令和元年度 計算科学技術研究実績

1. 査読付き研究論文、査読付き会議論文等

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

【高度計算機技術開発室】

＜査読付き研究論文＞

(1) Asahi Yuichi, Grandgirard Virginie, Sarazin Yanick, Donnel Peter, Garbet Xavier, Idomura Yasuhiro, Guilhem Dif-Pradalier, Latu Guillaume,
"Synergy of turbulent and neoclassical transport through poloidal convective cells",
Plasma Physics and Controlled Fusion, Vol.61, No.6, pp.065015_1-065015_15 (2019).

(2) Idomura Yasuhiro,
"Isotope and Plasma Size Scaling in Ion Temperature Gradient Driven Turbulence",
Phys. Plasmas, Vol.26, No.12, pp.120703_1-120703_5 (2019).

＜査読無し研究論文＞

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

＜査読付き会議論文＞

(1) Watanabe Tadashi,
"Numerical simulation of oscillating-rotating liquid droplet",
Proceedings of 3rd IASME/WSEAS International Conference on Continuum Mechanics (CM '08), pp.30-35 (2008).

(2) Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Kawamura Takuma, Uesawa Shinichiro, Yamashita Susumu, Yoshida Hiroyuki,
"Fuel debris' air cooling analysis using a lattice Boltzmann method",
Proceedings of 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27) (Internet) (2019).

(3) Ali Yussuf, Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Imamura Toshiyuki,
"GPU Acceleration of Communication Avoiding Chebyshev Basis Conjugate Gradient Solver for Multiphase CFD Simulations",
2019 IEEE/ACM 10th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems (ScalA), Denver, CO, USA, pp.1-8 (2019).

＜査読無し会議論文＞

なし

【シミュレーション技術開発室】

＜査読付き研究論文＞

(1) Fedkin Mark V., Shin Yun Kyung, Dasgupta Nabankur, Yeon Jejoon, Zhang Weiwei, van Duin Diana, Van Duin Adri C. T., Mori Kento, Fujiwara Atsushi, Machida Masahiko, Nakamura Hiroki, Okumura Masahiko,
"Development of the ReaxFF methodology for electrolyte-water systems",
Journal of Physical Chemistry A, Vol.123, No.10, pp.2125-2141 (2019).

(2) Shiga Motoyuki,
"Path integral simulations",
Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering (Internet), pp.22 (2018).

(3) Nagai Yuki, Shinaoka Hiroshi,
"Smooth self-energy in the exact-diagonalization-based dynamical mean-field theory: Intermediate-representation filtering approach",
Journal of the Physical Society of Japan, Vol.88, No.6, pp.064004_1-064004_5 (2019).

(4) Nagai Yuki, Kato Yusuke,
"Quasiparticle bound states around fractional vortices in *s*-wave superconductor",
Journal of the Physical Society of Japan, Vol.88, No.5, pp.054707_1-054707_8 (2019).

(5) Liu Xudong, Machida Masahiko, Kurikami Hiroshi, Kitamura Akihiro,
"Long-term simulations of radiocesium discharge in watershed with improved radiocesium wash-off model; Applying the model to Abukuma River basin of Fukushima",
Journal of Environmental Radioactivity, Vol.203, pp.135-146 (2019).

(6) Suno Hiroya, Machida Masahiko,
"Quantum chemical calculations for the norbadione A complexes with Cs^+, K^+, and Na^+ in gas and aqueous phases",
Chemical Physics Letters, Vol.730, pp.26-31 (2019).

(7) Hayakawa Sho, Doihara Kohei, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Aichi Masaatsu, Suzuki Katsuyuki,
"Screw dislocation-spherical void interactions in fcc metals and their dependence on stacking fault energy",
Journal of Materials Science, Vol.54, No.17, pp.11509-11525 (2019).

(8) Hayakawa Sho, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Kawabata Tomoya, Suzuki Katsuyuki,
"Atomistic simulations for the effects of stacking fault energy on defect formations by displacement cascades in FCC metals under Poisson's deformation",
Journal of Materials Science, Vol.54, No.16, pp.11096-11110 (2019).

(9) Itakura Mitsuhiro, Nakamura Hiroki, Kitagaki Toru, Hoshino Takanori, Machida Masahiko,
"First-principles calculation of mechanical properties of simulated debris $Zr_xU_{1-x}O_2$",
Journal of Nuclear Science and Technology, Vol.56, No.9-10, pp.915-921 (2019).

(10) Kimizuka Hajime, Ogata Shigenobu, Shiga Motoyuki,
"Unraveling anomalous isotope effect on hydrogen diffusivities in fcc metals from first principles including nuclear quantum effects",
Physical Review B, Vol.100, No.2, pp. 024104_1-024104_9 (2019).

