.1)。この研究課題の選定に関しても、上記と同様に現実的かつより効果的な対応策を討議した。

②応募課題の選定に関する討議結果

特定テーマ1 「マルチスケールアプローチに基づく IASCC の数値予測手法の構築」について

前記のように、単独テーマとしては、公募テーマの主旨に沿った IASCC 現象全体を包含する整合性のとれたミクロ、メソ、マクロモデルを提案したものはなかった。当専門部会としては、本来このような調整は主催者である原研があらかじめ行うべきであるという意見も出たものの、IASCC 現象の物理的過程の多岐性により計算科学的アプローチの困難性を再認識すると同時に、この課題の重要性に鑑み、現時点におけるより効果的な研究方策を見出すこととした。その結果、オールジャパン的な能力を結集し問題解決を図る方向として、各応募者の得意とする分野に注目して複数の提案を採択し、まずは、1年間の研究開発として採用することが望ましいとの結論を得た。

原研における IASCC 研究の対象領域は、特定テーマ公募による研究のほか、クロスオーバー研究及び実験的研究がある。このうち、特定テーマ公募による研究の重点は、照射損傷、水化学及び材料力学の3分野のいずれかに置かれている。以下の4研究は総合評価点が高く、かつ上述の3分野のいずれかに含まれているため、これらを採用することとする。また、この4研究提案は、ミクロ、メソ、マクロモデル等において計算科学手法の共通内容があるので、研究の重複を避け、それぞれの提案者の専門性に沿った特徴のある研究に重点を絞ることとする。このように対応することによって、3分野が網羅され、IASCCの数値予測手法の構築が可能となると考える。また、今年度は初年度であるため、実施内容が今後の研究の基礎となる検討が中心となるという観点から、研究予算は均等に割り振るのが適当と判断する。

以上の専門部会の討議により、採用テーマの提案者には、平成12年度実施の研究内容を下記の重点課題として設定することを推奨する。

- 内田 俊介氏 (東北大) ・ 亀裂先端部水質環境評価モデルの構築
・ 応力因子発現モデルの構築
- 北村 隆行氏 (京大) ・ 微視組織を考慮した粒界に沿った原子輸送解析
・ 有限要素法による粒界・界面近傍の変形特性解析
- 高橋 平七郎氏 (北大) ・ 照射下における材料挙動のモデル化
(特に照射誘起粒界構造変化, ミクロ組織変化等)
- 関村 直人氏 (東大) ・ 照射誘起偏析コード
(2次元格子間原子ダンベルの導入, 分子動力学計算による高度化)

特定テーマ2「並列分散環境対応の数値計算ライブラリの開発」について

萩原 一郎氏 (東京工大) の研究提案は公募テーマの方向性、内容を満足しているが、実施内容、進め方についての具体化が不十分であるため、これを策定することが重要と考える。この策定を行うために平成12年度の研究課題として採用することとしその研究成果を次の年次評価において審査し、全体研究計画の妥当性を決定するものとする。

(4) 平成13年度評価における専門部会の総合所見

1) 平成12年度終了課題の事後評価

6 終了課題の内、特に「CIP 法による 6 次元位相空間ソルバーの開発」は、高次元ブラソフ方程式の CIP 法による新しい数値解法を考案し、大規模並列計算に必要なアルゴリズムを検討することにより、プロセッサ数に比例するパフォーマンスを実証している。この成果は、一連の CIP 研究の中で、ユニークな研究成果を加えたもので、非常に有用な結果を得ているとして高い評価を得た。また、「全電子第一原理計算プログラムの並列化とその原子吸着シリコン表面の再構成に関する大規模シミュレーションへの適用」は、電子励起状態において原子ダイナミクスを追跡する方法の開発等とともに、全電子混合基底法プログラムを用いて水素終端シリコン 2×1 表面上の欠陥に関する構造最適化及び全エネルギーの計算を可能とした。この研究実績は、系統的に課題の解決を図り、良く整備された有意義なプログラムを開発し、且つ、マニュアルの整備、成果の公開、発表も優れているとの高い評価を得た。「非定常キャビテーション流れの翼列全周解析」は、大学院生の 2 年間の研究であり、特に 2 年目の努力の成果が得られている。IASCC 数値予測関連の 2 課題については、研究期間が短く、単年度として見るべき進展はあったが、計算科学的手法の適用にまでは至らなかったことはやむを得ない。なお、こうした高い評価を得た研究課題に見られるように、この研究制度により開発された計算プログラムについては、原研として積極的に公開し、普及するための事後措置が望まれる。

2) 平成 11 年度採択若手研究者向け公募研究課題の年次評価

全体としては、それぞれの研究年次計画に沿って順調に研究を進展させ、成果を得ており、当初計画通りに第 3 年次への継続すべきものと判断された。ただし、「計算科学ソフトウェアのための WWW アーカイブ・サイトの実現」については、ソフト開発ツールとしては有用性があると考えられるので、継続に当たっては、アーカイブとしての計画、解析対象とする大規模プログラムをより明確にすべきであるなど再調整すべきとの指摘があった。これに対して、計算科学技術推進センターが該当する適切な C 言語プログラムを研究実施者に提案するなど、当初の目標を達成するための対応策を採ることとして、継続と最終決定した。

以上のように、これら 5 研究課題は平成 13 年度に最終年度となるが、評価項目に示されているように、当初の目標達成とその成果の発表等を目指した研究の進展を期待する。

3) 平成 12 年度採択特定テーマ公募研究課題の年次評価

評価対象の 2 課題については、素過程で成果を得ているが、計算科学的

アプローチについては未着手である。また、もう1課題については、より広い観点から総合的な計画として遂行することが推奨された。したがって、これら3研究課題については、以下の調整を行った上、第2年次以降の研究を継続することとした。

4) その他の所見

以下に、計算科学技術推進センターが提案した関連検討での調整の考え方を記す。

i) 「マルチスケールアプローチに基づく IASCC の数値予測手法の構築」

き裂先端の水化学、結晶粒方位を考慮した応力分布、照射誘起偏析の2次元分布(照射速度効果を含む)等がき裂先端のひずみ速度に及ぼす影響を明らかにし、き裂進展物理モデルのプロトタイプを開発する。すなわち、これらのミクロ的スケールでのき裂進展の素過程物理モデルの作成を公募研究課題の主要達成目標とする。

一方で、原研は、有限要素法によるマクロスケールの大規模数値シミュレーションプログラムを開発し、これに上記のき裂進展素過程物理モデルを考慮することとし、最終的にマルチスケール統合計算プログラムを開発する。この統合プログラムにより、種々のシミュレーションを行うとともに、実験結果との比較を行うことによって、き裂進展物理モデルの高度化を図る。また、計算科学的手法の活用としても、き裂進展に伴うミクロ領域での自動メッシュ生成手法、大規模並列計算手法を導入し、計算速度の高速化を図る。

ii) 「並列分散環境対応の数値計算ライブラリの開発」

共有分散メモリアーキテクチャーに対応し、Open MP+MPI により、PARCEL を最適化することを目指す。すなわち、

①OpenMP+MPI 等により、共有分散メモリアーキテクチャーを持つ計算機に適したライブラリの構築を目指す。

②FFT 以外の残りの連立一次方程式、固有値計算、擬似一様乱数のパッケージについてベクトル演算能力の向上のための修正を行う。

以上のように、原研の提案に基づく研究計画の調整案は、専門部会における各研究課題への継続に当たっての問題提起に適切に対応する方針が明確になったと考える。従って、上記の調整結果を踏まえて、当該3研究課題は第2年次へ継続するものと判断した。

このように原研が参画するトップダウンプロジェクトとして進めるようになったことは評価できるが、これを順調に軌道に乗せるべく、今

後の努力を強く要望する。

(5) 平成 14 年度評価における専門部会の総合所見

1) 年次評価対象研究開発課題の概要と評価結果

年次評価対象課題 3 件のうちの 2 件「マルチスケールアプローチに基づく IASCC (照射誘起応力腐食割れ) 数値予測計算手法の構築」、及び「照射誘起偏析・粒界マイクロ組織変化と応力複合効果作用のモデル化による IASCC 挙動予測への計算科学的アプローチ」については、研究開発の進捗状況はほぼ妥当と評価され、平成 14 年度の課題継続に関しては、一致して継続が妥当と認められた。

年次評価対象課題の他の 1 件「並列分散環境対応の数値計算ライブラリの開発」については、研究開発の進捗状況は、残念ながら、当専門部会の期待に添ったものとはいえず、評価は低いものとならざるを得なかった。平成 14 年度の課題継続に関しては、継続を認める意見が過半数 (5 人、部長一任の 1 人を含む) であったが、中止すべきという意見 (2 人) もあった。当専門部会の総合的な見解としては、課題継続は認め得るが、原研・計算科学技術推進センターの強い指導の下に、研究計画の見直しを行い、評価結果のコメントが反映されることを望む。

2) 事後評価対象研究開発課題の概要と評価結果

事後評価対象課題 5 件のうちの 4 件「密度汎関数法並列化プログラミングによるメゾスコピック系の超高速計算ソフトウェアの開発」、「第一原理計算と MEM 構造解析を融合した並列処理電子構造解析・可視化システムの構築」、「非定常乱流の高精度シミュレーターの開発」、及び「モンテカルロ法及びランジュバン法を用いた並列計算による高温超伝導体の磁気的相図の探索」については、いずれも、研究開発課題の目的達成度は高く、研究の先進性や独創性も認められ、成果の有用性も含めて、高い評価が得られた。特に、上記の 4 番目については、極めて優れた研究として、最も高い評価が得られた。

事後評価対象課題の他の 1 件「計算科学ソフトウェアのための WWW アーカイブ・サイトの実現」については、C 言語プログラムの解析ツールと WWW アーカイブのシステムが、プロトタイプとしては実現されている。ただし、計算科学ソフトウェアを利用の対象とした研究開発としては、満足できるものとはいえない。現実の大規模な計算物理や計算化学のソフトウェアをアーカイブすべきであった。現状では、本プログラムの目的である計算科学ソフトウェアに対する有用性を認めることは難しく、評価が低いものと

ならざるを得なかったことは残念である。

(6) 平成 15 年度評価における専門部会の総合所見

計算ソフト専門部会における今回の評価課題は、それまでとは異なり、研究所側で具体的なテーマを定め、これに対する提案を公募したものである。テーマとしては、ひとつは IASCC (照射誘起応力腐食割れ) であり、もう一つは並列分散環境対応の数値計算ライブラリであった。これは、原研の計算ソフト開発と言うミッションを明確にした点が特徴的であるが、逆に、応募側の問題意識と研究所側の希望とがずれた場合には課題遂行上の問題が大きくなることがある。

IASCC については 4 課題で発足したが、途中 2 課題が中断ということになり、本来 4 課題全体で IASCC の複合的解明を意図したことが一部実現できなかった。また、並列ライブラリについては、応募者の問題意識が委員会側の認識とずれが見られ、低い評価となってしまった。

「マルチスケールアプローチに基づく IASCC (照射誘起応力腐食割れ) 数値予測計算手法の構築」については、亀裂先端部での活性溶解と酸化皮膜の成長・破壊を組み合わせたモデルをつくり、そのシミュレーションによっていくつかの成果を出したことは評価できる。ただしモデルの設定とその評価に多くの労力を費し、計算科学的な側面の進展は今後の課題となった。とくに、この課題では 1 次元のシミュレーションに終わっているが、先端の分岐や立体構造の影響など、より高次元の現象が計算科学によって探求できるのではないかと期待される。

「照射誘起偏析・粒界マイクロ組織変化と応力複合作用のモデル化による IASCC 挙動予測への計算科学的アプローチ」については、原子レベルから、組成・組織変化までマルチスケールでのシミュレーションを行おうとしたことは評価できる。ただ、マイクロに近いレベルでのモデル化に留まっており、本来期待された構造力学までの統合は今後の課題となった。上記課題との連携が望まれる。

「並列分散環境対応の数値計算ライブラリの開発」については、原研で開発した PARCEL を、その後発展した共有分散マシンやベクトル計算機向けに改良した点は評価できる。しかし、代表者等の得意な分野は構造計算など工学的な応用分野であり、数値計算ライブラリを多様なプラットフォーム上で最適化するというような技術は不十分で、結果的に、いくつかの改良と多少の追加に終わってしまった点は残念である。

4.2 一般向け公募研究の課題別評価結果について

表4-2-1 並列版全球大気モデル(NCAR コミュニティモデル)計算結果のファイングリッドへの転換プログラムの開発

実施者氏名、所属、実施期間	丸山康樹 ((財)電力中央研究所) 平成9年度(単年度)
研究開発の概要	大気大循環モデルの計算結果及び日々の気象状況を解析した全球データをファイングリッド上へ変換するプログラムの開発
事前評価(採択理由)	東アジア地区での気象予測データが自由に加工可能となり、大気拡散プログラムの前処理プログラムとして極めて有用性が高い。
事後評価	データ変換ツールとしてのコード開発は十分にその目的を達成した。作成したソフトウェアは所定の機能を有し、マニュアルも整備され、完成度は高い。新規性、独創性は高くないが、実用面では今後の研究を促進して行く上で有用と思われる。 しかし、データを変換することが本来の目的ではないはずで、変換されたデータを今後どのような目的に利用していくのが明確になっていない。今後の原研におけるWSPEEDI 研究のため実用的なシステムを作成した意義は認めるが、技術的には自明な部分が多く、この予算規模のプロジェクトとしては十分とは言えない。

