

平成 12 年 3 月 13 日

計算科学技術について

日本原子力研究所

齋藤伸三

1. 計算科学技術の重要性

最近のコンピュータ及びネットワーク技術の急速な進歩に支えられ、科学技術の研究開発では、実験や理論と並んで、計算科学が第 3 の方法として基礎研究における新現象の探索はもとより、新技術の開発や設計などに活用されている。計算科学は、高額な実験の代替手段ともなり、また、知識の体系的蓄積にも役立てられ、原子力の先端的分野においても、その一層の浸透が求められる。

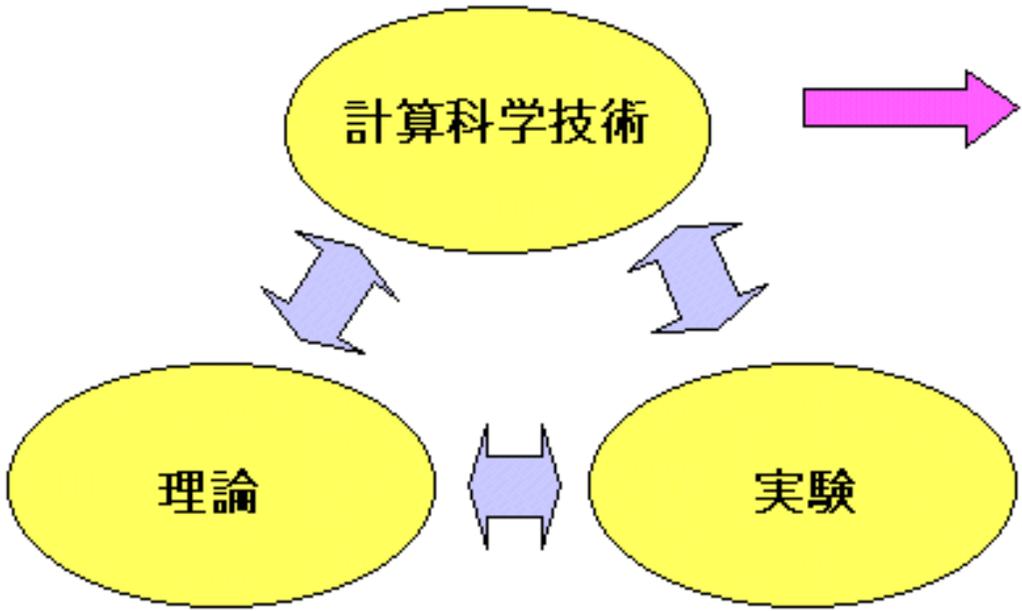
2. 計算科学技術の一層の活用に向けての提言

- 1) 原子力の先端的な研究開発において、大型装置の設計や現象の理解、新現象の予測に資するため、計算科学技術を積極的に活用する。
- 2) 計算科学技術を用いることにより、研究開発の大幅な進展が予想される材料科学、環境科学、生命科学、プラズマ物理等の分野において、高精度の予測性能を目指した原理的な手法（例えば第 1 原理分子動力学）の開発を不断に進める。
- 3) このような開発により、研究開発の省力化、効率化に寄与するのみでなく、科学技術知識の体系的な蓄積・継承を図る。
 - 上記の活動を先導し支援するため、既存の研究開発機関が有する計算センター等をネットワークで結合し、計算科学技術における相互乗り入れ可能な全国的な推進体制を整備する。
 - この推進体制のもとに、材料、環境、生命科学、プラズマ物理等の分野で、世界のトップを目指した手法開発等を戦略的に進める。

期待される計算科学技術

- ・実験、理論と並ぶ科学技術研究開発の第3の方法論
- ・理論(現象の支配方程式等)から、観測データを使用せず現象を説明
- ・公理的枠組みから、演繹的な手法で対象の性質を説明、理論化

高額な実験を回避するなど効率的な研究開発



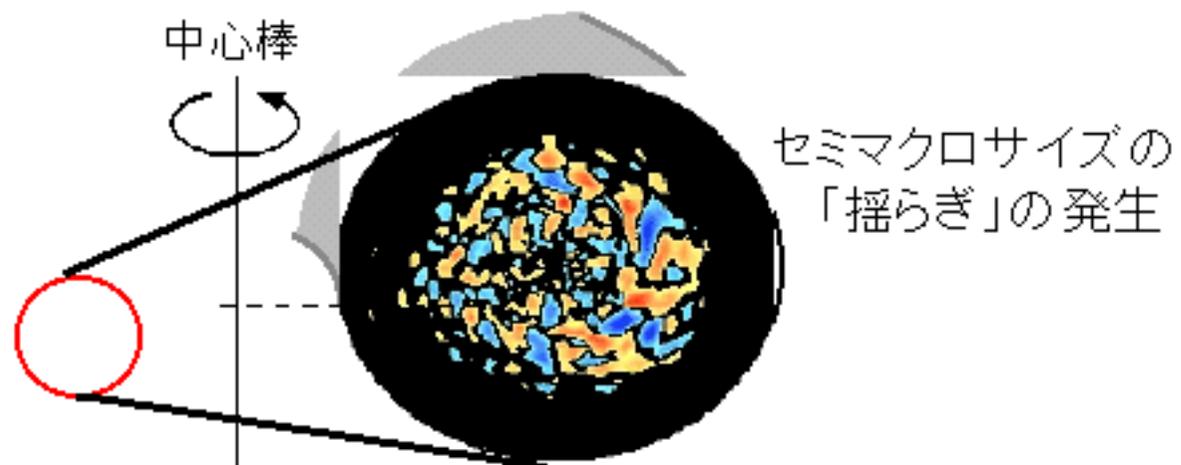
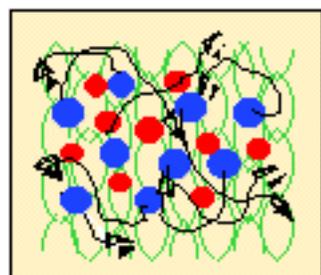
・実験現象等の同一性の関係形式化

