令和 3 年度 計算科学技術研究実績（暫定）

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	6	2	8
シミュレーション技術開発室	20	0	20
合計	26	2	28

（令和 4 年 1 月 7 日現在）

【高度計算機技術開発室】

＜査読有り研究論文＞

(1) Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Hasegawa Yuta, Nakayama Hiromasa, Shimokawabe Takashi, Aoki Takayuki,
"Real-time tracer dispersion simulations in Oklahoma City using the locally mesh-refined lattice Boltzmann method",
Boundary-Layer Meteorology, Vol.179, No.2, pp.187-208 (2021).

(2) Matsuoka Seikichi, Sugama Hideo, Idomura Yasuhiro,
"Neoclassical transport simulations with an improved model collision operator",
Physics of Plasmas, Vol.28, No.6, pp.064501_1-064501_5 (2021).

(3) Koyamada Koji, Yu Long, Kawamura Takuma, Konishi Katsumi,
"Data-driven derivation of partial differential equations using neural network model",
International Journal of Modeling, Simulation, and Scientific Computing, Vol.12, No.2, pp.2140001_1-2140001_19 (2021).

(4) Hasegawa Yuta, Aoki Takayuki, Kobayashi Hiromichi, Idomura Yasuhiro, Onodera Naoyuki,
"Tree cutting approach for domain partitioning on forest-of-octrees-based block-structured static adaptive mesh refinement with lattice Boltzmann method",
Parallel Computing, Vol.108, pp.102851_1-102851_12 (2021).

(5) Watanabe Tsutomu, Takagi Marie, Shimoyama Ko, Kawashima Masayuki, Onodera Naoyuki, Inagaki Atsushi,
"Coherent eddies transporting passive scalars through the plant canopy revealed by Large-Eddy simulations using the lattice Boltzmann method",
Boundary-Layer Meteorology, Vol.181, No.1, pp.39-71 (2021).

(6) Asahi Yuichi, Fujii Keisuke, Heim Dennis Manuel, Maeyama Shinya, Garbet Xavier, Grandgirard Vinginie, Sarazin Yanick, Dif-Pradalier Guilhem, Idomura Yasuhiro, Yagi Masatoshi,
"Compressing the time series of five dimensional distribution function data from gyrokinetic simulation using principal component analysis",
Physics of Plasmas, Vol.28, No.1, pp.012304_1-012304_21 (2021).

＜査読無し研究論文＞

(1) 朝比 祐一, 藤井 恵介, "データ駆動アプローチを用いた雪崩的乱流輸送現象の解析", プラズマ・核融合学会誌, Vol.97, No.2, pp.86-92 (2021).

＜査読有り会議論文＞

(1) Asahi Yuichi, Hatayama Sora, Shimokawabe Takashi, Onodera Naoyuki, Hasegawa Yuta, Idomura Yasuhiro,
"AMR-Net: Convolutional neural networks for multi-resolution steady flow prediction", Proceedings of 2021 IEEE International Conference on Cluster Computing (IEEE Cluster 2021) (Internet), "2021 IEEE International Conference on Cluster Computing (IEEE Cluster 2021); 2nd Workshop on Artificial Intelligence and Machine Learning for Scientific Applications (AI4S)", pp.686-691 (2021).

(2) 横内 浩志, 稲垣 厚至, 神田 学, 小野寺 直幸,
"格子ボルツマン法によるジャカルタ都市街区のラグランジュ粒子状汚染物質シミュレーション",
土木学会論文集,B1(水工学)(インターネット), "土木学会第 65 回水工学講演会", Vol.76, No.2, pp.I_253-I_258 (2020).

＜査読無し会議論文＞

(1) 長谷川 雄太, 青木 尊之, 小林 宏充, 井戸村 泰宏, 小野寺 直幸,
"木構造に基づく細分化格子 LBM における領域分割法の改善",
計算工学講演会論文集(CD-ROM), "第 26 回計算工学講演会", Vol.26, pp.6 (2021).

(2) 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 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 解法の混合精度演算による高速化",
計算工学講演会論文集(CD-ROM), "第 26 回計算工学講演会", Vol.26, pp.3 (2021).

(3) 朝比 祐一, 畑山 そら, 下川辺 隆史, 小野寺 直幸, 長谷川 雄太, 井戸村 泰宏,
"機械学習による細分化格子に基づく二次元定常流予測",
計算工学講演会論文集(CD-ROM), "第 26 回計算工学講演会", Vol.26, pp.4 (2021).

