



JAEA-Evaluation

2019-007

DOI:10.11484/jaea-evaluation-2019-007

平成 30 年度計算科学技術研究実績評価報告

Review of Research on Advanced Computational Science in FY2018

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

November 2019

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

JAEA-Evaluation

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 30 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

(2019 年 8 月 20 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 30 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 FY2018

Center for Computational Science & e-Systems

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

(Received August 20, 2019)

Research on advanced computational science for nuclear applications, based on “the plan to achieve the mid- and long-term goal of the Japan Atomic Energy Agency”, has been performed at Center for Computational Science & e-Systems (CCSE), Japan Atomic Energy Agency.

CCSE established a committee consisting of outside experts and authorities which does research evaluation and advice for the assistance of the future research and development.

This report summarizes the results of the R&D performed at CCSE in FY2018 (April 1st, 2018 - March 31st, 2019) and the evaluation by the committee on them.

Keywords: Research Evaluation, Numerical Simulation, Computer Science, Computational Science, Multi-scale Modeling, Material 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	5
4.1 中間評価	5
4.2 平成 30 年度評価	19
付録 平成 30 年度計算科学技術研究実績	29

Contents

1. Introduction	1
2. Evaluation Committee	2
3. R&D Plans for the Advanced Computational Science Research of CCSE/JAEA	3
3.1 Mid- and Long-term Plan	3
3.2 Plan for Fiscal Year (FY2015-FY2018)	3
4. Results of the R&D and the Evaluation Comments	5
4.1 Interim Evaluation	5
4.2 FY2018	19
Appendix List of Achievements in FY2018	29

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30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。なお、平成30年度は、第3期中長期目標期間の中間評価と当該年度評価の両方が実施された。

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	理化学研究所 計算科学研究機構 可視化技術研究チームリーダー （～平成 27 年度） 九州大学 情報基盤研究開発センター 教授（平成 28 年度～）
	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 10 月 12 日 13:30～16:30	機構東京事務所 第 4 会議室 （東京都千代田区内幸町）	<ul style="list-style-type: none"> 研究評価（中間評価）の目的と方法について 対象期間の研究の実績について 	岡崎委員、常行委員は欠席。 各委員に対し、それぞれ、10/19、10/23 に個別に説明を実施。
2	平成 31 年 1 月 8 日 10:30～12:00	機構東京事務所 第 4 会議室 （東京都千代田区内幸町）	<ul style="list-style-type: none"> 中長期計画、平成 30 年度計画及び評価軸について 平成 30 年度計算科学技術研究の実績について 	小野委員は欠席。

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 27 年度～平成 30 年度までのそれぞれの年度計画は、以下のように定められた。

(1) 平成 27 年度

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、高温・高圧下における物性変化モデル開発のための基礎データの拡充を進めるとともに、エクサスケールの流体解析に向けた効率的反復行列解法を試作し、評価する。耐震評価を高精度化する上で重要となるモデル化因子を抽出する。

(2) 平成 28 年度

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、高温・高圧下での核燃料挙動に関わる界面現象のメゾスケールモデル構築に必要となるデータを算出するとともに、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。耐震評価高精度化のため、地盤物性のばらつきを統計的に評価する。

(3) 平成 29 年度

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。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) 平成 30 年度

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、界面を対象としたメゾスケールモデル解析を実施し、燃料・被覆管溶融体の流動特性データを取得する。また、エクサスケール流体解析に向け、演算加速装置向けの流体計算モデル及び省通信型反復行列解法を構築するとともに、**In-Situ** 可視化システムを多階層流体解析向けに拡張する。

4. 研究実績と評価意見

4.1 中間評価

中長期目標中間期間（平成 27 年度～平成 30 年度）中計画に沿って実施した研究開発の実績について、当該期間を総括した自己評価を表 4.1（中列）にまとめる。

専門部会において、当該期間の実績・成果を説明し、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中間評価意見を表 4.1（右列）に記載する。

自己点検の「自己評価」欄、および、委員会評価の「評価」欄の記載は、以下の評価区分に基づく。

評価区分（S～D）の説明

評価区分（基準）（総合科学技術・イノベーション会議 評価専門調査会 研究開発法人部会（第 5 回）より）

S： 目的・業務・中長期目標等に照らし、研究成果、取組等について諸事情を踏まえて総合的に勘案した結果、適正、効果的かつ効率的な研究開発運営の下で、「研究開発成果の最大化」に向けて特に顕著な成果の創出や将来的な成果の創出の期待等が認められる。

A： 目的・業務・中長期目標等に照らし、研究成果、取組等について諸事情を踏まえて総合的に勘案した結果、適正、効果的かつ効率的な研究開発運営の下で、「研究開発成果の最大化」に向けて顕著な成果の創出や将来的な成果の創出の期待等が認められる。

B： 目的・業務・中長期目標等に照らし、研究成果、取組等について諸事情を踏まえて総合的に勘案した結果、「研究開発成果の最大化」に向けて成果の創出や将来的な成果の創出の期待等が認められ、着実な研究開発運営がなされている。

C： 目的・業務・中長期目標等に照らし、研究成果、取組等について諸事情を踏まえて総合的に勘案した結果、「研究開発成果の最大化」又は「適正、効果的かつ効率的な研究開発運営」に向けてより一層の工夫、改善等が期待される。

D： 目的・業務・中長期目標等に照らし、研究成果、取組等について諸事情を踏まえて総合的に勘案した結果、「研究開発成果の最大化」又は「適正、効果的かつ効率的な研究開発運営」に向けて抜本的な見直しを含め特段の工夫、改善等が求められる。

This is a blank page.

表 4.1 平成 27 年度～平成 30 年度を総括した自己評価及び専門部会評価意見 (1/6)

自己点検		委員会評価	
自己点検内容	自己評価	評価	評価理由/ご意見
<p>(1) 研究開発の進捗度 (見直しの必要性を含む)</p> <p>研究開発は順調に進捗しており、その上、下記の点で顕著な成果を挙げたことから A と自己評価した。</p> <p>①核燃料挙動に係る計算科学では、従来困難とされてきた複雑な系に対しても第一原理的計算手法の適用を可能とし、核燃料の高温物性データを取得可能とした (熱伝導率算出は世界初)。</p> <p>②エクサスケール流体解析に向けた計算技術では、「京」全系でのストロングスケーリングや 1000 億格子規模のエクサスケール流体解析に必要な性能 (世界でもトップクラスの計算規模) を達成した。</p> <p>③著名な論文誌を含め、毎年研究者数の 2 倍程度の数の学術論文を公表し、学術的貢献も果たしている。</p> <p>○シビアアクシデント時の炉内複雑現象解析に向けたシミュレーション技術研究</p> <p>【成果最大化に向けた研究開発運営】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・実験・観測が困難な現象を理解する上で、中長期計画の前半は現象 (マクロレベル) の原因となる (ミクロレベル) の知見を積み上げることを重要視。 ・シビアアクシデント時の炉内複雑現象解析に向けたシミュレーションの最重要課題である「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」に対し、現状マクロレベルの計算に使われる経験的パラメータを、ミクロの計算結果に基づき機構論的に決定し、置換するという方法を選択。 <p>【目標達成】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・核燃料の高温熱物性データおよび燃料溶融凝固体の機械的特性データを第一原理計算により取得。 ・マクロモデルで用いる固液混合溶融燃料の流体特性 (粘性値) を固液比割合や析出固体のサイズ依存性も含め、メゾレベルの情報を基にシミュレーションにより取得 (中長期計画後半の、ミクロレベル計算結果に基づくマクロレベル計算に向けて目途)。 <p>【顕著な成果】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・核燃料物性データ取得において、比熱や弾性定数に加え、熱伝導率、破壊靱性など計算が困難であった物性値についても新たな計算手法の開発等により評価に成功 (核燃料で結晶粒サイズ依存性も含め第一原理的に熱伝導率計算に成功したのは世界初)。 <p>○複雑現象シミュレーションのための基盤技術 (エクサスケール流体解析、In-Situ 可視化データ解析) の研究</p> <p>【成果最大化に向けた研究開発運営】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・様々なシミュレーションに共通な計算手法やアルゴリズム等を典型化し、計算機の技術進展 (メモリーコア、GPGPU 等) を見据えて、その計算機の能力を最大限に活用する技術を開発。 ・上記に必要な先端的計算機資源の確保にも注力。 <p>【目標達成】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・省通信ソルバを開発し、京や Oakforest-PACS における全系規模のスケラビリティ向上を達成。 ・格子ボルツマン法を用いた GPU 向け流体計算コードを開発、先進的な適合細分化格子法を構築することにより、多階層流体解析の実時間処理に必要な性能 (従来 CPU に比べ 10 倍以上) を達成。 ・In-Situ 可視化システムを開発し、メモリーコア環境向けの最適化技術によりエクサスケール計算データ解析に向けた In-Situ 可視化処理に目途。 	A	A	<p>○シビアアクシデント時の炉内複雑現象解析に向けたシミュレーション技術研究については、現象解析の主たるパラメータ分析を行い、知見が不足している物性データおよび機械特性データの予測を第一原理計算により取得可能とし、解析モデルのスケール間接続法を絞り込み、残り期間におけるシミュレーション技術の完成に向けた見通しを得た点は顕著な成果 (A) と評価できる。</p> <p>○複雑現象シミュレーションのための基盤技術の研究については、「京」全系でのストロングスケーリングや世界トップクラスのエクサスケール流体解析に必要な性能 (1000 億格子規模) を達成した点は、顕著な研究成果 (A) と評価できる。</p> <p>○新たな取り組みとして、機械学習 (AI) に基づく研究展開、すなわち、データサイエンスと HPC との融合へ研究展開した点は顕著な成果 (A) と評価できる。</p>
		S	<p>○ソフトの高度化に関しては、これまで不可能であった第一原理計算の大規模系への展開、また、デブリといった強烈に複雑な現象の解析を目指し、流体解析における将来を見据えたポスト京への展開など、可視化を含めて極めて優れた成果を出してきている。特に、ミクロシミュレーションをよりマクロなシミュレーションへと接続するためのデータ取得、そしてその接続技術を実現しており、シミュレーション技術の展開について大きな成果を得ている。その成果は一流誌に論文として発信してきており、高い評価に値する。</p>
		A	<p>○研究開発の進捗について、総括的にみると、研究開発運営は適切で、正しく機能しており、計画に即した結果が得られていると判断できる。</p> <p>○ (1) の①～③については、顕著な成果であり、IF が 2.0 を超える論文が平成 27 年度～平成 30 年度にわたり一定数発表されていることから、機構の高いプレゼンスが示されていると思われる。</p> <p>○個別の評価では、</p> <ol style="list-style-type: none"> 1) 核燃料挙動に係る計算科学において、世界初である核燃料の高温物性データを取得可能とした技術開発、 2) エクサスケールの高性能計算技術である省通信型反復解法ソルバー、GPU 向け AMR ボルツマンコードの開発、In-Situ 可視化技術の開発、 <p>については、学術的な側面やコミュニティへの貢献の点から、特に高い活動成果であり、S ランク評価と考えても良い。</p> <p>○耐震評価高度化の研究開発については、システム計算科学センターとして、耐震評価の基本アプローチを確立し、早期に開発した技術を安全研究センターへ移管することにより、組織全体として、健全なマネジメントが機能していることを示しており、評価できる。</p> <p>○今後、開発技術などのアピールとして、国際的なコミュニティへの貢献を強め、日本の技術的なプレゼンスを高めてほしい。</p>

