令和４年１月28日
計算科学技術研究・評価委員会
参考４

平成30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
システム計算科学センター	1	0
高度計算機技術開発室	4	6
シミュレーション技術開発室	21	6
合計	26	12

（平成31年3月31日現在）

【システム計算科学センター】

＜研究論文＞

(1) 中島 憲宏,
「計算科学技術の視点からの分析」
福島第一原子力発電所事故: その全貌と明日に向けた提言; 学会事故調最終報告書,
pp.228-237, (2014)

【高度計算機技術開発室】

＜研究論文＞

(1) Inagaki Atsushi, Kanda Manabu, Ahmad N. H., Yagi Ayako, Onodera Naoyuki, Aoki Takayuki,
“A Numerical study of turbulence statistics and the structure of a spatially-developing boundary layer over a realistic urban geometry”,
Boundary-Layer Meteorology, Vol.164, No.2, pp.161-181, (2017)

(2) Matsuoka Seikichi, Idomura Yasuhiro, Satake Shinsuke,
“Neoclassical transport benchmark of global full-f gyrokinetic simulation in stellarator configurations”,
Physics of Plasmas, Vol.25, No.2, pp. 022510_1- 022510_10, (2018)

(3) Wainwright H. M., Seki Akiyuki, Mikami Satoshi, Saito Kimiaki,
“Characterizing regional-scale temporal evolution of air dose rates after the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant accident”,
Journal of Environmental Radioactivity, Vol.189, pp.213-220, (2018)

(4) Maeyama Shinya, Watanabe Tomohiko, Idomura Yasuhiro, Nakata Mot oki, Nunami Masanori,
“Implementation of a gyrokinetic collision operator with an implicit time integration scheme and its computational performance”,
Computer Physics Communications, Vol.235, pp.9-15, (2019).

＜査読付き会議論文＞

(1) Shimokawabe Takashi, Endo Toshio, Onodera Naoyuki, Aoki Takayuki,

“A Stencil framework to realize large-scale computations beyond device memory capacity on GPU supercomputers”,
Proceedings of 2017 IEEE International Conference on Cluster Computing (IEEE Cluster 2017) (Internet), pp.525-529, (2017)

(2) Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro,
“Acceleration of wind simulation using locally mesh-refined Lattice Boltzmann Method on GPU-Rich supercomputers”,
Lecture Notes in Computer Science 10776 (Proceedings of 4th Asian Conference on Supercomputing Frontiers), pp.128-145, (2018)

(3) Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Mayumi Akie, Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki,
“Application of a preconditioned Chebyshev basis communication-avoiding conjugate gradient method to a multiphase thermal-hydraulic CFD code”,
Lecture Notes in Computer Science 10776 (Proceedings of 4th Asian Conference on Supercomputing Frontiers), pp.257-273, (2018)

(4) Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro,
“Acceleration of plume dispersion simulation using locally mesh-refined lattice Boltzmann method”,
Proceedings of 26th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-26) (Internet), p.7, (2018).

(5) Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Yussuf A., Shimokawabe Takas hi,
“Communication Reduced Multi-time-step Algorithm for Real-time Wind Simulation on GPU-based Supercomputers”,
Proceedings of 9th Workshop on Latest Advances in Scalable Algo rithms for Large-Scale Systems (ScalA 2018) (Internet), pp.9-16, (2018).

(6) Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Yamashita Susumu, Onodera Naoyuki, Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki,
“Communication avoiding multigrid preconditioned conjugate gradient method for extreme scale multiphase CFD simulations”,
Proceedings of 9th Workshop on Latest Advances in Scalable Algo rithms for Large-Scale Systems (ScalA 2018) (Internet), pp.17-24, (2018).

【シミュレーション技術開発室】
＜研究論文＞

(1) Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Machida Masahiko,
“Topological s-wave pairing superconductivity with spatial inhomogeneity; Midgap-state appearance and robustness of superconductivity”,
Journal of the Physical Society of Japan, Vol.84, No.3, pp.034711_1-034711_8, (2015)

(2) Honda Tomohiro, Minoshima Yusuke, Yokoi Yuki, Takayanagi Toshiyuki, Shiga Motoyuki,
“Semiclassical dynamics of electron attachment to guanine-cytosine base pair”,

