JAEA-Evaluation 2021-001

DOI:10.11484/jaea-evaluation-2021-001

令和 2 年度計算科学技術研究実績評価報告

Review of Research on Advanced Computational Science in FY2020

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

November 2021

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは国立研究開発法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。 本レポートはクリエイティブ・コモンズ 表示 4.0 国際 ライセンスの下に提供されています。 本レポートの成果(データを含む)に著作権が発生しない場合でも、同ライセンスと同様の 条件で利用してください。(https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ja) なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ウェブサイト(https://www.jaea.go.jp) より発信されています。本レポートに関しては下記までお問合せください。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 JAEA イノベーションハブ 研究成果利活用課 〒 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.

This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.en).

Even if the results of this report (including data) are not copyrighted, they must be used under the same terms and conditions as CC-BY.

For inquiries regarding this report, please contact Institutional Repository and Utilization Section, JAEA Innovation Hub, 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, 2021

令和2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

(2021年8月25日受理)

システム計算科学センターでは、「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。なお、計算科学技術研究については、新たに設置された計算科学技術研究・評価委員会(以下「委員会」という。)により課題の詳細な内容等が評価された。

本報告は、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、令和2年度における業務の実績、第3期中長期目標期間終了時に見込まれる業務実績、及び、それらに対する委員会による評価をとりまとめたものである。

原子力科学研究所: 〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方2番地4

Review of Research on Advanced Computational Science in FY2020

Center for Computational Science & e-Systems
Japan Atomic Energy Agency
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received August 25, 2021)

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 by Center for Computational Science & e-Systems (CCSE), Japan Atomic Energy Agency.

CCSE established a committee consisting of external 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 by CCSE in FY2020 (April 1st, 2020 - March 31st, 2021), the results expected at the end of the 3rd mid and long-term goal period, 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. V	まじめに	1
0 =	到 然 科 公 社 你 不 你 一 我 你 	C
2. =	計算科学技術研究・評価委員会	2
3.	計算科学研究における研究計画	3
3.1	L 中長期計画	3
3.2	2 年度計画	3
4. 荷	研究実績と評価意見	4
4.1	l 令和 2 年度評価	4
4.2	2 見込評価	25
付録	令和 2 年度計算科学技術研究実績	· 43
	Contents	
1. I	Introduction	1
2. F	Evaluation Committee	2
	R&D Plans for the Advanced Computational Science Research of CCSE/JAEA	
	l Mid- and Long-term Plan	
3.2	2 Plan for Fiscal Year (FY2020)	3
4. H	Results of the R&D and the Evaluation Comments	4
	1 FY2020	
4.2	2 Expected Evaluation	25
Арре	endix List of Achievements in FY2020	· 43

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。

計算科学技術研究については、新たに設置された計算科学技術研究・評価委員会(以下「委員会」という。)により課題の詳細な内容等を評価することとしている。また、この委員会の評価結果は、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2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 実績と委員会の評価結果をとりまとめたものであり、第2章に委員会の構成、第3章に研究の 計画、第4章に研究成果と委員会の評価意見、さらに付録に研究開発実績が記載されている。 なお、令和2年度は、当該事業年度における業務の実績に関する評価(令和2年度評価)に加 え、第3期中長期目標の期間の最後の事業年度の直前の事業年度ということから、第3期中長 期目標期間終了時に見込まれる業務実績に関する評価(見込評価)も実施された。

2. 計算科学技術研究・評価委員会

委員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·評価委員会構成(敬称略)

委員長	越塚 誠一	東京大学大学院 工学系研究科 教授
	小野 謙二	九州大学 情報基盤研究開発センター センター長
	寿楽 浩太	東京電機大学 工学部 人間科学系列 教授
	鈴木 晶子	京都大学 大学院教育学研究科 教授
委員	陳 迎	東北大学 大学院工学研究科 先端材料強度科学研究センター 教授
安貝	常行 真司	東京大学大学院 理学系研究科 教授
	津旨 大輔	電力中央研究所 大気・海洋環境領域 上席研究員
	朴 泰祐	筑波大学 計算科学研究センター センター長
	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·評価委員会開催状況

口	開催日時	開催場所	主たる議題	特記事項
1	令和 3 年 3 月 5 日 9:00~12:00	オンライン	・令和2年度評価及び見込 評価の観点・方法等について・中長期計画及び研究開発の概要について・令和2年度実績及び中長期計画達成の見込について	なし

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2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、制御棒内部構造の溶融移行解析に必要なパラメータを取得するためのミクロ・メゾスケールモデル解析を実施する。また、エクサスケール流体解析に向け、複雑流体解析コードにおける計算モデルの機能拡張を進めるとともに、省通信型行列解法等の計算技術の有効性を評価する。

4. 研究実績と評価意見

4.1 令和 2 年度評価

中長期計画及び令和 2 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 3 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。

委員会において、表 4.1 の内容を説明し、質疑応答等を経て議論した上で、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 2 年度研究開発実績及び成果の意義等(令和 3 年 2 月 18 日時点)(1/2)

	中長期計画	R2 年度計画	実績·成果	T先開発夫績及び成条の息義寺(〒和3年2月 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		シビアアクシデン			○鉄・B ₄ C 混合物のデータベースを整備	
	ビアアクシ	ト時の炉内複雑現	ラメータである、炭化ホウ素(B ₄ C)と鉄	パラメータが未整備であったことに起因	 している廃炉環境国際共同研究セン	(IF2.0 以上 3 件)
	デント時の	象解析に向け、制	被覆管溶融体の界面特性パラメータ(溶融	し、実験結果と相違する結果が報告されて	 ターと連携を開始、ミクロ・メゾ解析	○招待講演:1 件
	炉内複雑現	御棒内部構造の溶	鉄への B4C 溶出速度、溶融鉄/B4C 界面の	いたが、複雑な構造を持つ B4C の界面構	で得られた知見をデータベースに反	○外部資金:6件(16,660千円)
	象等のモデ	融移行解析に必要	ぬれ性)をミクロ・メゾスケールの解析に	造および液体状態の鉄との相互作用をミ	映していく予定。整備したデータを用	○国際会議発表:2件
	ル開発のた	なパラメータを取	より取得。	クロな計算により評価する手法を確立、実	い原子力基礎工学研究センターが開	○受賞:1件
	めの (中略)	得するためのミク		験での取得が困難な物質パラメータを取	発している JUPITER コードに界面	
	データベー	ロ・メゾスケール		得することができた。	現象の効果を取り入れる拡張を行い、	
	ス及びコン	モデル解析を実施			制御棒内部構造の溶融移行解析を実	
	ピュータシ	する。			施予定。	
2	ミュレーシ	エクサスケール流	○多相多成分熱流動解析コードJUPITERの	○JUPITER コードにおける GPU 向けの	○原子力基礎工学研究センターとの連	○査読付き論文数:19 件
	ョン技術の	体解析に向け、複	適合格子細分化(AMR)機能およびその	AMR 機能の拡張により流体部分のみに計	携の下、原子力機構の主力 CFD コー	(IF2.0 以上 3 件)
	開発を進め	雑流体解析コード	GPU 向け高性能計算手法を開発し、燃料	算格子を割り当てることが可能になった	ド JUPITER における GPU 向け	○招待講演:2件
	る。この研究	における計算モデ	集合体における気液二相流の解析におい	ことで、流体以外の部分が多くの体積を占	AMR機能を開発した。今後、GPU型	○外部資金:9件(62,382千円)
	を進めるこ	ルの機能拡張を進	て従来の一様格子に基づく解析に比べて	める燃料集合体や複雑な配管系における	の新機構スパコンにおいて燃料集合	○国際会議発表:15件
	とにより東	めるとともに、省	30%以上の省メモリ化を達成。	熱流動解析をGPUスパコン上で効率的に	体における気液二相流の実証解析を	○受賞:1件
	京電力福島	通信型行列解法等		行う見通しが得られた。	実施予定。	○プレス発表:2件
	第一原子力	の計算技術の有効	○汚染物質拡散解析コード CityLBM のアン	○CFD コードのアンサンブル計算機能を開	○原子力基礎工学研究センターとの連	
		性を評価する。	サンブル計算機能を開発し、汚染物質拡散	発したことで乱流を含む原子力流体解析	携の下、米国オクラホマシティで実施	
	の中長期的		解析の統計精度を向上。米国オクラホマシ	の系統的な不確実性評価が可能になった。	された汚染物質拡散実験(定常放出条	
	課題への対		ティで実施された汚染物質拡散実験(定常	また、将来のアンサンブルデータ同化機能		
	応、分離変換		放出条件) の実証解析において環境評価基	の開発やCFDデータの機械学習用の学習	り評価が困難なパフ放出条件の実証	
	技術等の放		準(ファクター2以下の誤差)の評価精度	データベース作成に向けた計算基盤を構	解析を実施予定。	
	射性廃棄物		を達成。	築できた。		
	処理処分、軽					
	水炉を含む		○富岳向け省通信型行列解法を開発し、従来			
	原子炉技術		の機構スパコンICEXにおける従来の行列			
	高度化、環境		解法に対してプロセッサあたり約60倍の			
	影響評価及		性能向上を達成。上記解法を GPU スパコ			
	び放射線防		ンにも移植し、富岳(世界1位、理研)と	クサスケール計算機を駆使した大規模流		
	護の各分野		Summit (世界 2 位、ORNL) において		, ,,,,,	
	に貢献する。		5,780CPU/GPU を用いた大規模流体解析	ードウェアアーキテクチャに対する省通		
			を実現。	信アルゴリズムの性能移植性を示すこと	一ザ向けに公開予定。	
				ができた。		

表 4.1 令和 2 年度研究開発実績及び成果の意義等(令和 3 年 2 月 18 日時点)(2/2)

その他(福島関連 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 \mathcal{O}

【放射性物質の環境動態に係る連携】

など「計算科学技」○福島部門、筑波大学、森林総研と連携 し、福島県の森林における三次元の空間 線量率分布を、実地形データを用いた詳 細シミュレーションによって再現、現状 では地表から 5cm 以内の土壌に存在する 放射性セシウムからの寄与が主要となる ことを明らかにした。

【原子炉材料の脆化に係る連携】

- ○鉄、ニッケル、アルミについて液体金属脆┃○鉄、ニッケル、アルミについて液体金属脆┃○ADS の設計には照射環境での液体金┃○査読付き論文数:8 件 化の共通傾向を見出すことで、具体的なメ する仮説モデルを構築できた。
- ○実験と計算によりアルミ合金水素脆化の|○実験と計算によりアルミ合金水素脆化の|○高強度アルミ合金は航空等の様々な メカニズムを解明、従来は試行錯誤により 行われていた合金設計を、計算による予測 により大幅に合理化し目的とする合金の 設計に成功した。

【AI 技術等の横断的展開】

- 算の結果を学習し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 力学をセメントへのセシウム吸着シミュ レーションに応用。更に学習プロセスを自 動化する手法を新たに開発。
- ○MITと連携し、重元素化合物の物性評価 で重要となる電子相関効果の新たな計算 手法を開発し、特異な量子現象発現の理 論的予言に成功。

【放射性物質の環境動態に係る連携】

構造物による遮蔽や散乱により不規則な 分布を示すが、詳細な三次元シミュレー ションでこの分布を再現する手法を確立 できた。本成果については論文出版とと もにプレス発表を行った。

【原子炉材料の脆化に係る連携】

- 化の共通傾向を見出すことで、具体的なメ カニズムが分かっていない脆化機構に関 カニズムが分かっていない脆化機構に関 する仮説モデルを構築できた。
 - メカニズムを解明、従来は試行錯誤により 行われていた合金設計を、計算による予測 により大幅に合理化し目的とする合金の 設計に成功した。

【AI 技術等の横断的展開】

- ○理研 AIP センター等と連携し、第一原理計 |○四元素化合物であるセメントの振る舞い |○機械学習分子動力学を用いた大規模 |○査読付き論文数:4 件 | を再現することは従来手法では困難であ ったが、機械学習により大規模かつ高精度 な計算が可能となった。また数万通りの第 一原理計算の結果を学習するプロセスを 自動化することで機械学習分子動力学ポ テンシャルの新規開発を大幅に効率化す ることが可能となった。
 - ○電子相関効果の評価は物性物理学の中心│○重元素など、電子相関効果が重要とな 的テーマであり、新規開発した手法は る物質の物性評価に応用が期待され Physical Review Letters 誌に掲載されプ レス発表を行った。

【放射性物質の環境動態に係る連携】

○空間線量率は不均一な線源分布、様々な | ○十壌中のセシウムがどのように移行 | ○ 査読付き論文数:3件 していくかを評価することで森林の 空間線量率の今後の推移を予測し、 住民の関心が高い問題に対して一つ ○外部資金:6件(2,930千円) の科学的知見を提供。

【原子炉材料の脆化に係る連携】

- 属脆化予測が必要だが直接的な実験 は行えない。今後、脆化機構を原子ス ○招待講演:1件 ケールでモデル化し非照射環境での ○外部資金:3件(3,560千円) 実験を再現した上で、照射の影響を取 ○国際会議発表:5件 り入れることを目標に研究を進める。○受賞:1件
- 産業において重要な材料であるが水 素脆化が問題だった。開発した水素脆 化防止剤については、企業との間で特 許使用許諾契約を進めている。

【AI 技術等の横断的展開】

- 計算による高精度の物性評価を基礎 工部門・東大人工物センター (原子力 ○国際会議発表:1件 材料)、新型炉部門(核燃料)、J-PARC ○プレス発表:1件 (アモルファス SiO₂) 等と連携し実 施予定。

【放射性物質の環境動態に係る連携】

- (IF2.0 以上1件)
- ○招待講演:1件
- ○国際会議発表:7件
- ○プレス発表:1件

【原子炉材料の脆化に係る連携】

- (IF2.0 以上 3 件)

【AI 技術の横断的展開】

- (IF2.0 以上 4 件)

【注】評価軸

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

表 4.2 令和 2年度評価意見 (1/8)

評価項目			評価に関する意見・コ	メント		
(年度計画)	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	人文・社会科学からの視点	その他当該研究に
						関するご意見等
シビアアクシ	○制御棒溶融解析に必要な物性	○過酷事故時のホウ素と鉄の共	○シビアアクシデント (SA) 解析	○第一原理計算と機械学習を	○福島第一の廃止措置作業の進	○適宜、開発技術
デント時の炉	パラメータの取得に向け、必	晶による溶融の解析について	に必要なパラメータ取得は、中	組み合わせ、大規模化するこ	展は地域社会や国全体が特に	のプレスリリー
内複雜現象解	要な課題を設定し、取り組み、	は、原子力安全において重要	長期計画に必要な技術であり、	とにより、材料特性を推定す	関心を寄せるところであり、	スを行ってお
析に向け、制	着実に成果が出ている。	な課題である。	またその応用範囲は広い。各方	る新たな手法を開発し、その	大局的見地からみれば、デブ	り、活動のビジ
御棒内部構造	○研究は計画通りに進捗してお	○非常に複雑な溶融現象の物性	面への展開が期待される。	有効性を示した点は顕著な	リ取り出しに向けて本件研究	ビリティを向上
の溶融移行解	り、期待された成果が得られ	取得について、第一原理計算	○顕著な成果を上げている。	成果である。	の重要性は論を俟たない。他	している点はよ
析に必要なパ	ている。	から積み上げたミクロ・メゾ	○SA 時溶融現象解析の高度化に	○十分に顕著な成果がみられ	方で、複雑現象を詳細・正確に	い。開発した In-
ラメータを取	○中長期ロードマップに加え、	解析を確立し、マクロ解析に	ついては機構内でのニーズに十	る。	模擬することが具体的にデブ	Situ PBVR を公
得するための	特に放射性物質の環境動態に	必要な界面特性パラメータを	分適合しており、また、廃炉環	○論文数は多いとは言えない	リ取り出し作業の進展や安全	開し、計算科学
ミクロ・メゾ	係る連携研究にも取り組み、	得る手法を、機械学習技術を	境国際共同研究センターとの連	が、そのほとんどが IF2.0 以	確保にどのように役に立つの	コミュニティに
スケールモデ	着実に成果を上げられている	用いて確立した点は顕著な成	携も行い、貢献も大きい。プレ	上であり、成果の内容は優れ	かについては、専門外の人び	貢献している点
ル解析を実施	と考えます。進捗度は申し分	果であると言える。	スリリースも行っており、機構	ているといえる。	とにとってそう自明ではない	も評価すべきポ
する。	ないと考えますが、別途、連携	○高速計算技術および可視化技	外への貢献も行っている。	○金属デブリの溶融凝固過程	点に注意が必要だ。学術的貢	イントである。
	研究にリソースを割り当てた	術に関する研究成果は学術的	○機構内の他のセンターと技術連	解析に必要な物性パラメー	献としての重要性に加えて、	今後「富岳」での
	ことによるロードマップの進	に先端的であり、科学的意義	携し、機構の中長期計画実現に	タを機構論的に取得する手	社会ニーズに応える研究でも	展開をお願いし
	捗への影響について、中長期	は大きい。	向けて貢献している。また自治	法を確立したことで、中長期	あることについては、引き続	たい。
	計画と当初計画外研究の関連	○専門外ですが、十分に科学的	体、官庁、東電などの要請に応	計画の最終年度での目標達	き積極的かつ丁寧に説明責任	
	の説明があったほうがよいと	意義があると思われます。	え、わかりやすい成果をあげて	成に向けて非常に重要な進	を果たすことが期待される。	
	思いました。	○ミクロ解析により、接触角と	いる点も評価できる。	展である。	○「シビアアクシデント時の炉	
	○機構論的な事故進展解析に向	いった理想的な実験系でしか	○鉄と B ₄ C 混合物の界面モデル	○B ₄ C と鉄被覆管溶融体の溶	内で生じる複雑現象の解明」	
	けた中長期計画ロードマップ	評価できないパラメータを対	の構築、複雑な界面の特性パラ	融鉄への溶出速度、ぬれ性、	が、今後の「安全」を保障する	
	に則り、ミクロからミクロ・メ	象系に応じて求めることがで	メータを計算で取得しているこ	機械特性変化など、界面特性	ためにどのように役立ってい	
	ゾスケールと着実に進展して	きるようになり、さらに、そこ	とが、学術的、実用的の視点か	パラメータのミクロ・メゾス	くのか、また、それが一般市民	
	おり、それらをマクロ解析へ	から溶融解析に重要な物質挙	らともに原子力研究開発に限ら	ケールの解析、機械特性変化	の「安心」にどのように繋がっ	
	取り込む準備が整ってきてい	動を示唆するレベルまで達し	ず材料科学に貢献している。	の再現は素晴らしいです。	ていくかという視点が、中長	
	る。R2 年度は特に、流動する	ていることは科学的にも大い		材料の粒界、照射欠陥、不純	期計画によく反映されてい	
	金属デブリの相変化解析に支	に意義がある。		物、転位など脆化に関して大	る。	
	配的な物性パラメータを取得	○B ₄ C 粉末の隙間に液体鉄が浸		規模第一原理計算で評価す	機構の成果について HP をは	
	に成功し、同時に、固気液界面	透しB4C が溶融する現象を、		る手法の開発、機械学習によ	じめどこでどのように広報し	
	における原子浸透に関する重	制御棒溶融のマクロ解析に取		るシミュレーションの高速	ていくかということに関わっ	
	要な知見を得ている。	り入れるためには、溶融速度		化の研究は優れた成果であ	て、たとえば、「シビアアクシ	
	○界面現象を取り入れた流動解	とぬれ性のパラメータが必要		る。	デント」の学術上の定義と一	
	析手法の開発に向けて、問題	となる。これらを取得するた			般市民の常識の範囲内での理	
	点の検討とその解決が試みら	めのミクロなシミュレーショ			解のギャップなどに、機構の	