(11) Chang Yong Lik, Sasaki Takehiko, Ribas-Ariño, Jordi, Machida, Masahiko, Shiga, Motoyuki,
"Understanding competition of polyalcohol dehydration reactions in hot water",
Journal of Physical Chemistry B, Vol.123, No.7, pp.1662-1671 (2019)

(12) Kim Minsik, Malins Alex, Yoshimura Kazuya, Sakuma Kazuyuki, Kurikami Hiroshi, Kitamura Akihiro, Machida Masahiko, Hasegawa Yukihiro, Yanagi Hideaki,
"Simulation study of the effects of buildings, trees and paved surfaces on ambient dose equivalent rates outdoors at three suburban sites near Fukushima Dai-ichi",
Journal of Environmental Radioactivity, Vol.210, pp.105803_1-105803_10 (2019).

(13) Matsushita Taiki, Nagai Yuki, Fujimoto Satoshi,
"Disorder-induced exceptional and hybrid point rings in Weyl/Dirac semimetals",
Physical Review B, Vol.100, No.24, pp.245205_1-245205_9 (2019).

(14) Malins Alex, Machida Masahiko, Vu The Dang, Aizawa Kazuya, Ishida Takekazu,
"Monte Carlo radiation transport modelling of the current-biased kinetic inductance detector",
Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A, Vol.953,
pp.163130_1-163130_7 (2020).

(15) Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
"First-principles calculation study on phonon thermal conductivity of thorium and plutonium dioxides: Intrinsic anharmonic phonon-phonon and extrinsic grain-boundary-phonon scattering effects",
Journal of Nuclear Materials, Vol.519, pp.45-51 (2019).

(16) Ohsawa Kazuhito, Toyama Takeshi, Hatano Yuji, Yamaguchi Masatake, Watanabe Hideo,
"Stable structure of hydrogen atoms trapped in tungsten divacancy",
Journal of Nuclear Materials, Vol.527, pp.151825_1-151825_7 (2019).

(17) Bendo Artenis, Maeda Tomoyoshi, Matsuda Kenji, Lervik Adrian, Holmestad Randi, Marioara Calin D., Nishimura Katsuhiko, Nunomura Norio, Toda Hiroyuki, Yamaguchi Masatake, Ikeda Kenichi, Homma Tomoyuki,
"Characterisation of structural similarities of precipitates in Mg-Zn and Al-Zn-Mg alloys systems",
Philosophical Magazine, Vol.99, No.21, pp.2619-2635 (2019).

＜査読無し研究論文＞

(1) Kim, Minsik, Malins Alex, 佐久間 一幸, 北村 哲浩, 町田 昌彦, 長谷川 幸弘, 柳 秀明,
"環境中空間線量率 3 次元分布計算システム(3D-ADRES)の研究開発; PHITS とリモートセンシングの融合による環境放射線量の推定",

Isotope News, No.765, pp.30-33 (2019).

(2) 永井 佑紀,
"自己学習モンテカルロ法",
物理学者、機械学習を使う, 朝倉書店, pp.74-86 (2019).

(3) 山田 進,
"疎行列の固有値計算",
固有値計算と特異値計算; 計算力学レクチャーコース, 丸善出版, pp.77-104 (2019).

(4) 数納 広哉, 奥村 雅彦, 町田 昌彦,
"粘土鉱物や菌類のセシウム吸着機構: 原子・分子論研究の現状と課題",
地盤工学会誌, Vol.67, No.10, pp.34-35 (2019).

＜査読付き会議論文＞

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

＜査読無し会議論文＞

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

【システム計算科学センター】

＜査読付き研究論文＞

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

＜査読無し研究論文＞

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

＜査読付き会議論文＞

なし

＜査読無し会議論文＞

なし

2. 国際会議、国内会議での発表等

【高度計算機技術開発室】

＜口頭発表＞

(1) 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 河村 拓馬, 中山 浩成, 下川辺 隆史,
"局所細分化格子ボルツマン法を用いたオクラホマシティにおけるトレーサー拡散解析",
第 24 回計算工学講演会, (さいたま, 日本, 2019 年 5 月 29 日-31 日).

(2) 長谷川 雄太, 青木 尊之, 小林 宏充, 白崎 啓太
"細分化格子 LBM に基づく LES の複数 GPU によるロードレースの空力計算",
第 24 回計算工学講演会, (さいたま, 日本, 2019 年 5 月 29 日-31 日).

(3) 河村 拓馬,
"可視化用粒子データを用いた In-Situ 可視化システムの SIMD 最適化",
JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 11 回シンポジウム, (東京, 日本, 2019 年 7 月 11 日-12 日).

(4) 小野寺 直幸,
"格子ボルツマン法による都市街区を対象とした物質拡散シミュレーション",
JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 11 回シンポジウム, (東京, 日本, 2019 年 7 月 11 日-12 日).

(5) Idomura Yasuhiro,
"Gyrokinetic simulation of fusion plasma",
9th East-Asia School and Workshop on Laboratory, Space, and Astrophysical Plasmas, (Nagoya, Japan, July 29-August 2, 2019).

(6) 関 暁之, 真弓 明恵, 村上 冶子, 斎藤 公明, 武宮 博, 井戸村 泰宏,
"福島における放射性物質分布調査,16; 福島県におけるモニタリングポストの測定結果の時間的統合", 日本原子力学会 2019 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-12 日).