Chemical Physics Letters, Vol.625, pp.174-178, (2015)
(3) Okumura Masahiko, Kerisit S., Bourg, I. C., Lammers L. N., Ikeda Takashi, Sassi M., Rosso, K. M., Machida Masahiko,
"Radiocesium interaction with clay minerals; Theory and simulation advances Post-Fukushima",
Journal of Environmental Radioactivity, Vol.189, pp.135-145, (2018)
(4) Doihara Kohei, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Aichi Masaatsu, Suzuki Katsuyuki,
"Atomic simulations to evaluate effects of stacking fault energy on interactions between edge dislocation and spherical void in face-centred cubic metals",
Philosophical Magazine, Vol.98, No.22, pp.2061-2076, (2018)
(5) Suzudo Tomoaki, Tsuru Tomohito, Hasegawa Akira,
"First-principles study of solvent-solute mixed dumbbells in body-centered-cubic tungsten crystals",
Journal of Nuclear Materials, Vol.505, pp.15-21, (2018)
(6) 海老原 健一,
「鉄鋼材料における水素昇温脱離解析のモデリングの現状と課題」,
まてりあ, Vol.57, No.7, pp.338-344, (2018)
(7) Ebihara Kenichi, Suzudo Tomoaki,
"Atomistic simulation of phosphorus segregation to Σ3(111) symmetrical tilt grain boundary in α-iron",
Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, Vol.26, No.6, pp. 065005_1-065005_10, (2018)
(8) Nordlund K., Zinkle S. J., Sand A. E., Granberg F., Averback R. S., Stoller R., Suzudo Tomoaki, Malerba L., Banhart F., Weber W. J., Willaime F., Dudarev S. L., Simeone D.,
"Improving atomic displacement and replacement calculations with physically realistic damage models",
Nature Communications, Vol.9, pp. 1084_1-1084_8, (2018).
(9) Yamaguchi Masatake, Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiro, Tsuru Tomohito, Matsuda Kenji, Toda Hiroyuki,
"First-principles calculation of multiple hydrogen segregation along aluminum grain boundaries",
Computational Materials Science, Vol.156, pp.368-375, (2019).
(10) Ikeda Shugo, Tsuchiya Yu, Zhang X.-W., Kishimoto Shunji, Kikegawa Takumi, Yoda Yoshitaka, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko, Glasbrenner J., Kobayashi Hisao,
"New antiferromagnetic order with pressure-induced superconductivity in EuFe2As2",
Physical Review B, Vol.98, No.10, pp.100502_1-100502_6, (2018).
(11) Ozama Eiki, Adachi Sadia, Takayanagi Toshiyuki, Shiga Motoyuki,
"Quantum simulation verifies the stability of an 18-coordinated actinium-helium complex",
Chemistry; A European Journal, Vol.24, No.48, pp.12716-12721, (2018).

(12) Nakanishi Daiki, Kawabata Tomoya, Doihara Kohei, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Suzuki Katsuyuki,
"Effects of stacking fault energies on formation of irradiation-induced defects at various temperatures in face-centred cubic metals",
Philosophical Magazine, Vol.98, No.33, pp.3034-3047, (2018).
(13) Hayakawa Sho, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Aichi Masaatsu, Suzuki Katsuyuki,
"Interactions between clusters of self-interstitial atoms via a conservative climb in BCC-Fe",
Philosophical Magazine, Vol.98, No.25, pp.2311-2325, (2018).
(14) Nordlund K., Zinkle S. J., Sand A. E., Granberg F., Averback R. S., Stoller R. E., Suzudo Tomoaki, Malerba L., Banhart F., Weber W. J., Willaime F., Dudarev S. L., Simeone D.,
"Primary radiation damage; A Review of current understanding and models",
Journal of Nuclear Materials, Vol.512, pp.450-479, (2018).
(15) Malins A., Kurikami Hiroshi, Kitamura Akihiro, Machida Masahiko,
"Modelling the effect of mechanical remediation on dose rates above radiocesium contaminated land",
Remediation Measures for Radioactively Contaminated Areas, pp.259-272, (2019).
(16) Nishimura Katsuhiko, Matsuda Kenji, Lee S., Nunomura Norio, Shimano Tomoki, Bendo A., Watanabe Katsumi, Tsuchiya Taiki, Namiki Takahiro, Toda Hiroyuki, Yamaguchi Masatake,
"Abnormally enhanced diamagnetism in Al-Zn-Mg alloys",
Journal of Alloys and Compounds, Vol.774, pp.405-409, (2019).
(17) Asari Keisuke, Hetland O. S., Fujita Satoshi, Itakura Mitsuhiro, Okita Taira,
"The effect of stacking fault energy on interactions between an edge dislocation and a spherical void by molecular dynamics simulations",
Journal of Nuclear Materials, Vol.442, No.1, pp.360-364 (2013).
(18) 戸田 裕之, 山口 正剛, 松田 健二, 清水 一行, 平山 恭介, Su H., 藤原 比呂, 海老原 健一, 板倉 充洋, 都留 智仁, 西村 克彦, 布村 紀男, Lee S., 土屋 大樹, 竹内晃久, 上杉 健太朗,
「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」,
鉄と鋼, Vol.105, No.2, pp.240-253, (2019).
(19) Bendo A., Matsuda Kenji, Lee S., Nishimura Katsuhiko, Toda Hiro yuki, Shimizu Kazuyuki, Tsuru Tomohito, Yamaguchi Masatake,
"Microstructure evolution in a hydrogen charged and aged Al-Zn-Mg alloy",
Materialia, Vol.3, pp.50-56, (2018).
(20) Shiga Motoyuki, Tuckerman M. E.,
"Finding free-energy landmarks of chemical reactions",
Journal of Physical Chemistry Letters, Vol.9, No.21, pp.6207-62 14, (2018).
(21) Suzuki Kento, Miyazaki Takaaki, Takayanagi Toshiyuki, Shiga Mot oyuki,

