令和４年１月28日
計算科学技術研究・評価委員会
参考２

平成28年度 計算科学技術研究実績

１．研究論文、査読付き会議論文等

室	研究論文	査読付き会議論文
システム計算科学センター	0	1
高度計算機技術開発室	6	8
シミュレーション技術開発室	25	2
合計	31	11

（平成29年３月31日現在）

【システム計算科学センター】

＜査読付き会議論文＞

・ Machida Masahiko, Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Sakuramoto Kazuhiro,
“First-principles calculation studies on cesium in environmental situations; Hydration structures and adsorption on clay minerals”,
Proceedings of Joint International Conference on Mathematics and Computation, Supercomputing in Nuclear Applications and the Monte Carlo Method (M&C + SNA + MC 2015) (CD-ROM), 12pages (2015)

【高度計算機技術開発室】

＜研究論文＞

・ Seki Akiyuki, Saito Osamu, Nago Harutaka, Suzuki Kenta, Tomishima Katsuya, Saito Kimiaki, Takemiya Hiroshi,
“Development of a software platform for providing environmental monitoring data for the Fukushima Daiichi nuclear accident”,
Radiation Protection Dosimetry, Vol.164, No.1-2, pp.97-102 (2015)

・ Kawamura Takuma, Idomura Yasuhiro, Miyamura Hiroko, Takemiya Hiroshi,
“Algebraic design of multi-dimensional transfer function using transfer function synthesizer”,
Journal of Visualization, pp.1-12 (2016)

・ Suzuki Yoshio, Kawakami Yoshiaki, Nakajima Norihiro,
“Investigation of error estimation method of observational data and comparison method between numerical and observational results toward V&V of seismic simulation”,
Mechanical Engineering Reviews, Vol.4, No.1, pp.1-18 (2017)

・ Kanno Ryutaro, Nunami Masanori, Satake Shinsuke, Matsuoka Seikichi, Takamaru Hisanori,
“Development of a drift-kinetic simulation code for estimating collisional transport affected by RMPs and radial electric field”,
Contributions to Plasma Physics, pp.1-11 (2016)

- Sugama Hideo, Matsuoka Seikichi, Satake Shinsuke, Kanno Ryutaro,
  “Radially local approximation of the drift kinetic equation”,
  Physics of Plasmas, pp.592-597 (2016)
- Idomura Yasuhiro,
  “A new hybrid kinetic electron model for full- f gyrokinetic simulations”,
  Journal of Computational Physics, Vol. 313, pp.511-531 (2016)

＜査読付き会議論文＞

- Wu H.-Y., Takahashi Shigeo, Miyamura Hiroko, Ozahata Satoshi, Nakao Akihiro,
  “Inferring partial orders of nodes for hierarchical network layout”,
  Electronic Imaging, Vol.2017, No.1, pp.118-130, (2017)
- Kawamura Takuma, Idomura Yasuhiro, Miyamura Hiroko, Takemiya Hiroshi,
  “Hands-on seminar of remote visualization system PBVR”,
  Proceedings of Siggraph Asia 2015 (2015)
- Kawamura Takuma, Idomura Yasuhiro, Miyamura Hiroko, Takemiya Hiroshi,
  “Multivariate volume rendering using transfer function synthesizer implemented in remote visualization system PBVR”,
  ACM Digital Library (2015)
- Choi B., Nishida Akemi, Nakajima Norihiro,
  “A Parametric study for the seismic response analysis of a nuclear reactor building by using a three-dimensional finite element model”,
  Proceedings of 24th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-24) (DVD-ROM), pp.1-7 (2016)
- Choi B., Nishida Akemi, Itoi Tatsuya, Takada Tsuyoshi, Furuya Osamu, Muta Hitoshi, Muramatsu Ken,
  “Reliability enhancement of seismic risk assessment of NPP as risk management fundamentals; Quantifying epistemic uncertainty in fragility assessment using expert opinions and sensitivity analysis”,
  Proceedings of 13th Probabilistic Safety Assessment and Management Conference (PSAM-13) (USB Flash Drive), pp.1-8 (2016)
- Kawamura Takuma, Noda Tomoyuki, Idomura Yasuhiro,
  “In-situ visual exploration of multivariate volume data based on particle based volume rendering”,
  Proceedings of International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis (SC 2016), pp.18-22 (2016)
- Mayumi Akie, Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki,
  “Left-preconditioned communication-avoiding conjugate gradient methods for multiphase CFD simulations on the K computer”,
  Proceedings of International Conference on High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis (SC 2016), pp.17-24 (2016)

- Matsuoka Seikichi, Satake Shinsuke, Idomura Yasuhiro, Imamura Toshiyuki,
  “Quality and performance of a pseudo-random number generator in massively parallel plasma particle simulations”,
  Proceedings of Joint International Conference on Mathematics and Computation, Supercomputing in Nuclear Applications and the Monte Carlo Method (M&C+SNA+MC 2015) (CD-ROM), 13 pages (2015)