【シミュレーション技術開発室】

＜査読有り研究論文＞

(1) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Nuclear quantum effects on autoionization of water isotopologs studied by *ab initio* path integral molecular dynamics",
Journal of Chemical Physics, Vol.154, No.8, pp.084117_1-084117_10 (2021).

(2) Kondo Tomomi, Sasaki Takehiko, Ruiz-Barragan Sergei, Ribas-Ariño Jordi, Shiga Motoyuki,
"Refined metadynamics through canonical sampling using time-invariant bias potential; A Study of polyalcohol dehydration in hot acidic solutions",
Journal of Computational Chemistry, Vol.42, No.3, pp.156-165 (2021).

(3) Noguchi Yoshifumi, Hiyama Miyabi, Shiga Motoyuki, Akiyama Hidefumi, Sugino Osamu,
"Quantum-mechanical hydration plays critical role in the stability of firefly

oxyluciferin isomers; State-of-the-art calculations of the excited states",
Journal of Chemical Physics, Vol.153, No.20, pp.201103_1-201103_6 (2020).

(4) Suno Hiroya, Machida Masahiko, Dohi Terumi, Omura Yoshihito,
"Quantum chemical calculation studies toward microscopic understanding of retention mechanism of Cs radioisotopes and other alkali metals in lichens",
Scientific Reports (Internet), Vol.11, No.1, pp.8228_1-8228_13 (2021).

(5) Suzudo Tomoaki,
"Computational study of solute effects in tungsten under irradiation", Materials Science Forum, Vol.1024, pp.87-94 (2021).

(6) Yamaguchi Masatake, Itakura Mitsuhiro, Tsuru Tomohito, Ebihara Kenichi,
"Hydrogen-trapping energy in screw and edge dislocations in aluminum; First-principles calculations",
Materials Transactions, Vol.62, No.5, pp.582-589 (2021).

(7) Nagai Yuki,
"N-independent localized Krylov-Bogoliubov-de Gennes Method; Ultra-fast numerical approach to large-scale inhomogeneous superconductors",
Journal of the Physical Society of Japan, Vol.89, No.7, pp.074703_1-074703_6 (2020).

(8) Suzudo Tomoaki, Tsuru Tomohito,
"Inclination of self-interstitial dumbbells in molybdenum and tungsten; A First-principles study",
AIP Advances (Internet), Vol.11, No.6, pp.065012_1-065012_7 (2021).

(9) Terayama Satoshi, Iwase Yuki, Hayakawa Sho, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Suzuki Katsuyuki,
"Molecular dynamic simulations evaluating the effect of the stacking fault energy on defect formations in face-centered cubic metals subjected to high-energy particle irradiation",
Computational Materials Science, Vol.195, pp.110479_1-110479_12 (2021).

(10) Zhao Can, Suzudo Tomoaki, Toyama Takeshi, Nishitani Shigeto, Inoue Koji, Nagai Yasuyoshi,
"Investigation of Cu diffusivity in Fe by a combination of atom probe experiments and kinetic Monte Carlo simulation",
Materials Transactions, Vol.62, No.7, pp.929-934 (2021).

(11) Kobayashi Keita, Nagai Yuki, Itakura Mitsuhiro, Shiga Motoyuki,
"Self-learning hybrid Monte Carlo method for isothermal-isobaric ensemble; Application to liquid silica",
Journal of Chemical Physics, Vol.155, No.3, pp.034106_1-034106_9 (2021).

(12) Yamaguchi Akiko, Kobayashi Keita, Takahashi Yoshio, Machida Masahiko, Okumura Masahiko,
"Hydration structures of barium ions; *Ab initio* molecular dynamics simulations using the SCAN meta-GGA density functional and EXAFS spectroscopy studies",

Chemical Physics Letters, Vol.780, pp.138945_1-138945_5 (2021).

(13) Konagaya Rimi, Kawamura Naomi, Yamaguchi Akiko, Takahashi Yoshio,
"Highly-sensitive analysis of fluorescence XANES at Europium (Eu) L_{III}-edge for the determination of oxidation state for trace amount of Eu in natural samples by bragg-type crystal analyzer system",
Chemistry Letters, Vol.50, No.8, pp.1570-1572 (2021).

(14) Okita Taira, Terayama Satoshi, Tsugawa Kiyoto, Kobayashi Keita, Okumura Masahiko, Itakura Mitsuhiro, Suzuki Katsuyuki,
"Construction of machine-learning Zr interatomic potentials for identifying the formation process of c-type dislocation loops",
Computational Materials Science, Vol.202, pp.110865_1-110865_9 (2022).

