



JAEA-Evaluation

2023-001

DOI:10.11484/jaea-evaluation-2023-001

令和 4 年度計算科学技術研究実績評価報告

Reports on Research Activities and Evaluation
of Advanced Computational Science in FY2022

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

July 2023

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

JAEA-Evaluation

本レポートは国立研究開発法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。
本レポートはクリエイティブ・コモンズ表示 4.0 国際ライセンスの下に提供されています。
本レポートの成果（データを含む）に著作権が発生しない場合でも、同ライセンスと同様の
条件で利用してください。（<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ja>）
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ウェブサイト（<https://www.jaea.go.jp>）
より発信されています。本レポートに関しては下記までお問合せください。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 JAEA イノベーションハブ 研究成果利活用課
〒 319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方 2 番地 4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency.

This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License
(<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.en>).

Even if the results of this report (including data) are not copyrighted, they must be used under the
same terms and conditions as CC-BY.

For inquiries regarding this report, please contact Institutional Repository and Utilization Section,
JAEA Innovation Hub, Japan Atomic Energy Agency.

2-4 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan

Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

令和 4 年度計算科学技術研究実績評価報告

日本原子力研究開発機構
システム計算科学センター

(2023 年 5 月 25 日受理)

システム計算科学センターでは、「国立研究開発法人日本原子力研究開発機構の中長期目標を達成するための計画（中長期計画）」に基づき、原子力分野における計算科学技術研究に関する研究開発を実施してきた。その計算科学技術研究の実績については、計算科学技術研究・評価委員会（以下「委員会」という。）により評価された。

本報告は、システム計算科学センターにおいて実施された計算科学技術研究の、令和 4 年度における業務の実績及びそれらに対する委員会による評価結果をとりまとめたものである。

**Reports on Research Activities and Evaluation of Advanced Computational Science
in FY2022**

Center for Computational Science & e-Systems
Japan Atomic Energy Agency
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received May 25, 2023)

Research on advanced computational science for nuclear applications, based on “the plan to achieve the medium- and long-term goal of the Japan Atomic Energy Agency”, has been performed by Center for Computational Science & e-Systems (CCSE), Japan Atomic Energy Agency.

CCSE established a committee consisting of external experts and authorities which evaluates and advises toward the future research and development.

This report summarizes the results of the R&D performed by CCSE in FY2022 (April 1st, 2022 - March 31st, 2023) and their evaluation by the committee.

Keywords: Research Evaluation, Numerical Simulation, Computer Science, Computational Science, Multi-scale Modeling, Material Simulation, Structural Simulation, Supercomputer, Large Scale Parallel Computing, Visualization

目 次

1. はじめに	1
2. 計算科学技術研究・評価委員会	2
3. 計算科学研究における研究計画	3
3.1 中長期計画	3
3.2 年度計画	3
4. 研究実績と評価意見	4
4.1 令和 4 年度評価	4
付録 令和 4 年度計算科学技術研究実績	15

Contents

1. Introduction	1
2. Evaluation Committee	2
3. R&D Plans for the Advanced Computational Science Research of CCSE/JAEA	3
3.1 Medium- and Long-term Plan	3
3.2 Plan for Fiscal Year (FY2022)	3
4. Results of the R&D and the Evaluation Comments	4
4.1 FY2022	4
Appendix List of Achievements in FY2022	15

This is a blank page.

1. はじめに

原子力に関する研究開発では、実験や観測が困難な現象のメカニズムを解明したり、その進展を予測したりする必要がある。このため、原子・分子の構造や運動をはじめとしてミクロなレベルの現象から、気象や環境等マクロなレベルの現象まで幅広くシミュレーション等を行う計算科学技術は、原子力分野の研究開発において理論、実験と並び必要不可欠な研究手法となっている。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構（以下「機構」という。）においては、計算科学技術研究を原子力基礎基盤研究の重要な柱として中長期計画に盛り込み、システム計算科学センターを中心に研究開発を推進している。

計算科学技術研究については、計算科学技術研究・評価委員会（以下「委員会」という。）により課題の詳細な内容等を評価することとしている。また、この委員会の評価結果は、機構における毎年度の内部評価（機構による自己評価）の際に「外部有識者の意見」としても活用されている。

本報告は、令和4年度にシステム計算科学センターにおいて実施された計算科学技術研究の実績と委員会の評価結果をとりまとめたものであり、第2章に委員会の構成、第3章に研究計画、第4章に研究成果と委員会の評価意見、さらに付録に研究開発実績が記載されている。

2. 計算科学技術研究・評価委員会

委員会の構成及び開催状況をそれぞれ表 2.1 及び表 2.2 に示す。

表 2.1 計算科学技術研究・評価委員会構成（敬称略）

委員長	越塚 誠一	東京大学大学院 工学系研究科 教授
委員	岩城 智香子	東芝エネルギーシステムズ株式会社 エネルギーシステム技術開発センター シニアフェロー
	小野 謙二	九州大学 情報基盤研究開発センター 附属汎オミクス計測・計算科学センター センター長・教授
	寿楽 浩太	東京電機大学 工学部 人間科学系列 教授
	常行 真司	東京大学大学院 理学系研究科 教授
	津旨 大輔	電力中央研究所 サステナブルシステム研究本部 研究推進マネージャー・副研究参事

表 2.2 計算科学技術研究・評価委員会開催状況

回	開催日時	開催場所	主たる議題	特記事項
1	令和 5 年 2 月 9 日 15:30～17:30	オンライン	- 第 4 期中長期計画及び 令和 4 年度研究計画について - 令和 4 年度の研究実績について	なし

3. 計算科学技術研究における研究計画

3.1 中長期計画

計算科学技術研究については、「国立研究開発法人日本原子力研究開発機構の中長期目標を達成するための計画（中長期計画）（令和4年4月1日～令和11年3月31日）」に次のとおり定められた。

2. 原子力科学技術に係る多様な研究開発の推進によるイノベーションの創出

(1) 原子力基礎基盤研究、先端原子力科学研究、中性子利用研究及び原子力計算科学研究の推進

4) 原子力計算科学研究

原子力計算科学研究においては、原子力研究開発のDXを加速するために不可欠な基盤技術である計算科学に係る研究を推進する。

具体的には、技術進展が著しく原子力の不可欠な研究開発基盤である最先端スーパーコンピュータ上での高性能計算技術及び可視化技術の研究開発を進めるとともに、実世界の現象を仮想空間上に精確に再現可能とするシミュレーション技術の研究開発を進める。さらに、実験・観測及びシミュレーションから得られる多様かつ膨大なデータを融合し、実空間と仮想空間の連携を可能とするデータ同化技術や有効な情報の抽出を可能とする機械学習技術の研究開発を進める。

また、得られた研究開発成果を活用し、機構が進める廃止措置、福島環境回復、軽水炉の安全性向上、新型炉設計、地層処分等に向けた研究開発のDXを支援する。さらに、様々な分野で活用可能となる基盤技術としての計算科学の特性を活かして産業界や大学と連携し、広く社会ニーズに呼応したイノベーション創出を図る。

