



JAEA-Evaluation

2020-002

DOI:10.11484/jaea-evaluation-2020-002

令和元年度計算科学技術研究実績評価報告

Review of Research on Advanced Computational Science in FY2019

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

December 2020

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

令和元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

(2020 年 10 月 15 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、令和元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 FY2019

Center for Computational Science & e-Systems

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

(Received October 15, 2020)

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 FY2019 (April 1st, 2019 - March 31st, 2020) 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	4
4.1 令和元年度評価	4
付録 令和元年度計算科学技術研究実績	17

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 (FY2019)	3
4. Results of the R&D and the Evaluation Comments	4
4.1 FY2019	4
Appendix List of Achievements in FY2019	17

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の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、令和元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	越塚 誠一	東京大学大学院 工学系研究科 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～）
	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 計算科学研究センター 教授
	横峯 健彦	京都大学大学院 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	令和 2 年 2 月 6 日 9:30～11:30	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、令和元年度計画及び評価軸について ・ 令和元年度計算科学技術研究の実績について	常行委員、横峯委員は欠席。 各委員に対し、それぞれ、2/26、3/12 に個別に説明を実施。

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～令和 4 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令和元年度の年度計画は、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、界面を対象としたマイクロ・メゾスケールモデル解析を実施し、燃料・被覆管熔融体の界面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、演算加速装置向け流体計算技術を複雑流体解析コードに適用するとともに、In-Situ 可視化システムにおける実時間シミュレーション制御機能を開発する。

4. 研究実績と評価意見

4.1 令和元年度評価

中長期計画及び令和元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（令和 2 年 1 月 31 日時点）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 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 令和元年度研究開発実績及び成果の意義等（令和 2 年 1 月 31 日時点）（1/2）

	中長期計画	R 元年度計画	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	シビアアクシデント時の炉内複雑現象解析に向け、界面を対象としたマイクロ・メゾスケールモデル解析を実施し、燃料・被覆管溶融体の界面特性データを取得する。	○燃料・被覆管溶融体界面のメゾスケールモデルを用い界面凝固の有無を判別できる技術を確立するとともにマイクロモデル解析で表面張力を評価し、炉内複雑現象解析の高度化に必要な界面特性データを取得。	○マクロな流動特性に影響を与える溶融体界面でのマイクロ・メゾスケールの物理現象をモデル化し定量評価するとともに、凝固プロセスや表面の原子構造に関する新たな知見を得た。	○原子力基礎工学研究センターで行っているマクロな溶融燃料移行挙動解析において、表面凝固は移行挙動に影響を与えるためその有無を判別する条件の評価が必要とされていた。今回の解析により溶融燃料移行の各段階での凝固の有無が判明した。	○査読付き論文数：8 件（IF2.0 以上 4 件） ○招待講演：3 件 ○外部資金：7 件（17,745 千円） ○国際会議発表：9 件
2	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。	エクサスケール流体解析に向け、演算加速装置向け流体計算技術を複雑流体解析コードに適用するとともに、 In-Situ 可視化システムにおける実時間シミュレーション制御機能を開発する。	○省通信型クリロフ部分空間法に基づく GPU 版ソルバを 3 次元多相多成分熱流動解析コード JUPITER に適用し、SUMMIT において 7680GPU までのスケーリングを達成。 ○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 CityLBM をデブリ空冷模擬実験解析に適用し、従来の CPU 向け流体計算コードに比べて一桁少ないプロセス数で 6 倍程度の処理速度を達成。 ○In-Situ 可視化システムにおける実時間シミュレーション制御機能を開発し、実時間汚染物質拡散解析における汚染物質源等の計算条件の実時間制御を実現。	○JUPITER コードによる多相多成分熱流動解析の大規模並列 GPU 処理を実現できたことで、次期機構スパコンを活用した過酷事故解析や炉内熱流動解析の見通しが得られた。 ○CityLBM コードによって単相熱流動解析の格子数削減と演算加速を実現し、物体表面の詳細な流れを捉えつつ大規模な熱流動を高速に計算することが可能になり、実機規模のデブリ空冷解析の見通しが得られた。 ○実時間汚染物質解析の実時間シミュレーション制御機能によって、In-Situ 可視化と組み合わせた対話的なシミュレーション結果の理解や汚染物質源探索のような逆問題の簡易的検討が可能になった。	○原子力基礎工学研究センターとの連携の下、原子力機構の主力流体計算コード JUPITER の GPU 向け整備を実施。また、GPU 向け省通信型クリロフ部分空間法ソルバの汎用インターフェースを整備し数値計算ライブラリ PARCEL として公開する予定。 ○原子力基礎工学研究センターとの連携の下、次期スパコンにおけるデブリ空冷解析に向けたデブリ空冷模擬実験の実証研究を実施。 ○オープンソース In-Situ システムの実時間シミュレーション制御機能を開発し、実時間汚染物質拡散解析における機能実証を実施。今後、本機能を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 2 件） ○招待講演：7 件 ○外部資金：8 件（81,675 千円） ○国際会議発表：13 件 ○受賞：1 件

表 4.1 令和元年度研究開発実績及び成果の意義等（令和 2 年 1 月 31 日時点）（2/2）

	中長期計画	R 元年度計画	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】 ○AI 技術を応用して福島全域の空間線量率の時間変化を解析し、環境半減期約半年および 2 年の成分と、減衰しない成分の 3 つが主であることを示した。 【原子炉材料の脆化に係る連携】 ○加速器駆動核変換システム（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が、固溶エネルギーが小さいという共通特性を持つことを第一原理計算で見出した。 【AI 技術の横断的展開】 ○第一原理計算の結果を学習することで高精度のシミュレーションを高速に実施できる機械学習分子動力学をクチノイド燃料に応用し大規模計算を実現。	【放射性物質の環境動態に係る連携】 ○従来手法による環境半減期の推定では成分の数をあらかじめ仮定して解析していたが、最新手法による解析で主要な成分の数を同定することに成功、解析精度を向上させた。 【原子炉材料の脆化に係る連携】 ○材料と様々な液体金属の組み合わせに対し、それらの間のミクロな相互作用と脆化傾向の相関を見出したことで脆化機構の解明に向けた手掛かりを得た。 【AI 技術の横断的展開】 ○アクチノイド燃料は第一原理計算に時間がかかり、液体の凝固過程などは計算規模が大きくなり従来は不可能であったが、機械学習分子動力学でこの計算を実現し凝固速度の温度依存性などを評価することに成功。	【放射性物質の環境動態に係る連携】 ○環境半減期を客観的な解析で導出することにより福島県における空間線量の将来予測の精度を向上させた。 【原子炉材料の脆化に係る連携】 ○原子力基礎工学研究センターとの連携の下、実験と計算により ADS 材料の液体金属脆化機構解明を行っている。照射と液体金属の重畳効果を実験で調べる際に、計算で得られた知見に基づいて実験の手順を立案し研究の効率化に貢献。 【AI 技術の横断的展開】 ○熔融核燃料の凝固速度は実験による測定が困難なため、凝固過程の解析を行う上で不確定性の大きいパラメータであったがこれを計算で評価することで解析の高精度化につなげた。またこの手法を広く機構内で横断展開するため理事長裁量経費を獲得し 11 件の連携研究を展開。	【放射性物質の環境動態に係る連携】 ○査読付き論文数：4 件（IF2.0 以上 2 件） ○外部資金：4 件（2,220 千円） ○国際会議発表：5 件 ○受賞：1 件 【原子炉材料の脆化に係る連携】 ○査読付き論文数：3 件（IF2.0 以上 2 件） ○招待講演：2 件 ○外部資金：7 件（11,489 千円） ○国際会議発表：4 件 【AI 技術の横断的展開】 ○理事長裁量経費：1 件（33,000 千円）