【シミュレーション技術開発室】
＜研究論文＞

- Ruiz-Barragan S., Ishimura Kazuya, Shiga Motoyuki,
  “On the hierarchical parallelization of *ab initio* simulations”,
  Chemical Physics Letters, Vol.646, pp.130-135 (2016)
- Minoshima Yusuke, Seki Yusuke, Takayanagi Toshiyuki, Shiga Motoyuki,
  “Effects of temperature and isotopic substitution on electron attachment dynamics of guanine-cytosine base pair; Ring-polymer and classical molecular dynamics simulations”,
  Chemical Physics, Vol.472, pp.1-8 (2016)
- Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
  “High-temperature properties of thorium dioxide; A First-principles molecular dynamics study”,
  Journal of Nuclear Materials, Vol.478, pp.56-60 (2016)
- Noguchi Yoshifumi, Hiyama Miyabi, Shiga Motoyuki, Sugino Osamu, Akiyama Hidefumi,
  “Reverse stability of oxyluciferin isomers in aqueous solutions”,
  Journal of Physical Chemistry B, Vol.120, No.34, pp.8776-8783 (2016)
- Lammers L., Bourg I. C., Okumura Masahiko, Kolluri K., Sposito G., Machida Masahiko,
  “Molecular dynamics simulations of cesium adsorption on illite nanoparticles”,
  Journal of Colloid and Interface Science, Vol.490, pp.608-620 (2017)
- Kerisit S., Okumura Masahiko, Rosso K. M., Machida Masahiko,
  “Molecular simulation of cesium adsorption at the basal surface of phyllosilicate minerals”,
  Clays and Clay Minerals, Vol.64, No.4, pp.389-400 (2016)
- Ruiz-Barragan S., Ribas Ariño J., Shiga Motoyuki,
  “The Reaction mechanism of polyalcohol dehydration in hot pressurized water”,
  Physical Chemistry Chemical Physics, Vol.18, No.47, pp.32438-32447 (2016)
- Sasa Narimasa, Yamada Susumu, Machida Masahiko, Imamura Toshiyuki,
  “Accumulated error in iterative use of FFT”,
  Nonlinear Theory and Its Applications, IEICE (Internet), Vol.7, No.3, pp.354-361 (2016)
- Ebihara Kenichi, Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake,
  “Modeling of Phosphorus Transport by Interstitial Dumbbell in α-Iron Using

First-Principles-Based Kinetic Monte Carlo”,
Materials Transactions, Vol.58, No.1, pp.26-32 (2017)

- Malins A., Kurikami Hiroshi, Kitamura Akihiro, Machida Masahiko,
  “Effect of remediation parameters on in-air ambient dose equivalent rates when remediating open sites with radiocesium-contaminated soil”,
  Health Physics, Vol.111, No.4, pp.357-366 (2016)
- Higashi Yoichi, Nagai Yuki, Yoshida Tomohiro, Masaki Yusuke, Yanase Yoichi,
  “Robust zero-energy bound states around a pair-density-wave vortex core in locally noncentrosymmetric superconductors”,
  Physical Review B, Vol.93, No.10, pp.104529_1-104529_10 (2016)
- Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo, Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito,
  “Novel cross-slip mechanism of pyramidal screw dislocations in magnesium”,
  Physical Review Letters, Vol.116, No.22, pp.225501_1-225501_5 (2016)
- Shitade Atsuo, Nagai Yuki,
  “Orbital angular momentum in a topological superconductor with Chern number higher than 1”,
  Physical Review B, Vol.93, No.17, pp.174517_1-174517_9 (2016)
- Nagai Yuki, Nakamura Hiroki,
  “Multi-band Eilenberger theory of superconductivity; Systematic low-energy projection”,
  Journal of the Physical Society of Japan, Vol.85, No.7, pp.074707_1-074707_18 (2016)
- Nagai Yuki, Hoshino Shintaro, Ota Yukihiro,
  “Critical temperature enhancement of topological superconductors; A Dynamical mean-field study”,
  Physical Review B, Vol.93, No.22, pp.220505_1-220505_5 (2016)
- Smith E. D. B., Tanaka Kaori, Nagai Yuki,
  “Manifestation of chirality in the vortex lattice in a two-dimensional topological superconductor”,
  Physical Review B, Vol.94, No.6, pp.064515_1-064515_13 (2016)
- Kim H., Lin S.-Z., Graf M., Miyata Yoshinori, Nagai Yuki, Kato Takeo, Hasegawa Yukio,
  “Electrical conductivity through a single atomic step measured with the proximity-induced superconducting pair correlation”,
  Physical Review Letters, Vol.117, No.11, pp.116802_1-116802_5 (2016)
- Nagai Yuki, Ota Yukihiro,
  “Nuclear magnetic relaxation rates of unconventional superconductivity in doped topological insulators”,
  Physical Review B, Vol.94, No.13, pp.134516_1-134516_8 (2016)
- Sassi M., Rosso K. M., Okumura Masahiko, Machida Masahiko,
  “Radiation-damage resistance in phyllosilicate minerals from first principles and implications for radiocesium and strontium retention in soils”,

Clays and Clay Minerals, Vol.64, No.2, pp.108-114 (2016)

- Kobayashi Keita, Okumura Masahiko, Yamada Susumu, Machida Masahiko, Aoki Hideo, “Superconductivity in repulsively interacting fermions on a diamond chain; Flat-band-induced pairing”, Physical Review B, Vol.94, No.21, pp.214501_1-214501_7 (2016)
- Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake, Hasegawa Akira, “Migration of rhenium and osmium interstitials in tungsten”, Journal of Nuclear Materials, Vol.467, Part 1, pp.418-423 (2015)
- Suzudo Tomoaki, Hasegawa Akira, “Suppression of radiation-induced point defects by rhenium and osmium interstitials in tungsten”, Scientific Reports (Internet), Vol.6, pp.36738_1-36738_6 (2016)
- Nagai Yuki, Shinohara Yasushi, Futamura Yasunori, Sakurai Tetsuya, “Reduced-shifted conjugate-gradient method for a Green's function; Efficient numerical approach in a nano-structured superconductor”, Journal of the Physical Society of Japan, Vol.86, pp.014708_1-014708_9 (2017)
- Ota Yukihiro, Ruiz-Barragan S., Machida Masahiko, Shiga Motoyuki, “A Screened automated structural search with semiempirical methods”, Chemical Physics Letters, Vol.648, pp.119-123 (2016)
- Yonezawa Shingo, Tajiri Kengo, Nakata Suguru, Nagai Yuki, Wang Z., Segawa Koji, Ando Yoichi, Maeno Yoshiteru, “Thermodynamic evidence for nematic superconductivity in $Cu_xBi_2Se_3$”, Nature Physics, Advance Online Publication 10 October 2016 (*advance online publication articles have not yet been published in a journal issue)