3.2 年度計画

中長期計画を実現するための令和4年度の年度計画は、以下のように定められた。

2. 原子力科学技術に係る多様な研究開発の推進によるイノベーションの創出

(1) 原子力基礎基盤研究、先端原子力科学研究、中性子利用研究及び原子力計算科学研究の推進

4) 原子力計算科学研究

高性能計算技術の研究開発では、GPU向けにデータ構造を最適化した行列解法を試作する。可視化技術の研究開発では、粒子ベース可視化技術のVR機能拡張を行う。シミュレーション技術の研究開発では、ランダムな磁性状態の高精度第一原理計算手法の開発を行うとともに、気液二相流解析の高精度化に向けた界面モデルを開発する。データ同化技術の研究開発では、観測と連携した流体解析に向けたデータ同化手法を試作する。機械学習技術の研究開発では、原子構造情報の効率的な抽出による機械学習分子動力学の高速化技術や、合金の原子配置を自動的に学習する手法を開発する。

また、DXを進める機構内外の組織との連携を開始し、ニーズ・シーズを集約してイノベーション創出に向けた方針を検討する。

4. 研究実績と評価意見

4.1 令和 4 年度評価

中長期計画及び令和 4 年度計画に沿って実施した研究開発の実績および委員からいただいた意見・コメントについて、表 4.1 および表 4.2（令和 5 年 2 月 9 日時点）にまとめる。研究開発実績（論文、受賞、産学官連携等）の詳細については、付録に一覧を掲載する。

委員会において、表 4.1 左欄の実績の内容を説明し、質疑応答等を経て議論した上で、委員からいただいた意見・コメントを表 4.1 右欄に記載している。また表 4.2 に全体を通じて委員からいただいた意見・コメントを記載している。

表 4.1 令和 4 年度研究開発実績の自己評価及び委員評価（令和 5 年 2 月 9 日時点）（1/4）

令和 4 年度計画	CCSE	外部有識者
	実績報告	意見・コメント
課題① 高性能計算技術の研究開発では、GPU 向けにデータ構造を最適化した行列解法を試作する。 可視化技術の研究開発では、粒子ベース可視化技術の VR 機能拡張を行う。 シミュレーション技術の研究開発では、気液二相流解析の高精度化に向けた界面モデルを開発する。 データ同化技術の研究開発では、観測と連携した流体解析に向けたデータ同化手法を試作する。 （高度計算機技術開発室）	(1) 研究開発の達成度(実績・成果) ○GPU 向け行列解法のデータ構造、アルゴリズムを最適化し、CPU 比約 12 倍、業界標準ライブラリに比べて約 1.5 倍の高速化を達成。 ○粒子ベース可視化技術の VR 機能拡張により遠隔 VR 可視化システムを開発し、業界標準ソフトウェアに比べて 10 倍以上高速な対話的 VR 可視化速度を実現。 ○界面追跡型気液二相流解析における高精度界面モデルを開発し、従来手法の 1/50 の解像度で 2 気泡上昇数値実験における気泡反発現象を再現。 ○基礎的乱流解析におけるアンサンブルデータ同化手法(LETKF)を GPU 向けに最適化し、LETKF における固有値計算を約 65 倍高速化するとともに、LETKF の並列処理を約 4 倍高速化。 (2) 成果の科学的意義 ○流体計算、量子計算、構造解析、電磁場解析等の原子力計算科学の基盤となる行列計算を GPU スパコン向けに効率化することができた。 ○大規模かつ複雑なシミュレーションデータに対する VR 可視化技術を確立し、特に、これまで可視化が困難であった非定常 3 次元流体解析データを対話的に可視化できるようになった。 ○バンドル体系の気液二相流解析における課題となってきた、数値誤差による気泡合体を回避できる見通しが得られた。 ○GPU を駆使した高速化によって、高解像度の乱流解析でもアンサンブルデータ同化手法を適用できる見通しが得られた。	・それぞれの研究開発課題について計画は達成されている。 ・いずれのテーマにおいても、従来あるいは標準に対して高速化や高解像度化などで明らかな向上が達成できており、<u>優れた成果</u>が上げられている。 ・研究テーマはいずれも科研費を獲得しており、<u>優れた</u>研究テーマ設定と言える。また、研究成果として論文や開発ソフトウェアのオープンソース化も進めている。特に PARCEL の性能は世界でもトップレベルにあり、<u>特に顕著な成果</u>と判断できる。 ・掲げた各目標に対していずれも<u>非常に優れた成果</u>を挙げている。論文等の成果出版、外部資金獲得などにおいて学術的に高い評価を得ていることはもちろん、産学連携や国際協力にも展開が見られ、意欲的に取り組まれていることがよくうかがわれる。実績を<u>非常に高く評価</u>するとともに、今後のさらなる成果を期待したい。 ・デジタルツインの研究開発に向けて、計算手法のアルゴリズム改良や GPU 向け最適化などが進んでおり、従来の計算科学技術開発の延長線上では<u>大変順調</u>に研究が進捗しているように思われる。今後、風況デジタルツイン、汚染物質拡散解析データベースの機械学習などで、計算科学の枠をこえたデータ利用を進め、DX としての新しい展開を図っていただきたい。 ・高性能計算技術、可視化技術、流体計算技術、データ同化技術ともに、計算時間の高速化、低解像度化を達成しており、<u>顕著な成果</u>を上げている。特に基礎的乱流解析におけるアンサンブルデータ同化手法の高速化は、今後の風況デジタルツインへの展開に非常に重要な基礎技術であり、<u>特に顕著な成果</u>と考えられる。成果と公開していることも有益であり、広く活用されるような活動にも期待している。 ・アンサンブルデータ同化手法では、学術的に先端的かつ DX にも貢献する<u>顕著な成果</u>が得られたと評価できる。 ・いずれのテーマの成果も、研究開発のリードタイム削減やイノベーション創出に寄与するもので、科学的意義においても<u>高く評価</u>される。 ・行列計算については計算機科学的な成果であるし、二相流の高精度解法は流体科学分野における<u>顕著な成果</u>と思われる。 ・<u>順調</u>に成果をあげており、性能向上面での進捗がわかりやすい。 ・いずれもそれぞれの分野での成果の科学的意義が高いと考えられる。数々の応用への展開が期待出来る基礎技術であり、今後の展開を期待したい。