表4-2-2 自動並列化システムの開発

実施者氏名、所属、実施期間	野木達夫 (京都大学 教授) 平成9~10年度(2年間)
研究開発の概要	スーパーコンピューターの新しい高速計算方式である並列処理法について、並列化の自動化という最大の課題に挑戦する。
事前評価(採択理由)	素直な書き方の Fortran ソースコードを自動化することを当面の目標としている。一般 Fortran プログラムの自動並列化はかなり困難とみる。
平成10年度年次評価	計画に沿って進めている。十分な経験をもって体系的に進めている。研究実施者が実現しようと狙っている自動並列化までは前途遠い。研究実施者が期待していること

	が、2年間で全部できるかどうかは不明。研究を継続することは妥当。
事後評価	プログラム仕様を定めたのみで終わった。ある範囲で限られたものでもよいからプロトタイプができていれば良かった。自動並列化は難しい問題であり本研究において多くの問題点は洗い出せた。大きな研究開発のその第一ステップであるとして、今後も自動並列化について努力するようであり、その結果に期待したい。

表4-2-3 事象駆動型モンテカルロコードなどデータ並列になじまない大規模計算の自動並列化

実施者氏名、所属、実施期間	津田孝夫（広島大学 教授）平成9～11年度（3年間）
研究開発の概要	プログラムを解析して、多数の粒子の動きを追跡する過程で必要となる状態を変数群として認識し、これら変数間の相互依存関係を解析することで、並列処理可能な計算部分を抽出する。
事前評価（採択理由）	スーパーコンピュータの新しい高速計算方式である並列処理法の最大の課題である自動並列化について、これは粒子輸送モンテカルロコードでの自動並列化の達成を目指した大きな問題に取り組んでいる。
平成10年度年次評価	計画通り進捗している。解決すべき特化された問題を意識しながら進めている。計画に沿って継続することは妥当と判断する。この分野の研究の現状を十分調査して、他の研究との違いを明確にして、本研究の特色を出してほしい。実用レベルのコンパイラを開発することは非常に重要と思われる。既存の並列化コンパイラに対する優位性を明確化すると研究をアピールする上で良い。アプリケーションの特色を活かした並列化手法の開発も1つのアプローチと思われる。
平成11年度年次評価	継続することは妥当。条件分岐の新しい処理手法を検討している。実用上、地道な努力に期待するので、研究状況、次年度の計画を見直し、オリジナリティのある実質的な成果、到着点が明確に見えるように持って行って欲しい。

事後評価	完全な汎用型自動並列コンパイラの開発が困難とされている現在、かなり広い部分集合を対象とした試作プログラムを開発したことは評価できる。多数の具体的プログラムへの適用によって性能評価を定量的に行う必要があり、今後の研究に期待する。
------	---

表 4-2-4 CIP 法による 6 次元位相空間ソルバーの開発

実施者氏名、所属、実施期間	矢部 孝 (東京工業大学 教授) 平成 10~12 年度 (3 年間)
研究開発の概要	フォッカープランク、ボルツマンなどの 6 次元位相空間計算ソルバーを計算格子数が非常に少なく済む CIP 法を用いて実現し、輻射輸送、銀河形成、希薄流体、プラズマに応用する。超粒子モデルと同程度のメモリーで、より高精度で高速の計算法を開発する。
事前評価 (採択理由)	CIP 法で位相空間に grid をつくろうとする方法であり、簡単な方程式で大規模なシミュレーションが可能である。応募者は CIP 法の提唱者として世界的に著名であり、実績、能力から成果が必ず期待できる。
平成 11 年度年次評価	継続することは妥当。計画通り順調に研究が進行し、新しい結果 (6 次元計算) が出つつあり、継続するのに十分な成果を残していると思われる。今後予定しているボルツマン型の衝突項の高速計算も期待できる。
平成 12 年度年次評価	継続することは妥当。 研究計画に従って順調に目標を達成しつつある。今後、具体的な応用の結果が期待される。
事後評価	一連の CIP 研究に成果を加えたもので、非常に有用な結果が出ている。ユニークな研究である。クラスタ上で実用的な計算を行ったことは評価できる。専門プロセッサによる積分とクラスタの結合も興味深い。ボルツマン方程式の方向は、特に興味のある応用が可能になりそうである。現状の粒子法の開発と並行して、新しいアプローチの開発が必要である。適用分野の拡大に期待したい。

表4-2-5 全電子第一原理計算プログラムの並列化とその原子吸着シリコン表面の再構築に関する大規模シミュレーションへの適用

実施者氏名、所属、 実施期間	川添良幸（東北大学金属材料研究所 教授）平成10～12年度（3年間）
研究開発の概要	種々の金属原子を多数シリコン表面に吸着させたときの最安定構造を第一原理計算法及びタイトバインディング法を用いて決定し、得られた安定性や電子状態及び伝導性から原子レベルで制御されたナノスケール電子デバイスの特性を材料物性的に解明する。
事前評価（採択理由）	ナノスケール電子デバイス要素特性を実験以前に予測することを可能とするシミュレーション技術であり、工業的な応用が期待される。応募者は既にこの分野で成果を上げており、実績から成果が期待できる。
平成11年度年次評価	継続することは妥当。計画がしっかりし、計画通り順調に研究が行われている。モデルに関してオリジナルな研究が進められ、計算科学らしい成果が得られている。今後、並列化についての評価をしっかり行って欲しい。
平成12年度年次評価	継続することは妥当。今年度はプログラムの最適化とユーザーインターフェース整備を目標とし、これらを達成し、成果を挙げている。最終目標であるシミュレーションへの適用を大いに期待している。
事後評価	よく整理された形で研究が進められ、成果を得ている。ユーザー・インターフェースを含め、よくまとめられたコードである。プログラム開発という点でも有意義である。マニュアルの整備、成果の公開もよくされており、成果の発表数も多い。専門部会での説明も良かった。今後はさらに、例題集などで、わかりやすさを補助する工夫をするとともに、プログラムの普及について支援すべきである。また、精度を含めて独自性を持ち得るよう、今後の応用、特にMDの方向を期待したい。

表4-2-6 分子シミュレーションにおける並列計算技法の開発と応用

実施者氏名、所属、 実施期間	樋渡保秋（金沢大学 教授）平成10～12年度（3年間）
研究開発の概要	分子シミュレーション分野における並列計算技法の研究開発を行う。炭素原子系（気体）からの分子生成（成長）、メッキ等の膜の成長、合金系における脆性破壊等の分子機構の解明のためのソフトウェアの開発及び分子シミュレーションの3D可視化ソフトウェアの開発を行う。
事前評価（採択理由）	現実の事象に対応する非平衡/非一様な系を対象としたシミュレーションを行うものであり、工学的にも大きな示唆を与えるものと思われる。応募者は日本の分子シミュレーション研究の草分けで、十分な経験と能力有しており、分子シミュレーション用の統合ソフトウェアへの発展が期待できる。
平成11年度年次評価	継続することは妥当。一部の並列化に関する研究は遅れぎみであるが全体としては順調に進んでいる。並列化については継続して検討すべき。
平成12年度年次評価	継続することは妥当。MD計算の並列化、高圧下セレン構造転移シミュレーション及びMEAMポテンシャルの有効性の確認という3つの目標について成果を得ている。成果の発表も順調である。
事後評価	種々の興味深い問題を扱っており、手法開発の意義はある。並列計算分野の成果としては、その有用性が明らかにされており、明確である。分子シミュレーションの幅広いテーマについて並列化を試みた点は評価される。但し、計算手法については必ずしも先進的であるとはいえない面もある。また独創性にいまひとつ物足りなさを感じるところもある。もう少し一般化されるとともに、チャレンジングな方向も目指して欲しい。このコードによる物理的な成果に期待したい。応用可能性の考え方が不明なところがある。また、例題は良いが、並列化の実験結果が少なく、目的達成度が不明である。

4.3 若手研究者向け公募研究の課題別評価結果について

表4-3-1 密度汎関数法並列化プログラミングによるメゾスコピック系の超高速計算ソフトウェアの開発

実施者氏名、所属、 実施期間	武次徹哉（お茶の水女子大学 助教授）平成11～13年度 (3年間)
研究開発の概要	メゾスコピック系をターゲットとした密度汎関数法並列化プログラミングによる超高速計算ソフトウェアを開発する。われわれが提案した単純かつ物理的正当性の高い新しい相関汎関数を組み込み、さらに線形スケールリングおよび超高速積分計算アルゴリズムにより計算の高速化を図る。
事前評価(採択理由)	新しい相関汎関数の開発は計算科学研究として重要であり、ベースになるソフトは既に開発済と推定され、世界的にみても一級のグループによる成果が期待される。このプログラムを用いた具体的ターゲットの設定を明確にする必要がある。
平成12年度年次評価	継続することは妥当。理論的組み立てがしっかりと検討し、問題箇所の解決策を得ている。順調に進展していると認められる。今後の並列化の検討が望まれる。
平成13年度年次評価	継続することは妥当。原理的なレベルの研究は計画どおり進んでいるがプログラムの高速化はまだ十分でないようである。まずはソフトウェアの開発を待って次の段階に進むことも必要である。並列化するプラットフォームの記述がないが、OpenMPは適当か。DFプログラムのOpenMP並列化による効果として高速化を期待する。
事後評価	メゾスコピック系をターゲットとした超高速ソフトウェア開発のために、その前提となる理論についての研究を進め、活性エネルギーの過小評価などの問題点を解決し、先進性と独創性のある新しい交換汎関数を開発し、また、OpenMPやMPIでの並列化による高速化に取り組んでおり、密度汎関数法のプログラムとしては開発目的が達成されていると評価できる。ただし、並列ソフトウェアの性能評価はまだ十分とはいえず、数百原子の系がどこまで扱えるようになったかは明確でない。今後、並列処理の評価及びチューニングについてさらに検討を進めるとともに、メゾスコピック系の実例を増やすことを期待し

	たい。本プログラムは、東京大学で開発中の分子軌道計算プログラムシステムに組み込むことが計画されており、本成果のフォローアップとして望ましい方向と考えられ、今後の展開に期待したい。
--	---

表 4-3-2 第一原理計算と MEM 構造解析を融合した並列処理電子構造解析・可視化システムの構築

実施者氏名、所属、実施期間	田中宏志（島根大学 助教授）平成 11～13 年度(3 年間)
研究開発の概要	第一原理電子構造計算を MEM 構造解析と融合することで、理論と実験の両面から新素材の電子構造を解析し可視化するシステムを構築する。開発するシステムでは、並列処理を行うことで、タンパク質などに代表される巨大な系においても高精度の解析を可能にする。
事前評価(採択理由)	大規模シミュレーション結果と実験結果を融合させて構造解析を行うシステムの研究で新規性がある興味深い。このシステムを用いて計算する具体的ターゲットの設定が必要である。
平成 12 年度年次評価	継続することは妥当。実験と計算を結合させるシステム化の試みという開発指向の研究である。今後は両手法の分解能の違いを考慮した物質サイズのモデリング限界、FLAPW 法との結合方法を明確にすべきである。
平成 13 年度年次評価	継続することは妥当。計画どおり進捗している。成果のプロダクティビリティも高く、計算科学らしい分かりやすい成果が得られている。MEM 解析への展開は、アモルファス系も含めて期待される。但し、第 1 原理計算と MEM の結合の可視化等、並列化の手法が記されていない等、目的が明確でないところがある。また並列化の手法の記述も見当たらない。2つの 2 CPU の場合、同じシステムの 2 CPU とは違う。システムの 2 CPU の違い、加速率の予測値との関係を示すべきである。結合したプログラムを具体的系により性能評価した結果も報告することが望ましい。
事後評価	MEM 構造解析、第一原理計算、可視化、データインターフェイス等を統合したプログラムが開発されたことは評価

	<p>できる。基本的な手法は独創的とはいえないが、全解析プロセスの統合を試みたところに先進性がある。プログラムの一部 (ENIGMA) が、研究・教育の目的で公開され利用に供されており、成果の有用性は認められる。なお、第一原理と MEM をともに扱えるツールの開発としては評価できるが、両者の融合とまではいえず、第一原理計算を構造解析にフィードバックするような手法が今後望まれる。挑戦的な研究をさらに期待したい。MEM の高速化は有用であるが、並列化について直接フーリエ変換と高速フーリエ変換の自動選択などの工夫が望まれる。</p>
--	--

表 4-3-3 非定常乱流の高精度シミュレータの開発

実施者氏名、所属、実施期間	森西洋平(名古屋工業大学 助教授)平成 11~13 年度(3 年間)
研究開発の概要	<p>まず申請者が最近提案した自乗量保存形の高次精度差分を用いて非圧縮性乱流に対する DNS 及び LES の汎用コードを開発する。</p> <p>次に B スプライン法を用いて圧縮性壁乱流の DNS コードを開発する。また圧縮性壁乱流に対する新たなデータベースも作成する。</p>
事前評価(採択理由)	申請者が開発した自乗量保存形の高次精度差分を用いて非圧縮性乱流に対する DNS、LES の汎用コードを作成するもので、独創性、有用性はある、また研究計画も十分であると思われる。一般曲線座標系への拡張により汎用性も増す。
平成 12 年度年次評価	継続することは妥当。DNS シミュレータの性能に及ぼす差分次数依存性を調べるなど、基礎固めを着実に進めた。今後に期待する。