表 4.1 平成 27 年度～平成 30 年度を総括した自己評価及び専門部会評価意見 (2/6)

<p>【顕著な成果】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・省通信ソルバについて、新しい省通信マルチグリッド法の開発にも成功し、炉心全系規模の解析に必要な 1000 億格子規模の流体解析に必要な性能を達成（世界でもトップクラスの計算規模）。 ・In-Situ 可視化システムについて、ファイルベースの対話的制御、伝達関数エディタを用いた多変量可視化といった先進的機能を開発し、従来の In-Situ 可視化の問題（超並列シミュレーションと対話的可視化処理の両立）を根本的に解決。 <p>○耐震評価高度化のためのモデル化手法の研究</p> <p>【成果最大化に向けた研究開発運営】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・先ず原子力施設の耐震評価高度化のためのモデル化手法の研究開発において考慮すべきモデル化因子を抽出し地震応答への影響を定量評価。その結果を踏まえモデル化因子の感度の優先順位付けを行い、感度の高い順に地盤、建屋、機器の順番でモデル化方針を明確化。 <p>【目標達成】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・耐震評価上重要となるモデル化因子の候補の選定および感度解析を実施し、地盤の物性（せん断波速度、減衰率）、建屋と地盤の結合条件、建屋壁の取り扱い等の違いが応答に強く影響するという知見を取得。 ・地盤に係るモデル化因子（せん断弾性係数、減衰率等）による地震応答のばらつきを統計的に定量評価し、物性値の決定手法に係る不確実性に関する知見を取得。 ・平成 28 年度までは計算科学（基礎研究）の視点から耐震解析等を進めてきたが、上記を達成したことを踏まえ、基礎研究のフェーズを終了し、応用面（原子力安全研究）の視点をもって研究推進するため、平成 29 年度より安全研究・防災支援部門安全研究センターに移管。 		<p>A</p> <ul style="list-style-type: none"> ○中長期計画に沿った、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を着実に実施していることに加えて、計画外の成果として、放射性セシウムの移行予測を行い、複数回の理事長表彰を受けるなど、顕著な成果の創出がなされていると評価できる。 ○コンピュータシミュレーション技術の開発として、最新のスーパーコンピュータに特徴的なアクセラレータに適した効率的な反復解法の試作・評価、および多変量データ可視化機能の試作を着実に進め、顕著な研究成果が得られていると評価できる。 	
			<p>A</p> <ul style="list-style-type: none"> ○機構がターゲットとする、きわめて複雑かつ実物実験の困難な、多岐にわたるテーマについて、計算科学的手法を用いた課題解決を図り、他研究機関所属研究者との共同研究や外部で開発された最新のシミュレーション手法などもうまく生かしつつ、それぞれの分野で着実に研究成果を上げている。研究のための研究ではなく、ミッションオリエンティッドな研究を実際に遂行している点を、高く評価する。 ○各種物性計算については、多体問題に関する先端的な基礎研究から応用に近い材料特性計算まで、幅広い研究を行っており、分野を超えた研究者コミュニティに貢献する成果をあげている。また反応をとまなう流体の大規模計算手法など、特徴的なシミュレーション手法、モデリング手法を開発している。これらも産業でのプロセスシミュレーションなど、本来の目的を超えた有効利用の可能性も考えられる。 ○波及効果のためにも、学術的成果の論文化を、一層進めていただきたい。

表 4.1 平成 27 年度～平成 30 年度を総括した自己評価及び専門部会評価意見 (3/6)

<p>(2) 効果・効用 (アウトカム)、波及効果 (インパクト)</p> <p>アウトカムに向けた積極的な成果公開・普及の取組が実施され、その上、下記の点で顕著な成果を挙げたことから A と自己評価した。</p> <p>①開発したソフトウェアの公開、インパクトある成果発表による研究コミュニティへの学術的貢献。 ②福島県の住民、自治体等のニーズに応える情報提供による社会的貢献。</p> <p>【成果最大化に向けた研究開発運営】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・当センターの強みである大規模・高精度計算のノウハウを活かし、従来ない大規模な福島環境動態シミュレーション研究を先導。また、成果 (開発したソフトウェア) は積極的にオープンソース化。 ・AI、Web、DB、可視化技術など IT を原子力分野の課題に積極的に導入。 ・計算科学の汎用性を踏まえ、当初計画にない研究課題 (機構外連携や外部資金獲得) も奨励。 <p>○「京」、「ポスト京」などの研究コミュニティからの要請に応え、行列計算ライブラリ、高精度基本演算ライブラリ、可視化システム、第一原理分子シミュレーション汎用ソフトウェアを公開。</p> <p>【顕著な成果】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・第 3 期中長期計画期間中の累計ダウンロード数は 3,900 以上、主に大規模・高精度計算の観点から研究コミュニティに貢献。 ・In-Situ 可視化システムは、汎用的な可視化解析ツールとして大規模データ解析分野への貢献が機構内外から期待されている。 <p>○量子多体系の物理計算に AI を導入するなど、新たな試みにも積極的に挑戦。<当初計画外></p> <p>【顕著な成果】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・学術的にトップレベルの成果創出 (米国物理学会論文誌の Editors' Suggestion 選出)。 <p>○福島関連の連携では、事故後からの放射線量の減衰状況を「見える化」して広く一般に提供。<当初計画外></p> <p>【顕著な成果】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・地元住民、自治体等のニーズに応え、安心感の醸成に貢献。 	A	S	<p>○自己評価の通り、研究のアウトカムやインパクトについて顕著な成果を挙げており、顕著な成果 (A) と評価できるが、以下の点は特に顕著な成果 (S) と認められる。</p> <p>(1)シビアアクシデント時の炉内複雑現象解析に向けたシミュレーション技術研究における実施計画外に成果として、シミュレーション技術に基づいた福島環境動態プロジェクトにおける放射性セシウムの移行抑制、除染効果および減容化手法の指針となりうる知見提供は大きな社会貢献であり、特に顕著な成果 (S) と評価できる。</p> <p>(2)複雑現象シミュレーションのための基盤技術の研究については、省通信アルゴリズムや In-Situ 可視化ソフトを機構内でオープンソース提供している点や、機構内の主要コードを 1000 倍高速化し研究のパラダイムシフトを促進した点は、業務運営の効率化の観点で顕著な成果 (S) と評価できる。</p>
		A	<p>○機構の内外に向けて着実に成果の活用、普及に向けた活動を展開してきている。</p>
		A	<p>○中長期計画の成果に加えて、時機を捉えた計画外の研究についても積極的に取り組み、HPC とデータ科学 (機械学習) の融合領域の先導例を創出するなど、高いアクティビティが見られる。</p> <p>○研究成果を社会還元する取り組みや研究コミュニティへの貢献など、その波及効果も評価できる。</p> <p>○このため、評価を A ランクとした。</p>
		A	<p>○放射性セシウムの移行予測に関する研究成果は、福島事故によって生じた環境汚染の回復に役立つものであり、顕著な波及効果があるものと認められる。</p> <p>○研究成果である、効率的な反復解法や多変量データ可視化機能は、ライブラリとして提供されており、顕著な波及効果があるものと認められる。</p> <p>○これまで進められてきた 3 次元の詳細な耐震計算技術は、安全研究センターに移管され、さらなる研究の発展と原子力安全への貢献に結びついており、顕著な波及効果があるものと認められる。</p>
		A	<p>○AI や可視化技術、最新型 CPU への対応など、IT 関連の最新技術をいち早く取り入れている。</p> <p>○開発したソフトウェアやライブラリの公開により、研究コミュニティにも貢献している。利用者を増やし、波及効果をさらに高めるため、研究者向け広報に工夫をいただくと良いのではないか。</p>
A	<p>○開発したコードの公開を積極的に行っていることは機構内の研究の推進のみならず、その成果を多くの研究者に還元しているという点で高く評価されるべきと思われる。</p> <p>○福島案件のシミュレーションを推進していることは非常に重要で、これに基づく県民・自治体への情報提供は深刻な社会問題への大きな貢献と評価される。</p> <p>○これらの活動は十分に高く評価できるが、波及効果については現時点では確定的ではないため、A 評価とした。</p>		

表 4.1 平成 27 年度～平成 30 年度を総括した自己評価及び専門部会評価意見 (4/6)