(7) Idomura Yasuhiro, Ali Yussuf, Onodera Naoyuki, Hasegawa Yuta, Ina Takuya,
"Performance portability of large scale distributed Krylov solvers with OpenACC and CUDA",
OpenACC Annual Meeting 2019, (Kobe, Japan, September 2, 2019).

(8) 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 河村 拓馬, 中山 浩成, 下川辺 隆史, 青木 尊之,
"観測データを適用した局所細分化格子ボルツマン法によるトレーサー拡散解析",
日本機械学会第 32 回計算力学講演会(CMD 2019), (川越, 日本, 2019 年 9 月 16 日-18 日).

(9) 長谷川 雄太, 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏,
"局所細分化格子ボルツマン法における GPU 間相互接続技術を活用した高速化手法の検討",
日本機械学会第 32 回計算力学講演会(CMD 2019), (川越, 日本, 2019 年 9 月 16 日-18 日).

(10) 井戸村 泰宏,
"核融合プラズマのジャイロ運動論シミュレーション",
STE シミュレーション研究会, (広島, 日本, 2019 年 9 月 24 日-26 日).

(11) Kawamura Takuma,
"In-situ visualization based on particle based volume rendering",
1st CEA-JAEA Collaboration Workshop on Computational Nuclear Engineering,

(Kashiwa, Japan, Octeber 2 2019).

(12) Idomura Yasuhiro,
"Computational nuclear engineering at JAEA and Post-K project",
1st CEA-JAEA Collaboration Workshop on Computational Nuclear Engineering,
(Kashiwa, Japan, Octeber 2 2019).

(13) Onodera Naoyuki,
"GPU accelerated real-time plume dispersion analysis based on Lattice Boltzmann Method",
1st CEA-JAEA Collaboration Workshop on Computational Nuclear Engineering,
(Kashiwa, Japan, Octeber 2 2019).

(14) Obrejan Kevin, Idomura Yasuhiro, Honda Mitsuru,
"Influence of the normalised gyroradius on neoclassical transport in global gyrokinetic simulations using the code GT5D",
18th European Fusion Theory Conference (EFTC 2019), (Ghent, Belgium, October 7-10 2019).

(15) Ali Yussuf, Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Imamura Toshiyuki,
"GPU optimization of matrix solvers",
Joint US-Japan Workshop on PostK-ECP Collaboration and JIFT Exascale Computing Collaboration, (Kobe, Japan, October 28 2019).

(16) Idomura Yasuhiro,
"Status of GT5D",
Joint US-Japan Workshop on PostK-ECP Collaboration and JIFT Exascale Computing Collaboration, (Kobe, Japan, October 28 2019).

(17) Obrejan Kevin, Idomura Yasuhiro, Honda Mitsuru,
"Influence of the normalised ion gyroradius on collisional transport of impurities in full-f gyrokinetic simulations",
第 36 回プラズマ・核融合学会年会, (春日井, 日本, 2019 年 11 月 29 日-12 月 2 日).

(18) 井戸村 泰宏,
"イオン温度勾配駆動乱流における水素同位体効果の解析",
第 36 回プラズマ・核融合学会年会, (春日井, 日本, 2019 年 11 月 29 日-12 月 2 日).

(19) 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, Yussuf A., 山下 晋, 伊奈 拓也, 今村 俊幸,
"GPU による多相流解析コード JUPITER の Poisson 方程式の高速化",
第 33 回数値流体力学シンポジウム, (札幌, 日本, 2019 年 11 月 27 日-29 日).

(20) Idomura Yasuhiro,
"Communication-avoiding sparse matrix solvers for extreme scale nuclear CFD simulations",
Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (APCOM 2019), (Taipei, Taiwan, December 18-21 2019).

(21) Onodera Naoyuki,
"Real-time wind simulation using locally mesh-refined lattice Boltzmann method",

GPU Computing Workshop for Advanced Manufacturing 2019 (GPU 2019), (東京, 日本, 2019 年 12 月 6 日).

(22) 長谷川 雄太,
"格子ボルツマン法への適合細分化格子法の導入と複数 GPU 化のための諸実装",
第 32 回 LBM 研究会, (東京, 日本, 2019 年 12 月 20 日).

(23) Kawamura Takuma, Idomura Yasuhiro, Onodera Naoyuki,
"Interactive in-situ visualization of GPU-accelerated simulations using particle-based volume rendering",
International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2020), (Fukuoka, Japan, January. 15-17, 2020).

(24) 河村 拓馬,
"粒子ベース In-Situ 可視化技術とその VR 化の展望",
先進的可視化環境を用いた可視化情報の研究会(VR 2019), (土岐, 日本, 2020 年 1 月 23 日-24 日).

(25) Idomura Yasuhiro, Ali Yussuf, Ina Takuya, Imamura Toshiyuki,
"Optimization of Fusion Plasma Turbulence Code GT5D on FUGAKU and SUMMIT",
The 2nd R-CCS International Symposium, (Kobe, Japan, February. 17-18, 2020).