【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 令和元年度評価意見（1/4）

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、界面を対象としたミクロ・メゾスケールモデル解析を実施し、燃料・被覆管溶融体の界面特性データを取得する。	○複雑現象シミュレーション技術に関して、計画に沿って凝固や表面張力などの研究課題に対して、優れた成果が得られている。 ○計画に沿って着実に成果を上げている。 ○当初計画に留まらず、計画外でも非常に大きな将来の成果につながり得る基礎技術の開発に成功しており、本課題に対しては特に顕著な成果の創出がなされており、また、将来技術に向けても格段の成果が期待できると判断される。 ○大規模な第一原理計算から取得したデータをもとに、フェーズフィールド法によるメゾスケールモデルシミュレーションを行えるようになった。全体として、研究は着実に進捗している。 ○計画に従い順調に進捗している。 ○来年度のメゾ・ミクロモデルを組み込んだマクロスケール流動特性評価が本計画の肝となるが、それに備え、今年度はミクロ・メゾスケールのモデリングを機械学習 MD など新しい試みも加え順調に準備ができたと評価できる。 （評価項目「その他」を含む）	○多くの論文発表を行っていることは高く評価できる。 （評価項目「その他」を含む） ○複雑現象の解明に向けた方法論や現象モデルの開発は、SA 分析における定量評価、メカニズム理解に貢献している。 ○大規模な第一原理計算、MD 計算に基づく界面の解析から、界面構造や界面張力の計算に成功しており、高く評価できる。特に界面張力に関しては、高温実験とも比較して良好な再現性を得た上で界面過剰自由エネルギーをエネルギー、エントロピーに分割して議論を進めるなど、大きな科学的意義が認められる。 ○汎用的なシミュレーション手法の開発・実証で、成果が上がっている。とくに、実験計測の難しい溶融デブリ等の高温物性シミュレーションが着実に前進している。 ○移動現象機構の第一義的な界面現象に関して、マクロモデルへの適用を考慮したミクロ・メゾスケールモデリングは、出てきた成果はすべて科学的意義が大きいと思われるが、今年度は、ミクロ・メゾスケールの解析から実験解析へ示唆や物性評価といったマクロスケールへのブリッジを行っており、成果の科学的重要性を示している。	○シビアアクシデント解析において原子力基礎工学研究センターと連携するなど、機構内外のニーズへの貢献に努めている。 ○マイクロデータに基づいて、界面現象も含めたメゾスケールシミュレーションが成功すれば、原子力技術において最も重要な課題の一つである炉内複雑現象の解明に大きく貢献できるものと期待される ○一方で、これまで確立してきた大規模第一原理計算技術を他材料の界面ナノ力学の解明に適用し、他分野の研究者に協力して新規高性能材料の開発にすでに着手しているなど大きな波及効果が期待される。 ○機構のニーズに適合した研究を進め、貢献している。 ○機構内での SA 時溶融現象解析の高度化については十分適合しており、貢献も大きい。そのみならず、界面現象解析の系統的なモデリング手法の構築として他分野に関しても貢献が大きい。	○界面現象に対して大規模第一原理計算と分子動力学計算に基づいた解析により解明するなど、科学的に優れた成果が得られている。 ○大規模第一原理計算技術の確立など、方法論的にも優れた成果が得られている。	○複雑な現象のモデリングはチャレンジングな研究領域である。加えて、計算科学的なアプローチを進める上で、予測精度を検証する実験結果が少ない中で結果の解釈をどのように担保していくのか、その考え方をしっかりと示せると良い。 ○原子力基盤研究としてすでに大きな成果を上げてきているが、令和 2 年度からの計画において、メゾ、マクロ、そして実験研究者等と連携して、実際のデブリの取り出しに貢献できるよう引き続き精力的に研究を進めていただきたい。

表 4.2 令和元年度評価意見（2/4）

エクサスケール流体解析に向け、演算加速装置向け流体計算技術を複雑流体解析コードに適用するとともに、In-Situ 可視化システムにおける実時間シミュレーション制御機能を開発する。	○3 次元多相多成分熱流動解析コード JUPITER の高速化、GPU 向け格子ボルツマン法コードの開発、In-Situ 可視化技術の開発は、研究計画に沿った顕著な成果であると評価できる。 ○着実な成果を上げ、開発したソフトウェアのアウトリーチも積極的に進め、日本の計算科学コミュニティに大きく貢献している。 ○GPU を用いた複雑流体解析で大きな成果が出始めており、また可視化技術も順調に進んでおり、顕著な成果が期待できる。 ○原子力流体解析コードへの GPU 向け省通信型行列解法適用、世界最大の GPU スパコン Summit での実証、GPU 向け格子ボルツマン法コード開発、In-Situ 可視化システムにおける実時間シミュレーション制御機能の開発など、計画は着実に進捗している。 ○研究は計画通りに進捗しており、期待された成果が得られている。 ○順調に進捗している。	○高速計算技術および可視化技術に関する研究成果は学術的に先端的である。 ○高性能計算技術は有限時間内での計算可能性を担保する重要な技術であるため、顕著な研究成果である。 ○本計画は、科学的成果を目指す研究の基盤となるソフト開発、計算技術開発が主な課題であるが、ここで開発されたソフト、計算技術を用いて他部門の研究者と協力しながらすでにいくつかの科学的成果が得られ始めており、高く評価できる。 ○GPU マシン向けに開発された各種流体解析コードや、シミュレーションにあわせリアルタイムで使える可視化システムは、計算科学コミュニティに向けて適切に提供されるならば、大きな波及効果があると期待される。 ○省通信 CG 法の GPU 化は先進的な演算加速スーパーコンピュータの効率的利用という点で非常に重要な成果を上げている。米国 Summit システムの約 1/4 のリソースを使った世界最大クラスの同種計算は特筆に値し、特に顕著な成果であると認められる。 ○共有ファイルシステムを介した In-Situ 可視化はスーパーコンピュータのジョブスケジューリングへの影響を最小化する有効な手法である。 ○まだ、科学的意義を発するとは言えないが、科学的意義を発出する基盤構築としては意義がある。	○GPU を用いた高速計算に関する成果は、機構に導入される予定である新しいスーパーコンピュータでも生かされるものであり、機構全体の計算技術のレベルアップに貢献している。 ○機構内外のグループとのコラボレーションを積極的に進めており、競争的資金や計算資源の獲得などにつながっている点は評価できる。 ○機構内他部門の研究に大きく貢献している。また、ポスト東京重点課題 6 においては核融合コミュニティに欠かせないアプリ開発を担ってきているなど、高く評価できる。富岳プロジェクトにおいても活躍が期待される。 ○機構内の他のセンターと連携しつつ、機構のニーズに適合した研究を進め、貢献している。 ○GPU コンピューティングを複雑流体解析コードに適用することは電力性能効率が求められる超大規模計算におけるトレンドに乗っており、開発したコードが共有化・オープン化されれば分野研究に大きく資すると考えられる。 ○機構内外との連携を推進しており十分貢献している。	○世界最大の GPU スーパーコンピュータである SUMMIT で計算性能を実証した成果は、特に顕著な成果である。また、格子ボルツマン法に関する研究は広くメディアで取り上げるなど特に顕著な成果であると認められる。 ○高性能計算技術、LBM + AMR、In-Situ 可視化のいずれも優れた研究成果であり、publication も出ている。 ○特に、汚染物質拡散解析において、野外実験との比較において極めて優れた予測性能を実証するなど、我が国喫緊の課題の解決に直結した成果を挙げている。 ○省通信 CG 法により、Summit を用いて、7680GPU までの強スケーリングを実証した。 ○流体解析において 7680 台の GPU 利用まで順調なスケーリングが得られており、極めて大規模な計算を高速に実施できている。これにより、特に顕著な研究成果が得られているといえる。 ○通信隠蔽による効果は地道な努力であるが、確実に計算時間短縮に貢献している。 ○In-Situ PBVR 実時間シミュレーションを対話型で計算条件最適化できるように改良した点。	○In-Situ 可視化とシミュレータを用いた、Huma-in-the-Loop 的な逆問題アプローチは研究者の学習としては効果があると考えられる。その一方で、コンタミのソース推定は計算科学的な点からは価値のある研究内容と思われる。是非、先進的な取組にしていきたい。 ○実時間汚染物質拡散解析ソフトは、行政的、法的に正式に位置づけた上での緊急時の避難指示などへの積極的な活用が素人的には期待される。 ○計算基盤技術開発において、非常に優れた成果を上げている。 ○JUPITER、CityLBM は、現時点では公開されていないが、将来的にはぜひ公開もしくは商用化して、幅広いユーザが使えるようにすることをご検討いただきたい。 ○大規模 GPU システムにおける演算加速のノウハウは貴重である。今後、計算結果だけでなく手法やコード自体のオープン化を進めれば、研究分野への大きな貢献となり、研究力のアピールにつながると思われる。 ○性能評価、有効性評価のみならず、エクサスケール解析の芯となる“科学的意義を発出する課題”を 1, 2 つあらかじめ立てたらどうか。汚染物質拡散解析などの精緻化は確かに意義があるが、本当に目指しているのは複雑流体解析であり、この場合の“複雑”の定義をどうとらえている（とらえればいい）のか曖昧である。
---	--	---	--	--	---