(15) Toyama Takeshi, Zhao Can, Yoshiie Toshimasa, Yamasaki Shota, Uno Sadanori, Shimodaira Masaki, Miyata Hotaka, Suzudo Tomoaki, Shimizu Yasuo, Yoshida Kenta, Inoue Koji, Nagai Yasuyoshi,
"Radiation-enhanced diffusion of copper in iron studied by three-dimensional atom probe",
Journal of Nuclear Materials, Vol.556, pp.153176_1-153176_7 (2021).

(16) Suno Hiroya, Machida Masahiko,
"Atomistic origin of selective Cs accumulation in mushrooms; DFT analysis for alkali metal cation complexation selectivity of scissors-like pigments",
ACS Food Science ¥& Technology (Internet), Vol.1, No.8, pp.1381-1391 (2021).

(17) Pal Asit, Pal Subhendu, Verma Shivani, Shiga Motoyuki, Nair Nisnanth N.,
"Mean force based temperature accelerated sliced sampling; Efficient reconstruction of high dimensional free energy landscapes",
Journal of Computational Chemistry, Vol.42, No.28, pp.1996-2003 (2021).

(18) Kim Howon, Nagai Yuki, Rózsa Levente, Schreyer Dominik, Wiesendanger Roland,
"Anisotropic non-split zero-energy vortex bound states in a conventional superconductor",
Applied Physics Reviews (Internet), Vol.8, No.3, pp.031417_1-031417_8 (2021).

(19) Kondo Tomomi, Sasaki Takehiko, Shiga Motoyuki,
"The Mechanism of sorbitol dehydration in hot acidic solutions",
Journal of Computational Chemistry, Vol.42, No.25, pp.1783-1791 (2021).

(20) Matsushita Taiki, Nagai Yuki, Fujimoto Satoshi,
"Spectrum collapse of disordered Dirac Landau levels as topological non-Hermitian physics",
Journal of the Physical Society of Japan, Vol.90, No.7, pp.074703_1-074703_7 (2021).

＜査読無し研究論文＞

(1) 君塚 肇, 尾方 成信, 志賀 基之,
"経路積分法で探る金属中の水素の拡散メカニズム",
日本物理学会誌, Vol.75, No.8, pp.484-490 (2020).

(2) 数納 広哉, 町田 昌彦,
"菌類(キノコ)の放射性セシウム濃縮機構解明に向けた分子シミュレーション技術の研究開発; 量子化学計算によるキノコ色素分子の錯体形成におけるセシウム選択性の定量的評価",
RIST News, No.66, pp.3-16 (2020).

(3) Kim Minsik, Malins Alex, 町田 昌彦, 吉村 和也, 斎藤 公明, 吉田 浩子, 柳 秀明, 吉田 亨, 長谷川 幸弘,
"環境中での空間線量率 3 次元分布計算システム(3D-ADRES)の研究開発の現状と今後の展望; 福島復興に向けた市街地・森林等の環境中空間線量率分布の推定",
RIST News, No.67, pp.3-15 (2021).

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) Onodera Naoyuki, Hasegawa Yuta, Asahi Yuichi, Idomura Yasuhiro, Shimokawabe Takashi, Aoki Takayuki,
"GPU acceleration of tracer dispersion simulation using the locally mesh-refined lattice Boltzmann method",
ADAC (Accelerated Data Analytics and Computing Institute) Workshop, (online, Jun. 01, 2021).

(2) Idomura Yasuhiro,
"Development of exascale full-f gyrokinetic simulation on Summit and FUGAKU",
The Platform for Advanced Scientific Computing Conference (PASC21), (online, Jul. 01, 2021).

(3) Idomura Yasuhiro,
"A New synergy effect between neoclassical and turbulent particle transport in ion temperature gradient driven turbulence",
5th Asia-Pacific Conference on Plasma Physics (AAPPS-DPP 2021), (online, Japan, Sep. 01, 2021).

(4) Grandgirard Vinginie, Asahi Yuichi, Bigot Julien, Bourne Emily, Dif-Pradalier Guilhem, Donnel Peter, Garbet Xavier, Ghendrih Phillppe,
"How to prepare the GYSELA-X code to future exascale edge-core simulations",
The Platform for Advanced Scientific Computing Conference (PASC21), (Zürich (online), Switzerland, July 05-09, 2021).