【シミュレーション技術開発室】

＜口頭発表＞

(1) 山田 進, 今村 俊幸, 町田 昌彦,
"ハバードモデルのハミルトニアンに対する高性能固有値ソルバ",
大規模並列数値計算技術に関する研究集会(LSPANC 2019 March), (March 19, 神戸, 日本, 2020).

(2) Yamada Susumu, Machida Masahiko,
"Studies for environmental impact of released radioactive materials under their mitigation measures in both inside and outside FDNPP harbor area using a nested CFD simulation code",
European Geosciences Union General Assembly 2019, (Vienna, Austria, April 7-12 2019).

(3) 志賀 基之,
"自由エネルギー面上の鞍点探索法の開発",
第 22 回理論化学討論会, (札幌, 日本, 2019 年 5 月 27 日-29 日).

(4) Thomsen Bo,
"Describing molecular potential energy surfaces using general functions",
第 22 回理論化学討論会, (札幌, 日本, 2019 年 5 月 27 日-29 日).

(5) Liu Xudong, Machida Masahiko, Saito Kimiaki, Tanimura Naoki,
"A Study of KURAMA measurement data by sparse modeling",
International Topical Workshop on Fukushima Decommissioning Research (FDR 2019), (Naraha, Japan, May 24-26 2019).

(6) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,

"Understanding the broadening of the $H_9O_4^+$ Infra-Red spectrum through clustering of path integral molecular dynamics trajectories",
15th International Workshop on Quantum Reactive Scattering (QRS 2019), (Saitama, Japan, July 1-5 2019).

(7) Ebihara Kenichi, Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake,
"Rate theory model of phosphorus grain boundary segregation considering atomistic processes",
5th International Workshop on Structural Materials for Innovative Nuclear Systems (SMINS-5), (Kyoto, Japan, July 8-11 2019).

(8) Itakura Mitsuhiro,
"First-principles calculation of mechanical properties of simulated debris $Zr_xU_{1-x}O_2$ ",
Fukushima Research Conference on Materials Science for Severe Accident and Fukushima Daiichi Decommissioning Workshop 2019, (Naraha, Japan, July 10-12 2019).

(9) Yamada Susumu, Machida Masahiko, Imamura Toshiyuki,
"Tuning strategy of solving the Hubbard model by LOBPCG method on CUDA GPU",
15th U.S. National Congress on Computational Mechanics (USNCCM-15), (Austin, U. S. A., July 28-August 1 2019).

(10) Takahashi Yoshio, Tsuboi Hiroyuki, Yamaguchi Akiko,
"Molecular geochemistry of interactions of various hard cations and phyllosilicates related to their environmental behaviors and isotope fractionation",
29th Goldschmidt Conference (Goldschmidt 2019), (Barcelona, Spain, August 18-23 2019).

(11) Malins Alex, Imamura Naohiro, Niizato Tadafumi, Kim Minsik, Sakuma Kazuyuki, Shinomiya Yoshiki, Miura Satoru, Machida Masahiko,
"Using PHITS to calculate ambient dose equivalent rates in radiocesium contaminated forests",
高エネルギー加速器研究機構における PHITS 研究会, (つくば, 日本, 2019 年 8 月 5 日-6 日).

(12) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Calculating $pK_a(H_2O)$ and $pK_a(D_2O)$ using path integral molecular dynamics",
ハイドロジェノミクス第 4 回若手育成スクール, (岡崎, 日本, 2019 年 8 月 23 日-24 日).

(13) Nagai Yuki, Qi Yang, Isobe Hiroki, Kozii, Vladyslav, Fu, Liang,
"Bulk topological Fermi arcs in heavy fermion systems; Non-Hermitian topology meets DMFT",
International Workshop on Quantum Criticality and Topology in Correlated Electron Systems, (Dresden, Germany, August 5-9 2019).

(14) Nagai Yuki, Okumura Masahiko, Tanaka Akinori,
"Self-learning Monte Carlo method; Speedup of the Markov chain Monte Carlo with machine learning",

Quantum Engineering meets Harmonic Analysis, (Saskatoon, Canada, August 12-16 2019).

(15) 佐々 成正,
"シンプレクティック数値積分法とリュービルの定理",
日本応用数理学会 2019 年度年会, (東京, 日本, 2019 年 9 月 3 日-5 日).

(16) 永井 佑紀, 奥村 雅彦, 小林 恵太, 志賀 基之,
"自己学習ハイブリッドモンテカルロ法; 第一原理分子シミュレーションの高速化",
日本物理学会 2019 年秋季大会(物性), (岐阜, 日本, 2019 年 9 月 10 日-13 日).

(17) Malins Alex, 今村 直広, 新里 忠史, Kim Minsik, 佐久間 一幸, 篠宮 佳樹, 三浦 覚, 町田 昌彦,
"福島における放射性物質分布調査,9; 福島第一原発事故後 6 年間にわたる森林内での周辺線量当量率の経時変化解析",
日本原子力学会 2019 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).