表 4.2 令和元年度評価意見（3/4）

その他（機構内他部署との連携）	○機械学習の応用は当初の計画外であるが、昨今のニーズを受けた取り組みであり、今後の技術開発において基礎技術の蓄積の役割を果たしている。 ○高温融体の表面張力の第一原理計算や、二酸化アクチノイドの高精度なニューラルネットワーク原子間力モデル作成にも成功した。空間線量データ取得とその AI による解析も行われている。全体として、研究は着実に進捗している。 ○AI 関連技術の進展は好調で、今後の進展に期待したい。	○ニューラルネットワーク原子間力モデルは、手法自体新しいわけでは無いが、先行研究のない核燃料でその有用性が実証されつつあることは、大きな成果である。 ○AI 関連技術において、第一原理計算に基づく計算結果を学習させた後、MD に適用する手法は重要であり、今後の同種の計算への応用は全演算時間を大幅に短縮しつつ結果を出すという点で成果が期待される。 ○福島環境回復への AI 技術応用も、空間線量の将来予測精度向上に寄与する点で重要な成果と思われる。	○機械学習を用いた多体力の計算においては、これまで全く試みられていなかった異方性を持った相互作用への適用を行っており、原子力分野に加えて他分野への大きな貢献も期待される。 ○機構のニーズに適合した研究を進め、貢献している。 ○機械学習の適用は様々な分野で進んでおり、機構内外での連携研究に資すると期待される。 ○連携研究などを進めることによって、他分野への展開を推進していることは評価に値する。	○AI 関連技術の研究を独自に進めて成果を得ていることは高く評価できる。AI を活用して福島県における空間線量率をサーベイメータから推定する手法を開発したことは、特に顕著な成果であると考ええる。 ○第一原理計算からの多体力の機械学習による迅速な評価法の確立など、方法論的にも優れた成果が得られている。 ○福島の路線バスサーベイにより得られた 13 万地点 150 万個の空間線量データは、震災後の環境回復を実データから考える上で、世界的にも類のない貴重なデータであると思われる。 ○機械学習の第一原理から MD 計算への適用により、顕著な成果が得られたと認められる。	○サロゲートモデルとしては、CNN をつかっているということだが、十分なデータがない領域では学習したモデルの精度は保証できない。また、学習したモデルは単なるフィッティングであるので、モデルの意味は説明できない。メカニズムを説明できるホワイトボックス的なアプローチも検討してはいかがでしょうか。 ○小規模の第一原理計算を多数実行しているとのことであるが、キャパシティコンピューティングを効果的に進めるため、ワークフローなど高生産性ツールが未利用であれば、検討してはいかがでしょうか。 ○機械学習を援用したテーマについては、当該領域でのベンチマークを実施し、開発する技術がどのような位置づけであるのかを、再度確認してはどうでしょうか。その過程で、既に開発されている技術やソフトウェアが明らかになり、それらを再利用して更に研究を進めることもできると思いますし、類似の研究をするにしても、従来との差違を明確にすることで、研究の目的やメリットを強固にできると思います。 ○第一原理に基づくニューラルネットワーク原子間力モデルを利用して、ミクロなシミュレーションの守備範囲を拡大することは、良い戦略だと思われる。ただし、表面、界面のように化学組成が変化する領域でも妥当なモデルとなっているかどうかは、表面、界面の完全な第一原理計算との比較検証等により、詳細な検討を行う必要がある。 ○機械学習アプローチについて、他の研究との対比とオリジナリティの模索を強化してほしい。 ○特に福島環境回復は機構内外へのニーズへの貢献としては非常に大きい。社会に還元する際は、環境半減期をもっとわかりやすい指標に替えて公表すべきである。
-----------------	--	---	---	---	---

表 4.2 令和元年度評価意見（4/4）

中長期計画・年度計画にとらわれず、全体を通じた、当該分野の研究開発についてのコメント（今後の方向性、改善点、その他）
○高速計算や可視化といった、大規模高速計算に関わる研究を通じて、機構全体の計算技術のレベルアップにこれからも貢献してほしい。また、機構内での様々な連携を通じた貢献も引き続き大いに期待される。福島事故関連の貢献についても今後も注力してほしい。 ○今後、計算科学とデータ科学の統合的なアプローチが増えてくると思われるが、データの品質と蓄積が重要になってくる。特に、複雑現象のモデリングにおいてはその重要性は十分に注意を払う必要がある。また、関連して、今後の大型の競争資金の提案ではデータマネジメントポリシーが要求される傾向であるため、機構としてのポリシーを整理することを検討されてはどうか。また、積極的な意味では、オープンデータについての取組も考えられるとよいかと思います。 ○機構の特徴として、各専門領域への情報発信はもちろん、一般層に向けた情報発信が要求されると思われるが、その取組や成果については、今回のプレゼンでは見えてきませんでした。 ○原子力に関わる基盤技術はいかなる社会環境の下でも重要であり、将来にわたって引き続き積極的に推進していただければと思う。 ○高度計算機技術開発室で行われている大規模流体計算は、古典的な問題であるが、メモリバンド幅律速となるステンシル計算が重要な性能ファクタとなる。8000 台の GPU に迫る超大規模計算において、メモリ性能に見合った性能が達成されていると考えられ、高い strong scaling が実現できていることは重要な成果である。コードのオープン化を検討してほしい。今後の研究の進展に期待したい。

付録

令和元年度計算科学技術研究実績

This is a blank page.