平成 13 年度年次評価	継続することは妥当。この分野では多くのソフトが開発されているが、他の研究者、既存コード機能への配慮を行うべきである。また高次精度差分法による結果と従来法による開発コードの差異を明確化すべきである。いずれにせよ、十分な効果があげられているので、一般ユーザーからの使いやすい入出力部分の作成を行うこと等、トランスファーするようにしたい。また並列化等の高性能化は必要ないだろうか。
事後評価	圧縮性及び非圧縮性乱流並びに様々な境界条件に対応するコード体系をそれぞれ吟味して開発できたことで、コード開発の目的は達成している。当初計画以上の成果も得られており、進捗にも優れている。高次精度、圧縮性流体への適用に新しい進展が認められ、境界適合座標系や LES 等、応用的にも有用な成果が得られている。この高次精度スキームの適用範囲については詳しい分析が望まれる。なお、実際のシミュレーションでは、乱流場に加えて種々の場の連成も考慮する必要がある、より汎用性を実現できる基盤的な方法論の開拓が望まれる。また、当初目的のシミュレーターの開発という観点からは、広範なユーザーが利用しやすい形に統一的な整備のなされることが望まれる。

表 4-3-4 モンテカルロ及びランジュバン法を用いた並列計算による高温超伝導体の磁氣的相図の探索

実施者氏名、所属、 実施期間	菅野量子 (株)日立製作所基礎研究所 平成 11~13 年度(3 年間)
研究開発の概要	Lawrence-Doniach モデルを基に、モンテ・カルロ及び、ランジュバン・シミュレーションを行い、種々の乱れによる磁束のピン止め機構、磁束系の静的及び動的状態を系統的に調べる。実験との比較・検討より、 J_c 向上のためのピン止め中心の種類、分布、応用可能磁場領域特定する指針を得る。

事前評価(採択理由)	並列計算への配慮も明示され、具体的研究計画のもとにプロジェクト性もしっかりしている。ピン止め機構における3次元的效果の研究として意味があり、センター実施の研究との比較の観点からも考えられる。他の提案に抜きんでて良い。
平成 12 年度年次評価	継続することは妥当。 研究計画に従い、並列化法を重点的に検討するとともに、物理的現象シミュレーションでも成果を挙げた。今後のダイナミクス計算面での進捗に期待する。
平成 13 年度年次評価	継続することは妥当。大筋において着実な成果が出ているが、昨年来の進行がそれまでの成果と比べ、順調でない部分もあるようだ。プログラムに時間がかかったようで、今後期待したい。特にランジュバン法による磁束ダイナミクス解析には期待が持てる。但し、U系のCompendなどd電子系の実験データが整備されつつあり、必ずしも高温超伝導体の磁気相図が適切なターゲットとは思えない面もある。どの程度の規模のシステムまで取り扱えるのかも明確にすべきである。また研究成果のとりまとめにも力を入れて欲しい。
事後評価	高温超伝導の磁氣的相図の解析という点でも、並列処理の分析という点でも、設定された目標に対して着実に成果を上げており、目的は十分達成したと評価される。Lawrence-Doniach モデルによるモンテカルロ法、ランジュバン法の並列化も十分に実施され、手法及び進捗とも妥当であり、3年間で大きな飛躍を遂げている。物理的にも計算手法の点でも、独創性、先見性が認められる。極めて優秀な研究であり、物理的内容は、今後のこの分野への貢献が期待される。開発された並列プログラムは、他の分野のシミュレーションにも有効であると考えられる。また、超伝導のみに限らず、連成場問題になりつつある物性研究の応用にも期待したい。プログラムの公開と多くのユーザーによる多方面への応用を期待する。

表4-3-5 計算科学ソフトウェアのためのWWWアーカイブ・サイトの実現

実施者氏名、所属、実施期間	山本晋一郎(愛知県立大学 助教授)平成11~13年度(3年間)
研究開発の概要	C言語とJavaで書かれたソフトウェアを詳細に解析した結果を公開するwwwアーカイブ・サイトの実現技術と、そのために必要となる・10万行規模のソフトウェアを効率的に依存解析するための技術を確立し、研究者自身による計算科学ソフトウェアの修正・改良を支援する。
事前評価(採択理由)	この種の研究は計算科学の発展にと言うよりは、実現されるとソフトウェア利用者に非常に有用で、波及効果は大きい。解析対象の大規模な計算科学プログラムの選択に注意し、理論解析を含めユーザーに有益な結果を出してもらいたい。
平成12年度年次評価	継続することは妥当。現実的観点からは有用性のあるシステムの開発であることは理解できる。但し、その計算科学的な基礎事項の検討を重要視して欲しい。また、最終的に計算科学ソフトウェアによる実証を目標とすることを強く推奨する。
平成13年度年次評価	継続することは妥当。一応計画どおり進捗している。しかし本計画をこの研究プロジェクト内で行う意義が分からない。実際の開発例とも結びつけるべきである。公開されたものを見ないと、このプロジェクトの成果のレベルは評価できない。問題はどの程度広くソフトを勧められるかである。また、解析内容を改善するために、実際にどれだけ役に立つかを評価する客観的な基準が必要である。次年度の研究開始前に解析を予定しているソフトウェアについての報告があってもいいのではないか。
事後評価	C言語プログラムの解析ツールとWWWアーカイブのシステムは、プロトタイプとしては実現されており、WWWブラウザ上でのソースプログラムの参照・検索機能も作成されている。研究手法には斬新な点もあり、ソフトウェア工学的なツールとしての独創性も感じられる。ただし、計算科学ソフトウェアを利用の対象とした研究開発としては、不満足である。TEXやUNIXを例に挙げているが、これらは計算科学ソフトウェアと呼ぶべきかどうか疑問である。現実の大規模な計算物理や計算化学のソフトウェアをアーカイブすべきであった。現状では、本プログラ

	<p>ムの目的である計算科学ソフトウェアに対する有用性を認めることは難しい。このようなソフトウェア開発をする場合、情報分野の中だけで議論するのではなく、異種分野（特に応用分野）の研究者との交流が必要である。</p>
--	---

4.4 特定テーマ公募研究の課題別評価結果について

表 4-4-1 マルチスケールアプローチに基づく IASCC(照射誘起効力腐食割れ) 数値予測計算手法の構築

実施者氏名、所属、 実施期間	内田俊介（東北大学大学院 教授）平成 12～14 年度（3 年間）
研究開発の概要	IASCCIASCC の発生、進展の理論評価シナリオに基づく数値シミュレーションモデル、特に亀裂先端部水質評価、照射誘起応力因子発現モデルを作成し、IASCCIASCC 発生、進展を予測可能として、経年炉の予防保全計画作成と IASCCIASCC 関連の重要実験項目の絞込みに資する。
事前評価(採択理由)	<p>基本的にはマクロの経験則を統合し、IASCC 現象の全体像を捉えようとするアプローチである。特に亀裂先端部の水化学環境評価のモデリングを重視していることが特長である。</p> <p>このアプローチによる大規模計算でどこまでの現実の説明、予測が可能となるか見通しが必ずしもはっきりしない。</p>
平成 13 年度年次評価	<p>継続することは妥当。水環境を中心に研究が進んでいる。全体としてマルチスケール手法をどのように確立するかを明確にすべきである。位置依存性を取り入れる手法を開発するとともに、微分方程式の時間積分等の数値的手法については、専門家と連携して行うべきである。また、モデルを精密化するために、マイクロな解析結果との連携が必要である。</p> <p>最終年度までのターゲットを明確にしたい。経験則による予測が Blind Test をクリアできるかを最終年度に行うべきである。</p>

平成14年度年次評価	<p>継続することは妥当。従来のラジオリシスモデルを一步進める試みであり、また、亀裂進展へ結合させる方向性が出てきたのも評価できる。マイクロモデルに関しては十分な検討がなされており、応力腐食割れモデルを1次元の亀裂に適用した点は順調に進捗している。ただし、マイクロな解析モデルと材質・組織とを結合するモデルには至っておらず、2次元的な広がり、亀裂が枝分かれした場合などの分析も必要である。マルチスケールに向けた課題の整理を行うべきである。計算科学というほどの複雑なシステムを扱っておらず、複雑現象としての分析が望まれる。応力とのつながりをどうするのかも明らかにすべきである。原研等の他の IASCC 研究グループとの連携による研究の進展を期待する。</p>
事後評価	<p>腐食という非常に複雑な現象に対して、亀裂先端部での活性溶解と酸化皮膜の成長・破壊を組み合わせたモデルを作り、これのシミュレーションによっていくつかの現象を解明したこと、及び従来モデルとは異なる新たな機構の提案が出来たことは評価できる。いくつかの条件下での解析と現象の考察、プログラムの開発等、良く進捗していると評価できる。ただし、先進的な計算科学の手法としての観点からは十分とは言い難い。独創性の面では、モデルを構築して腐食割れの諸現象を予言できたことは評価できる。現行のままで IASCC を議論することは難しいが、研究炉における実験データとの比較検討には利用できる。波及効果については、ここで用いた系と異なる場合、果たして正しい予測を与え得るかどうかの確証が欲しい。今後、亀裂進展について、照射因子、応力因子、環境因子の総合的モデル化と、それをコンピュータ・シミュレーションによるマルチスケールな分析に期待する。大規模計算科学プロジェクトを成功裏に終了した様子は理解できるが、大規模計算で何が可能になるかの検討がほしい。</p>

表 4-4-2 粒界近傍の原子輸送と変形に関するマルチスケール・シミュレーション

実施者氏名、所属、実施期間	北村隆行（京都大学 教授）平成 12 年度(単年度)
研究開発の概要	IASCC 機構の基礎となる結晶粒界近傍における原子輸送機構について、マルチスケールモデリングに基づく数値シミュレーション手法を開発する。これを用いて、原子の移動による粒界における偏析や界面近傍の変形特性に関する基礎的知見を得る。
事前評価(採択理由)	結晶粒界近傍に限定して原子の移動と応力・変形現象をモデリングする本格的なマルチスケール・シミュレーションの提案である。この点で方法的に明快である。照射の効果を含んでいないために IASCC にどのように迫るかは見通せない。
事後評価	結果は興味深く、部分的なテーマとしては成果を出したと言える。短い期間ではあったが、多結晶体の応力解析に新しい知見を得た点が評価される。有限要素法を改良すれば、より面白い研究になったはずである。しかし、報告内容は従来研究の延長であり、この中から計算方法の独創性を見出すのは困難である。今後はこれらを統合して普遍化する方法の提案も必要であろう。

表 4-4-3 照射誘起偏析・粒界マイクロ組織変化と応力複合効果作用のモデル化による IASCC 挙動予測への計算科学的アプローチ

実施者氏名、所属、実施期間	高橋平七郎（北海道大学エネルギー先端工学研究センター教授）平成 12～14 年度(3 年間)
研究開発の概要	IASCC の主因と考えられる粒界偏析、応力負荷効果、結晶粒界構造効果、クラック生成・伝播の要素過程について現象を解明しモデルを提案する。拡散過程を中心とする照射効果モデルの枠組みに要素モデルを組み込み統合的な計算機シミュレーションを可能にする。統合計算と検証・較正実験との最適な組み合わせによって、現象の定量予測評価への足掛かりを得、実現に向けた方法論を確立し知識基盤を形成する。

事前評価（採択理由）	各基礎的プロセスの要素モデルを統合化するマルチスケールシミュレーションを目指しており、方法論的に極めて妥当である。提案者は照射効果の研究の実績もあり、照射損傷プロセスモデルに重点があることが特長である。
平成 13 年度年次評価	継続することは妥当。粒界における照射励起偏析に対する実験と計算の詳細な比較を行っており、アプローチとしては適当である。しかしながら、計算科学プロジェクトとして未消化なところがある。大規模計算という計算科学的手法を活用すべきである。最終的には IASCC の評価と関連してターゲットを明確にする必要がある。FEM との結合について、より詳しい考察が必要である。x 依存性を入れたモデルは作成できないだろうか。また、弾性解析とマイクロ組織変化予測との統合を行う方法論や、粒子シミュレーションと巨視的モデルとの間及び中間視的なものの方法論、応力場解析と結晶・転位解析との連携によるより具体的なナノスケール解析等が見過ごされている。その結果として得られる成果を明確化することで、初めて計算科学と呼び得るものである。
平成 14 年度年次評価	継続することは妥当。大規模な分子動力学によりマイクロな組織の振る舞いを解析していることは評価できる。ただし、Ni の粒界からの逆偏析など、粒界構造に関わるマイクロ事象に関しては考察が進んでいるものの、静的解析などが定量的にどの程度有効なのかは、まだ疑問が残る。残り 1 年で、絶対値としての応力値の物理的意味と、複合効果に関する検討を進めることを期待する。自由エネルギー最小の静的な分析と、かなり高温でのシミュレーションを両方やっているが、両者の関係を明確にし、照射との定量的関係、温度の効果などについて、より統合的な解析を展開することを望む。これまで行ってきた照射誘起偏析速度式と粒界近傍での腐食・酸化速度式との結合、大規模連続体解析モデルへの適合性の検討へ一歩踏み出すことを期待する。原研や東北大学・内田グループ（課題 No. 12-1）等の IASCC 研究グループとの連携による研究の進展を期待する。
事後評価	照射下における材料挙動を、原子レベルからマイクロ組成・組織変化まで異なるスケールで追求するモデルを構築し、

	<p>これをマルチスケールアプローチを現実的なレベルにおいて実現し、実際のシミュレーションで実証したことは評価できる。ただし、「数理モデル」というよりも「経験的モデル」であり統合的な予測システムとしては未完成である。手法としては、現状では、多くの経験則を導入しており、それらの一般性から考え、中間的な段階であるといわざるを得ない。十分に応用に耐える方法論に成熟するにはさらに方法論を精密化する必要があると思われる。特に先進性はないが、粒界偏析シミュレーションは有効であり、今後の展開がまたれる。波及効果については、個別には一定の成果が得られており、今後、さらに統合化して発展させれば、貢献が期待できる。その際、FEMモデル等、大規模計算の可能性についての検討がほしい。将来、内田プロジェクトと結合して、クラック先端部での腐食進展を、水側と金属側との両方から実規模で分析しうる総合システムが期待される。</p>
--	--