表 4.1 令和 4 年度研究開発実績の自己評価及び委員評価（令和 5 年 2 月 9 日時点）（2/4）

	(3) 機構内外のニーズへの適合・貢献 ○開発した GPU 向け行列解法を多相多成分熱流動解析コード JUPITER(原子力基礎工学研究センター)に提供するとともに、他の問題でも汎用的に利用可能となるように行列計算ライブラリを整備し、反復解法ライブラリ PARCEL として公開した。 ○開発した高速 VR 可視化技術を炉設計プラットフォーム(高速炉・新型炉研究開発部門)、CFD 機器設計(株式会社荏原製作所)に提供するとともに、VR 可視化ライブラリ VRKVS および遠隔 VR 可視化システム VR-PBVR(2 月末予定)を整備・公開した。 ○開発した高精度界面モデルを JUPITER(原子力基礎工学研究センター)に提供し、今後、共同でバンドル体系の実証解析を実施予定。 ○アンサンブルデータ同化手法を応用した風況デジタルツイン構築に向けて、東京工業大学、防災科学技術研究所と共同で科研費基盤 B 課題を開始した。	・GPU 向け行列解法ライブラリの開発では、GPU を搭載したスーパーコンピュータが現在は主流であることから、機構内外の大規模高速計算に広く貢献する<u>顕著な成果</u>であると評価できる。GPU 向け行列解法ライブラリの開発および高速 VR 可視化技術の開発では研究成果を公開しており、機構内外のニーズに応える<u>顕著な成果</u>であると評価できる。 ・開発した手法を解析コードに提供するなど、機構内のニーズに貢献している。また、高速 VR 可視化技術は産業界にも提供されており、<u>高く評価</u>される。技術をライブラリ化して汎用的に使用できるように公開されたことも評価できる。高精度界面モデルを適用した JUPITER は、バンドル体系の実験データで比較し、解析精度向上の効果を検証いただきたい。風況デジタルツインは、データ同化技術の良い適用先と考える。他にも実施されているので、ベンチマークしながら、ぜひ今後は積極的に成果を公開していただきたい。 ・開発した行列計算ライブラリおよび可視化ソフトウェアは公開しており、機構内だけではなく広く社会への貢献がなされている。公開したソフトウェアについては、継続してダウンロード数などをウォッチし、リクエストなどに対するフィードバックもあるとよい。 ・国の研究機関としての立場を活かし、成果の公開を積極的に行っており、他機関、企業、大学との共同研究も意欲的に進めており、<u>高く評価</u>できる。 ・着実に進捗している。引き続き実験グループとの対話と連携を進め、DX を進めていただきたい。 ・機構内に加え、民間企業を含む機構外のニーズに答えるべく、<u>顕著な成果</u>を上げていると考えられる。風況デジタルツイン構築では、非原子力分野への展開を考えており、科研費による協働に加え、さらに密接な外部機関との連携が必要と考えられる。
	(4) 参考指標、優れた成果等 ○査読付き論文掲載数: 6 件 ○IF3.0 以上の論文掲載数: 2 件 ○外部表彰数: 1 件 ○科研費実施数: 7 件 うち新規 3 件 うち代表 6 件 ○政府系受託研究実施数: 2 件 ○0 円共同研究実施数: 5 件 ○夏期休暇実習生・特別研究生等: 1 件	・4 件の研究開発課題に関連してそれぞれにおいて科学研究費補助金を獲得しており、外部資金獲得としては<u>顕著な成果</u>である。 ・論文発表、外部資金獲得において、<u>優れた成果</u>を上げている。人材育成の観点で、実習生、研究生の受け入れは、可能であれば積極的にお願いしたい。 ・豊富な成果が客観的な指標で裏付けられており、<u>高く評価</u>するべきものとする。 ・科研費適切に実施し、<u>顕著な成果</u>を上げていると考えられる。
	(5) 人文・社会科学からの視点 計算科学による原子力研究開発の DX 支援およびイノベーション創出という 2 つの目標に向けて機構内外の関係機関と双方向のコミュニケーションを図り、中核となる要素技術を抽出して研究開発を開始した。また、開発技術の実用化・社会実装に向けてこれらの機関との共同研究を開始した。	・原子力研究開発の DX 支援およびイノベーション創出という 2 つの目標に対し、機構内外と連携し、重要な要素技術を抽出して取り組まれている点が<u>高く評価</u>される。風況デジタルツインは社会実装に向けて進めていただくと同時に、引き続き他分野展開の可能性も探っていただきたい。 ・人文社会科学分野との協働は、すぐに成果がでるものではないと思うが、継続して取り組んでいただきたい。 ・開発した技術の社会での利用(防災利用などを含む)を意識した取り組みが図られていることは前向きに評価したい。欲を言うならば、いわゆる「ニーズ志向」の取り組みについては、現在の社会でのニーズに加えて、今後の社会の動向、さらに言えば望ましい社会のあり方を念頭に、それに積極的に資する研究開発を志向するのが欧米で広まりつつある RRI(Responsible Research and Innovation: 責任ある研究・イノベーション)の考え方である。RRI 取り組みのためには、企業、自治体などはもちろん、一般市民を含む社会の様々なステークホルダーに基礎研究段階、技術の萌芽的な段階から積極的に、かつ適切な関与を求めることが有効とされている。今後はこうした面での取り組みも期待したい。 ・適切な 3 つの実施内容を設定しているとする。データ同化技術は<u>顕著な成果</u>を上げており、都市風況解析以外の課題への調査検討についても積極的に実施して頂きたい。多くのニーズがあると考えられる。
	(6) その他	・機構の DX 推進にリーダーシップを発揮しており、<u>顕著な貢献</u>がある。