令和元年度 計算科学技術研究実績

1. 査読付き研究論文、査読付き会議論文等

室	査読付き研究論文	査読付き会議論文	合計
高度計算機技術開発室	2	3	5
シミュレーション技術開発室	17	1	18
システム計算科学センター	1	0	1
合計	20	4	24

(令和2年3月31日現在)

【高度計算機技術開発室】

< 査読付き研究論文 >

- Asahi Yuichi, Grandgirard Virginie, Sarazin Yanick, Donnel Peter, Garbet Xavier, Idomura Yasuhiro, Guilhem Dif-Pradalier, Latu Guillaume, "Synergy of turbulent and neoclassical transport through poloidal convective cells", Plasma Physics and Controlled Fusion, Vol.61, No.6, pp.065015_1-065015_15 (2019).
- Idomura Yasuhiro, "Isotope and Plasma Size Scaling in Ion Temperature Gradient Driven Turbulence", Phys. Plasmas, Vol.26, No.12, pp.120703_1-120703_5 (2019).

< 査読無し研究論文 >

- 井戸村 泰宏, 渡邊 智彦, 藤堂 泰, "核融合プラズマのエクサスケールシミュレーション", シミュレーション, Vol. 38, No. 2, pp.79-86 (2019).

< 査読付き会議論文 >

- Watanabe Tadashi, "Numerical simulation of oscillating-rotating liquid droplet", Proceedings of 3rd IASME/WSEAS International Conference on Continuum Mechanics (CM '08), pp.30-35 (2008).
- Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Kawamura Takuma, Uesawa Shinichiro, Yamashita Susumu, Yoshida Hiroyuki, "Fuel debris' air cooling analysis using a lattice Boltzmann method", Proceedings of 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27) (Internet) (2019).
- Ali Yussuf, Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Imamura Toshiyuki, "GPU Acceleration of Communication Avoiding Chebyshev Basis Conjugate Gradient Solver for Multiphase CFD Simulations", 2019 IEEE/ACM 10th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems (ScalA), Denver,

CO, USA, pp.1-8 (2019).

<査読無し会議論文>

- ・ なし

【シミュレーション技術開発室】

<査読付き研究論文>

- ・ Fedkin Mark V., Shin Yun Kyung, Dasgupta Nabankur, Yeon Jejoon, Zhang Weiwei, van Duin Diana, Van Duin Adri C. T., Mori Kento, Fujiwara Atsushi, Machida Masahiko, Nakamura Hiroki, Okumura Masahiko,
"Development of the ReaxFF methodology for electrolyte-water systems",
Journal of Physical Chemistry A, Vol.123, No.10, pp.2125-2141 (2019).
- ・ Shiga Motoyuki,
"Path integral simulations",
Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering (Internet), pp.22 (2018).
- ・ Nagai Yuki, Shinaoka Hiroshi,
"Smooth self-energy in the exact-diagonalization-based dynamical mean-field theory: Intermediate-representation filtering approach",
Journal of the Physical Society of Japan, Vol.88, No.6, pp.064004_1-064004_5 (2019).
- ・ Nagai Yuki, Kato Yusuke,
"Quasiparticle bound states around fractional vortices in *s*-wave superconductor",
Journal of the Physical Society of Japan, Vol.88, No.5, pp.054707_1-054707_8 (2019).
- ・ Liu Xudong, Machida Masahiko, Kurikami Hiroshi, Kitamura Akihiro,
"Long-term simulations of radiocesium discharge in watershed with improved radiocesium wash-off model; Applying the model to Abukuma River basin of Fukushima",
Journal of Environmental Radioactivity, Vol.203, pp.135-146 (2019).
- ・ Suno Hiroya, Machida Masahiko,
"Quantum chemical calculations for the norbadione A complexes with Cs⁺, K⁺, and Na⁺ in gas and aqueous phases",
Chemical Physics Letters, Vol.730, pp.26-31 (2019).
- ・ Hayakawa Sho, Doihara Kohei, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Aichi Masaatsu, Suzuki Katsuyuki,
"Screw dislocation-spherical void interactions in fcc metals and their dependence on stacking fault energy",
Journal of Materials Science, Vol.54, No.17, pp.11509-11525 (2019).
- ・ Hayakawa Sho, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Kawabata Tomoya, Suzuki Katsuyuki,
"Atomistic simulations for the effects of stacking fault energy on defect formations by displacement cascades in FCC metals under Poisson's deformation",

- Journal of Materials Science, Vol.54, No.16, pp.11096-11110 (2019).
- Itakura Mitsuhiro, Nakamura Hiroki, Kitagaki Toru, Hoshino Takanori, Machida Masahiko,
"First-principles calculation of mechanical properties of simulated debris $Zr_xU_{1-x}O_2$ ",
Journal of Nuclear Science and Technology, Vol.56, No.9-10, pp.915-921 (2019).
 - Kimizuka Hajime, Ogata Shigenobu, Shiga Motoyuki,
"Unraveling anomalous isotope effect on hydrogen diffusivities in fcc metals from first principles including nuclear quantum effects",
Physical Review B, Vol.100, No.2, pp. 024104_1-024104_9 (2019).
 - Chang Yong Lik, Sasaki Takehiko, Ribas-Ariño, Jordi, Machida, Masahiko, Shiga, Motoyuki,
"Understanding competition of polyalcohol dehydration reactions in hot water",
Journal of Physical Chemistry B, Vol.123, No.7, pp.1662-1671 (2019)
 - Kim Minsik, Malins Alex, Yoshimura Kazuya, Sakuma Kazuyuki, Kurikami Hiroshi, Kitamura Akihiro, Machida Masahiko, Hasegawa Yukihiro, Yanagi Hideaki,
"Simulation study of the effects of buildings, trees and paved surfaces on ambient dose equivalent rates outdoors at three suburban sites near Fukushima Dai-ichi",
Journal of Environmental Radioactivity, Vol.210, pp.105803_1-105803_10 (2019).
 - Matsushita Taiki, Nagai Yuki, Fujimoto Satoshi,
"Disorder-induced exceptional and hybrid point rings in Weyl/Dirac semimetals",
Physical Review B, Vol.100, No.24, pp.245205_1-245205_9 (2019).
 - Malins Alex, Machida Masahiko, Vu The Dang, Aizawa Kazuya, Ishida Takekazu,
"Monte Carlo radiation transport modelling of the current-biased kinetic inductance detector", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, Vol.953, pp.163130_1-163130_7 (2020).
 - Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
"First-principles calculation study on phonon thermal conductivity of thorium and plutonium dioxides: Intrinsic anharmonic phonon-phonon and extrinsic grain-boundary-phonon scattering effects", Journal of Nuclear Materials, Vol.519, pp.45-51 (2019).
 - Ohsawa Kazuhito, Toyama Takeshi, Hatano Yuji, Yamaguchi Masatake, Watanabe Hideo,
"Stable structure of hydrogen atoms trapped in tungsten divacancy", Journal of Nuclear Materials, Vol.527, pp.151825_1-151825_7 (2019).
 - Bendo Artenis, Maeda Tomoyoshi, Matsuda Kenji, Lervik Adrian, Holmestad Randi, Marioara Calin D., Nishimura Katsuhiko, Nunomura Norio, Toda Hiroyuki, Yamaguchi Masatake, Ikeda Kenichi, Homma Tomoyuki,
"Characterisation of structural similarities of precipitates in Mg-Zn and Al-Zn-Mg alloys systems", Philosophical Magazine, Vol.99, No.21, pp.2619-2635 (2019).