表4-4-4 照射下粒界マイクロ過程のダンベル移動変換モデルとマイクロ磁場逆解析による戦略的解明

実施者氏名、所属、実施期間	関村直人（東京大学大学院 教授）平成12年度(単年度)
研究開発の概要	<p>(1) 照射下の粒界マイクロ過程を格子間原子ダンベルの移動変換に基づいたモデルを検討し、2次元のコードとして開発する。また、結晶粒界ごく近傍の分子動力学計算によって、コードの高度化をはかる。</p> <p>(2) 磁気力顕微鏡によって測定されるマイクロ磁場の逆問題解析に基づいて、材料マイクロ変化過程と亀裂の生成と進展をSCC挙動に結びつけ、維持基準等へつなげるモデルの基盤を形成する。</p>
事前評価(採択理由)	<p>原子論的マイクロ過程とマクロ磁場過程のモデリングとその結合によるシミュレーションに重点をおいている。前者については独特な原子移動物理モデルを拡張すること、後者については実験的手法をも含めていることが特長である。最終的には材料検査手法として工学的な問題解決に繋がることを窺わせている。</p>

事後評価	<p>1年間の研究の成果としてはほぼ妥当であると思われる。エンジニアリング的なまとめ方をしており、適当である。今後は、原研内全体で、このようなまとめ方を議論しておく必要がある。しかし、MDによるマイクロな研究は入っておらず、2次元、3次元モデルが未完である。また、計画の設定が不明確であり、従来研究結果との比較に終始している。さらに、ここでのレート方程式のアプローチがマイクロなクラックモデルにどのように結合されていくか、具体的な取り組みが欲しかった。今後はメゾスコピックなレベルのモデル構築を期待したい。</p>
------	---

表4-4-5 並列分散環境対応の数値計算ライブラリの開発

実施者氏名、所属、実施期間	萩原一郎（東京工業大学大学院 教授）平成12～14年度（3年間）
研究開発の概要	<p>PARCELを、分散ベクトル並列機、分散共有ベクトル並列機、マルチスレッド機などについて、性能評価を行い、アーキテクチャ依存並列数値ライブラリの実設計指針を提言すると共に最も定評のあるパッケージに置き換え、上述の実設計指針のもとに、アーキテクチャ依存並列数値ライブラリとして新たに実装する。</p>
事前評価(採択理由)	<p>基本的には既存の手法を組み合わせる方向でのライブラリの実開発であり、独創性が薄い。地球シミュレータ対応数値計算ライブラリとして期待がある。原研開発のPARCELの現状を打破する方向ではあるが、性能評価手法、適用の範囲など、実施計画として十分詰められていない感がある。</p>

平成 13 年度年次評価	<p>継続することは妥当。1年間の研究成果としては進捗が少ないと見られる。現在あるベクトル化に限定しただけでは不十分である。新規性・発展性が見えない。これからの計算機に対する最適化・適応についての方針についてもあいまいである。FET だけに集中するより、並行的に開発した方が良かった。VPP, SX に特化した研究だけでいいのか。現状の計算機システムを解法毎に最適化するよりも、ライブラリー全体としての理想設計を行った上で、最適化のための要点を明らかにすべきであろう。自動最適化の手法も取り入れた方が良い。より効率的なアプローチをするため、対象とする計算機環境の今後の動向等を含め、原研の PARCEL 開発グループ等と協議の上、ターゲットを見直しながら開発を進めることが望ましい。</p>
平成 14 年度年次評価	<p>研究開発の進捗状況は、残念ながら、本専門部会の期待に添ったものとはいえない。初年度からの進展は見られたが、並列分散環境対応の数値計算ライブラリーというには不十分な成果である。特定のプラットフォームの上での高速性を追求するのか、多少速度は遅くても多くのプラットフォームの上で動く汎用のものを開発するのか、趣旨がはっきりしない。Open MP/MPI の比較に SGI Origin を用いるなど、実験の評価に疑問がある。結果を見るかぎり、Open MP の採用が特別優れているとは思われない。並列分散環境を、SGI だけでなく多くの機種や構成で分析すべきであり、また、他の同種ライブラリー等との比較、性能評価の詳細解析も行うべきである。アーキテクチャを分類し、その特徴をしっかりと踏まえた上で、できる限り広く適用可能なアルゴリズムの基本方針の提案を行うことを望む。継続する場合には、一般的な手法の提案をするのか、特定の計算機を対象に開発を行うかについて、焦点を絞り目的を明確化して、研究体制及び研究計画を見直すことが必要である。</p> <p>平成 14 年度の課題継続についての見解は、継続 4 人、部会長一任 1 人、中止 2 人であった。</p>
事後評価	<p>既に原研で開発された PARCEL を、分散共有システムやベクトル機などより広いプラットフォームで利用できるよう</p>

	<p>に改良した点は評価できる。並列分散メモリ計算機用に開発されたライブラリを、分散共有メモリ計算機にも対応できるように改良したことは評価できる。各種アルゴリズムを並列化することで分散対応のライブラリー化をはかろうとした。一定の成果、特に Lanczos 法の大型問題への展開など、ライブラリー化の上での示唆を提示している。アルゴリズム等の手法での先進性は無いので、実際の問題、計算環境等における性能評価をより充実してほしかった。また、情報分野等で得られている研究成果の調査等が不足していると思われる。命令言語以上に計算機のアーキテクチャを積極的に考慮したものとなっていない点に不満が残り、先進性・独創性があまりあるようには思えない。</p>
--	---

4.5 大学院生向け公募研究の課題別評価結果について

表4-5-1 差分可視化ツール WINDIFFS の JAVA 環境上での実現と評価

実施者氏名、所属、 実施期間	池谷九美（お茶の水女子大学）平成9年度(単年度)
研究開発の概要	差分可視化ツール WINDIFFS を JAVA 環境上で実現させ、評価することを目標とする。
事前評価(採択理由)	インターネットを介して遠隔地からでも、スーパーコンピュータ用プログラムが視覚的に自在に編集可能となる。
事後評価	Tcl/Tk で書かれた WINDIFFS を JAVA 言語により書き換え、動くものを完成した。1,800 千円の予算規模で、かつ修士の学生としては研究成果はOKであった。ツールとしての有用性は認められる。

表4-5-2 異機種計算機を結合したバーチャル・メタ・スーパーコンピュータ環境の構築

実施者氏名、所属、 実施期間	久野章則（京都大学）平成9年度(単年度)
研究開発の概要	多様なネットワーク結合された並列マシンを活用して、一つのジョブを効率よく処理するシステムを構築する。
事前評価(採択理由)	1つのプログラムを2つ以上の異機種スーパーコンピュ

	一タで同時分担計算可能となるようにしようというもので、実現すれば画期的である。
事後評価	<p>目標の設定は妥当であり、目標は一応達成された。アイデアとしては単純であるが、使いやすいインターフェースを作成したことに意義がある。ヘテロジニアス・コンピューティングは計算機資源を有効に活用できるものと期待されるので、今後広範な分野での研究の展開が望まれる。</p> <p>センターにおけるSTAプロジェクトの中で行われている研究との切り分けが明確でなく、本研究自身の有用性は評価できないが、デモで見える限り今後STAの中で使用されていく可能性があるようなので、発展性は期待できる。</p>

表4-5-3 並列計算機による角柱まわりの大規模 LES 解析のための流出環境条件の検討

実施者氏名、所属、実施期間	嶋田 哲 (工学院大学) 平成9年度(単年度)
研究開発の概要	大規模 LES 解析の効率化を図る目的で、より小さい領域でも計算精度を確保できる流出境界条件を検討する。
事前評価(採択理由)	ビル風などの流体騒音の問題が単純化される可能性があると同時に一般的な大規模渦流解析にも有用である。
事後評価	当初設定した目標は一応達成している。LES は今後、乱流 CFD の実用化にとって重要な手法で、その際、適切な流出条件の設定は環境問題等の解析に不可欠であり、大学院生レベルの一年間の成果としては、高く評価できる。計算手法の原理のみならず、詳細な手法が広く利用されることが望まれる。

表4-5-4 偏微分方程式求解における大規模連立一次方程式に対する前処理及び求解の並列計算法の開発

実施者氏名、所属、 実施期間	伊藤洋司（筑波大学）平成9～11年度（3年間）
研究開発の概要	周期境界条件を課した問題を離散化したときに得られる連立一次方程式の求解において、分散メモリ型の計算機を用いて効率よく前処理を行うプログラムを開発する。具体的には、周期境界要素に対する前処理を施した上で、不完全コレスキー分解前処理をCPU数に応じてブロック化してデータ参照を簡素化し、並列性を高める。
事前評価(採択理由)	スーパーコンピュータ用の新しい高速計算方式である並列計算法のための計算ライブラリの一つとして期待できる。
平成10年度年次評価	継続することは妥当。2年目以降の研究計画の見直しが必要。前処理に現れる回帰参照の並列は、ブロック化前処理を適用し、その効果も評価している。本年度の研究では、不完全コレスキー分解のブロック化を用いた並列化を行っているが新規性が高いと言えない。今後、独創性、新規性のある研究にして行くよう工夫してほしい。アルゴリズムの工夫、対称問題における拡散係数の場所による変動の検討、ブロック化による並列効果の検討等。
平成11年度年次評価	継続することは妥当。昨年度の年次評価においてオリジナリティが少ない等ということで本研究に対しクレームをつけた。平成10年度は大変研究が進展した。SMW-ICCG法を考案してプログラムを作成し、評価の結果、その有効性を確かめている。今後の並列化の研究が期待される。
事後評価	逆行列の適用法において独自のアイデアを用いたことは評価できる。但し、具体的な問題を設定して、実用的な性能評価を行う必要がある。

表4-5-5 多自由度系分散相のダイナミックスの並列解析

実施者氏名、所属、 実施期間	瀧口智志（大阪大学）平成9～11年度（3年間）
研究開発の概要	固体粒子など離散的に存在する相と流体など連続的に存在する相が混在して運動する混相流動状態での非線形相相互作用を表現する数値解法を開発する。
事前評価（採択理由）	燃焼、混相流問題の新しい並列計算法が期待されると同時に多分野への適用可能となる画期的なものである。
平成10年度年次評価	継続することは妥当。目標は非常によいが、必ずしも研究計画に沿って進められておらず、今後、研究計画の見直しが必要である。SGSモデルを構築するため必要なアルゴリズムの研究はこの1年間相当に進展しており、達成された研究結果は評価できる。新しいモデルの提案を行っている。実行されたシミュレーション例も興味深いものである。
平成11年度年次評価	継続することは妥当。昨年度のコメントをそれなりに反映して、並列処理、分散相解析について一応計画通り進んでいて、今後の発展につなげ得ると思われる。研究手順を良く考え、目標の成果を得られるよう努力していただきたい。
事後評価	問題例の解析に関する限り当初の目標は達成している。モデルでの粒子数の限度など計算科学的新規性を他の計算方法との比較においてより定量的に把握する必要がある。

表 4-5-6 非定型問題における並列計算のための動的負荷分散機構の研究

実施者氏名、所属、 実施期間	大内拓実（東京大学）平成9～10年度（2年間）
研究開発の概要	計算の進行に従って順次計算量を見積もり、それに基づいて実行途中の適切な負荷分散を行う動的な負荷分散の手法を実現する。
事前評価（採択理由）	並列計算の効率が飛躍的に向上するため、大規模計算が高速に処理できる期待がある。
平成10年度年次評価	継続することは妥当。計画通り進捗している。大規模問題での評価を次のステップで実施する予定であり、計画通り進めるべきと判断。3種の負荷分散手法の評価を行っているが、逐次処理（最適化したもの）に対する各手法による並列処理の効果、手法間の優劣の評価法等について今後検討してほしい。
事後評価	初期の目的に合った方向で研究が行われ、分散管理／タスク要求方式が動的負荷分散手法となりうることを示している。オーバーヘッド等の評価にやや不十分なところも見られるが、成果は上がっている。大学院生としては小ざれいにまとまっていた。対象課題について基礎的データを得たので、実用的問題への発展を今後の課題として欲しい。

表 4-5-7 多次元的な自働領域分割法を用いた適応格子法の並列計算

実施者氏名、所属、 実施期間	古山彰一（北陸先端科学技術大学院大学）平成 9～10 年 度（2 年間）
研究開発の概要	圧縮型流体の計算において、並列計算機の各演算装置の 計算負荷とそれら装置間の通信量が最小となるよう自動 的に領域を分割する手法を開発する。
事前評価（採択理由）	格子生成は流体解析計算では、必要不可欠な前処理であ り、本テーマはそれを解法に応じて自在に適用可能とす るものである。
平成 10 年度年次評価	継続することは妥当。計画的に着実に進捗している。2 次元の動的な自働領域分割法をもう少し一般的な方法で できるよう考えて貰うとよい。例えば、今回の圧縮性流 体解析のように解が分かっているものでなく、分からな い物理現象にも適用可能な自働領域分割法を考えてほし い。領域間のデータの交換の効果を検討することが望ま れる。負荷分散についてさらに工夫が必要。
事後評価	非粘性圧縮性流体を対象とする適応格子法に対する自動 領域分割手法による動的負荷分散の有効性を示し、一応 目的は達成した。大学院生の一年強の研究成果としては 評価できる。再分割の指標・式の妥当性の吟味は十分で はないので、今後の課題である。詳しいアルゴリズムを 論文として発表すべきであろう。

