



JAEA-Evaluation

2018-002

DOI:10.11484/jaea-evaluation-2018-002

平成29年度計算科学技術研究実績評価報告

Review of Research on Advanced Computational Science in FY2017

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

JAEA-Evaluation

February 2019

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは国立研究開発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 (<https://www.jaea.go.jp>)
より発信されています。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 研究連携成果展開部 研究成果管理課
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方 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
Institutional Repository Section,
Intellectual Resources Management and R&D Collaboration Department,
Japan Atomic Energy Agency.
2-4 Shirakata, 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, 2019

平成 29 年度計算科学技術研究実績評価報告

日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター

(2018 年 12 月 13 日受理)

システム計算科学センターにおいては、「国立研究開発法人日本原子力研究開発機構の中長期目標を達成するための計画（中長期計画）」に基づき、原子力分野における計算科学技術研究に関する研究開発を実施してきた。本研究開発は原子力基礎基盤研究のうちの 1 分野として位置づけられていることから、原子力基礎工学研究・評価委員会による助言と評価がなされるが、計算科学技術研究については、それを支援するために原子力基礎工学研究・評価委員会の下に計算科学技術研究専門部会が設置され、課題の詳細な内容等を評価することとなった。

本報告は、平成 29 年度にシステム計算科学センターにおいて実施された計算科学技術研究の実績と、それに対する計算科学技術研究専門部会による評価をとりまとめたものである。

Review of Research on Advanced Computational Science in FY2017

Center for Computational Science & e-Systems

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

(Received December 13, 2018)

Research on advanced computational science for nuclear applications, based on “Plan to Achieve Medium- to Long-term Objectives of the Japan Atomic Energy Agency (Medium- to Long-term Plan)”, has been performed at Center for Computational Science & e-Systems (CCSE), Japan Atomic Energy Agency. CCSE established the committee consisting of outside experts and authorities which does research evaluation and advices for the assistance of the research and development.

This report summarizes the results of R&D performed at CCSE in FY 2017 (April 1st, 2017 - March 31st, 2018) and the evaluation by the committee on it.

Keywords: Research Evaluation, Numerical Simulation, Computer Science, Computational Science, Multi-scale Modeling, Material Modeling and Simulation, Structural Simulation, Supercomputer, Large-scale Parallel Computing, Visualization.

目 次

1. はじめに	1
2. 計算科学技術研究専門部会	2
3. 計算科学技術研究における研究計画	3
3.1 中長期計画	3
3.2 年度計画	3
4. 研究実績と評価意見	4
付録 平成 29 年度計算科学技術研究実績	11

Contents

1. Introduction	1
2. Evaluation Committee	2
3. R&D Plans for the Advanced Computational Science Research of CCSE/JAEA	3
3.1 Medium to Long-term Plan	3
3.2 Plan for Fiscal Year 2017	3
4. Results of the R&D and the Evaluation Comments	4
Appendix List of Achievements in FY 2017	11

This is a blank page.

1. はじめに

原子力に関する研究開発では、実験や観測が困難な現象のメカニズムを解明したり、その進展を予測したりする必要がある。このため、原子・分子の構造や運動をはじめとしてミクロなレベルの現象から、気象や環境等マクロなレベルの現象まで幅広くシミュレーション等を行う計算科学技術は、原子力分野の研究開発において理論、実験と並び必要不可欠な研究手法となっている。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構（以下「機構」という。）においては、計算科学技術研究を原子力基礎基盤研究の重要な柱として中長期計画に盛り込み、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。

本研究開発は原子力基礎基盤研究のうちの 1 分野として位置づけられていることから、機構の原子力基礎工学研究・評価委員会（以下「委員会」という。）によって研究に対する助言と評価がなされるが、計算科学技術研究については、委員会の助言・評価を支援するため、委員会の下に計算科学技術研究専門部会（以下「専門部会」という。）が設置され、課題の詳細な内容等を評価することとなった。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」としても活用されている。

本報告は、平成 29 年度にシステム計算科学センターにおいて実施された計算科学技術研究の実績と専門部会の評価結果をとりまとめたものであり、第 2 章に専門部会の構成、第 3 章に研究の計画、第 4 章に研究成果と専門部会の評価意見、さらに付録に研究開発実績が記載されている。

2. 計算科学技術研究専門部会

専門部会の構成及び開催状況をそれぞれ表 2.1 及び表 2.2 に示す。

表 2.1 計算科学技術研究専門部会構成（敬称略）

部会長	功刀 資彰	京都大学大学院 工学研究科 教授
専門委員	岡崎 進	名古屋大学大学院 工学研究科 教授
	小野 謙二	九州大学 情報基盤研究開発センター 教授
	越塚 誠一	東京大学大学院 工学系研究科 教授
	常行 真司	東京大学大学院 理学系研究科 教授
	朴 泰祐	筑波大学大学院 システム情報工学研究科 教授

表 2.2 計算科学技術研究専門部会開催状況

回	開催日時	開催場所	主たる議題	特記事項
1	平成 30 年 2 月 16 日 13:30～16:00	日本原子力研究開発機構 東京事務所第 7 会議室 （東京都千代田区内幸町）	・ 中長期計画、平成 29 年度計画及び評価軸について ・ 平成 29 年度計算科学技術研究の実績について	小野専門委員は欠席

3. 計算科学技術研究における研究計画

3.1 中長期計画

計算科学技術研究を含む原子力基礎基盤研究については、「国立研究開発法人日本原子力研究開発機構の中長期目標を達成するための計画（中長期計画）（平成 27 年 4 月 1 日～平成 34 年 3 月 31 日）」に次のとおり定められた。下線部が計算科学研究についての計画である。

原子力利用を支え、様々な社会的ニーズへの科学的貢献と新たな原子力利用を創出するために、原子力科学技術基盤の根幹をなす核工学・炉工学、燃料・材料工学、原子力化学、環境・放射線科学及び計算科学技術分野を体系的かつ継続的に強化する。優れた科学技術・学術的成果の創出はもとより、機構の中核的なプロジェクトの加速や社会的ニーズに対応した課題解決に貢献するテーマ設定を行う。

具体的には、核データ、燃料・材料の劣化挙動、放射性核種の環境中挙動等の知見を蓄積し、長寿命核種の定量分析や核燃料物質の非破壊測定等の測定・分析技術を開発する。また、核特性、熱流動、環境動態、放射線輸送、耐震評価、シビアアクシデント時の炉内複雑現象等のモデル開発のための基礎データの拡充並びに信頼性及び妥当性検証のための測定手法や分析手法の開発を進め、データベース及びコンピュータシミュレーション技術の開発を進める。この研究を進めることにより東京電力福島第一原子力発電所事故の中長期的課題への対応、分離変換技術等の放射性廃棄物処理処分、軽水炉を含む原子炉技術高度化、環境影響評価及び放射線防護の各分野に貢献する。

3.2 年度計画

中長期計画を実現するための平成 29 年度の年度計画は、以下のように定められた。

計算科学技術研究では、シビアアクシデント時の炉内複雑現象解析に向け、平成 28 年度に取得したミクロレベルの物性値を用いて、界面を対象としたメゾスケールモデル解析を実施し、界面凝固物等の機械的特性に関するデータを取得する。また、エクサスケール流体解析に向け、省通信型反復行列解法を複雑流体解析に組み込んで適用性を評価するとともに、In-Situ 可視化システムをエクサスケール計算機の構成（メニーコア）向けに拡張する。

4. 研究実績と評価意見

中長期計画及び平成29年度計画に沿って実施した研究開発の実績について、表4.1にまとめる。
また、研究開発実績（論文、受賞、産学官連携等）の詳細については、付録に一覧を掲載する。

専門部会において、表4.1（平成30年2月16日時点）の内容を説明し、質疑応答等を経て議論した上で、専門委員からいただいた評価意見を表4.2に記載する。

表 4.1 平成 29 年度研究開発実績及び成果の意義等 (1/2)