<p>(3) 他機関・部署との連携</p> <p>機構内、機構外（国内、国外）とも 20 件以上と、多様な連携が展開されており、その上、下記の点で顕著な成果を挙げたことから A と自己評価した。</p> <p>①行列計算の高速化やシミュレーション大規模化等の技術基盤を構築し、他機関・部署との連携を通じて、各課題解決（計算の高度化）に貢献。</p> <p>②以下の成果からは、さらに将来的な成果創出が期待される。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・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、理研等 AI 研究機関との連携を展開。 ・マイクロレベルの計算を原子力分野の諸課題に適用することにより、従来困難とされてきた転位と照射損傷・不純物などの相互作用の計算手法を開発、当該技術は鉄鋼業界等からも注目。 ・土壌へのセシウム吸着挙動の解明では、汚染土壌の除染、減容化処理に指針を与える成果を創出。 <p>【成果最大化に向けた研究開発運営】</p> <ul style="list-style-type: none"> ・少人数で多くの連携を実施・成果を得るため、原子力分野の諸課題の中から計算科学の視点で解決すべき共通主要課題を抽出することで、1つの基盤技術開発が多くの課題に適用できるよう工夫。 <p>【主な連携内容】</p> <p><シビアアクシデント時の炉内複雑現象解析に向けたシミュレーション技術研究></p> <ul style="list-style-type: none"> ・マイクロレベル計算技術は、他機関からの要請に応じてオープンソース化して公開（第一原理分子シミュレーション汎用ソフトウェア、4倍精度演算ライブラリ）。 ・<u>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、理研等 AI 研究機関との連携を展開。</u> <p><複雑現象シミュレーションのための基盤技術（エクサスケール流体解析、In-Situ 可視化データ解析）の研究></p> <ul style="list-style-type: none"> ・省通信型反復行列解法の開発により機構内課題の計算性能向上に貢献。また、ポスト京重点課題にも成果を展開。平成 30 年度中に省通信クリロフ部分空間法ソルバをオープンソース化して公開予定。 ・<u>米国オークリッジ国立研究所とは世界最大の GPU スパコン“SUMMIT”の利用に向けた連携を推進。</u> ・<u>In-Situ 可視化システムも機構内課題に適用し、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。平成 30 年度中にオープンソース化して公開予定。</u> <p><福島空間線量率データ提供、放射性物質の環境動態に係る連携></p> <ul style="list-style-type: none"> ・<u>事故後長期にわたり環境モニタリングデータを集約してきた実績を活かし、マスコミや展示施設等、多くの人に情報を提供する機関からの要求に的確に応え、事故後からの放射線量の減衰状況を示す情報を広く一般に提供。</u> ・<u>福島土壌へのセシウム吸着挙動の解明では、福島での汚染土壌の除染、減容化処理に指針を与える研究成果を創出。</u> ・<u>環境動態に係るデータを政府や東京電力に提供、種々の対応策の検討に貢献。</u> <p><原子炉材料の脆化に係る連携></p> <ul style="list-style-type: none"> ・<u>従来困難とされてきた照射欠陥→転位→粒界脆化に至る相互作用（不純物も含む）の計算手法を開発した。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も注目。原子力学会誌や OECD/NEA レポートなど記事や招待講演の依頼に応じている。連携の成果は Nature Communications など著名な学術誌にも掲載。</u> 	A	<p>○他機関・部署との連携については、自己評価通りの顕著な成果（A）を挙げていると評価できる。</p> <p>○これに加えて、シビアアクシデント時の炉内複雑現象解析に向けたシミュレーション技術研究の実施計画外に成果として、他部署との共同研究として、シミュレーション技術に基づいた福島環境動態プロジェクトにおける放射性セシウムの移行抑制、除染効果および減容化手法の指針となりうる知見を提供した点は大きな社会貢献であり、特に顕著な成果（S）と評価できる。</p>
		<p>○機構内外で国際連携も含め 20 件以上の連携が達成されており、評価に値する。</p>
		<p>○組織内・外の連携については、共著論文などの形で成果として表れており、連携の件数も第二期の平均以上の推移となっている。また、国際協力についてもコンスタントに継続されている。</p> <p>○これらの点から、A ランクの評定とした。</p>
		<p>○スーパーコンピュータを用いた様々な研究成果は、他機関や他部署との緊密な連携のもとに得られたものであり、着実であると評価することができる。</p> <p>○得られた成果は機構における計算技術のレベルを幅広く上げていく効果があり、次期スーパーコンピュータの導入にも関連し、計算科学を活用した原子力イノベーションに向けて特に顕著な貢献があるものと評価できる。</p>
		<p>○成果の早期創出に向け、理化学研究所や米国オークリッジ国立研究所、海外の大学など、他機関との連携を効果的に推進・活用している。</p> <p>○実験研究を行う部署との連携も着実に進んでいる。</p>
<p>○他機関及び他部署との連携は適切に行われ、十分な情報共有および技術共有ができていると評価できる。</p> <p>○十分な連携が取れていると思われるが、極めて顕著であるとまでは言えず、A 評価が妥当であると判断した。</p>		

※下線部は、当初計画にはなく、機構内外との連携（外部資金獲得や計算資源獲得を含む）により自主的に実施したものの。

表 4.1 平成 27 年度～平成 30 年度を総括した自己評価及び専門部会評価意見 (5/6)

総合評価 (自己点検)

評価	自己点検内容
A	<p>・研究開発の進捗度の観点では、上記の成果最大化に向けた研究開発運営のもと、研究開発は順調に進捗しており、その上、下記の点で顕著な成果を挙げたことから A と自己評価した。</p> <ul style="list-style-type: none"> ①核燃料挙動に係る計算科学では、従来困難とされてきた複雑な系に対しても第一原理的計算手法の適用を可能とし、核燃料の高温物性データを取得可能とした（核燃料で結晶粒サイズ依存性も含め第一原理的に熱伝導率計算に成功したのは世界初）。 ②エクサスケール流体解析に向けた計算技術では、「京」全系でのストロングスケーリングや 1000 億格子規模のエクサスケール流体解析に必要な性能（世界でもトップクラスの計算規模）を達成した。 ③著名な論文誌を含め、毎年研究者数の 2 倍程度の数の学術論文を発表し、学術的貢献も果たしている。 <p>・効果・効用（アウトカム）、波及効果（インパクト）の観点では、上記の成果最大化に向けた研究開発運営のもと、アウトカムに向けた積極的な成果公開・普及の取組が実施され、その上、下記の点で顕著な成果を挙げたことから A と自己評価した。</p> <ul style="list-style-type: none"> ①開発したソフトウェアの公開、インパクトある成果発表による研究コミュニティへの学術的貢献。 ②福島県の住民等のニーズに応える情報提供による社会的貢献。 <p>・他機関・部署との連携においては、上記の成果最大化に向けた研究開発運営のもと、機構内、機構外（国内、国外）とも 20 件以上と、多様な連携が展開されており、その上、下記の点で顕著な成果を挙げたことから A と自己評価した。</p> <ul style="list-style-type: none"> ①行列計算の高速化やシミュレーション大規模化等の技術基盤を構築し、他機関・部署との連携を通じて、各課題解決（計算の高度化）に貢献。 ②以下の成果からは、さらに将来的な成果創出が期待される。 <ul style="list-style-type: none"> ・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、理化学研究所等 AI 研究機関との連携を展開。 ・マイクロレベルの計算を原子力分野の諸課題に適用することにより、従来困難とされてきた転位と照射損傷・不純物などの相互作用の計算手法を開発、当該技術は鉄鋼業界等からも注目。 ・土壌へのセシウム吸着挙動の解明では、汚染土壌の除染、減容化処理に指針を与える成果を創出。 <p>以上を総合的に判断し、A と評価した。</p>

表 4.1 平成 27 年度～平成 30 年度を総括した自己評価及び専門部会評価意見 (6/6)

委員会総合評価

評価	評価理由/ご意見
A	<p>総合的に判断すると、中長期計画に沿った、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化のための基礎データ、コンピュータシミュレーション技術について、現時点の世界トップレベルシステムにも対応し得る規模及び機能を有したコード開発が行われていると判断でき、ポスト京に対する準備も順調に行われており、その成果は学術論文が多数執筆され、受賞実績も多い。以上の観点から、本研究開発計画は顕著な成果を上げた評価できる。</p> <p>さらに、当初は計画していなかったものの、福島環境回復に役立つ放射性セシウム挙動に関する研究など外部機関と連携し、最近のデータ科学の手法を取り入れて当該分野における先導的な成果を上げており、研究マネジメントの柔軟性も評価できる。</p> <p>また、機構内においては、研究の効率化に大きく貢献する効率的な反復解法や多変量データ可視化機能のライブラリ化を実施しており、顕著な成果の創出がなされたと認められる。</p> <p>評価のガイドラインに従うと、全体としてはA評価としたが、個別の項目についてはS評価としてもよい項目もあり、今後も継続して高い研究活動の推進を期待したい。</p> <p>このほかの意見・提案としては、以下のものが出された。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・人材育成について、短期海外派遣制度やテニュアトラック制度などに加え、外部機関とのクロスアポイントメントなども検討されたい。
A	<p>開発の進捗は良好であり、十分な成果があがってきており、評価に値する。一方で、システム計算科学センターのミッションをソフトの高度化や計算技術の確立にとどめることなく、連携の一環としてサイエンス研究にも踏み込んだ活動を展開されてはどうか。未確立の新しい分野の研究においては、ミッションを細分化するよりも研究開発を互いにオーバーラップさせながら進めていった方が、目標の達成はより近いものとなるのではないかと。</p>
A	<p>総合的に判断すると、中長期計画に即して年度毎に積み上げた活動が推進されており、確実な技術研究開発の成果の積み上げが見て取れる。当初は計画していなかったものの、外部機関と連携して最近のデータ科学の手法を取り入れ、当該分野において先導的な成果を示すなど、研究マネジメントの柔軟性も評価できる。評価のガイドラインに従うと、全体としてはA評価としたが、個別の項目についてはS評価としてもよい項目もあり、今後も継続して高い研究活動の推進を期待したい。</p> <p>また、本評価項目にはなかったが、若手研究者の人材育成は重要な項目であるので、人材開発とともに短期海外派遣制度やテニュアトラック制度などに加え、外部機関とのクロスアポイントメントなども検討されてはどうか。</p>
A	<p>中長期計画に沿った、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化のための基礎データ、コンピュータシミュレーション技術の開発に関して、着実に成果を得ていることに加えて、福島環境回復に役立つ放射性セシウム挙動に関する研究や、機構全体にも貢献する効率的な反復解法や多変量データ可視化機能のライブラリ化を実施しており、顕著な成果の創出がなされたと認められる。</p> <p>学術論文が多数執筆されており、受賞実績も多く、顕著な成果が得られているものと客観的に評価できる。</p>
A	<p>スーパーコンピュータを用いた超大規模・超並列シミュレーション技術の進捗は順調に進んでおり、現時点の世界トップレベルシステムにも対応し得る規模及び機能を有したコード開発が行われていると思われる。ポスト京に対する準備も順調に行われていると思われる。</p>
A	<p>システム計算科学センターにおける研究テーマの多くは、複雑かつ必ずしもシミュレーション手法が完成していない系を対象としており、困難かつ野心的な挑戦を求められるテーマである。その中で、ミッションオリエンティッドな研究を実際に遂行し、着実に研究成果を上げている点は高く評価できる。多くの優れた研究を世に出し、波及効果の最大化に努めていただきたい。</p>

4.2 平成 30 年度評価

中長期計画及び平成 30 年度計画に沿って実施した研究開発の実績について、表 4.2 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 4.2（平成 31 年 1 月 8 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 4.3 に記載する。

This is a blank page.