(5) Asahi Yuichi, Fujii Keisuke, Maeyama Shinya, Idomura Yasuhiro,
"Phase-Space Pattern Extraction from 5D gyrokinetic simulation data",
30th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (ITC-30), (Toki (online), Japan, November 16-19, 2021).

(6) Watanabe Tomohiko, Idomura Yasuhiro, Todo Yasushi, Honda Mitsuru,
"Exploration of burning plasma confinement physics using the supercomputer

Fugaku",
2nd Fusion HPC Workshop, (online, Dec. 2-3, 2021).

＜国内会議＞

(1) 河村 拓馬, 坂本 尚久,
"粒子ベースレンダリングによる数値シミュレーションデータ向け遠隔 VR 可視化システム",
第 49 回可視化情報シンポジウム, (横浜(online), 日本, 2021 年 9 月 9-11 日).

(2) 矢野 緑里, 河村 拓馬, 長谷川 雄太, 井戸村 泰宏,
"汚染物質拡散シミュレーションの In-Situ 統計解析",
第 49 回可視化情報シンポジウム, (横浜(online), 日本, 2021 年 9 月 9-11 日).

(3) 朝比 祐一,
"性能可搬な運動論的プラズマシミュレーションコードのための最適化手法",
NVIDIA 秋の HPC Weeks, (online, 日本, 2021 年 10 月 25 日).

(4) 井戸村 泰宏,
"エクサスケール流体シミュレーション技術の開発",
第 8 回 HPCI システム利用研究課題成果報告会, (online, 日本, 2021 年 10 月 28-29 日).

(5) 井戸村 泰宏, Dif-Pradalier G., Garbet X., Sarazin Y., Tore Supra Teams, "LOC-SOC 遷移の full-f ジャイロ運動論的シミュレーション", 第 38 回プラズマ・核融合学会年会, (online, 日本, 2021 年 11 月 1 日).

(6) 朝比 祐一, 小野寺 直幸, 長谷川 雄太, 井戸村 泰宏,
"機械学習による都市汚染物質拡散の即時予測",
第 35 回数値流体力学シンポジウム(CFD35), (online, 日本, 2021 年 12 月 14-16 日).

(7) 伊奈 拓也, 井戸村 泰宏, 今村 俊幸, 山下 晋, 小野寺 直幸,
"多相 CFD シミュレーションにおける悪条件行列に対する FP16 データ/FP32 演算混合精度前処理の開発",
第 35 回数値流体力学シンポジウム(CFD35), (online, 日本, 2021 年 12 月 14-16 日).

【シミュレーション技術開発室】

＜国際会議＞

(1) Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake, Egusa Daisuke, Abe Eiji,
"Density functional theory study of solute cluster growth processes in Mg-Y-Zn LPSO alloys",
12th International Conference on Magnesium Alloys and their Applications (MG 2021), (online, U. S. A., Jun. 01, 2021).

(2) Shiga Motoyuki, Kobayashi Keita, Okumura Masahiko, Nagai Yuki,
"Self-learning hybrid Monte Carlo; A First-principles method",
32nd IUPAP Conference on Computational Physics (CCP 2021), (Coventry (online), U. K., Aug. 01, 2021).

(3) Suzudo Tomoaki, Toyama Takeshi, Hatano Yuji, Wang Jing,
"Solute elements suppress the radiation damage in W alloys; Comparison between first-principles-based modeling and experimental evidence",

20th International conference on fusion reactor materials (ICFRM-20), (Granada (online), Spain, Oct. 24-29, 2021).

(4) Nagai Yuki,
"Localized Krylov Bogoliubov-de Gennes method (LK-BdG); Ultra-fast numerical approach for large-scale inhomogeneous superconductors",
34th International Symposium on Superconductivity (ISS 2021), (online, Japan, November 30-December 2, 2021).

(5) Shiga Motoyuki,
"First-principles simulations with nuclear quantum effects",
1st International Conference on Computational Science & Data Analytics (COMDATA 2021), (Kuala Lumper (online), Malaysia, November 21-24, 2021).

(6) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"New insights into nuclear quantum effects of liquid water from first principles calculations",
Materials Research Meeting 2021 (MRM 2021), (Yokohama, Japan, December 13-16, 2021).

(7) Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito, Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiro,
"Hydrogen trapping energy at incoherent boundary in aluminum alloy; First-principles calculations",
Materials Research Meeting 2021 (MRM 2021), (Yokohama, Japan, December 13-16, 2021).