表 4.2 令和 2 年度評価意見 (2/8)

		X 4.2 17年2 千尺叶画总元 (216)	
れ、進展が見られた。	ン手法を開発し、データを取		活動の広報において十分配慮
○今年度から評価委員会に参加	得したことは科学的にも重要		する必要もあるかと思う。
したので、全体をまだ十分に	で、またこの手法が原理的に		○研究の内容的にプレスリリー
把握していないが、前日の会	はどのような物質界面に対し		ス等での成果の説明では、専
議での紹介と資料から、素晴	ても適用可能な汎用性の高い		門家の興味は引いても国民の
らしい研究成果を上げている	手法であることも評価でき		理解、支持とまではいかない。
ことを知り、中長期研究計画	る。得られたパラメータが必		NHK 等の特集番組や科学番
の第三段階に進んで順調に最	要十分な精度・信頼性を有す		組にうまく組み入れるなど、
終目標に向けて進捗している	るかどうか、実験との比較に		計算科学の重要度を示すこと
印象を受けました。	より確認できれば、その科学		が必要と思われる。
	的価値はいっそう高まると思		○ビアアクシデント時の炉内複
	われる。		雑現象解析は、原子力安全性
	○制御棒内部構造の溶融移行解		に関わる重要な研究テーマで
	析という大変重要かつ難しい		あり、社会のニーズに適切に
	テーマに関して、B4C と鉄被		反映した課題設定と思われ
	覆管溶融体の溶融鉄への溶出		る。
	速度、ぬれ性、機械特性変化な		
	ど界面特性パラメータをミク		
	ロ・メゾスケールの解析から		
	取得したのは優れた成果であ		
	り、核材料に関わる複雑な界		
	面構造における液体状態の鉄		
	との相互作用を計算するモデ		
	ルの確立、機械学習分子動力		
	学との最先端なシミュレーシ		
	ョン技術の採用は高く評価で		
	きる。		

表 4.2 令和 2 年度評価意見 (3/8)

- エクサスケー ル流体解析に 向け、複雑流 体解析コード における計算 モデルの機能 拡張を進める とともに、省 通信型行列解 術の有効性を 評価する。
- ○当初計画どおりに進捗してお り、研究成果も十分にでてい る。先端的な計算技術要素の 研究開発力が高く、それらを 組み合わせ、よい結果がでて 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。
- 法等の計算技 〇中長期研究計画は順調に進捗 していると考えます。計画の 進捗には、富岳や米国の Summit などの利用が重要と なっていますが、的確にリソ ースを獲得出来ていたと考え ます。

来年度が最終年度となります が、外部の計算リソースの獲 得は順調かどうかが気になり ます。中長期研究計画の達成 に外部リソースの獲得状況が 重要ですが、万が一獲得が不 十分であった場合の代替案を 考えたほうがよいのではと思 います。

- ○エクサスケール複雑流体解析 に向けて必須の多相流解析の 30%以上の省メモリ化に成功 し、世界最大のメニーコアス パコンで大規模流体解析を実 現している。さらに、実時間汚 染物質拡散解析の計算を実施 し、観測値との比較により精 度評価も行っており、計画通 りの進捗を達成している。
- ○複雑流体解析コードに共通す る省通信型行列解法の高度化

- ○連立一次方程式に対する省通 信ソルバの開発は、最新のス ーパーコンピュータと整合す るものであり、高く評価でき る。さらに、LBM による汚染 物質の拡散解析では、アンサ ンブル平均などを算出し実験 と比較するという先端的な研 究を行っており高く評価でき
- ○最先端の高性能計算機の性能 を引き出す技術開発を推進し ており、得られた知見を計算 科学コミュニティに還元され ている点は高く評価できる。
- ○高速計算技術および可視化技 | ○「汚染物質拡散解析等の複雑流 | ○AMR コードを用いたアンサ 術に関する研究成果は学術的 に先端的であり、科学的意義 は大きい。
- ○「汚染物質拡散解析等の複雑 流体解析において解析精度を 実証」では、高精度な再現シミ ュレーションを達成しまし た。米国オクラホマシティの 汚染物質拡散実験に対するシ ミュレーションにおいて、計 算時間の短縮と再現性の改善 を達成したことは科学的意義 も高いと考えます。米国オク ラホマシティは内陸の平坦な 地形ですが、今後、より困難な 日本への適用へ向け、海陸風、 地形変化、樹木影響などへの 取り組みも期待しておりま す。また米国と同様に、日本で も再現対象のベンチマークと なるような現地実験について

- ○大規模データの可視化の研究で ○ソルバの研究では、わが国の は、ソフトウェアの公開を行い、 多数のダウンロード数があるな ど、機構内外のニーズへの貢献 が非常に大きい。
- ○高精度化、短時間化、省メモリ などの計算技術はいずれもユー ザニーズに合致するものであ り、様々な形で貢献している。 また可視化技術についても、基 本技術は確立しており、今後多 くの分野での展開が期待され
- ○機構内外との連携によってもた らされる成果が顕著である。
- 体解析において解析精度を実 証」として、実時間シミュレー ションを達成したことが大きな 成果とされており、機構内外の ニーズに適合・貢献していると 思います。核テロ時の汚染物質 拡散解析を事例としてあげられ ておりますが、これに対応する ためには全国の都市部のモデル 化が必要となります。将来的な│○米国の汚染物質拡散実験と 計画、展望はあるのか示してい ただければと思います。また核 テロも重要ですが、原子力発電 所の過酷事故への適用のほうが ○汚染物質拡散実証解析をプ ニーズは高いのではないかと考 えます。SPEEDI は避難指示に は使用しないとされましたが、 事故の実態解明のための大気拡 散シミュレーションは引き続き 重要であり、研究は進められて います。次の展開として、原子

- 富岳、米国の Summit とい った最高クラスのスーパー コンピュータを用いて高い 性能が得られることを示し ており、特に優れた成果であ ると評価できる。
- ○高性能を達成しにくい AMR 計算法に対して、メモリ要求 量の削減と高速化を同時に 達成し、複雑な多層流解析コ ードにおいて、より小さな計 算資源でのシミュレーショ ンを可能にした点は評価で きる。
- ンブル平均により、解析結果 の不確かさを考慮した評価 が可能になった点は評価で きる。今後、別の課題でもよ いので V&V も進め、シミュ レーションの不確かさと実 験の不確かさの比較を行い、 シミュレーション結果の信 頼性評価に期待したい。
- いう世界的なベンチマーク に対して、優れた成果を収め ていると考えます。
- レスリリースしている。
- ○機構のニーズに合わせた計 算手法を、CPU型、GPU型 の両アーキテクチャに向け て開発し、いずれも成功して│○アプリの開発を通して、機構の いることは驚きである。
- ○省通信並列化アルゴリズム

○複雑流体現象をリアルタイム 水準で高度に模擬できる本件 開発の社会的意義は極めて大 きい。紹介があったように、そ の適用範囲は原子力(放射性物 質)にとどまらず、社会の安全 と人びとの生命・健康を守る上 で、あるいは環境調和型の都市 計画等を進める上で非常に有 用である。

他方で、順方向の拡散解析は放 出源情報を常に必要とし、特に 予測計算として現実に適用す る場合には、結果が持つ意味は その確からしさに大きく依存 する点については強調してし すぎることはない。原子力災害 における SPEEDI の活用が福 島第一事故において不首尾と なったことは大きな教訓であ る。

当該技術については、今後、社 会からのニーズは高まる一方 であると思われるが、そうであ ればこそ、この点について十分 な留意が必要である。特に、拡 散解析の利点と弱みについて 特に深く知悉した人材が制度 設計や運用に適切に関与する よう、研究段階から具体的な構 想を持ち、政策担当者等の他の ステークホルダーとの積極的 なコミュニケーションを図る ことが強く期待される。

活動の社会的貢献が分かり

表 4.2 令和 2 年度評価意見 (4/8)

- を進め、最先端マシンである「富岳」(世界 1 位)およびGPUスパコン「Summit」(世界 2位)において高性能計算を実現したほか、JUPITERコードのGPU向けアルゴリズム改良やCFDコードのアンサンブル計算機能の開発を行なっており、全体的に非常に順調に進捗している。
- ○研究は計画通りに順調に進んでいると思われる。コード開発や各種システム上での実装と性能評価も適切に行われており、特に富岳の本格稼働に向けての準備も順調である。
- ○富岳や Summit との最高な計算リソースを利用して、複雑流体解析コードの拡張機能の開発に関して優れた研究成果を出しており、計画は順調に進捗していると考えます。

- も、今後検討して頂きたく考えております。
- ○CFDコードのアンサンブル計 算機能を開発したことで、原 子力流体解析の系統的な不確 実性評価が可能になった。デ ータ同化技術基盤につなげる ことで、エクサスケールでの データ駆動型複雑流体解析へ のアプローチができることの 意義は大きい。
- ○富岳および Summit という CPU 型、GPU 型の代表的な エクサスケール計算機で性能 を実証したことで、エクサス ケール計算機を駆使した大規 模流体解析の今後の見通しや 省通信アルゴリズムの性能移 植性を示したことは、計算機 科学の観点でタイムリーな成 果である。
- ○複雑流体解析コードは、本テーマにおいて重要であるが、より一般的な問題にも展開可能な技術である。コードのオープン化を検討している点で非常に有意義と思われ、富岳や GPU スパコンの有効活用の点でも多くの知見が共有さればその意義は非常に大きい。
- ○複雑流体解析に関する高速計 算技術よび巨大なデータの高 速可視化技術研究開発は独創 性があり、学術的に先端的で ある。

- 力発電所の過酷事故への適用へのニーズについてもご検討頂きたく思っております。その際、事前のモデル化の準備も含め、実時間シミュレーションをどのように利用するのかという具体的な検討も期待します。
- ○原子力基礎工学研究センターと連携し、オクラホマシティの汚染物質拡散実験の実証解析を実施し、また、JUPITERコードの富岳への移植、最適化を実施している。また、オープンソース行列計算ライブラリ PARCELの機能拡張として、富岳向け省通信型行列解法を整備し、富岳ユーザ向けに公開が予定されており、機構外への貢献も大きい。
- ○原子力基礎工学研究センターと の連携が良く行われている。
- ○このコード開発研究は機構内に おいても、また上述のようによ り広範な研究への適用という意 味でも意義が大きい。成果だけ でなくコードの公開が世の中に 与えるインパクトは大きいと考 える。
- ○開発された複雑流体解析の高速 計算技術よび巨大なデータの高 速可視化技術は計算科学コミュ ニティへの提供が期待されま す。論文発表を積極的に行うと 共に、いろんな形で最先端の研 究開発成果を世の中にアピール してください。

- や、In-situ 可視化による省 データ・省メモリ処理は今後 のエクサスケールシステム で顕在化すると思われる通 信性能の相対的な低下や、メ モリ容量問題に対する一つ の解である。同種の技法が、 機構内外のより幅広いアプ リケーションに拡大されれ ばその意義は非常に大きい。 〇省通信型行列解法等の計算
- 技術、富岳向け省通信型行列 解法の開発の成果が多数の ハイレベルな論文で発表さ れている。

汚染物質拡散解析コードの 開発、汚染物質拡散解析の統 計精度の向上、米国で実施さ れた汚染物質拡散実験(定常 放出条件)の実証解析は大変 優れた成果である。 前項とも関連するが、「複雑」ないし「複雑性」についての学術上の定義と一般用語としての意味との間のギャップに配慮した広報活動が求められるところである。

やすい形で示されている。

- ○ニーズにも関連しますが、原子 力発電所の過酷事故への適用 について、人文・社会学的な視 点による検討を期待します。い ろいろと議論が分かれるかと も思いますが、正確性および速 報性においても、議論をリード できる成果となっていると考 えます。
- 計算結果を効果的な可視化で示しており、若手研究者に「かっこいい」と夢を感じてもらえるような成果となっていると思えました。改めて可視化の有効性、また可視化のセンスの重要性を感じました。
- ○SA解析、廃炉措置解析、福島に目的を定めた環境動態を反めた環境動態を反めた環境動態では、など社会のニーズを反対ななない。また、社会もそのおりである。また、社会もそと思うがあると、関を明しては、おいると、実際のデータの値以をおいると、実際のデータの値がある。特に方と、実際のデータの値がある。

表 4.2 令和 2 年度評価意見 (5/8)

その他	(機構
内他部界	署との
連携)	

- ○森林の線量の主要な寄与が十 壌表層のセシウムであること を解明し、1F事故の影響評価 に大きく貢献すると評価でき る。また、AI 研究の着手、基 礎研究としての「電子相関効 果」の研究成果は先進的な取 組であり高く評価できる。
- ○当初計画以外にも機動的に課 題を捉え、連携研究により、優 れた成果、およびプレスリリ ースなどによる成果の周知に より、研究活動の高さをアピ ールしている。
- ○AI 技術をはじめ技術革新の成 果を十分に活用し、また、社会 的要請にきめ細かに応えるな ど十分な成果を上げている。
- ○「福島県の森林における空間 線量率分布を再現、主要線源 を特定しは、森林総研や筑波大 学との連携し、システム計算 科学センターの持つモンテカ ルロ計算技術によって、森林 の空間線量率に対する線源の 寄与を特定しており、科学的 に有益な成果であると考えま す。森林の地形は複雑でモデ ルの誤差は大きくなると考え られますが、誤差評価が含ま れていることも重要です。一 方で、表層十壌の寄与が大き いということは容易に想像出 来る結果とも考えられます。 モデルを応用した今後の展開 を期待します。森林は河川へ の溶存放射性セシウムのソー

- ○十分な貢献をしている。
- ○放射性物質の環境動態に係る連 携研究は、福島の環境回復とい う点において、機構内外のニー ズに適合し、貢献出来たものと 考えます。福島第一原発事故後 に得られた多くのモニタリング データの高度な数値シミュレー ション技術による活用は、森林 総研や筑波大学のニーズでもあ ったと思います。その観点から も、プレスリリースに至った研 究成果は外部研究機関のニーズ に応えたものとなったと考えま

河川や海洋に対する高度な数値 シミュレーション技術に対して も、外部研究機関からのニーズ | ○プレスリリースを伴う高 IF は高いと考えます。今後、この 分野についても外部研究機関と の連携による成果の公表を期待 します。

○機構内で9件、大学他研究機関 と8件の連携・共同研究を行っ ており貢献はできている。また、 避難地域における家屋の撤去等 の影響を評価する PJ 等に参画 しており、社会への貢献も評価 できる。