	中長期計画	平成 29 年度計画	平成 29 の実績・成果	成果の科学的意義	機構内外のニーズへの適合・貢献	参考指標、優れた成果等
1	耐震評価、シビアアクシデント時の炉内複雑現象等のモデル開発のための(中略)データベース及びコンピュータシミュレーション技術の開発を進める。この研究を進めることにより東京電力福島第一原子力発電所事故の中長期的	シビアアクシデント時の炉内複雑現象解析に向け、平成 28 年度に取得したマイクロレベルの物性値を用いて、界面を対象としたメゾスケールモデル解析を実施し、界面凝固物等の機械的特性に関するデータを取得する。	○シビアアクシデント時の高温・高圧下、熔融燃料物表面での凝固組織生成メゾスケールモデルを構築し、凝固組織の形状を計算により推定した。またこの組織の弾性定数を評価することができた。 ○上記シミュレーション等を大規模化・高度化するために必要な基盤技術として、機械学習を応用して量子多体系の物理計算を高速化する手法を開発した。	○シビアアクシデント時の高温・高圧下、熔融燃料物表面での凝固組織生成は様々な条件に依存するため、実験だけでは包括的な理解が困難である。メゾスケールのシミュレーション手法を用いて評価することで、条件の違いでどのような組織が生成するかを包括的に推測することが可能となる。 ○量子多体系は計算量が膨大となるため、その物理現象を解明するには計算結果を解析し、より簡単なモデルで現象を再現する必要がある。本成果ではこのプロセスを機械学習で行うことに成功した。これにより超伝導機構解明など量子多体系の様々な未解決問題に向けて新たな可能性が開けた。	○燃料デブリの除去には、デブリの硬さなどの材料特性をあらかじめ推定しておくことが重要である。実験と並行して様々な条件での計算を行い材料特性値の範囲を推定しておくことが廃炉に向けて重要な課題となる。 ○機械学習を用いた高速かつ効率的な物質・材料モデルの構築が現在様々な分野で行われ多数の成功事例が報告されている。今後は理化学研究所 AIP 等の専門機関との共同研究も視野に入れ、更なる高度化を図る。	○査読付き論文数:11 件(IF3.0 以上 5 件) ○招待講演:4 件 ○外部資金:5 件(4,400 千円)(科研費基盤 C、新学術) ○国際会議発表:9 件 ○プレス発表:1 件(自ら学習し複雑な現象の本質を抽出可能にするモンテカルロ法の開発ー機械学習による量子シミュレーションの高速化ー)
2	課題への対応、分離変換技術等の放射性廃棄物処理処分、軽水炉を含む原子炉技術高度化、環境影響評価及び放射線防護の各分野に貢献する。	エクサスケール流体解析に向け、省通信型反復行列解法を複雑流体解析に組み込んで適用性を評価するとともに、In-Situ 可視化システムをエクサスケール計算機の構成(メニーコア)向けに拡張する。	○省通信型反復行列解法の炉内複雑流体解析コードへの適用性評価の結果、解法の頑健性が課題となった。改良アルゴリズムに基づく省通信型反復行列解法の開発により、数値安定な省通信ステップ数を一桁向上し、この課題を解決した。 ○In-Situ 可視化システムを最先端メニーコア環境に移植し、メニーコア最適化、データ I/O の改良によって、約 10 万コアまでの強スケーリングを達成した。	○従来の省通信型反復行列解法は誤差の蓄積に弱く、悪条件問題でしばしば数値不安定となることが課題であった。誤差の影響を弱める改良アルゴリズムの有効性を悪条件の実問題ではじめて実証し、省通信型行列解法の適用範囲を拡大することができた。 ○エクサスケール計算機のプロトタイプである最先端メニーコア環境で In-Situ 可視化システムの性能を実証することにより、将来のエクサスケールシミュレーションにおける In-Situ 可視化の有効性を示した。	○原子力基礎工学研究センターとの連携の下、熔融燃料移行挙動解析コードを対象とする研究開発を推進し、改良アルゴリズムに基づく省通信型反復行列解法により計算性能と頑健性を向上する。また、ポスト京重点課題にも省通信型反復行列解法に関する成果を展開し、最先端メニーコア環境における複雑流体解析の性能向上に貢献する。 ○原子力基礎工学研究センターとの連携の下、熔融燃料移行挙動解析コードへの In-Situ 可視化システムの適用を推進し、従来の汎用可視化ソフトウェアでは解析が困難な大規模シミュレーションの可視化解析の効率化に貢献する。	○査読付き論文数:15 件(IF3.0 以上 3 件) ○招待講演:1 件 ○外部資金:2 件(11,380 千円)(文科省ポスト京重点課題⑥「革新的クリーンエネルギーの実用化」等) ○国際会議発表:10 件 ○受賞:1 件(第 28 期可視化情報学会論文賞)

表 4.2 平成 29 年度研究開発実績及び成果の意義等 (2/2)

	中長期計画	平成 29 年度計画	平成 29 の実績・成果	成果の科学的意義	機構内外のニーズへの適合・貢献	参考指標、優れた成果等
3		その他（福島関連など「計算科学技術研究」の年度計画に記載はないが、機構内外との連携で実施したもの）	【放射性物質の環境動態に係る連携】 ○福島第一原子力発電所港湾内の放射性セシウム濃度変化について、データ解析と 3 次元流体シミュレーションの両面から解析し、東京電力ホールディング株式会社（以下「東電」という。）側に要因分析結果を提示すると同時に対策等の提案を行った。 ○空間線量率分布解析ツールを開発し、林野庁及び筑波大学との連携により森林内での解析を行った結果、樹木の遮蔽効果及び土壌中水分の遮蔽効果の重要性を見出した。 ○本年度発生した帰還困難区域での森林火災について、衛星画像の解析と米国農務省開発のコードによる計算から放射性物質拡散の評価を実施した。 【原子炉材料の脆化に係る連携】 ○原子炉圧力容器鋼の照射脆化等においては、変形を司る結晶欠陥である転位と他の様々な溶質元素、欠陥との相互作用が重要な役割を担っている。本年度において、欠陥集合体と転位の相互作用を原子スケールで計算する手法を確立した。	【放射性物質の環境動態に係る連携】 ○福島第一原子力発電所事故に関し、測定データの異常な変化の原因を特定したり、山火事、台風などの事象による線量率や放射性物質分布の変化を予測したりするにはシミュレーションによる解析が不可欠であり、適切なモデル構築に基づいた迅速な対応が求められる。 【原子炉材料の脆化に係る連携】 ○脆化予測式では欠陥集合体の大きさに応じた脆化への影響が仮定されるが、これを機構論的に検証する必要がある。第一原理計算による検証にはこれまでにない規模の計算が必要になるため、手法の確立のため鋼と同じ構造で計算が軽いタングステンを用い、こうした計算が実際に可能であることを初めて示した。	【放射性物質の環境動態に係る連携】 ○開発中の空間線量率計算ツールは今後公開予定である。また林野庁、東電などからの依頼で行ったデータ解析の結果をもとに対応策の提言を行っている。 【原子炉材料の脆化に係る連携】 ○転位と照射損傷・不純物などの相互作用は材料の機械的性質を決定する要因であるため、その原子論的計算は原子力分野のみならず鉄鋼メーカー等からも大変注目されている。本年度、原子力学会誌や OECD/NEA レポートなどでその最新動向を紹介する記事の依頼が 3 件、鉄鋼協会等からの 3 件の招待講演依頼があったことがこれを裏付けている。	【放射性物質の環境動態に係る連携】 ○査読付き論文数: 5 件 ○招待講演: 1 件 ○外部資金: 1 件 (300 千円) (科研費基盤 A 分担) ○国際会議発表: 1 件 ○受賞: 1 件 (理事長表彰・特賞 (環境動態プロジェクト)) 【原子炉材料の脆化に係る連携】 ○査読付き論文数: 4 件 ○招待講演: 3 件 ○外部資金: 5 件 (7,980 千) (内閣府戦略的イノベーション創造プログラム、JST 産学共創基礎基盤戦略研究プログラム等) ○国際会議発表: 2 件 ○学会誌解説記事: 3 件

【注】評価軸

- 基礎基盤研究及び先端原子力科学研究の成果・取組の科学的意義は十分に大きなものであるか（独創性・革新性の高い科学的意義を有する研究成果の創出、研究者の流動化・国際化に係る研究環境整備の取組など）。
- 基礎基盤研究の成果や取組は機構内外のニーズに適合し、また、それらの課題解決に貢献するものであるか（国のプロジェクトや機構内・学会・産業界からのニーズに貢献する成果の創出や成果活用促進取組など）。