表 4.2 平成 30 年度研究開発実績及び成果の意義等（平成 31 年 1 月 8 日時点）（1/2）

	中長期計画	平成 30 年度計画	平成 30 年度の実績・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（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。	シビアアクシデント時の炉内複雑現象解析に向け、界面を対象としたメゾスケールモデル解析を実施し、燃料・被覆管溶融体の流動特性データを取得する。	○マクロモデルで用いる固液混合溶融燃料の流体特性（粘性）を、流体計算と弾性体計算を連成したシミュレーションにより取得した。	○流体計算と弾性体計算を連成したシミュレーションにより固液混合流体の粘性値を評価した例はこれまでになく、理論予測式の適用限界外となる領域で初めて現実的な値を得ることができた。	○計算で得られた粘性値を原子力基礎工学研究センターで行っている溶融燃料移行挙動解析コードで用いられている値と比較し、その妥当性を検証することで高度化に貢献する予定。	○査読付き論文数：7 件（IF2.0 以上 1 件） ○招待講演：1 件 ○外部資金：7 件（14,079 千円） ○国際会議発表：5 件
2	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。	エクサスケール流体解析に向け、演算加速装置向けの流体計算モデル及び省通信型反復行列解法を構築するとともに、In-Situ 可視化システムを多階層流体解析向けに拡張する。	○平成 29 年度に構築した省通信型クリロフ部分空間法の改良アルゴリズムに基づく GPU 版ソルバを構築し、CPU 比約 4 倍の性能向上を達成。また、新たな省通信型マルチグリッド法を構築し、Oakforest-PACS 全系を用いて 900 億格子の超大規模問題における有効性を確認。 ○適合細分化格子に基づく格子ボルツマン法を用いた GPU 向け多階層流体計算コードを構築し、CPU 比 10 倍以上の性能向上を達成。 ○In-Situ 可視化システムを適合細分化格子と非構造格子に拡張し、多階層流体解析の In-Situ 可視化を実現。また、多変量可視化の中核的な処理を担う数式処理アルゴリズムを改良し、処理性能を一桁向上。	○GPU 環境におけるクリロフ部分空間法のボトルネックと考えられてきた、縮約通信と前処理の問題を解決し、演算加速を実現した。また、新たな省通信型マルチグリッド法の構築により、炉心全系の過酷事故解析に必要な 1000 億格子規模のエクサスケール流体解析の見通しが得られた。 ○適合細分化格子に基づく格子ボルツマン法の GPU による演算加速を実現したことにより、原子力施設の汚染物質拡散解析等、複雑形状の多階層流体解析に対する実時間解析の見通しが得られた。 ○In-Situ 可視化システムを適合細分化格子と非構造格子に拡張したことにより、汎用性を向上した。また、処理性能を一桁向上したことで、演算加速されたシミュレーションにも耐えうる In-Situ 可視化を実現した。	○原子力基礎工学研究センターとの連携の下、溶融燃料移行挙動解析コードの高度化に貢献。これまでに開発したメニーコア向け省通信型クリロフ部分空間法ソルバを数値計算ライブラリ PARCEL の追加機能として整備し、オープンソースとして公開予定。 ○原子力基礎工学研究センターとの連携の下、原子力施設の汚染物質拡散解析への適用に向けた風洞実験に対する実証研究を実施。また、東京工業大学との連携の下、都市気流解析への適用を実施。 ○原子力基礎工学研究センターとの連携の下、可視化機能を向上。In-Situ 可視化システムのインターフェース整備、マルチプラットフォーム対応等により汎用的に利用可能とし、オープンソースとして公開予定。	○査読付き論文数：8 件（IF2.0 以上 4 件） ○招待講演：1 件 ○外部資金：7 件（80,154 千円） ○国際会議発表：9 件 ○受賞：2 件

表 4.2 平成 30 年度研究開発実績及び成果の意義等（平成 31 年 1 月 8 日時点）（2/2）

	中長期計画	平成 30 年度計画	平成 30 年度の実績・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）	<p>【放射性物質の環境動態に係る連携】</p> <p>○放射性物質の粘土鉱物への吸着を分子モデリングで評価、様々な場所の中で楔形ナノ構造が最も強くセシウムを吸着することを発見した。</p> <p>【原子炉材料の脆化に係る連携】</p> <p>○ADS 材料の液体金属脆化機構解明に向け、脆化を引き起こす液体金属元素の共通特性を第一原理計算で見出した。</p>	<p>【放射性物質の環境動態に係る連携】</p> <p>○放射性物質が粘土鉱物のどの部分に吸着しているのかは実験による観察だけでは判断できなかったが、分子モデリングと実験の連携によつてはじめて有効な知見が得られた。</p> <p>【原子炉材料の脆化に係る連携】</p> <p>○液体金属脆化の具体的な機構は明らかになっておらず、機構解明のための原子モデル構築に向けてモデルの絞り込みを行うことができた。</p>	<p>【放射性物質の環境動態に係る連携】</p> <p>○米国の研究機関・大学との国際共同研究の下、吸着メカニズムの知見に基づき、いくつかのセシウム除去手法について有効性を比較・検討することで汚染土壌減容化技術の指針を得た。</p> <p>【原子炉材料の脆化に係る連携】</p> <p>○原子力基礎工学研究センターとの連携の下、ADS 材料の液体金属脆化機構解明と照射の影響を予測するモデル構築を行っている。今後さらに具体的な脆化機構のモデル化を行い実験結果の再現を目指す。</p>	<p>【放射性物質の環境動態に係る連携】</p> <p>○査読付き論文数：2 件（IF2.0 以上 2 件）</p> <p>○外部資金：5 件（5,050 千円）</p> <p>○プレス発表：2 件</p> <p>【原子炉材料の脆化に係る連携】</p> <p>○査読付き論文数：11 件（IF2.0 以上 4 件）</p> <p>○招待講演：5 件</p> <p>○外部資金：7 件（10,884 千円）</p> <p>○国際会議発表：3 件</p>

【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 4.3 平成 30 年度評価意見 (1/2)

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、界面を対象としたメソスケールモデル解析を実施し、燃料・被覆管溶融体の流動特性データを取得する。	<p>○研究開発は計画通り進捗した。他にも多くの基盤的研究を実施しており、数多くの論文が出版されていることは、特に高く評価できる。</p> <p>○新規手法の開発に基づいて、当初計画していた流動特性データの取得に成功している。このこと自体高く評価できるものであるが、これに加えて粘土鉱物のセシウム吸脱着機構や照射欠陥の生成機構を原子、分子レベルで解明するなど、予想を超えた進捗を見せている。</p>	<p>○流動特性として、広範囲の固体比率に対する粘性データが取得でき高温・高圧下でのマクロモデルの開発が進んだ。</p> <p>○溶融物の温度低下に対して粘性が指数関数的に上昇していくことは経験的に知られているが、固液混合状態のシミュレーションによってこの特性を再現できたことは、学術的意義が高い。</p> <p>○高温高圧における固液混合流体の粘性評価を、流体、弾性体の連成計算に基づいて世界でもいち早く実現している。このことはシミュレーション技術の進歩に大きく貢献し、高く評価できる。また、混合流体の界面張力の評価という計算科学的にも相当に高度な技術に挑戦中ということであり、大いに期待できる。</p>	<p>○粘性の物性に関する研究は、原子力安全の重要課題である過酷事故の解析に貢献できる。被ばく量の計算システムの開発は、福島環境回復に貢献できる。</p> <p>○本計画で得られた物性値を実際に用いて、福島のどの問題にどのように貢献できるのか、より具体的でわかりやすい設計図を示すことができれば本計画の意義がより明確になると思われる。つまり、得られた特性値もしくは基礎的な知見が機構内でどのように利用され、その結果何が新しく実現されていくのか、見通しの良いビジョンがあればさらに理解しやすい。</p>	<p>○原子炉構造材料の照射欠陥挙動を解明する計算手法を開発し、新たな照射損傷の尺度を提唱するとともに、銅原子析出による硬化を第一原理計算で評価し、脆化予測式の高精度化への知見を得た。</p> <p>○福島環境回復のための被ばく量の計算システムの開発は特に優れた成果であると評価できる。</p> <p>○成果の科学的意義の項目でも述べたように、新規な連成計算技術を確立するなど、大きな成果があがりつつある。</p>	<p>○現状の粘性データの評価は、固体粒子を含む管内流を対象とした解析結果に基づいているが、固相率は同じでも、断面内の固相分布は速度分布に大きく依存するため、気液二相流では一般的なドリフト・フラックスモデルのような分布パラメータを考慮した取扱を考える必要がある。</p> <p>○平成 31 年度の計画では表面張力特性を検討することになっているが、液体金属自由界面流のマランゴニ対流などの研究では、僅かな不純物の存在が表面張力の温度依存性を逆転することが知られている。固体粒子クラスターが自由界面に存在する場合については、自由界面近傍の固液混相状態のマイクロ性状を知ることが重要であることは論を待たないが、もう少しマクロな特性をあらかじめ検討する意味で固液自由界面流の安定性解析などを行ってはどうか。また、シビアアクシデントの状況を考えれば、溶融物表面はクラストになっていると想定されるので、クラスト割れがどのような条件で発生・進展するのかを検討項目に加えるべきではないだろうか。</p> <p>○今後の計画として、溶融物の表面張力の物性のシミュレーションを挙げているが、過酷事故においては溶融物の表面は固化してクラストを形成するので、こうした現象のシミュレーションも重要ではないか。</p>

表 4.3 平成 30 年度評価意見 (2/2)

<p>エクサスケール流体解析に向け、演算加速装置向けの流体計算モデル及び省通信型反復行列解法を構築するとともに、In-Situ 可視化システムを多階層流体解析向けに拡張する。</p>	<p>○研究開発は計画通り進捗した。 ○京コンピュータや GPU への最適化により計算の格段の高速化を実現しており、十分に進捗している。また、In-Situ 可視化についても階層型格子の採用により大幅な高速化に成功しており、評価に値する。</p>	<p>○大規模高速ソルバの開発や大規模高速可視化技術の開発は学術的に最先端であり、意義が高い。 ○開発ソフトの実問題への適用はこれからのことでありその成果は大いに期待されるが、今後の問題である。また、In-Situ 可視化が科学の課題の解決にどのように貢献できるのか、必ずしも明らかではない。単に失敗計算の判定といった研究の効率化に対する寄与だけではなく、どのような問題でも構わないが、科学の問題に直接的に貢献できる積極的な意義を見出していれば、その価値がよく理解できる。</p>	<p>○機構内外の多くの関連部署と連携しながら精力的に研究を進めており、貢献度は大きい。 ○開発されたソルバは、機構の他の部署の流体シミュレーションソフトウェアに組み込まれるなど、機構内のニーズに大きく貢献している。 ○実問題の解決に向けた開発ソフトの活用はこれからのことであり、他部門や機構外との積極的な連携が期待される。</p>	<p>○特に、CityLBM の熱モデルへの拡張と実証研究、および In-Situ 可視化についての進捗が大きかった。 ○混合精度マルチグリッド前処理にソルバの開発は、GPU の特性を生かした優れた成果である。これからのスーパーコンピュータは GPU のようなアクセラレータを備えることになると考えられるので、こうした成果は機構全体の計算技術のレベルアップにもつながる。 ○ソフト開発の視点からは、十分な成果が得られている。科学的成果はこれからである。</p>	<p>○In-Situ 可視化技術がごく短時間に実施可能となって来ているので、事故時の予測外の人的操作や外的事象を想定した Interactive な条件変更で事象(現象)進展がどのように変わるのか、それに対する対策をどうすべきか、などの事前検討が可能なシステムも構想できるのではないかと。 ○大規模高速可視化技術は、AI やデータ解析との組み合わせによって新たな展開ができる可能性を秘めており、将来の発展が大いに期待できる。</p>
<p>その他 (機構内他部署との連携)</p>			<p>○福島研究開発部門との連携で、被ばく線量の詳細な推定を可能とする計算システムを開発し、除染計画の策定に貢献した。 ○原子力基礎工学研究センターとの連携で、原子炉構造材料の照射欠陥挙動を解明する計算手法を開発した。</p>		

付録

平成 30 年度計算科学技術研究実績

This is a blank page.