- ○開発した手法を代替モデル 構築に応用し、物性評価を行 う技術として適用範囲を拡 げ成果を出している。
- ○AI 技術等の横断的展開はと りわけ顕著な成果を上げて いる。
- ○「福島県の森林における空間 線量率分布を再現、主要線源 を特定」は、学術論文に成果 を公表し、プレスリリースに も至った優れた成果である と考えます。今後の森林研究 に対して優れたツールが開 発出来たと考えますので、今 後、ツールの活用による成果 を期待しています。
- 論文への掲載があり、優れた 成果を上げている。
- ○アルミ合金の水素脆化を防 止する化合物候補を予測し、 実験で実証して特許申請ま で行ったことは、期待を超え る成果である。

また電子相関の強い系を非 エルミート量子力学で表現 し、フェルミアークの存在を 予測した研究は、物性物理学 の観点でさまざまな波及効 果のあり得る、非常に興味深 い成果である。

- ○放射性物質の環境動態に係る 連携は、福島第一事故の影響 を受けた地域はもちろん、原 子力以外への応用も含めて社 会のニーズが高く、積極的な 展開は高く評価される。ただ し、専門外のステークホルダ ーがシミュレーション結果を 活用する際には、不確かさの 存在やその程度をはじめ、適 切な活用方法についての助言 が不可欠だ。もっとも当該研 究について知悉する開発者自 身が、その部分で積極的な関 与を続けることが望まれる。
- ○「当初計画外研究」は、この研 究の社会ニーズへの迅速かつ きめ細かな対応という点で、 センターの活動のなかでも特 記に値する位置づけだと理解 できる。そのうえで果たして 「当初計画外活動」という名 称がその意義を的確に伝え切 れていないのではないかとの 印象を受けた。研究の進捗や 社会的影響、社会的要請に柔 軟かつ迅速に対応した成果と して、今少し積極的意義をイ メージさせるような項目名称 にしてもよいのではないかと 思う。
- ○「福島県の森林における空間 線量率分布を再現、主要線源 を特定」のプレスリリースに おいて、「今後実施する森林管 理の影響を評価する」ことは 社会ニーズに応えきれている

表 4.2 令和 2 年度評価意見 (6/8)

		表 4.2 分和 2 年度評価意見 (6/8)
展外から使用への移行でプル により現象体列にも別行します。 また 河川木流の三状元時報 計算を得る反称を開発、グム には用より天然化計算を拠点を 一成機関内の方法物での移 を担かしており、大型が自然を構造した。 一成機関内の方法物での移 をしたモデルによる高度な計 が表するが表現であると考えでいる。表れの をしたモデルによる高度な計 が表するが異常のセプル があるが表現であると考えでいる。表れの が相違連続にはマスコミな がを事態しており、オリジナー リラーのあるが異であると考え として、プル・スタ合有での実績もあ るとは思われますが、経済的な が構造しなかますが、経済的な が構造しなかますが、経済的な が構造しなかますが、経済的な が構造しなかますが、経済的な が構造しています。 の放射性機関の関連を れているが表すとしますが、の 使い方が異なることから、それに 対してどういっか反と(医療) がより、手がかの 使い方が異なるがあると思います。別川木舎部の研究機 関と無色に、基本の多素的な を関係しています。 の放射性が関の機関があるのと思います。別川木舎部の研究機 関と無色に、基本の多素的な 歯と形向、よれを分のの であるのとないか、情報の 虚しのかしては、地表から るの 以内のナシの人が上露後 関であることとならないよう社 原確については、地表から るの 以内のナシの人が上露後 関であることとないよう社 原確については、地表から るの 以内のナシの人が上露後 関であることとないよう社 原確については、地表から るの 以内のナシの人が上露後 関であることとないよう社 原確については、地表から るの 関内のナシの人が上露く 関であることとないよう社 原確については、地表から るの 関内のナシの人が上露く 関でなることととと におるないよう社 原確については、地表から るの 関内のナシの人が上露く 関でなることととと におるないよう社 原確については、地表から るの 関内のナシの人が上露く 関でなることととと におるないよう社 原確については、地表が の機関の関連に関しては、機 被学習 MI によるを解析的 の機関の関連に関しては、機 被学習 MI によるを解析的 の機関の関連に関しては、機 被学習 MI によるを解析的 の機関の関連に関しては、機 被学可能とないの、特別の はしつかないないか、特別の があるのとたとと におるないよう社 原確しては、とながすない。 は他の の関係のが成れては、地表が の関係のが成れては、地表が の関係のが成れては、地表が の関係のが成れては、地表が の関係のが成れては、地表が の関係のがあるとないますな があるのとないないか、特別の はしつかでは、地表が の関係のがあるとないないか、特別の はしつかでは、地表が の関係のが表れては、地表が の関係のがあるとないないか、特別の があるのとないないか、特別の があるのとないないか、特別の を関係のではないか、特別の があるのとないないか、特別の があるのとないないか、特別の があるのとないないか、特別の があるのとないないか、特別の があるのとないか、特別の があるのとないないか、特別の があるのとないないか、特別の があるのとないないか、特別の があるのとないないか、特別の があるのとないないか、特別の があるのとないないか、特別の があるがとないないないか、特別の があるのとないないないか、特別の があるのとないないないないないないないないないないないないないないないないないないない	スとなっています。保有する	ものと考えます。また「今後の
による現象解例にも期待します。 また「同川未放の三次元部組 相信を行う技術を摂金、ダム に応用、「大水門的を保護には 2 かん し 東川対効果などの経済的な	高度なモデル技術を用いて、	有効な森林内の放射線量低減
また「同川木能の一次元譜細 前形を行う技術を開発、ダム に以用、「水素排料を結め着 一原光溶清内の汚染物質の移 一原光溶清内の汚染物質の移 一原光溶清内の汚染物質の移 一原光溶清内の汚染物質の移 一原光溶清内の汚染物質の移 対したエッルによる高速な計 類にたエッルによる高速な計 が、直接が からとき考え、する。 カースのある反射であると考 えます。同川や物作のロナブル 計算は詳細などの表を作りる変定 が同様に、検査サイタを組更デ ータもホー分では、老棚がデ ータもホー分では、老棚がデ ータもホー分では、老棚が大きない。 は、アデルの 他い方が異なる面があると思 いよず。同川や物体の内が分から、表しに 対している方が、表しい が現れるの面があると思 いよず。同川や物体の内が分から、表しに 対している方が大きい があったかにで活動する反響 があったかにで活動する反響 同と連携し、活来の効果的な 会表を測性しています。 の体性物質の原境の情になる 演奏については、地変から を発しています。 の体性物質の原境の情になる 対象にかっては、地変から があったかにで活動する反響 であることがでは、は多い の物性の研究が表し、 は関いない に、地変から の表の対性にいる 対象については、地変から の動物が成れることと に対すのには単位の 対象については、地変から の動物が成れることと の情報を対することと に対すのには単位の 対象については、地変から の動物が成れません。 対象については、地変から の動物が成れません。 対象については、地変から の動物が成れません。 対象については、地変がよるい。 は知かない。 は知れない。 は知かない。 は知かない。 は知かない。 は知れない。 は知れない。 は知れない。 は知れないないないないないないないないないないないないないないないないないないない	森林から河川への移行モデル	に向け、現実的な提案を行う」
正文に「東川水液の三次元音組 一文は「東川水液の三次元音組 一次を自力及称を開発、ダム に応用」が表対異素体制品等 一項発酵外内の汚現物で図れる 一項発酵外内の汚現物で図れる 一項発酵外内の汚現物で図れる 一項発酵外内の汚現物で図れる 一項発酵外内の汚現物で図れる 一項発酵が用では、独自に開 等を火塩しており、オリジナ リティのある成果であると考 えます。河川や物作のモデル 計算は詳細な現界条件の設定 が開業で、検証すべき観測デ 一夕ちゃト分です。そういう 意味でも、これまでシステム 計算科学エンターで取り組ま れていた分野とは、モデルの 彼い方が異なる面があると思 がいます。河川や物での電光機 開と連修し、七米ルの 次のインパクトが大きい 研究であることから、それに かんのインパクトが大きい 研究であることがら、それに かんのインパクトが大きい の機能の必果的な 連修しています。 ②放射性物質の環境制度に係る 連修については、連者から るの 、別内のセンクル主要線 顕示あることを研示してよと 、部域の水上を 、証述のよれ主要線 顕示あることを研示したこと は料定的では、正式がよる様等 の機断の関に関しては、機 様学の を関いてよる経球科科 (中本アト)の物性を再現す ることができている。また。主	による現象解明にも期待しま	とあります。もちろん森林の
計算を行う技術を開発、グム に応用」、「水面計算を協画等 一般を建物のの影響である 行評価に応用では、地質に開 類と大モデルによる高度な計 類と大田ではよう。不りジナ リティのある成果にあると考 えます。利用では海のホモデル 計算は雑組な投算条件の設定 が開酵で、他面すべき観測ア ークも不十分です。そういう 選集でも、これまでシステム 言葉科学センターで取り組ま れていた方型とは、モデルの 使い方が異なる高流あると思 います。河川で清等の研究機 関と流動する。と思りないます。 の数件を物質の研究的表すと思 います。河川で清等の研究機 関と流動する。これまでシステム 言葉科学には、モデルの 使い方が異なる高流あると思 います。河川で清等の研究機 関と流動し、起来の効果的な 公変を関待しています。 ○数件を物質の機変が低に係る 浮標については、地表から 5cm 以内のセジウムが主要的な 原と流動する必要 原と流動し、起来のも 5cm 以内のセジウムが主要的な 原となると思 があるのではないか。情報の 同しし放しにならないよう注 を願いたい。 2 類似になることとを決定したこと に科学的変素によるらんと社会 的可能的皮膚に関しては、機 報学習 MD による電池材料 (セメント) の物性を再現す ることができている。また、直	す。	放射線量低減には社会的なニ
に送用」「本部計算を補助等	また「河川水流の三次元詳細	ーズは高いと考えます。しか
一原発線内内の召喚物質の移行評価には用いては、独自に開発したますがによる高度な計算を実施しており、オリジナリティのある成果であると考えます。環体の 放射線量低減にはマスコミなどを中心とした世論による社会ます。 同川へ海洋のモアル 計算は詳細な成熟条件の設定 が国難で、移画すべき観測データも不十分です。そういう意味でも、これまでシステム 計算科学センターで取り組立 相同人のインバタトが大きい 研究であることから、それに 対してどういった反応 (反野) います。 同川へ福洋の研究機関 します。 原川や福洋の研究機関 があったかまで高速する必要 関と連携し、結果の効果的な 公表を規切しています。 〇放射性物質の原境動態はブレスリリースも行っているが、 国民へのインバタトが大きい研究であることから、それに 対してどういった反応 (反野) があったかまで高速する必要 別と連携し、結果の効果的な 公表を規切しています。 〇放射性物質の原境動態に係る 連携については、地表から 60m 以内のセンタムが主要解 源であることを特定したこと は科学的は高さもちろん社会 的貢献成立大きい。 AI 技術等の 個断的展示に関しては、機 様学習 MD による複雑材料 (ヒメント) の物性を表対することを発達してによ、機 様学習 MD による複雑材料 (ヒメント) の物性を表対することが発達しては、機 様学習 MD による複雑材料 (ヒメント) の物性を再対することが表するい。 AI 技術等の 個断的展示に関しては、機 様学習 MD による複雑材料 (ヒメント) の物性を再対 ることができている。また、表	計算を行う技術を開発、ダム	し費用対効果などの経済的な
行評価に応用」では、独自に開発したモデルによる高度な計算を実施しており、オリジナリティのある成果であると考えます。	に応用」、「水流計算を福島第	観点、科学的な観点からは「森
源と大平デルによる高度な計算を実施しており、オリジナリティのある場果であるともとを中心とした世流による社会ニーズや名有行の設飾もあるとも名。大生でのいては、地表がのではいか。「何様の一大変を明確ない。」では、地表がいるでは、地表がいる。「のないます。」では、地表がいる。「のないます。」では、地表がいる。「のないます。」では、地表がいる。「のないます。」では、地表がいる。「のないます。」では、地表から、「のないます。」では、地表から、「のないます。」では、地表から、「のないます。」では、地表から、「のないます。」では、地表から、「のないます。」では、地表から、「のないます。」では、地表から、「のないまりない」では、地表から、「のないまりない」では、地表から、「のないまりない」では、地表から、「のないまりない」では、地表から、「のないまりない」では、地表から、「のないまりない」では、地表から、「ないまない」では、地表から、「ないまない」では、地表から、「ないまない」では、地表から、「ないまない」では、地表から、「ないまない」では、地表から、「ないまない」では、地表から、「ないまない」では、地表から、「ないまない」では、地表から、「ないまない」では、地表から、「ないまない」では、地表から、「ないまない」では、「ないまないまない」では、「ないまないまない」では、「ないまないまないまないまないまない。「ないまないまないまないまないまないまない。「ないまないまないまないまないまないまないまないまないまない。「ないまないまないまないまないまないまないまないまないまないまないまないまないまな	一原発港湾内の汚染物質の移	林の線量低減」には議論の余
第を実施しており、オリジナ リティのある放果であると考 えます。 河川や海洋のモデル 計算は詳細な原界条件の設定 が困難で、検証すべき観測デ ータも不十分です。そういう 意味でも、これまでシステム 計算科学センターで取り組ま れていた分野とは、モデルの 使い方が異なる面があると思 います。 河川や海洋の研究機 関と連携し、結果の効果的な 公表を明存しています。 () 放射性物質の研究物能に係る 連携については、地表から 5cm 以内のセンクムが主要線 顔であることを特定したこと は科学的伝統はもちる人社会 的貢献度が大きい。 AI 技術等 の機断的機関に関しては、機 被学習 MD による複雑材料 (セメント) の物性を再現す ることができている。また、重	行評価に応用」では、独自に開	地があると考えます。森林の
サティのある成果であると考えます。河川や海洋のモデル 計算は詳細な境界条件の設定 が困難で、検証サイき・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・・	発したモデルによる高度な計	放射線量低減にはマスコミな
えます。河川や海洋のモデル 計算は詳細な境界条件の設定 が困難で、検証すべき観測デ ータも不十分です。そういう 意味でも、これまでシステム 計算科学センターで取り組ま れていた分野とは、モデルの 使い方が異なる面があると思 います。河川や海洋の研究機 間と連携し、結果の効果的な 公表を期待しています。 ②放射性物質の環境動態に係る 連携については、地表から 5cm 以内のセシウムが主要線 源であることを特定したとと は科学的意識はもちろん社会 的貢献度が大きい。AI 技術等 の横断的展開に関しては、機 被学習 MU による 複雑材料 (セメント) の物性を再則す ることができている。また、重	算を実施しており、オリジナ	どを中心とした世論による社
計算は詳細な境界条件の設定 が困難で、検証すべき観測データも不十分です。そういう 意味でも、これまでシステム 計算科学センターで取り組ま れていた分野とは、モデルの 使い方が異なる面があると思 います。河川や海洋の研究機 関と連携し、新巣の効果的な 公表を期待しています。 〇放射性物質の環境動態に係る 連携については、地表から 5cm 以内のセシウムが主要線 流であることを特定したこと は科学的意義はもちろん社会 的貢献度が大きい。Al 技術等 の横断的展開に関しては、機 被学習 MD による複雑材料 (セメント) の物性を再处す ることができている。また、竜	リティのある成果であると考	会ニーズや各省庁の要請もあ
が困難で、検証すべき観測データも不十分です。そういう 意味でも、これまでシステム 計算科学センターで取り組ま れていた分野とは、モデルの 使い力が異なる面があると思 います。河川や海洋の研究機 関と連携し、計果の効果的な 公表を期待しています。 ○放射性物質の環境動態に係る 連携については、地表から 5cm 以内のセシウムが主要線 源であることを特定したこと は科学的意義はもちろん社会 的貢献度が大きい。AI 技術等 の機断的展開に関しては、機 被学習 MD による複雑材料 (セメント)の物性を再現す ることができている。また、重	えます。河川や海洋のモデル	るとは思われますが、経済的
	計算は詳細な境界条件の設定	な観点も含めた科学的な研究
意味でも、これまでシステム 計算科学センターで取り組ま れていた分野とは、モデルの 使い方が異なる面があると思 います。河川や海洋の研究機 関と連携し、結果の効果的な 公表を期待しています。 〇放射性物質の環境動態に係る 連携については、地表から 5cm 以内のセシウムが主要線 源であることを特定したこと は科学的意義はもちるん社会 的貢献度が大きい。AI 技術等 の機断的展開に関しては、機 被学習 MD による複雑材料 (セメント) の物性を再現す ることができている。また、重	が困難で、検証すべき観測デ	を期待しています。
計算科学センターで取り組まれていた分野とは、モデルの 使い方が異なる面があると思います。河川や海洋の研究機 関と連携し、結果の効果的な公表を期待しています。 ○放射性物質の環境動態に係る連携については、地表から 5cm 以内のセシウムが主要線源であることを特定したことは科学的意義はもちろん社会的貢献度が大きい。AI 技術等の関版関に関しては、機 被学習 MD による複雑材料 (セメント)の物性を再現することができている。また、重	ータも不十分です。そういう	○放射性物質の環境動態はプレ
れていた分野とは、モデルの 使い方が異なる面があると思います。河川や海洋の研究機 関と連携し、結果の効果的な 公表を期待しています。 〇放射性物質の環境動態に係る 連携については、地表から 5cm 以内のセシウムが主要線 源であることを特定したこと は科学的意義はもちろん社会 的貢献度が大きい。AI 技術等 の横断的展開に関しては、機 被学習 MD による複雑材料 (セメント)の物性を再現す ることができている。また、重	意味でも、これまでシステム	スリリースも行っているが、
使い方が異なる面があると思います。河川や海洋の研究機関と連携し、結果の効果的な公表を期待しています。 ②放射性物質の環境動態に係る連携については、地表から5cm以内のセシウムが主要線源であることを特定したことは科学的意義はもちろん社会的貢献度が大きい。AI技術等の機断的展開に関しては、機械学習MDによる複雑材料(セメント)の物性を再現することができている。また、重	計算科学センターで取り組ま	国民へのインパクトが大きい
います。河川や海洋の研究機関と連携し、結果の効果的な公表を期待しています。 () 放射性物質の環境動態に係る連携については、地表から をm 以内のセシウムが主要線源であることを特定したことは科学的意義はもちろん社会的貢献度が大きい。AI技術等の機断的展開に関しては、機械学習 MD による複雑材料(セメント)の物性を再現することができている。また、重	れていた分野とは、モデルの	研究であることから、それに
関と連携し、結果の効果的な 公表を期待しています。 ○放射性物質の環境動態に係る 連携については、地表から 5cm 以内のセシウムが主要線 源であることを特定したこと は科学的意義はもちろん社会 的貢献度が大きい。AI 技術等 の横断的展開に関しては、機 被学習 MD による複雑材料 (セメント) の物性を再現す ることができている。また、重	使い方が異なる面があると思	対してどういった反応(反響)
公表を期待しています。 ○放射性物質の環境動態に係る 連携については、地表から 5cm 以内のセシウムが主要線 源であることを特定したこと は科学的意義はもちろん社会 的貢献度が大きい。AI 技術等 の横断的展開に関しては、機 械学習 MD による複雑材料 (セメント)の物性を再現す ることができている。また、重	います。河川や海洋の研究機	があったかまで追跡する必要
○放射性物質の環境動態に係る 連携については、地表から 5cm 以内のセシウムが主要線 源であることを特定したこと は科学的意義はもちろん社会 的貢献度が大きい。AI 技術等 の横断的展開に関しては、機 械学習 MD による複雑材料 (セメント)の物性を再現す ることができている。また、重	関と連携し、結果の効果的な	があるのではないか。情報の
連携については、地表から 5cm 以内のセシウムが主要線 源であることを特定したこと は科学的意義はもちろん社会 的貢献度が大きい。AI 技術等 の横断的展開に関しては、機 被学習 MD による複雑材料 (セメント) の物性を再現することができている。また、重	公表を期待しています。	出しっ放しにならないよう注
5cm 以内のセシウムが主要線 源であることを特定したこと は科学的意義はもちろん社会 的貢献度が大きい。AI 技術等 の横断的展開に関しては、機 械学習 MD による複雑材料 (セメント) の物性を再現することができている。また、重	○放射性物質の環境動態に係る	意願いたい。
源であることを特定したこと は科学的意義はもちろん社会 的貢献度が大きい。AI 技術等 の横断的展開に関しては、機 械学習 MD による複雑材料 (セメント)の物性を再現す ることができている。また、重	連携については、地表から	
は科学的意義はもちろん社会 的貢献度が大きい。AI 技術等 の横断的展開に関しては、機 械学習 MD による複雑材料 (セメント) の物性を再現す ることができている。また、重	5cm 以内のセシウムが主要線	
的貢献度が大きい。AI 技術等 の横断的展開に関しては、機 械学習 MD による複雑材料 (セメント)の物性を再現す ることができている。また、重	源であることを特定したこと	
の横断的展開に関しては、機 械学習 MD による複雑材料 (セメント)の物性を再現す ることができている。また、重	は科学的意義はもちろん社会	
械学習 MD による複雑材料 (セメント) の物性を再現す ることができている。また、重	的貢献度が大きい。AI 技術等	
(セメント)の物性を再現す ることができている。また、重	の横断的展開に関しては、機	
ることができている。また、重	械学習 MD による複雑材料	
	(セメント) の物性を再現す	
元素化合物でのフェルミアー	ることができている。また、重	
	元素化合物でのフェルミアー	
ク発現を世界で初めて予測し	ク発現を世界で初めて予測し	
ている。	ている。	