表 4.2 平成 29 年度評価意見

評価項目 (年度計画)	評価に関する意見・コメント				
	計画進捗度	成果の科学的意義	機構内外のニーズへの適合・貢献	優れた成果等	その他当該研究に関するご意見等
シビアアクシデント時の炉内複雑現象解析に向け、高温・高圧下での核燃料挙動に関わる界面現象のメソスケールモデル構築に必要となるデータを算出する。	○研究開発は順調に進捗している。	○シビアアクシデント時の核燃料挙動の「今後はミクロとマクロのスケール間接続をどのように実現するかが重要な鍵」という昨年度コメントに対し、マクロの経験的パラメータをミクロに基づき機構論的に決定し、置換するという方向性は現実的であり進捗を期待する。	○計算技術開発では原子力基礎工学研究センターとよく連携しており、機構のニーズに貢献している。外部機関とも広く連携している。		○電力中央研究所で、シビアアクシデント関係で類似の計算をしているので、比較検討等してはどうか。 ○名古屋大学の小山先生が、フェーズフィールド法に必要なパラメータを実験から持ってきて、機械学習で決めることをやっている。そういうことをトライしてもよいと思う。 ○著名なジャーナルに論文を出されているが原子力系の論文誌にも出してもらいたい。物理系の論文誌が多いが、原子力分野としてどういう成果を上げているかをアピールする意味で原子力系の論文誌にも定期的に報告していただきたい。原子力系学術誌にも発表することで、原子力分野での visibility を向上するべき。 ○シビアアクシデント時の核燃料挙動に係る計算に関しては、異なるスケール間接続や系の定常性等に注意し、十分な検証のもとに進めること。 ○機構の他の部門で実施されている福島事故のデブリ研究の中での位置づけが欲しい。
エクサスケール流体解析のために、i)省通信型の反復行列解法及び ii) 計算と同時に可視化処理する In-situ 可視化技術の開発に着手する。		○エクサスケール流体の実現に向けて、アプリケーションの研究者とも連携して、意義のある研究をしている。可視化は流体分野でインパクトが大きい。		○昨年話を聞いたときは半信半疑だったが、実際見せてもらうと、この可視化ツールはかなりすばらしい。すぐにも使いたい。	○高速計算ライブラリや In-Situ 可視化システムは、コミュニティに積極的に公開すべき。 ○In-Situ 可視化システムに計算途中のデータを操作する対話的シミュレーション機能を拡張するとよい。 ○可視化ツールはよくできているが、問題は使う人をどう訓練するかである。 ○HPCI コンソーシアムと文科省と RIST 共催の京の運用停止とポスト京への移行に関する説明会があった。そこでアンケート回答を見ていると、可視化をもっとサポートしてほしいという意見がある。RIST 経由でやると早いと思う。
その他(機構内他部署との連携)					○炉内構造物(材料研究)と環境動態研究は平成 29 年度計画には書いていないが、その他(機構内他部署との連携)で読めるのか。

付録
平成 29 年度計算科学技術研究実績

This is a blank page.

平成 29 年度 計算科学技術研究実績

1. 研究論文、査読付き会議論文等

室	研究論文	査読付き会議論文
システム計算科学センター	1	1
高度計算機技術開発室	13	2
シミュレーション技術開発室	14	4
合計	28	7

(平成 30 年 3 月 31 日現在)

【システム計算科学センター】

< 研究論文 >

- ・ Machida Masahiko, Kato Koichiro, Shiga Motoyuki,
“Nuclear quantum effects of light and heavy water studied by all-electron first principles path integral simulations”,
Journal of Chemical Physics, Vol.148, No.10, pp.102324_1-102324_11, (2018).

< 査読付き会議論文 >

- ・ Sakurai Daisuke, Saeki Osamu, Carr H., Wu H.-Y., Yamamoto Takahiro, Duke D.,
Takahashi Shigeo,
“Interactive visualization for singular fibers of functionsInteractive Visualization for Singular Fibers of Functions $f: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^2$ ”,
IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, Vol.22, No.1, pp.945-954, (2016).

【高度計算機技術開発室】

< 研究論文 >

- ・ Wainwright H. M., Seki Akiyuki, Chen J., Saito Kimiaki,
“A Multiscale Bayesian data integration approach for mapping air dose rates around the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant”,
Journal of Environmental Radioactivity, Vol.167, pp.62-69, (2017).
- ・ Maeyama Shinya, Watanabe Tomohiko, Idomura Yasuhiro, Nakata Motoki, Ishizawa Akihiro, Nunami Masanori,
“Cross-scale interactions between turbulence driven by electron and ion temperature gradients via sub-ion-scale structures”,
Nuclear Fusion, Vol.57, No.6, pp.066036_1-066036_10, (2017).
- ・ Kawai Chika, Idomura Yasuhiro, Maeyama Shinya, Ogawa Yuichi,
“Impact of plasma parameter on self-organization of electron temperature gradient driven turbulence”,
Physics of Plasmas, Vol.24, No.4, pp.042303_1-042303_13, (2017).

- Huang B., Satake Shinsuke, Kanno Ryutaro, Sugama Hideo, Matsuoka Seikichi,
“Benchmark of the local drift-kinetic models for neoclassical transport simulation in helical plasmas”,
Physics of Plasmas, Vol.24, No.2, pp.022503_1-022503_19, (2017).
- Asahi Yuichi, Latu G., Ina Takuya, Idomura Yasuhiro, Grandgirard V., Garbet X.,
“Optimization of fusion kernels on accelerators with indirect or strided memory access patterns”,
IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems, Vol.28, No.7, pp.1974-1988, (2017).
- Idomura Yasuhiro,
“Toroidal angular momentum balance during rotation changes induced by electron heating modulation in tokamak plasmas”,
Physics of Plasmas, Vol.24, No.8, pp.080701_1-080701_5, (2017).
- Wu H.-Y., Takahashi Shigeo, Miyamura Hiroko, Ozahata Satoshi, Nakao Akihiro,
“Inferring partial orders of nodes for hierarchical network layout”,
Journal of Imaging Science and Technology, Vol.60, No.6, pp.060407_1-060407_13, (2016).
- 崔 炳賢, 西田 明美, 中島 憲宏,
「3次元有限要素モデルによる原子力施設の地震応答解析モデルの構築のための感度解析」 構造工学論文集 B, Vol.63B, pp.325-333, (2017).
- Asahi Yuichi, Grandgirard V., Idomura Yasuhiro, Garbet X., Latu G., Sarazin Y., Dif-Pradalier G., Donnel P., Ehrlacher C.,
“Benchmarking of flux-driven full-F gyrokinetic simulations”,
Physics of Plasmas, Vol.24, No.10, pp.102515_1-102515_17, (2017).
- Matsuoka Seikichi, Idomura Yasuhiro, Satake Shinsuke,
“Global kinetic simulations of neoclassical toroidal viscosity in low-collisional perturbed tokamak plasmas”,
Physics of Plasmas, Vol.24, No.10, pp.102522_1-102522_9, (2017).
- Kawamura Takuma, Noda Tomoyuki, Idomura Yasuhiro,
“Performance evaluation of runtime data exploration framework based on in-situ particle based volume rendering”,
Supercomputing Frontiers and Innovations, Vol.4, No.3, pp.43-54, (2017).
- Mantica P., Bourdelle C., Camenen Y., Dejarnac R., Evans T. E., Görler T., Hilleheim J., Idomura Yasuhiro, Jakubowski M., Ricci P., White A.,
“Summary of 21st joint EU-US Transport Task Force Workshop (Leysin, September 5-8, 2016)”, Nuclear Fusion, Vol.57, No.8, pp.087001_1-087001_19, (2017).
- Kanno Ryutaro, Nunami Masanori, Satake Shinsuke, Matsuoka Seikichi, Takamaru Hisanori,
“Electron heat diffusivity in radially-bounded ergodic region of toroidal plasma”,
Nuclear Fusion, Vol.58, No.1, pp.016033_1-016033_7, (2018).

＜査読付き会議論文＞

- ・ Igarashi Sayaka, Sakamoto Shigehiro, Nishida Akemi, Muramatsu Ken, Takada Tsuyoshi,
“Structural response by ground motions from sources with stochastic characteristics”,
Proceedings of 23rd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-23)
(DVD-ROM), 10p., (2015).
- ・ Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Mayumi Akie, Yamada Susumu, Matsumoto Kazuya,
Asahi Yuichi, Imamura Toshiyuki,
“Application of a communication-avoiding generalized minimal residual method to a
gyrokinetic five dimensional Eulerian code on many core platforms”,
Proceedings of 8th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for
Large-Scale Systems (Scala 2017), pp.7_1-7_8, (2017).

【シミュレーション技術開発室】

＜研究論文＞

- ・ Okumura Masahiko, Sassi M., Rosso K. M., Machida Masahiko,
“Origin of 6-fold coordinated aluminum at (010)-type pyrophyllite edges”,
AIP Advances (Internet), Vol.7, No.5, pp.055211_1-055211_9, (2017).
- ・ Marian J., Becquart C. S., Domain C., Dudarev S. L., Gilbert M. R., Kurtz R. J., Mason
D. R., Nordlund K., Sand A. E., Snead L. L., Suzudo Tomoaki, Wirth B. D.,
“Recent advances in modeling and simulation of the exposure and response of
tungsten to fusion energy conditions”,
Nuclear Fusion, Vol.57, No.9, pp.092008_1-092008_26, (2017).
- ・ Okamoto Norihiko, Takemoto Shohei, Chen Z. M. T., Yamaguchi Masatake, Inui
Haruyuki,
“FCC metal-like deformation behaviour of Ir3Nb with the L12 structure”,
International Journal of Plasticity, Vol.97, pp.145-158, (2017).
- ・ Araki Yuki, Sato Hisao, Okumura Masahiko, Onishi Hiroshi,
“Localization of cesium on montmorillonite surface investigated by frequency
modulation atomic force microscopy”,
Surface Science, Vol.665, pp.32-36, (2017).
- ・ Sassi M., Okumura Masahiko, Machida Masahiko, Rosso K. M.,
“Transmutation effects on long-term Cs retention in phyllosilicate minerals from first
principles”,
Physical Chemistry Chemical Physics, Vol.19, No.39, pp.27007-27014, (2017).
- ・ Nagai Yuki, Shen H., Qi Y., Liu J., Fu L.,
“Self-learning Monte Carlo method; Continuous-time algorithm”,
Physical Review B, Vol.96, No.16, pp.161102_1-161102_6, (2017).
- ・ 土田 豊, 海老原 健一,

「焼もどしマルテンサイト鋼の水素昇温脱離プロファイルの二種類のトラップサイトを仮定した数値シミュレーション」

鉄と鋼, Vol.103, No.11, pp.653-659, (2017).

- Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Tanaka Kaori,
“Time-reversal symmetry breaking and gapped surface states due to spontaneous emergence of new order in d-wave nanoislands”,
Physical Review B, Vol.96, No.6, pp.060503_1-060503_5, (2017).
- Ikeuchi Kazuhiko, Kobayashi Yoshiaki, Suzukia Kazunori, Ito Masayuki, Kajimoto Ryoichi, Bourges P., Christianson A. D., Nakamura Hiroki, Machida Masahiko, Sato Masatoshi,
“Phonons of Fe-based superconductor $\text{Ca}_{10}\text{Pt}_4\text{As}_8(\text{Fe}_{1-x}\text{Pt}_x\text{As})_{10}$ ”,
Journal of Physics: Condensed Matter, Vol.27, No.46, pp.465701_1-465701_7, (2015).
- Sasa Narimasa,
“Poincar'e integral invariant and momentum conservation in symplectic time integration of Hamiltonian partial differential equations”,
Journal of the Physical Society of Japan, Vol.86, No.7, pp. 074006_1-074006_6, (2017).
- Kimizuka Hajime, Ogata Shigenobu, Shiga Motoyuki,
“Mechanism of fast lattice diffusion of hydrogen in palladium; Interplay of quantum fluctuations and lattice strain”,
Physical Review B, Vol.97, No.1, pp. 014102_1-014102_11, (2018).
- Seki Yusuke, Takayanagi Toshiyuki, Shiga Motoyuki,
“Photoexcited Ag ejection from a low-temperature He cluster; A simulation study by nonadiabatic Ehrenfest ring-polymer molecular dynamics”,
Physical Chemistry Chemical Physics, Vol.19, No. 21, pp.13798-13806, (2017).
- Hiyama Miyabi, Shiga Motoyuki, Koga Nobuaki, Sugino Osamu, Akiyama Hidefumi, Noguchi Yoshifumi,
“The Effect of dynamical fluctuations of hydration structures on the absorption spectra of oxyluciferin anions in an aqueous solution”,
Physical Chemistry Chemical Physics, Vol.19, No.15, pp.10028-10035, (2017).
- Goertzen S. L., Tanaka Kaori, Nagai Yuki,
“Self-consistent study of Abelian and non-Abelian order in a two-dimensional topological superconductor”,
Physical Review B, Vol. 95, No.6, pp. 064509_1-064509_11, (2017).

<査読付き会議論文>

- Yamada Susumu, Ina Takuya, Sasa Narimasa, Idomura Yasuhiro, Machida Masahiko, Imamura Toshiyuki,
“Quadruple-precision BLAS using Bailey's arithmetic with FMA instruction; Its performance and applications”,
Proceedings of 2017 IEEE International Parallel & Distributed Processing Symposium

- Workshops (IPDPSW) (Internet), pp.1418-1425, (2017).
- ・ Ebihara Kenichi, Saito Kei, Takai Kenichi,
“Determination of detrapping and trapping rate constants for hydrogen based on experimental thermal desorption spectra”,
Proceedings of 2016 International Hydrogen Conference (IHC 2016); Materials Performance in Hydrogen Environments, pp.470-477, (2017).
 - ・ Yamaguchi Masatake, Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiro,
“Analysis of intergranular cracking in an alloy steel by hydrogen-enhanced decohesion”,
Proceedings of 2016 International Hydrogen Conference (IHC 2016); Materials Performance in Hydrogen Environments, pp.563-571, (2017).
 - ・ Malins A., Machida Masahiko, Niita Koji,
“Continuous energy adjoint transport for photons in PHITS”,
EPJ Web of Conferences (Internet), Vol.153, pp.06001_1-06001_9, (2017).

2. 国際会議、国内会議での発表等

【システム計算科学センター】

<査読無し論文>

- ・ 中島 憲宏,
「アブダクションによるデータ解析; 計算予測結果を読み解く力」
日本原子力学会誌, Vol.59, No.8, pp.34-38, (2017).
- ・ 中島 憲宏, 西田 明美, 宮村 浩子, 飯垣 和彦, 沢 和弘,
「原子力プラントの地震応答解析と可視化」
可視化情報全国講演会(日立 2016)論文集(USB Flash Drive), 4p., (2016).

<口頭発表>

- ・ 武宮 博, 斎藤 公明, 吉田 浩子,
「福島における放射性物質の分布状況調査,3; 常磐道における空間線量率分布および経時変化の解析」
日本原子力学会 2017 年秋の大会, (札幌, 日本, 2017 年 9 月 13 日～15 日).
- ・ 町田 昌彦, 山田 進, 渡辺 将久,
「福島第一原子力発電所港湾内の放射性核種の環境動態; 沿岸域を含めた環境影響評価の取り組み」
日本原子力学会 2018 年春の年会, (吹田, 日本, 2018 年 3 月 26 日～28 日).

【高度計算機技術開発室】

<査読無し論文>

- ・ 西田 明美,
「構造部材と非構造部材の設計クライテリア」
日本建築学会シンポジウム「建築物を取り巻く衝撃問題; 人災(衝突・爆発)、天災(津波・

- 竜巻)、テロへの備え」, pp.7-22, (2015).
- ・ Idomura Yasuhiro, Asahi Yuichi, Ina Takuya, Matsuoka Seikichi,
“Computational challenges towards Exa-scale fusion plasma turbulence simulations”,
Proceedings of 24th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics
(ICTAM 2016), pp.3106-3107, (2016).
 - ・ 河村 拓馬,
「オープンソース遠隔可視化ソフトウェア PBVR」
計算工学ナビ・ニュースレター(インターネット), Vol.7, pp.4-5, (2015).
 - ・ 西田 明美, 大橋 泰裕, 小尾 博俊, 竹内 義高, 加納 俊哉, 龍崎 響, 大田 敏郎, 岸 徳光,
小室 雅人, 中村 尚弘,
「設計事例」
建築物の耐衝撃設計の考え方, pp.161-202, (2015).

<口頭発表>

- ・ 西田 明美,
「フラジリティ評価における認識論的不確実さの評価に関する検討, 2; 建屋・地盤等に関する検討」
地震リスク評価に関するワークショップ 2013, (東京, 日本, 2013 年 3 月 15 日).
- ・ 関 暁之, 鈴木 健太, 高橋 義知, 松原 武史, 首藤 重雄, 斎藤 公明, 武宮 博,
「放射性物質モニタリングデータの情報公開サイトの開設」
環境創造センター研究成果報告会, (三春, 日本, 2017 年 4 月 11 日).
- ・ 小野寺 直幸, 大橋 訓英,
「GPU を用いた格子ボルツマン法による固気液連成解析モデルの開発」
第 22 回計算工学講演会, (さいたま, 日本, 2017 年 5 月).
- ・ Matsuoka Seikichi, Idomura Yasuhiro, Satake Shinsuke,
“Finite orbit width effect on the neoclassical toroidal viscosity in the
superbanana-plateau regime”,
7th Asia Pacific Transport Working Group International Conference (APTGW 2017),
(Nagoya, Japan, June 5-8, 2017).
- ・ Idomura Yasuhiro,
“Computational challenges towards strong scaling gyrokinetic Eulerian codes at
Exa-scale”,
The Platform for Advanced Scientific Computing Conference (PASC '17), (Lugano,
Switzerland, June 26-28, 2017).
- ・ Idomura Yasuhiro,
“Self-organization of plasma turbulence”,
9th Festival de Theorie, (Aix-en-Provence, France, June 26-July 7, 2017).
- ・ Matsuoka Seikichi, Idomura Yasuhiro, Satake Shinsuke,
“Development of GT5D for stellarator configurations”,
3rd US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on Innovations and