平成 30 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	0
高度計算機技術開発室	4	6
シミュレーション技術開発室	21	6
合計	26	12

(平成 31 年 3 月 31 日現在)

【システム計算科学センター】

<研究論文>

- ・ 中島 憲宏

「計算科学技術の視点からの分析」

福島第一原子力発電所事故：その全貌と明日に向けた提言；学会事故調最終報告書，pp. 228-237, (2014).

【高度計算機技術開発室】

<研究論文>

- ・ Inagaki Atsushi, Kanda Manabu, Ahmad N. H., Yagi Ayako, Onodera Naoyuki, Aoki Takayuki,
“A Numerical study of turbulence statistics and the structure of a spatially-developing boundary layer over a realistic urban geometry”,
Boundary-Layer Meteorology, Vol.164, No.2, pp.161-181, (2017).
- ・ Matsuoka Seikichi, Idomura Yasuhiro, Satake Shinsuke,
“Neoclassical transport benchmark of global full-f gyrokinetic simulation in stellarator configurations”,
Physics of Plasmas, Vol.25, No.2, pp.022510_1- 022510_10, (2018).
- ・ Wainwright H. M., Seki Akiyuki, Mikami Satoshi, Saito Kimiaki,
“Characterizing regional-scale temporal evolution of air dose rates after the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant accident”,
Journal of Environmental Radioactivity, Vol.189, pp.213-220, (2018).
- ・ Maeyama Shinya, Watanabe Tomohiko, Idomura Yasuhiro, Nakata Motoki, Nunami Masanori,
“Implementation of a gyrokinetic collision operator with an implicit time integration scheme and its computational performance”,
Computer Physics Communications, Vol.235, pp.9-15, (2019).

<査読付き会議論文>

- Shimokawabe Takashi, Endo Toshio, Onodera Naoyuki, Aoki Takayuki,
 “A Stencil framework to realize large-scale computations beyond device memory capacity on GPU supercomputers” ,
 Proceedings of 2017 IEEE International Conference on Cluster Computing (IEEE Cluster 2017) (Internet), pp.525-529, (2017).
- Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro,
 “Acceleration of wind simulation using locally mesh-refined Lattice Boltzmann Method on GPU-Rich supercomputers” ,
 Lecture Notes in Computer Science 10776 (Proceedings of 4th Asian Conference on Supercomputing Frontiers), pp.128-145, (2018).
- Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Mayumi Akie, Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki,
 “Application of a preconditioned Chebyshev basis communication-avoiding conjugate gradient method to a multiphase thermal-hydraulic CFD code” ,
 Lecture Notes in Computer Science 10776 (Proceedings of 4th Asian Conference on Supercomputing Frontiers), pp.257-273, (2018).
- Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro,
 “Acceleration of plume dispersion simulation using locally mesh-refined lattice Boltzmann method” ,
 Proceedings of 26th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-26) (Internet), p.7, (2018).
- Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Yussuf A., Shimokawabe Takashi,
 “Communication Reduced Multi-time-step Algorithm for Real-time Wind Simulation on GPU-based Supercomputers” ,
 Proceedings of 9th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems (Scala 2018) (Internet), pp.9-16, (2018).
- Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Yamashita Susumu, Onodera Naoyuki, Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki,
 “Communication avoiding multigrid preconditioned conjugate gradient method for extreme scale multiphase CFD simulations” ,
 Proceedings of 9th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems (Scala 2018) (Internet), pp.17-24, (2018).

【シミュレーション技術開発室】

<研究論文>

- Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Machida Masahiko,
 “Topological s-wave pairing superconductivity with spatial inhomogeneity; Midgap-state appearance and robustness of superconductivity” ,
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol.84, No.3, pp.034711_1-034711_8,

- (2015).
- Honda Tomohiro, Minoshima Yusuke, Yokoi Yuki, Takayanagi Toshiyuki, Shiga Motoyuki, “Semiclassical dynamics of electron attachment to guanine-cytosine base pair” , Chemical Physics Letters, Vol.625, pp.174-178, (2015).
 - Okumura Masahiko, Kerisit S., Bourg, I. C., Lammers L. N., Ikeda Takashi, Sassi M., Rosso, K. M., Machida Masahiko, “Radiocesium interaction with clay minerals; Theory and simulation advances Post-Fukushima” , Journal of Environmental Radioactivity, Vol.189, pp.135-145, (2018).
 - Doihara Kohei, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Aichi Masaatsu, Suzuki Katsuyuki, “Atomic simulations to evaluate effects of stacking fault energy on interactions between edge dislocation and spherical void in face-centred cubic metals” , Philosophical Magazine, Vol.98, No.22, pp.2061-2076, (2018).
 - Suzudo Tomoaki, Tsuru Tomohito, Hasegawa Akira, “First-principles study of solvent-solute mixed dumbbells in body-centered-cubic tungsten crystals” , Journal of Nuclear Materials, Vol.505, pp.15-21, (2018).
 - 海老原 健一, 「鉄鋼材料における水素昇温脱離解析のモデリングの現状と課題」 , まてりあ, Vol.57, No.7, pp.338-344, (2018).
 - Ebihara Kenichi, Suzudo Tomoaki, “Atomistic simulation of phosphorus segregation to $\Sigma 3(111)$ symmetrical tilt grain boundary in α -iron” , Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, Vol.26, No.6, pp.065005_1-065005_10, (2018).
 - Nordlund K., Zinkle S. J., Sand A. E., Granberg F., Averback R. S., Stoller R., Suzudo Tomoaki, Malerba L., Banhart F., Weber W. J., Willaime F., Dudarev S. L., Simeone D., “Improving atomic displacement and replacement calculations with physically realistic damage models” , Nature Communications, Vol.9, pp.1084_1-1084_8, (2018).
 - Yamaguchi Masatake, Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiro, Tsuru Tomohito, Matsuda Kenji, Toda Hiroyuki, “First-principles calculation of multiple hydrogen segregation along aluminum grain boundaries” , Computational Materials Science, Vol.156, pp.368-375, (2019).
 - Ikeda Shugo, Tsuchiya Yu, Zhang X.-W., Kishimoto Shunji, Kikegawa Takumi, Yoda Yoshitaka, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko, Glasbrenner J., Kobayashi Hisao, “New antiferromagnetic order with pressure-induced superconductivity in

- EuFe₂As₂”, Physical Review B, Vol.98, No.10, pp.100502_1-100502_6, (2018).
- Ozama Eiki, Adachi Sadia, Takayanagi Toshiyuki, Shiga Motoyuki,
“Quantum simulation verifies the stability of an 18-coordinated actinium-helium complex” ,
Chemistry; A European Journal, Vol.24, No.48, pp.12716-12721, (2018).
 - Nakanishi Daiki, Kawabata Tomoya, Doihara Kohei, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Suzuki Katsuyuki,
“Effects of stacking fault energies on formation of irradiation-induced defects at various temperatures in face-centred cubic metals” ,
Philosophical Magazine, Vol.98, No.33, pp.3034-3047, (2018).
 - Hayakawa Sho, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Aichi Masaatsu, Suzuki Katsuyuki,
“Interactions between clusters of self-interstitial atoms via a conservative climb in BCC-Fe” ,
Philosophical Magazine, Vol.98, No.25, pp.2311-2325, (2018).
 - Nordlund K., Zinkle S. J., Sand A. E., Granberg F., Averback R. S., Stoller R. E., Suzudo Tomoaki, Malerba L., Banhart F., Weber W. J., Willaime F., Dudarev S. L., Simeone D.,
“Primary radiation damage; A Review of current understanding and models” ,
Journal of Nuclear Materials, Vol.512, pp.450-479, (2018).
 - Malins A., Kurikami Hiroshi, Kitamura Akihiro, Machida Masahiko,
“Modelling the effect of mechanical remediation on dose rates above radiocesium contaminated land” ,
Remediation Measures for Radioactively Contaminated Areas, pp.259-272, (2019).
 - Nishimura Katsuhiko, Matsuda Kenji, Lee S., Nunomura Norio, Shimano Tomoki, Bendo A., Watanabe Katsumi, Tsuchiya Taiki, Namiki Takahiro, Toda Hiroyuki, Yamaguchi Masatake,
“Abnormally enhanced diamagnetism in Al-Zn-Mg alloys” ,
Journal of Alloys and Compounds, Vol.774, pp.405-409, (2019).
 - Asari Keisuke, Hetland O. S., Fujita Satoshi, Itakura Mitsuhiro, Okita Taira,
“The effect of stacking fault energy on interactions between an edge dislocation and a spherical void by molecular dynamics simulations” ,
Journal of Nuclear Materials, Vol.442, No.1, pp.360-364 (2013).
 - 戸田 裕之, 山口 正剛, 松田 健二, 清水 一行, 平山 恭介, Su H., 藤原 比呂, 海老原 健一, 板倉 充洋, 都留 智仁, 西村 克彦, 布村 紀男, Lee S., 土屋 大樹, 竹内 晃久, 上杉 健太朗,
「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」 ,
鉄と鋼, Vol.105, No.2, pp.240-253, (2019).
 - Bendo A., Matsuda Kenji, Lee S., Nishimura Katsuhiko, Toda Hiroyuki, Shimizu Kazuyuki, Tsuru Tomohito, Yamaguchi Masatake,

- “Microstructure evolution in a hydrogen charged and aged Al-Zn-Mg alloy” ,
Materialia, Vol. 3, pp. 50-56, (2018).
- Shiga Motoyuki, Tuckerman M. E. ,
 “Finding free-energy landmarks of chemical reactions” ,
Journal of Physical Chemistry Letters, Vol. 9, No. 21, pp. 6207-6214, (2018).
 - Suzuki Kento, Miyazaki Takaaki, Takayanagi Toshiyuki, Shiga Motoyuki,
 “Nuclear quantum effects in the direct ionization process of pure helium clusters;
 Path-integral and ring-polymer molecular dynamics simulations on the
 diatomics-in-molecule potential energy surfaces” ,
Physical Chemistry Chemical Physics, Vol. 20, No. 41, pp. 26489-26499, (2018).