表 4.2 令和 2年度評価意見 (7/8)

○自治体、官庁、東京電力等から		
の要請に応え、これまで開発		
してきた福島環境回復に関わ		
るシミュレーション技術を用		
いて、除染が困難な森林での		
空間線量の主要線源を特定し		
たことは、一般向けにもわか	7	
りやすい成果である。		
ADS材料の液体金属脆化機構		
解明に向け、液体金属 15 元素		
の材料への溶融エネルギー、		
表面吸着エネルギーを計算し		
た。まだ明確な結論が得られ		
たとは言い難いが、今後の進		
展に注目したい。またアルミ		
合金の水素脆化を防止する化		
合物候補を予測し、実験で実		
証した。これはおそらく重要		
な成果であり、鉄の水素脆化		
との関連性(物理的理由や研	f	
究手法の応用の観点で)に興		
味が持たれる。		
AI 技術等の横断的展開では、		
電子相関の強い系を非エルミ		
ート量子力学で表現し、フェ		
ルミアークの存在を予測した		
研究は、斬新かつ非常に興味	ϵ	
深い内容である。		
○当初計画に留まらず、計画外		
でも基礎研究開発、環境動態研	f	
究への展開など顕著な成果の創		
出がなされました。「当初計画外		
研究」とは、中長期計画のロード		
マップにない内容であり、中長		
期計画との関連性、何時、どのよ		
うなプロセスで当初計画外研究		
を実行したのが不明です。		

表 4.2 令和 2 年度評価意見 (8/8)

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)

- ○日本原子力研究開発機構における他部署でも大規模高速計算を行っていると考えられ、それらともできるだけ連携することにより、研究所全体のシミュレーション技術のレベルアップに貢献してほしい。
- ○有力な計算科学の拠点として考えるならば、成果のみならず人材育成という観点からは、国内外拠点との長期的な人材交流などを通し、若手研究者の育成なども検討していただきたい。
- ○今回報告のあった成果はいずれもすばらしいものであるが、人文・社会科学の視点からは、欧米での動きに鑑みて、今後は RRI(Responsible Research and Innovation: 責任ある研究・イノベーション)の考え方を PDCA サイクルに組み込むとともに、現場での日々の研究業務において実践することが望まれる。具体的には、社会の課題解決への貢献を基礎研究から応用研究に至るあらゆる研究において意識することはもちろんのこと、人権・尊厳の尊重(例:あらゆる差別やハラスメントの排除)、社会的弱者のエンパワーメント、環境配慮などを意識した組織運営なども含まれるのが RRI の考え方である。また、各論部分でコメントしたように、シミュレーション技術が誤解に基づいて制度・政策に組み込まれることを戒め、適切な活用がなされるよう、研究者も他のステークホルダーと連携して積極的に関与、発言、行動することもまた、「責任ある研究」のあり方に含まれるし、福島第一事故の被害の回復、廃止措置の推進に資する研究を引き続き精力的に展開することも当然、RRI の考え方に適うものである。こうした考え方は現在、新たに策定される政府の第6期科学技術・イノベーション基本計画にも反映されつつあり、機構においても率先して取り入れることが望ましい。
- ○AI の利活用などをはじめ、技術の安心と安全が一括りの言葉として登場することが多くなってきている。ただし、安全は技術的に保障すべきものであり、事故時には、極力その被害を軽微なものにとどめるための対処システムを開発するなど明確に示すことができる一方、安心はあくまで一般市民の感情的な部分に関わるものである。アウトリーチ活動においては、安全が安心につながるような仕組みがどれだけ考えられているかが重要になってくると思われる。

AI 技術の導入により、研究も新たな展開を迎えている。「原子力研究の AI 人材」あるいは「AI に通じた原子力研究人材」の育成を今後、ヴィジョンとして明確に提示していくことが可能かと思う。

- ○「数値シミュレーションの品質確保・保証」について、JANSIのガイドラインや ISO9001 などがありますが、システム計算科学センターとして、どのような対応を考えておられるか示していただきたい。
- ○両ユニットとも、機構内の連携に基づき、機構のミッションに合致した研究を強力に推進し、興味深い成果をあげている。シミュレーション技術開発室の研究においては、最終的にミクロからマクロをつなぐマルチスケール解析が求められ、それが中長期計画期間にどこまで達成できるかが問題であろう。ぬれや拡散速度など、ミクロなシミュレーションで求めた物性値がどこまで信頼できるのかを、できるかぎり実験的に検証しておくことが重要と思われる。また AI 技術の利用では、機械学習 MD しか用いられていないが、たとえば流体の高速計算に向けたサロゲートモデルなども検討していただきたい。センターでは、ミッションオリエンティッドな研究に加え、研究者の創意に基づく幅広い研究を容認し、その中からこれまでも学術的にオリジナリティの高い優れた研究が生まれている。このような風土は、ぜひ維持していただきたい。
- ○富岳を始めとするエクサスケール計算機は今年から来年にかけて本格的に日米(あるいは中国でも)立ち上がってくる予定である。以前より複雑流体解析のチームは米国で主流となっている GPU への適用も、国内における富岳やその他のメニーコアシステム(Oakforest-PACS等)でも最適化を行っており、いわばプラットフォームフリーな形で色々な方面に展開できる技術力を持っている。今後にも大いに期待したい。
- ○実験で計測困難な物質パラメータを計算で取得し、実験しにくい、できない状況をコンピュータシミュレーションで「実験」することは計算科学手法の大きなメリットである。一方、一連のモデリング、 理論の集積に対して、科学的な正確性の確保、結果の信頼性、安定性、適用条件などの検証を今後の研究開発に取り入れて欲しい。 原子力研究に関わる各研究テーマに関して、国際動向も検討してほしい。

中長期計画のロードマップには、第一段階で核燃料ミクロ解析、第二段階でマクロ流動解析、第三段階で界面現象解析と3つの段階の開発計画がありますが、前段階の研究開発は順調に進んでいても学術 的に核燃料ミクロ解析、マクロ解析には未解明なことがたくさんあります。各段階の研究は分断的ではなく、学術的に継続して進められる体制にしていただきたい。

4.2 見込評価

中長期目標期間の最後の事業年度の直前の事業年度までの期間(平成27年度~令和2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点検内容を表5.1 (中列)にまとめる。

評価委員会において、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、委員からいただいた見込評価意見を表5.1 (右列) に記載する。

This is a blank page.

表 5.1 見込評価意見 (1/8)

(1) 研究開発の進捗度 (達成見込度)

研究開発は順調に進捗している。

① 炉内複雑現象解析に係る計算科学では、機械学習を応用した物性評価手法を確立し、これまでミクロ解析が困難であった固液共存状態のシミュレーションを実現させ、μm スケールで起こる界面現象がm スケールの炉内複雑現象へと発展するマルチスケール性を確認した。令和3年度は、マクロ解析を実施し、開発手法の有効性を実証することで、第3期中長期計画を完遂予定。

自己点検内容

- ② エクサスケール流体解析に向けた計算技術では、「富岳」、「Summit」等、世界最先端のアクセラレータ型スーパーコンピュータ向けの高性能計算技術を開発し、世界トップクラスの処理性能を有する複雑流体解析を構築した。これまでに都市街区の汚染物質拡散解析における実証解析を完了した。令和3年度は燃料集合体の気液二相流解析における実証解析を実施し、第3期中長期計画を完遂予定。
- 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。(年度の平均値は約 1.7 倍)

○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

【成果最大化に向けた研究開発運営】

・今年度までに、ミクロ・メゾスケールのマルチスケール化のために、AI 技術をいち早く導入し、界面 現象の高精度計算を実現させた。

【目標達成】

- ・今年度までに、ミクロ・メゾスケールモデル解析を用いて燃料・被覆管溶融体および制御棒溶融体の 界面特性データ(表面張力、凝固速度、ぬれ性、粘性)を取得。マクロ解析に取り入れる準備を完了。
- ・令和 3 年度にミクロ・メゾスケールモデル解析で得られたデータと知見に基づき μ m スケールの界面 現象の効果を取り入れたマクロ解析を実施し、その有効性を検証し中長期計画を達成する予定。

【顕著な成果】

- ・従来の第一原理計算を用いた分子動力学では、その計算限界の 100 倍以上の計算量を必要とするため 不可能とされた固液共存状態のシミュレーションを、機械学習を導入することで実現した。これにより、事故時の燃料溶融挙動に関わる凝固界面を対象に、第一原理計算の精度でメゾスケールの解析が可能となった。
- ・機械学習技術の高度化による横断展開強化を図るため理化学研究所革新知能統合研究センター(AIP) と連携し、核燃料等の重元素化合物や超伝導体の物性評価において必須となる電子の集団挙動を解析

委員評価 (評価理由/ご意見)

- ○本研究で開発したソフトウェアを、実際に富岳や Summit で動かし、高い性能が得られたことは、特に高く評価できる。また、こうした大規模並列計算に関する先端的技術は、日本原子力研究開発機構内にも広く役立つものである。
- ○(1)-①について、炉内の複雑現象である燃料棒溶融シミュレーションを実施するために必要な物性パラメータを取得する方法を開発し、その実証を終了している。当初目的を達成するためのマイルストーンはクリアしていると判断できる。
- (1)-②について、燃料集合体の気液二相流解析を実施するためのコード開発に見通しがたっており、当初予定を達成できると判断される。
- ○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。
- ○研究開発は順調に進捗していると思います。

都市街区の汚染物質拡散解析における実証解析の結果も世界トップクラスと言えるのではないでしょうか。

今後の日本への適用も期待でき、顕著な成果の創出であったと思います。

○シミュレーション技術開発については、多様な物理現象、あるいはその組み合わせを取り扱うための、 新しい手法が開発されている。極めて困難な問題に取り組みつつ着実に成果を上げている。最終的に 原子論に基づくミクロなシミュレーションの結果を取り入れたマルチスケール解析を行うためには、 まだ乗り越えなければならない壁があるものの、成果の創出や将来的な成果の創出の期待等が認められ、着実な業務運営がなされている。

シミュレーション基盤技術開発に関しては、非常に順調に進捗している。ソフトウェアの公開なども 含め、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。

- ○エクサスケール流体解析に向けた計算技術では、世界の主要スーパーコンピュータのアーキテクチャである Summit の NVIDIA 社製 GPU や富岳の富士通 A64FX など、幅広いシステムに対する適切なコード開発と最適化がなされている。開発計画は順調に進捗していると判断できる。論文発表数も妥当である。
- ○研究開発は順調に進捗していると思います。
- ○第一原理計算と機械学習による大規模解析技術を開発し、マクロ解析に必要なパラメータ取得法を確立している。得られたパラメータを用いたマクロ解析により、マルチスケール解析を達成できる見通しである。
- ○大変複雑な炉内現象、核燃料の解析を取り込んで着実な成果を上げ続けていることは素晴らしい。 原子力分野だけではなく、また、論文だけではなく、色々な面で最先端の研究開発成果を世の中にア ピールしてください。
- ○開発した方法は多くの分野に応用が可能であり、波及効果が高い。また、サロゲートモデル構築の強力なツールであり、広く計算科学の領域に貢献する基盤技術となる点は顕著な成果と判断される。
- ○各段階の研究開発を有機的に繋いで、原子力分野の実問題により近づく問題の解析に展開してほしい。

表 5.1 見込評価意見 (2/8)

する計算(量子シミュレーション)に対し、機械学習で得た代理モデルを用いる超高速な計算手法(従 来比:1000倍)を開発した。

○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

【成果最大化に向けた研究開発運営】

- ・様々な原子力流体シミュレーションに共通する計算手法やアルゴリズム等を抽出し、メニーコア CPU 型だけでなく GPU 型の代表的なアクセラレータ型スーパーコンピュータ向けにも高性能計算技術を 開発することで開発技術を汎化させ成果の波及効果を最大化した。
- ・上記に必要な「富岳」、「Summit」等、世界最先端のアクセラレータ型スーパーコンピュータにおけ る公募計算機資源を獲得することで研究開発を加速させた。

【目標達成】

- ・省通信型行列解法を開発し、最先端アクセラレータ型スーパーコンピュータにおける数千 CPU/GPU │ ○いずれの目標も順調に達成されつつある。 規模の高性能計算を達成した。
- ・格子ボルツマン法流体計算コードにおける適合格子細分化法および GPU 向け最適化技術を開発し、 都市街区の汚染物質拡散解析における有効性を実証した。
- ・多相流体計算コードにおける適合格子細分化法、高精度界面捕獲モデル、および GPU 向け最適化技 術を開発した。令和3年度に燃料集合体の気液二相流を対象とする実証解析を実施し、開発技術の有 効性を実証予定。
- ·In-Situ 可視化システムおよびその最先端アクセラレータ型スーパーコンピュータ向け最適化技術を 開発し、エクサスケール流体計算の In-Situ 可視化を実現した。