(18) 中村 博樹, 町田 昌彦, 加藤 正人,
"CaF_2 の基礎特性の評価,2; DFT に基づく高温物性解析",
日本原子力学会 2019 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).

(19) Liu Xudong, Machida Masahiko, Saito Kimiaki, Tanimura Naoki,
"Investigation on distribution of radioactive substances in Fukushima, 4; Study on the ecological half-lives of ambient dose rates using car-borne survey data with fused LASSO",
日本原子力学会 2019 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).

(20) 奥村 雅彦, 小林 恵太, 中村 博樹, 板倉 充洋, 町田 昌彦,
"機械学習分子動力学法によるコンクリート中セシウム拡散シミュレーション",
日本原子力学会 2019 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).

(21) 小林 恵太, 奥村 雅彦, 中村 博樹, 板倉 充洋, 町田 昌彦,
"機械学習分子動力学による二酸化トリウムの物性値評価",
日本原子力学会 2019 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).

(22) 海老原 健一, 鈴土 知明,
"粒界領域中におけるリン移動の分子動力学シミュレーション",
日本金属学会 2019 年秋季(第 165 回)講演大会, (岡山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).

(23) 板倉 充洋, 山口 正剛,
"Y_8Zn_6 クラスタ中の格子間原子の安定性解析",
日本金属学会 2019 年秋季(第 165 回)講演大会, (岡山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).

(24) Yamaguchi Akiko, Kuribara Yuichi, Okumura Masahiko, Takahashi Yoshio,
"Fixation of radium by adsorption on clay minerals based on analyses of core samples around Ningyo-toge uranium mine",
17th International Conference on the Chemistry and Migration Behavior of Actinides and Fission Products in the Geosphere (Migration 2019), (Uji, Japan, September 15-20 2019).

(25) Suno Hiroya, Machida Masahiko, Dohi Terumi, Omura Yoshihito, Sasaki Yoshito,

"Computational molecular study of predominant organic molecules in forest ecosystems concerning cesium accumulation and transport",
17th International Conference on the Chemistry and Migration Behavior of Actinides and Fission Products in the Geosphere (Migration 2019), (Uji, Japan, September 15-20 2019).

(26) Okumura Masahiko, Kerisit Sebastien, Bourg Ian, Lammers Laura, Ikeda Takashi, Sassi Michel, Rosso Kevin, Machida Masahiko,
"Addressing radiocesium contamination in Fukushima waste soil through the lens of systematic numerical simulations",
17th International Conference on the Chemistry and Migration Behavior of Actinides and Fission Products in the Geosphere (Migration 2019), (Uji, Japan, September 15-20 2019).

(27) Nagai Yuki,
"Non hermitian physics in strongly electron systems",
3rd EPiQS-TMS alliance workshop on Topological Phenomena in Quantum Materials (TPQM 2019), (Santa Barbara, U. S. A., October 21-25 2019).

(28) Nagai Yuki, Okumura Masahiko, Kobayashi Keita, Shiga Motoyuki,
"Self-learning Hybrid Monte Carlo for first-principles molecular simulations",
Deep Learning and Physics 2019 (DLAP 2019), (Kyoto, Japan, October 31- November 2 2019).

(29) 永井 佑紀,
"超高速 BdG シミュレーション",
第 27 回渦糸物理ワークショップ, (京都, 日本, 2019 年 12 月 17 日-19 日).

(30) Kim Minsik, Malins Alex, 町田 昌彦, 吉村 和也, 吉田 浩子, 斎藤 公明,
"福島県飯舘村における家屋周りの空間線量率分布の特徴について",
第 2 回日本放射線安全管理学会・日本保健物理学会合同大会, (仙台, 日本, 2019 年 12 月 4 日-7 日).

(31) Koshiro Hidehiko, Nagai Yuki,
"Self-learning Monte Carlo simulation in the semiclassical site-diluted double-exchange model",
Workshop on Tensor Network States; Algorithms and Applications 2019-2020 (TNSAA 2019-2020), (Taipei, Taiwan, December 4-6 2019).

(32) Nagai Yuki, Qi Yang, Isobe Hiroki, Kozii Vladyslav, Fu Liang,
"Non-Hermitian effective Hamiltonian for low-energy quasiparticles",
International Conference on Topological Materials Science 2019 (TopoMat2019), (Kyoto, Japan, December 3-7 2019).

(33) 永井 佑紀, 奥村 雅彦, 小林 恵太, 志賀 基之,
"自己学習ハイブリッドモンテカルロ法; 機械学習による第一原理分子シミュレーションの高速化",
第 33 回分子シミュレーション討論会, (名古屋, 日本, 2019 年 12 月 9 日-11 日).

(34) Suzudo Tomoaki, Tsuru Tomohito,
"First principles modeling on radiation defects in W and W-based alloys",
4th International Workshop on Models and Data for Plasma-Material Interaction in Fusion Devices (MoD-PMI 2019), (Toki, Japan, June 18-20 2019).

(35) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Calculating the pK_w of subcritical and critical H_2O and D_2O",
1st International Symposium "Hydrogenomics" combined with 14th International Symposium Hydrogen & Energy, (Sapporo, Japan, Jan. 14, 2020).