<査読付き会議論文>

- Higashi Yoichi, Nagai Yuki, Yoshida Tomohiro, Kato Masaru, Yanase Yoichi,
 “Excitation spectra and wave functions of quasiparticle bound states in bilayer
 Rashba superconductors” ,
Physica C (Proceedings of 27th International Symposium on Superconductivity),
 Vol. 518, pp. 1-4, (2015).
- Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki, Machida Masahiko,
 “Communication avoiding Neumann expansion preconditioner for LOBPCG method;
 Convergence property of exact diagonalization method for Hubbard model” ,
*Parallel Computing is Everywhere (Proceedings of International Conference on
 Parallel Computing)*, pp. 27-36, (2018).
- Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki, Machida Masahiko,
 “High performance LOBPCG method for solving multiple eigenvalues of Hubbard
 model; Efficiency of communication avoiding Neumann expansion preconditioner” ,
*Lecture Notes in Computer Science 10776 (Proceedings of 4th Asian Conference on
 Supercomputing Frontiers)*, pp. 243-256, (2018).
- 山口 正剛, 都留 智仁, 海老原 健一, 板倉 充洋,
 「アルミニウムのポア内表面における水素解離吸着と表面エネルギー低下」,
軽金属, Vol. 68, No. 11, pp. 588-595, (2018).
- 海老原 健一, 山口 正剛, 都留 智仁, 板倉 充洋,
 「数値シミュレーションによるアルミニウムの水素昇温脱離曲線の解釈」,
軽金属, Vol. 68, No. 11, pp. 596-602, (2018).
- Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Tanaka Kaori,
 “Time-reversal symmetry breaking phase and gapped surface states in d-wave
 nanoscale superconductors” ,
Journal of Physics: Conference Series, Nol. 969, pp. 012039_1-012039_6, (2018).

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】

<口頭発表>

- ・ 武宮 博, 斎藤 公明, 吉田 浩子,
「常磐自動車道における放射線の分布状況調査, 2; 常磐自動車道における歩行サーベイおよび走行サーベイ結果」,
日本原子力学会 2018 年春の年会, (吹田, 日本, 2018 年 3 月 26-28 日) .
- ・ 町田 昌彦, 山田 進,
「1F 港湾及び近傍沿岸での放射性核種動態; データ分析に基づく考察」,
日本原子力学会 2018 年秋の大会, (岡山, 日本, 2018 年 9 月 18 日) .
- ・ 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, 14; 常磐自動車道における空間線量率分布」,
日本原子力学会 2018 年秋の大会, (岡山, 日本, 2018 年 9 月 18 日) .
- ・ 町田 昌彦, 山田 進, 江角 亜矢子,
「1F 内及び周辺海域におけるセシウム動態評価」,
日本原子力学会 2019 年春の年会, (水戸, 日本, 2019 年 3 月 21 日) .

【高度計算機技術開発室】

<口頭発表>

- ・ Seki Akiyuki,
“Progress report of data integration of time-series environmental monitoring data” ,
JAEA-LBNL Collaboration Meeting, (Berkeley, U.S.A., March 7-9, 2018).
- ・ Seki Akiyuki, Suzuki Kenta, Akazaki Tomohiko, Tamori Kiyomi, Kitamura Tomoko, Sugiyama Noriko, Saito Kimiaki, Takemiya Hiroshi,
“Development of information systems for understanding environmental monitoring data on the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant accident” ,
5th European IRPA Congress (IRPA 2018), (Hague, Netherlands, June 4-8, 2018).
- ・ 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, Yusuff A.,
「局所細分化格子を用いた格子ボルツマン法へのテンポラルブロッキング法の適用」,
第 23 回計算工学講演会, (名古屋, 日本, 2018 年 6 月 6-8 日) .
- ・ 下川辺 隆史, 小野寺 直幸,
「複数 GPU を用いた高精細計算を実現する AMR 法フレームワークの構築」,
第 23 回計算工学講演会, (名古屋, 日本, 2018 年 6 月 6-8 日) .
- ・ 大橋 訓英, 小野寺 直幸,
「Xeon Phi による共有メモリ型計算手法の数理モデルを含む船舶周り流れへの適用」,
第 23 回計算工学講演会, (名古屋, 日本, 2018 年 6 月 6-8 日) .
- ・ 河村 拓馬,

- 「可視化用粒子データを用いた遠隔地からの対話的 In-Situ 可視化」,
 JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 10 回シンポジウム, (東京, 日本, 2018 年 7 月 12-13 日) .
- ・ 小野寺 直幸,
 「格子ボルツマン法によるリアルタイム物質拡散シミュレーション手法の開発」,
 JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 10 回シンポジウム, (東京, 日本, 2018 年 7 月 12-13 日) .
 - ・ Idomura, Yasuhiro,
 “Computational challenges towards exa-scale fusion plasma turbulence simulations” ,
 13th World Congress in Computational Mechanics (WCCM 2018), (New York, U.S.A., July 22-27, 2018).
 - ・ Idomura, Yasuhiro,
 “Status of GT5D” ,
 4th US-Japan Joint Institute for Fusion Theory (JIFT) Workshop on Innovations and Co-Designs of Fusion Simulations towards Extreme Scale Computing, (Princeton, U.S.A., July 30-31, 2018).
 - ・ Matsuoka, Seikichi, Idomura, Yasuhiro, Satake Shinsuke, Honda Mitsuru, Suzuki Yasuhiro,
 “Development of GT5D for stellarator configurations” ,
 4th US-Japan Joint Institute for Fusion Theory (JIFT) Workshop on Innovations and Co-Designs of Fusion Simulations towards Extreme Scale Computing, (Princeton, U.S.A., July 30-31, 2018).
 - ・ Imamura Toshiyuki, Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Yamashita Susumu, Onodera Naoyuki, Yussuf, A., Yamada Susumu,
 “Development of exascale matrix solvers based on communication avoiding algorithms” ,
 4th US-Japan Joint Institute for Fusion Theory (JIFT) Workshop on Innovations and Co-Designs of Fusion Simulations towards Extreme Scale Computing, (Princeton, U.S.A., July 30-31, 2018).
 - ・ Onodera, Naoyuki,
 “Large-scale wind simulation using lattice Boltzmann method on GPU-Rich supercomputer” ,
 26th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-26), (London, U.K., July 22-26, 2018).
 - ・ 井戸村 泰宏,
 「ポスト京に向けた核融合プラズマ乱流コードのエクサスケール計算技術開発」,
 第 24 回 NEXT 研究会, (六ヶ所, 日本, 2018 年 8 月 9-10 日) .
 - ・ 河村 拓馬, 井戸村 泰宏,

- 「In-situ PBVR の SIMD 最適化」,
第 46 回可視化情報シンポジウム, (東京, 日本, 2018 年 9 月 14-16 日) .
- ・ Yussuf A., Ina Takuya, Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro,
“Porting a state-of-the-art communication avoiding Krylov subspace solver on P100 GPUs” ,
GTC Japan 2018, (Tokyo, Japan, September 13-14, 2018) .
 - ・ Obrejan K., Idomura Yasuhiro, Honda Mitsuru,
“Numerical study of impurity transport using the code GT5D” ,
プラズマシミュレータシンポジウム 2018 (PSS 2018), (Toki, Japan, September 7-8, 2018).
 - ・ 鈴木 喜雄, 井原 遊, 奥田 洋司,
「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; 階層化手法における加算順序の自動最適化」,
日本原子力学会 2018 年秋の大会, (岡山, 日本, 2018 年 9 月 5-7 日).
 - ・ Obrejan K., Idomura Yasuhiro, Honda Mitsuru,
“Introduction of a multi-species collision operator in GT5D and its application to heavy impurity transport” ,
Numerical Methods for the Kinetic Equations of Plasma Physics (NumKin2018),
(Garching, Germany, October 22-25, 2018).
 - ・ 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, Yussuf A., 下川辺 隆史,
「適合細分化格子ボルツマン法による熱流動解析」,
第 32 回数値流体力学シンポジウム, (東京, 日本, 2018 年 12 月 11-13 日).
 - ・ 井戸村 泰宏, Obrejan K.,
「イオン温度勾配駆動乱流における不純物輸送解析」,
第 35 回プラズマ・核融合学会年会, (吹田, 日本, 2018 年 12 月 3-6 日).
 - ・ Obrejan K., Idomura Yasuhiro, Honda Mitsuru,
“Numerical study of the role of higher order flows in neoclassical transport of high-Z impurities” ,
閉じ込め・輸送研究会 2018, (Toki, Japan, December 12, 2018).
 - ・ Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Yussuf A., Shimokawabe Takashi,
“Communication reduced multi-time-step algorithm for the AMR-based lattice Boltzmann method on GPU-rich supercomputers” ,
The 1st R-CCS International Symposium, (Kobe, Japan, February 18-19, 2019).
 - ・ Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Obrejan K., Asahi Yuichi, Matsuoka Seikichi, Imamura Toshiyuki,
“Development of exascale fusion plasma turbulence simulations for post-K” ,
The 1st R-CCS International Symposium, (Kobe, Japan, February 18-19, 2019).
 - ・ 宮村 浩子, 松原 武史, 関 暁之, 武宮 博,
「環境モニタリングデータの感覚的可視化」 ,

- 情報処理学会第 81 回全国大会, (福岡, 日本, 2019 年 3 月 14-16 日).
- ・ 宮村 浩子, 江角 亜矢子, 山田 進, 町田 昌彦,
「衛星画像を用いた河床地形推定」,
日本原子力学会 2019 年春の年会, (水戸, 日本, 2019 年 3 月 20-22 日).
 - ・ 関 暁之, 村上 治子, 斎藤 公明, 武宮 博,
「福島県におけるモニタリングポストの測定結果の時間的統合」,
日本原子力学会 2019 年春の年会, (水戸, 日本, 2019 年 3 月 20-22 日).
 - ・ 井戸村 泰宏, Obrejan K., 朝比 祐一, 松岡 清吉,
「実験解析に向けた準局所的 full-f ジャイロ運動論シミュレーションの開発」,
日本物理学会第 74 回年次大会, (福岡, 日本, 2019 年 3 月 14-17 日).
 - ・ Obrejan K., Idomura Yasuhiro, Honda Mitsuru,
“Numerical study of neoclassical impurity transport using the code GT5D” ,
2019 US-EU Transport Task Force Workshop (TTF 2019), (Austin, U. S. A., March, 18-21,
2019).