< 査読無し研究論文 >

- ・ Kim, Minsik, Malins Alex, 佐久間 一幸, 北村 哲浩, 町田 昌彦, 長谷川 幸弘, 柳 秀明,
"環境中空間線量率3次元分布計算システム(3D-ADRES)の研究開発; PHITSとリモートセンシングの融合による環境放射線量の推定", Isotope News, No.765, pp.30-33 (2019).
- ・ 永井 佑紀,
"自己学習モンテカルロ法", 物理学者、機械学習を使う, 朝倉書店, pp.74-86 (2019).
- ・ 山田 進,
"疎行列の固有値計算", 固有値計算と特異値計算; 計算力学レクチャーコース, 丸善出版, pp.77-104 (2019).
- ・ 数納 広哉, 奥村 雅彦, 町田 昌彦,
"粘土鉱物や菌類のセシウム吸着機構: 原子・分子論研究の現状と課題", 地盤工学会誌, Vol.67, No.10, pp.34-35 (2019).

< 査読付き会議論文 >

- ・ Suzudo Tomoaki, Onitsuka Takashi, Fukumoto Kenichi,
"Analyzing the cross slip motion of screw dislocations at finite temperatures in body-centered-cubic metals: Molecular statics and dynamics studies",
Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM 2018), Vol.27, No.6, pp.064001_1-064001_15 (2019).

< 査読無し会議論文 >

- ・ 海老原 健一, 齋藤 圭, 高井 健一,
"水素ひずみ誘起空孔を含む焼戻しマルテンサイト鋼の水素昇温脱離曲線のシミュレーションの試み",
「水素脆化の基本要因と特性評価」研究会報告書, 日本鉄鋼協会材料の組織と特性部会
「水素脆化の基本要因と特性評価」研究会最終報告会, pp.57-61 (2018).

【システム計算科学センター】

< 査読付き研究論文 >

- ・ 町田 昌彦 山田 進, 岩田 亜矢子, 乙坂 重嘉, 小林 卓也, 渡辺 将久, 船坂 英之, 森田 貴己,
"福島第一原発港湾からの放射性セシウム 137 の推定流出量の変遷—2011年4月～2018年6月までの7年間に渡る月間流出量の推定—",
日本原子力学会和文論文誌, Vol.18, No.4, pp.226-236 (2019).

< 査読無し研究論文 >

- ・ 中島 憲宏, 青木 恵子,
"客員人工物工学研究部門",
東京大学人工物工学研究センター2017年度研究年報, pp.51-53, 84 (2018).

< 査読付き会議論文 >

なし

- ・ <査読無し会議論文>
なし

2. 国際会議、国内会議での発表等

【高度計算機技術開発室】

<口頭発表>

- ・ 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 河村 拓馬, 中山 浩成, 下川辺 隆史,
"局所細分化格子ボルツマン法を用いたオクラホマシティにおけるトレーサー拡散解析",
第 24 回計算工学講演会, (さいたま, 日本, 2019 年 5 月 29 日-31 日).
- ・ 長谷川 雄太, 青木 尊之, 小林 宏充, 白崎 啓太
"細分化格子 LBM に基づく LES の複数 GPU によるロードレースの空力計算",
第 24 回計算工学講演会, (さいたま, 日本, 2019 年 5 月 29 日-31 日).
- ・ 河村 拓馬,
"可視化用粒子データを用いた In-Situ 可視化システムの SIMD 最適化",
JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 11 回シンポジウム, (東京, 日本, 2019 年 7 月 11 日-12 日).
- ・ 小野寺 直幸,
"格子ボルツマン法による都市街区を対象とした物質拡散シミュレーション",
JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 11 回シンポジウム, (東京, 日本, 2019 年 7 月 11 日-12 日).
- ・ Idomura Yasuhiro,
"Gyrokinetic simulation of fusion plasma",
9th East-Asia School and Workshop on Laboratory, Space, and Astrophysical Plasmas, (Nagoya, Japan, July 29-August 2, 2019).
- ・ 関 暁之, 真弓 明恵, 村上 治子, 斎藤 公明, 武宮 博, 井戸村 泰宏,
"福島における放射性物質分布調査,16; 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 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-12 日).
- ・ Idomura Yasuhiro, Ali Yussuf, Onodera Naoyuki, Hasegawa Yuta, Ina Takuya,
"Performance portability of large scale distributed Krylov solvers with OpenACC and CUDA",
OpenACC Annual Meeting 2019, (Kobe, Japan, September 2, 2019).
- ・ 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 河村 拓馬, 中山 浩成, 下川辺 隆史, 青木 尊之,
"観測データを適用した局所細分化格子ボルツマン法によるトレーサー拡散解析",
日本機械学会第 32 回計算力学講演会(CMD 2019), (川越, 日本, 2019 年 9 月 16 日-18 日).
- ・ 長谷川 雄太, 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏,
"局所細分化格子ボルツマン法における GPU 間相互接続技術を活用した高速化手法の検討",
日本機械学会第 32 回計算力学講演会(CMD 2019), (川越, 日本, 2019 年 9 月 16 日-18 日).
- ・ 井戸村 泰宏,

- "核融合プラズマのジャイロ運動論シミュレーション",
STE シミュレーション研究会, (広島, 日本, 2019 年 9 月 24 日-26 日).
- Kawamura Takuma,
"In-situ visualization based on particle based volume rendering",
1st CEA-JAEA Collaboration Workshop on Computational Nuclear Engineering,
(Kashiwa, Japan, October 2 2019).
 - Idomura Yasuhiro,
"Computational nuclear engineering at JAEA and Post-K project",
1st CEA-JAEA Collaboration Workshop on Computational Nuclear Engineering,
(Kashiwa, Japan, October 2 2019).
 - Onodera Naoyuki,
"GPU accelerated real-time plume dispersion analysis based on Lattice Boltzmann Method",
1st CEA-JAEA Collaboration Workshop on Computational Nuclear Engineering,
(Kashiwa, Japan, October 2 2019).
 - Obrejan Kevin, Idomura Yasuhiro, Honda Mitsuru,
"Influence of the normalised gyroradius on neoclassical transport in global gyrokinetic simulations using the code GT5D",
18th European Fusion Theory Conference (EFTC 2019), (Ghent, Belgium, October 7-10 2019).
 - Ali Yussuf, Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Imamura Toshiyuki,
"GPU optimization of matrix solvers",
Joint US-Japan Workshop on PostK-ECP Collaboration and JIFT Exascale Computing Collaboration, (Kobe, Japan, October 28 2019).
 - Idomura Yasuhiro,
"Status of GT5D",
Joint US-Japan Workshop on PostK-ECP Collaboration and JIFT Exascale Computing Collaboration, (Kobe, Japan, October 28 2019).
 - Obrejan Kevin, Idomura Yasuhiro, Honda Mitsuru,
"Influence of the normalised ion gyroradius on collisional transport of impurities in full-f gyrokinetic simulations",
第 36 回プラズマ・核融合学会年会, (春日井, 日本, 2019 年 11 月 29 日-12 月 2 日).
 - 井戸村 泰宏,
"イオン温度勾配駆動乱流における水素同位体効果の解析",
第 36 回プラズマ・核融合学会年会, (春日井, 日本, 2019 年 11 月 29 日-12 月 2 日).
 - 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, Yussuf A., 山下 晋, 伊奈 拓也, 今村 俊幸,
"GPU による多相流解析コード JUPITER の Poisson 方程式の高速化", 第 33 回数値流体力学シンポジウム, (札幌, 日本, 2019 年 11 月 27 日-29 日).
 - Idomura Yasuhiro,

