

平成23年度におけるRISTの動き

I まえがき

当財団は、創立以来、原子力、地球環境等の分野における情報科学技術の高度化、大規模高速計算機の利用技術の開発、原子力分野のコード、データベース等の調査収集・整備提供、及び各種の調査・研究を総合的に推進し、科学技術の発展に寄与してきた。特に近年においては、先端的スーパーコンピュータの進展に即応する科学技術研究用ソフトウェア等の高度化開発を通じて、社会的要請が高まっている計算科学技術インフラの強化充実に貢献している。

平成23年度においては、情報科学技術の高度化では、日本原子力研究開発機構が進める原子力研究開発に供する各種原子力コードの高度化開発を実施するとともに、当財団が同機構と協力して開発した粒子挙動解析用コードPHITSの他分野への応用を推進した。さらに、文部科学省が進める「21世紀気候変動予測革新プログラム」及び「HPCI戦略プログラム」に参画し、大規模シミュレーション用ソフトウェア開発を実施した。

大規模計算機の利用技術の開発では、日本原子力研究開発機構の大型計算機運用の技術支援を引続き実施するとともに、特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律（以下「共用法」という。）に定める特定高速電子計算機施設（以下「京」という。）として理化学研究所が整備中の京速コンピュータについて、運用開始後早期に研究利用に供される主要アプリケーション群の性能向上の検討などを通じてその利用基盤整備に協力した。

原子力分野の解析コード、データベース等に関する情報の調査収集・整備提供では、わが国の原子力コードセンターとして、原子力

コードの調査収集と産業界を含む国内ユーザへの提供を実施するとともに、インターネットを利用した原子力関連情報提供サイトを整備・運用した。

財団運営においては、新公益法人制度における一般財団法人への移行のための定款の変更の案等を機関決定し、平成23年11月9日に移行認可申請を行い、平成24年3月19日に内閣総理大臣より一般財団法人として認可された。また平成23年度、共用法に基づく「京」の登録施設利用促進機関の登録申請を行い、平成24年度からの「京」利用促進業務を実施する機関に選定された。さらに、文部科学省の「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）の構築事業（HPCIの運営）」委託業務の共同事業参画機関としてHPCI運用事務局の業務を平成24年度から担うこととなった。当財団の業務遂行に係る情報資産の保存・管理体制については、情報セキュリティマネジメントシステム（JIS Q 27001：2006/ISO/IEC 27001：2005）の考え方にに基づき、その維持、改善を継続的に進めた。

平成23年度に実施した個別事業は、以下のとおりである。

II 事業内容

1. 情報科学技術の高度化に関する研究開発・調査

- (1) 原子力研究開発コードの高度化に関する研究・調査

二流体モデルを用いた機構論的熱設計手法コード、中性子を用いた高速度イメージセンシングのためのデータ処理コード、超高温プラズマの特性解析コード等

の大規模コードを含む各種の原子力研究開発コードの高度化・高速化、可視化プログラム及び解析ツールプログラムの作成・改良を実施した。さらに、原子力施設の大規模並列ソフトウェアの改良及び並列数値環境ソフトウェアの高度化作業等を実施した。大強度陽子加速器計画(J-PARC)のために日本原子力研究開発機構と協力して開発を進めている粒子・重イオン輸送コードシステムPHITSについて、国際宇宙ステーション内の宇宙放射線評価、粒子線治療線量評価システム等の他分野への応用のための高度化を推進した。また、PHITSの応用としては、J-PARC中性子ビームラインの遮へい設計、粒子線がん治療施設の遮へい設計を実施した。さらに、新技術振興渡辺記念会の助成を受けて「原子力利用を支えるソフトウェアの状況と開発に関する調査」を実施した。

(2) 大規模シミュレーション技術の開発・研究

平成23年度は、文部科学省から東京大学生産技術研究所が受託した「HPCI戦略プログラム」研究開発に参加して、本研究開発における代表的コードFrontFlow/Blueについて、京速コンピュータ「京」等への応用を念頭に、実際の複雑な形状等に沿う流れ、大規模な騒音問題等を精度良くシミュレーションし、大規模計算問題にも従来より短時間で安定的な解を得られる新しい並列数値解法を開発した。また、平成23年度で終了する「21世紀気候変動予測革新プログラム」では、全地球規模の長期気候変動予測の性能向上のために必要な不確定性の把握を目的として、気候モデル精度比較の大規模シミュレーションに向けた日本標準版カップラーを開発した。さらに、次世代「大気海洋結合気候モデル