- Co-Designs of Fusion Simulations towards Extreme Scale Computing, (Kashiwa, Japan, August 7-8, 2017).
- ・ Idomura Yasuhiro,
“Status of fusion sub-project under Post-K project”,
3rd US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on Innovations and Co-Designs of Fusion Simulations towards Extreme Scale Computing, (Kashiwa, Japan, August 7-8, 2017).
 - ・ Kawamura Takuma,
“Scalable in-situ visualization framework”,
3rd US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on Innovations and Co-Designs of Fusion Simulations towards Extreme Scale Computing, (Kashiwa, Japan, August 7-8, 2017).
 - ・ 真弓 明恵, 井戸村 泰宏, 伊奈 拓也, 山田 進, 今村 俊幸,
「多相流体コード JUPITER における前処理付き Chebyshev 基底 CG 法ソルバの収束特性評価」
日本原子力学会 2017 年秋の大会, (札幌, 日本, 2017 年 9 月 13 日～15 日).
 - ・ 宮村 浩子, 松原 武史, 関 暁之, 武宮 博,
「走行サーベイデータの車窓画像上への表示」
日本原子力学会 2017 年秋の大会, (札幌, 日本, 2017 年 9 月 13 日～15 日).
 - ・ 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏,
「格子ボルツマン法を用いた物質拡散計算の高速化」
日本原子力学会 2017 年秋の大会, (札幌, 日本, 2017 年 9 月 13 日～15 日).
 - ・ 鈴木 喜雄,
「原子力施設全体規模の構造解析に向けた要素毎有限要素接触解析手法; 性能改善のための並列化手法開発」
日本原子力学会 2017 年秋の大会, (札幌, 日本, 2017 年 9 月 13 日～15 日).
 - 井戸村 泰宏,
「ジャイロ運動論的 full-f オイラーコード GT5D におけるエクサスケール計算技術開発」
プラズマシミュレータシンポジウム 2017, (土岐, 日本, 2017 年 9 月 7 日～8 日).
 - ・ 井戸村 泰宏,
「メニーコア環境における核融合プラズマ乱流シミュレーションの高速化」
ポスト「京」重点課題 8・重点課題 6; 第 1 回 HPC ものづくり統合ワークショップ, (東京, 日本, 2017 年 9 月 12 日).
 - ・ 関 暁之, 村上 治子, 斎藤 公明, 武宮 博,
「福島における放射性物質の分布状況調査,5; 福島における環境モニタリング結果の時間的变化」
日本原子力学会 2017 年秋の大会, (札幌, 日本, 2017 年 9 月 13 日～15 日).
 - ・ 宮村 浩子, 松原 武史, 関 暁之, 武宮 博,
「カーモニタリングデータ可視化アプリケーション」
第 8 回情報可視化研究室合同合宿, (八王子, 日本, 2017 年 9 月 8 日～9 日).

- ・ 松岡 清吉, 井戸村 泰宏, 佐竹 真介,
「3次元磁場平衡における大域的 full-f ジャイロ運動論シミュレーションの新古典輸送ベンチマーク」
プラズマシミュレータシンポジウム 2017, (土岐, 日本, 2017 年 9 月 7 日～8 日).
- ・ Matsuoka Seikichi, Idomura Yasuhiro, Satake Shinsuke,
“Benchmark studies of a global full-f gyrokinetic code through neoclassical transport and radial electric field in three-dimensional equilibria”,
21st International Stellarator-Heliotron Workshop (ISHW 2017), (Kyoto, Japan, October 2-6, 2017).
- ・ 井戸村 泰宏,
「Oakforest-PACS における大規模 CFD コードの計算技術開発」
第 1 回 OFP 利活用報告会(第 5 回 JCAHPC セミナー), (柏, 日本, 2017 年 10 月 12 日).
- ・ 松本 和也, 井戸村 泰宏, 伊奈 拓也, 真弓 明恵, 山田 進,
「HA-PACS/TCA における CA-GMRES 通信回避型 Krylov 部分空間法の実装と評価」
第 9 回「学際計算科学による新たな知の発見・統合・創出」シンポジウム, (筑波, 日本, 2017 年 10 月 10 日～11 日).
- ・ 井戸村 泰宏,
「サブ課題 D「核融合炉の炉心設計」の開発状況」
第 2 回ポスト「京」重点課題 6 シンポジウム, (東京, 日本, 2017 年 10 月 25 日).
- ・ Kawamura Takuma, Noda Tomoyuki, Idomura Yasuhiro,
“Cross-platform In-Situ visualization system for runtime data exploration based on PBVR”,
ISC High Performance Conference 2017 (ISC 2017), (Frankfurt, Germany, June 18-24, 2017).
- ・ 井戸村 泰宏,
「ジャイロ運動論コードのエクサスケール計算技術」
Plasma Conference 2017 (PLASMA 2017), (Himeji, Japan, 2017 年 11 月 20 日～24 日).
- ・ 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏,
「適合細分化格子を用いた格子ボルツマン法による物質拡散計算」
第 31 回数値流体力学シンポジウム, (京都, 日本, 2017 年 12 月 12 日～12 月 14 日).
- ・ Matsuoka Seikichi, Idomura Yasuhiro, Satake Shinsuke,
“Benchmark of neoclassical transport in a global full-f gyrokinetic simulations for stellarator plasmas”,
26th International Toki Conference and The 11th Asia Plasma and Fusion Association Conference, (Toki, Japan, December 5-8, 2017).
- ・ 河村 拓馬,
「PBVR による大規模シミュレーションの対話的遠隔可視化」
日本学術会議第 7 回計算力学シンポジウム, (東京, 日本, 2017 年 12 月 7 日).
- ・ 井戸村 泰宏,
「エクサスケール核融合プラズマシミュレーションに向けた計算技術開発」

- 九州大学情報基盤研究開発センターセミナー, (福岡, 日本, 2017 年 7 月 26 日).
- ・ 井戸村 泰宏,
「メニーコア環境における大規模 CFD コードの計算技術開発」
九州大学情報基盤研究開発センターセミナー, (福岡, 日本, 2018 年 2 月 5 日).
 - ・ 鈴木 喜雄,
「原子力施設全体規模の構造解析に向けた要素毎有限要素接触解析手法; 性能向上のための階層化手法の改善」
日本原子力学会 2018 年春の年会, (吹田, 日本, 2018 年 3 月 26 日～28 日).
 - ・ Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Mayumi Akie, Yamada Susumu, Matsumoto Kazuya, Asahi Yuichi, Imamura Toshiyuki,
“Performance evaluation of a modified communication-avoiding generalized minimal residual method on many core platforms”,
18th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP-18), (Tokyo, Japan, March 7-10, 2018).
 - ・ Mayumi Akie, Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki,
“Performance property of preconditioned Chebyshev basis CG solver for multiphase CFD simulations”,
18th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP-18), (Tokyo, Japan, March 7-10, 2018).
 - ・ Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro,
“Acceleration of turbulent wind simulation using locally mesh-refined Lattice Boltzmann Method”,
18th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP-18), (Tokyo, Japan, March 7-10, 2018).
 - ・ 井戸村 泰宏,
「Full-f ジャイロ運動論シミュレーションによる不純物輸送解析」
日本物理学会第 73 回年次大会, (野田, 日本, 2018 年 3 月 22 日～25 日).
 - ・ Inagaki Atsushi, Onodera Naoyuki, Kanda Manabu, Aoki Takayuki,
“Large eddy simulation of thermal atmospheric environment in urban boundary layer”,
18th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP-18), (Tokyo, Japan, March 7-10, 2018).
 - ・ Shimokawabe Takashi, Aoki Takayuki, Onodera Naoyuki,
“An AMR framework for realizing effective high-resolution simulations on multiple GPUs”,
18th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP-18), (Tokyo, Japan, March 7-10, 2018).
 - ・ 松岡 清吉, 井戸村 泰宏, 本多 充, 佐竹 真介, 鈴木 康浩,
「JT-60U における 3 次元効果の大域的運動論シミュレーションを用いた実験解析」
日本物理学会第 73 回年次大会, (野田, 日本, 2018 年 3 月 22 日～25 日).

【シミュレーション技術開発室】

<査読無し論文>

- ・ Yamaguchi Masatake,
“Embrittlement without hardening; Grain boundary embrittlement”,
NEA/NSC/R(2016)5 (Internet), pp.303-316, (2017).
- ・ 山口 正剛,
「第一原理計算によるマグネシウム合金のすべり変形挙動評価」
まてりあ, Vol.56, No.8, pp.480-483, (2017).
- ・ 沖田 泰良, 板倉 充洋,
「材料挙動と計算機シミュレーションの接点,2; 原子力材料の分子シミュレーション; 現状と展望」
日本原子力学会誌, Vol.59, No.12, pp.712-716, (2017).
- ・ 山口 正剛,
「材料挙動と計算機シミュレーションの接点,3; 粒界破壊における破壊力学試験と第一原理計算」
日本原子力学会誌, Vol.60, No.1, pp.30-34, (2018).

