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 block-structured 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-adsorption type deposits",
Chemistry Letters, Vol.49, No.8, pp.909-911 (2020).

(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 Mg_2Si and Al_7FeCu_2 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 Minsik, Sakuma Kazuyuki, Shinomiya Yoshiki, Miura Satoru, Machida Masahiko,
"Calculations for ambient dose equivalent rates in nine forests in eastern Japan from ^{134}Cs and ^{137}Cs 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 Σ5 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 CaF_2",

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 CaF_2 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

(1) 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 2021/8/25).

(2) 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
―原子力機構などが開発―」、
https://newswitch.jp/p/25743
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 2021/8/25).

(3) 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」

(4) 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」
―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	1,824,698 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	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。

【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況予報データの受信、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～）