表 4.1 令和 4 年度研究開発実績の自己評価及び委員評価（令和 5 年 2 月 9 日時点）（3/4）

令和 4 年度計画	CCSE	外部有識者
	実績報告	意見・コメント
課題② シミュレーション技術の研究開発では、ランダムな磁性状態の高精度第一原理計算手法の開発を行う。 機械学習技術の研究開発では、原子構造情報の効率的な抽出による機械学習分子動力学の高速度技術や、合金の原子配置を自動的に学習する手法を開発する。 （シミュレーション技術開発室）	(1) 研究開発の達成度(実績・成果) ○ステンレス合金のランダムな磁性状態を対象とし、第一原理計算の収束性を改善し4倍以上の高速化を達成。物性評価に必要な数百ケースの計算を可能にした。 ○核燃料物質酸化トリウムを対象とし、CUR 分解を用いて機械学習分子動力学計算で用いる原子構造情報の縮約を行い、従来手法の二倍の高速化を達成。 ○二元合金を対象とし、合金元素を交換した配置を効率的に生成し学習する手法を開発し従来手法の 5 倍の効率を達成。	・それぞれの研究開発課題について計画は達成されている。 ・いずれのテーマにおいても、従来に対して高速化が達成できており、<u>優れた成果</u>が上げられている。 ・収束性の改善により高速化を達成しているが、物性探査では多数の第一原理計算が必要となるため、より少ない試行で最適な解を探索する方法論の開発が必要になると思われる。 ・掲げた各目標に対していずれも非常に<u>優れた成果</u>を挙げている。論文等の成果出版、外部資金獲得などにおいて学術的に高い評価を得ていることはもちろん、産学連携や国際協力にも展開が見られ、意欲的に取り組まれていることがよくうかがわれる。実績を<u>非常に高く評価</u>するとともに、今後のさらなる成果を期待したい。 ・新しいシミュレーション手法の開発でも、その材料研究への応用でも、意欲的に研究が進められており、興味深い成果が上がっている。全体として<u>大変よく進捗</u>しているように思う。 ・高性能シミュレーション技術、機械学習技術ともに、計算時間の高速化を達成しており、<u>顕著な成果</u>を上げている。
	(2) 成果の科学的意義 ○ステンレス合金における最安定な磁性状態を新たに発見し、これを用いた計算をすると、実験結果を従来より高い精度で再現できることを明らかにした。 ○核燃料物質酸化トリウムに対し、機械学習分子動力学計算を用いると、融点などの熱物性値を従来より高い精度で再現できることを明らかにした(成果は Scientific Reports 誌に掲載)。 ○合金において原子の振動と交換を同時に行う効率的な手法は、従来、存在していなかったが、現実的な計算時間でこれを行うことに成功。合金の効率的計算手法を提案した。	・機械学習分子動力学計算を核物質に適用した研究は、先端性および発展性があり、<u>顕著な成果</u>であると評価できる。 ・革新的材料開発、評価において、有望な手法を提供するもので、科学的意義においても<u>極めて高く評価</u>される。 ・合金の効率的な計算手法の提案は、応用計算を促進する効果的な手法であり、<u>顕著な成果</u>と考えられる。 ・原子炉材料や核燃料につながる研究に力点をおいて説明があったが、それらに限定されない一般的な手法開発やシミュレーションが行われており、<u>科学的意義の高い</u>研究が進められている。 ・計算の高速化と精度向上によって、ステンレス合金における最安定な磁性状態を新たに発見したことは、<u>特に顕著な成果</u>であると考えられる。
	(3) 機構内外のニーズへの適合・貢献 ○新型炉 ADS 炉候補材料であり産業上も重要なステンレス合金の第一原理計算が可能となり、原子力基礎工学研究センターと連携し、実問題への適用へ進展。 ○新型炉の MOX 燃料のシミュレーションによる物性評価に向け、高速炉・新型炉研究開発部門と連携し、応用研究へと進展。 ○ステンレス合金のシミュレーションによる物性評価に向け、基盤となる計算手法を整備。また原子配置を自動的に学習する手法は商用ソフトに採用された他、企業との共同研究において活用。	・連携研究として実施した、ラジウムの分子レベルでの観測、および、材料脆化、では、シミュレーションを用いた貢献があり、<u>顕著な成果</u>であると認められる。 ・基盤技術の開発のみならず、機構内のニーズをとらえ、応用研究に進展させていることが<u>高く評価</u>される。特に、ガラス材料や電池材料など、他分野貢献が進められていることも<u>極めて高く評価</u>される。 ・研究成果が企業の製品に採用されるなど、成果の拡がりが出てきた点は<u>非常に評価</u>できる。研究成果の社会還元の点から、引き続き積極的な展開を期待したい。 ・国の研究機関としての立場を活かし、成果の公開を積極的に行っており、他機関、企業、大学との共同研究も意欲的に進めており、<u>高く評価</u>できる。 ・全体的に、機構や関連分野のニーズに合致した研究計画を練った上で研究が進められている。 ・機構内外のニーズに対して、適切に貢献出来ていると考えられる。ステンレス合金における最安定な磁性状態の発見の、新型炉構造材料に係る応用研究の展開を期待している。また自動学習の商用ソフトへの展開を通じ、普及がより進むことを期待している。

表 4.1 令和 4 年度研究開発実績の自己評価及び委員評価（令和 5 年 2 月 9 日時点）（4/4）

	(4) 参考指標、優れた成果等 ○査読付き論文掲載数:22 件(+受理済 4 件) ○IF3.0 以上の論文掲載数:12 件(+受理済 1 件) ○国内特許出願数:1 件 ○外部表彰数:1 件 ○プレス発表:1 件 うちプレス掲載数:1 件 ○科研費実施数:12 件 うち新規 4 件 うち代表 6 件 ○政府系受託研究実施数:3 件 ○0 円共同研究実施数:11 件 ○客員研究員・国内外委員等:12 件 ○夏期休暇実習生・特別研究生等:9 件	・IF の高い論文が多数出版されており、<u>顕著な成果</u>であると評価できる。 ・論文発表、外部資金獲得、人材育成において、<u>極めて優れた成果</u>を上げている。 ・論文数としては、インパクトのある数だと思われる。 ・豊富な成果が客観的な指標で裏付けられており、<u>高く評価</u>するべきものとする。 ・<u>順調</u>に外部発表を進めている。外部資金獲得も十分に行われている。 ・多くの論文を発表することによって、<u>顕著な成果</u>を上げていると考える。プレス発表を行った「水に溶けたラジウムの分子レベルの観測」に関しても、医療用原料に対する連携研究に繋がっており、今後の展開も期待している。
	(5) 人文・社会科学からの視点 ○放射性物質に関わる研究で省庁の研究プロジェクト 2 件に参画、国民の安全に直接かかわるテーマでの貢献を目指している。また企業との共同研究を通じ材料分野における社会ニーズを把握し、機械学習技術を活用したイノベーション創出への貢献を目指している。	・原子力研究開発の DX 支援およびイノベーション創出という 2 つの目標に対し、社会ニーズに応える基盤・応用研究を進められており、<u>極めて高く評価</u>される。材料開発・評価技術は汎用性が高く重要な技術であるため、引き続き社会実装に向けて進めていただきたい。 ・開発した技術の社会での利用（特に社会の安全や産業振興）を意識した取り組みが図られていることは前向きに評価したい。欲を言うならば、いわゆる「ニーズ志向」の取り組みについては、現在の社会でのニーズに加えて、今後の社会の動向、さらに言えば望ましい社会のあり方を念頭に、それに積極的に資する研究開発を志向するのが欧米で広まりつつある RRI (Responsible Research and Innovation: 責任ある研究・イノベーション) の考え方である。RRI 取り組みのためには、企業、自治体などはもちろん、一般市民を含む社会の様々なステークホルダーに基礎研究段階、技術の萌芽的な段階から積極的に、かつ適切な関与を求めることが有効とされている。今後はこうした面での取り組みも期待したい。 ・空間線量分布の詳細計算に関して、省庁の研究プロジェクトに貢献していることは<u>顕著な成果</u>であると考えられる。中長期計画に「福島環境回復に向けた研究開発の DX を支援する」とある。省庁などのニーズを的確に捉え、積極的に基礎的な研究による貢献を進めて頂きたい。
	(6) その他	・開発された基盤技術は、非常に広い範囲で他分野展開が可能と考えられる。より広くかつ早く展開するためにも、技術の一般化と移管が期待される。 ・「水に溶けたラジウムの分子レベルの観測」に関しても、医療用原料に対する連携研究に繋がっており、今後の展開も期待している。