【顕著な成果】

- ・「富岳」、「Summit」というメニーコア CPU 型、GPU 型の世界最先端アクセラレータ型スーパーコン | ピュータで共通に利用可能な省通信型行列解法の開発に成功し、1,000 億格子規模(世界トップクラ スの解析規模)の複雑流体解析を実現した。本成果は当該分野のトップカンファレンスである SC20 | ○スケールの異なるデータに跨る多階層流体解析を各システム向けに応用できている。In-Situ 可視化 での技術論文に採択(採択率25%)された。
- ・km スケールの気象データと m スケールの都市データを反映した多階層流体解析により環境評価基 | 的なシステムとなっている。 準(ファクター2以下の誤差)を満たす高精度汚染物質拡散解析を実現し、さらに実時間での計算と いう目標も達成(世界トップクラスの計算性能と計算精度)。本成果は当該分野の国際論文誌に出版 され、プレスリリースを実施した。
- ·In-Situ 可視化システムにおいて、ファイルベースの対話的可視化機能、多変量データ可視化機能、 対話的シミュレーション制御機能等の先進的機能を開発し、従来の In-Situ 可視化の問題 (対話的 In-Situ 可視化、対話的シミュレーション制御)を根本的に解決した。この成果は当該分野の国際論文誌 に出版され、プレスリリースを実施した。

○耐震評価高度化のためのモデル化手法の研究

【成果最大化に向けた研究開発運営】

・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。

【目標達成】

・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

- ○開発した技術を複数の異なるコードに実装し、性能向上を図るなど、開発技術の汎用化により波及効 果を高める努力がなされ、その効果を上げている。また、公募計算資源の獲得など、効率的な研究活 動の運営努力が見られ、評価できる。
- ○研究開発が加速されたことに同意します。一方で、万一公募計算機資源が不十分だった場合の達成目 標はどのようなものだったかを示していただきたい。
- 機構内の計算資源でも、ロードマップの達成は可能だったかを示していただきたい。
- ○世界トップレベルのスーパーコンピュータにおいて大規模シミュレーションを高い効率で実施する コードが開発され、研究が加速されていることは評価できる。
- ○目標達成に必要な要素技術を計画どおりにすすめ、着実な成果創出へとつなげていると認められる。

- ○トップカンファレンスである SC20 に採択される論文がでており、顕著な成果が創出されている。
- ○世界トップクラスの計算性能と計算精度は間違いないと思いますが、汚染物質拡散解析の相互比較な どを通じて具体的に示していただきたい。
- では、メモリ容量にほとんど影響を与えることなく、大量のデータのシステム外への転送を抑えた効率
- ○表現の問題ですが、「根本的に解決」とは何か、曖昧です。対話的というところが論点なら、数年前の 論文にも出ています。
- ○大変重要なテーマであり、一連のモデリング、理論の集積に対して、科学的な正確性の確保、結果の 信頼性、安定性、適用条件などの検証を今後の研究開発に取り入れて欲しい。

表 5.1 見込評価意見 (3/8)

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。
- ・H28 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、H29 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。

(2)効果・効用 (アウトカム)、波及効果 (インパクト)

アウトカムに向けて積極的に成果公開・普及の取組を実施した。

- 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

【成果最大化に向けた研究開発運営】

- ・大規模・高精度計算のノウハウを活かし、従来にはない大規模な福島環境動態シミュレーション研究を主導。
- ・成果(開発したソフトウェア)を積極的にオープンソース化。
- ・AI、Web、DB、可視化など先端的 IT 技術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。

【顕著な成果】

○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

(溶融燃料物性評価に用いた機械学習分子動力学の手法を横断展開し連携研究を推進。)

- ・第一原理計算や機械学習分子動力学を用いた大規模原子シミュレーション技術を、燃料、被覆管、材料、セメント、SiO₂ガラスなど様々な対象に応用する連携研究を展開し、実験で観察できない原子レベルの知見を提供し、成果を創出した。
- ○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

(「京」、「富岳」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および In-Situ 可視化システムを整備した。これまでに「京」をはじめとする汎用 CPU 向けソフトウェアをオープンソースとして公開しており、令和 3 年度は「富岳」向けソフトウェアをオープンソースとして公開予定。)

- ・第3期中長期計画期間中の累計ダウンロード数は、約6,300に上り、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した。
- ・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「富岳」における大規模解析への貢献 が機構内外から期待されている。

- ○研究者コミュニティ、一般市民に対する情報提供など、研究成果を広く社会還元する努力が認められる。
- ○成果公開、アウトリーチに積極的である点は大変好ましいが、それは研究成果が出た後に行われるだけではなく、研究課題の設定、研究の遂行、研究成果の発信という研究開発のすべての段階において頻回かつ双方向になされることが望まれる。行政や一般市民と直接にやりとりすることばかりを念頭に置き、ハードルを上げて考える必要はなく、本委員会を期末評価だけではなく、期初や期中のレビューと助言にも活用する等もやり方としてあり得るであろう。積極的な検討と対応を期待したい。
- ○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。 社会のニーズを的確に把握し、安心安全の向上に向けて成果公開を行っておられると思います。波及効果へのきめ細かい配慮も見受けられます。
- (「大規模・高精度計算のノウハウを活かし、従来にはない大規模な福島環境動態シミュレーション 研究を主導。」について) 従来とはどの時点をさすのか、もう少し詳しい説明をお願いします。また主 導したとありますが、どのようなグループを主導されたかを示していただきたい。

(「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。」について)当初計画にこだわらない姿勢は大切だと思いますが、研究リソースの面で当初計画への影響はなかったか示していただきたい。

○開発したソフトウェアを公表し、研究コミュニティに提供することは重要であり、これを推進していることは大いに評価できる。

○OSS としての公開により、計算科学コミュニティへ大きく貢献している。

表 5.1 見込評価意見 (4/8)

○放射性物質の環境動態に係る連携

(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示す情報を「見える化」して広く一般に 提供。)

- ・地元住民、自治体等のニーズに応え、安心感の醸成に貢献。
- ・福島県の住宅地および森林における複雑な空間線量率の三次元分布を、実地形データを基に再現する シミュレーション技術を開発。土壌除染や地面被覆などの対策の効果を計算で評価可能とし2件のプレス発表を実施、住民の関心が高いテーマに関して科学的な知見を提供した。

○原子炉材料の脆化に係る連携

(材料脆化研究を産業分野テーマへ応用展開。)

・アルミ合金で問題となっていた水素脆化を防止する化合物を原子・分子シミュレーションと実験との 連携で発見、九州大学、富山大学と共同で特許出願した。

○AI 技術等の横断的展開

(量子多体系の物性計算に AI を導入するなど、新たな試みにも積極的に挑戦。)

・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)。

○地元住民、自治体等のニーズに応え、安心感の醸成に貢献することは重要であると考えます。ただし、 放射能汚染の実態とその影響には未解明な点が残されており、必ずしも適切なニーズとなっていると は限らないと考えます。これらのニーズが必ずしもに地元住民、自治体等のためになるとは限らない と考えます。ニーズに応えることに加え、科学的な知見を提供することによる安心感の醸成への貢献 も重要であると考えます。

○今後の森林の対策を実施するかどうかを検討する際にも有益なモデルとなると考えますので、顕著な成果の創出であったと思います。

(3) 他機関・部署との連携

機構内、機構外(国内、国外)とも年度平均20件程度(機構内21件、機構外19件)、多様な連携を展開した。

- ① 省通信型行列解法、複雑流体計算技術、In-Situ 可視化技術等の計算基盤技術を構築し、他機関・部署との連携を通じて、各課題解決に貢献した。
- ② 大規模原子シミュレーションによる物性評価技術を応用し、様々な材料を対象として他機関・部署との連携研究を推進、成果を創出した。
- ③ 実地形データを基に空間線量率分布を再現する詳細シミュレーション技術を開発し福島環境動態研究に貢献した。
- ④ 材料脆化に関する原子・分子シミュレーション技術を開発し、他機関・部署と連携した原子力材料や工業材料への応用で顕著な成果を創出した。

【成果最大化に向けた研究開発運営】

- ・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、一つの基盤技術開発が多くの課題に適用できるよう工夫した。
- ・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、研究開発を加速するとともに、計算科学の汎用性を踏まえ自主的な分野横断的技術の研究開発を奨励した。ここで、自主的に実施した研究からも高い成果(Nature Physics、Nature Communications等)が創出された。

【主な連携内容】

○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

・重元素化合物の物性評価で重要となる電子相関効果を効率的に計算する手法を MIT との連携で新たに開発し、未発見の物理現象の予言に成功。成果を Physical Review Letters に出版し 1 件のプレス

- ○放射性物質の環境動態の研究では、1F 事故後の環境修復に役立つものであり、連携研究として高く 評価できる。
- ○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。
- ○他機関との連携は適切に行われており、研究結果や知見の共有が適切に行われている。

- ○限られた原資での研究開発運営と成果最大化に向けた議論がなされ、着実に実施されており、効率的な運営が期待される。また、機構内外の連携にも積極的であり、連携を通した人材育成やニーズの発掘なども期待できる。
- ○素晴らしい取り組みだと思います。このような工夫は、誰が主導して、どのような議論の中で行われ たのか、参考として教えて頂きたいと思いました。
- ○連携で素晴らしい研究成果を上げていますが、中長期計画との関連性、連携研究の仕組みの簡単な説明をいただきたいと思います。

表 5.1 見込評価意見 (5/8)

発表を実施した。

・ミクロレベル計算技術をオープンソース化して公開、基盤技術の横断展開を行った(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)。

○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

- ・省通信型行列解法の開発により、機構内の原子力流体解析の性能向上に貢献するとともに、ポスト京 重点課題等における機構外の連携にも展開した。これにより「富岳」成果創出加速プログラムおよび 富岳早期利用課題が採択された。また、平成30年度に省通信型行列解法を含む行列計算ライブラリ PARCELをオープンソース化して公開した。令和3年度はPARCELにおける「富岳」向け機能拡張 を公開予定。
- ・複雑流体解析技術の開発により、機構内の原子力流体解析の精度向上に貢献するとともに、科研費等における機構外の連携にも展開した。また、開発した複雑流体解析コードを令和 3 年度に公開する (限定条件付機構外提供)予定。
- ・In-Situ 可視化技術を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。また、平成 30 年度に In-Situ 可視化システム In-Situ PBVR をオープンソース化して公開した。令和 3 年度は「富岳」向け機能拡張を公開予定。

○放射性物質の環境動態に係る連携

- ・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。
- ・環境動態に係るデータを政府や自治体、東京電力に提供、種々の対応策の検討に貢献した。

○原子炉材料の脆化に係る連携

- ・加速器駆動未臨界炉 (ADS) で問題となる液体金属脆化機構解明に向け、原子・分子シミュレーション技術を適用、脆化要因となる液体金属の共通特性を計算から見出すことで、機構解明に向けた実験 条件の絞り込みに成功した。
- ・一連の成果は原子力分野のみならず金属材料の分野でも注目され、学会での招待講演の依頼に応えている。連携の成果は Nature Communications, Scientific Reports など著名な学術誌にも掲載された。

○AI 技術等の横断的展開

- ・機械学習技術の高度化による横断展開強化を図るため理化学研究所革新知能統合研究センター (AIP) と連携し、核燃料等の重元素化合物や超伝導体の物性評価において必須となる電子の集団挙動を解析 する計算 (量子シミュレーション) に対し、機械学習で得た代理モデルを用いる超高速な計算手法(従来比:1000倍) を開発した。
- ・福島全域の空間線量率の経時変化の解析に機械学習技術を適用することで、空間線量率の減衰を特徴 づける複数の環境半減期の推定に成功した。

(4) 人材育成

従来の方針を見直しつつ若手研究者の育成を継続した。

- ・「研究者の自由な発想が重要」との認識の下、プロジェクト研究との違いも意識しつつ、研究者のモ チベーション向上や将来の原子力研究を牽引できる若手研究者の育成に組織的に取り組んだ。
- ・新卒職員、若手職員、中堅職員及びグループリーダークラスの各層に応じたキャリアパスを明確にするとともに、体系的な教育の充実を図った。
- ○人材育成に関して、若手研究者の国際会議への出席を奨励する制度を新たに創設したことは高く評価できる。また、多くの大学生・大学院生が夏期実習に参加したという実績についても、高く評価できる。
- ○人材育成に関しては、ジェンダーや国籍の多様性が確保され、良好な雰囲気のもとでコロナ禍のもとでも順調に展開されている旨の説明を受けた。これは大変好ましいことであり、高く評価される。人数のみではなく、こうした質的な部分についても自信をもって積極的に発信し、国内外で広く、多くの若手や学生が本センターでのインターンや勤務を希望するような状況を継続・発展させて、優秀な人材がいっそう活躍できるよう、引き続きご尽力賜りたい。

表 5.1 見込評価意見 (6/8)

・若手研究者に対し、積極的な国際会議での発表等を奨励した。 (※若手研究者:各年度における満年齢が39歳以下の研究者とする。)

項目	年度平均
研究者数	22 人
うち若手研究者数	10 人
割合	0.45

項目	年度平均
受賞件数	1.5 件
うち若手研究者件数	1.0 件
割合	0.67

項目	年度平均
国際会議発表件数	38 件
うち若手研究者件数	14 件
割合	0.37

- ・夏期実習生、特別研究生の受け入れ及び大学等への講師派遣による大学等における人材育成に協力した。
- ・機構のスパコンや計算コードを活用した研究現場体験により、原子力研究への関心を喚起する機会を 学生に提供するとともに、研究員派遣を通じて、将来の原子力研究開発人材の育成にも幅広く貢献し た。

項目	年度平均
夏期休暇実習性	4 人
特別研究生	1人
博士研究員・任期付研究員	3 人
客員研究員等派遣	10 人

- ○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。
- 原子力研究分野における AI 活用について横断的に柔軟に対応可能な資質を備えた人材育成に向けて、今後さらに充実を図っていただけるよう期待している。
- ○毎年研究者数の 2 倍程度の数の学術論文を発表されており、素晴らしいと思いますが、若手研究者に 限るとどのような傾向が見えるか示していただきたい。
- ○精力的・組織的に人材育成に取り組まれています。若手研究者に対し魅力がある研究所だと思います。 大学の学生に紹介したいと思います。

○人材育成の観点において、コロナ禍においても実習生の受け入れを行われたことは素晴らしいと思います。

オンラインの実習生というと困難もあったと思いますが、そのノウハウの公開も有益だと思います。

(5) 成果の社会実装

社会や産業界へ様々な展開を実施した。

- ・平成27年度から令和2年度までに、17件のソフトウェアについて公開あるいは情報更新した。
- ・プログラム等利用許諾収入として、平成27年度から令和2年度までの期間において、年度平均272百万円を得た。
- ・科学的知見の社会提供として、年度平均2件のプレス発表を実施した。主な事例として以下が挙げられる。
- ① 平成 28 年 3 月 6 日放映(平成 27 年 12 月 NHK 取材)NHK スペシャル"被曝の森~原発事故 5 年 目の記録~"

(福島研究開発部門と連携して解析した空間線量率の変遷を番組内で紹介)

② 平成 28 年 5 月 1 日放映 (平成 27 年 12 月 NHK 取材) NHK BS1 スペシャル "原発事故 5 年目の記録"

(平成28年3月6日に地上波で放映された"被曝の森~原発事故5年目の記録~"の拡大版、福島研究開発部門と連携して解析した空間線量率の変遷を番組内で紹介)

- ○マスコミ発表など、研究成果のアウトリーチの実績については、高く評価できる。
- ○多数のプレス発表や取材への情報提供を通して、研究成果を一般の方にわかりやすく説明することで、日本の研究機関における科学技術力や研究に対する理解を涵養することに大いに役立っている。
- ○多くの一般向けの発信が含まれており、具体的な社会課題の解決への貢献意欲も強く伺え、大変心強い。他方で、シミュレーション技術については、あたかも現象の全てを容易に理解することを可能にし、それに基づいて意思決定や行動を最適化・自動化できるという幻想が社会のなかでは根強いことにも留意が必要である。様々なリスクに囲まれた現代社会では、いよいよ、不確実性を排除するという動機でシミュレーションへの誤った依存が生じる素地が強く存在し、研究者・開発者が利害得失を正しく伝えながら社会での応用を図るようにしないと、望まない結果に帰結して時には損害を生じることにもなりかねない。

福島第一事故時に SPEEDI の活用が不首尾に終わり、その後、規制当局が今後の原子力災害においては同技術を活用しないと決定したことは強い教訓をもたらしている。

もちろん、政策担当者、事業者、一般市民等、社会の側のリテラシー向上も求められるが、やはり技術の可能性と限界の双方を最も深く知悉する研究者自身が積極的に活用の方途を発信し、他のステークホルダーとよい関係を構築して、共に技術を活かす方向性をつくり出すことが効果的だと考える。全てを研究者自身が引き受ける必要はなく、良好な協働関係ができればむしろ研究の推進にもつながると考えられるので、積極的な行動を期待したい。