＜査読付き会議論文＞

- Malins A., Okumura Masahiko, Machida Masahiko, Takemiya Hiroshi, Saito Kimiaki, “Fields of view for environmental radioactivity”, Proceedings of International Symposium on Radiological Issues for Fukushima's Revitalized Future, pp.28-34 (2015)
- Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki, Machida Masahiko, “High performance eigenvalue solver in exact-diagonalization method for Hubbard model on CUDA GPU”, Parallel Computing: On the Road to Exascale; Advances in Parallel Computing, Vol.27, pp.361-369 (2016)

２．国際会議、国内会議での発表等

【システム計算科学センター】

＜査読無し論文＞

- 中島 憲宏、西田 明美、沢 和弘、飯垣 和彦、宮村 浩子、

「原子力プラントの地震応答解析と可視化」
可視化情報全国講演会講演論文集、No.U00052, pp.1-4 (2016)

＜口頭発表＞

・ 中島 憲宏、
「アブダクションによるデータ解析」
日本原子力学会 2017 年春の年会、(平塚、日本、2017 年 3 月 27 日～29 日)

・ Machida Masahiko, Nakamura Hiroki,
“First-principles molecular dynamics study of high-temperature properties of thorium dioxide”,
Nuclear Materials Conference 2016 (NuMat 2016), (Montpellier, France, November 7-10, 2016)

【高度計算機技術開発室】

＜査読無し論文＞

・ 西田 明美、
「フラジリティ評価における認識論的不確実さの評価に関する検討,2; 建屋・地盤等に関する検討」
地震リスク評価に関するワークショップ 2013 資料集、pp.48-62 (2013)

・ 河村 拓馬、
「オープンソース遠隔可視化ソフトウェア PBVR」
計算工学ナビ・ニュースレター、Vol.7, pp.4-5 (2015)

・ 宮村 浩子, 武宮 博, Wu, H.-Y., 高橋 成雄,
「環境モニタリングデータの詳細度制御」
可視化情報学会誌、Vol.36, No.143, pp.152-156 (2016)

＜口頭発表＞

・ 鈴木 喜雄,
「原子力施設全体規模の地震時挙動解析に向けた要素毎有限要素接触解析手法; 固着問題での検証」
日本原子力学会 2017 年春の年会、(平塚、日本、2017 年 3 月 27 日～29 日)

・ 崔 炳賢, 西田 明美, Guo Z., 村松 健, 高田 毅士,
「多様な地震波による原子力施設の地震応答解析結果におけるばらつき評価」
日本原子力学会 2017 年春の年会、(平塚、日本、2017 年 3 月 27 日～29 日)

・ Guo Z., 西田 明美, 中島 憲宏,
「大型プラント等の次世代耐震解析技術に関する研究」
日本原子力学会 2017 年春の年会、(平塚、日本、2017 年 3 月 27 日～29 日)

・ 西田 明美, 崔 炳賢, Guo Z., 高田 毅士,
「原子力プラントの包括的安全性向上のための地震時クリフエッジ回避技術の開発-建屋システムの検討-」
日本原子力学会 2017 年春の年会、(平塚、日本、2017 年 3 月 27 日～29 日)

- 河村 拓馬，野田 智之，井戸村 泰宏，
  「可視化用粒子データを用いた燃料溶融シミュレーションの対話的 In-Situ 可視化」
  日本原子力学会 2017 年春の年会、(平塚、日本、2017 年 3 月 27 日～29 日)
- 真弓 明恵，井戸村 泰宏，伊奈 拓也，山田 進，今村 俊幸，
  「多相流体コード JUPITER における前処理付き省通信 CG 法ソルバの開発」
  日本原子力学会 2017 年春の年会、(平塚、日本、2017 年 3 月 27 日～29 日)
- 宮村 浩子，冠城 雅晃，佐藤 優樹，河村 拓馬，井戸村 泰宏，鳥居 建男，
  「小型・軽量コンプトンカメラを用いた遠隔放射線イメージング技術の開発,3；コンプトンカメラデータを用いた 3 次元線源分布再構成に関する検討」
  日本原子力学会 2017 年春の年会、(平塚、日本、2017 年 3 月 27 日～29 日)
- 関 暁之，鈴木 健太，高橋 義知，松原 武史，首藤 重雄，斎藤 公明，武宮 博，
  「環境モニタリングデータ情報発信システムの構築」
  日本原子力学会 2017 年春の年会、(平塚、日本、2017 年 3 月 27 日～29 日)
- 井戸村 泰宏，
  「イオン温度勾配駆動捕捉電子モード乱流の電子変調加熱数値実験」
  日本物理学会第 72 回年次大会、(豊中、日本、2017 年 3 月 17 日～20 日)
- 松岡 清吉，井戸村 泰宏，佐竹 真介，
  「3 次元磁場平衡における大域的 full-f ジャイロ運動論シミュレーショ ンコードの開発」
  日本物理学会第 72 回年次大会、(豊中、日本、2017 年 3 月 17 日～20 日)
- Idomura Yasuhiro,
  “Development of gyrokinetic toroidal 5D full-f Eulerian code GT5D on Helios and K-computer”,
  5th IFERC-CSC Review Meeting, (Rokkasho, Japan, March, 2017)
- Mayumi Akie, Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki,
  “Left-preconditioned communication avoiding CG solver for multiphase CFD code JUPITER”,
  7th AICS International Symposium, (Kobe, Japan, February 23-24, 2017)
- 宮村 浩子，冠城 雅晃，佐藤 優樹，河村 拓馬，井戸村 泰宏，鳥居 建男，
  「小型・軽量コンプトンカメラを用いた遠隔放射線イメージング技術の開発」
  第 29 回 CCSE ワークショップ、(東京、日本、2017 年 2 月 14 日)
- 関 暁之，鈴木 健太，高橋 義知，松原 武史，首藤 重雄，斎藤 公明，武宮 博，村上 治子，
  「放射性物質モニタリングデータベースの現状」
  第 29 回 CCSE ワークショップ、(東京、日本、2017 年 2 月 14 日)
- 松岡 清吉，井戸村 泰宏，佐竹 真介，
  「摂動磁場による新古典粘性の衝突周波数依存性についての大域的運動論シミュレーション研究」
  第 6 回 IFERC-CSC 研究会、(東京、日本、2017 年 1 月)
- 朝比 祐一，Grandgirard, V.，井戸村 泰宏，Sarazin Y.，Latu, G.，Garbet, X.，