(36) 海老原 健一, 鈴土 知明,
"分子動力学シミュレーションによるBCC鉄Σ3(111)粒界およびΣ5(0-13)粒界中のリンの移動に関する考察",
令和元年度材料照射研究会「Irradiation 3.0 に向けて」, (仙台, 日本, 2020 年 1 月 9 日-10 日).

(37) 鈴土 知明, 鬼塚 貴志, 福元 謙一,
"BCC 鉄におけるらせん転位の挙動; 分子動力学シミュレーションによる研究",
令和元年度材料照射研究会「Irradiation 3.0 に向けて」, (仙台, 日本, 2020 年 1 月 9 日-10 日).

(38) Nagai Yuki,
"Self-learning Monte Carlo; Machine learning speeds up the Markov chain Monte Carlo",
TPI Seminars in University of Alberta, (Edmonton, Canada, Feb. 27, 2020).

(39) Suzudo Tomoaki, Toyama Takeshi, Nagai Yasuyoshi,
"Origin of hardening in spinodally-decomposed Fe-Cr binary alloys",
149th Annual Meeting & Exhibition (TMS 2020), (San Diego, U. S. A., Feb. 23-27, 2020).

(40) Zhao Can, Suzudo Tomoaki, Toyama Takeshi, Nagai Yasuyoshi,
"A Study of Cu diffusion in Fe-Cu alloy by kinetic Monte Carlo simulation",
日本金属学会 2019 年秋期(第 165 回)講演大会, (岡山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).

(41) Yoshida Kenta, Du Yufeng, Shimada Yusuke, Suzudo Tomoaki, Toyama Takeshi, Inoue Koji, Arakawa Kazuto, Milan Konstantinovic J., Gerard Robert., Nagai Yasuyoshi,
"In-situ weak-beam scanning transmission electron microscopy for quantitative dislocation analysis in nuclear materials during post-irradiation annealing",
12th Asia-Pacific Microscopy Conference (APMC 2020), (Hyderabad, India, Feb. 3-7, 2020).

【システム計算科学センター】

＜口頭発表＞

(1) 町田 昌彦, 山田 進,
"水と共に動くセシウムのシミュレーション; 大柿ダム湖でセシウムはどこに?",
環境創造センター成果報告会, (三春, 日本, 2019 年 5 月 20 日).

(2) 町田 昌彦, 岩田 亜矢子, 山田 進,

"1F 港湾及び沿岸での海水及び放射性物質の動態シミュレーション技術の進展; モニタリングデータの取り込み",
日本原子力学会 2019 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).

(3) 武宮 博, 根本 美穂, 林 寛子, 関 暁之, 斎藤 公明,
"福島における放射性物質分布調査,6; 異なる手法による観測データを統合した 80 km 圏内空間線量率マップの作成",
日本原子力学会 2019 年秋の大会, (富山, 日本, 2019 年 9 月 11 日-13 日).

3. 技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

(1) システム計算科学センター,
"平成 30 年度計算科学技術研究実績評価報告",
JAEA-Evaluation 2019-007.

(2) システム計算科学センター高性能計算技術利用推進室,
"平成 30 年度大型計算機システム利用による研究成果報告集",
JAEA-Review 2019-017.

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

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

5. 研究発表会等の開催

(1) システム計算科学センター・原子力基礎工学研究センター合同セミナー
「NEA データバンクの計算コード配布サービスについて」
2019 年 11 月 26 日、原子力科学研究所情報交流棟北ウイング第 2 会議室

(2) 第 31 回 CCSE ワークショップ
「計算科学を活用した大気・海洋・水系における汚染物質拡散評価」
2020 年 2 月 21 日、東海村産業・情報プラザ 1F 多目的ホール

6. 受賞等

(1) 第 24 回計算工学講演会グラフィックスアワード特別賞（Visual Computing 賞）
小野寺直幸
（第 24 回計算工学講演会、2019 年 5 月）

(2) 国際会議 Migration 2019 ポスター賞
山口瑛子
（国際会議 Migration 2019、2019 年 9 月）

7. 特許等の状況

(1) 特許の出願及び登録
なし

(2) 成果の活用（利用許諾）による収入

件名（成果の内容）	契約先（販売者）	権利／契約種別	今年度収入額
並列分子動力学ステンシル他２件	株式会社 JSOL	プログラム著作権／利用許諾	1,647,325 円

8. 外部資金の獲得に関連する事項

室	予算額（千円）（件数）
高度計算機技術開発室	81,675（ 8）
シミュレーション技術開発室	30,904（18）
合計	112,579（26）

【高度計算機技術開発室】

(1) 東京電力株式会社福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の分布状況等に関する調査（原子力規制庁）15,639 千円

(2) 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化（分担課題：核融合炉の炉心設計）（東京大学） 10,050 千円