表 5.1 見込評価意見 (7/8)

③ 平成30年7月13日

"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)

④ 平成30年9月4日 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」平成 30 年 10 月号 (No.127) pp.41-43 (Electronics 専門誌) に記事掲載) 本成果は、平成 29年 10 月 3 日付で、米国物理学会誌「Physical Review B」の「Rapid Communication」 セクションの オンライン版に掲載され、Physical Review B 編集者が選ぶ注目論文 "Editors' Suggestion" に選出された。

⑤ 令和2年7月10日

"スパコン上で時間発展する大規模な原子炉シミュレーションをリアルタイムに可視化ー可視化ソフトウェア「In-Situ PBVR」によって可視化処理を約 100 倍高速化ー"

(7月13日電気新聞、7月31日日刊工業新聞、8月2日ニュースイッチに掲載)

⑥ 令和3年1月28日

"リアルタイムで高精度な汚染物質拡散シミュレーションを世界で初めて実現ー都市構造物の詳細を捉え予測精度を大幅に向上ー"

(1月29日電気新聞、1月29日日刊工業新聞、1月31日ニュースイッチに掲載)

・主なイノベーションの創出として以下が挙げられる。

特許出願

① 「脆化研究の応用展開としての計算・実験の連携で開発したアルミ合金 水素脆化防止材」 (2020年6月、九州大学、富山大学との共同出願)

水素脆化が問題となっている航空用の高強度アルミ合金について、計算と実験により脆化機構を解明、脆化防止効果のある添加成分を発見し特許出願した。本特許に関しては現在企業との間で使用許諾契約について調整中。

民間との共同研究

- ① 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について、原子力安全研究協会と実施。
- ② In-Situ 可視化技術を応用した産業応用分野における CFD 解析の可視化に関して荏原製作所と実施

大学との共同研究

- ① 実時間汚染物質拡散解析技術を応用した都市街区、森林等における風況、汚染物質の評価に関して東京工業大学、北海道大学と実施。
- ② 省通信型反復行列解法を活用した燃料電池解析の高速化に関して東京大学と実施。

成長産業研究への貢献

① 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。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。日本原子力学会誌や OECD/NEA レポートなど記事や招待講演の依頼に応えている。連携の成果は Nature Communications など著名な学術誌にも掲載。

社会課題解決への貢献

① モニタリングデータの解析やシミュレーションを通して放射線量を含む環境影響等に係るデータや 資料を政府や東京電力に提供し、種々の対応策の検討に貢献。

放射線量マップや WEB サイトの整備等、研究開発成果のみえる化を進め、社会への発信を実施。

○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。

ソフトウェアの開発をはじめ、社会とのインターフェースにおいて十分に配慮した活動を積極的に展開している。

専門的知見がなければ理解しにくい内容について、いかに一般市民に伝えていくかのノウハウを十分に蓄積してこられている。そのノウハウの蓄積をさらなる社会貢献に向けて、何らかの形で発信することを期待する。

- ○プログラム等利用許諾収入の内訳と、その使い道を示していただきたい。
- ○原子力や汚染物質拡散に対する国民の関心は、東日本大震災の 10 年経過が近いこともあり、依然として高いと思われる。これらのアウトリーチ活動は重要で、評価できる。

○有益な貢献であったと考えます。公表出来ていない成果もあると思いますが、今後の公開についても 検討して頂きたく思っております。

表 5.1 見込評価意見 (8/8)

自己点検内容

- 1) 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にもと、研究開発は順調に進捗している。
- ① 炉内複雑現象解析に係る計算科学では、今年度までにミクロ・メゾ解析の知見をマクロ解析に取り入れる手法を構築、令和3年度にマクロ解析を実施し有効性を実証し中長期計画を達成する予定。さらに機械学習を応用した物性評価手法を確立し、これまでミクロ解析が困難であった融点付近の物性を評価可能とした。
- ② エクサスケール流体解析に向けた計算技術では、「富岳」、「Summit」等、世界最先端のアクセラレータ型スーパーコンピュータ向けの高性能計算技術を開発し、世界トップクラスの処理性能を有する複雑流体解析を構築した。これまでに都市街区の汚染物質拡散解析における実証解析を完了した。令和3年度は燃料集合体の気液二相流解析における実証解析を実施し、第3期中長期計画を完遂予定。
- 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。
- 2) 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にもと、アウトカムに向けた積極的な成果公開・普及の取組を実施した。
- 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
- 3) 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にもと、機構内、機構外 (国内、国外)とも 20 件程度と、多様な連携を展開した。
- ① 省通信型行列解法、複雑流体計算技術、In-Situ 可視化技術等の計算基盤技術を構築し、他機関・ 部署との連携を通じて、各課題解決に貢献した。
- ② 機械学習分子動力学コードを整備し他機関・部署に提供、連携研究により成果を創出した。
- ③ 実地形データを基に空間線量率分布を再現する詳細シミュレーション技術を開発し福島環境動態研究に貢献した。
- ④ 材料脆化モデル化手法を開発し他機関・部署と連携した原子力材料や工業材料への応用で顕著な成果を創出した。
- 4) 人材育成については、従来の方針を見直しつつ若手研究者の育成を継続した。
- 5) 成果の社会実装については、社会や産業界への様々な展開を実施した。

委員総合評価 (評価理由/ご意見)

- ○各論で提言した通り、研究組織として社会が奉じる価値に積極的に適合することや、社会との関係に おいてより能動的な関与を展開することについて、これまでの実績の土台のもと、いっそうの展開を 図ることを期待する。
- ○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。
- いずれも項目においても、当初の計画に基づきつつ、その最大化を実現している。AI技術等新たな技術の進展にタイムリーに対応しつつも、当初の基本軸からぶれることのない、手堅い実績をあげておられると思います。
- ○研究開発は順調に進捗していると思います。

特に、システム計算科学センターの持つ高度な数値シミュレーション技術と、大気拡散や福島の環境 回復などに適用してことは、顕著な成果の創出に繋がったものであると考えます。

論文執筆も十分で、効果的なプレスリリースも行えています。

若手研究者に加え、将来の若手研究者の育成に向けた実習生の受け入れをコロナ禍においても実施されていることは、コロナ禍で様々な機会を奪われている学生にとっても素晴らしいことであると思います。

○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関して、今年度までにミクロ・メゾスケールモデリングを組み込んだマクロ解析に向けた準備および検証は滞りなく進められており、令和3年度に計画しているマクロ解析をもって、中期計画を達成できると認められる。その間、多相共存流動状態でのミクロ・メゾスケール解析に機械学習を取り入れ、かつ超高速計算を可能とする開発を行った。また、これらで得られた成果の展開としても、放射性物質の環境動態解析や、特異な量子現象発現予言に成功するなど、特筆すべき成果を上げている。以上を鑑み、特に顕著な成果の創出や将来的な特別な成果の創出の期待等が認められる。

複雑現象シミュレーションのための基盤技術の研究に関しては、実行に必須の大規模高速計算に対応すべく省メモリ、省通信型手法を開発し、メニーコア CPU および GPU アクセラレータ型スパコンで世界最大級の大規模高速計算に成功している。また、将来エクサスケールシミュレーションの実現時に必要な超大規模データを In-situ で可視化できるソフトウェアを開発し、公開することで対応すべく、社会への還元も果たしている。以上を鑑み、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。

総合して、計算科学技術研究は、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特別な成果の創出の期待等が認められる。

○エクサスケール計算に向けたこれまでの研究は順調に成果を生みつつある。富岳の本格稼働に向けて の準備も順調で、今後の更なる成果を期待したい。

付録

令和2年度計算科学技術研究実績

This is a blank page.

令和2年度 計算科学技術研究実績

1. 査読有り研究論文、査読有り会議論文等

室	査読有り研究論文	査読有り会議論文	合計
高度計算機技術開発室	9	11	20
シミュレーション技術開発室	20	6	26
高性能計算技術利用推進室	0	1	1
合計	29	18	47

【高度計算機技術開発室】

<査読有り研究論文>

(1) Inagaki Atsushi, Wangsaputra Yovita, Kanda Manabu, Yücel Meral, Onodera Naoyuki, Aoki Takayuki,

"Inner and outer-layer similarity of the turbulence intensity profile over a realistic urban geometry",

SOLA (Scientific Online Letters on the Atmosphere) (Internet), Vol.16, pp.120-124 (2020).

(2) Kawai Chika, Idomura Yasuhiro, Ogawa Yuichi, Yamada Hiroshi,

"Self-organization of zonal flows and isotropic eddies in toroidal electron temperature gradient driven turbulence",

Physics of Plasmas, Vol.27, No.8, pp.082302_1-082302_11 (2020).

(3) Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Uesawa Shinichiro, Yamashita Susumu, Yoshida Hiroyuki,

"Locally mesh-refined lattice Boltzmann method for fuel debris air cooling analysis on GPU supercomputer",

Mechanical Engineering Journal (Internet), Vol.7, No.3, pp.19-00531_1-19-00531_10 (2020).

(4) Asahi Yuichi, Latu Guillaume, Bigot Julien, Maeyama Shinya, Grandgirard Virginie, Idomura Yasuhiro,

"Overlapping communications in gyrokinetic codes on accelerator-based platforms", Concurrency and Computation; Practice and Experience, Vol.32, No.5, pp.e5551_1-e5551_21 (2020).

(5) Kawamura Takuma, Idomura Yasuhiro,

"Improvement in interactive remote in situ visualization using SIMD-aware function parser and asynchronous data I/O",

Journal of Visualization, Vol.23, No.4, pp.695-706 (2020).

(6) Matsumoto Kazuya, Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Mayumi Akie, Yamada Susumu,

"Implementation and performance evaluation of a communication-avoiding GMRES method for stencil-based code on GPU cluster",

Journal of Supercomputing, Vol.75, No.12, pp.8115-8146 (2019).

(7) Sun Dajie, Wainwright Haruko M., Oroza Carlos A., Seki Akiyuki, Mikami Satoshi, Takemiya Hiroshi, Saito Kimiaki,

"Optimizing long-term monitoring of radiation air-dose rates after the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant",

Journal of Environmental Radioactivity, Vol.220-221, pp.106281_1-106281_8 (2020).

(8) Ohashi Kunihide, Hino Takanori, Kobayashi Hiroshi, Onodera Naoyuki, Sakamoto Nobuaki,

"Development of a structured overset Navier-Stokes solver with a moving grid and full multigrid method",

Journal of Marine Science and Technology, Vol.24, No.3, pp.884-901 (2019).

(9) Idomura Yasuhiro, Obrejan Kevin, Asahi Yuichi, Honda Mitsuru,

"Dynamics of enhanced neoclassical particle transport of tracer impurity ions in ion temperature gradient driven turbulence",

Physics of Plasmas, Vol.28, No.1, pp.012501_1-012501_11 (2021).

<査読無し研究論文>

(1) 青木 尊之, 長谷川 雄太,

"自転車競技の集団走行に対する大規模空力解析",

自動車技術, Vol.74, No.4, pp.18-23 (2020).

(2) 井戸村 泰宏, 小野寺 直幸, 山田 進, 山下 晋, 伊奈 拓也, 今村 俊幸, "大規模多相流体解析向け省通信型マルチグリッド前処理付き共役勾配法", スーパーコンピューティングニュース, Vol.22, No.5, pp.18-29 (2020).

<査読有り会議論文>

(1) Seki Akiyuki, Mayumi Akie, Murakami Haruko, Saito Kimiaki, Takemiya Hiroshi, Idomura Yasuhiro.

"Estimation of air dose rate using measurement results of monitoring posts in Fukushima Prefecture",

Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020)", pp.158-164 (2020).

(2) Idomura Yasuhiro, Ali Yussuf, Onodera Naoyuki, Ina Takuya, Imamura Toshiyuki, "Communication-avoiding Krylov solvers for extreme scale nuclear CFD simulations", Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020)",

pp.225-230 (2020).

(3) Hasegawa Yuta, Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro,

"Ensemble wind simulations using a mesh-refined lattice Boltzmann method on GPU-accelerated systems",

Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020)", pp.236-242 (2020).

(4) Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Ali Yussuf, Imamura Toshiyuki,

"Acceleration of fusion plasma turbulence simulations using the mixed-precision communication-avoiding Krylov method",

Proceedings of International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis (SC 2020) (Internet), "International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis (SC 2020)", pp.1318-1330 (2020).

- (5) Donnel Peter, Garbet Xavier, Sarazin Yanick, Asahi Yuichi, Wilczynski Fryderyk, Caschera Elisabett, Dif-Pradalier Guilhem, Ghendrih Phillppe, Gillot Camille, "Turbulent generation of poloidal asymmetries of the electric potential in a tokamak", Plasma Physics and Controlled Fusion, "45th European Physical Society Conference on Plasma Physics (EPS 2018)", Vol.61, No.1, pp.014003_1-014003_11 (2019).
- (6) Kawamura Takuma, Hasegawa Yuta, Idomura Yasuhiro, "Interactive In-situ Steering and Visualization of GPU-accelerated simulations using Particle-based Volume Rendering",

Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020)", pp.187-192 (2020).

(7) Yano Midori, Itoh Takayuki, Tanaka Yuusuke, Matsuoka Daisuke, Araki Fumiaki, Czauderna Tobias, Stephens Kingsley,

"Image-Based View Selection for Shape Comparison of Mode Water Regions in Virtual Reality Space",

Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020)", pp.201-208 (2020).

(8) Tabata Ginga, Sakamoto Naohisa, Kawamura Takuma,

"Intuitive interactions for immersive data exploring of numerical simulation results", Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020)", pp.193-200 (2020).

(9) Asahi Yuuichi, Latu Guillaume, Bigot Julien, Grandgirard Virginie,

"Performance portable implementation of a kinetic plasma simulation mini- app with a higher level abstraction and directives",

Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020)", pp.218-224 (2020).

(10) Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Ali Yussuf, Yamashita Susumu, Shimokawabe Takashi, Aoki Takayuki,

"GPU-acceleration of locally mesh allocated two phase flow solver for nuclear reactors",

Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020)", pp.210-215 (2020).

(11) Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Hasegawa Yuta, Yamashita Susumu, Shimokawabe Takashi, Aoki Takayuki,

"GPU acceleration of multigrid preconditioned conjugate gradient solver on blockstructured cartesian grid",

Proceedings of International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2021) (Internet), "International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2021)", pp.120-128 (2021).

<査読無し会議論文>

(1) 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を用いたアンサンブル風況解析",

第 25 回計算工学講演会論文集(CD-ROM), "第 25 回計算工学講演会", 4p. (2020).

(2) 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, Ali Yussuf, 下川辺 隆史, 青木 尊之,

"ブロック型適合細分化格子での Poisson 解法の GPU 高速化",

第 25 回計算工学講演会論文集(CD-ROM), "第 25 回計算工学講演会", 4p. (2020).

(3) 長谷川 雄太, 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏,

"格子ボルツマン法のアンサンブル計算に基づく汚染物質拡散解析",

第 34 回数値流体力学シンポジウム講演論文集(インターネット), "第 34 回数値流体力学シンポジウム", 3p. (2020).

(4) 井戸村 泰宏, 伊奈 拓也, Ali Yussuf, 今村 俊幸,

"富岳および Summit における核融合プラズマ流体解析の高速化",

- 第 34 回数値流体力学シンポジウム講演論文集(インターネット), "第 34 回数値流体力学シンポジウム", 6p. (2020).
- (5) 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 朝比 祐一, 長谷川 雄太, 下川辺 隆史, 青木 尊之, "ブロック型適合細分化格子での Poisson 解法の GPU・CPU・ARM プロセッサに対する性能測定",
 - 第 34 回数値流体力学シンポジウム講演論文集(インターネット), "第 34 回数値流体力学シンポジウム", 2p. (2020).
- (6) 河村 拓馬,
 - "粒子ベースによる対話的 In-Situ 可視化フレームワークを利用した対話的 In-Situ ステアリング"、
 - 第 34 回数値流体力学シンポジウム講演論文集(インターネット), "第 34 回数値流体力学シンポジウム", 3p. (2020).