「BMTFF の研究成果」
第 6 回 IFERC-CSC 研究会、(東京、日本、2017 年 1 月)

- 井戸村 泰宏, 松岡 清吉, 伊奈 拓也, Garbet, X., Brunner, S., Villard, L., 河合 智賀,
「GT5DISO の研究成果」
第 6 回 IFERC-CSC 研究会、(東京、日本、2017 年 1 月)
- 松岡 清吉, 井戸村 泰宏,
「3 次元平衡版 GT5D コード開発の現状」
閉じ込め・輸送研究会 2016、(土岐、日本、2016 年 12 月 14 日～16 日)
- Idomura Yasuhiro,
"Progress of full-f gyrokinetic simulations including kinetic electrons",
13th Asia Pacific Physics Conference and 22nd Australian Institute of Physics Congress, (Brisbane, Australia, December 4-8, 2016)
- Asahi Yuichi, Latu G., Ina Takuya, Idomura Yasuhiro, Grandgirard V., Garbet X.
"Acceleration of stencil-based fusion kernels",
Accelerators for Fusion Workshop, (Saclay, France, November, 2016)
- 松岡 清吉, 井戸村 泰宏, 佐竹 真介,
「摂動バウンス粒子軌道共鳴による新古典トロイダル粘性」
第 33 回プラズマ・核融合学会年会、(仙台、日本、2016 年 11 月 29 日～12 月 2 日)
- 井戸村 泰宏、
「ITG-TEM 乱流の電子変調加熱数値実験における粒子輸送と運動量輸送の解析」
第 33 回プラズマ・核融合学会年会、(仙台、日本、2016 年 11 月 29 日～12 月 2 日)
- Idomura Yasuhiro,
"Full-f gyrokinetic simulations on rotation changes induced by electron heating modulation",
17th ITPA Transport and Confinement Topical Group Meeting, (Naka, Japan, October 24-27, 2016)
- Matsuoka Seikichi, Idomura Yasuhiro, Satake Shinsuke,
"Global kinetic effect on the collisionality dependence of the neoclassical toroidal viscosity in the superbanana-plateau regime",
26th IAEA Fusion Energy Conference, (Kyoto, Japan, October 17-22, 2016)
- Idomura Yasuhiro, Asahi Yuichi, Hayashi Nobuhiko, Urano Hajime,
"Full-f gyrokinetic simulation including kinetic electrons",
26th IAEA Fusion Energy Conference, (Kyoto, Japan, October 17-22, 2016)
- Asahi Yuichi, Garbet X., Idomura Yasuhiro, Grandgirard V., Latu G., Sarazin Y., Dif-Pradalier G., Donnel P., Ehrlacher C., Passeron Ch.,
"Benchmarking of global full-f gyrokinetic codes",
NUMKIN 2016: International Workshop on Numerical Methods for Kinetic Equations, (Strasbourg, France, October 17-21, 2016)
- Guo Z., 西田 明美, 崔 炳賢, 中島 憲宏

「大規模分散データの前処理による並列可視化の高速化」
可視化情報全国講演会；日立 2016、(日立、日本、2016 年 10 月 8 日～9 日)

- 真弓 明恵，井戸村 泰宏，山田 進，伊奈 拓也，山下 晋，
「多相流体問題における省通信 Krylov 部分空間法の性能評価」
日本原子力学会 2016 年秋の大会、(久留米、日本、2016 年 9 月 7 日～9 日)
- 崔 炳賢，西田 明美，郭 智宏，山野 秀将，高田 毅士，
「原子力プラントの包括的安全性向上のための地震時クリフエッジ回避技術の開発その 2:建屋システムと原子炉容器・配管の検討」
日本原子力学会 2016 年秋の大会、(久留米、日本、2016 年 9 月 7 日～9 日)
- Guo Z.，崔 炳賢，西田 明美，中島 憲宏、
「原子力施設の耐震評価のための組立構造解析結果の大規模分散並列可視化」
日本原子力学会 2016 年秋の大会、(久留米、日本、2016 年 9 月 7 日～9 日)
- 松本 和也，朝比 祐一，伊奈 拓也，井戸村 泰宏、
「核融合シミュレーションコードの GPU クラスタにおける高性能実装」
日本原子力学会 2016 年秋の大会、(久留米、日本、2016 年 9 月 7 日～9 日)
- Idomura Yasuhiro,
“Full-f gyrokinetic simulations on rotation changes induced by electron heating modulation”,
21st EU-US Transport Task Force Meeting, (Leysin, Switzerland, September 5-8, 2016)
- Matsuoka Seikichi, Idomura Yasuhiro,
“Full-f gyrokinetic simulations in three-dimensional plasma equilibrium”,
21st EU-US Transport Task Force Meeting, (Leysin, Switzerland, September 5-8, 2016)
- 崔 炳賢，西田 明美，
「原子力施設の地震観測記録の分析および地震応答解析モデルの妥当性評価」
日本建築学会大会、(福岡、日本、2016 年 8 月 24 日～26 日)
- Idomura Yasuhiro,
“Progress of full-f gyrokinetic simulations including a new hybrid kinetic electron model”,
US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on Innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing, (Oak Ridge, US, August 16-20, 2016)
- 井戸村 泰宏、
「核融合プラズマ解析コード開発の計画と状況」
ポスト京重点課題 6、8 アプリケーション連携開発会議、(東京、日本、2016 年 7 月 6 日)
- 真弓 明恵，井戸村 泰宏，山田 進，伊奈 拓也，山下 晋，
「多相流体問題への省通信 GMRES 法の適用性評価」
2016 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS 2016)、(仙台、日本、2016 年 6 月 6 日～7 日)
- Wu H.-Y.，高橋 成雄，宮村 浩子，大坐畠 智，中尾 彰宏、
「視覚分析のための P2P ネットワーク階層最適化」