・複数回生起の現象から同一性を見出す

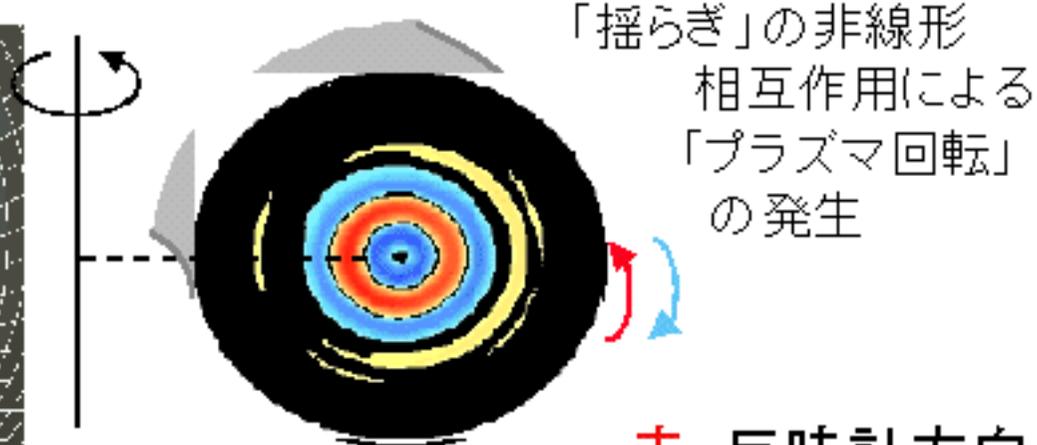
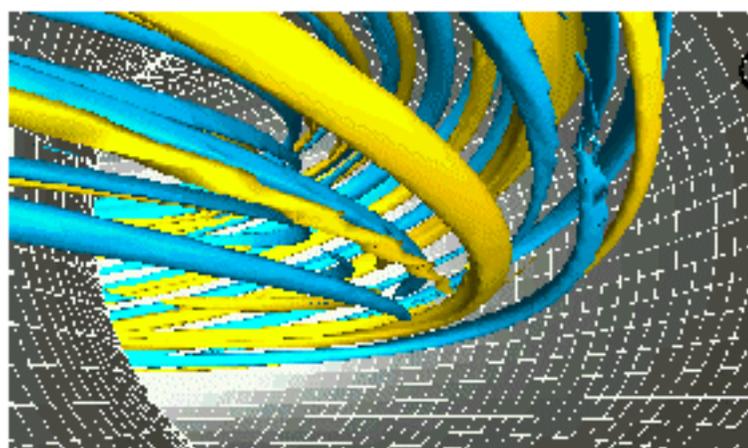
適用分野	適用のメリット
放射線の生体影響	DNA修復過程
地球環境変化	地球気候変動予測
レーザー科学 放射光	実験の絞込 新現象探索
蛋白質構造解析	蛋白質機能予測
加速器 中性子科学	設計R&D 実験補完
核融合	閉じ込め 特性予測

計算科学を駆使した核融合研究

2000万個の粒子が解き明かすトカマクの揺らぎの構造



セミマクロサイズの
「揺らぎ」の発生



「揺らぎ」の非線形
相互作用による
「プラズマ回転」
の発生

“揺らぎ”と“プラズマ回転”の微妙な
バランスがトカマクの熱の流れを決める。

赤：反時計方向
青：時計方向
の回転

酵素によるDNA損傷修復過程の研究

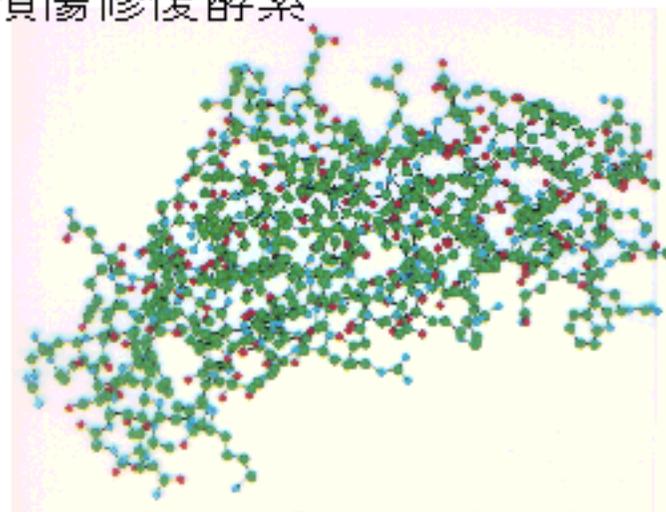
DNAが紫外線で損傷する部位を修復酵素が、どのように認識し結合するかを調べる。

分子動力学シミュレーションを用いてDNA損傷修復過程の解明。

静電エネルギー、DNAの立体構造、周囲の水和水の働きが、損傷部位認識・結合過程で重要な要因。

計算科学による生命現象解明。

損傷修復酵素



損傷部位認識・結合

DNA