表 4.2 令和 4 年度研究開発実績の委員の意見・コメント（令和 5 年 2 月 9 日時点）

意見・コメント
・日本原子力研究開発機構での DX 推進による原子力研究におけるイノベーションの創出という目標に対して、大規模高速計算に関してこれまで積み重ねてきた実績やシミュレーションに関する先端的な研究成果が先導的な役割を果たすものと期待できる。 ・総じて、報告いただいた各テーマはいずれも<u>優れた成果</u>を上げており、皆様のご努力がうかがえる。一方、難しい課題にチャレンジされているので新たな課題も見つかったのではないと思われる。研究において明らかになった課題も研究成果の一部であるので、それらを整理して次年度計画に反映いただきたい。目標設定が難しいのは理解しつつ、テーマによってはゴールやキーメトリックをもう少し明確化していただけないだろうか。例えば、R8 のアウトプットの「二相流解析の高性能計算技術の開発」は、何に使えるようにするのか、高性能とは何を意味しているのか、目指す姿を明示いただけないか。現状では、何を達成するために、ブレークダウンされ抽出された課題が何か、それが年度毎の実施内容にどう落とし込まれているのかが不明瞭で、単年度成果としては明確な進捗があるものの全体 RM に対してそれが妥当なものかどうか、判断が難しい。計算科学における重要な基盤技術の研究開発に取り組んでおられ、得られた成果は原子力のみならず他分野への波及効果が大きい。より効率的に社会ニーズに応え他分野展開するための、仕組みづくりやマーケティングについても検討いただきたい。日本を代表する原子力の研究開発機関として、世界の技術ベンチマークをして、研究計画に反映することもご検討いただきたい。 ・ここ数年評価委員を拝命していますが、システム計算科学センター 高度計算機技術開発室の計算科学、計算機科学分野へのコミットメントが顕著であり、国内においては重要な拠点となっていると思います。今後も、継続して優れた研究成果の発出を期待します。 ・課題毎のコメントとしても記載したとおり、欧米（特に欧州）での先端技術の研究開発においては、現在の社会でのニーズに加えて、今後の社会の動向、さらに言えば望ましい社会のあり方を念頭に、それに積極的に資する研究開発を志向することが政策的に取り組まれている（いわゆる RRI (Responsible Research and Innovation: 責任ある研究・イノベーション) の考え方）。我が国においても、科学技術・イノベーション基本法の改正後に定められた第 6 期科学技術・イノベーション基本計画では、「国民の安全と安心」と「一人ひとりの多様な幸せ (well-being) 」の両方を実現する「Society 5.0」の実現に向け、「総合知やエビデンスを活用しつつ、未来像からの「バックキャスト」を含めた「フォーサイト」に基づき政策を立案し、評価を通じて機動的に改善」することが政策上の要求として掲げられており、これは RRI の考え方とも通底する。こうした政策的な潮流にも呼応し、より社会全体の利益に資する研究開発を進めるためには、企業、自治体などはもちろん、一般市民を含む社会の様々なステークホルダーに基礎研究段階、技術の萌芽的な段階から積極的に、かつ適切な関与を求めることが有効であるし、人文・社会科学との連携がいっそう重視されることになる。今後はこうした面での取り組みの強化も期待したい。 ・学術論文、科研費の獲得においても、順調な成果が得られていると思います。また、今後の方向性についても妥当であると考えます。一方で、中長期計画について「福島環境回復」があげられていますが、具体的な計画が示されていないように思えました。国などの外部動向に応じて、開発した技術を適用していくという計画であると理解していますが、もう少し具体的に今後の方向性について検討頂ければよいと考えています。

付録

令和 4 年度計算科学技術研究実績

This is a blank page.

令和 4 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	3	4	7
シミュレーション技術開発室	26	2	28
システム計算科学センター	1	0	1
合計	30	6	36

【高度計算機技術開発室】

< 査読有り研究論文 >

- (1) Maeyama Shinya, Watanabe Tomohiko, Nakata Motoki, Nunami Masanori, Asahi Yuichi, Ishizawa Akihiro,
"Multi-scale turbulence simulation suggesting improvement of electron heated plasma confinement",
Nature Communications (Internet), Vol.13, No.1, pp.3166_1-3166_8 (2022).
- (2) Asahi Yuichi, Onodera Naoyuki, Hasegawa Yuta, Shimokawabe Takashi, Shiba Hayato, Idomura Yasuhiro,
"CityTransformer; A Transformer-based model for contaminant dispersion prediction in a realistic urban area",
Boundary-Layer Meteorology, Vol.186, pp.659-692 (2023).
- (3) Kawamura Takuma, Sakamoto Naohisa, Osaki Tsukasa,
"VR extension of client server type particle-based volume visualization application",
Journal of Advanced Simulation in Science and Engineering (Internet), Vol.10, No.1, pp.31-39 (2023).

< 査読無し研究論文 >

- (1) 渡邊 智彦, 井戸村 泰宏, 藤堂 泰, 本多 充,
"最先端の研究開発 理化学研究所ほか,2; 第一原理シミュレーションで挑む核燃焼プラズマ閉じ込めの物理",
日本原子力学会誌 ATOMO Σ, Vol.64, No.3, pp.152-156 (2022).

< 査読有り会議論文 >

- (1) Kawamura Takuma, Sakamoto Naohisa,
"VR extension of particle-based remote visualization application",
Proceedings of 41st JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST 2022) (Internet), "41st JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST 2022)", pp.266-269 (2022).
- (2) Asahi Yuichi, Padioleau Thomas, Latu Guillaume, Bigot Julien, Grandgirard Virginie, Obrejan Kevin,

- "Performance portable Vlasov code with C++ parallel algorithm",
 Proceedings of 2022 International Workshop on Performance, Portability, and Productivity in HPC (P3HPC) (Internet), "International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis (SC2022); 2022 International Workshop on Performance, Portability, and Productivity in HPC (P3HPC)", pp.68-80 (2022).
- (3) Hasegawa Yuta, Imamura Toshiyuki, Ina Takuya, Onodera Naoyuki, Asahi Yuichi, Idomura Yasuhiro,
 "GPU optimization of lattice Boltzmann method with local ensemble transform Kalman filter",
 Proceedings of 13th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Heterogeneous Systems (ScalAH22) (Internet), "International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage, and Analysis (SC22); 13th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Heterogeneous Systems (ScalAH22)", pp.10-17 (2022).
- (4) Ina Takuya, Idomura Yasuhiro, Imamura Toshiyuki, Onodera Naoyuki,
 "A New data conversion method for mixed precision Krylov solvers with FP16/BF16 Jacobi preconditioners",
 Proceedings of International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region (HPC Asia 2023) (Internet), "Supercomputing Asia 2023 & HPC Asia 2023", pp.29-34 (2023).
- <査読無し会議論文>
- (1) 長谷川 雄太, 小野寺 直幸, 朝比 祐一, 井戸村 泰宏,
 "二次元格子ボルツマン法に対する局所アンサンブル変換カルマンフィルタ(LETKF)の GPU 実装",
 計算工学講演会論文集(CD-ROM), "第 27 回計算工学講演会", Vol.27, 4p. (2022).
- (2) 杉原 健太, 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 山下 晋,
 "気液二相流問題におけるフェーズフィールド変数の最適化",
 計算工学講演会論文集(CD-ROM), "第 27 回計算工学講演会", Vol.27, 5p. (2022).
- (3) 朝比 祐一, 小野寺 直幸, 長谷川 雄太, 下川辺 隆史, 芝 隼人, 井戸村 泰宏,
 "適合細分化格子ボルツマン法に基づく都市風況解析コードの NVIDIA 及び AMD の GPU における性能移植性評価",
 計算工学講演会論文集(CD-ROM), "第 27 回計算工学講演会", Vol.27, 5p. (2022).
- (4) 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 長谷川 雄太, 下川辺 隆史, 青木 尊之,
 "適合細分化格子ボルツマン法による大気境界層生成のためのパラメータ最適化",
 計算工学講演会論文集(CD-ROM), "第 27 回計算工学講演会", Vol.27, 4p. (2022).
- (5) 朝比 祐一, Padioleau Thomas, Latu Guillaume, Bigot Julien, Grandgirard Virginie, Obrejan Kevin,
 "C++ parallel algorithm による性能可搬性評価",