表 4-5-8 分散共有メモリを用いた並列プログラミング支援環境

実施者氏名、所属、 実施期間	金山二郎、斉木雅弘（成蹊大学）平成9～10年度（2年間）
研究開発の概要	安価なパソコン複数台をネットワークで結合し、これに適合する並列モデルとプログラミング言語を開発する。このシステムで応用プログラムを実行して並列処理性能を評価する。
事前評価（採択理由）	複数パソコンで並列計算を意図する。実現すれば、個人で複数パソコンをつないで、大規模計算を並列化できる。
平成10年度年次評価	継続することは妥当。達成した成果が見えにくいだが着実に進展しており、研究実施内容も豊富であると思われる。計画が2年としては、欲張り過ぎている。センターが次年度の研究計画、実施内容を再確認した上で継続するのが適切。100 base ether の次に Myrinet での評価を行うとあるが、今年度予算で購入した 100 base ether の有効利用を考えながら、クラスタシステムの改良を行ってほしい。
事後評価	応用プログラムが単純すぎるが、開発ソフトの評価を行い基礎データを得ている。オリジナリティの面で不十分などころ、当初の目標に合う成果が出ていないところがある。この手法の多くのUNIXシステムへの移植は可能であろう。実用上は種々の検討すべき課題が残されている。

表4-5-9 ベクトル並列 TreeSPH による銀河形成シミュレーション

実施者氏名、所属、実施期間	河田大介 (茨城大学・東北大学) 平成9～11年度(3年間)
研究開発の概要	銀河形成のシミュレーションの結果と観測データを比較できる汎用性のあるプログラムを作成し、インターフェースを画像表示可能とする。
事前評価(採択理由)	銀河形成計算の新しい汎用コード開発が狙い。観測データと理論の比較が容易になる。
平成10年度年次評価	継続することは妥当。研究計画にある並列化の研究が行われていない。研究計画を見直し、センターが後年の計画を確認してから進める必要がある。来年度は無理のない研究計画を立て、並列化もしっかり行ってほしい。2年目の研究内容によっては3年目に進ませられない可能性がある。物理モデルの作成はよいが、計算面の分析が不十分である。本公募は計算科学技術のソフトウェアの研究開発であるので、並列化など計算科学技術面の視点も意識に入れ研究を進めてほしい。シミュレーションの結果と天文観測データを比較することは面白い。ベクトル化並列化の評価分析をすべきである。
平成11年度年次評価	継続することは妥当。重力多体系に特徴的な計算について並列化の試みを適切に行っている。並列コードが開発されているので、このコードを用いた研究が来年度に期待できる。今後の観測との比較が期待される。
事後評価	既存の手法をシミュレーション手法として統合し、天体観測結果とシミュレーション結果を直接比較できるプログラムを開発し、着実な成果を上げた。実際に得られた計算結果は極めて興味深いものであった。今後は通常の流体系の適用に期待する。

表4-5-10 磁場中成形解析のための異形粒子及びコセラ理論によるシミュレーション

実施者氏名、所属、 実施期間	北原治倫（京都大学）平成9～11年度（3年間）
研究開発の概要	球体ではない異形粒子の磁場中での磁化、粒子間作用力、粒子回転などをモデル化し、その挙動を3次元で解析して粒子からなる粉体の物理現象を定量的に解明する手法を開発する。
事前評価（採択理由）	磁場中の粉体解析は磁気テープ製造など工業上非常に期待されている。
平成10年度年次評価	継続することは妥当。計画通り進捗していると思われるので、次年度以降の成果に期待したい。大きさをもった磁性粒子相互の作用があり、計算量は膨大となる上に、粒子が相互に力を及ぼすので、並列化が難しい問題である。これについて深く考察すべき。土木分野では、砂利の相互衝突などの文献があると思われるので、今後の研究に当たっては、文献をよく調べるとよい。並列化に当たっては領域分割でもいけそうではあるが、色々よく考えて工夫してほしい。
平成11年度年次評価	継続することは妥当。具体的な物質生成プロセスについて現実的な場合と比較できるような計算を行っており、計画進展状況も適当である。並列計算など、計算科学的側面を今後含めて頂きたい。コセラ理論を用いたシミュレーションの並列化も検討されると良いと思う。
事後評価	粉体挙動の解析法としてミクロ的、マクロ的な両手法による大規模計算を実現した。この分野の先駆的な研究成果といえる。今後も並列化手法の適用を含めて展開することを大いに期待する。

表4-5-11 非定常キャビテーション流れの翼列全周解析

実施者氏名、所属、 実施期間	沖田浩平（大阪大学）平成11～12年度（2年間）
研究開発の概要	非定常キャビテーションに関して、低マッハ数近似型の気液二相流の数値解析法、準平衡気泡運動モデルを確率し、圧力方程式の並列化高速解法と、翼列ピッチごとの並列化による翼列全周解析を実現し、旋回キャビテーションなど新たな翼列キャビテーション問題を解析する手法を構築する。
事前評価（採択理由）	キャビテーション現象の3次元的研究の進展が期待される。大学院3年目としてある程度の成果を得ており、比較的分かり易い複合モデルの研究で計画自体概ね妥当と思われる。
平成12年度年次評価	継続することは妥当。3次元非定常問題に取り組んでおり、成果も得つつある。今後は計算科学的側面の考察を期待する。
事後評価	全体として良好に進展していると思われる。並列化を実現したことは評価できる。但し、研究がオーソドックス過ぎるところもある。解法の独自性がどこまでであるのか不明であるが、より新規性、発展性のある研究が欲しい。また、モデル化が中途半端である。根本的な物理モデルからのアプローチが欲しかった。これから実用化に向けて努力して欲しい。

5. 公募型研究開発の成果、課題、問題点等のまとめ

5.1 本制度としての成果及び意義

平成9年度から平成14年度まで続けられた計算科学技術ソフトウェア研究開発公募制度は、原研の研究への寄与のみならず広範な大学、企業研究者への計算科学の浸透、普及、活性化の点で有意義であったと認められる。質の高い計算科学技術の研究やソフトウェア作成がなされており、研究連携の意味でも特に大学関係者との繋がりが、ITBL計画にも寄与した面がある。以下に代表的な成果と意義を箇条書きにして列挙する。

- (1) 本公募型研究開発制度によって開発された以下のソフトウェアは、原研のプログラム等審査会の審議を経て、一般プログラムとして採用登録され、原研の成果として広く公開の利用に供されている。
- ・登録番号 10011106 IMR-MXB (全電子混合基底法によるIMR第一原理計算プログラム)
 - ・登録番号 10011107 CAVITATIONBLADE(軸流ポンプにおける非定常キャビテーション流れの3次元計算)
 - ・登録番号 10021136 ENIGMA(並列処理MEM構造解析プログラム)
 - ・登録番号 10021137 DFINTEGRA(超高速積分アルゴリズム実装密度汎用関数法並列プログラム)
 - ・登録番号 10021138 NVLES0402(非圧縮性平面壁乱流のLESシミュレーション)
 - ・登録番号 10021139 CMPTEXP(圧縮性平面壁乱流のシミュレーション)
 - ・登録番号 10021140 CMP(非圧縮性平面壁乱流のシミュレーション)
 - ・登録番号 FORCING8 (非圧縮性一様乱流のシミュレーション)
- (2) 課題「“第一原理計算とMEM構造解析を融合した並列処理電子構造解析・可視化システムの構築” 田中宏志(島根大学 助教授)平成11~13年度」については、開発した物質構造の精密解析方法、プログラム、システム及び物質の製造方法の特許登録申請が出され、特許として公開された。本テーマの成果によって、X線回折データ、中性子線回折データをもとに、分子量が2000~3000以上の蛋白質等の物質構造を精密に解析する方法、プログラム、システム及び物質の製造方法等に関する有効な技術が一般に公開され広く利用できることとなった。
- (3) 課題「“全電子第一原理計算プログラムの並列化とその原子吸着シリコン表面の再構築に関する大規模シミュレーションへの適用” 川添良幸(東北大学金属材料研究所 教授)平成10~12年度」については、完成度の高いプログラムとして企業による実用ソフトウェアとして製品化の見通

しが得られている。

- (4) 課題「“モンテカルロ及びランジュバン法を用いた並列計算による高温超伝導体の磁気相図の探索”菅野量子(㈱日立製作所基礎研究所)平成11~13年度」、課題「“非定常乱流の高精度シミュレーションの開発”森西洋平(名古屋大学 助教授)平成11~13年度」、課題「“マルチスケールアプローチに基づく IASCC(照射誘起応力腐食割れ)数値予測計算手法の構築”内田俊介(東北大学大学院 教授)平成12~14年度」の派生発展研究が原研との協力研究及び共同研究として継続された。
- (5) 各課題についての事前評価、年次評価、事後評価等は計算科学技術ソフトウェア研究開発専門部会により毎年実施されるとともに計算科学技術推進センターのソフトウェア研究開発報告会として関係者の情報交流の場ともなった。これらの公募型研究開発制度での大学、企業の研究者との協力研究、共同研究を通じての繋がりは、ITBL の立上げ、ITBL 共同研究の開始にも貢献している。
- (6) 平成15年度の日本原子力学会奨励賞には「マルチスケールアプローチに基づく IASCC(照射誘起応力腐食割れ)数値予測計算法の構築」(東北大学 佐藤智徳)が選ばれた。原子力プラントの信頼性向上のためには、応力腐食割れ(SCC)に対する適切な対応策が必要である。特に放射線照射下では、き裂内での放射線エネルギー吸収量が大きく、き裂先端部での腐食環境を評価するためには、き裂内での放射線分解生成種の直接湧き出しを考慮した水化学解析が必須となる。本研究では、(a)き裂内での分解生成種の湧き出し、及び(b)き裂内面との相互作用による分解生成種の生成、消失の影響を取り入れたクレビスラジオリシスモデルを作成し、き裂内部、特にき裂先端部での酸化性分解生成種濃度を定量化した。これにより、照射下では ppb レベル以上の H_2O_2 が残存し、SCC 評価においては、き裂先端の酸化種濃度評価が不可欠であることを示したことが高く評価された。
- (7) 平成15年度の日本原子力学会計算科学技術部会奨励賞には「照射誘起偏析・粒界マイクロ組織変化と応力複合効果作用のモデル化による IASCC 挙動予測への計算科学的アプローチ」(北海道大学 坂口紀史)が選ばれた。

5.2 本制度による主な成果発表の一覧

- (1) “Absolute total energy of small copper clusters in an all-electron mixed-basis approach with the generalized-gradient approximation”, K. Shiga, K. Ohno, Y. Kawazoe, R. T. Fu, Y. Maruyama, J. Mat. Res.,

- Vol. 14, p980 (1999)
- (2) “Cubic Interpolated Propagation Scheme for Solving the Hyper-Dimensional Vlasov-Poisson Equation in Phase Space”, T. Nakamura, T. Yabe, Comp. Phys. Commun., Vol. 120, p122 (1999)
 - (3) “Parameter-Free Exchange Functional”, T. Tsuneda, K. Hirao, Phys. Rev. B, Vol. 62, p15527 (2000)
 - (4) “ENIGMA:MEM Program Package for Huge Systems”, H. Tanaka et al., J. Appl. Crystallogr., Vol. 35, p282 (2002)
 - (5) “Current-Driven Vortex State in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_8$ with columnar Defects”, R. Sugano et al., Phys. Rev. B 60, p9732 (1999)
 - (6) “A New DNS Algorithm for Rotating Homogeneous Decaying Turbulence”, Y. Morinishi et al., Int’l J. of Heat and Fluid Flow, Vol. 22 p30 (2001)
 - (7) “Crevice Chemistry under Gamma-ray Irradiation”, T. Satoh, K. Furukawa, K. Iinuma, Y. Satoh and S. Uchida, J. Nucl. Sci. Technol., Vol. 38, p733 (2001)
 - (8) “Atomistic Dynamical Observation of Grain boundary Structural Changes under Electron Irradiation”, N. Sakaguchi, H. Kinoshita and H. Takahashi, J. Nucl. Mat., 307-311 (2002) 1003-1006

5.3 本制度による特許出願

- (1) ”物質構造の精密構造解析方法、プログラム、システム及び物質の製造方法” 田中 宏志、坂田 誠、高田 昌樹、西堀 英治、原田 仁平、中川 敦史(以上島根大学) 大谷 孝之(原研)、特願平 13-376969 (平成13年12月11日)、特開 2003-177106(平成15年6月27日)

5.4 制度運用の問題点及び改善点

冒頭にも述べたように、本制度の趣旨は、広く産・学・官から先進的、独創的で、有用性が高く、将来への発展性のある、優れたアイデアを発掘し、計算科学技術研究開発の振興・推進を図ることにある。例えば、特徴あるプログラムを開発し非常に先駆的な成果をあげた大学院生も少なからずいた。しかしながら若手研究者を効果的に育成するという観点、及び質の高い研究開発の振興・推進という全般的な観点等から、助成対象を当初「大学院生」に限定していた部門を、専任講師、助教授レベルに焦点を当てた「若手研究者」部門に切り替える改善を行っている。また、国の予算を使う制約上、原子力における特定領域の喫緊の課題を重点的に解決することも求められており、平成12年度

から設置した「特定テーマ」部門については、年度ごとに行う個別課題間のきめ細かな調整や、原研が直接参画する共同開発体制によって、5.1 成果及び意義の(6)及び(7)に示すように多くの実りある成果が生み出された。さらに、この制度の運用を通じて、大学関係者などと研究交流の機会ができ、それがきっかけで、その後の研究協力の幅が広がったのは、大きな波及効果であった。これは逆に、予算の制約があっても、このような制度が大きな波及効果をもつようにできる工夫のひとつとして、研究コミュニティのきめ細かなグループづくりを第一目的にした研究交流会の開催などを実施して行くことは、本制度の趣旨にとってさらに効果的なことである。