“Nuclear quantum effects in the direct ionization process of pure helium clusters; Path-integral and ring-polymer molecular dynamics simulations on the diatomics-in-molecule potential energy surfaces”,
Physical Chemistry Chemical Physics, Vol.20, No.41, pp.26489-26 499, (2018).

＜査読付き会議論文＞

(1) Higashi Yoichi, Nagai Yuki, Yoshida Tomohiro, Kato Masaru, Yanase Yoichi,
“Excitation spectra and wave functions of quasiparticle bound states in bilayer Rashba superconductors”,
Physica C (Proceedings of 27th International Symposium on Superconductivity), Vol.518, pp.1-4, (2015)

(2) Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki, Machida Masahiko,
“Communication avoiding Neumann expansion preconditioner for LOBPCG method; Convergence property of exact diagonalization method for Hubbard model”,
Parallel Computing is Everywhere (Proceedings of International Conference on Parallel Computing), pp.27-36, (2018)

(3) Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki, Machida Masahiko,
“High performance LOBPCG method for solving multiple eigenvalues of Hubbard model; Efficiency of communication avoiding Neumann expansion preconditioner”,
Lecture Notes in Computer Science 10776 (Proceedings of 4th Asian Conference on Supercomputing Frontiers), pp.243-256, (2018)

(4) 山口 正剛, 都留 智仁, 海老原 健一, 板倉 充洋,
「アルミニウムのポア内表面における水素解離吸着と表面エネルギー低下」,
軽金属, Vol,68, No.11, pp.588-595, (2018).

(5) 海老原 健一, 山口 正剛, 都留 智仁, 板倉 充洋,
「数値シミュレーションによるアルミニウムの水素昇温脱離曲線の解釈」,
軽金属, Vol,68, No.11, pp.596-602, (2018).

(6) Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Tanaka Kaori,
“Time-reversal symmetry breaking phase and gapped surface states in d-wav e nanoscale superconductors”,
Journal of Physics; Conference Series, Nol.969, pp.012039_1-012 039_6, (2018).

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】

＜口頭発表＞

(1) 武宮 博, 斎藤 公明, 吉田 浩子,
「常磐自動車道における放射線の分布状況調査,2; 常磐自動車道における歩行サーベイおよび走行サーベイ結果」
日本原子力学会 2018 年春の年会, (吹田,日本, 2018 年 3 月 26-28 日)

(2) 町田 昌彦, 山田 進,

「1F 港湾及び近傍沿岸での放射性核種動態; データ分析に基づく考察」,
日本原子力学会 2018 年秋の大会, (岡山, 日本, 2018 年 9 月 18 日）.

(3) 武宮 博, 斎藤 公明, 吉田 浩子,
「福島における放射性物質の分布状況調査,14; 常磐自動車道における空間線量率分布」,
日本原子力学会 2018 年秋の大会, (岡山, 日本, 2018 年 9 月 18 日）.

(4) 町田 昌彦, 山田 進, 江角 亜矢子,
「1F 内及び周辺海域におけるセシウム動態評価」,
日本原子力学会 2019 年春の年会, (水戸, 日本, 2019 年 3 月 21 日）.

【高度計算機技術開発室】

＜口頭発表＞

(1) Seki Akiyuki,
"Progress report of data integration of time-series environmental monitoring data",
JAEA-LBNL Collaboration Meeting, (Berkeley, U.S.A., March 7-9, 2018)

(2) Seki Akiyuki, Suzuki Kenta, Akazaki Tomohiko, Tamori Kiyomi, Kitamura Tomoko, Sugiyama Noriko, Saito Kimiaki, Takemiya Hiroshi,
"Development of information systems for understanding environmental monitoring data on the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant accident",
5th European IRPA Congress (IRPA 2018), (Hague, Netherlands, June 4-8, 2018)

(3) 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, Ali, Y.,
「局所細分化格子を用いた格子ボルツマン法へのテンポラルブロッキング法の適用」
第 23 回計算工学講演会, (名古屋, 日本, 2018 年 6 月 6-8 日）

(4) 下川辺 隆史, 小野寺 直幸,
「複数 GPU を用いた高精細計算を実現する AMR 法フレームワークの構築」
第 23 回計算工学講演会, (名古屋, 日本, 2018 年 6 月 6-8 日）