<口頭発表>

- ・ 海老原 健一, 山口 正剛, 都留 智仁, 板倉 充洋
「純アルミニウムにおける水素昇温脱離スペクトルの数値シミュレーションによる考察」
軽金属学会第 131 回秋期大会, (水戸, 日本, 2016 年 11 月 5 日～6 日).
- ・ 町田 昌彦, 山田 進, 小山 富男,
「固有ジョセフソン接合系での巨視的量子トネリグ; 非線形結合とダイナミクス」
日本物理学会第 72 回年次大会, (豊中, 日本, 2017 年 3 月 17 日～20 日).
- ・ 町田 昌彦, 山田 進, 渡辺 将久,
「福島第一原子力発電所港湾内放射性核種の動態解析,1; モニタリングデータによるトレンド分析」
日本原子力学会 2017 年春の年会, (平塚, 日本, 2017 年 3 月 27 日～29 日).
- ・ Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Tanaka Kaori,
“Anti-peak profile of the nuclear magnetic relaxation rate in a superconducting topological insulator”,
American Physical Society 2017 March Meeting, (New Orleans, U. S. A., March 13-17, 2017).
- ・ 山田 進, 町田 昌彦, 渡辺 将久,
「沿岸域における放射性物質動態のモデル開発; 1F 港湾内に対するシミュレーションコードの開発」
環境創造センター研究成果報告会, (三春, 日本, 2017 年 4 月 11 日).
- ・ 志賀 基之,
「並列分子シミュレーションコード PIMD について」

- 第 20 回理論化学討論会, (京都, 日本, 2017 年 5 月).
- Okumura Masahiko, Machida Masahiko, Kogure Toshihiro,
“Ab initio numerical study of halloysite”,
16th International Clay Conference (ICC 2017), (Granada, Spain, July 17-21, 2017).
 - Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“Molecular modeling of adsorption sites in micaceous clay minerals”,
16th International Clay Conference (ICC 2017), (Granada, Spain, July 17-21, 2017).
 - Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“A First-principles study on point defects in plutonium dioxide”,
ACTINIDES 2017, (Sendai, Japan, July 9-14, 2017).
 - Machida Masahiko, Nakamura Hiroki, Kato Masato,
“Ab-initio calculations of thermal properties of actinide dioxides”,
ACTINIDES 2017, (Sendai, Japan, Jul-17).
 - Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Tanaka Kaori,
“Second-order phase transition due to disappearance of topological protection in d-wave superconducting nanoislands”,
International Conference on Topological Materials Science 2017 (TopoMat2017),
(Tokyo, Japan, May 9-13, 2017).
 - Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Tanaka Kaori,
“Time-reversal symmetry breaking phase, gapped surface states, and vortex-antivortex pairs in d-wave nanoislands”,
16th International Workshop on Vortex Matter in Superconductors (VORTEX 2017),
(Natal, Brazil, May 29 - June 2, 2017).
 - Nagai Yuki, Shen H., Qi Y., Liu J., Fu L.,
“Self-learning continuous-time quantum Monte Carlo method”,
Order, Fluctuations, and Strong Correlations; New Platforms and Developments
(INTERTWINED C17), (Santa Barbara, U. S. A., July 31 - August 4, 2017).
 - Suzudo Tomoaki,
“Modeling of radiation-induced embrittlement of fusion materials”,
3rd US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on Innovations and
Co-Designs of Fusion Simulations towards Extreme Scale Computing, (Kashiwa,
Japan, August 7-8, 2017).
 - Kim M., 塩谷 仁, 佐久間 一幸, Malins A., 町田 昌彦, 北村 哲浩,
「森林火災に伴う放射性セシウムの動態とその環境影響評価手法の研究開発」
日本原子力学会 2017 年秋の大会, (札幌, 日本, 2017 年 9 月 13 日～15 日).
 - 奥村 雅彦,
「粘土鉱物によるセシウム吸着現象の原子スケールシミュレーション研究」
2017 年度日本地球化学会第 64 回年会, (東京, 日本, 2017 年 9 月 13 日～15 日).
 - 早川 頌, 沖田 泰良, 板倉 充洋, Haixuan X., Osetsky Y.,
「BCC-Fe における転位・結晶欠陥集合体間相互作用の原子論的解析」

- 日本原子力学会 2017 年秋の大会, (札幌, 日本, 2017 年 9 月 13 日～15 日).
- ・ 中村 博樹, 町田 昌彦,
「二酸化プルトニウムの点欠陥に関する第一原理計算」
日本原子力学会 2017 年秋の大会, (札幌, 日本, 2017 年 9 月 13 日～15 日).
- ・ 海老原 健一, 鈴木 知明, 山口 正剛,
「分子動力学シミュレーションによる粒界リン偏析過程の考察」
日本金属学会 2017 年秋期(第 161 回)講演大会, (札幌, 日本, 2017 年 9 月 6 日～8 日).
- ・ 谷口 啓介, 鬼塚 貴志, 福元 謙一, 鈴木 知明,
「分子動力学シミュレーションを用いた純 Fe 中のらせん転位とボイドの相互作用の研究,
5」
日本金属学会 2017 年秋期(第 161 回)講演大会, (札幌, 日本, 2017 年 9 月 6 日～8 日).
- ・ 佐々 成正,
「ハミルトン系の相空間面積計算手法」
日本応用数理学会 2017 年度年会, (東京, 日本, 2017 年 9 月 6 日～8 日).
- ・ 町田 昌彦, 山田 進, 渡辺 将久,
「福島第一原子力発電所港湾を含む沿岸域における放射性核種の環境動態」
日本原子力学会 2017 年秋の大会, (札幌, 日本, 2017 年 9 月 13 日～15 日).
- ・ 町田 昌彦, 奥村 雅彦, 中村 博樹, 山口 正剛,
「第一原理原子・分子シミュレーションの現状と原子力分野での研究進展」
日本原子力学会 2017 年秋の大会, (札幌, 日本, 2017 年 9 月 13 日～15 日).
- ・ Yamaguchi Masatake,
“Combined analysis of first-principles calculations and fracture mechanics
experiments on intergranular embrittlement of a Ni-Cr steel”,
5th International Symposium on Steel Science (ISSS 2017), (Kyoto, Japan, November
13-16, 2017).
- ・ 永井 佑紀, 太田 幸宏, 田中 佳織,
「d 波超伝導ナノアイランドにおける時間反転対称性の破れた相と渦糸・反渦糸」
第 25 回渦糸物理国内会議, (恩納, 日本, 2017 年 11 月 27 日～29 日).
- ・ 山田 進, 今村 俊幸, 町田 昌彦,
「LOBPCG 法を用いたハバードモデルの厳密対角化; 複素固有値に対する省通信ノイマ
ン展開前処理の有効性」
情報処理学会第 162 回ハイパフォーマンズコンピューティング研究発表会, (熊本, 日本,
2017 年 12 月 18 日～19 日).
- ・ 鈴木 知明,
「分子動力学による材料照射モデリング研究; 力学系シミュレーションによる展開」
材料照射研究会・ゼロエミッションエネルギー拠点研究会(ZE 研究会); 照射効果(II), (宇
治, 日本, 2018 年 1 月 10 日～12 日).
- ・ 鈴木 知明,
「タングステンにおける照射効果モデリング研究」
核融合フォーラム炉工学・炉材料モデリングサブクラスター会合, (宇治, 日本, 2018 年 1

- 月 11 日).
- ・ Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Tanaka Kaori,
“Spontaneous time-reversal breaking and topologically protected gapless states in unconventional nano superconductors”,
TMS-EPiQS 2nd Alliance Workshop: Topological Magnets and Topological Superconductors, (Tokyo, Japan, January 10-14, 2018).
 - ・ Itakura Mitsuhiro,
“First-principles calculation of interaction between iron dislocation and carbon atoms”,
6th ESISM International Workshop, (Kyoto, Japan, February 27-28, 2018).
 - ・ 中村 博樹,
「第一原理計算による核燃料物質の物性評価」
第 22 回原子力計算科学セミナー, (柏, 日本, 2018 年 2 月 4 日).
 - ・ 板倉 充洋,
「計算科学による軽水炉および新型炉の材料研究」
第 22 回原子力計算科学セミナー, (柏, 日本, 2018 年 2 月 4 日).
 - ・ Kim M., Malins A., 佐久間 一幸, 北村 哲浩, 町田 昌彦, 長谷川 幸弘, 柳 秀明,
「DEM・DSM データと現実的な建物・樹木モデルを用いた空間線量率評価システムツールの開発」
日本原子力学会 2018 年春の年会, (吹田, 日本, 2018 年 3 月 26 日～28 日).
 - ・ 中村 博樹, 町田 昌彦,
「第一原理計算による(Th,Pu)O₂ の機械的物性評価」
日本原子力学会 2018 年春の年会, (吹田, 日本, 2018 年 3 月 26 日～28 日).
 - ・ 板倉 充洋, 山口 正剛,
「鉄中の転位; 第一原理計算による新知見」
日本金属学会 2018 年春期(第 162 回)講演大会, (習志野, 日本, 2018 年 3 月 19 日～21 日).
 - ・ Ebihara Kenichi, Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake,
“Simulation of phosphorous migration to grain-boundary by molecular dynamics”,
147th Annual Meeting & Exhibition (TMS 2018), (Phoenix, U.S.A., March 11-15, 2018).
 - ・ 永井 佑紀, Shen, H., Qi, Y., Liu, J., Fu, L.,
「自己学習連続時間量子モンテカルロ法; 機械学習を用いたマルコフ連鎖モンテカルロ法の高速化」
日本物理学会第 73 回年次大会, (野田, 日本, 2018 年 3 月 22 日～25 日).
 - ・ 早川 頌, 沖田 泰良, 板倉 充洋, Haixuan, X., Osetsky, Y.,
「BCC 鉄における自己格子間原子集合体の三次元的運動に関する検討」
日本原子力学会 2018 年春の年会, (吹田, 日本, 2018 年 3 月 26 日～28 日).
 - ・ Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Nakanishi Daiki, Kawabata Tomoya,
“Molecular dynamics simulations of effects of stacking fault energies on defect formation process in FCC metals”,
147th Annual Meeting & Exhibition (TMS 2018), (Phoenix, U.S.A., March 11-15, 2018).