- "Communication-avoiding sparse matrix solvers for extreme scale nuclear CFD simulations", Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM 2019), (Taipei, Taiwan, December 18-21, 2019).
- ・ Onodera Naoyuki,
"Real-time wind simulation using locally mesh-refined lattice Boltzmann method", GPU Computing Workshop for Advanced Manufacturing 2019 (GPU 2019), (東京, 日本, 2019 年 12 月 6 日).
 - ・ 長谷川 雄太,
"格子ボルツマン法への適合細分化格子法の導入と複数 GPU 化のための諸実装", 第 32 回 LBM 研究会, (東京, 日本, 2019 年 12 月 20 日).
 - ・ Kawamura Takuma, Idomura Yasuhiro, Onodera Naoyuki,
"Interactive in-situ visualization of GPU-accelerated simulations using particle-based volume rendering", International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2020), (Fukuoka, Japan, January 15-17, 2020).
 - ・ 河村 拓馬,
"粒子ベース In-Situ 可視化技術とその VR 化の展望", 先進的可視化環境を用いた可視化情報の研究会(VR 2019), (土岐, 日本, 2020 年 1 月 23 日・24 日).
 - ・ Idomura Yasuhiro, Ali Yussuf, Ina Takuya, Imamura Toshiyuki,
"Optimization of Fusion Plasma Turbulence Code GT5D on FUGAKU and SUMMIT", The 2nd R-CCS International Symposium, (Kobe, Japan, February 17-18, 2020).

【シミュレーション技術開発室】

<口頭発表>

- ・ 山田 進, 今村 俊幸, 町田 昌彦,
"ハバードモデルのハミルトニアンに対する高性能固有値ソルバ",
大規模並列数値計算技術に関する研究集会(LSPANC 2019 March), (神戸, 日本, 2020 年 3 月 19 日).
- ・ Yamada Susumu, Machida Masahiko,
"Studies for environmental impact of released radioactive materials under their mitigation measures in both inside and outside FDNPP harbor area using a nested CFD simulation code",
European Geosciences Union General Assembly 2019, (Vienna, Austria, April 7-12, 2019).
- ・ 志賀 基之,
"自由エネルギー面上の鞍点探索法の開発",
第 22 回理論化学討論会, (札幌, 日本, 2019 年 5 月 27 日・29 日).
- ・ Thomsen Bo,
"Describing molecular potential energy surfaces using general functions",
第 22 回理論化学討論会, (札幌, 日本, 2019 年 5 月 27 日・29 日).

- Liu Xudong, Machida Masahiko, Saito Kimiaki, Tanimura Naoki,
"A Study of KURAMA measurement data by sparse modeling",
International Topical Workshop on Fukushima Decommissioning Research (FDR 2019), (Naraha, Japan, May 24-26, 2019).
- Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Understanding the broadening of the H_9O_4^+ Infra-Red spectrum through clustering of path integral molecular dynamics trajectories",
15th International Workshop on Quantum Reactive Scattering (QRS 2019), (Saitama, Japan, July 1-5, 2019).
- Ebihara Kenichi, Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake,
"Rate theory model of phosphorus grain boundary segregation considering atomistic processes",
5th International Workshop on Structural Materials for Innovative Nuclear Systems (SMINS-5), (Kyoto, Japan, July 8-11, 2019).
- Itakura Mitsuhiro,
"First-principles calculation of mechanical properties of simulated debris $\text{Zr}_x\text{U}_{1-x}\text{O}_2$ ",
Fukushima Research Conference on Materials Science for Severe Accident and Fukushima Daiichi Decommissioning Workshop 2019, (Naraha, Japan, July 10-12, 2019).
- Yamada Susumu, Machida Masahiko, Imamura Toshiyuki,
"Tuning strategy of solving the Hubbard model by LOBPCG method on CUDA GPU",
15th U.S. National Congress on Computational Mechanics (USNCCM-15), (Austin, U. S. A., July 28-August 1, 2019).
- Takahashi Yoshio, Tsuboi Hiroyuki, Yamaguchi Akiko,
"Molecular geochemistry of interactions of various hard cations and phyllosilicates related to their environmental behaviors and isotope fractionation",
29th Goldschmidt Conference (Goldschmidt 2019), (Barcelona, Spain, August 18-23, 2019).
- Malins Alex, Imamura Naohiro, Niizato Tadafumi, Kim Minsik, Sakuma Kazuyuki, Shinomiya Yoshiki, Miura Satoru, Machida Masahiko,
"Using PHITS to calculate ambient dose equivalent rates in radiocesium contaminated forests",
高エネルギー加速器研究機構における PHITS 研究会, (つくば, 日本, 2019 年 8 月 5 日-6 日).
- Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Calculating $\text{pK}_a(\text{H}_2\text{O})$ and $\text{pK}_a(\text{D}_2\text{O})$ using path integral molecular dynamics",
ハイドロジェノミクス第 4 回若手育成スクール, (岡崎, 日本, 2019 年 8 月 23 日-24 日).
- Nagai Yuki, Qi Yang, Isobe Hiroki, Kozii, Vladyslav, Fu, Liang,
"Bulk topological Fermi arcs in heavy fermion systems; Non-Hermitian topology

- meets DMFT",
International Workshop on Quantum Criticality and Topology in Correlated Electron Systems, (Dresden, Germany, August 5-9, 2019).
- ・ Nagai Yuki, Okumura Masahiko, Tanaka Akinori,
"Self-learning Monte Carlo method; Speedup of the Markov chain Monte Carlo with machine learning",
Quantum Engineering meets Harmonic Analysis, (Saskatoon, Canada, August 12-16, 2019).
 - ・ 佐々 成正,
"シンプレクティック数値積分法とリュービルの定理",
日本応用数学会 2019 年度年会, (東京, 日本, 2019 年 9 月 3 日-5 日).
 - ・ 永井 佑紀, 奥村 雅彦, 小林 恵太, 志賀 基之,
"自己学習ハイブリッドモンテカルロ法; 第一原理分子シミュレーションの高速化",
日本物理学会 2019 年秋季大会(物性), (岐阜, 日本, 2019 年 9 月 10 日-13 日).
 - ・ Malins Alex, 今村 直広, 新里 忠史, Kim Minsik, 佐久間 一幸, 篠宮 佳樹, 三浦 寛, 町田 昌彦,
"福島における放射性物質分布調査,9; 福島第一原発事故後 6 年間にわたる森林内での周辺線量当量率の経時変化解析",
日本原子力学会 2019 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).
 - ・ 中村 博樹, 町田 昌彦, 加藤 正人,
"CaF₂ の基礎特性の評価,2; DFT に基づく高温物性解析",
日本原子力学会 2019 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).
 - ・ Liu Xudong, Machida Masahiko, Saito Kimiaki, Tanimura Naoki,
"Investigation on distribution of radioactive substances in Fukushima, 4; Study on the ecological half-lives of ambient dose rates using car-borne survey data with fused LASSO",
日本原子力学会 2019 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).
 - ・ 奥村 雅彦, 小林 恵太, 中村 博樹, 板倉 充洋, 町田 昌彦,
"機械学習分子動力学法によるコンクリート中セシウム拡散シミュレーション",
日本原子力学会 2019 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).
 - ・ 小林 恵太, 奥村 雅彦, 中村 博樹, 板倉 充洋, 町田 昌彦,
"機械学習分子動力学による二酸化トリウムの物性値評価",
日本原子力学会 2019 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).
 - ・ 海老原 健一, 鈴木 知明,
"粒界領域中におけるリン移動の分子動力学シミュレーション",
日本金属学会 2019 年秋季(第 165 回)講演大会, (岡山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).
 - ・ 板倉 充洋, 山口 正剛,
"Y₈Zn₆ クラスタ中の格子間原子の安定性解析",
日本金属学会 2019 年秋季(第 165 回)講演大会, (岡山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).