(5) 大橋 訓英, 小野寺 直幸,
「Xeon Phi による共有メモリ型計算手法の数理モデルを含む船舶周り流れへの適用」
第 23 回計算工学講演会, (名古屋, 日本, 2018 年 6 月 6-8 日）

(6) 河村 拓馬,
「可視化用粒子データを用いた遠隔地からの対話的 In-Situ 可視化」
JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 10 回シンポジウム, (東京, 日本, 2018 年 7 月 12-13 日）

(7) 小野寺 直幸,
「格子ボルツマン法によるリアルタイム物質拡散シミュレーション手法の開発」
JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 10 回シンポジウム, (東京, 日本, 2018 年 7 月 12-13 日）

(8) Idomura, Yasuhiro,
"Computational challenges towards exa-scale fusion plasma turbulence simulations",
13th World Congress in Computational Mechanics (WCCM 2018), (New York, U.S.A., July 22-27, 2018)

(9) Idomura, Yasuhiro,
"Status of GT5D",
4th US-Japan Joint Institute for Fusion Theory (JIFT) Workshop on Innovations and Co-Designs of Fusion Simulations towards Extreme Scale Computing, (Princeton, U.S.A., July 30-31, 2018)

(10) Matsuoka, Seikichi, Idomura, Yasuhiro, Satake Shinsuke, Honda Mitsuru, Suzuki Yasuhiro,
"Development of GT5D for stellarator configurations",
4th US-Japan Joint Institute for Fusion Theory (JIFT) Workshop on Innovations and Co-Designs of Fusion Simulations towards Extreme Scale Computing, (Princeton, U.S.A., July 30-31, 2018)

(11) Imamura Toshiyuki, Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Yamashita Susumu, Onodera Naoyuki, Yussuf, A., Yamada Susumu,
"Development of exascale matrix solvers based on communication avoiding algorithms",
4th US-Japan Joint Institute for Fusion Theory (JIFT) Workshop on Innovations and Co-Designs of Fusion Simulations towards Extreme Scale Computing, (Princeton, U.S.A., July 30-31, 2018)

(12) Onodera, Naoyuki,
"Large-scale wind simulation using lattice boltzmann method on GPU-Rich supercomputer",
26th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-26), (London, U.K., July 22-26, 2018)

(13) 井戸村 泰宏
「ポスト京に向けた核融合プラズマ乱流コードのエクサスケール計算技術開発」
第 24 回 NEXT 研究会, (六ヶ所, 日本, 2018 年 8 月 9-10 日)

(14) 河村 拓馬, 井戸村 泰宏,
「In-situ PBVR の SIMD 最適化」
第 46 回可視化情報シンポジウム, (東京, 日本, 2018 年 9 月 14-16 日)

(15) Yussuf A., Ina Takuya, Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro,
"Porting a state-of-the-art communication avoiding Krylov subspace solver on P100 GPUs",
GTC Japan 2018, (Tokyo, Japan, September 13-14, 2018)

(16) Obrejan K., Idomura Yasuhiro, Honda Mitsuru,
"Numerical study of impurity transport using the code GT5D",
プラズマシミュレータシンポジウム 2018 (PSS 2018), (Toki, Japan, September 7-8, 2018).

(17) 鈴木 喜雄, 井原 遊, 奥田 洋司,
「原子力施設全体規模の構造解析に向けた要素毎有限要素接触解析手法; 階層化手法における加算順序の自動最適化」,

日本原子力学会 2018 年秋の大会, (岡山, 日本, 2018 年 9 月 5-7 日).

(18) Obrejan K., Idomura Yasuhiro, Honda Mitsuru,
"Introduction of a multi-species collision operator in GT5D and its application to heavy impurity transport",
Numerical Methods for the Kinetic Equations of Plasma Physics (NumKin2018),
(Garching, Germany, October 22-25, 2018).

(19) 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, Yussuf A., 下川辺 隆史,
「適合細分化格子ボルツマン法による熱流動解析」,
第 32 回数値流体力学シンポジウム, (東京, 日本, 2018 年 12 月 11-13 日).

(20) 井戸村 泰宏, Obrejan K.,
「イオン温度勾配駆動乱流における不純物輸送解析」,
第 35 回プラズマ・核融合学会年会, (吹田, 日本, 2018 年 12 月 3-6 日).

(21) Obrejan K., Idomura Yasuhiro, Honda Mitsuru,
"Numerical study of the role of higher order flows in neoclassical transport of high-Z impurities",
閉じ込め・輸送研究会 2018, (Toki, Japan, December 12, 2018).

(22) Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Yussuf A., Shimokawabe Takas hi,
"Communication reduced multi-time-step algorithm for the AMR-based lattice Boltzmann method on GPU-rich supercomputers",
The 1st R-CCS International Symposium, (Kobe, Japan, February 1 8-19, 2019).