(8) Okumura Masahiko, Kobayashi Keita, Nakamura Hiroki, Yamaguchi Akiko, Itakura Mitsuhiro, Machida Masahiko,
"Machine learning potentials for cement and clay minerals",
International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), (Honolulu, U.S.A. (onlilne), December 16-21, 2021).

＜国内会議＞

(1) 鈴土 知明,
"材料照射シミュレーションと照射データのニーズ",
「大強度加速器による材料照射施設の可能性」研究会, (online, 日本, 2021 年 3 月 30 日).

(2) 奥村 雅彦,
"複雑な構造を持つ物質の機械学習分子動力学シミュレーション",
AGC 株式会社におけるセミナー, (横浜, 日本, 2021 年 4 月 7 日).

(3) 山口 瑛子, 三浦 輝, 長澤 真, 高橋 嘉夫,
"高エネルギー分解能蛍光 XAFS による環境中の微量元素のスペシエーション",
日本地球惑星科学連合 2021 年大会, (横浜(online), 日本, 2021 年 5 月 30 日-6 月 1 日、6 月 3-6 日).

(4) （基調講演）板倉 充洋, 山口 正剛,
"Mg-Y-Zn LPSO 合金キンク境界の第一原理計算",
軽金属学会第 140 回春期大会, (online, 日本, 2021 年 5 月 15-16 日).

(5) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Ab-Initio calculation of the autoionization product of water using path integral molecular dynamics",
第 23 回理論化学討論会, (online, 日本, 2021 年 5 月 17-19 日).

(6) 志賀 基之, 小林 恵太, 奥村 雅彦, 永井 佑紀,
"自己学習ハイブリッドモンテカルロ法の提案",
第 23 回理論化学討論会, (online, 日本, 2021 年 5 月 17-19 日).

(7) （招待講演）志賀 基之,
"計算化学における機械学習ポテンシャルの利用; 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法",
統計数理研究所統計物理と統計科学のセミナー, (online, 日本, 2020 年 7 月 13 日).

(8) 志賀 基之,
"経路積分法と水素材料への応用",
第 33 回 DV-Xα 研究会(2021 年度), (online, 日本, 2021 年 8 月 28-29 日).

(9) 鈴土 知明, 都留 智仁,
"Mo および W における SIA の最安定状態に関する第一原理計算",
日本金属学会 2021 年秋期(第 169 回)講演大会, (online, 日本, 2021 年 9 月 14-17 日).

(10) 山口 瑛子, 永田 光知郎, 田中 万也, 小林 恵太, 奥村 雅彦, 小林 徹, 下条 晃司郎, 谷田 肇, 関口 哲弘, 金田 結依, 松田 晶平, 横山 啓一, 矢板 毅, 吉村 崇, 高橋 嘉夫,
"EXAFS による Ra の水和状態と粘土鉱物への吸着状態の解明",
日本放射化学会第 65 回討論会(2021), (online, 日本, 2021 年 9 月 22-24 日).

(11) 濱里 恒彦, 松川 義孝, 辻村 一葉, 坂口 知聡, 連川 貞弘, 本間 佳哉, 薮内 聖皓, 山口 正剛,
"G 相に関する第一原理計算の技術的限界と精度について",
日本金属学会 2021 年秋期(第 169 回)講演大会, (online, 日本, 2021 年 9 月 14-17 日).

(12) Kim Minsik, Malins Alex, 町田 昌彦, 斎藤 公明,
"福島における放射性物質分布調査,17; 空間線量率の 3 次元分布が計算可能なシステム(3D-ADRES)の開発現状について",
日本原子力学会 2021 年秋の大会, (札幌(online), 日本, 2021 年 9 月 8-10 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,
"多成分系における機械学習分子動力学法",
日本原子力学会 2021 年秋の大会, (札幌(online), 日本, 2021 年 9 月 8-10 日).

(14) 板倉 充洋, 中村 博樹, 奥村 雅彦,
"過酷事故における溶融物の多孔質浸透のモデル化",
日本原子力学会 2021 年秋の大会, (札幌(online), 日本, 2021 年 9 月 8-10 日).

(15) 森 英喜, 板倉 充洋, 奥村 雅彦, 椎原 良典, 松中 大介,
"ニューラルネットワーク原子間ポテンシャルを用いた BCC 鉄中の転位と空孔の相互作用解析",
日本金属学会 2021 年秋期(第 169 回)講演大会, (online, 日本, 2021 年 9 月 14-17 日).