MIROC」について、大規模高速最適化へ向けたデータ構造、処理構造、ファイルI/O構造、結合構造等の改良に係わる基本設計を実施した。

さらに、新技術振興渡辺記念会の助成を受けて「大規模スーパーコンピュータを利用した危機対応における新しい意思決定法の調査研究」を実施中である。また、地球シミュレータの共同利用枠組みを活用し、大学及び産業界等との研究会活動を通じて、ナノカーボン類の電気伝導性、セシウム、ストロンチウムなどの放射性物質の吸着性、高温超伝導物質のテラヘルツ波応用のシミュレーション研究を実施した。

2. 大規模高速計算機の利用に関する技術開発

(1) 大型計算機システム及びネットワークシステムの運用支援

日本原子力研究開発機構の大型計算機システムの運用を技術支援するとともに、機構内情報システムの管理運用等を技術支援した。

(2) 次世代スーパーコンピュータ利用計画

理化学研究所計算科学研究機構に整備中の京速コンピュータ「京」について、平成24年秋からの運用開始に備えて大規模シミュレーション用並列ソフトウェアの高速化及び調整等に協力した。具体的には、大気、海洋の長期的地球環境変動に係わる大規模シミュレーションモデル群の性能向上、次世代生命体統合シミュレーション関連の細胞挙動に関する並列モデルの開発、大規模量子化学シミュレーションコード開発、さらに固有値解法等の数理モデルの改良等を通じて計画に協力した。

(3) その他の超高速計算機システム

日欧協力で整備された核融合計算シ

ミュレーションセンター（幅広いアプローチ活動・国際核融合エネルギー研究センター事業のサブプロジェクト）において、平成24年1月から利用開始したスーパーコンピュータの運用及びユーザーサポート並びにネットワーク等の関連インフラ整備に関わる技術支援を行った。

3. 原子力分野の解析コード、データベース等に関する情報の調査収集・整備提供

(1) 原子力分野の解析コードの調査収集・提供

日本原子力研究開発機構等の国内機関及びOECD/NEAデータバンクから収集した40件の原子力コードを原子力コードセンターに新規登録した。産業界を含む国内加盟機関への原子力コードの提供は260件であった。米国オークリッジ国立研究所・放射線安全情報計算センター(ORNL/RSICC)との契約の下で、新規に18件の原子力コードを収集・整備するとともに、「RSICCユーザ会」加盟機関に278件の原子力コードを配付した。なお、当財団が運営している「RSICCユーザ会」の加盟機関は、平成23年度末で51機関である。

(2) 原子力分野のデータベース等の整備・提供

インターネットを利用して原子力関連情報を提供する「原子力百科事典ATOMICA」のコンテンツの制作と運営を行った。コンテンツの制作においては既存のデータ93件の更新、新規データ23件の追加を行うとともに、用語辞書に登録されている用語のうち131件の更新を行った。なお、平成23年度におけるATOMICAサイトへのアクセス数は約26万件であった。

4. 事業の成果の普及等

(1) RISTニュースの発行

当財団の事業、特に計算科学技術研究の成果の普及を目的として、最新の研究開発成果の紹介、関連研究の解説、事業動向の報告、トピックス等を内容とする「RISTニュース」を平成23年7月及び平成24年3月に刊行し、関連機関に配付するとともに、当財団の公開ホームページに掲載し、成果の普及を図った。

(2) ワークショップ、セミナー等の開催

原子力コード利用の促進に資するため、RSICCユーザ会加盟機関向けに「核燃料施設及び核燃料容器の設計評価のための標準的解析手法SCALE 6」の利用法に関する講習会（平成23年11月、東海）を開催した。また、IEEE主催のスーパーコンピューティング会議SC11（平成23年11月、米国ワシントン州シアトル）において研究成果を展示した。さらに、「先端計算機施設における次世代気候モデルに関する専門家ワークショップ」(平成24年3月、米国ハワイ州マウイ島)において東京大学、海洋研究開発機構、電力中央研究所等と共催して、日米の気候専門家によるエクサスケールスパコンなどに向けた次世代気候モデルの動向を討議した。