6. おわりに

平成9年度に原研が開始した「計算科学技術ソフトウェア研究開発」の公募制度は、この種の公募元は科学技術振興事業団(現在の科学技術振興機構：JST)に一元化すると文部科学省の方針を受け平成14年度に終了するまでの6年間において、①一般向け公募研究 6課題、②若手向け公募研究 5課題、③特定テーマ公募研究 5課題、④大学院生向け公募課題 11課題を終了した。

今では、「計算科学技術」というものが、理論、実験に次ぐ「第3の科学技術」として大変重要な役割を果たすことは、世の中に大分浸透してきたが、上記公募制度を開始した時点では、まだまだそのような状況にはなかった。この意味で、「広く産・学・官から先進的、独創的で、有用性が高く、将来への発展性のある優れたアイデアを発掘し、計算科学技術研究開発の振興・推進を図る」という趣旨の本制度の発足は、大変時宜を得たものであった。

しかし、計算科学技術ソフトウェアの研究開発というものは、対象とする物理現象について理論や実験に立脚した高度な理解があつてはじめて有効なモデル化を行うことができ、かつ、それを解析するプログラムが効率的に動作し、他のユーザーにもわかり易く使いやすいものに仕上げていくためには、非常に広範な知識と経験および多くの試行錯誤を必要とする。そのうえ、そこに先進性と独創性のある計算科学的手法の適用と、さらに有用性を要求した本制度は、非常に高度な目標を掲げたものであったと言えるだろう。

さて、実際の結果は、各年度ごとの終了テーマの事後評価に記載されているように、個別の研究開発課題において重要な成果が数多く得られた。また、公募制度の仕組み・運用面において、貴重な知見も得られた。特に、後者は、ソフトウェアの研究開発に関するこのような制度の運用そのものがひとつの新しい試みであった点を考えると、意義のある結果である。

なお、このような制度全体の本来の効果を評価するには、もう数年間の実施経験が必要だったかもしれない。いずれにせよ、本制度の運用は、今日に反映

される一定の具体的成果を生み出し、制度運用側にとっても示唆深い貴重な経験であったと言えるであろう。

平成11年度における応募要領

参考-1

平成11年度
計算科学技術ソフトウェア研究開発の募集のご案内Visitor count **000482** since 1998.12.15平成10年12月15日
日本原子力研究所計算科学技術推進センター**1. 背景**

計算科学技術推進センターは、理論、実験に次ぐ「第3の科学技術」として期待が高まっている計算科学技術を総合的に推進するための期かれた研究開発拠点として、21世紀を展望した先端的な研究開発の推進と次代を担う優れた人材の育成を目的に掲げ、平成7年度設立以来、幅広い活動を展開しております。現在、並列計算機の性能向上に対応し、これを最大限に発揮させるためのソフトウェアの向上に寄与することを目標として、並列処理のための基盤技術の研究開発及びそれに関連した応用研究、基礎研究を積極的に推進することとしております。

2. 研究目的

計算科学技術ソフトウェア研究開発は、公募制の導入により、優れたアイデアを発掘し、産・官・学の研究交流を通じて、この分野において先進的、独創的で、有用性が高く、将来への発展性のある研究開発を推進しようとするものです。

本制度は、目的、1テーマ当たりの予算額、応募資格等によって計算科学技術ソフトウェア研究開発(一般)、同(若手研究者)及び同(大学院生)とに区分けされております。このうち(一般)では、計算科学技術の研究開発を幅広く推進する目的で外部機関から計算科学技術ソフトウェア研究開発の提案を公募するものです。また(若手研究者)では、若手研究者の活発な研究開発の意欲と能力及び柔軟な発想を活かし計算科学技術の研究開発を推進する目的で若手研究者から計算科学技術ソフトウェア研究開発の提案を公募するものです。さらに(大学院生)では、特に大学院生のもつ柔軟な発想と研究能力を主とし大学院生から計算科学技術ソフトウェア研究開発の提案を公募するものです。なお、本制度は発足3年目を迎えることとなりますが、平成10年度は(一般)は5件が、また(大学院生)は7件が実施されました。

3. 応募資格**(1) 計算科学技術ソフトウェア研究開発(一般)**

大学、国立試験研究機関、特殊法人、民間企業等に所属する研究者の方または研究者のグループであれば、応募いただけます。

応募に際しては、あらかじめ所属長(または所属機関)の了解をお取りください。

(2) 計算科学技術ソフトウェア研究開発(若手研究者)

大学、国立試験研究機関、特殊法人、民間企業等に所属する研究者の方(但し、原則として平成11年4月1日現在で37歳以下の研究者(昭和36年4月2日以後に生まれた者)またはそれらの研究者のグループであれば、応募いただけます。但し、契約当事者については、協議させていただきます。

応募に際しては、あらかじめ所属長(または所属機関)の了解をお取りください。

(3) 計算科学技術ソフトウェア研究開発(大学院生)

大学院生または大学院生のグループであれば、応募いただけます。但し、契約当事者については、協議させていただきます。

応募に際しては、あらかじめ所属長(または所属大学)の了解をお取りください。

(注)平成11年度は、後述するとおり(一般)については公募しません。

4. 対象分野及び領域**(1) 基礎研究分野**

オペレーティングシステム、アルゴリズムとデータ構造、プログラミング言語、コンピュータアーキテクチャ

(2) 基盤技術研究分野

基本ソフトウェア、並列計算法、並列処理支援技術

(3) 応用研究分野

地球環境、流体、材料物性、複雑系非線形現象、計算物理学、計算化学、計算生物学、構造

5. 平成11年度選定テーマ数

- (1)計算科学技術ソフトウェア研究開発(一般)
本制度の全体の計画としては対象分野及び領域は上記「4. 対象分野及び領域」のとおりですが、平成11年度は、(一般)については公募しません。
- (2)計算科学技術ソフトウェア研究開発(若手研究者)
本制度の全体の計画としては対象分野及び領域は上記「4. 対象分野及び領域」のとおりですが、平成11年度は、それらのうち、基盤技術研究分野及び応用研究分野について、あわせて3テーマ程度の提案を公募します。
- (3)計算科学技術ソフトウェア研究開発(大学院生)
本制度の全体の計画としては対象分野及び領域は上記「4. 対象分野及び領域」のとおりですが、平成11年度は、それらのうち、基盤技術研究分野及び応用研究分野について、あわせて3テーマ程度の提案を公募します。
- 本公募は平成11年度予算の成立を前提としております。
上記応募テーマの参考事例として平成10年度実施テーマの一覧を添付します。また、応募テーマについて不明の点があれば日本原子力研究所に問い合わせして下さい。

6. 実施方法

- (1)研究体制
研究計画応募者が中心となってテーマごとに研究グループをつくり、研究に係わる事務手続きの庶務等は日本原子力研究所計算科学技術推進センターが担当します。
- (2)研究評価委員会及び計算ソフト専門部会
日本原子力研究所が設置する研究評価委員会及び計算ソフト専門部会が、以下「(9) 報告・評価」及び「8. 選考方法」に述べるとおり、応募のあったテーマについて選考、評価等を行います。
- (3)研究期間
研究期間は、1事業年度毎の評価に基づく更新とし最大限3年間とします。
- (4)研究予算
- 計算科学技術ソフトウェア研究開発(一般)
原則として1テーマ年間最大約1千万円でテーマの内容等により決定します。
 - 計算科学技術ソフトウェア研究開発(若手研究者)
原則として1テーマ年間最大約400万円でテーマの内容等により決定します。
 - 計算科学技術ソフトウェア研究開発(大学院生)
原則として1テーマ年間最大約150万円でテーマの内容等により決定します。
- (5)契約方式
別途協議します。
- (6)研究実施場所
原則として応募者の所属機関で実施していただきます。
- (7)施設の利用
計算科学技術推進センターの複合並列計算機システムを無料で利用できます。
- (8)報告・評価
選定されたテーマに関しては、進捗状況、成果等について、年次及び最終報告書を提出し、研究評価委員会及び計算ソフト専門部会の評価を受けていただきます。
- (9)その他
研究内容、方向性や進捗状況などに関し適宜、計算科学技術推進センターと打ち合わせながら研究開発を進めていただきます。

7. 成果の取扱い

本研究開発に伴いソフトウェアの特許権、著作権等の知的財産権が発生した場合は、原則として日本原子力研究所が定める規程に従っていただきますが、日本原子力研究所との協議により決定します。(詳細は日本原子力研究所に問い合わせして下さい。)

8. 選考方法

研究評価委員会及び計算ソフト専門部会が、審査を実施します。選考に当たっては、特にテーマの先進性、独自性、有用性、発展性といった観点から審査します。(一般)の場合には、応募者の研究開発実績も考慮に入れます。

9. 応募方法

(1) 応募期間等

下記提出書類に必要事項を明記の上、平成11年2月19日(金)までに送付してください。郵送で応募申込みをする場合は書留で郵送してください。期限当日の消印があれば有効とします。なお、応募の秘密は厳守します。

応募テーマは、4月中を目途に選考する予定です。

(2) 提出書類

以下の書類を提出してください。当研究所指定の書類はWWW上で取り出しができます。送付希望の方は計算科学技術推進センターまでご連絡ください。

- 当研究所指定の研究計画書(目的、内容、計画、研究費等)
- 当研究所指定の研究業績リスト(論文、著書、特許、受賞等)
- 当研究所指定の主要論文の要旨(2,000字程度)
- 主要論文別刷り(3編以内、1編につき各3部)

なお、(一般)又は(若手研究者)に応募の方は研究所概要または会社案内等を添付してください。

(3) 提出先

〒153-0061

東京都目黒区中目黒2-2-54
金属材料技術研究所 51号庁舎内
日本原子力研究所 計算科学技術推進センター

(注) ①計算科学技術ソフトウェア研究開発(一般)、計算科学技術ソフトウェア研究開発(若手研究者)または計算科学技術ソフトウェア研究開発(大学院生)応募者が空欄とすべきこと

TEL: 03-5723-2504

FAX: 03-5723-2537

10. その他

本制度の研究費を用いて得られた研究成果を論文、講演等の形式で発表する際、またはその研究内容について新聞や雑誌の記者から取材を受ける際には、日本原子力研究所の所定の手続きに従っていただきます。

11. 問い合わせ先

〒153-0061

東京都目黒区中目黒2-2-54
金属材料技術研究所 51号庁舎内
日本原子力研究所 計算科学技術推進センター

TEL: 03-5723-2504

FAX: 03-5723-2537

e-mail: kobo@koma.jaeri.go.jp

平成10年度 計算科学技術ソフトウェア研究開発 実施テーマ一覧

□ 一般(5テーマ)

分野	領域	研究テーマ
基礎技術研究	並列計算法領域	分子シミュレーションにおける並列計算法の開発と応用
	並列処理支援技術領域	自動並列化システムの開発 事象駆動型モンテカルロコードなどデータ並列にならない大規模計算の自動並列化
応用研究	計算物理学領域	CIP法による6次元位相空間ソルバの開発
	材料物性領域	全電子第一原理計算プログラムの並列化とその原子吸着シリコン表面の再構成に関する大規模シミュレーションへの適用

□ 大学院生(7テーマ)

分野	領域	研究テーマ
基礎技術研究	基本ソフトウェア領域	非定常問題における並列計算のための動的負荷分散機構の研究
	並列計算法領域	偏微分方程式求解における大規模連立一次方程式に対する前処理及び求解の並列計算法 多次元的な自動領域分割法を用いた適応格子法の並列計算
	並列処理支援技術領域	分散共有メモリを用いた並列プログラミング支援環境
応用研究	計算物理学領域	多自由度系分散相のダイナミックスの並列解析
		ベクトル並列TreeSPHによる銀河形成シミュレーション 磁場中成形解析のための異形粒子及びコセラ理論によるシミュレーション

平成12年度 「計算科学技術ソフトウェア研究開発」の募集の御案内

平成12年3月13日
日本原子力研究所計算科学技術推進センター

1. 本制度の趣旨

日本原子力研究所(以下「原研」と呼びます。)計算科学技術推進センターは、理論、実験に次ぐ「第3の科学技術」として期待が高まっている計算科学技術を総合的に推進するための開かれた研究開発拠点として、先端的な研究開発の推進と次代を担う優れた人材の育成を目的に掲げ、平成7年度の設立以来、幅広い活動を展開しております。平成9年度から、産・官・学の研究交流を通じて、計算科学技術の分野において先進的、独創的で、有用性が高く、将来への発展性のある研究開発を推進し、併せて研究開発の一層の活性化と人材の育成を図るため、「計算科学技術ソフトウェア研究開発」制度を実施しています。

2. 本制度の概要

国内の大学等(国立研究所、公立試験研究機関、原研を除く特殊法人、公益法人、民間研究機関を含む。以下同じ。)から広く研究課題を公募し、原研の「研究評価委員会(計算ソフト専門部会)」の下で課題を選考し、その研究を推進します。

i. 対象研究課題

平成12年度の特定テーマ公募対象研究課題は次のとおりです。(公募の研究内容は別紙を御参照下さい。)

イ 計算材料工学(研究領域)

特定テーマ1 マルチスケールアプローチに基づくIASCC(照射誘起応力腐食割れ)数値予測手法の構築

ロ 並列処理基盤技術の研究開発(研究領域)