(16) 江草 大佑, Zhao Yifang, 斉藤 光, 波多 聰, 板倉 充洋, 阿部 英司,
"MFS 型 Mg 合金におけるキンク界面構造の三次元解析",

日本金属学会 2021 年秋期(第 169 回)講演大会, (online, 日本, 2021 年 9 月 14-17 日).

(17) 阿部 弘亨, 叶野 翔, Yang Huilong, 高鍋 和広, 中山 哲, Chen Yue, 山口 正剛, 篠原 靖周, 小方 宏一,
"金属被覆ジルコニウム合金型事故耐性燃料の開発,1; 研究の概要と計画",
日本原子力学会 2021 年秋の大会, (札幌(online), 日本, 2021 年 9 月 8-10 日).

(18) 叶野 翔, 村上 健太, Yang Huilong, 高鍋 和広, 中山 哲, Chen Yue, 山口 正剛, 篠原 靖周, 小方 宏一, 阿部 弘亨,
"金属被膜ジルコニウム合金型事故耐性燃料の開発,2; 材料開発と照射特性",
日本原子力学会 2021 年秋の大会, (札幌(online), 日本, 2021 年 9 月 8-10 日).

(19) 津川 聖人, 寺山 怜志, 沖田 泰良, 奥村 雅彦, 板倉 充洋,
"機械学習分子動力学法による Zr 中の空孔集合体挙動解明に関する研究",
日本原子力学会 2021 年秋の大会, (札幌(online), 日本, 2021 年 9 月 8-10 日).

(20) 森 承宇, 松田 那由多, 沖田 泰良, 板倉 充洋,
"分子動力学法を用いた非線形超音波成分のナノ構造依存性に関する定量化,3",
日本原子力学会 2021 年秋の大会, (札幌(online), 日本, 2021 年 9 月 8-10 日).

(21) 永井 佑紀,
"空間的に非一様な超伝導体に対する超高速シミュレーション手法",
日本物理学会 2021 年秋季大会(物性), (online, 日本, 2021 年 9 月 14-17 日).

(22) 高橋 嘉夫, 長澤 真, Qin Hai Bo, 山口 瑛子, 柏原 輝彦, 田中 万也,
"天然でのレアアースの吸着や共沈による濃集プロセスの系統的な比較",
2021 年度日本地球化学会第 68 回年会, (弘前, 日本, 2021 年 9 月 7-9 日).

(23) 山口 瑛子, 永田 光知郎, 田中 万也, 小林 恵太, 奥村 雅彦, 小林 徹, 下条 晃司郎, 谷田 肇, 関口 哲弘, 金田 結依, 松田 晶平, 横山 啓一, 矢板 毅, 吉村 崇, 高橋 嘉夫,
"ラジウムの水和構造及び粘土鉱物への吸着構造の解明",
2021 年度日本地球化学会第 68 回年会, (弘前, 日本, 2021 年 9 月 7-9 日).

(24) 小長谷 莉未, 河村 直己, 山口 瑛子, 高橋 嘉夫,
"Bragg 型分光器を用いた高エネルギー分解能蛍光検出 XANES による天然試料中の微量ユウロピウムの酸化状態決定",
2021 年度日本地球化学会第 68 回年会, (弘前, 日本, 2021 年 9 月 7-9 日).

(25) 山口 瑛子, 中尾 淳, 奥村 雅彦,
"雲母の構造が剥離強度に及ぼす影響の数値的評価",
第 64 回粘土科学討論会, (長野(online), 日本, 2021 年 9 月 14-15 日).

(26) 永井 佑紀,
"Fortran から始める Julia",
Julia in Physics 2021, (大阪(online), 日本, 2021 年 9 月 3 日).

(27) 奥村 雅彦, 小林 恵太, 山口 瑛子,
"カオリナイトの機械学習分子動力学法シミュレーション",
第 64 回粘土科学討論会, (長野(online), 日本, 2021 年 9 月 14-15 日).

(28) 奥村 雅彦,
"珪酸塩鉱物の機械学習分子動力学シミュレーション",

2021 年日本表面真空学会学術講演会, (online, 日本, 2021 年 11 月 3-5 日).

(29) 鈴土 知明,
"鉄鋼材料の転位ループモデリング; 分子動力学シミュレーションの現状と課題",
令和 3 年度材料照射研究会「原子力イノベーションを見据えた材料研究」, (online, 日本, 2021 年 11 月 18-19 日).

(30) 志賀 基之,
"水素の量子揺らぎ効果を考慮した第一原理計算",
第 15 回物性科学領域横断研究会(領域合同研究会), (online, 日本, 2021 年 11 月 26-27 日).