【シミュレーション技術開発室】

< 査読無し論文 >

- ・ 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,
「福島県内を想定した複雑な実環境中での空間線量率分布解析システム(3D-ADRES)の
研究開発; リモートセンシング情報の活用と各環境因子(地形・土壌・建物・樹木等)の
影響評価」,
RIST News, No. 64, pp. 3-16, (2018).
- ・ 佐々 成正,
「微積分の考え方「変数が増えた時の微積分」」,
数理科学, Vol. 56, No. 5, pp. 22-28, (2019).

< 口頭発表 >

- ・ 鈴木 知明, 都留 智仁, 長谷川 晃,
「タングステン合金における照射欠陥抑制機構と計算科学による合金元素探索」,
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 19-21 日).
- ・ 山口 一郎, Malins A.,
「短半減期核種の内部被ばく」,
日本保健物理学会シンポジウム I, 「福島事故後の内部被ばくの課題の解決に向けて;
不溶性粒子と短半減期核種」, (東京, 日本, 2018 年 3 月 19 日).
- ・ Kim M., Malins A., 吉村 和也, 佐久間 一幸, 操上 広志, 北村 哲浩, 町田 昌彦,
「PHITS による空間線量率評価のための現実的なモデル作成ツールの開発」,
日本地球惑星科学連合 2018 年大会(JpGU 2018), (千葉, 日本, 2018 年 5 月 20-24 日).
- ・ 永井 佑紀, Shen H., Qi Y., Liu J., Fu L.,
「自己学習モンテカルロ法」,

- 深層学習と物理 2018, (豊中, 日本, 2018年6月1, 2日).
- Suzudo Tomoaki,
 “Modeling of solute effects on radiation damage in W-based alloys” ,
 14th International Conference on Computer Simulation of Radiation Effects in Solids (COSIRES 2018), (Shanghai, China, June 18–22, 2018).
 - Nagai Yuki, Qi Y., Isobe Hiroki, Kozii V., Fu L.,
 “Bulk Fermi arcs in heavy fermion systems” ,
 International Workshop on Symmetry & Topology in condensed-matter physics, (Tokyo, Japan, June19–21, 2018).
 - Nagai Yuki, Qi Y., Isobe Hiroki, Kozii V., Fu L.,
 “Bulk Topological Fermi arcs in heavy fermion systems” ,
 4th Conference on Condensed Matter Physics (CCMP 2018), (Shanghai, China, July 5–8, 2018).
 - Nagai Yuki, Qi Y., Isobe Hiroki, Kozii V., Fu L.,
 “Bulk Fermi arcs in heavy fermion systems” ,
 New Trends in Topological Insulators (NTTI 2018) and 18th International Conference on Narrow Gap Systems (NGS-18), (Luxembourg, July 16–19, 2018).
 - Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Tanaka Kaori,
 “Time-reversal and/or translational symmetry breaking in d-wave nano-superconductors” ,
 12th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (M²S 2018), (Beijing, China, August 19–24, 2018).
 - Malins A., Ochi Kotaro, Sanada Yukihiisa, Yamaguchi Ichiro, Sato Tatsuhiko,
 “Simulating gamma spectrometers with PHITS; Examples of LaBr₃(Ce) airborne detector and shielded HPGe detector inside a vehicle” ,
 第14回 PHITS 研究会, (東海, 日本, 2018年8月22日).
 - Malins, A., Ochi Kotaro, Nakasone Takamasa, Yamada Tsutomu, Machida Masahiko, Kurikami Hiroshi, Saito Kimiaki, Sanada Yukihiisa,
 “Advancement of airborne radiation measurement technology, 2; Simulations of unmanned helicopter and LaBr₃(Ce) detector used for estimating radiocesium distribution in soil” ,
 日本原子力学会 2018年秋の大会, (岡山, 日本, 2018年9月5–7日).
 - Liu Xudong, Machida Masahiko, Kurikami Hiroshi, Kitamura Akihiro,
 “Simulations of radiocesium discharge from Abukuma River with improved cesium wash-off model” ,
 日本原子力学会 2018年秋の大会, (岡山, 日本, 2018年9月5–7日).
 - 数納 広哉, 町田 昌彦, 土肥 輝美,
 「森林内での菌類有機分子とセシウムの選択的錯体形成機構の理論研究」,
 日本原子力学会 2018年秋の大会, (岡山, 日本, 2018年9月5–7日).

- ・ 山田 進, 町田 昌彦, 操上 広志, 北村 哲浩,
「福島県浜通りダム湖におけるセシウム動態季節変動の数値解析」,
日本原子力学会 2018 年秋の大会, (岡山, 日本, 2018 年 9 月 5-7 日).
- ・ 山口 正剛, 海老原 健一, 鈴木 知明, 板倉 充洋,
「鉄の液体金属脆化; 第一原理計算」,
日本金属学会 2018 年秋期(第 163 回)講演大会, (仙台, 日本, 2018 年 9 月 19-21 日).
- ・ 板倉 充洋, 沖田 泰良, 中村 博樹,
「二酸化ウランおよびガンマ鉄のノンコリニア常磁性状態の第一原理計算」,
日本原子力学会 2018 年秋の大会, (岡山, 日本, 2018 年 9 月 5-7 日).
- ・ 永井 佑紀, Qi Y., 磯部 大樹, Kozii V., Fu, L.,
「重い電子系におけるバルクトポロジカルフェルミアーク」,
日本物理学会 2018 年秋季大会(物性), (京田辺, 日本, 2018 年 9 月 9-12 日).
- ・ Nagai Yuki, Okumura Masahiko, Tanaka Akinori,
“Self-learning Monte Carlo method with neural networks inspired by
machine-learning molecular dynamics” ,
Mini-workshop on Machine Learning in Physics, (Tokyo, Japan, September 13 2018).
- ・ 奥村 雅彦, 中村 博樹, 町田 昌彦,
「粘土鉱物とセシウムの非イオン結合」,
2018 年度日本地球化学会第 65 回年会, (沖縄県中頭郡, 日本, 2018 年 9 月 11-13 日).
- ・ 志賀 基之,
「自由エネルギー面上の化学反応経路探索」,
第 12 回分子科学討論会, (福岡, 日本, 2018 年 9 月 10-13 日).
- ・ 板倉 充洋, 沖田 泰良,
「ボイドによる転位ピン止め過程の原子論的モデル化」,
日本金属学会 2018 年秋期(第 163 回)講演大会, (仙台, 日本, 2018 年 9 月 19-21 日).
- ・ Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“A First-principles study on the mechanical properties of (Th,Pu)O₂” ,
Nuclear Materials Conference 2018 (NuMat 2018), (Seattle, U.S.A, October 14-18
2018).
- ・ Yamaguchi Masatake,
“Combined analysis of first-principles calculations and fracture mechanics
experiments on intergranular embrittlement of a Ni-Cr steel” ,
Nuclear Materials Conference 2018 (NuMat 2018), (Seattle, U.S.A, October 14-18
2018).
- ・ Ebihara Kenichi, Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake,
“Simulation of irradiation-induced grain boundary phosphorus segregation by
first-principles-based rate theory model including trapping and detrapping
processes” ,
Nuclear Materials Conference 2018 (NuMat 2018), (Seattle, U.S.A, October 14-18

- 2018).
- Suzudo Tomoaki, Nagai Yasuyoshi, Toyama Takeshi, Takamizawa Hisashi, Nishiyama Yutaka, Caro A.,
 “Atomistic modeling of hardening in thermally-aged Fe-Cr binary alloys” ,
 Nuclear Materials Conference 2018 (NuMat 2018), (Seattle, U.S.A, October 14-18 2018).
 - Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake, Tsuru, Tomohito,
 “First-principles calculation of interactions between edge/screw dislocations and carbon/nitrogen atoms in alpha iron” ,
 International Symposium on Atomistic Processes of Crystal Plasticity (APCP 2018), (Tokyo, Japan, October 25-27 2018).
 - Suzudo Tomoaki, Onitsuka Takashi, Fukumoto Kenichi,
 “Scrutinizing screw dislocation glide initiation at finite temperature in BCC metals” ,
 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM 2018), (Osaka, Japan, October 28-November 2 2018).
 - Ebihara Kenichi, Suzudo, Tomoaki,
 “Computational study of phosphorus migration to grain boundary in α -iron” ,
 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM 2018), (Osaka, Japan, October 28-November 2 2018).
 - Yamaguchi Masatake,
 “Combined analysis of first-principles calculations and fracture mechanics experiments on intergranular embrittlement of a Ni-Cr steel” ,
 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM 2018), (Osaka, Japan, October 28-November 2 2018).
 - Suzudo Tomoaki,
 “Computational study of solute effects in tungsten under irradiation” ,
 14th International Workshop on Spallation Materials Technology (IWSMT-14), (Fukushima, Japan, November 11-17 2018).
 - 鈴木 知明, 永井 康介, 外山 健, 高見澤 悠, 西山 裕孝, Caro Alfredo,
 「Fe-Cr 合金の熱時効硬化に関するモデリング研究」 ,
 平成 30 年度材料照射研究会・ゼロエミッションエネルギー拠点研究会 (ZE 研究会), (宇治, 日本, 2018 年 11 月 27-28 日).
 - 志賀 基之,
 「水素の量子効果を考慮した第一原理計算」 ,
 第 15 回水素量子アトムクス研究会/第 1 回ハイドロジェノミクス研究会, (柏, 日本, 2018 年 11 月 15-16 日).
 - 板倉 充洋, 山口 正剛,
 「純マグネシウム系におけるキンクの第一原理計算」 ,