(23) Idomura Yasuhiro, Ina Takuya, Obrejan K., Asahi Yuichi, Matsuoka Seikichi, Imamura Toshiyuki,
"Development of exascale fusion plasma turbulence simulations for post-K",
The 1st R-CCS International Symposium, (Kobe, Japan, February 1 8-19, 2019).

(24) 宮村 浩子, 松原 武史, 関 暁之, 武宮 博,
「環境モニタリングデータの感覚的可視化」,
情報処理学会第 81 回全国大会, (福岡, 日本, 2019 年 3 月 14-16 日).

(25) 宮村 浩子, 江角 亜矢子, 山田 進, 町田 昌彦,
「衛星画像を用いた河床地形推定」,
日本原子力学会 2019 年春の年会, (水戸, 日本, 2019 年 3 月 20-22 日).

(26) 関 暁之, 村上 冶子, 斎藤 公明, 武宮 博,
「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 年春の年会, (水戸, 日本, 2019 年 3 月 20-22 日).

(27) 井戸村 泰宏, Obrejan K., 朝比 祐一, 松岡 清吉,
「実験解析に向けた準局所的 full-f ジャイロ運動論シミュレーションの開発」,
日本物理学会第 74 回年次大会, (福岡, 日本, 2019 年 3 月 14-17 日).

(28) Obrejan K., Idomura Yasuhiro, Honda Mitsuru,
"Numerical study of neoclassical impurity transport using the code GT5D",
2019 US-EU Transport Task Force Workshop (TTF 2019), (Austin, U.S.A., March, 18-21, 2019).

【シミュレーション技術開発室】

＜査読無し論文＞

(1) Kim M., Malins A., 佐久間 一幸, 北村 哲浩, 町田 昌彦, 長谷川 幸弘, 柳 秀明,
「福島県内を想定した複雑な実環境中での空間線量率分布解析システム(3D-ADRES)の研究開発; リモートセンシング情報の活用と各環境因子(地形・土壌・建物・樹木等)の影響評価」,
RIST News, No.64, pp.3-16, (2018).

(2) 佐々 成正,
「微積分の考え方「変数が増えた時の微積分」」,
数理科学, Vol.56, No.5, pp.22-28, (2019).

＜口頭発表＞

(1) 鈴土 知明, 都留 智仁, 長谷川 晃,
「タングステン合金における照射欠陥抑制機構と計算科学による合金元素探索」
日本金属学会 2018 年春期(第 162 回)講演大会, (習志野, 日本, 2018 年 3 月 19-21 日)

(2) 山口 一郎, Malins, A.,
「短半減期核種の内部被ばく」
日本保健物理学会シンポジウム I「福島事故後の内部被ばくの課題の解決に向けて; 不溶性粒子と短半減期核種」, (東京, 日本, 2018 年 3 月 19 日)

(3) Kim, M., Malins, A., 吉村 和也, 佐久間 一幸, 操上 広志, 北村 哲浩, 町田 昌彦,
「PHITS による空間線量率評価のための現実的なモデル作成ツールの開発」
日本地球惑星科学連合 2018 年大会(JpGU 2018), (千葉, 日本, 2018 年 3 月 20-24 日)

(4) 永井 佑紀, Shen, H., Qi, Y., Liu, J., Fu, L.
「自己学習モンテカルロ法」
深層学習と物理 2018, (豊中, 日本, 2018 年 6 月 1, 2 日)

(5) Suzudo Tomoaki
“Modeling of solute effects on radiation damage in W-based alloys”,
14th International Conference on Computer Simulation of Radiation Effects in Solids (COSIRES 2018), (Shanghai, China, June 18-22, 2018)

(6) Nagai Yuki, Qi Y., Isobe Hiroki, Kozii V., Fu L.,
“Bulk Fermi arcs in heavy fermion systems”,
International Workshop on Symmetry & Topology in condensed-matter physics, (Tokyo, Japan, June19-21, 2018)

(7) Nagai Yuki, Qi Y., Isobe Hiroki, Kozii V., Fu L.,
“Bulk Topological Fermi arcs in heavy fermion systems”,
4th Conference on Condensed Matter Physics (CCMP 2018), (Shanghai, China, July 5-8, 2018)

(8) Nagai Yuki, Qi Y., Isobe Hiroki, Kozii V., Fu L.,
“Bulk Fermi arcs in heavy fermion systems”,

New Trends in Topological Insulators (NTTI 2018) and 18th International Conference on Narrow Gap Systems (NGS-18), (Luxembourg, Luxembourg, July 16-19, 2018)

(9) Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Tanaka Kaori,
"Time-reversal and/or translational symmetry breaking in d-wave nano-superconductors",
12th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (M^2S 2018), (Beijing, China, August 19-24, 2018)

(10) Malins A., Ochi Kotaro, Sanada Yukihisa, Yamaguchi Ichiro, Sato Tatsuhiko,
"Simulating gamma spectrometers with PHITS; Examples of $LaBr_3$(Ce) airborne detector and shielded HPGe detector inside a vehicle",
第 14 回 PHITS 研究会, (Tokai, Japan, 2018 年 8 月 22 日)