電子情報通信学会 2016 年総合大会、(福岡、日本、2016 年 3 月 15 日～18 日)

【シミュレーション技術開発室】

＜査読無し論文＞

・ 海老原 健一, 齋藤 圭, 高井 健一、
「焼き戻しマルテンサイト鋼の水素昇温脱離曲線の実験データに基づく数値的再現」
「水素脆化の基本要因、解析と評価」シンポジウム予稿集、pp.27-33 (2015)

・ 海老原 健一, 山口 正剛, 都留 智仁, 板倉 充洋、
「純アルミニウムにおける水素昇温脱離スペクトルの数値シミュレーションによる考察」
軽金属学会第 131 回秋期大会概要集、pp.271-272 (2016)

・ 海老原 健一, 齋藤 圭, 高井 健一,
「空孔型欠陥トラップサイトの変化を考慮した水素昇温脱離モデリングの検討」
「水素脆化の基本要因と特性評価研究会中間報告会」シンポジウム予稿集(USB Flash Drive)、pp.30-35 (2016)

＜口頭発表＞

・ Malins A.、町田 昌彦、仁井田 浩二,
“Adjoint photon transport in PHITS”,
日本原子力学会 2017 年春の年会、(平塚、日本、2017 年 3 月 27 日～29 日)

・ 中村 博樹, 町田 昌彦,
「第一原理計算による MOX 燃料の物性評価」
日本原子力学会 2017 年春の年会、(平塚、日本、2017 年 3 月 27 日～29 日)

・ 山田 進, 町田 昌彦, 渡辺 将久,
「福島第一原子力発電所港湾内放射性核種の動態解析,2; シグマ座標系 3 次元シミュレーションによる海水流動場シミュレーション」
日本原子力学会 2017 年春の年会、(平塚、日本、2017 年 3 月 27 日～29 日)

・ 佐々 成正,
「運動量、角運動量、エネルギーの同時保存スキーム」
第 13 回日本応用数理学会研究部会連合発表会、(調布、日本、2017 年 3 月 6 日～7 日)

・ Suzudo Tomoaki, Nagai Yasuyoshi, Alfredo Caro,
“Atomistic modeling of hardening in thermally-aged Fe-Cr binary alloys”,
TMS2017 146th Annual Meeting & Exhibition, (San Diego, USA, February 26 - March 2, 2017)

・ Ebihara Kenichi, Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake,
“Numerical Estimation of Phosphorus Transport for Different Migration Modes in α-iron”,
TMS2017 146th Annual Meeting & Exhibition, (San Diego, USA, February 26 - March 2, 2017)

・ 山田 進,
「水圏における放射性物質動態評価シミュレーション技術の開発」

第29回CCSEワークショップ、(東京、日本、2017年2月14日)

- Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
  "Numerical studies of radiocesium adsorption to micaceous clay minerals; Basal surfaces, edges, frayed edges, and interlayer sites",
  REIMEI International Workshop; Radionuclides Remediation and Clean-Up, (Nantes, France, February 9-10, 2017)
- Itakura Mitsuhiro, Okita Taira,
  "First-Principles Calculation of Hydrogen Absorption to a Planar Vacancy Cluster in Zirconium",
  MRS 2016 fall meeting, (Boston, USA, November 27- December 2, 2016)
- Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko, Shimoyama Iwao,
  "Density functional theory study of cesium adsorption to micaceous clay minerals",
  3rd Asian Clay Conference 2016 (ACC 2016), (Guangzhou, China, November 17-20, 2016)
- Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
  "A First-principles study on thermal conductivity of actinide dioxides",
  Nuclear Materials Conference 2016 (NuMat 2016), (Montpellier, France, November 7-10, 2016)
- 山口 正剛, 海老原 健一, 都留 智仁, 板倉 充洋,
  「Al結晶粒界及び析出物界面の水素偏析による凝集エネルギー低下; 第一原理計算」
  日本軽金属学会第131回秋期大会、(水戸、日本、2016年11月5日～6日)　C29
- 山田 進, 北村 哲浩, 中西 貴宏, 佐久間 一幸, 町田 昌彦,
  「計算機シミュレーションによる請戸川河口付近における放射性物質が付着した土砂の移動予測」
  日本陸水学会第81回大会、(西原、日本、2016年11月3日～6日)
- Shiga Motoyuki,
  "A QM/MM method for open boundary systems",
  4th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2016), (Shanghai, China, October23-26, 2016)
- 板倉 充洋, 山口 正剛, 都留 智仁,
  「マグネシウム錐面らせん転位の新奇な交叉すべり」
  日本金属学会2016年秋期(第159回)講演大会、(豊中、日本、2016年9月21日～23日)
- 山口 正剛, 海老原 健一, 板倉 充洋, 都留 智仁,
  「アルミニウム結晶粒界の水素偏析による凝集エネルギー低下; 第一原理計算」
  日本金属学会2016年秋期(第159回)講演大会、(豊中、日本、2016年9月21日～23日)
- 永井 佑紀, 太田 幸宏,
  「ドープされたトポロジカル絶縁体の超伝導状態での核磁気緩和率の理論的解析」
  日本物理学会2016年秋季大会(物性)、(金沢、日本、2016年9月13日～16日)
- 永井 佑紀, 篠原 康, 山田 進, 二村 保徳, 今村 俊幸, 櫻井 鉄也,
  「動的平均場理論に対する、LOBPCG法とshifted COCG法を用いた厳密対角化ソルバー」
  日本物理学会2016年秋季大会(物性)、(金沢、日本、2016年9月13日～16日)