- Yamaguchi Akiko, Kuribara Yuichi, Okumura Masahiko, Takahashi Yoshio,
 "Fixation of radium by adsorption on clay minerals based on analyses of core samples around Ningyo-toge uranium mine",
 17th International Conference on the Chemistry and Migration Behavior of Actinides and Fission Products in the Geosphere (Migration 2019), (Uji, Japan, September 15-20, 2019).
- Suno Hiroya, Machida Masahiko, Dohi Terumi, Omura Yoshihito, Sasaki Yoshito,
 "Computational molecular study of predominant organic molecules in forest ecosystems concerning cesium accumulation and transport",
 17th International Conference on the Chemistry and Migration Behavior of Actinides and Fission Products in the Geosphere (Migration 2019), (Uji, Japan, September 15-20, 2019).
- Okumura Masahiko, Kerisit Sebastien, Bourg Ian, Lammers Laura, Ikeda Takashi, Sassi Michel, Rosso Kevin, Machida Masahiko,
 "Addressing radiocesium contamination in Fukushima waste soil through the lens of systematic numerical simulations",
 17th International Conference on the Chemistry and Migration Behavior of Actinides and Fission Products in the Geosphere (Migration 2019), (Uji, Japan, September 15-20, 2019).
- Nagai Yuki,
 "Non hermitian physics in strongly electron systems",
 3rd EPiQS-TMS alliance workshop on Topological Phenomena in Quantum Materials (TPQM 2019), (Santa Barbara, U. S. A., October 21-25, 2019).
- Nagai Yuki, Okumura Masahiko, Kobayashi Keita, Shiga Motoyuki,
 "Self-learning Hybrid Monte Carlo for first-principles molecular simulations",
 Deep Learning and Physics 2019 (DLAP 2019), (Kyoto, Japan, October 31-November 2, 2019).
- 永井 佑紀,
 "超高速 BdG シミュレーション", 第 27 回渦糸物理ワークショップ, (京都, 日本, 2019 年 12 月 17 日-19 日).
- Kim Minsik, Malins Alex, 町田 昌彦, 吉村 和也, 吉田 浩子, 斎藤 公明,
 "福島県飯舘村における家屋周りの空間線量率分布の特徴について", 第 2 回日本放射線安全管理学会・日本保健物理学会合同大会, (仙台, 日本, 2019 年 12 月 4 日-7 日).
- Koshiro Hidehiko, Nagai Yuki,
 "Self-learning Monte Carlo simulation in the semiclassical site-diluted double-exchange model", Workshop on Tensor Network States: Algorithms and Applications 2019-2020 (TNSAA 2019-2020), (Taipei, Taiwan, December 4-6, 2019).
- Nagai Yuki, Qi Yang, Isobe Hiroki, Kozii Vladyslav, Fu Liang,
 "Non-Hermitian effective Hamiltonian for low-energy quasiparticles", International

- Conference on Topological Materials Science 2019 (TopoMat2019), (Kyoto, Japan, December 3-7, 2019).
- ・ 永井 佑紀, 奥村 雅彦, 小林 恵太, 志賀 基之,
"自己学習ハイブリッドモンテカルロ法; 機械学習による第一原理分子シミュレーションの高速化", 第33回分子シミュレーション討論会, (名古屋, 日本, 2019年12月9日-11日).
 - ・ Suzudo Tomoaki, Tsuru Tomohito,
"First principles modeling on radiation defects in W and W-based alloys", 4th International Workshop on Models and Data for Plasma-Material Interaction in Fusion Devices (MoD-PMI 2019), (Toki, Japan, June 18-20, 2019).
 - ・ Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Calculating the pK_w of subcritical and critical H₂O and D₂O", 1st International Symposium "Hydrogenomics" combined with 14th International Symposium Hydrogen & Energy, (Sapporo, Japan, January 14, 2020).
 - ・ 海老原 健一, 鈴土 知明,
"分子動力学シミュレーションによる BCC 鉄 $\Sigma 3(111)$ 粒界および $\Sigma 5(0-13)$ 粒界中のリンの移動に関する考察", 令和元年度材料照射研究会「Irradiation 3.0 に向けて」, (仙台, 日本, 2020年1月9日-10日).
 - ・ 鈴土 知明, 鬼塚 貴志, 福元 謙一,
"BCC 鉄におけるらせん転位の挙動; 分子動力学シミュレーションによる研究", 令和元年度材料照射研究会「Irradiation 3.0 に向けて」, (仙台, 日本, 2020年1月9日-10日).
 - ・ Nagai Yuki,
"Self-learning Monte Carlo; Machine learning speeds up the Markov chain Monte Carlo", TPI Seminars in University of Alberta, (Edmonton, Canada, February 27, 2020).
 - ・ Suzudo Tomoaki, Toyama Takeshi, Nagai Yasuyoshi,
"Origin of hardening in spinodally-decomposed Fe-Cr binary alloys", 149th Annual Meeting & Exhibition (TMS 2020), (San Diego, U. S. A., February 23-27, 2020).
 - ・ Zhao Can, Suzudo Tomoaki, Toyama Takeshi, Nagai Yasuyoshi,
"A Study of Cu diffusion in Fe-Cu alloy by kinetic Monte Carlo simulation", 日本金属学会 2019 年秋期(第 165 回)講演大会, (岡山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).
 - ・ Yoshida Kenta, Du Yufeng, Shimada Yusuke, Suzudo Tomoaki, Toyama Takeshi, Inoue Koji, Arakawa Kazuto, Milan Konstantinovic J., Gerard Robert., Nagai Yasuyoshi,
"In-situ weak-beam scanning transmission electron microscopy for quantitative dislocation analysis in nuclear materials during post-irradiation annealing", 12th Asia-Pacific Microscopy Conference (APMC 2020), (Hyderabad, India, February 3-7, 2020).

【システム計算科学センター】

<口頭発表>

- ・ 町田 昌彦, 山田 進,
"水と共に動くセシウムのシミュレーション; 大柿ダム湖でセシウムはどこに?",
環境創造センター成果報告会, (三春, 日本, 2019 年 5 月 20 日).
- ・ 町田 昌彦, 岩田 亜矢子, 山田 進,
"1F 港湾及び沿岸での海水及び放射性物質の動態シミュレーション技術の進展; モニタリングデータの取り込み",
日本原子力学会 2019 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).
- ・ 武宮 博, 根本 美穂, 林 寛子, 関 暁之, 斎藤 公明,
"福島における放射性物質分布調査,6; 異なる手法による観測データを統合した 80 km 圏内空間線量率マップの作成",
日本原子力学会 2019 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).

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 30 年度計算科学技術研究実績評価報告",
JAEA-Evaluation 2019-007.
- ・ システム計算科学センター高性能計算技術利用推進室,
"平成 30 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 2019-017.