(11) Malins, A., Ochi Kotaro, Nakasone Takamasa, Yamada Tsutomu, Machida Masahiko, Kurikami Hiroshi, Saito Kimiaki, Sanada Yukihisa
"Advancement of airborne radiation measurement technology, 2; Simulations of unmanned helicopter and $LaBr_3$(Ce) detector used for estimating radiocesium distribution in soil",
日本原子力学会 2018 年秋の大会, (Okayama, Japan, 2018 年 9 月 5-7 日)

(12) Liu Xudong, Machida Masahiko, Kurikami Hiroshi, Kitamura Akihiro,
"Simulations of radiocesium discharge from Abukuma River with improved cesium wash-off model",
日本原子力学会 2018 年秋の大会, (Okayama, Japan, 2018 年 9 月 5-7 日)

(13) 数納 広哉, 町田 昌彦, 土肥 輝美,
「森林内での菌類有機分子とセシウムの選択的錯体形成機構の理論研究」
日本原子力学会 2018 年秋の大会, (Okayama, Japan, 2018 年 9 月 5-7 日)

(14) 山田 進, 町田 昌彦, 操上 広志, 北村 哲浩,
「福島県浜通りダム湖におけるセシウム動態季節変動の数値解析」
日本原子力学会 2018 年秋の大会, (Okayama, Japan, 2018 年 9 月 5-7 日)

(15) 山口 正剛, 海老原 健一, 鈴土 知明, 板倉 充洋,
「鉄の液体金属脆化; 第一原理計算」
日本金属学会 2018 年秋期(第 163 回)講演大会, (仙台, 日本, 2018 年 9 月 19-21 日)

(16) 板倉 充洋, 沖田 泰良, 中村 博樹,
「二酸化ウランおよびガンマ鉄のノンコリニア常磁性状態の第一原理計算」,
日本原子力学会 2018 年秋の大会, (岡山, 日本, 2018 年 9 月 5-7 日).

(17) 永井 佑紀, Qi Y., 磯部 大樹, Kozii V., Fu, L.,
「重い電子系におけるバルクトポロジカルフェルミアーク」,
日本物理学会 2018 年秋季大会(物性), (京田辺, 日本, 2018 年 9 月 9-12 日).

(18) Nagai Yuki, Okumura Masahiko, Tanaka Akinori,
"Self-learning Monte Carlo method with neural networks inspired by machine-learning molecular dynamics",
Mini-workshop on Machine Learning in Physics, (Tokyo, Japan, September 13 2018)

(19) 奥村 雅彦, 中村 博樹, 町田 昌彦,
「粘土鉱物とセシウムの非イオン結合」,
2018 年度日本地球化学会第 65 回年会, (沖縄県中頭郡, 日本, 2018 年 9 月 11-13 日).
(20) 志賀 基之,
「自由エネルギー面上の化学反応経路探索」,
第 12 回分子科学討論会, (福岡, 日本, 2018 年 9 月 10-13 日).
(21) 板倉 充洋, 沖田 泰良,
「ボイドによる転位ピン止め過程の原子論的モデル化」,
日本金属学会 2018 年秋期(第 163 回)講演大会, (仙台, 日本, 2018 年 9 月 19-21 日).
(22) Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
"A First-principles study on the mechanical properties of (Th, Pu) O_2",
Nuclear Materials Conference 2018 (NuMat 2018), (Seattle, U.S.A, October 14-18 2018).
(23) Yamaguchi Masatake,
"Combined analysis of first-principles calculations and fracture mechanics experiments on intergranular embrittlement of a Ni-Cr steel",
Nuclear Materials Conference 2018 (NuMat 2018), (Seattle, U.S.A, October 14-18 2018).
(24) Ebihara Kenichi, Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake,
"Simulation of irradiation-induced grain boundary phosphorus segregation by first-principles-based rate theory model including trapping and detrapping processes",
Nuclear Materials Conference 2018 (NuMat 2018), (Seattle, U.S.A, October 14-18 2018).
(25) Suzudo Tomoaki, Nagai Yasuyoshi, Toyama Takeshi, Takamizawa Hisashi, Nishiyama Yutaka, Caro A.,
"Atomistic modeling of hardening in thermally-aged Fe-Cr binary alloys",
Nuclear Materials Conference 2018 (NuMat 2018), (Seattle, U.S.A, October 14-18 2018).
(26) Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake, Tsuru, Tomohito,
"First-principles calculation of interactions between edge/screw dislocations and carbon/nitrogen atoms in alpha iron",
International Symposium on Atomistic Processes of Crystal Plasticity (APCP 2018), (Tokyo, Japan, October 25-27 2018).
(27) Suzudo Tomoaki, Onitsuka Takashi, Fukumoto Kenichi,
"Scrutinizing screw dislocation glide initiation at finite temperature in BCC metals",
9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM 2018), (Osaka, Japan, October 28-November 2 2018).
(28) Ebihara Kenichi, Suzudo, Tomoaki,
"Computational study of phosphorus migration to grain boundary in α -iron",
9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM 2018), (Osaka,

Japan, October 28-November 2 2018).