- 永井 佑紀, 篠原 康, 二村 保徳, 櫻井 鉄也,
  「Shifted CG 法を用いた超伝導自己無撞着平均場計算の実空間高速解法」
  日本物理学会 2016 年秋季大会(物性)、(金沢、日本、2016 年 9 月 13 日～16 日)
- 佐々 成正、
  「エネルギー保存スキームにおける運動量保存則」
  日本応用数理学会 2016 年度年会、(北九州、日本、2016 年 9 月 12 日～14 日)
- 山田 進, 町田 昌彦, 渡辺 将久,
  「福島第一原子力発電所港湾内における放射性核種の動態評価:(2)3 次元流体モデルによる海水流動場シミュレーション」
  日本原子力学会 2016 年秋の大会、(久留米、日本、2016 年 9 月 7 日～9 日)
- 中村 博樹, 町田 昌彦,
  「第一原理計算による核燃料の熱伝導率評価」
  日本原子力学会 2016 年秋の大会、(久留米、日本、2016 年 9 月 7 日～9 日)
- 板倉 充洋, 沖田 泰良,
  「ジルコニウム中溶質元素の第一原理計算」
  日本原子力学会 2016 年秋の大会、(久留米、日本、2016 年 9 月 7 日～9 日)
- 町田 昌彦, 山田 進, 渡辺 将久,
  「福島第一原子力発電所港湾における放射性核種の動態評価,1; モニタリングデータ分析による各核種の挙動」
  日本原子力学会 2016 年秋の大会、(久留米、日本、2016 年 9 月 7 日～9 日)
- Shiga Motoyuki,
  “Exploration of Rare Events Based on Ab Initio Simulations”,
  2016 International Workshop on Frontiers in Molecular Biophysics, (Shanghai, China, July 23-25, 2016)
- Malins A., Kurikami Hiroshi, Nakama Shigeo, Machida Masahiko, Kitamura Akihiro,
  “Open Sites with Radiocesium Contaminated Soil: Evaluating Dose Rates and Remediation Strategies”,
  61st Annual Health Physics Society Meeting, (Spokane, USA, July 17-21, 2016)
- Malins, A., 操上 広志, 北村 哲浩, 町田 昌彦,
  「H*(10)空間線量率に関する除染評価シミュレーション」
  第 5 回研究発表会、(福島、日本、2016 年 7 月 6 日～7 日)
- Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
  “Numerical studies of effects of microscopic structure on affinity of clay minerals to cesium ion”,
  Goldschmidt 2016, (Yokohama, Japan, June 26-July 1, 2016)
- Malins A., Sakuma Kazuyuki, Nakanishi Takahiro, Machida Masahiko, Kitamura Akihiro,
  “The Effect of 2015 Typhoon Etau on Radiation Dose Rates in River Basins Surrounding Fukushima Daiichi”,
  Goldschmidt 2016, (Yokohama, Japan, June 26-July 1, 2016)
- Suzudo Tomoaki, Tsuru Tomohito, Hasegawa Akira,

“Effect of Re and Os in W under irradiation: comparison between numerical and experimental results”,
MoD-PMI 2016, (Loughborough, United Kingdom, June 22-24 2016)

- Hirota Yusuke, Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki, Sasa Narimasa, Machida Masahiko,
  “Performance of Quadruple Precision Eigenvalue Solver Libraries QPEigenK and QPEigenG on the K Computer”,
  ISC High Performance Conference 2016 (ISC 2016) (Frankfurt, Germany, June 19-23, 2016)
- Shiga Motoyuki,
  “A Theoretical Study of Hexanediol Dehydration Reaction”,
  32nd Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics, (Saitama, Japan, June 1-3, 2016)
- 志賀 基之、
  「高温水における多価アルコール脱水反応に関する理論的研究」
  第 19 回理論化学討論会、(東京、日本、2016 年 5 月 23 日～25 日)
- Malins, A.,
  “Calculating Dose Rates in Various Settings after the Fukushima Nuclear Disaster”,
  Scottish Universities Environmental Research Centre Seminar Series, (East Kilbride, United Kingdom, May 3, 2016)
- Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki, Machida Masahiko,
  “High performance eigenvalue solver for Hubbard model on CPU-GPU hybrid platform”,
  17th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP16), (Paris, France, April 12-15, 2016)
- Yamada Susumu, Idomura Yasuhiro, Imamura Toshiyuki, Sasa Narimasa, Machida Masahiko,
  “Quadrature Precision Basic Linear Algebra Subprograms with FMA Instruction”,
  17th SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP16), (Paris, France, April 12-15, 2016)
- Suzudo Tomoaki,
  “Migration behaviors of rhenium and osmium interstitials in tungsten; Ab initio informed kinetic Monte Carlo study”,
  17th International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM-17), (Aachen, Germany, October 11-16, 2015)

【情報システム利用推進室】
＜口頭発表＞

- 伊奈 拓也, 井戸村 泰宏, 山田 進, 真弓 明恵, 山下 晋,
  「圧縮対角格納形式の適用による多相流体コードの高速化」
  HPCS2016 2016 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム、(仙台、日本、2016 年 6 月 6 日～7 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 27 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 2016-024 (2017), 259p.
・ システム計算科学センター
「平成 27 年度計算科学技術研究実績評価報告」
JAEA-Evaluation 2016-003 (2017), 38p.

４．メディアへの情報発信及び新聞報道等

・ 2016 年 5 月 1 日放映（2015 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）
・ 2016 年 10 月 11 日 Nature Physics Online 版掲載（京都大学よりプレス発表）
“液晶のような特定の向きに整列する超伝導状態の発見 －回転対称性の破れを伴った「ネマティック」超伝導－”
（10 月 12 日京都新聞、10 月 13 日日刊工業新聞に掲載）

５．研究発表会等の開催

・ 第 29 回 CCSE ワークショップ（2017 年 2 月 14 日）
「福島事故からの復興に向けた計算科学の取り組み」
・ 第 21 回原子力計算科学セミナー(2017 年 3 月 24 日)
「人工物工学とシミュレーション技術」
・ シミュレーション技術開発室セミナー
2016 年 7 月 6 日：Ian C. Bourg (Princeton 大学)
「粘土鉱物の分子動力学シミュレーション」