(31) Kim Minsik, Malins Alex, 吉村 和也, 町田 昌彦, 斎藤 公明, 吉田 亨, 柳 秀明, 長谷川 幸弘, 吉田 浩子,
"家屋線量低減効果の経時変化に対する家屋周囲の除染の影響; シミュレーションと測定結果の比較評価",
第 3 回日本放射線安全管理学会・日本保健物理学会合同大会(日本放射線安全管理学会第 20 回学術大会、日本保健物理学会第 54 回研究発表会), (online, 日本, 2021 年 12 月 1-3 日).

(32) 永井 佑紀,
"自己学習ハイブリッドモンテカルロ法; 精度保証された機械学習分子シミュレーション",
レア・イベントの計算科学第 4 回ワークショップ「レア・イベント解析とデータ科学」, (online, 日本, 2021 年 12 月 11 日).

【システム計算科学センター】

＜国内会議＞

(1) 町田 昌彦,
"海水中放射性核種分布の現状と福島沿岸/沖合での移流拡散の特徴",
ANFURD ウェビナー「東京電力 HD 福島第一原子力発電所 ALPS 処理水の処分に関する見解」, (online, 日本, 2021 年 6 月 12 日).

(2) 町田 昌彦,
"原子炉建屋内での機械学習技術を用いた放射線源逆推定技術の研究開発",
第 14 回放射線計測フォーラム福島, (online, 日本, 2021 年 7 月 14 日).

(3) 町田 昌彦,
"原子炉建屋内での機械学習技術を用いた放射線源逆推定技術の研究開発と推定線源及び線量率可視化への期待",
富士通 SS 研 5G 可視化技術研究 WG, (online, 日本, 2021 年 9 月 30 日).

(4) 町田 昌彦,
"原子炉建屋内における放射線源逆推定技術の研究開発計画; 機械学習及び XR 技術の活用",
第 2 回点群データ分析・可視化ワークショップ, (東京, 日本, 2021 年 10 月 29 日).

3. 技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

(1) システム計算科学センター,
"令和 2 年度計算科学技術研究実績評価報告",

JAEA-Evaluation 2021-001

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

(1) 数納広哉、町田昌彦、"計算化学を駆使して地衣類が放射性セシウムを保持する謎に迫る—量子化学計算が明らかにする地衣類代謝物の放射性セシウム錯体形成力—" (2021/6/7)
掲載：電気新聞朝刊(2021/6/8)、福島民報(2021/6/8)、福島民友(2021/6/8)、日刊工業新聞（2021/6/10）

5. 研究発表会等の開催

(1) CCSE セミナー
「Nuclear Thermal-Hydraulics Research Relevant to Nuclear Safety, Decommissioning, and Prevailing Challenges」
2021 年 4 月 12 日、オンライン

(2) 第 33 回 CCSE ワークショップ（予定）
（核熱構造連成シミュレーション）
2022 年 3 月、オンライン

6. 受賞等

(1) 日本放射化学会若手優秀発表賞
山口瑛子 他共著 14 名
（日本放射化学会第 65 回討論会、2021 年 9 月 24 日）

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	2,503,233 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	55,728（ 8）
シミュレーション技術開発室	35,066（12）
システム計算科学センター	268,374（ 1）
合計	359,168（21）

【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） 43,684 千円

(2) 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） 4,344 千円

(3) 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)） 1,460 千円

(4) 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） 260 千円

(5) 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

(6) 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)） 1,430 千円

(7) GPU スーパーコンピュータを用いた沸騰多相流挙動解析（日本学術振興会：科研費（基盤 C)） 1,300 千円

(8) 観測密度を上回る高解像度の都市風況 LES に対するデータ同化手法の開発（日本学術振興会：科研費（若手研究)） 1,950 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） 603 千円

(2) 「ナノ～マクロを繋ぐトモグラフィー：界面の半自発的剥離」、「界面のナノスケール・イメージベース計算物理解析」（分担）（科学技術振興機構：CREST） 10,290 千円