- 軽金属学会第 135 回秋期大会, (東京, 日本, 2018 年 11 月 9-11 日).
- ・ 志賀 基之,
「自由エネルギー面上における停留点の探索法」,
第 32 回分子シミュレーション討論会, (つくば, 日本, 2018 年 11 月 28-30 日).
 - ・ 永井 佑紀, Qi Y., 磯部 大樹, Kozii V., Fu L.,
「重い電子系における例外点とバルクトポロジカルフェルミアーク」,
第 10 回トポロジー連携研究会「非平衡系・非エルミート系の新奇量子現象」, (京都, 日本, 2018 年 11 月 30 日-12 月 1 日).
 - ・ 永井 佑紀,
「BdG 方程式を用いた磁束格子計算」,
第 26 回渦糸物理国内会議, (いわき, 日本, 2018 年 12 月 3-5 日).
 - ・ 永井 佑紀,
「自己学習モンテカルロ法; 機械学習を用いたモンテカルロ法の高速化」,
第 7 回材料系ワークショップ, (東京, 日本, 2019 年 2 月 8 日).
 - ・ Yamada Susumu, Onodera Naoyuki, Ina Takuya, Yamashita Susumu, Idomura Yasuhiro, Imamura Toshiyuki,
“Communication avoiding multigrid preconditioned conjugate gradient method for extreme scale multiphase CFD simulations” ,
The 1st R-CCS International Symposium, (Kobe, Japan, February 18-19, 2019).
 - ・ Suzudo Tomoaki,
“Atomistic modeling study of fusion materials” ,
Plasma Conference 2017 (PLASMA 2017), (Himeji, Japan, November 20-24, 2017).
 - ・ Malins A., Imamura Naohiro, Niizato Tadafumi, Kim M., Sakuma Kazuyuki, Shinomiya Yoshiki, Miura Satoru, Machida Masahiko,
“PHITS models for ambient dose equivalent rates in Fukushima’s Radiocesium contaminated forests” ,
日本原子力学会 2019 年春の年会, (水戸, 日本, 2019 年 3 月 20-22 日).
 - ・ 中村 博樹, 町田 昌彦,
「二酸化アクチニドにおけるポーラロンの第一原理計算」,
日本原子力学会 2019 年春の年会, (水戸, 日本, 2019 年 3 月 20-22 日).
 - ・ 奥村 雅彦, 小林 恵太, 中村 博樹, 板倉 充洋, 町田 昌彦,
「二酸化トリウムの機械学習分子動力学法シミュレーション」,
日本原子力学会 2019 年春の年会, (水戸, 日本, 2019 年 3 月 20-22 日).
 - ・ 佐々 成正,
「リュービルの定理と保存則」,
第 15 回日本応用数理学会研究部会連合発表会, (つくば, 日本, 2019 年 3 月 4-5 日).
 - ・ 永井 佑紀, 奥村 雅彦, 田中 章詞,
「Behler-Parrinello 型ニューラルネットワークを用いた自己学習モンテカルロ法」,
日本物理学会第 74 回年次大会, (福岡, 日本, 2019 年 3 月 14-17 日).

- ・ Nagai Yuki, Qi Y., Isobe Hiroki, Kozii V., Fu L.,
“Bulk topological Fermi arcs in heavy fermion systems”,
American Physical Society March Meeting 2019, (Boston, U. S. A., March 4-8, 2019).
- ・ 板倉 充洋, 山口 正剛,
「転位列への固溶元素析出の第一原理計算によるモデル化」,
日本金属学会 2019 年春期(第 164 回)講演大会, (東京, 日本, 2019 年 3 月 20-22 日).
- ・ 板倉 充洋,
「鉄中転位と炭素・窒素の相互作用の第一原理計算」,
日本鉄鋼協会材料の組織と特性部会評価・分析・解析部会「鉄鋼中の軽元素と材料組織
および特性」研究会最終報告会, (東京, 日本, 2019 年 3 月 22 日).

3. 技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

- (1) Suzuki Yoshio, Iigaki Kazuhiko,
“Error estimation in observed acceleration data toward V&V of a seismic
simulation” ,
JAEA-Data/Code 2018-009 (2018), 41p.
- (2) 植野 あすか, 矢城 重夫, 宇野 騎一郎, 青木 和久,
「情報セキュリティ教育教材集; 2013 年度~2017 年度」,
JAEA-Review 2018-006 (2018), 115p.

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- (1) 2018 年 7 月 13 日プレス発表, “土壌粘土粒子の表面ナノ構造とセシウム吸着特性との
関係を解明ー最も強い吸着を示すのは「ほつれたエッジ」と呼ばれるナノ構造であるこ
とを計算科学で立証ー” ,
(7 月 18 日日刊工業新聞、7 月 19 日電気新聞、7 月 29 日日本経済新聞に掲載) .
- (2) 2018 年 9 月 4 日プレス発表, 矢野経済研究所“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”につ
いて取材,
(月刊誌「Yano E Plus」 2018 年 10 月号(No.127) p.41-43 (Electronics 専門誌) に
記事掲載) .

5. 研究発表会等の開催

- (1) CCSE セミナー, 「Toward machine learning based study of physics」, (2018 年 4 月 27
日).
- (2) 3 機関(国立環境研究所・電力中央研究所・原子力機構)連携 WS、福島環境動態解析研究
の今後の連携展開について(2018 年 6 月 15 日).
- (3) 第 30 回 CCSE ワークショップ, 「AI 技術の原子力および関連分野への応用」, (2019 年 3
月 11 日) .

6. 受賞等

- (1) 第 23 回計算工学講演会 グラフィックスアワード 特別賞 (Visual Computing 賞)
下川辺隆史, 小野寺直幸
(日本計算工学会、2018 年 6 月)
- (2) 第 23 回計算工学講演会 グラフィックスアワード 特別賞 (MSC Apex 賞)
下川辺隆史, 小野寺直幸
(日本計算工学会、2018 年 6 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	3,687,977 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	80,154 (7)
シミュレーション技術開発室	29,747 (18)

【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) 10,700 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) 43,415 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) 23,959 千円
- (5) 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
- (6) 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
- (7) 電子加熱に対する不純物イオン輸送の過渡的応答に関する研究 (日本学術振興会: 科研費(基盤 C)) 520 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） 3,000 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) 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
- (12) 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
- (13) 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鉍化法の開発（日本学術振興会：科研費（基盤 A）） 200 千円
- (14) 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）） 1,300 千円
- (15) 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
- (16) 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
- (17) 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
- (18) 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）） 650 千円
- (19) 強相関電子系における自己学習連続時間量子モンテカルロ法の確立（日本学術振興会：科研費（基盤 C）） 2,470 千円
- (20) 機械学習分子シミュレーションと実験による粘土鉍物界面水物性の解明（日本学術振興会：科研費（基盤 C）） 3,120 千円
- (21) エクサスケール計算機を想定した量子モデルシミュレーションに対する並列化・高速化（日本学術振興会：科研費（基盤 C）） 1,170 千円
- (22) トポロジカルフェルミアーク：有限温度での特異な準粒子励起の研究（日本学術振興会：科研費（基盤 C）） 1,950 千円
- (23) 水素の先端計算による水素機能の高精度予測（日本学術振興会：科研費（新学術領域研究）） 5,746 千円
- (24) 水素エネルギー材料の次代設計のための量子論的モデリングの深化と応用（日本学術振興会：科研費（基盤 B）） 1,053 千円
- (25) モデリングによるキンク形成・強化のメカニズム解明（日本学術振興会：科研費（新学術領域研究）） 4,238 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	5	0	4	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	9	0	7	1

●共同研究

【高度計算機技術開発室】

- (1) 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）
- (2) 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）
- (3) 大規模シミュレーションに対する粒子ベース可視化のための高度化に関する研究（京都大学）
- (4) 大規模流体解析のための適合細分化格子法の高度化に関する研究（東京大学、東京工業大学）
- (5) 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】

- (6) 大規模並列計算用ライブラリの研究開発（理化学研究所）
- (7) 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）
- (8) 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）
- (9) 「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】

- (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）
- (2) 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）
- (3) 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）（福島研究開発部門受託に参加）
- (4) 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手続き中）

【シミュレーション技術開発室】

- (5) 「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）
- (6) 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）
- (7) ポスト「京」萌芽的課題 基礎科学のフロンティアー極限への挑戦（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)

- (8) 革新炉材料開発のための次世代ナノスケール解析法の開発と照射後実験研究の国際ハブの構築
(原子力安全研究協会)

●研究協定

- (1) 「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 11 件に及ぶ機構内連携を実施している。

- (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) 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。

- (5) 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。

- (6) 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。

- (7) 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。

- (8) ADS 材料の脆化評価
 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：ADS 炉ビーム窓材料の液体金属脆化と照射脆化について計算科学による評価を行う。
- (9) 酸化物アクチナイドの計算科学による物性評価
 部署：高速炉・新型炉研究開発部門（高速炉サイクル研究開発センター）
 概要：第一原理計算を基にした数値シミュレーションによる MOX 燃料の熱物性・機械的特性の評価を行う。
- (10) 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。
- (11) 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 ヶ国が参加）
 （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～）

This is a blank page.

国際単位系 (SI)

表1. SI 基本単位

基本量	SI 基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質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
比透磁率 ^(b)	(数字の)	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 ^(e)	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	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
光照射度	ルーメン	lm	cd sr ^(e)	cd
放射線量	グレイ	Gy	J/kg	m ² s ⁻²
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み、ベクレルは放射性核種の統計的過程についてのみ使用される。
 (e) セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。セルシウス度とケルビンの単位の大きさは同一である。したがって、温度差や温度間隔を表す数値はどちらの単位で表しても同じである。
 (f) 放射性核種の放射能 (activity referred to a radionuclide) は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。
 (g) 単位シーベルト (PV, 2002, 70, 205) についてはCIPM勧告2 (CI-2002) を参照。

表4. 単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI 組立単位		
	名称	記号	SI 基本単位による表し方
粘力のモーメント	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
角加速度	ニュートン毎メートル	N/m	kg s ⁻²
角加減	ラジアン毎秒	rad/s	m m ⁻¹ s ⁻¹ =s ⁻¹
熱流密度, 放射照度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s ²	m m ⁻¹ s ⁻² =s ⁻²
熱容量, エントロピー	ワット毎平方メートル	W/m ²	kg s ⁻³
比熱容量, 比エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	m ² kg s ⁻² K ⁻¹
比エネルギー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	m ² s ⁻² K ⁻¹
熱伝導率	ジュール毎キログラム	J/kg	m ² s ⁻²
体積エネルギー	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s ⁻³ K ⁻¹
電界の強さ	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ⁻¹ kg s ⁻²
電荷密度	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m kg s ⁻³ A ⁻¹
電表面電荷	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ⁻³ 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	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² s A
透磁率	ファラド毎メートル	F/m	m ³ kg ⁻¹ s ⁴ A ²
モルエネルギー	ヘンリー毎メートル	H/m	m kg s ⁻² A ⁻²
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル	J/mol	m ² kg s ⁻² mol ⁻¹
照射線量 (X線及びγ線)	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	m ² kg s ⁻² K ⁻¹ mol ⁻¹
吸収線量率	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ s A
放射線強度	グレイ毎秒	Gy/s	m ² s ⁻³
放射輝度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m ⁴ m ⁻² kg s ⁻³ =m ² kg s ⁻³
酵素活性濃度	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
	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) ² =10 ⁻²⁸ m ²
ノット	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネーパ	Np	SI単位との数値的關係は、 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
エルグ	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J
ダイン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N
ポアズ	P	1 P=1 dyn s cm ⁻² =0.1Pa s
ストークス	St	1 St=1cm ² s ⁻¹ =10 ⁻⁴ m ² s ⁻¹
スチルブ	sb	1 sb=1cd cm ⁻² =10 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 _e =(10 ³ /4π)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「△」は対応關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°C」カロリ), 4.1868J (「IT」カロリ), 4.184J (「熱化学」カロリ)
マイクロ	μ	1 μ=1μm=10 ⁻⁶ m