６．受賞等

・ ISC High Performance June19-23, 2016 Frankfurt, Germany(ISC 2016) “ISC 2016 HPC IN ASIA POSTER AWARD”
廣田　悠輔、山田　進、今村　俊幸、佐々　成正、町田　昌彦
（ISC 2016 実行委員会、平成 28 年 6 月）
・ International Workshop on the Environmental Damage in Structural Materials Under Static Load/Cyclic Loads at Ambient Temperatures(EDSM-IV) “Science Award”
山口　正剛
（EDSM-IV 実行委員会、平成 28 年 6 月）
・ The Nuclear Materials Conference November7-10, 2016 Montpellier, France(NuMat 2016) “Poster Award 1st Prize”
早川 頌、沖田　泰良、愛知 正温、板倉　充洋
（NuMat2016 実行委員会、平成 28 年 11 月）

７．特許等の状況

(1)特許の出願及び登録

なし。

(2)成果の活用（利用許諾）による収入

件名（成果の内容）	契約先（販売者）	権利／契約種別	今年度収入額
並列分子動力学ステンシル他２件	株式会社 JSOL	プログラム著作権／利用許諾	3,613,521 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	77,337（ 9）
シミュレーション技術開発室	44,776（17）

【高度計算機技術開発室】

(1) 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化（分担課題：核融合炉の炉心設計）（東京大学） 10,000 千円

(2) 原子力プラントの包括的安全性向上のための地震時クリフエッジ回避技術の開発（文部科学省） 3,645 千円

(3) 高温ガス炉の確率論的安全評価手法の開発（文部科学省）6,894 千円

(4) ペタスケール乱流シミュレーションによる異常輸送の同位体効果に関する研究（日本学術振興会:科研費(基盤 C)） 780 千円

(5) 建築物の耐衝撃設計における人的被害低減と構造安全性維持のためのアプローチ（日本学術振興会:科研費(基盤 C)） 0 千円

(6) 空間線量観察のためのマジックレンズ（日本学術振興会:科研費(基盤 C)） 2,600 千円

(7) 広域線量分布測定用装置（KURAMA-Ⅱ）データ解析・補正委託業務（福島県） 34,490 千円

(8) 東京電力株式会社福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の分布データの集約事業（原子力規制庁） 12,187 千円

(9) 福島県内空間線量率の経時変化傾向の分析（福島環境創造センター） 6,741 千円

【シミュレーション技術開発室】

(10)高効率 TRU 燃焼を可能とする革新的水冷却炉 RBWR の研究開発（文部科学省）665 千円

(11)「界面」を通じた、構造材料における未解決課題克服のための技術構築（分担課題：第一原理からの水素脆性メカニズム解明）（科学技術振興機構：SIP） 13,800 千円

(12)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） 13,000 千円

(13)ポスト「京」萌芽的課題　基礎科学のフロンティアー極限への挑戦（分担課題：破壊とカタストロフィ）（東北大学金属材料研究所） 780 千円

(14)イオン伝導体によるリチウム同位体分離技術に関する研究（自動車メーカー） 14,609 千円

(15)マルチバンド超伝導体に対する擬ポテンシャルを用いた次元縮約有効理論の構築と応用（日本学術振興会:科研費(若手 B)） 390 千円

(16)異常な電子-格子相互作用のモデルフリー観測の試み（日本学術振興会:科研費(基盤C)）
52 千円
(17)量子多体問題に対するアクセレータを用いた高速化・並列化手法の研究開発（日本学術振興会:科研費(基盤C)）　1,820 千円
(18)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)）
3,250 千円
(19)大型計算機を用いた核燃料熱物性の第一原理計算による評価手法の開発（日本学術振興会:科研費(基盤C)）　2,730 千円
(20)第一原理強束縛模型によるトポロジカル物質のバルク観測量提案（日本学術振興会:科研費(新学術領域)　1,560 千円
(21)福島汚染土壌の減容化と再生利用に向けたセシウムフリー鉱化法の開発（日本学術振興会:科研費(基盤A)）　400 千円
(22)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)）　910 千円
(23)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
(24)地衣類における金属蓄積・保持機構の解明と放射性汚染物質降下量評価への適用（日本学術振興会:科研費(挑戦的萌芽研究)）　40 千円
(25)粒界偏析エネルギーの算出方法に関する拡散レートモデルによる評価（日本学術振興会:科研費(基盤C)）　650 千円
(26)タングステン合金における照射誘起析出発生メカニズム解明（日本学術振興会:科研費(基盤C)）　1,430 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	8	0	6	0
シミュレーション技術開発室	5	0	4	0
両室共通	0	0	0	1
合計	13	0	10	1

●共同研究
【高度計算機技術開発室】
・　大規模複雑流体シミュレーション技術の研究開発（東京大学）
・　超並列遠隔可視化システムの機能強化のための研究開発（一般財団法人高度情報科学技術研究機構）
・　次世代スーパーコンピュータ用プラズマ流体解析技術の研究（名古屋大学、自然科学研究機構核融合研究開発機構）
・　微分トポロジーを用いた大規模データ解析（会津大学）
・　複雑環境システムシミュレーションのための大規模連立方程式解法の高度化に関する研究（東京大学）

・ 原子力施設の地震リスク評価手法の高度化に関する研究（東京都市大学、東京大学、シー・エス・エー・ジャパン、大成建設）
・ ジャイロ運動論シミュレーションによる乱流輸送低減効果の研究（量子科学技術研究開発機構、自然科学研究機構核融合科学研究所、名古屋大学、東京大学）
・ 大型プラント等の次世代耐震シミュレーション技術に関する研究開発（千代田化工建設）

【シミュレーション技術開発室】
・ 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（九州大学、富山大学）
・ 超並列計算機シミュレーションによるトリチウム水の生体機能への影響に関する研究（自然科学研究機構分子科学研究所）
・ 大規模並列計算用ライブラリの研究開発（理化学研究所）
・ イオン伝導体によるリチウム同位体分離技術に関する研究（自動車メーカー）
・ 大規模複雑人工物構造材料に劣化予測技術構築に関する研究（東京大学）