(3) 広域線量分布測定用装置（KURAMA-Ⅱ）データ解析・補正委託業務（福島県） 44,087 千円

(4) 福島県内空間線量率の経時変化傾向の分析（福島環境創造センター）8,649 千円

(5) 電子加熱に対する不純物イオン輸送の過渡的応答に関する研究（日本学術振興会：科研費（基盤 C)） 1,430 千円

(6) GPU スーパーコンピュータによる原子炉内溶融物の移行挙動解析（日本学術振興会：科研費（基盤 C)） 1,300 千円

(7) 次世代の船舶運航・操船支援システムの研究開発（日本学術振興会：科研費（基盤 B)） 390 千円

(8) 都市街区スケールとメソスケールをつなぐ大規模数値計算（日本学術振興会：科研費（基盤 C)） 130 千円

【シミュレーション技術開発室】

(1) 水素分配制御によるアルミニウム合金の力学特性最適化（科学技術振興機構：産学共創）1,300 千円

(2) 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） 741 千円

(3) 革新炉材料開発のための次世代ナノスケール解析法の開発と照射後実験研究の国際ハブの構築（原子力安全研究協会） 608 千円

(4) 水を反応場とするグリーンケミストリーの計算化学（日本学術振興会:科研費（基盤 C)）650 千円

(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)） 1,170 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)） 520 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)） 1,430 千円

(8) トポロジカルフェルミアーク：有限温度での特異な準粒子励起の研究（日本学術振興会:科研費（基盤 C)） 1,950 千円
(9) 層状ケイ酸塩鉱物における原子レベルキンク構造の解明（日本学術振興会:科研費（新学術領域研究)） 1,560 千円
(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) 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
(12) リチウム６吸着イオン伝導体による革新的同位体分離に関する研究（日本学術振興会:科研費（基盤 B)） 300 千円
(13) 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
(14) 水素の先端計算による水素機能の高精度予測（日本学術振興会:科研費（新学術領域研究)） 10,842 千円
(15) 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
(16) モデリングによるキンク形成・強化のメカニズム解明（日本学術振興会:科研費（新学術領域研究)） 3,900 千円
(17) 計算科学手法を用いた空孔型欠陥の定量的評価に基づく水素脆化モデルの検証（日本学術振興会:科研費（基盤 C)） 2,210 千円
(18) タングステンにおいて照射欠陥生成を抑制する合金元素の探索（日本学術振興会:科研費（基盤 C)） 2,080 千円

9. 産学官との連携に関連する事項

室	共同研究	委託研究	受託研究	研究協定
高度計算機技術開発室	5	0	3	0
シミュレーション技術開発室	3	0	3	0
両室共通	0	0	0	1
合計	8	0	6	1

●共同研究

【高度計算機技術開発室】

(1) 大規模有限要素法解析のための連立一次方程式解法の高度化に関する研究（東京大学）
(2) 大規模シミュレーションに対する粒子ベース可視化のための高度化に関する研究（京都大学）
(3) 大規模流体解析のための適合細分化格子法の高度化に関する研究（東京大学、東京工業大学）
(4) 大規模シミュレーションのための反復行列解法の高度化に関する研究（東京大学）
(5) 原子力分野における機構論的シミュレーションのための大規模並列計算手法の研究開発（理化学研究所）

【シミュレーション技術開発室】

(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（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）

●受託研究

【高度計算機技術開発室】

(1) 広域線量分布測定用装置（KURAMA-Ⅱ）データ解析・補正委託業務（福島県）（福島研究開発部門受託に参加）
(2) 革新的クリーンエネルギーシステムの実用化（分担課題：核融合炉の炉心設計）（東京大学）
(3) 福島県内空間線量率の経時変化傾向の分析（福島環境創造センター）（福島研究開発部門受託に参加）

【シミュレーション技術開発室】

(1) 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）
(2) 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）
(3) 革新炉材料開発のための次世代ナノスケール解析法の開発と照射後実験研究の国際ハブの構築（原子力安全研究協会）

●研究協定

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

10. 原子力機構内の他部門との連携に関連する事項

研究の実施にあたっては、機構としての統合効果を発揮し、研究開発を効率的･効果的に推進する観点から、以下のとおり 28 件に及ぶ機構内連携を実施している。

(1) 包括的評価システムの構築
部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）
概要：福島第一原子力発電所事故に関してデータベース、解析コード、ウェブサイトを構築・連携させ、福島復興に資する情報を専門家および一般向けに提供する。

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

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

(4) 河口及び沿岸でのセシウム長期輸送解析
部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）、原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）、バックエンド研究開発部門（東濃地科学センター）

概要：福島長期環境予測に資するため、河口及び沿岸での 2/3 次元のセシウム長期輸送解析システムを開発する。

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

(6) ADS 材料の脆化評価
部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）
概要：ADS 炉ビーム窓材料の液体金属脆化と照射脆化について計算科学による評価を行う。

(7) 酸化物アクチノイドの計算科学による物性評価
部署：高速炉・新型炉研究開発部門（高速炉サイクル研究開発センター）
概要：第一原理計算を基にした数値シミュレーションによる MOX 燃料の熱物性・機械的特性の評価を行う。