特定テーマ2 並列分散環境対応の数値計算ライブラリーの開発

ii. 研究期間

最大限3事業年度。ただし、年度毎の評価に基づき、1事業年度毎に更新することと致します。

iii. 研究予算

1課題当たり年間約2千万円を限度とします。予算額は、研究評価による課題採択後、課題の内容等により決定します。なお、初年度は研究開発設備の整備等研究の立ち上げに重点を置き、最終年度は研究のとりまとめを考慮する等適切な予算計画の立案に御配慮下さい。

iv. 採択件数

平成12年度は、2件程度を採択する予定です。

v. 研究実施場所

原則として原研としますが、応募者の所属機関でも実施できます。原研の施設を利用する場合は、原研の受入制度に従っていただきます。

vi. 成果の報告及び評価

選定された課題についての進捗状況、成果等を毎年度及び全体研究期間終了時に所定の様式による研究成果報告書等で報告していただきます。また、1事業年度毎及び全体研究期間終了時に「研究評価委員会(計算ソフト専門部会)」の下

で評価を受けていただきます。1事業年度毎の評価によっては、全体研究期間の途中であっても研究課題の継続を認めない場合があります。

また、全体研究期間終了時又は全体研究期間の途中であっても、優れた研究成果を挙げた研究課題については、更なる展開を考慮します。

vii 契約方式

原則として、原研と委託研究契約を結んでいただき、研究に必要な経費を支払うこととなります。

3. 応募資格

国内の大学等に所属する教授及び助教授又は同等の研究経歴をもつ方を研究代表者として応募していただきます。研究代表者は提案研究期間全体を通じて研究チームの責任者として研究全体に責務を負っていただける研究者とします。

研究代表者は国内の単独又は複数の大学等の研究者からなる研究チームを構成することができます。

4. 研究成果の取り扱い

i. 研究成果の帰属

研究を実施することにより特許権等の知的所有権が発生した場合、原則として、原研が定める契約条項等に従うこととしますが、原研との協議により決定します。

ii. 研究成果の発表

本制度で実施した研究の成果等は原研が開催する成果報告会に発表していただきます。また、本制度で実施した研究成果等を論文、講演等の形式で発表する際又は、その研究内容について新聞や雑誌から取材を受ける際には、原研の所定の手続きに従っていただきます。

5. 選考方法

選考は、「研究評価委員会(計算ソフト専門部会)」の下で審査を実施します。選考に当たっては、研究課題の先進性・独創性、有用性、研究手法の妥当性、研究実施体制・研究スケジュールの妥当性等といった観点から審査します。具体的には、提出していただいた応募書類の書類審査を実施した後、応募課題の研究代表者から課題についての説明を受け、評価・選考を行います。

6. 応募方法

i. 応募期間等

下記提出書類に必要事項を明記の上、平成12年4月20日(木)までに送付して下さい。郵送で応募申込みをする場合は書留で郵送して下さい。期限当日の消印があれば有効とします。なお、応募の秘密は厳守します。

応募テーマは6月中を目途に選考する予定です。

ii. 提出書類

以下の書類を提出して下さい。当研究所指定の書類はWWW(<http://guide.tokaijaeri.go.jp/ccse/koubo/H12/>)上で取り出すことができます。送付希望の方は計算科学技術推進センターまでご連絡下さい。(様式1-1～様式3

を御参照下さい。)

イ 当研究所指定の研究計画書(目的、内容、必要性、目標及び目標達成の方法、予想される成果、予算、人員等)

ロ 当研究所指定の研究業績リスト(論文、著書、特許、受賞等)

ハ 当研究所指定の主要論文の要旨(2,000字程度)

ニ 主要論文別刷り(3編以内、1編につき各3部)

iii. 提出先

〒153-0061

東京都目黒区中目黒2-2-54 金属材料技術研究所

51号庁舎内

日本原子力研究所 計算科学技術推進センター

封筒に計算科学技術ソフトウェア研究開発応募書類在中と朱書きのこと)

TEL 03-5723-2502

FAX: 03-5723-2537

7. その他

提出していただいた書類は審査以外の目的には使用せず、応募内容についての秘密は厳守します。なお、提出書類等は返却しませんので御了承下さい。また、応募後の提出書類の修正は御遠慮下さい。

8. 問い合わせ先

〒153-0061 東京都目黒区中目黒2-2-54 金属材料技術研究所

51号庁舎内

日本原子力研究所 計算科学技術推進センター

TEL: 03-5723-2502

FAX: 03-5723-2537

e-mail: kobo@komajaeri.go.jp

平成12年度特定テーマ公募対象研究課題について

特定テーマ1: マルチスケールアプローチに基づくIASCC(照射誘起応力腐食割れ)数値予測手法の構築

目標:

照射誘起応力腐食割れ(IASCC)の研究は、軽水炉の高経年化および核融合炉を含む新型炉の開発に関わり益々重要性が高まっている。一般に、照射損傷を受けた材料の変形や破壊の過程は複雑であり、材料の状態は高エネルギー粒子の入射、点欠陥の拡散と集合、マイクロ組織変化といった多段階の現象により変化し、これに環境の化学的影響のもとで力学的負荷が加わりIASCCが生じる。一方、近年の計算技術の発達により、経験的な構成方程式と連続体モデルによるシミュレーションから、分子・原子モデルを取り込んだマルチスケールモデリングなど、可能な限り非経験的な力学理論等の枠内での数値シミュレーションが可能になりつつある。本計画では、これまで実験結果等をもとに構築されてきた個別現象モデルやそれらに基づくシミュレーションコードの可能な限りの非経験化を進めるとともに、計算機能力が限界となっていた数値モデルについては、実験的事実を適宜取りこむなど複合的アプローチをとることで、IASCCの予測精度を大幅に向上させることを目指す。

概要:

本計画によるIASCC研究では、従来の応力腐食割れ予測モデルが経験的な因子を多く含むのに対して、IASCC現象を説明するに必要な構成要素についてマイクロなスケールからモデル化を行いそれらを積み上げることにより、経験的な因子を極力排除したIASCC予測モデルを構築することを目指す。本研究の重要な目的の一つは、そのようなIASCC現象のモデル化等を通して、実施すべき実験の絞込みや実験結果の理論的解釈など効率的な実験的研究を実現することにある。

IASCCは、中性子照射をある程度以上受けたステンレス鋼等の原子炉構造材が高温高压水中で応力腐食割れを生じるようになる現象である。IASCCの発生と進展には、材料及び水環境への照射の効果が複雑に関与している。IASCC現象を統一的に説明できるモデルは、現在まだ得られていないが、その検討において重要な要素過程は図1中に示すように、(a)結晶粒界での照射誘起偏析、(b)クリープ(応力緩和)挙動、(c)表面皮膜の形成、(d)アノード溶解と水素の挙動、(e)き裂先端での限界破壊歪み、(f)き裂内部の物質移動であると考えられる。本研究では、まず照射の作用を含めてこれらの要素過程のモデル化を行い、さらにそれらを統合してIASCC予測モデルを構築する手法の検討を行う。本計画の基本的な考え方として、マルチスケールモデルに基づくアプローチがある。図2には、IASCCの支配因子である水環境、照射及び応力について、マイクロなレベルの現象からマクロなき裂のレベルに至る広いスケール範囲において、IASCC現象のモデル化に必要と考えられる構成要素と、その記述に用いることが可能と考えられる計算手法を模式的に示した。ここで対象とする領域は、およそ図2上の点線で示す範囲である。

以上のように本計画の目指す方向は、従来のき裂進展予測モデルが材料及び環境に対する照射の影響を間接的・経験的なパラメータとして取り込み、いわばマクロなレベルでのシミュレーションであったのに対し、本研究ではよりマイクロなスケールレベルから各種要素のモデル化を行いさらにそれらを統合することで、より直接的・合理的なIASCC予測モデルを構築することである。

今回公募の研究範囲:

まず、(i)照射誘起偏析等によるマイクロ組織変化を含む材料条件、(ii)き裂の発生と進展条件(腐食、水素等の影響を含む)、(iii)放射線分解及びき裂内の物質移動を含む水環境条件の3つを最重要条件と設定し、上記の(a)~(f)の要素過程(図1参照)についての考察を基に、これらの条件に対する数値シミュレーション法の開発を行う。さらに、次の段階では、数値計算手法

の拡張と関連する因子のデータベース化を進め、最終的な段階として、照射条件、材料条件、水環境条件及び力学条件を入力とすることが可能なIASCC数値予測コードを構築する。本計画の第1段階としては、まず3年間程度を想定する。

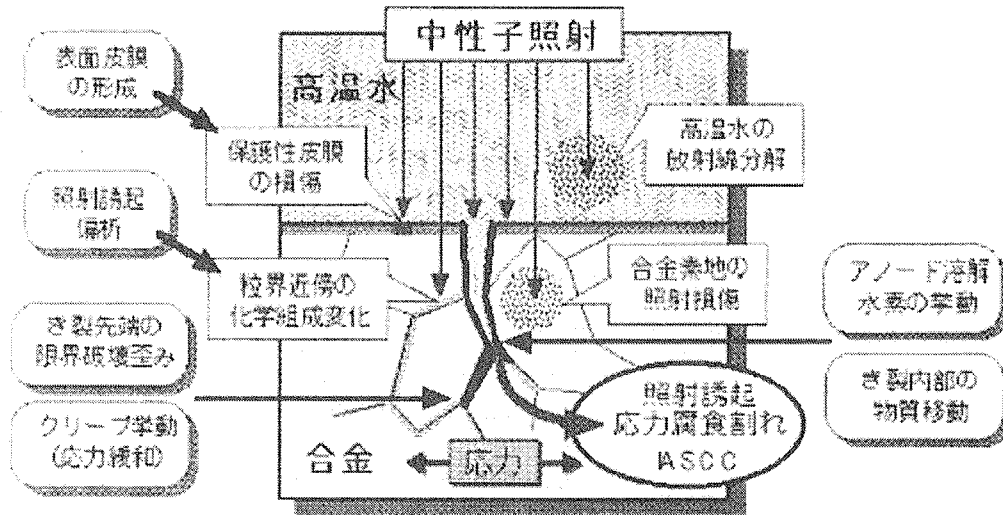


図1 照射が材料及び水環境へ与える効果とIASCCに関わる要素過程

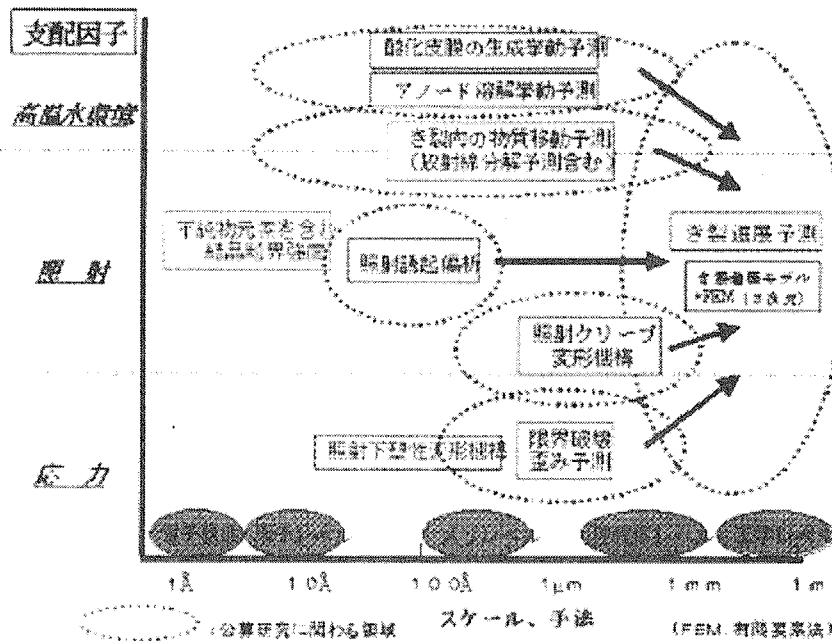


図2 IASCC現象に関わる重要因子のマルチスケール概念

平成12年度特定テーマ公募対象研究課題について

特定テーマ2: 並列分散環境対応の数値計算ライブラリーの開発

目標:

原研で開発したスカラ並列計算機用の数値計算ライブラリーPARCELを、スカラ並列計算機以外の多様なアーキテクチャ上で、具体的な問題を計算することにより、演算精度を保存しつつ、性能評価を行う。実在する同種のものと比較して、汎用性、高速度性、頑強性を旨とし、アーキテクチャ依存の並列数値ライブラリー設計指針を提言する。

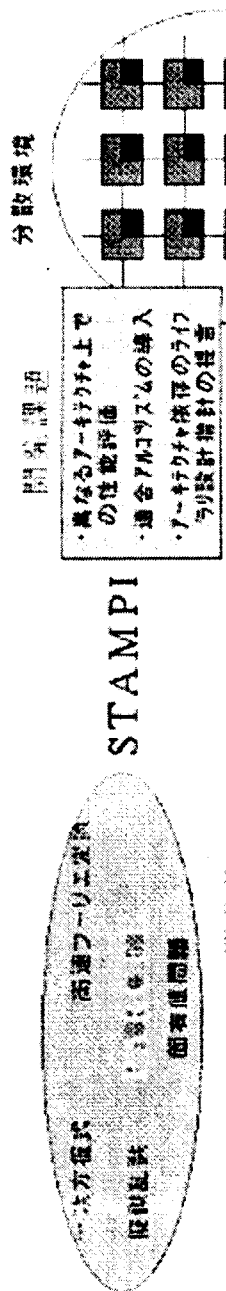
概要:

原研で開発した並列数値計算ライブラリーPARCEL(図3参照)は、既に、国内大学など関連20機関で実用に供されている。しかし、1)ライブラリー(連立1次方程式、FFT、擬似乱数、固有値問題)に採用したアルゴリズムは教科書的な基本的なもののみであること、2)また、ベクトル化は考慮しているものの、MPIベースの並列化であり、地球シミュレータなど多様なアーキテクチャに適合したものではない、3)適切なコミュニケーションなどと協力して、より適合するアルゴリズムに置き換え、3)アーキテクチャに依存した並列数値ライブラリーの構成などについて、計算機メーカーへ提言する。