●受託研究

【高度計算機技術開発室】
・ 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化（分担課題：核融合炉の炉心設計）（東京大学）
・ 原子力プラントの包括的安全性向上のための地震時クリフエッジ回避技術の開発（文部科学省）
・ 高温ガス炉の確率論的安全評価手法の開発（文部科学省）（原子力科学研究部門受託に参加）
・ 広域線量分布測定用装置（KURAMA-Ⅱ）データ解析・補正委託業務（福島県）（福島研究開発部門受託に参加）
・ 東京電力株式会社福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の分布データの集約事業（原子力規制庁）（福島研究開発部門受託に参加）
・ 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】
・ 高効率 TRU 燃焼を可能とする革新的水冷却炉 RBWR の研究開発（文部科学省）（原子力科学研究部門受託に参加）
・ 「界面」を通じた、構造材料における未解決課題克服のための技術構築（科学技術振興機構）
・ 水素分配制御によるアルミニウム合金の力学特性最適化（科学技術振興機構）
・ ポスト「京」萌芽的課題　基礎科学のフロンティアー極限への挑戦（分担課題：破壊とカタストロフィ）（東北大学金属材料研究所）

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

１０．原子力機構内の他部門との連携に関連する事項

研究の実施にあたっては、機構としての統合効果を発揮し、研究開発を効率的･効果的に推進する観点から、以下のとおり 26 件に及ぶ機構内連携を実施した。

(1) 放射線量等測定データの収集および管理に関する技術協力
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伴い放出された放射性物質の測定結果を収集する技術および、収集データを登録、公開するデータベースの構築技術を確立する。

(2) 福島県空間線量率測定データの情報発信
部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）
概要：福島県下を走行する路線バスを活用することで得られる、地域住民に密着した空間線量率分布データを可視化し、迅速に公開する。

(3) 土壌粘土鉱物への放射性セシウム吸着の解析
部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）、原子力科学研究部門（物質科学研究センター）
概要：粘土鉱物に対する吸着化学形態を量子ビームと計算科学の両面から解明する。

(4) ゼオライトへの放射性セシウム吸着の解析
部署：原子力科学研究部門（先端基礎研究センター、原子力基礎工学研究センター）
概要：ゼオライトのセシウム吸着性状について計算科学の観点から評価する。

(5) 河口及び沿岸でのセシウム長期輸送解析
部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）、原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）、バックエンド研究開発部門（東濃地科学センター）
概要：福島長期環境予測に資するため、河口及び沿岸での 2/3 次元のセシウム長期輸送解析システムを開発する。

(6) 土壌有機物におけるセシウム吸着特性の評価
部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）、原子力科学研究部門（物質科学研究センター）
概要：有機物におけるセシウムの吸着形態や輸送特性を原子・分子レベルから評価する。

(7) 福島第一原子力発電所港湾内放射性核種動態シミュレーション
部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）
概要：福島第一原子力発電所の港湾内の放射性核種の動態をシミュレーションにより評価する。

(8) 損傷頻度評価
部署：安全研究・防災支援部門（安全研究センター）
概要：３次元モデルを用いる大規模耐震解析システムを活用し、建屋および機器の地震時応答解析を高精度化。

(9) 高温工学試験炉の耐震解析に関する研究
部署：原子力科学研究部門（大洗研究開発センター高温工学試験研究炉部）
概要：大規模耐震解析システムやモデルデータを提供し、施設の耐震性評価を支援。

(10) 施設の耐震評価支援
部署：建設部
概要：耐震強度解析および評価への協力により機構内施設建家の耐震バックフィットを支援。

(11) 原子炉圧力容器鋼の高経年化対策研究（照射脆化予測）

部署：安全研究・防災支援部門（安全研究センター）

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

(12)応力腐食割れ、照射材料の数値シミュレーション研究

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

概要：応力腐食割れのいくつかの仮説メカニズムを検証、選択（脆化元素＝酸素 or 水素）するためシミュレーションを行う。

(13)中性子検出器開発に関わるシミュレーション研究と実験による検証

部署：原子力科学研究部門（物質科学研究センター、J-PARC センター）

概要：実験及び開発研究を先導（設計支援を含む）するため、高精度シミュレーションを行い、データを提供する。

(14)構造材料照射に関わる材料強度等の物性評価シミュレーション研究

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

概要：材料強度基礎パラメータの導出し提供するためモデリング及びシミュレーションを行う。

(15)Fe 中における He の拡散と結合状態に関する原子論的モデリング

部署：核融合研究開発部門

概要：核融合環境化での長期の中性子照射による材料組織変化を予測するモデルを確立。

(16)六方晶金属の機械的性質の計算科学研究

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

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

(17)シンクロ型 LPSO 構造の材料科学

部署：原子力科学研究部門（J-PARC センター）

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

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

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

概要：マイナーアクチニドを含有する MOX 燃料の物性評価のため、高精度シミュレーション手法を確立し、実験結果の予測やその解釈を行う。

(19)転位バイアス因子の理論的解明

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

概要：照射スウェリングの原因である転位バイアス因子の理論の構築。

(20)セシウムの地衣類等の生体内での分布メカニズムの解明

部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）

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

(21)ストロンチウム吸着材チタン酸化合物の開発

部署：福島研究開発部門（核燃料サイクル工学研究所環境技術開発センター）

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

(22)ガラス溶融固化シミュレーション高速化

部署：バックエンド研究開発部門（核燃料サイクル工学研究所）

概要：ガラス固化プロセスの温度や流量等の運転パラメータの最適化をするために膨大な計算を効率化する。

(23)大型放射光施設等による物性実験データの第一原理計算による解析

部署：原子力科学研究部門（物質科学研究センター）

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

(24)燃料溶融複雑系の解析に関する技術協力

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

概要：燃料溶融複雑系の大規模シミュレーションデータの解析作業を効率化するために高速可視化処理ツールを開発する。

(25)地質環境解析に関する技術協力

部署：バックエンド研究開発部門（東濃地科学センター）

概要：ボリュームレンダリング可視化処理ツールを適用し、地質環境シミュレーションデータの解析作業を効率化する。

１１．国際協力

国際協力の一覧を以下に示す。

(1) 原子力庁（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～）