- 第 36 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 36 回数値流体力学シンポジウム", 8p. (2022).
- (6) 長谷川 雄太, 小野寺 直幸, 朝比 祐一, 井戸村 泰宏,
"格子ボルツマン法と局所アンサンブル変換カルマンフィルタ(LBM-LETKF)による 3
次元乱流データ同化",
第 36 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 36 回数値流体力学
シンポジウム", 5p. (2022).
- (7) 河村 拓馬, 坂本 尚久,
"粒子ベース可視化アプリケーションの VR 対応とジェスチャ制御機能開発",
第 36 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 36 回数値流体力学
シンポジウム", 3p. (2022).
- (8) 杉原 健太, 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 山下 晋,
"マルチフェーズフィールド法を用いた気液二相流解析",
第 36 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 36 回数値流体力学
シンポジウム", 5p. (2022).
- 【シミュレーション技術開発室】
<査読有り研究論文>
- (1) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Ab initio study of nuclear quantum effects on sub- and supercritical water",
Journal of Chemical Physics, Vol.155, No.19, pp.194107_1-194107_11 (2021).
- (2) Chen Jiao, Yoshida Kenta, Suzudo Tomoaki, Shimada Yusuke, Inoue Koji, Konno
Toyohiko, Nagai Yasuyoshi,
"In situ TEM observation and MD simulation of frank partial dislocation climbing in
Al-Cu alloy",
Materials Transactions, Vol.63, No.4, pp.468-474 (2022).
- (3) Ebihara Kenichi, Suzudo Tomoaki,
"Molecular dynamics study of phosphorus migration in $\Sigma 3(111)$ and $\Sigma 5(0-13)$ grain
boundaries of α -iron",
Metals, Vol.12, No.4, pp.662_1-662_10 (2022).
- (4) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Structures of liquid and aqueous water isotopologues at ambient temperature from
ab initio path integral simulations",
Physical Chemistry Chemical Physics, Vol.24, No.18, pp.10851-10859 (2022).
- (5) Tsugawa Kiyoto, Hayakawa Sho, Iwase Yuki, Okita Taira, Suzuki Katsuyuki, Itakura
Mitsuhiro, Aichi Masaatsu,
"Molecular dynamics simulations to quantify the interaction of a rigid and
impenetrable precipitate with an edge dislocation in Cu",
Computational Materials Science, Vol.210, pp.111450_1-111450_9 (2022).
- (6) Mori Sho, Matsuda Nayuta, Okita Taira, Aichi Masaatsu, Itakura Mitsuhiro, Suzuki

- Katsuyuki,
 "Modeling changes in the second harmonic generation of ultrasonic waves having wavelengths beyond the length scale of conventional molecular dynamics",
 Materialia, Vol.21, pp.101371_1-101371_6 (2022).
- (7) Sasa Narimasa,
 "Fourier interpolation method in phase space of Hamiltonian systems",
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol.91, No.5, pp.054001_1-054001_8 (2022).
- (8) Kobayashi Keita, Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Itakura Mitsuhiro, Machida Masahiko, Cooper Michael W. D.,
 "Machine learning molecular dynamics simulations toward exploration of high-temperature properties of nuclear fuel materials; Case study of thorium dioxide",
 Scientific Reports (Internet), Vol.12, No.1, pp.9808_1-9808_11 (2022).
- (9) 海老原 健一,
 "水素ぜい化の評価・解析法; 3.水素昇温脱離曲線の数値シミュレーションに基づく解釈",
 材料, Vol.71, No.5, pp.481-487 (2022).
- (10) Kobayashi Keita, Yamaguchi Akiko, Okumura Masahiko,
 "Machine learning potentials of kaolinite based on the potential energy surfaces of GGA and meta-GGA density functional theory",
 Applied Clay Science, Vol.228, pp.106596_1-106596_11 (2022).
- (11) Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito, Itakura Mitsuhiro, Abe Eiji,
 "Atomistic weak interaction criterion for the specificity of liquid metal embrittlement",
 Scientific Reports (Internet), Vol.12, No.1, pp.10886_1-10886_7 (2022).
- (12) Nagai Yuki,
 "Intrinsic vortex pinning in superconducting quasicrystals",
 Physical Review B, Vol.106, No.6, pp.064506_1-064506_10 (2022).
- (13) Kimizuka Hajime, Thomsen B., Shiga Motoyuki,
 "Artificial neural network-based path integral simulations of hydrogen isotope diffusion in palladium",
 Journal of Physics; Energy (Internet), Vol.4, No.3, pp.034004_1-034004_13 (2022).
- (14) Machida Tadashi, Nagai Yuki, Hanaguri Tetsuo,
 "Zeeman effects on Yu-Shiba-Rusinov states",
 Physical Review Research (Internet), Vol.4, No.3, pp.033182_1-033182_12 (2022).
- (15) Shiga Motoyuki,
 "Path integral Brownian chain molecular dynamics; A Simple approximation of quantum vibrational dynamics",
 Journal of Computational Chemistry, Vol.43, No.27, pp.1864-1879 (2022).
- (16) Yamaguchi Akiko, Nagata Kojiro, Kobayashi Keita, Tanaka Kazuya, Kobayashi Toru,