3. 技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

- ・ システム計算科学センター
「平成 28 年度大型計算機システム利用による研究成果報告集」
JAEA-Review 2017-023, 157p., (2018).
- ・ システム計算科学センター
「平成 28 年度計算科学技術研究実績評価報告」
JAEA-Evaluation 2017-002, 37p., (2017).

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- ・ 2018 年 1 月 26 日 “自ら学習し複雑な現象の本質を抽出可能にするモンテカルロ法の開発ー機械学習による量子シミュレーションの高速化ー”
(米国物理学雑誌「Physical Review B」の「Rapid Communication」セクションのオンライン版に掲載され、Physical Review B 編集者が選ぶ注目論文“Editors’ Suggestion”に選出)
- ・ 2018 年 3 月 23 日 “炉心溶融挙動を予測する新しい数値シミュレーションコードの開発ーデブリの詳細な組成分布の推定に光が見えたー”
(原子力基礎工学研究センターよりプレス発表)
- ・ 2018 年 3 月 28 日 “「答えます みんなが知りたい福島のことー根拠情報 Q & A サイトー」の見直しについて (ホームページリニューアルのお知らせ)”
(福島研究開発部門よりプレス発表)

5. 研究発表会等の開催

- ・ 3rd US-Japan Workshop on Innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing (2017 年 8 月 7 日～8 月 8 日)
- ・ 科研費によるワークショップ「レアイベントの計算科学」(2017 年 8 月 28 日～30 日)
- ・ 第 21 回原子力計算科学セミナー(2018 年 2 月 26 日)
「ポスト福島原発事故の原子力材料研究ー材料リスク評価に関わる計算科学ー」
- ・ シミュレーション技術開発室セミナー
2018 年 2 月 13 日：杉田 剛 (日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター)
「溶媒抽出法を用いた金属イオン分離・回収に関する研究と計算科学的アプローチの探索」

6. 受賞等

- ・ 第 28 期可視化情報学会 学会賞 (論文賞)
河村 拓馬
(可視化情報学会、平成 29 年 7 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	今年度収入額
並列分子動力学ステンシル 他 2 件	株式会社 JSOL	プログラム著作 権／利用許諾	3,008,017 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	64,760 (7)
シミュレーション技術開発室	16,401 (14)

【高度計算機技術開発室】

- (1) 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化（分担課題：核融合炉の炉心設計）（東京大学） 10,500 千円
- (2) 空間線量観察のためのマジックレンズ（日本学術振興会:科研費(基盤 C)） 780 千円
- (3) 広域線量分布測定用装置（KURAMA-II）データ解析・補正委託業務（福島県） 34,000 千円
- (4) 東京電力株式会社福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の分布データの集約事業（原子力規制庁） 12,000 千円
- (5) 福島県内空間線量率の経時変化傾向の分析（福島環境創造センター） 6,700 千円
- (6) 次世代の船舶運航・操船支援システムの研究開発（日本学術振興会:科研費(基盤 B)） 650 千円
- (7) 都市街区スケールとメソスケールをつなぐ大規模数値計算（日本学術振興会:科研費(基盤 C)） 130 千円

【シミュレーション技術開発室】

- (8) 「界面」を通じた、構造材料における未解決課題克服のための技術構築（分担課題：第一原理からの水素脆性メカニズム解明）（科学技術振興機構：SIP） 5,300 千円
- (9) 水素分配制御によるアルミニウム合金の力学特性最適化（科学技術振興機構：産学共創） 1,300 千円
- (10) ポスト「京」萌芽的課題 基礎科学のフロンティア極限への挑戦（分担課題：破壊とカタストロフィ）（東北大学金属材料研究所） 780 千円
- (11) イオン伝導体によるリチウム同位体分離技術に関する研究（自動車メーカー） 1,691 千円
- (12) 量子多体問題に対するアクセレータを用いた高速化・並列化手法の研究開発（日本学術振興会:科研費(基盤 C)） 1,300 千円
- (13) 水を反応場とするグリーンケミストリーの計算化学（日本学術振興会:科研費(基盤 C)） 650 千円
- (14) 大型計算機を用いた核燃料熱物性の第一原理計算による評価手法の開発（日本学術振興会:科研費(基盤 C)） 1,040 千円
- (15) 第一原理強束縛模型によるトポロジカル物質のバルク観測量提案（日本学術振興会:科研費(新学術領域)） 1,560 千円
- (16) 福島汚染土壌の減容化と再生利用に向けたセシウムフリー鉱化法の開発（日本学術振興会:

- 科研費(基盤 A)) 400 千円
- (17) リチウム 6 吸着イオン伝導体による革新的同位体分離に関する研究 (日本学術振興会:科研費(基盤 B)) 390 千円
- (18) デュアル電流バイアス運動インダクタンス検出器による中性子検出効率の改善 (日本学術振興会:科研費(基盤 A)) 390 千円
- (19) 地衣類における金属蓄積・保持機構の解明と放射性汚染物質降下量評価への適用 (日本学術振興会:科研費(挑戦的萌芽研究)) 40 千円
- (20) 粒界偏析エネルギーの算出方法に関する拡散レートモデルによる評価 (日本学術振興会:科研費(基盤 C)) 650 千円
- (21) タングステン合金における照射誘起析出発生メカニズム解明 (日本学術振興会:科研費(基盤 C)) 910 千円

9. 産学官との連携に関連する事項

室	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	4	0	5	0
シミュレーション技術開発室	4	0	3	0
両室共通	0	0	0	1
合計	8	0	8	1

●共同研究

【高度計算機技術開発室】

- ・ 大規模複雑流体シミュレーション技術の研究開発 (東京大学)
- ・ 大規模有限要素法解析のための連立一次方程式解法の高度化に関する研究 (東京大学)
- ・ ジャイロ運動論シミュレーションによる乱流輸送低減効果の研究 (量子科学技術研究開発機構、自然科学研究機構核融合科学研究所、名古屋大学、東京大学)
- ・ 個人向け行路線量計算システムの構築 (東北大学、東日本高速道路株式会社の共同研究に研究協力者として参加)

【シミュレーション技術開発室】

- ・ 大規模並列計算用ライブラリの研究開発 (理化学研究所)
- ・ イオン伝導体によるリチウム同位体分離技術に関する研究 (自動車メーカー)
- ・ 大規模複雑人工物構造材料に劣化予測技術構築に関する研究 (東京大学)
- ・ 「界面」を通じた、構造材料における未解決課題克服のための技術構築 (九州大学、北見工業大学、京都大学、大阪大学)

●受託研究

【高度計算機技術開発室】

- ・ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化 (分担課題: 核融合炉の炉心設計) (東京大学)
- ・ 高温ガス炉の確率論的安全評価手法の開発 (文部科学省) (原子力科学研究部門受託に参加)
- ・ 広域線量分布測定用装置 (KURAMA-II) データ解析・補正委託業務 (福島県) (福島研究開発部門受託に参加)
- ・ 東京電力福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の分布データの集約事業 (原子力規

制庁) (福島研究開発部門受託に参加)

- ・ 福島県内空間線量率の経時変化傾向の分析 (福島環境創造センター) (福島研究開発部門受託に参加)

【シミュレーション技術開発室】

- ・ 「界面」を通じた、構造材料における未解決課題克服のための技術構築 (分担課題: 第一原理からの水素脆性メカニズム解明) (科学技術振興機構)
- ・ 水素分配制御によるアルミニウム合金の力学特性最適化 (科学技術振興機構)
- ・ ポスト「京」萌芽的課題 基礎科学のフロンティア極限への挑戦 (分担課題: 破壊とカタストロフィ) (東北大学金属材料研究所)

●研究協定

- ・ 「国立大学法人東京大学と独立行政法人日本原子力研究開発機構との間における連携協力の推進に係る協定書」に基づく「国立大学法人東京大学と独立行政法人日本原子力研究開発機構との計算科学研究協力に関する覚書」(東京大学)

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、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 23 件に及ぶ機構内連携を実施した。

(1) 包括的評価システムの構築

部署: 福島研究開発部門 (福島環境安全センター)

概要: 福島第一原子力発電所事故に関してデータベース、解析コード、ウェブサイトを構築・連携させ、福島復興に資する情報を専門家および一般向けに提供する。

(2) 福島県空間線量率測定データの情報発信

部署: 福島研究開発部門 (福島環境安全センター)