(3) 学術協力

当財団における研究開発の成果を国内外の学術論文誌、学会及び研究展示会等に発表した。平成23年度における当該発表を6. に示す。また、情報科学技術関連の研究に従事している若手大学院生2名に対し国際学会への参加を援助した。その他、日本原子力学会の「2011年秋の大会」展示会に参加して原子力コードセンターに関する普及活動を行うとともに、応用数理学会等を通じて国内学界活動に協力をした。

5. その他

(1) 神戸地区における新規事業の準備

平成23年7月14日、文部科学省令「特定先端大型研究施設の共用の促進に関する法律施行規則」の改正が行われると同時に、理化学研究所が神戸市において整備中の特定高速電子計算機施設に係る登録施設利用促進機関（以下「登録機関」という。）の登録申請が開始されたため、当財団は、同年8月18日、この登録申請を行い、その後文部科学省における登録機関業務実施機関審査を経て、同年10月28日、文部科学大臣より平成24年4月1日からの当該登録機関業務の実施を通知された。この通知を踏まえ、当財団は、平成23年12月より次世代計算機技術研究センター職員を神戸市に所在する理化学研究所計算科学研究機構内の一室に駐在させ、登録機関業務の開始に向けた準備活動を進めた。また、平成24年3月、文部科学省の「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ（HPCI）構築事業（HPCIの運営）」委託業務のうち、登録機関業務と一体的な実施が期待されたHPCI利用促進業務を担うHPCI運用事務局に当財団がなることが決定し、その準備も併せて進めた。

6. 研究成果の発表

平成23年度の主な研究成果発表リストを以下に示す。

- (1) K. Niita, H. Iwase, T. Sato, Y. Iwamoto, N. Matsuda, Y. Sakamoto, H. Nakashima, D. Mancusi and L. Sihver, “Recent developments of the PHITS code”, Prog. Nucl. Sci. Technol. **1**, (2011) 1.
- (2) Kenichi Ishikawa, Koji Niita, Kazuo Takeda, Nobuhisa Fukunishi and Shu Takagi, “Domain-Division Monte Carlo Dose Calculation Method for Particle Therapy”, Prog. Nucl. Sci. Technol. **2**, (2011) 197.
- (3) Tetsuya Mukawa, Tetsuo Matsumoto and Koji Niita, “Study on Microdosimetry for Boron Neutron Capture Therapy”, Prog. Nucl. Sci. Technol. **2**, (2011) 242.
- (4) Tatsuhiko Sato, Akira Endo and Koji Niita, “Fluence-to-Dose Coefficients for Muons and Pions Calculated Based on ICRP Publication 103 Using the PHITS code”, Prog. Nucl. Sci. Technol. **2**, (2011) 432.
- (5) Shin-ichiro Abe, Yukinobu Watanabe, Koji Niita and Yukio Sakamoto, “Implementation of a Forced Collision Method in the Estimation of Deposit Energy Distribution with the PHITS cod”, Prog. Nucl. Sci. Technol. **2**, (2011) 477.
- (6) Koji Niita, Tatsuhiko Sato, Yosuke Iwamoto, Norihiro Matsuda, Hiroshi Iwase, Lembit Sihver, Yukio Sakamoto and Hiroshi Nakashima, “New Features of the Particle and Heavy Ion Transport Code System; PHITS”, Prog. Nucl. Sci. Technol. **2**, (2011) 923.
- (7) Norihiro Matsuda, Yosuke Iwamoto, Hiroshi Iwase, Yukio Sakamoto, Hiroshi Nakashima and Koji Niita, “Benchmarking of PHITS on Pion Production for Medium-Energy Physics”, Prog. Nucl. Sci. Technol. **2**, (2011) 927.
- (8) Yosuke Iwamoto, Koji Niita, Tatsuhiko Sato, Norihiro Matsuda, Hiroshi Iwase, Hiroshi Nakashima and Yukio Sakamoto, “Application