- Tanida Hajime, Shimojo Kojiro, Sekiguchi Tetsuhiro, Kaneta Yui, Matsuda Shohei, Yokoyama Keiichi, Yaita Tsuyoshi, Yoshimura Takashi, Okumura Masahiko, Takahashi Yoshio,
 "Extended X-ray absorption fine structure spectroscopy measurements and *ab initio* molecular dynamics simulations reveal the hydration structure of the radium (II) ion",
 iScience (Internet), Vol.25, No.8, pp.104763_1-104763_12 (2022).
- (17) Suzudo Tomoaki, Ebihara Kenichi, Tsuru Tomohito, Mori Hideki,
 "Cleavages along {110} in bcc iron emit dislocations from the curved crack fronts",
 Scientific Reports (Internet), Vol.12, pp.19701_1-19701_10 (2022).
- (18) Yabuuchi Kiyohiro, Suzudo Tomoaki,
 "Interaction between an edge dislocation and faceted voids in body-centered cubic Fe",
 Journal of Nuclear Materials, Vol.574, pp.154161_1-154161_6 (2023).
- (19) Li Wenshuai, Yamada Shinya, Hashimoto Tadashi, Okumura Takuma, Hayakawa Ryota, Nitta Kiyofumi, Sekizawa Oki, Suga Hiroki, Uruga Tomoya, Ichinohe Yuto, Sato Toshiki, Toyama Yuichi, Noda Hirofumi, Isobe Tadaaki, Takatori Sayuri, Hiraki Takahiro, Tatsuno Hideyuki, Kominato Nao, Ito Masaki, Sakai Yusuke, Omamiuda Hajime, Yamaguchi Akiko, Yomogida Takumi, Miura Hikaru, Nagasawa Makoto, Okada Shinji, Takahashi Yoshio,
 "High-sensitive XANES analysis at Ce L₂-edge for Ce in bauxites using transition-edge sensors; Implications for Ti-rich geological samples",
 Analytica Chimica Acta, Vol.1240, pp.340755_1-340755_9 (2023).
- (20) Davies Simon. J. C., Bolea-Alamanac Blanca, Endo Kaori, Yamamoto Yu, Yamasaki Shudo, Malins Alex, Evans Jonathan, Sullivan Sarah, Ando Shuntaro, Nishida Atsushi, Kasai Kiyoto,
 "Urban factors and mental health symptoms in children of the Tokyo Early Adolescence Survey; Impact of proximity to railway stations",
 Journal of Transport & Health, Vol.28, pp.101564_1-101564_11 (2023).
- (21) Nagai Yuki, Shinaoka Hiroshi,
 "Sparse modeling approach for quasiclassical theory of superconductivity",
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol.92, No.3, pp.034703_1-034703_8 (2023).
- (22) Galvin Conor O. T., Machida Masahiko, Nakamura Hiroki, Andersson David A., Cooper Michael W. D.,
 "Correlations for the specific heat capacity of (U_xPu_{1-x})_{1-y}Gd_yO_{2-z} derived from molecular dynamics", Journal of Nuclear Materials, Vol.572, pp.154028_1-154028_8 (2022).
- (23) Sasa Narimasa,
 "Poincaré integral invariant and conserved quantity of Toda lattice systems",
 JSIAM Letters, Vol.14, pp.88-91 (2022).

- (24) Hayakawa Sho, Yamamoto Yojiro, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro, Suzuki Katsuyuki,
"Long-timescale transformations of self-interstitial atom clusters of Cu using the SEAKMC method; The Effect of setting an activation energy threshold for saddle point searches",
Computational Materials Science, Vol.218, pp.111987_1-111987_10 (2023).
- (25) Wallerberger Markus, Badr Samuel, Hoshino Shintaro, Huber Sebastian, Kakizawa Fumiya, Koretsune Takashi, Nagai Yuki, Nogaki Kosuke, Nomoto Takuya, Mori Hitoshi, Otsuki Junya, Ozaki Soshun, Plaikner Thomas, Sakurai Rihito, Vogel Constanze, Witt Niklas, Yoshimi Kazuyoshi, Shinaoka Hiroshi,
"sparse-ir; Optimal compression and sparse sampling of many-body propagators",
Software X (Internet), Vol.21, pp.101266_1-101266_7 (2023).
- (26) Tsugawa Kiyoto, Hayakawa Sho, Okita Taira, Aichi Masaatsu, Itakura Mitsuhiro, Suzuki Katsuyuki,
"Molecular dynamics simulation to elucidate effects of spatial geometry on interactions between an edge dislocation and rigid, impenetrable precipitate in Cu",
Computational Materials Science, Vol.215, pp.111806_1-111806_8 (2022).

【システム計算科学センター】

- (1) 町田 昌彦, 岩田 亜矢子, 山田 進, 乙坂 重嘉, 小林 卓也, 船坂 英之, 森田 貴己,
"福島前面海域におけるトリチウム存在量の推定とその経時変化; 福島沿岸および沖合のトリチウム存在量と 1F 貯留量および年間放出管理量との比較",
日本原子力学会和文論文誌, Vol.22, No.1, pp.12-24 (2023).

<査読無し研究論文>

- (1) 佐々 成正, 井上 純一,
"常微分方程式",
東京大学工学教程; 基礎系数学, 常微分方程式, 174p. (2020).
- (2) 山口 瑛子, 永田 光知郎, 田中 万也, 小林 恵太, 小林 徹, 下条 晃司郎, 谷田 肇, 関口 哲弘, 金田 結依, 松田 晶平, 横山 啓一, 矢板 毅, 吉村 崇, 奥村 雅彦, 高橋 嘉夫,
"EXAFS による Ra の水和状態と粘土鉱物への吸着状態の解明",
放射化学, No.45, pp.28-30 (2022).
- (3) 永井 佑紀,
"1 週間で学べる! Julia 数値計算プログラミング",
244p. (2022).

<査読有り会議論文>

- (1) Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki, Machida Masahiko,
"High performance parallel LOBPCG method for large Hamiltonian derived from Hubbard model on multi-GPU systems",
Supercomputing Frontiers, "Supercomputing Frontiers Asia 2022 (SCFA22)", pp.1-19 (2022).
- (2) Hirayama Shintaro, Sato Koichi, Kato Daiji, Iwakiri Hiroto, Yamaguchi Masatake,

Watanabe Yoshiyuki, Nozawa Takashi,

"Effect of uniaxial tensile strain on binding energy of hydrogen atoms to vacancy-carbon-hydrogen complexes in α -iron",

Nuclear Materials and Energy (Internet), "20th International conference on fusion reactor materials (ICFRM-20)", Vol.31, pp.101179_1-101179_9 (2022).

【システム計算科学センター】

<査読無し研究論文>

- (1) Machida Masahiko, Iwata Ayako, Yamada Susumu, Otosaka Shigeyoshi, Kobayashi Takuya, Funasaka Hideyuki, Morita Takami,
"Estimation of temporal variation of tritium inventory discharged from the port of Fukushima Dai-ichi Nuclear Power Plant; Analysis of the temporal variation and comparison with released tritium inventories from Japan and world major nuclear facilities",
Journal of Nuclear Science and Technology, Vol.60, No.3, pp.258-276 (2023).

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) Hasegawa Yuta, Aoki Takayuki, Kobayashi Hiromichi, Idomura Yasuhiro, Onodera Naoyuki,
"Tree cutting approach for reducing communication in domain partitioning of tree-based block-structured adaptive mesh refinement",
15th World Congress on Computational Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM-APCOM Yokohama 2022), (Yokohama (online), Japan, Jul. 31-Aug. 5, 2022).
- (2) Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Hasegawa Yuta, Nakayama Hiromasa, Shimokawabe Takashi, Aoki Takayuki,
"Particle filter for Large-eddy Simulations of turbulent boundary-layer flow generation based on observations",
15th World Congress on Computational Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM-APCOM Yokohama 2022), (Yokohama (online), Japan, Jul. 31-Aug. 5, 2022).
- (3) Sugihara Kenta, Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro, Yamashita Susumu,
"A Study of phase-field parameters in gas-liquid two-phase flow problems",
15th World Congress on Computational Mechanics & 8th Asian Pacific Congress on Computational Mechanics (WCCM-APCOM Yokohama 2022), (Yokohama (online), Japan, Jul. 31-Aug. 5, 2022).
- (4) Idomura Yasuhiro,
"Performance portable full-f gyrokinetic simulations on exascale supercomputers",

27th International Conference on Numerical Simulation of Plasmas (ICNSP 2022),
(online, Japan, Aug. 30-Sep. 2, 2022).