(29) Yamaguchi Masatake,
"Combined analysis of first-principles calculations and fracture mechanics experiments on intergranular embrittlement of a Ni-Cr steel",
9th International Conference on Multiscale Materials Modeling (MMM 2018), (Osaka, Japan, October 28-November 2 2018).

(30) Suzudo Tomoaki,
"Computational study of solute effects in tungsten under irradiation",
14th International Workshop on Spallation Materials Technology (IWSMT-14), (Fukushima, Japan, November 11-17 2018).

(31) 鈴土 知明, 永井 康介, 外山 健, 高見澤 悠, 西山 裕孝, Caro Alfredo,
「Fe-Cr 合金の熱時効硬化に関するモデリング研究」,
平成 30 年度材料照射研究会・ゼロエミッションエネルギー拠点研究会(ZE 研究会), (宇治, 日本, 2018 年 11 月 27-28 日).

(32) 志賀 基之,
「水素の量子効果を考慮した第一原理計算」,
第 15 回水素量子アトミクス研究会/第 1 回ハイドロジェノミクス研究会, (柏, 日本, 2018 年 11 月 15-16 日).

(33) 板倉 充洋, 山口 正剛,
「純マグネシウム系におけるキンクの第一原理計算」,
軽金属学会第 135 回秋期大会, (東京, 日本, 2018 年 11 月 9-11 日).

(34) 志賀 基之,
「自由エネルギー面上における停留点の探索法」,
第 32 回分子シミュレーション討論会, (つくば, 日本, 2018 年 11 月 28-30 日).

(35) 永井 佑紀, Qi Y., 磯部 大樹, Kozii V., Fu L.,
「重い電子系における例外点とバルクトポロジカルフェルミアーク」,
第 10 回トポロジー連携研究会「非平衡系・非エルミート系の新奇量子現象, (京都, 日本, 2018 年 11 月 30 日-12 月 1 日).

(36) 永井 佑紀,
「BdG 方程式を用いた磁束格子計算」,
第 26 回渦糸物理国内会議, (いわき, 日本, 2018 年 12 月 3-5 日).

(37) 永井 佑紀,
「自己学習モンテカルロ法; 機械学習を用いたモンテカルロ法の高速化」,
第 7 回材料系ワークショップ, (東京, 日本, 2019 年 2 月 8 日).

(38) Yamada Susumu, Onodera Naoyuki, Ina Takuya, Yamashita Susumu, Idomura Yasuhiro, Imamura Toshiyuki,
"Communication avoiding multigrid preconditioned conjugate gradient method for extreme scale multiphase CFD simulations",
The 1st R-CCS International Symposium, (Kobe, Japan, February 1 8-19, 2019).

(39) Suzudo Tomoaki,

“Atomistic modeling study of fusion materials”,
Plasma Conference 2017 (PLASMA 2017), (Himeji, Japan, Nobemver 20-24, 2017).

(40) Malins A., Imamura Naohiro, Niizato Tadafumi, Kim M., Sakuma Kazuyuki, Shinomiya Yoshiki, Miura Satoru, Machida Masahiko,
“PHITS models for ambient dose equivalent rates in Fukushima's Radiocesium contaminated forests”,
日本原子力学会 2019 年春の年会, (水戸, 日本, 2019 年 3 月 20-22 日).

(41) 中村 博樹, 町田 昌彦,
「二酸化アクチニドにおけるポーラロンの第一原理計算」,
日本原子力学会 2019 年春の年会, (水戸, 日本, 2019 年 3 月 20-22 日).

(42) 奥村 雅彦, 小林 恵太, 中村 博樹, 板倉 充洋, 町田 昌彦,
「二酸化トリウムの機械学習分子動力学法シミュレーション」,
日本原子力学会 2019 年春の年会, (水戸, 日本, 2019 年 3 月 20-22 日).

(43) 佐々 成正,
「リュービルの定理と保存則」,
第 15 回日本応用数理学会研究部会連合発表会, (つくば, 日本, 2019 年 3 月 4-5 日).

(44) 永井 佑紀, 奥村 雅彦, 田中 章詞,
「Behler-Parrinello 型ニューラルネットワークを用いた自己学習モンテカルロ法」,
日本物理学会第 74 回年次大会, (福岡, 日本, 2019 年 3 月 14-17 日).

(45) Nagai Yuki, Qi Y., Isobe Hiroki, Kozii V., Fu L.,
“Bulk topological Fermi arcs in heavy fermion systems”,
American Physical Society March Meeting 2019, (Boston, U.S.A., March 4-8, 2019).