- and Validation of Event Generator in the PHITS Code for the Low-Energy Neutron-Induced Reactions”, *Prog. Nucl. Sci. Technol.* **2**, (2011) 931.
- (9) T. Sato, K. Niita, V. A. Shurshakov, B.E. Kalyaev, E.N. Yarmanova, I.V. Nikolaev, H. Iwase, L. Sihver, D. Mancusi, A. Endo, N. Matsuda, Y. Iwamoto, H. Nakashima, Y. Sakamoto, H. Yasuda, M. Takada and T. Nakamura, “Evaluation of dose rate reduction in a spacecraft compartment due to additional water shield” *Cosmic Research* **49** (2011) 319
- (10) Yosuke Iwamoto, Koji Niita, Tomotsugu Sawai, R.M. Ronningen, Thomas Baumann, “Improvement of radiation damage calculation in PHITS and tests for copper and tungsten irradiated with protons and heavy-ions over a wide energy range”, *Nucl. Instrum. Methods* **B274** (2012) 57.
- (11) Y. Kagei and S. Tokuda, “Fully-implicit MHD Simulation Using Nonconforming Vector Finite Elements”, *Proc. Plasma Conf. 2011* 23P075-P (2011).
- (12) Takashi Arakawa, Hiromasa Yoshimura, Fuyuki Saito and Koji Ogochi, “Data exchange algorithm and software design of KAKUSHIN coupler Jcup”, *Procedia Computer Science* **4** (2011), 1516-1525.
- (13) Yoshiharu Iwasa, Takashi Arakawa, Akimasa Sumi, “Tropical Mid-level Detrainment as a Thermodynamically Driven Flow”, *Journal of Meteorological Society of Japan*, **90** (2012), 11-33.
- (14) Y. Kagei and S. Tokuda, “Nonconforming Vector Finite Element Method for Fully-implicit Resistive MHD Simulations”, 17th Numerical Experiment of Tokamak (NEXT) Meeting (Kashiwa, Japan, March 2012)
- (15) M.Iizuka, H.Nakamura, M.Tachiki, “Large-Scale Simulation for Design of Continuous THz Wave Devices”, 15th Workshop on Sustained Simulation Performance (Tohoku University, Sendai March 2012).
- (16) 飯塚幹夫、中村壽、立木昌、「固有ジョセフソンプラズマの素子表面からのテラヘルツ波放射のシミュレーション(4)」2011年秋季第72回応用物理学会学術講演会(2011年9月、山形大学小白川キャンパス)
- (17) 中村賢、志澤由久、手島正吾、富山栄治、飯塚幹夫、中村壽、「有限温度LCAO法の開発」日本物理学会 秋季大会(2011年9月、富山大学五福キャンパス)
- (18) 荒川隆、吉村裕正、齋藤冬樹、大越智幸司、「21世紀気候変動革新プログラムにおけるカップラー開発(最終報)」気象学会秋季大会(2011年11月、名古屋大学)
- (19) 矢木雅敏、影井康弘、「ディスラプション時における逃走電子軌道損失のシミュレーション研究」第67回日本物理学会年次大会(2012年3月、関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス)
- (20) 中村賢、志澤由久、手島正吾、富山栄治、飯塚幹夫、中村壽、「スレーター型基底関数を用いた有限温度LCAO法」第67回日本物理学会年次大会(2012年3月、関西学院大学西宮上ヶ原キャンパス)

- (21) 飯塚幹夫、中村壽、立木昌、「固有ジョセフソンプラズマの素子表面からのテラヘルツ波放射のシミュレーション(4)」2012年春季 第59回 応用物理学関係連合講演会 (2012年3月、早稲田大学)
- (22) 手島正吾、中村賢、宮本善之、中村壽、「カーボンナノチューブの特性に関する大規模シミュレーション」平成23年度地球シミュレータ利用報告会(2012年2月、地球シミュレータセンター)
- (23) 飯塚幹夫、中村壽、立木昌、「テラヘルツ発振超伝導素子に関する大規模シミュレーション」平成23年度地球シミュレータ利用報告会 (2012年2月、地球シミュレータセンター)
- (24) 徳田伸二、松岡浩、「実時間・超高速計算—計算機の新しい利用技術の開拓に向けて—」RIST NEWS No.52 (2012年3月) 13
- (25) 手島正吾、中村賢、宮本善之、中村壽、「ナノ炭素類に対する電子伝導の研究」RIST NEWS No.52 (2012年3月) 22
- (26) 手島正吾、「マッカイ結晶を用いた超高効率太陽電池の研究」NTS社 未来材料 高効率太陽電池 第6編 第9章(2012年5月出版予定)
- (27) RIST ; 研 究 展 示 in Nanotech 2012 (2011年2月、東京ビッグサイト)