(8) 燃料溶融複雑系の解析に関する技術協力
部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）
概要：燃料溶融複雑系の大規模シミュレーションデータの高度化に向けて計算モデル拡張の支援、高速行列ソルバの開発、高速可視化処理ツールの開発を行う。

(9) 放射性物質拡散解析に関する技術協力
部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）
概要：放射性物質拡散解析のための局地的気流解析シミュレーションの高速化を支援する。

(10) 東京電力株式会社福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の分布データの統合
部署：安全研究・防災支援部門（安全研究センター）
概要：異なる手法により得られた空間線量率のデータを統計的手法により統合し、稠密かつ高精度な分布を示す。

(11) 過酷事故解析コードのエクサスケール計算技術開発
部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）
概要：多相熱流動解析コード JUPITER におけるアクセラレータ利用技術、大規模行列ソルバ、マルチスケール流体モデルの開発

(12) 汚染物質拡散解析コードのエクサスケール計算技術開発
部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）
概要：アクセラレータ向け流体計算モデルによる実時間汚染物質拡散解析、アンサンブル計算手法の開発

(13) 熱流動解析コード SPIRAL の高速化支援
部署：高速炉・新型炉研究開発部門（高速炉サイクル研究開発センター）
概要：熱流動解析コード SPIRAL における行列解法の改良

(14) 環境動態解析コードの高速化支援
部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）
概要：メソスケール気象モデル WRF の並列処理性能評価、大気拡散モデル GEARN/SPEEDI-II の並列最適化、局所気流解析コード LOHDIM-LES における植生モ

デル導入

(15) 熱流動解析コード TPFIT の高速化支援

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター））

概要：多相流体コード TPFIT における粒子追跡機構の並列最適化

(16) 熱流動解析コード OpenFORM の高速化支援

部署：安全研究・防災支援部門（安全研究センター）

概要：汎用 CFD コード OpenFOAM の並列性能評価

(17) モニタリングデータから空間線量率変化の将来予測

部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）

概要：機械学習（スパースモデリング・LASSO）技術を適用

(18) 異種モニタリングデータから統合マップを作成

部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）

概要：機械学習（ベイズ統計等）技術を適用

(19) 1F 港湾・沿岸モニタリングデータからのインベントリー推定

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

(20) ガラス状物質の構造解析

部署：原子力科学研究部門（J-PARC センター）

概要：中性子非弾性散乱データ解釈に機械学習分子動力学法を適用

(21) 核燃料の高温物性解析

部署：高速炉・新型炉研究開発部門（高速炉サイクル研究開発センター）

概要：酸化物高温物性解析に機械学習分子動力学法を適用

(22) 航空機モニタリングから地上線量率の推定

部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）

概要：機械学習（深層学習）コード分析とその高速化

(23) 中性子非弾性散乱データの分析技術

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

概要：適用技術調査

(24) 構造材表面観察画像の推定

部署：安全研究・防災支援部門（安全研究センター）

概要：機械学習（深層学習）コード分析と高速化

(25) 環境動態シミュレーションの高度化

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

概要：AI 適用に向け機構スパコンのノード貸し出し（リソース提供）

(26) Cs 土壌・コンクリ浸透解析

部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）

概要：Cs 土壌・コンクリ浸透解析に機械学習分子動力学法の適用を検討

(27) 核燃料の CT 画像解析技術

部署：高速炉・新型炉研究開発部門（高速炉サイクル研究開発センター）

概要：課題調査と技術コンサル（助言他）

(28) 燃料デブリの機械的特性の計算

部署：廃炉国際共同研究センター

概要：燃料デブリの機械的特性の計算、実験結果との比較および解析

11. 国際協力

国際協力の一覧を以下に示す。

(1) 原子力・代替エネルギー庁（CEA）：仏国

“フランス原子力庁と日本原子力研究開発機構との原子力研究開発分野における協力に関するフレームワーク協定”（この協定中の一つのテーマとして計算科学が位置づけられている）

（2006 年度～）

(2) カリフォルニア大学バークレー校（UCB）：米国

“地層処分及び燃料サイクルに関する共同研究契約”（この共同研究の一環として、計算科学の観点から協力している）

（2008 年度～、システム計算科学センターの協力は 2011 年度～）

(3) パシフィックノースウェスト国立研究所（PNNL）：米国

“環境汚染の評価及び浄化に係る共同研究契約”（この共同研究の一環として、計算科学の観点から協力している）

（2011 年度～）

(4) 国際原子力機関（IAEA）

“国際協力研究事業（食糧・農業に影響を及ぼす原子力災害への対策）「食糧・農業モニタリングデータの収集、管理および提供のためのソフトウェアプラットフォームの研究開発」”（IAEA 主導のもと 8 ヶ国が参加）

（2013 年度～）

(5) ローレンス・バークレイ国立研究所（LBNL）：米国

“2011 年に発生した福島事故による Cs の広域放出を経験した福島地域の環境復興に関する委託研究”（この研究の一環として、計算科学の観点から協力している）

（2015 年度～）