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- ・ 実時間汚染物質拡散解析の開発が NVIDIA 社ブログ記事 (日刊工業新聞他、オンラインメディア 31 社掲載)、産総研 ABCI 事例集、HPCWireJapan 誌に掲載

5. 研究発表会等の開催

- (1) システム計算科学センター・原子力基礎工学研究センター合同セミナー
「NEA データバンクの計算コード配布サービスについて」
2019 年 11 月 26 日、原子力科学研究所情報交流棟北ウイング第 2 会議室
- (2) 第 31 回 CCSE ワークショップ
「計算科学を活用した大気・海洋・水系における汚染物質拡散評価」
2020 年 2 月 21 日、東海村産業・情報プラザ 1F 多目的ホール

6. 受賞等

- (1) 第 24 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)
小野寺直幸
(第 24 回計算工学講演会、2019 年 5 月)
- (2) 国際会議 Migration 2019 ポスター賞
山口瑛子
(国際会議 Migration 2019、2019 年 9 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	1,647,325 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	81,675 (8)
シミュレーション技術開発室	30,904 (18)
合計	112,579 (26)

【高度計算機技術開発室】

- (1) 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状況等に関する調査（原子力規制庁） 15,639 千円
- (2) 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） 10,050 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） 44,087 千円
- (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） 8,649 千円
- (5) 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)） 1,430 千円
- (6) GPU スーパーコンピュータによる原子炉内容融物の移行挙動解析（日本学術振興会：科研費(基盤 C)） 1,300 千円
- (7) 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)） 390 千円
- (8) 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】

- (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） 741 千円
- (11) 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） 608 千円
- (12) 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

- (13) 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)） 1,170 千円
- (14) 機械学習分子シミュレーションと実験による粘土鉱物界面水物性の解明（日本学術振興会: 科研費(基盤 C)） 520 千円
- (15) 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)） 1,430 千円
- (16) トポロジカルフェルミアーキ：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
- (17) 層状ケイ酸塩鉱物における原子レベルキンク構造の解明（日本学術振興会: 科研費(新学術領域研究)） 1,560 千円
- (18) 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)） 100 千円
- (19) 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)） 100 千円
- (20) 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)） 300 千円
- (21) 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
- (22) 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)） 10,842 千円
- (23) 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
- (24) 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)） 3,900 千円
- (25) 計算科学手法を用いた空孔型欠陥の定量的評価に基づく水素脆化モデルの検証（日本学術振興会: 科研費(基盤 C)） 2,210 千円
- (26) タングステンにおいて照射欠陥生成を抑制する合金元素の探索（日本学術振興会: 科研費(基盤 C)） 2,080 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	3	0
シミュレーション技術開発室	3	0	3	0
両室共通	0	0	0	1
合計	8	0	6	1

●共同研究

【高度計算機技術開発室】

- (1) 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）
- (2) 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）
- (3) 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）
- (4) 大規模シミュレーションのための反復行列解法の高度化に関する研究（東京大学）
- (5) 原子力分野における機構論的シミュレーションのための大規模並列計算手法の研究開発（理化学研究所）

【シミュレーション技術開発室】

- (6) 大規模複雑人工物構造材料の劣化予測技術構築に関する研究（東京大学）
- (7) 水を反応場とするグリーンケミストリーの計算化学（東京大学）
- (8) 放射性元素の環境中動態に関する研究（東京大学）

●受託研究

【高度計算機技術開発室】

- (1) 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）
- (2) 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）
- (3) 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】

- (4) 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）
- (5) 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）
- (6) 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 28 件に及ぶ機構内連携を実施している（令和 2 年 1 月 31 日現在）。

- (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) 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。
- (7) 酸化物アクチノ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。
- (8) 燃料熔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：燃料熔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。
- (9) 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。
- (10) 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統合
 部署：安全研究・防災支援部門（安全研究センター）
 概要：異なる手法により得られた空間線量率のデータを統計的手法により統合し、稠密かつ高精度な分布を示す。
- (11) 過酷事故解析コードのエクサスケール計算技術開発
 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：多相熱流動解析コード JUPITER におけるアクセラレータ利用技術、大規模行列

ソルバ、マルチスケール流体モデルの開発

(12) 汚染物質拡散解析コードのエクサスケール計算技術開発

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：アクセラレータ向け流体計算モデルによる実時間汚染物質拡散解析、アンサンブル計算手法の開発

(13) 熱流動解析コード SPIRAL の高速化支援

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：熱流動解析コード SPIRAL における行列解法の改良

(14) 環境動態解析コードの高速化支援

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：メソスケール気象モデル WRF の並列処理性能評価、大気拡散モデル GEARN/SPEEDI-II の並列最適化、局所気流解析コード LOHDIM-LES における植生モデル導入

(15) 熱流動解析コード TPFIT の高速化支援

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：多相流体コード TPFIT における粒子追跡機構の並列最適化

(16) 熱流動解析コード OpenFORM の高速化支援

部署：安全研究・防災支援部門（安全研究センター）

概要：汎用 CFD コード OpenFOAM の並列性能評価

(17) モニタリングデータから空間線量率変化の将来予測

部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）

概要：機械学習（スパースモデリング・LASSO）技術を適用

(18) 異種モニタリングデータから統合マップを作成

部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）

概要：機械学習（ベイズ統計等）技術を適用

(19) 1F 港湾・沿岸モニタリングデータからのインベントリ推定

部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）

概要：地理空間情報解析（ボロノイ解析やクリギング手法等）技術を適用

(20) ガラス状物質の構造解析

部署：原子力科学研究部門（J-PARC センター）

概要：中性子非弾性散乱データ解釈に機械学習分子動力学法を適用

(21) 核燃料の高温物性解析

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：酸化物高温物性解析に機械学習分子動力学法を適用

(22) 航空機モニタリングから地上線量率の推定

部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）

概要：機械学習（深層学習）コード分析とその高速化

(23) 中性子非弾性散乱データの分析技術

部署：原子力科学研究部門（J-PARC センター）、原子力科学研究部門（先端基礎研究セ

ンター)

概要：適用技術調査

(24) 構造材表面観察画像の推定

部署：安全研究・防災支援部門（安全研究センター）

概要：機械学習（深層学習）コード分析と高速化

(25) 環境動態シミュレーションの高度化

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：AI 適用に向け機構スパコンのノード貸し出し（リソース提供）

(26) Cs 土壌・コンクリ浸透解析

部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）

概要：Cs 土壌・コンクリ浸透解析に機械学習分子動力学法の適用を検討

(27) 核燃料の CT 画像解析技術

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：課題調査と技術コンサル（助言他）

(28) 燃料デブリの機械的特性の計算

部署：廃炉国際共同研究センター

概要：燃料デブリの機械的特性の計算、実験結果との比較および解析

11. 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	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	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
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	ジュール毎平方メートル	V/m	m kg s ⁻³ A ⁻¹
表面電荷密度	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=0.1 MPa=100 kPa=10 ⁵ Pa
水銀柱ミリメートル	mmHg	1 mmHg=133.322 Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1 nm=100 pm=10 ⁻¹⁰ m
海里	M	1 M=1852 m
バイン	b	1 b=100 fm 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 =0.1 Pa s
ストークス	St	1 St=1 cm ² s ⁻¹ =10 ⁻⁴ m ² s ⁻¹
スチルブ	sb	1 sb=1 cd cm ⁻² =10 ⁴ cd m ⁻²
フオット	ph	1 ph=1 cd sr cm ⁻² =10 ⁴ lx
ガリ	Gal	1 Gal=1 cm 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=1 Mx cm ⁻² =10 ⁻⁴ T
エルステッド ^(a)	Oe	1 Oe Δ (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「Δ」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=1 cGy=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=4.1858 J (「15℃」カロリ), 4.1868 J (「IT」カロリ), 4.184 J (「熱化学」カロリ)
マイクロン	μ	1 μ =1 μm=10 ⁻⁶ m