概要: 福島県下を走行する路線バスを活用することで得られる、地域住民に密着した空間線量率分布データを可視化し、迅速に公開する。

(3) 土壌粘土鉱物への放射性セシウム吸着の解析

部署: 福島研究開発部門 (福島環境安全センター)、原子力科学研究部門 (物質科学研究センター)

概要: 粘土鉱物に対する吸着化学形態を量子ビームと計算科学の両面から解明する。

(4) ゼオライトへの放射性セシウム吸着の解析

部署: 原子力科学研究部門 (先端基礎研究センター、原子力基礎工学研究センター)

概要: ゼオライトのセシウム吸着性状について計算科学の観点から評価する。

(5) 河口及び沿岸でのセシウム長期輸送解析

部署: 福島研究開発部門 (福島環境安全センター)、原子力科学研究部門 (原子力基礎工学研究センター)、バックエンド研究開発部門 (東濃地科学センター)

概要: 福島長期環境予測に資するため、河口及び沿岸での 2/3 次元のセシウム長期輸送解析システムを開発する。

(6) 土壌有機物におけるセシウム吸着特性の評価

部署: 福島研究開発部門 (福島環境安全センター)、原子力科学研究部門 (物質科学研究センター)

概要：有機物におけるセシウムの吸着形態や輸送特性を原子・分子レベルから評価する。

(7) 福島第一原子力発電所港湾内放射性核種動態シミュレーション

部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）

概要：福島第一原子力発電所の港湾内の放射性核種の動態をシミュレーションにより評価する。

(8) コンプトンカメラ 3 次元画像再構成技術の開発

部署：福島研究開発部門（廃炉国際共同研究センター）

概要：コンプトンカメラによる γ 線計測データから放射性物質の 3 次元分布を再構成する技術を開発する。

(9) 原子力施設の耐震解析の高度化支援

部署：安全研究・防災支援部門（安全研究センター）

概要：有限要素法に基づく耐震解析システムにおける行列ソルバの高速化を支援する。

(10) 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：安全研究・防災支援部門（安全研究センター）

概要：脆化予測に必要な基礎的知見を提供するため、第一原理計算や、それに基づくレート方程式シミュレーションを実施。

(11) 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：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

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。

(12) 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：原子力科学研究部門（物質科学研究センター、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。

(13) 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：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

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。

(14) 六方晶金属の機械的性質の計算科学研究

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

概要：計算モデリングが進んでおらず、基礎的な機械的性質についてもよくわかっていない六方晶金属（燃料被覆管 Zr 合金、自動車用軽量金属）について、第一原理計算にもとづいたモデリング手法を開発する。

(15) シンクロ型 LPSO 構造の材料科学

部署：原子力科学研究部門（J-PARC センター）

概要：熊本大学で開発された LPSO（長周期積層構造）をもつマグネシウム合金の基本的な物性を解明する。

(16) 分子動力学計算と実験による MA 含有 MOX 燃料の熱物性と微視的構造の評価

部署：原子力科学研究部門（先端基礎研究センター、原子力基礎工学研究センター）、高速炉研究開発部門（次世代高速炉サイクル研究開発センター）

概要：マイナーアクチニドを含有する **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。

(17) 転位バイアス因子の理論的解明

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

概要：照射スウェリングの原因である転位バイアス因子の理論の構築。

(18) セシウムの地衣類等の生体内での分布メカニズムの解明

部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）

概要：地衣類に代表される生物生体内でのセシウムの分布のメカニズムを生体代謝物や細胞組織との吸着化学形態の解析を基に明らかにする。

(19) ストロニウム吸着材チタン酸化合物の開発

部署：福島研究開発部門（核燃料サイクル工学研究所環境技術開発センター）

概要：ストロニウム吸着材チタン酸化合物の開発に対し、計算科学的手法を援用し、開発を加速させる。

(20) ガラス溶融固化シミュレーション高速化

部署：バックエンド研究開発部門（核燃料サイクル工学研究所）

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。

(21) 大型放射光施設等による物性実験データの第一原理計算による解析

部署：原子力科学研究部門（物質科学研究センター）

概要：鉄系高温超伝導体等の超伝導発現機構の解明のために、物質科学研究センターの大型放射光施設等で得られる実験データを第一原理計算を用いて解析する。

(22) 燃料溶融複雑系の解析に関する技術協力

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

概要：燃料溶融複雑系の大規模シミュレーションデータの高度化に向けて計算モデル拡張の支援、高速行列ソルバの開発、高速可視化処理ツールの開発を行う。

(23) 放射性物質拡散解析に関する技術協力

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

概要：放射性物質拡散解析のための局地的気流解析シミュレーションの高速化を支援する。

1 1. 国際協力

国際協力の一覧を以下に示す。

(1) 原子力・代替エネルギー庁（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 年度～）

(2) カリフォルニア大学バークレー校（UCB）：米国

“地層処分及び燃料サイクルに関する共同研究契約”（この共同研究の一環として、計算科学の観点から協力している。）

(2008 年度～、システム計算科学センターの協力は 2011 年度～)

(3) パシフィックノースウェスト国立研究所 (PNNL) : 米国

“環境汚染の評価及び浄化に係る共同研究契約” (この共同研究の一環として、計算科学の観点から協力している。)

(2011 年度～)

(4) 国際原子力機関 (IAEA)

“国際協力研究事業 (食糧・農業に影響を及ぼす原子力災害への対策) 「食糧・農業モニタリングデータの収集、管理および提供のためのソフトウェアプラットフォームの研究開発」” (IAEA 主導のもと 8 カ国が参加)

(2013 年度～)

(5) ローレンス・バークレイ国立研究所(LBNL) : 米国

“2011 年に発生した福島事故による Cs の広域放出を経験した福島地域の環境復興に関する委託研究” (この研究の一環として、計算科学の観点から協力している。)(2015 年度～)

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량	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 組立単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m ²
体積	立方メートル	m ³
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	キログラム毎立方メートル	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	ジーメンズ	S	A/V	m ⁻² kg ⁻¹ s ³ A ²
磁束	ウェーバ	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)	°C		K
光束度	ルーメン	lm	cd sr ^(c)	cd
照射度	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
酸素活性化	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及び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のみ、ベクレルは放射性核種の統計的過程についてののみ使用される。

(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
粘着力のモーメント	パスカル秒	Pa s	m ⁻¹ kg s ⁻¹
表面張力	ニュートンメートル	N m	m ² kg s ⁻²
角速度	ニュートン毎メートル	N/m	kg s ⁻²
角加速度	ラジアン毎秒	rad/s	m m ⁻¹ s ⁻¹ =s ⁻¹
角速度	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 s A
電表面電荷	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² s A
電束密度, 電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² s A
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 s A
吸収線量率	グレイ毎秒	Gy/s	m ² s ⁻³
放射線強度	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	名称	記号	乗数	名称	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=60 s
時	h	1 h=60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86 400 s
度	°	1°=(π/180) rad
分	′	1′=(1/60)°=(π/10 800) rad
秒	″	1″=(1/60)′=(π/648 000) rad
ヘクタール	ha	1 ha=1 hm ² =10 ⁴ m ²
リットル	L, l	1 L=1 l=1 dm ³ =10 ³ cm ³ =10 ⁻³ m ³
トン	t	1 t=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	1 eV=1.602 176 53(14)×10 ⁻¹⁹ J
ダルトン	Da	1 Da=1.660 538 86(28)×10 ⁻²⁷ kg
統一原子質量単位	u	1 u=1 Da
天文単位	ua	1 ua=1.495 978 706 91(6)×10 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=100 kPa=10 ⁵ Pa
水銀柱ミリメートル	mmHg	1 mmHg=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
バイン	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。
ベレル	B	
デシベル	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	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 ⁴ cd m ⁻²
フオト	ph	1 ph=1cd sr cm ⁻² =10 ⁴ lx
ガリ	Gal	1 Gal=1cm s ⁻² =10 ⁻² ms ⁻²
マクスウェル	Mx	1 Mx=1 G cm ² =10 ⁻⁸ Wb
ガウス	G	1 G=1Mx cm ⁻² =10 ⁻⁴ T
エルステッド ^(a)	Oe	1 Oe≡ (10 ³ /4 π) A m ⁻¹

(a) 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=3.7×10 ¹⁰ Bq
レントゲン	R	1 R = 2.58×10 ⁻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 γ=1 nT=10 ⁻⁹ T
フェルミ	f	1 フェルミ=1 fm=10 ⁻¹⁵ m
メートル系カラット		1 メートル系カラット=0.2 g = 2×10 ⁻⁴ kg
トル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
カロリ	cal	1 cal=4.1858J (「15℃」カロリ), 4.1868J (「IT」カロリ), 4.184J (「熱化学」カロリ)
ミクロン	μ	1 μ =1μm=10 ⁻⁶ m