【シミュレーション技術開発室】

<査読有り研究論文>

- (1) Bendo Artenis, Matsuda Kenji, Lervik Adrian, Tsuru Tomohito, Nishimura Katsuhiko, Nunomura Norio, Holmestad Randi, Marioara Calin Daniel, Shimizu Kazuyuki, Toda Hiroyuki, Yamaguchi Masatake,
 - "An Unreported precipitate orientation relationship in Al-Zn-Mg based alloys", Materials Caracterization, Vol.158, pp.109958_1-109958_7 (2019).
- (2) Kheirkhah Majid, Yan Zhongbo, Nagai Yuki, Marsiglio Frank,
 - "First- and second-order topological superconductivity and temperature-driven topological phase transitions in the extended Hubbard model with spin-orbit coupling",
 - Physical Review Letters, Vol.125, No.1, pp.017001_1-017001_8 (2020).
- (3) Suzudo Tomoaki, Takamizawa Hisashi, Nishiyama Yutaka, Caro Alfredo, Toyama Takeshi, Nagai Yasuyoshi,
 - "Atomistic modeling of hardening in spinodally-decomposed Fe-Cr binary alloys", Journal of Nuclear Materials, Vol.540, pp.152306_1-152306_10 (2020).
- (4) Nagasawa Makoto, Qin Hai-Bo, Yamaguchi Akiko, Takahashi Yoshio,
 "Local structure of rare earth elements (REE) in marine ferromanganese oxides by
 extended X-ray absorption fine structure and its comparison with REE in ion-
 - Chemistry Letters, Vol.49, No.8, pp.909-911 (2020).

adsorption type deposits",

- (5) Du Yufeng, Yoshida Kenta, Shimada Yusuke, Toyama Takeshi, Inoue Koji, Arakawa Kazuto, Suzudo Tomoaki, Milan Konstantinovic J., Gerard Robert, Onuki Somei, Nagai Yasuyoshi,
 - "In situ WB-STEM observation of dislocation loop behavior in reactor pressure vessel steel during post-irradiation annealing",

Materialia, Vol.12, pp.100778_1-100778_10 (2020).

(6) Ito Etsuko, Nagai Yuki,

"Sparse modeling approach to obtaining the shear viscosity from smeared correlation functions",

Journal of High Energy Physics (Internet), Vol.2020, No.7, pp.7 1-7 31 (2020).

(7) Nagai Yuki, Okumura Masahiko, Kobayashi Keita, Shiga Motoyuki,

"Self-learning hybrid Monte Carlo; A First-principles approach",

Physical Review B, Vol.102, No.4, pp.041124_1-041124_6 (2020).

(8) Kheirkhah Majid, Nagai Yuki, Chen Chun, Marsiglio Frank,

"Majorana corner flat bands in two-dimensional second-order topological superconductors",

Physical Review B, Vol.101, No.10, pp.104502_1-104502_9 (2020).

(9) Nagai Yuki, Okumura Masahiko, Tanaka Akinori,

"Self-learning Monte Carlo method with Behler-Parrinello neural networks",

Physical Review B, Vol.101, No.11, pp.115111_1-115111_12 (2020).

(10) Yan Lei, Yamamoto Yoshiyuki, Shiga Motoyuki, Sugino Osamu,

"Nuclear quantum effect for hydrogen adsorption on Pt(111)",

Physical Review B, Vol.101, No.16, pp.165414_1-165414_9 (2020).

(11) Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito, Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiro, Matsuda Kenji, Shimizu Kazuyuki, Toda Hiroyuki,

"Hydrogen trapping in Mg₂Si and Al₇FeCu₂ intermetallic compounds in aluminum alloy; First-principles calculations",

Materials Transactions, Vol.61, No.10, pp.1907-1911 (2020).

(12) Matsuda Kenji, Yasumoto Toru, Bendo Artenis, Tsuchiya Taiki, Lee Seungwon, Nishimura Katsuhiko, Nunomura Norio, Marioara Calin D., Lervik Adrian, Holmestad Randi, Toda Hiroyuki, Yamaguchi Masatake, Ikeda Kenichi, Homma Tomoyuki, Ikeno Susumu,

"Effect of copper addition on precipitation behavior near grain boundary in Al-Zn-Mg alloy",

Materials Transactions, Vol.60, No.8, pp.1688-1696 (2019).

(13) Suzudo Tomoaki, Ebihara Kenichi, Tsuru Tomohito,

"Brittle-fracture simulations of curved cleavage cracks in α-iron; A Molecular dynamics study",

AIP-Advances, Vol. 10, No. 11, pp. 115209_1-115209_8 (2020).

(14) Kobayashi Keita, Nakamura Hiroki, Yamaguchi Akiko, Itakura Mitsuhiro, Machida Masahiko, Okumura Masahiko,

"Machine learning potentials for tobermorite minerals",

Computational Materials Science, Vol.188, pp.110173_1-110173_14 (2021).

(15) Malins Alex, Imamura Naohiro, Niizato Tadafumi, Takahashi Junko, Kim M., Sakuma Kazuyuki, Shinomiya Yoshiki, Miura Satoru, Machida Masahiko,

"Calculations for ambient dose equivalent rates in nine forests in eastern Japan from ¹³⁴Cs and ¹³⁷Cs radioactivity measurements",

Journal of Environmental Radioactivity, Vol.226, pp.106456 1-106456 12 (2021).

(16) Ebihara Kenichi, Sugiyama Yuri, Matsumoto Ryosuke, Takai Kenichi, Suzudo Tomoaki,

"Numerical interpretation of hydrogen thermal desorption spectra for iron with hydrogen-enhanced strain-induced vacancies",

Metallurgical and Materials Transactions A, Vol.52, No.1, pp.257-269 (2021).

(17) Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake, Egusa Daisuke, Abe Eiji,

"Density functional theory study of solute cluster growth processes in Mg-Y-Zn LPSO alloys",

Acta Materialia, Vol.203, pp.116491_1-116491_9 (2021).

(18) Nagai Yuki, Qi Yang, Isobe Hiroki, Kozii Vladyslav, Fu Llang,

"DMFT reveals the non-Hermitian topology and Fermi arcs in heavy-fermion systems",

Physical Review Letters, Vol.125, No.22, pp.227204_1-227204_7 (2020).

(19) Saito Shimpei, De Rosis Alessandro, Fei Linlin, Luo Kai Hong, Ebihara Kenichi, Kaneko Akiko, Abe Yutaka,

"Lattice Boltzmann modeling and simulation of forced-convection boiling on a cylinder",

Physics of Fluids, Vol.33, No.2, pp.023307_1-023307_21 (2021).

(20) Shinaoka Hiroshi, Nagai Yuki,

"Sparse modeling of large-scale quantum impurity models with low symmetries", Physical Review B, Vol.103, No.4, pp.045120_1-045120_8 (2021).

<査読有り会議論文>

(1) Yamada Susumu, Machida Masahiko, Imamura Toshiyuki,

"High performance eigenvalue solver for Hubbard model; Tuning strategies for LOBPCG method on CUDA GPU",

Parallel Computing; Technology Trends, "International Conference on Parallel Computing (ParCo 2019)", pp.105-113 (2020).

(2) Yamada Susumu, Machida Masahiko, Kurikami Hiroshi,

"Applications of radiocesium migration models to Fukushima environmental issues: Numerical analysis of radiocesium transport in temperature-stratified reservoirs by 3D-Sea-SPEC",

Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), "Joint International Conference

on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020)", pp.140-146 (2020).

(3) Ebihara Kenichi, Suzudo Tomoaki,

"Molecular dynamics study of phosphorus migration in $\Sigma 5$ grain boundary of α iron",

Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020)", pp.65-69 (2020).

(4) Yamaguchi Akiko, Asano Ikumi, Kitagawa Yuri, Meng C., Nakao Atsushi, Okumura Masahiko,

"Quantitative evaluation of effects of isomorphic substitutions on delamination energies of clay minerals",

Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020)", pp.127-130 (2020).

(5) Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,

"Machine-learning molecular dynamics study of thermal properties of CaF₂",

Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020)", pp.104-108 (2020).

(6) Malins Alex, Ochi Kotaro, Machida Masahiko, Sanada Yukihisa,

"Simulation analysis of the Compton-to-peak method for quantifying radiocesium deposition quantities",

Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020)", pp.147-154 (2020).

<査読無し会議論文>

(1) Ebihara Kenichi, Suzudo Tomoaki,

"Molecular dynamics simulations of phosphorus migration in a grain boundary of α -iron",

TMS 2020; 149th Annual Meeting & Exhibition Supplemental Proceedings, "149th Annual Meeting & Exhibition (TMS 2020) ", pp.995-1002 (2020).

【高性能計算技術利用推進室】

<査読有り会議論文>

(1) Suzuki Yoshio, Otani Takayuki, Sakamoto Kensaku, Takakura Masahiro, Kuwabara Yasuhiro,

"JAEA activities related to the use of computer programs and databases in the nuclear field",

Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020)", pp.287-294 (2020).

【システム計算科学センター】

<査読無し研究論文>

(1) Machida Masahiko, Yamada Susumu, Iwata Ayako, Otosaka Shigeyoshi, Kobayashi Takuya, Watanabe Masahisa, Funasaka Hideyuki, Morita Takami,

"Seven-year temporal variation of caesium-137 discharge inventory from the port of Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant; Continuous monthly estimation of caesium-137 discharge in the period from April 2011 to June 2018",

Journal of Nuclear Science and Technology, Vol.57, No.8, pp.939-950 (2020).

2. 国際会議、国内会議での発表等

【高度計算機技術開発室】

<国際会議>

(1) Idomura Yasuhiro,

"Global full-f Gyrokinetic simulations of isotope scaling in ion temperature gradient driven turbulence",

4th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (AAPPS-DPP 2020), (Online, October 26-31, 2020).

(2) Hasegawa Yuta, Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro,

"Ensemble simulation for micro-meteorological wind condition using locally-mesh refined lattice Boltzmann method",

3rd International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems (COMPSAFE 2020), (Kobe (online), Japan, Dec. 8-11, 2020).

(3) Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Asahi Yuichi, Hasegawa Yuta, Shimokawabe Takashi, Aoki Takayuki,

"Multigrid Poisson solver for a block-structured adaptive mesh refinement method on CPU and GPU supercomputers",

3rd International Conference on Computational Engineering and Science for Safety

and Environmental Problems (COMPSAFE 2020), (Kobe (online), Japan, Dec. 8-11, 2020).

(4) Hatayama Sora, Shimokawabe Takashi, Onodera Naoyuki,

"Steady flow prediction across multiple regions using deep learning and boundary exchange",

3rd International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems (COMPSAFE 2020), (Kobe (online), Japan, Dec. 8-11, 2020).

(5) Asahi Yuichi, Latu G., Bigot Julien, Grandgirard Virginie,

"Accumulating knowledge for a performance portable kinetic plasma simulation code with Kokkos and directives",

IFERC Workshop on GPUs Programming 2020, (Rokkasho (online), Japan, Dec. 16, 2020).

(6) Shimokawabe Takashi, Onodera Naoyuki,

"High-resolution simulations using an AMR framework on GPU supercomputers", 3rd International Conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems (COMPSAFE 2020), (Kobe (online), Japan, Dec. 01, 2020).

<国内会議>

(1) 畑山 そら,下川辺 隆史,小野寺 直幸,

"畳み込みニューラルネットワークと境界交換を用いた複数領域にまたがる定常流のシミュレーション結果の予測",

第 25 回計算工学講演会, (北九州, 日本, 2020 年 6 月 10 日-12 日).

(2) 朝比 祐一, 前山 伸也, Latu Guillaume, Garbet Xavier, 渡邉 智彦, 青木 尊之, 荻野正雄,

"エクサスケールシステムへ向けたプラズマ乱流コードの現代化と高速化",

JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 12 回シンポジウム, (東京 (online), 日本, 2020 年 7 月 9 日).

- (3) 朝比 祐一,藤井 恵介, Dennis Manuel Heim, 前山 伸也,井戸村 泰宏, "主成分分析によるジャイロ運動論的シミュレーションの位相空間構造データの圧縮", 日本物理学会 2020 年秋季大会(素粒子,核物理,宇宙線・宇宙物理),(つくば(online),日本, 2020 年 9 月 14 日-17 日).
- (4) Murakami Haruko, Sun Dajie, Seki Akiyuki, Takemiya Hiroshi, Saito Kimiaki, "Bayesian hierarchical methods for spatiotemporal integration of radiation air dose rates",

日本原子力学会 2020 年秋の大会、(福岡(online)、日本、2020 年 9 月 16 日・18 日).

(5) 河村 拓馬, 長谷川 雄太,

"粒子ベース In-Situ 可視化フレームワークを利用したファイルベース制御による対話

的 In-Situ ステアリング",

第48回可視化情報シンポジウム, (鹿児島(online), 日本, 2020年9月24日-26日).

(6) Yang Antong, 矢野 緑里, 神山 翼, 伊藤 貴之,

"台風の影響を観察するための VR システム",

第48回可視化情報シンポジウム、(鹿児島(online)、日本、2020年9月24日-26日)。

(7) 河村 拓馬,

"ニューラルネットワークを使った偏微分方程式推定のための近似解法",

第11回横幹連合コンファレンス, (立川(online), 日本, 2020年10月8日-9日).

(8) 朝比 祐一,

"5次元分布関数時系列データの低次元表現",

プラズマ核融合学会第 37 回年会, (松山(online), 日本, 2020 年 12 月 1 日-4 日).

(9) 河村 拓馬,

"In-Situ 可視化ソフトウェア In-Situ PBVR の紹介",

JSS ユーザ説明会番外編, (online, 日本, 2020年10月1日).

(10) 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よる都市風況解析におけるアンサンブル計算の MPI 実 装"

日本原子力学会 2021 年春の年会, (東京(online)、日本, 2021 年 3 月 17 日-19 日).

(11) 矢野 緑里, 河村 拓馬, 長谷川 雄太, 井戸村 泰宏,

"汚染物質拡散解析の In-Situ アンサンブル可視化",

日本原子力学会 2021 年春の年会, (東京(online)、日本, 2021 年 3 月 17 日-19 日).

(12) 井戸村 泰宏, Obrejan Kevin, 朝比 祐一, 本多 充,

"イオン温度勾配駆動乱流と新古典粒子輸送の相互作用機構",

日本物理学会第76回年次大会, (online, 日本, 2021年3月17日-19日).

(13)小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 山下 晋, 長谷川 雄太, 下川辺 隆史, 青木 尊之,

"ブロック型適合細分化格子を用いた気液二相流体解析手法の開発",

日本原子力学会 2021 年春の年会, (東京(online), 日本, 2021 年 3 月 17 日-19 日).

【シミュレーション技術開発室】

<国際会議>

(1) Yamada Susumu, Machida Masahiko, Iwata Ayako, Otosaka Shigeyoshi, Kobayashi Takuya, Watanabe Masahisa, Funasaka Hideyuki, Morita Takami,

"Analysis of temporal variations of Cs-137 discharge inventory from the port of Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant over 9 years after the accident",

European Geosciences Union General Assembly 2020, (online, May 4-8, 2020).

(2) Kim Minsik, Malins Alex, Machida Masahiko, Saito Kimiaki, Hasegawa Yukihiro, Yanagi Hideaki,

"Development and application of the 3D Air Dose Rate Evaluation System (3DADRES)",

- Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC2020), (Chiba, Japan, (online) May 18-22, 2020).
- (3) Yamaguchi Akiko, Asano Ikumi, Kitagawa Yuri, Meng Chenrui, Nakao Atsushi, Okumura Masahiko,
 - "Quantitative evaluation of effects of isomorphic substitutions on delamination energies of clay minerals",
 - Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), (Chiba, Japan, (online) May 18-22, 2020).
- (4) Yamaguchi Masatake,
 - "Specificity of liquid metal embrittlement; First-principles calculations", Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), (Chiba, Japan, (online) May 18-22, 2020).
- (5) Suzudo Tomoaki, Fukumoto Kenichi,
 "Simulation of slip plane transition from {110} to {112} of body-centered-cubic metals",
 Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte
 Carlo 2020 (SNA + MC 2020), (Chiba, Japan, (online) May 18-22, 2020).
- (6) Itakura Mitsuhiro,
 - "Atomistic simulation to estimate liquid surface tension of nuclear materials", Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), (Chiba, Japan, (online) May 18-22, 2020).
- (7) Okumura Masahiko, Kobayashi Keita, Yamaguchi Akiko, Nakamura Hiroki, Itakura Mitsuhiro, Machida Masahiko,
 - "Machine learning molecular dynamics studies of clay minerals", 30th Goldschmidt Conference (Goldschmidt 2020), (Honolulu (online), U. S. A., Jun. 21-26, 2020).
- (8) Suzudo Tomoaki, Ebihara Kenichi, Tsuru Tomohito,
 "Cleavage and dislocation emissions in BCC iron; A Molecular dynamics study",
 GIMRT Joint International Symposium on Radiation Effects in Materials and
 Actinide Science (GIMRT-REMAS 2020), (Sendai (online), Japan, Sep. 30-Oct. 2, 2020).
- (9) Yamaguchi Akiko, Okumura Masahiko, Takahashi Yoshio, "Effects of ionic radius on adsorption structures of hard cations on clay minerals", 57th Annual Meeting of the Clay Minerals Society (CMS 2020), (Richland (online), U. S. A., October 18-23, 2020).
- (10) Okumura Masahiko,
 - "Mechanism of inhomogeneous concentration of Cs in 2:1 clay minerals; Systematic numerical studies",
 - 57th Annual Meeting of the Clay Minerals Society (CMS 2020), (Richland (online), U. S. A., October 18-23, 2020).

<国内会議>

(1) 海老原 健一, 関根 大貴, 高井 健一,

" α/γ 二相鋼の昇温脱離曲線に対する水素添加の影響の数値シミュレーションによる 考察".