今回公募の研究範囲:

上記のPARCELを、分散ベクトル並列機、分散共有ベクトル並列機、マルチスレッド機などについて、性能評価を行い、アーキテクチャ依存並列数値ライブラリーの設計指針を提言する。研究期間を3年とする。

並列分散環境対応の数値計算ライブラリーの開発



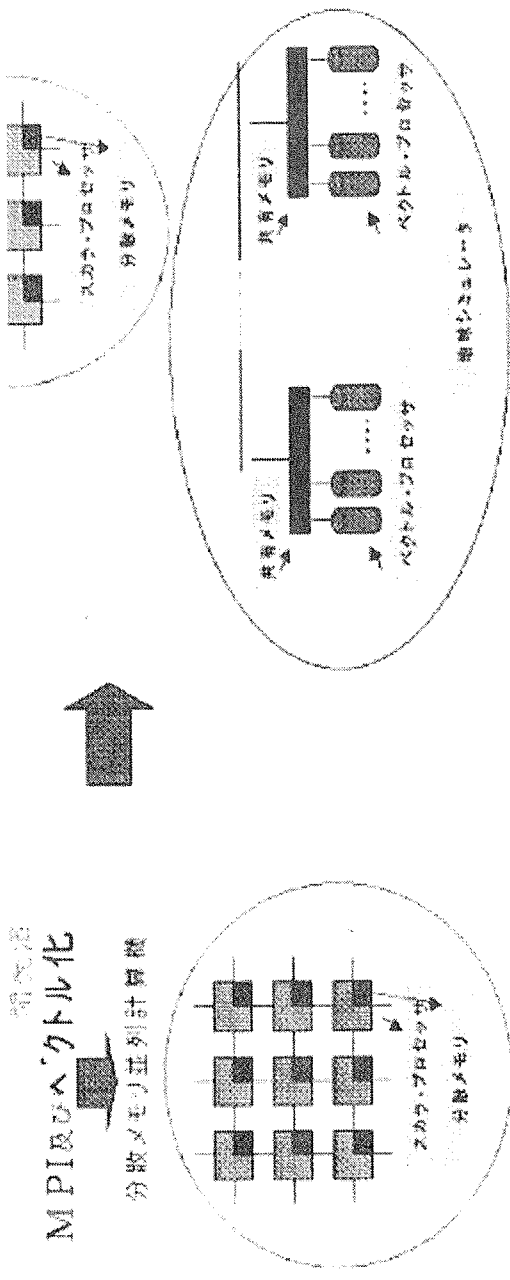


図 2

計算科学技術ソフトウェア研究開発専門部会の構成

平成9年度

部会長	秋元 正幸	日本原子力研究所原子炉安全工学部長
専門委員	小柳 義夫	東京大学理学部情報科学科教授
	河村 洋	東京理科大学工学部機械工学科教授
	木寺 詔紀	京都大学理学研究科助教授
	笠原 博徳	早稲田大学工学部電気電子情報工学科教授
	平山 俊雄	日本原子力研究所炉心プラズマ研究部 プラズマ理論研究室長
	茅野 政道	日本原子力研究所環境安全研究部主任研究員
	浅井 清	日本原子力研究所 理事 計算科学技術推進センター長

平成10年度

部会長	矢川 元基	東京大学大学院工学系研究科教授
専門委員	小柳 義夫	東京大学理学部情報科学科教授
	河村 洋	東京理科大学工学部機械工学科教授
	笠原 博徳	早稲田大学工学部電気電子情報工学科教授
	鶴飼 正二	東京工業大学大学院情報理工学研究科 数理・計算科学専攻教授
	秋元 正幸	日本原子力研究所安全性試験研究センター長
	竹田 辰興	日本原子力研究所計算科学技術推進センター長
	蕪木 英雄	日本原子力研究所計算科学技術推進センターグループリーダー

平成11年度

部会長	矢川 元基	東京大学大学院工学系研究科教授
専門委員	小柳 義夫	東京大学理学部情報科学科教授
	河村 洋	東京理科大学工学部機械工学科教授
	笠原 博徳	早稲田大学工学部電気電子情報工学科教授
	鶴飼 正二	東京工業大学大学院情報理工学研究科 数理・計算科学専攻教授
	秋元 正幸	日本原子力研究所安全性試験研究センター長
	竹田 辰興	日本原子力研究所計算科学技術推進センター長
	蕪木 英雄	日本原子力研究所計算科学技術推進センターグループリーダー

平成 12 年度

部会長	矢川	元基	東京大学大学院工学系研究科教授
専門委員	小柳	義夫	東京大学理学部情報科学科教授
	河村	洋	東京理科大学理工学部機械工学科教授
	木寺	詔紀	京都大学理学研究科助教授
	佐藤	三久	技術研究組合新情報処理開発機構超並列研究部 超並列パフォーマンス研究室長
	竹田	辰興	電気通信大学通信学部教授
	秋元	正幸	日本原子力研究所計算科学技術推進センター長
	蕪木	英雄	日本原子力研究所計算科学技術推進センターグループリーダー

平成 13 年度

部会長	小柳	義夫	東京大学理学部情報科学科教授
専門委員	相澤	龍彦	東京大学先端科学研究センター教授
	河村	洋	東京理科大学理工学部機械工学科教授
	木寺	詔紀	京都大学理学研究科助教授
	佐藤	三久	技術研究組合新情報処理開発機構超並列研究部 超並列パフォーマンス研究室長
	竹田	辰興	電気通信大学通信学部教授
	秋元	正幸	日本原子力研究所計算科学技術推進センター長 (平成 13 年 3 月 31 日まで)
	矢川	元基	日本原子力研究所計算科学技術推進センター長 (平成 13 年 4 月 1 日から)
	蕪木	英雄	日本原子力研究所計算科学技術推進センターグループリーダー

平成 14 年度

部会長	小柳	義夫	東京大学理学部情報科学科教授
専門委員	相澤	龍彦	東京大学先端科学研究センター教授
	河村	洋	東京理科大学理工学部機械工学科教授
	木寺	詔紀	京都大学理学研究科助教授
	佐藤	三久	技術研究組合新情報処理開発機構超並列研究部 超並列パフォーマンス研究室長
	竹田	辰興	電気通信大学通信学部教授
	矢川	元基	日本原子力研究所計算科学技術推進センター長
	蕪木	英雄	日本原子力研究所計算科学技術推進センターグループリーダー

平成 15 年度

部会長	小柳 義夫	東京大学理学部情報科学科教授
専門委員	相澤 龍彦	東京大学先端科学研究センター教授
	河村 洋	東京理科大学理工学部機械工学科教授
	木寺 詔紀	京都大学理学研究科助教授
	佐藤 三久	技術研究組合新情報処理開発機構超並列研究部 超並列パフォーマンス研究室長
	竹田 辰興	電気通信大学通信学部教授
	矢川 元基	日本原子力研究所計算科学技術推進センター長
	蕪木 英雄	日本原子力研究所計算科学技術推進センターグループリーダー

国際単位系 (SI) と換算表

表1 SI基本単位および補助単位

量	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
物質質量	モル	mol
光度	カンデラ	cd
平面角	ラジアン	rad
立体角	ステラジアン	sr

表2 SIと併用される単位

名称	記号
分, 時, 日	min, h, d
度, 分, 秒	°, ', "
リットル	l, L
トン	t
電子ボルト	eV
原子質量単位	u

$$1 \text{ eV} = 1.60218 \times 10^{-19} \text{ J}$$

$$1 \text{ u} = 1.66054 \times 10^{-27} \text{ kg}$$

表5 SI接頭語

倍数	接頭語	記号
10^{18}	エクサ	E
10^{15}	ペタ	P
10^{12}	テラ	T
10^9	ギガ	G
10^6	メガ	M
10^3	キロ	k
10^2	ヘクト	h
10^1	デカ	da
10^{-1}	デシ	d
10^{-2}	センチ	c
10^{-3}	ミリ	m
10^{-6}	マイクロ	μ
10^{-9}	ナノ	n
10^{-12}	ピコ	p
10^{-15}	フェムト	f
10^{-18}	アト	a

表3 固有の名称をもつSI組立単位

量	名称	記号	他のSI単位による表現
周波数	ヘルツ	Hz	s^{-1}
力	ニュートン	N	$\text{m} \cdot \text{kg} / \text{s}^2$
圧力, 応力	パスカル	Pa	N / m^2
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	$\text{N} \cdot \text{m}$
工率, 放射束	ワット	W	J / s
電気量, 電荷	クーロン	C	$\text{A} \cdot \text{s}$
電位, 電圧, 起電力	ボルト	V	W / A
静電容量	ファラド	F	C / V
電気抵抗	オーム	Ω	V / A
コンダクタンス	ジーメン	S	A / V
磁束	ウェーバ	Wb	$\text{V} \cdot \text{s}$
磁束密度	テスラ	T	Wb / m^2
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb / A
セルシウス温度	セルシウス度	$^{\circ}\text{C}$	
光度	ルーメン	lm	$\text{cd} \cdot \text{sr}$
照射能	ルクス	lx	lm / m^2
放射線量	ベクレル	Bq	s^{-1}
吸収線量	グレイ	Gy	J / kg
線量等量	シーベルト	Sv	J / kg

表4 SIと共に暫定的に維持される単位

名称	記号
オングストローム	Å
バーン	b
バル	bar
ガリ	Gal
キュリー	Ci
レントゲン	R
ラド	rad
レム	rem

$$1 \text{ Å} = 0.1 \text{ nm} = 10^{-10} \text{ m}$$

$$1 \text{ b} = 100 \text{ fm}^2 = 10^{-28} \text{ m}^2$$

$$1 \text{ bar} = 0.1 \text{ MPa} = 10^5 \text{ Pa}$$

$$1 \text{ Gal} = 1 \text{ cm} / \text{s}^2 = 10^{-2} \text{ m} / \text{s}^2$$

$$1 \text{ Ci} = 3.7 \times 10^{10} \text{ Bq}$$

$$1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{ C} / \text{kg}$$

$$1 \text{ rad} = 1 \text{ cGy} = 10^{-2} \text{ Gy}$$

$$1 \text{ rem} = 1 \text{ cSv} = 10^{-2} \text{ Sv}$$

(注)

- 表1-5は「国際単位系」第5版, 国際度量衡局1985年刊行による。ただし, 1 eV および 1 u の値はCODATAの1986年推奨値によった。
- 表4には海里, ノット, アール, ヘクトールも含まれているが日常の単位なのでここでは省略した。
- bar は, JIS では流体の圧力を表わす場合に限り表2のカテゴリーに分類されている。
- E C 閣僚理事会指令では bar, barn および「気圧の単位」mmHg を表2のカテゴリーに入れている。

換算表

力	N (=10 ⁵ dyn)	kgf	lbf
	1	0.101972	0.224809
	9.80665	1	2.20462
	4.44822	0.453592	1

粘度 $1 \text{ Pa} \cdot \text{s} (= \text{N} \cdot \text{s} / \text{m}^2) = 10 \text{ P (ポアズ)} (\text{g} / (\text{cm} \cdot \text{s}))$

動粘度 $1 \text{ m}^2 / \text{s} = 10^4 \text{ St (ストークス)} (\text{cm}^2 / \text{s})$

圧力	MPa (=10 bar)	kgf/cm ²	atm	mmHg (Torr)	lbf/in ² (psi)
1	1	10.1972	9.86923	7.50062×10^3	145.038
0.0980665	1	0.967841	735.559	14.2233	
0.101325	1	1.03323	1	760	14.6959
1.33322×10^{-4}	1.35951×10^{-3}	1.31579×10^{-3}	1	1.93368×10^{-2}	
6.89476×10^{-3}	7.03070×10^{-2}	6.80460×10^{-2}	51.7149	1	

エネルギー・仕事・熱量	J (=10 ⁷ erg)	kgf·m	kW·h	cal (計量法)	Btu	ft·lbf	eV
1	0.101972	2.77778×10^{-7}	0.238889	9.47813×10^{-7}	0.737562	6.24150×10^{15}	
9.80665	1	2.72407×10^{-6}	2.34270	9.29487×10^{-3}	7.23301	6.12082×10^{19}	
3.6×10^6	3.67098×10^5	1	8.59999×10^3	3412.13	2.65522×10^6	2.24694×10^{25}	
4.18605	0.426858	1.16279×10^{-6}	1	3.96759×10^{-3}	3.08747	2.61272×10^{19}	
1055.06	107.586	2.93072×10^{-4}	252.042	1	778.172	6.58515×10^{21}	
1.35582	0.138255	3.76616×10^{-7}	0.323890	1.28506×10^{-3}	1	8.46233×10^{18}	
1.60218×10^{19}	1.63377×10^{20}	4.45050×10^{25}	3.82743×10^{20}	1.51857×10^{22}	1.18171×10^{19}	1	

1 cal = 4.18605 J (計量法)
 = 4.184 J (熱化学)
 = 4.1855 J (15°C)
 = 4.1868 J (国際蒸気表)
 仕事率 1 PS (仏馬力)
 = 75 kgf·m/s
 = 735.499 W

放射能	Bq	Ci
1	2.70270×10^{11}	
3.7×10^{10}	1	

吸収線量	Gy	rad
1	100	
0.01	1	

照射線量	C/kg	R
1	3876	
2.58×10^{-4}	1	

線量当量	Sv	rem
1	100	
0.01	1	

公募型研究（計算科学技術ソフトウェア研究開発） 総括報告書（平成9年度～平成14年度）



志紙舎印刷株式会社
白色版印刷/再生紙を原料とする