(3) 金属被覆ジルコニウム合金型事故耐性燃料の開発（化学的作用の確認・物理的安定性の確認）（文部科学省：原子力システム研究開発事業） 724 千円

(4) 3D 造形革新燃料製造のシミュレーション共通基盤技術（文部科学省：原子力システム研究開発事業） 2,300 千円

(5) 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)） 843 千円

(6) 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)） 10,790 千円

(7) 遅延時間型超伝導検出器による中性子イメージングの位置分解能向上と検出効率改善（日本学術振興会：科研費（基盤 A)） 390 千円

(8) 水素エネルギー材料の次代設計のための量子論的モデリングの深化と応用（日本学術振興会：科研費（基盤 B)） 1,053 千円

(9) 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)） 5,278 千円

(10) 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)） 2,210 千円

(11) 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)） 325 千円

(12) 粘土鉱物により放射性核種は還元されるか？－放射性廃棄物地層処分と関連して－（日本学術振興会：科研費（挑戦的研究（萌芽)） 260 千円

【システム計算科学センター】

(1) 廃炉・汚染水対策事業費補助金（原子炉建屋内の環境改善のための技術の開発（被ばく低

減のための環境・線源分布のデジタル化技術の開発)) (分担) (資源エネルギー庁) 268,374千円

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	3	0	2	0
シミュレーション技術開発室	12	0	5	0
システム計算科学センター	2	0	0	1
合計	17	0	7	1

(令和 3 年 11 月 17 日現在)

●共同研究

【高度計算機技術開発室】

(1) 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)

(2) 大規模シミュレーションに対する粒子ベース可視化のための高度化に関する研究 (荏原製作所)

(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 (2) (京都大学、神戸大学)

【シミュレーション技術開発室】

(1) ナノ～マクロを繋ぐトモグラフィー：界面の半自発的剥離 (九州大学、富山大学)

(2) 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)

(3) 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)

(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)

(9) 原子力建屋等における放射線源逆推定に係る機械学習技術の研究 (東京大学)

(10) 雲母系鉱物のセシウム吸着等の機能に関する実験及び計算科学研究 (京都府立大学)

(11) 無機材料探索に向けた自己学習ハイブリッドモンテカルロ法を活用した機械学習分子動力学シミュレーション手法の研究 (株式会社東芝)

(12) エクサスケール計算機に向けた並列計算手法の研究開発 (理化学研究所)

【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)

(2) 廃棄物の X 線イメージング法の高度化に関する研究 (大阪市立大学大学院)

●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) 「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) ナノ～マクロを繋ぐトモグラフィー：界面の半自発的剥離、界面のナノスケール・イメージベース計算物理解析（科学技術振興機構）
(2) 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）
(3) 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）
(4) 金属被覆ジルコニウム合金型事故耐性燃料の開発（化学的作用の確認・物理的安定性の確認）（文部科学省）
(5) 3D 造形革新燃料製造のシミュレーション共通基盤技術（文部科学省）

●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 21 件に及ぶ機構内連携を実施している（令和 3 年 8 月 13 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（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。
(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（福島環境安全センター）
概要：機械学習（深層学習）コード分析とその高速化

【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（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。

(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（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。

(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（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。

(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（福島環境安全センター)

概要：機械学習（スパースモデリング・LASSO）技術を適用

(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（福島環境安全センター)

概要：地理空間情報解析（ボロノイ解析やクリギング手法等）技術を適用

(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（福島環境安全センター)

概要：Cs 土壌・コンクリ浸透解析に機械学習分子動力学法の適用を検討

(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) JUPITER コードの GPU 移植作業

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：GPU 移植、改良及び動作確認を行う。

(2) GPU 版 VASP の最適化作業

部署：原子力基礎工学研究センター照射材料工学研究 Gr.

概要：データ通信の性能向上に向けたコード改良を行う。

(3) GPU 版 SERAPHIM コードの最適化作業
部署：高速炉サイクル研究開発センター安全解析評価 Gr.
概要：データ通信の性能向上に向けたコード改良を行う。

(4) TPFIT-LPT の GPU 移植作業
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：GPU 移植、改良及び動作確認を行う。

(5) FLEXPART コードの移植作業
部署：核不拡散・核セキュリティ総合支援センターCTBT・輸送支援室
概要： SGI8600 移植及び動作確認を行う。

(6) LLEQ_dipole コードの並列化作業
部署：物質科学研究センター多重自由度相関研究 Gr.
概要：MPI 並列化及びスレッド化を行う。

(7) FEMAX-8 コードの並列化作業
部署：物質科学研究センター多重自由度相関研究 Gr.
概要：MPI 並列化及びスレッド化を行う。

11. 国際協力

国際協力の一覧を以下に示す（件数：3 件）。

(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～2021 年 12 月 12 日：5 年間の延長に向け CEA と調整中）

(2) 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 10 ヶ国が参加）
（2013 年度～2024 年 7 月 8 日）

(3) 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～2021 年 9 月 30 日）