日本鉄鋼協会第 176 回秋季講演大会, (仙台, 日本, 2018 年 9 月 19 日-21 日).

(2) 板倉 充洋, 山口 正剛,

"マグネシウム系 LPSO 合金析出物クラスタ中の格子間原子の安定性", 軽金属学会第 137 回秋期大会、(小金井、日本、2019 年 11 月 1 日-3 日).

(3) 永井 佑紀,

"精度保証された機械学習分子動力学法; 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法", ディープラーニングと物理学 2020(第1回), (柏(online), 日本, 2020年5月14日).

(4) 奥村 雅彦, 板倉 充洋,

"粘土鉱物の原子スケールキンク構造",

軽金属学会第 138 回春期大会, (高松, 日本, 2020 年 5 月 22 日-24 日).

(5) 板倉 充洋, 山口 正剛,

"マグネシウム基 LPSO 合金の溶質クラスタ生成過程のシミュレーション", 軽金属学会第 138 回春期大会, (高松, 日本, 2020 年 5 月 22 日-24 日).

- (6) Kim Minsik, Malins Alex, 町田 昌彦, 吉村 和也, 吉田 浩子, 斎藤 公明, "福島第一原子力発電所事故後の木造家屋内外の空間線量率分布の特徴について", 日本保健物理学会第53回研究発表会, (大阪(online), 日本, 2020年6月29日-30日).
- (7) 永井 佑紀,

"超伝導準結晶における磁束束縛状態",

日本物理学会 2020 年秋季大会(物性), (熊本(online), 日本, 2020 年 9 月 8 日-11 日).

(8) 山口 瑛子, 栗原 雄一, 桧垣 正吾, 奥村 雅彦, 高橋 嘉夫,

"環境中ラジウムの粘土鉱物への吸着と固定",

日本放射化学会第 64 回討論会(2020), (豊中(online), 日本, 2020 年 9 月 9 日-11 日).

(9) 海老原 健一, 杉山 優理, 高井 健一, 松本 龍介, 鈴土 知明,

"ひずみ誘起空孔を含む純鉄の水素熱脱離スペクトルの数値的考察",

日本鉄鋼協会第 180 回秋季講演大会, (online, 日本, 2020 年 9 月 16 日-18 日).

(10) Kim Minsik, Malins Alex, 町田 昌彦, 吉村 和也, 吉田 浩子, 斎藤 公明,

"福島における放射性物質分布調査,7; 家屋周囲の空間線量率の連続モニタリングによる遮蔽係数の検討",

日本原子力学会 2020 年秋の大会、(福岡(online)、日本、2020 年 9 月 16 日-18 日).

(11) 吉田 浩子, Kim Minsik, Malins Alex, 町田 昌彦, 吉村 和也,

"福島における放射性物質分布調査,6; 旧・現避難指示区域の木造住家での線量低減係数の経時変化",

日本原子力学会 2020 年秋の大会、(福岡(online)、日本、2020 年 9 月 16 日・18 日).

(12)中村 博樹, 町田 昌彦, 加藤 正人,

"模擬燃料物質 CaF2の機械学習分子動力学",

日本原子力学会 2020 年秋の大会, (福岡(online), 日本, 2020 年 9 月 16 日-18 日).

(13) 小林 恵太, 中村 博樹, 山口 瑛子, 板倉 充洋, 町田 昌彦, 奥村 雅彦,

"セメント水和物に対する機械学習分子動力学法による解析",

日本原子力学会 2020 年秋の大会、(福岡(online)、日本、2020 年 9 月 16 日・18 日).

(14) 板倉 充洋, 海老原 健一, 中村 博樹, 奥村 雅彦,

"原子力材料の固液界面の第一原理計算",

日本原子力学会 2020 年秋の大会、(福岡(online)、日本、2020 年 9 月 16 日-18 日).

(15) 山口 正剛, 都留 智仁, 海老原 健一, 板倉 充洋,

"アルミニウム合金中非整合界面の水素トラップエネルギーの第一原理計算",

軽金属学会第 139 回秋期大会, (日野(online), 日本, 2020 年 11 月 7 日-8 日).

(16) 山口 瑛子, 高橋 嘉夫, 奥村 雅彦,

"陽イオンの粘土鉱物への吸着構造の解明; 水の効果を含めた第一原理計算と XAFS 法 の相補的利用",

2020 年度日本地球化学会第 67 回オンライン年会, (online, 日本, 2020 年 11 月 19 日-21 日).

(17) Malins Alex,

"放射性崩壊計算用 Python パッケージ「radioactivedecay」の開発",

日本原子力学会 2021 年春の年会、(東京(online)、日本、2021 年 3 月 17 日・19 日).

(18) 板倉 充洋, 中村 博樹, 奥村 雅彦, 小林 恵太,

"デブリの特性に関する計算材料科学的研究",

日本原子力学会 2021 年春の年会, (東京(online), 日本, 2021 年 3 月 17 日-19 日).

(19) 鈴土 知明, 海老原 健一, 都留 智仁,

"BCC 鉄におけるへき開面と転位の射出; 分子動力学シミュレーション",

日本金属学会 2021 年春期(第 168 回)講演大会, (online, 日本, 2021 年 3 月 16 日-19 日).

(20) 高橋 嘉夫, 山口 瑛子, 奥村 雅彦, 河村 直己,

"HERFD-XANES によるセシウムやバリウムのソフト性の評価と天然試料中の化学結合状態解析",

第 58 回 SPring-8 先端利用技術ワークショップ, (online, 日本, 2021 年 3 月 23 日).

【システム計算科学センター】

<国際会議>

(1) Machida Masahiko, Yamada Susumu,

"Characteristic radiocesium transport in temperature-stratified reservoirs and port areas; Analysis by using a code, 3D-Sea Spec, developed for complex aquatic systems", European Geosciences Union General Assembly 2020, (online, May. 4-8, 2020).

<国内会議>

(1) 町田 昌彦, 岩田 亜矢子, 山田 進,

"福島第一原発港湾と福島沿岸における Cs-137 の環境動態と他核種との比較; データ分

析から見る事故以後9年間に渡る変化",

日本原子力学会 2020 年秋の大会, (福岡(online), 日本, 2020 年 9 月 16 日-18 日).

(2) 町田 昌彦, 岩田 亜矢子, 山田 進,

"福島第一原発港湾と福島沿岸におけるトリチウムの環境動態と他核種との比較; データ分析から見る事故以後9年間に渡る変化".

日本原子力学会 2021 年春の年会, (東京(online), 日本, 2021 年 3 月 17 日-19 日).

3. 技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

(1) 木村 英雄, 瀧田 勇人,

"RPA ソフトの機能調査及び機構業務への適用検討"

JAEA-Technology 2020-002, 50p.

(2) システム計算科学センター、

"令和元年度計算科学技術研究実績評価報告",

JAEA-Evaluation 2020-002, 37p.

(3) システム計算科学センター.

"大型計算機システム利用による研究成果報告集 令和元年度",

JAEA-Review 2020-021, 215p.

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

 河村拓馬,井戸村泰宏,"スパコン上で時間発展する大規模な原子炉シミュレーションを リアルタイムに可視化―可視化ソフトウェア「In-Situ PBVR」によって可視化処理を約 100 倍高速化―"(2020/7/10)

掲載:電気新聞(2020/7/13),

「スパコン 計算結果すぐに表示―原子力機構 事故解析効率化も―」

掲載:日刊工業新聞(2020/7/31),

「原子炉シミュレーション―スパコンで即時可視化―原子力機構」

掲載:ニュースイッチ(2020/8/2),

「スパコンで原子炉シミュレーション、温度や流れ場をリアルタイムで可視化」, https://newswitch.jp/p/23232 (accessed 2021/8/10).

・ 小野寺直幸,井戸村泰宏,長谷川雄太,"リアルタイムで高精度な汚染物質拡散シミュレーションを世界で初めて実現―都市構造物の詳細を捉え予測精度を大幅に向上―"

(2021/1/28)

掲載:日刊工業新聞(2021/1/29).

「汚染物質の拡散 即時予測 高精度・計算速度 10 倍 原子力機構など」

掲載:電気新聞(2021/1/29).

「汚染拡散 高精度に予測 -原子力機構 都市部向け新技術-」

掲載:ニュースイッチ(2021/1/31),

「スパコンで汚染物質拡散をリアルタイムで予測!計算速度が10倍以上に

一原子力機構などが開発一」,

https://newswitch.jp/p/25743 (accessed 2021/8/10).

掲載:「子供の科学」の WEB サイト KoKaNet(2021/3/1),

「世界初!高精度な大都市の汚染物質拡散シミュレーション」、

https://www.kodomonokagaku.com/read/14676/ (accessed 2021/8/10).

・ Alex Malins, 金敏植, 町田昌彦, "森林内の放射線量を決めている要因をシミュレーションにより解明―2017年以降、森林の放射線量の大半が土壌表層 5cm 内の放射性セシウムに由来することが判明―"(2021/1/20)

掲載:電気新聞(2021/1/21),

「福島・森林の放射線量、土壌表層のセシウム影響 原子力機構など解析」

・ 永井佑紀, "従来の量子力学概念を越えた先に見えた特異な現象「フェルミアーク」 一強く影響しあう多数の電子が重元素化合物内で奏でる特異なハーモニー"(2021/2/8)

掲載: 日刊工業新聞(2021/2/9)

「物質中の電子運動解析 原子力機構など、計算手法を開発」

5. 研究発表会等の開催

(1) 第 32 回 CCSE ワークショップ

「原子力デジタルツイン構築に向けた研究開発の現状と今後の展望」 2021年3月8日、オンライン

6. 受賞等

(1) 令和 2 年度軽金属論文賞

山口 正剛

(軽金属学会, 2020年11月)

(2) 日本原子力学会計算科学技術部会 (第 18 回) 部会業績賞 システム計算科学センター

(日本原子力学会 2021 年春の年会, 2021 年 3 月)

(3) 日本原子力学会計算科学技術部会(第 18 回)部会 CG 賞 板倉 充洋

(日本原子力学会 2021 年春の年会, 2021 年 3 月)

(4) 日本原子力学会計算科学技術部会(第18回)部会奨励賞 小野寺 直幸

(日本原子力学会 2021 年春の年会, 2021 年 3 月)

(5) 第71回金属組織写真賞・最優秀賞

山口 正剛

(日本金属学会, 2021年3月)

7. 特許等の状況

(1)特許の出願及び登録

出願: 脆化研究の応用展開としての計算・実験の連携で開発したアルミ合金水素脆化防止 材

(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	権利/契約種別	今年度収入額
	者)		
並列分子動力学ステンシ	株式会社 JSOL	プログラム著作権/	1,824,698 円
ル 他 2 件		利用許諾	

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	66,082 (9)				
シミュレーション技術開発室	52,147 (19)				
合計	118,229 (28)				

【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) 43,754 千円
- (2) 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) 8,648 千円
- (3) 核燃焼プラズマ閉じ込め物理の開拓、「富岳」成果創出加速プログラム(分担)(文部科学省) 6,680 千円
- (4) 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)) 1,950 千円
- (5) GPU スーパーコンピュータによる原子炉内溶融物の移行挙動解析 (日本学術振興会: 科研費 (基盤 C)) 1,430 千円
- (6) GPU スパコンを用いた都市風況解析の実時間アンサンブルデータ同化(日本学術振興会:科研費(研究活動スタート支援)) 1,430 千円
- (7) 都市歩行者レベルにおける大気環境の超解像評価システムの構築(日本学術振興会:科研費国際共同B(分担))(東京工業大学) 500千円
- (8) 大規模分散 GPGPU シミュレーションの対話的 In-Situ 可視化(日本学術振興会:科研費(基盤 C)) 1,300 千円
- (9) 次元削減技術を用いた 5 次元速度分布関数のダイナミクス解析(日本学術振興会:科研費(若手研究)) 390 千円

【シミュレーション技術開発室】

(1) 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) 682 千円

- (2) 革新的力学機能材料の創出に向けたナノスケール動的挙動と力学特性機構の解明(科学技術振興機構) 14,381 千円
- (3) ナノ〜マクロを繋ぐトモグラフィー: 界面の半自発的剥(科学技術振興機構) 13,080 千円
- (4) 金属被覆ジルコニウム合金型事故耐性燃料の開発(文部科学省) 854 千円
- (5) 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)) 650 千円
- (6) 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)) 780千円
- (7) 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)) 1,690 千円
- (8) 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)) 130千円
- (9) 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
- (10)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
- (11)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
- (12) 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)) 10,920 千円
- (13) 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)) 800千円
- (14) 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)) 2,000 千円
- (15) 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)) 1040 千円
- (16) 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)) 520 千円
- (17) 実験とシミュレーションによるラジウムの粘土鉱物への吸着構造の解明(日本学術振興会:科研費(研究活動スタート支援)) 1,430 千円
- (18) 準結晶における機械学習分子シミュレーション手法の確立とその有限温度物性の解明 (日本学術振興会:新学術領域研究(研究領域提案型)) 2080 千円
- (19) 超伝導固有ジョセフソン接合における多光子レーザー発振の実証(日本学術振興会:科研費(基盤 C)) 520千円

9. 産学官との連携に関連する事項

室	共同研究	委託研究	受託研究	研究協定
高度計算機技術開発室	4	0	3	0
シミュレーション技術開発室	8	0	2	0
システム計算科学センター	1	0	0	1
合計	13	0	5	1

●共同研究

【高度計算機技術開発室】

- (1) 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、神戸大学)
- (2) 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)
- (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(荏原製作所)
- (4) 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(2)(京都大学)

【シミュレーション技術開発室】

- (1) 大規模複雑人工物構造材料の劣化予測技術構築に関に関する研究(東京大学)
- (2) 水を反応場とするグリーンケミストリーの計算化学に関する研究(東京大学)
- (3) 放射性元素の環境中動態に関する研究(東京大学)
- (4) 機械学習分子動力学法を用いた天然変性ペプチドの物性評価研究(量子科学技術研究開発機構)
- (5)機械学習分子動力学法を用いた金属材料の物性評価研究(産業技術短期大学)
- (6) 核分裂生成析出物 (Pd-Rh-Ru 系合金) の水素吸蔵等の機能に関する計算科学研究 (東京都市大学)
- (7) 放射性元素の環境中動態に関する研究(東京大学、大阪大学)
- (8) 生体分子による放射性元素吸着現象の計算科学研究(自然科学研究機構分子科学研究所) 【システム計算科学センター】
- (1) 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)

●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) 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)
- (3) 「富岳」成果創出加速プログラム「核燃焼プラズマ閉じ込め物理の開拓」(名古屋大学)

【シミュレーション技術開発室】

- (1) 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)
- (2) 革新的力学機能材料の創出に向けたナノスケール動的挙動と力学特性機構の解明(科学技術振興機構)

●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 19 件に及ぶ原子力機構内連携を実施している(令和 2 年 9 月 4 日現在)。

【高度計算機技術開発室】

(1) 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(廃炉環境国際共同研究センター)

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。

(2) 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

(3) 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

(4) 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(廃炉環境国際共同研究センター)

概要:機械学習(深層学習)コード分析とその高速化

【シミュレーション技術開発室】

(1) 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(廃炉環境国際共同研究センター)、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。

(2) 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(廃炉環境国際共同研究センター)、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。

(3) 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(廃炉環境国際共同研究センター)

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。

(4) 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。

(5) 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(廃炉環境国際共同研究センター)

概要:機械学習(スパースモデリング・LASSO)技術を適用

(6) 1F 港湾・沿岸モニタリングデータからのインベントリー推定

部署:福島研究開発部門(廃炉環境国際共同研究センター)

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

(7) 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

(8) 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第一原理計算および機械学習分子動力学法を適用

(9) Cs 土壌・コンクリ浸透解析

部署:福島研究開発部門(廃炉環境国際共同研究センター)

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

(10)燃料デブリの機械的特性の計算

部署:廃炉環境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

【高性能計算技術利用推進室】

(1) FEMAXI-8 コードの高速化作業

部署:安全研究センター燃料安全研究 Gr.

概要: Intel Fortran (linux) での動作確認ならびに高速化・並列化を行う。

(2) PHITS の OpenMP 共有メモリ型並列計算の性能向上を目指した改良

部署:原子力基礎工学研究センター放射線挙動解析研究 Gr.

概要: OpenMP 並列計算の性能向上に向けたコード改良を行う。

(3) TPFIT-LPT の並列化作業

部署:原子力基礎工学研究センター熱流動技術開発 Gr.

概要:TPFIT-LPT に対して MPI 3 次元領域分割化の作業を行う。

(4) STEAMER コードの移植作業

部署:原子力基礎工学研究センター環境動態研究 Gr.

概要:緊急時海洋環境放射能評価システム STEAMER について、外部研究機関からの海沢予報データの受信、入力データの作成、海洋拡散シミュレーションの実行、計算結果の可視化ができる環境を現場の計算機からスパコンに移植する。

(5) LOHDIM-LES コードの移植作業

部署:原子力基礎工学研究センター環境動態研究 Gr.

概要: GPU 移植、改良及び動作確認を行う。

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) 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~)

(4) 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~)