(46) 板倉 充洋, 山口 正剛,
「転位列への固溶元素析出の第一原理計算によるモデル化」,
日本金属学会 2019 年春期(第 164 回)講演大会, (東京, 日本, 2019 年 3 月 20-22 日).

(47) 板倉 充洋,
「鉄中転位と炭素・窒素の相互作用の第一原理計算」,
日本鉄鋼協会材料の組織と特性部会評価・分析・解析部会「鉄鋼中の軽元素と材料組織および特性」研究会最終報告会, (東京, 日本, 2019 年 3 月 22).

3. 技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

(1) Suzuki Yoshio, Iigaki Kazuhiko,
“Error estimation in observed acceleration data toward V&V of a seismic simulation”,
JAEA-Data/Code 2018-009 (2018), 41p.

(2) 植野 あすか, 矢城 重夫, 宇野 騎一郎, 青木 和久,
「情報セキュリティ教育教材集; 2013 年度～2017 年度」
JAEA-Review 2018-006 (2018), 115p.

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

(1) 2018 年 7 月 13 日 “土壌粘土粒子の表面ナノ構造とセシウム吸着特性との関係を解明－最

も強い吸着を示すのは「ほつれたエッジ」と呼ばれるナノ構造であることを計算科学で立証－”
（7 月 18 日日刊工業新聞、7 月 19 日電気新聞、7 月 29 日日本経済新聞に掲載）

(2) 2018 年 9 月 4 日 矢野経済研究所“自ら学習し複雑な現象の本質を抽出可能にするモンテカルロ法の開発－機械学習による量子シミュレーションの高速化－”について取材
（月刊誌「Yano E Plus」2018 年 10 月号（No.127）pp.41-43（Electronics 専門誌）に記事掲載）

5. 研究発表会等の開催

(1) CCSE セミナー,「Toward machine learning based study of physics」, (2018 年 4 月 27 日)

(2) 3 機関(国立環境研究所・電力中央研究所・原子力機構)連携 WS、福島環境動態解析研究の今後の連携展開について, (2018 年 6 月 15 日).

(3) 第 30 回 CCSE ワークショップ,「AI 技術の原子力および関連分野への応用」, (2019 年 3 月 11 日).

6. 受賞等

(1) 第 23 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）
下川辺隆史, 小野寺直幸
（日本計算工学会、平成 30 年 6 月）

(2) 第 23 回計算工学講演会 グラフィックスアワード 特別賞（MSC Apex 賞）
下川辺隆史, 小野寺直幸
（日本計算工学会、平成 30 年 6 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	3,687,977 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	80,154（ 7）
シミュレーション技術開発室	29,747（18）

【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） 10,700 千円

(2) 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)） 780 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） 43,415 千円
(4) 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） 23,959 千円
(5) 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)） 650 千円
(6) 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
(7) 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)） 520 千円

【シミュレーション技術開発室】

(1) 「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） 3,000 千円
(2) 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
(3) 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
(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) 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)） 1,040 千円
(6) 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)） 200 千円
(7) 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)） 1,300 千円
(8) 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
(9) 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
(10) 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
(11) 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)） 650 千円
(12) 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)） 2,470 千円
(13) 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)） 3,120 千円
(14) 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)） 1,170 千円

(15) 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
(16) 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)）5,746 千円
(17) 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
(18) 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)）　4,238 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	4	0
シミュレーション技術開発室	4	0	4	0
両室共通	0	0	0	1
合計	9	0	8	1

●共同研究
【高度計算機技術開発室】
(1) 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）
(2) 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）
(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（京都大学）
(4) 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）
(5) 個人向け行路線量計算システムの構築（東北大学、東日本高速道路株式会社の共同研究に研究協力者として参加）
【シミュレーション技術開発室】
(1) 大規模並列計算用ライブラリの研究開発（理化学研究所）
(2) 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）
(3) 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）
(4) 「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（九州大学、北見工業大学、京都大学、大阪大学）
●受託研究
【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）
(2) 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）
(3) 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）
(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）（福島研究開発部門受

託に参加手続き中）

【シミュレーション技術開発室】

(1) 「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）

(2) 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）

(3) 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）

(4) 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 11 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) コンプトンカメラ 3 次元画像再構成技術の開発

部署：福島研究開発部門（廃炉国際共同研究センター）

概要：コンプトンカメラによるγ線計測データから放射性物質の 3 次元分布を再構成する技術を開発する。

(7) 原子力施設の耐震解析の高度化支援

部署：安全研究・防災支援部門（安全研究センター）

概要：有限要素法に基づく耐震解析システムにおける行列ソルバの高速化を支援する。

(8) 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。

(9) 酸化物アクチナ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。

(10) 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。

(11) 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。

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～）