<国内会議>

- (1) 井戸村 泰宏,
"Oakforest-PACS における大規模 CFD 解析向け省通信型行列解法の開発",
第 11 回 JCAHPC セミナー(OFP 運用終了記念シンポジウム), (online, 日本, 2022 年 5 月 27 日).
- (2) 朝比 祐一, 前山 伸也, Bigot Julien, Garbet Xavier, Grandgirard Virginie, 藤井 恵介,
下川辺 隆史, 渡邊 智彦, 井戸村 泰宏, 小野寺 直幸, 長谷川 雄太, 青木 尊之, 片桐 孝洋,
"エクサスケール数値計算のためのデータ解析手法の開発",
JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 14 回シンポジウム, (東京, 日本, 2022 年 7 月 1 日).
- (3) 小野寺 直幸, 長谷川 雄太, 井戸村 泰宏, 朝比 祐一, 河村 拓馬, 伊奈 拓也, 下村 和也,
稲垣 厚至, 鈴木 真一, 平野 洪賓, 下瀬 健一, 下川辺 隆史,
"超高解像度の即時予測の実現に向けた都市街区内風況データベースの構築",
JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 14 回シンポジウム, (東京, 日本, 2022 年 7 月 7-8 日).
- (4) 小野寺 直幸, 青木 尊之, 井戸村 泰宏, 山下 晋, 河村 拓馬, 朝比 祐一, 伊奈 拓也,
長谷川 雄太, 杉原 健太, 下川辺 隆史, 大島 聡史,
"GPU・CPU・ARM プロセッサに対する原子力 CFD アプリケーション用の混合精度ポアソン解法",
JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 14 回シンポジウム, (東京, 日本, 2022 年 7 月 7-8 日).
- (5) 杉原 健太, 青木 尊之, 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 河村 拓馬, 下川辺 隆史, 伊奈 拓也,
山下 晋,
"原子力気液二相流体解析における界面追跡手法の高度化",
JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 14 回シンポジウム, (東京, 日本, 2022 年 7 月 7-8 日).
- (6) 朝比 祐一, 前山 伸也, Bigot Julien, Garbet Xavier, Grandgirard Virginie, Obrejan Kevin,
Padioleau Thomas, 藤井 恵介, 下川辺 隆史, 渡邊 智彦, 井戸村 泰宏, 小野寺 直幸,
長谷川 雄太, 青木 尊之,
"エクサスケール数値計算を見据えた性能可搬性研究およびデータ解析手法の開発",
JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 14 回シンポジウム, (東京, 日本, 2022 年 7 月 7-8 日).
- (7) 伊奈 拓也, 井戸村 泰宏, 今村 俊幸, 山下 晋, 小野寺 直幸,
"多相 CFD シミュレーションにおける悪条件行列に対する GPU 向け BFloat16 精度前処理の検証",
情報処理学会第 185 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, (下関, 日本,

2022 年 7 月 27-29 日).

- (8) 矢野 緑里, 河村 拓馬, 下村 和也, 杉原 健太, 井戸村 泰宏,
"汚染物質拡散シミュレーションの In-Situ アンサンブル可視化",
第 50 回可視化情報シンポジウム, (東京, 日本, 2022 年 8 月 8-10 日).
- (9) 朝比 祐一,
"大規模核融合プラズマ乱流シミュレーションデータの主成分分析",
日本原子力学会 2022 年秋の大会, (日立, 日本, 2022 年 9 月 7-9 日).
- (10) 井戸村 泰宏,
"大域的乱流シミュレーション",
第 39 回プラズマ・核融合学会年会, (富山, 日本, 2022 年 11 月 22-25 日).
- (11) 小野寺 直幸,
"都市街区内の風況デジタルツインの実現に向けた高速化およびデータ同化技術の開発",
NVIDIA 冬の HPC Weeks; Week 1, (online, 日本, 2022 年 11 月 29 日).
- (12) 今村 俊幸, 伊奈 拓也, 廣田 悠輔, 井戸村 泰宏,
"CPU+GPU 混成システム上の固有値計算ソルバーの現状調査と性能評価",
情報処理学会第 187 回ハイパフォーマンソコンピューティング研究発表会, (那覇, 日本,
2022 年 12 月 1-2 日).
- (13) 河村 拓馬, 坂本 尚久,
"粒子ベース可視化アプリケーションの VR 対応とジェスチャ制御機能開発",
第 36 回数値流体力学シンポジウム, (online, 日本, 2022 年 12 月 14-16 日).
- (14) 河村 拓馬, 坂本 尚久,
"粒子ベースの大規模データ向け遠隔可視化アプリケーションの VR 化",
先進的可視化環境とデータ科学を用いた可視化解析の研究会(VR2022), (土岐, 日本,
2022 年 12 月 8-9 日).

【シミュレーション技術開発室】

<国際会議>

- (1) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Nuclear quantum effects in water and its isotopologues",
2nd International Symposium "Hydrogenomics", (online, Japan, May. 16-19, 2022).
- (2) Takahashi Yoshio, Yamaguchi Akiko,
"High energy resolution fluorescence XAS for the speciation of cesium and rare earth
elements in geochemical and environmental samples",
32nd Goldschmidt Conference (Goldschmidt 2022), (Honolulu, U.S.A., Jul. 10-15,
2022).
- (3) Nagai Yuki,
"Localized Krylov-Bogoliubov-de Gennes Method: Ultra-fast numerical approach to
large-scale inhomogeneous superconductor",
29th International Conference on Low Temperature Physics (LT29), (Sapporo, Japan,
Aug. 18-24, 2022).

- (4) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Nuclear quantum effects in molecular dynamics simulations of water",
33rd IUPAP Conference on Computational Physics (CCP 2022), (Austin (online),
U.S.A., Aug. 1-4, 2022).
- (5) Ebihara Kenichi, Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito, Itakura Mitsuhiro,
"Numerical study of hydrogen thermal desorption spectra of aluminum",
18th International Conference on Aluminium Alloys (ICAA18), (Toyama, Japan, Sep.
4-8, 2022).
- (6) Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito, Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiro,
"Hydrogen trapping energy at the incoherent interface in aluminum alloys; First-
principles calculations",
18th International Conference on Aluminum Alloys (ICAA18), (Toyama, Japan, Sep.
4-8, 2022).
- (7) Shiga Motoyuki,
"Current status of ab initio molecular dynamics simulations",
10th International Conference on Smart Systems Engineering 2022 (SmaSys2022),
(Yamagata (online), Japan, Oct. 6-7, 2022).
- (8) Ebihara Kenichi, Sugiyama Yuri, Matsumoto Ryosuke, Takai Kenichi, Suzudo
Tomoaki,
"Simulation of hydrogen thermal desorption spectra for iron with strain-Induced
vacancy-type defects included",
4th International Conference on Metals Hydrogen (Steely Hydrogen 2022), (Ghent,
Belgium, Oct. 01, 2022).
- (9) Shiga Motoyuki,
"Path integral simulations; Probing nuclear quantum effects in materials",
Seminar series for Establishment of an integrated HPC platform project, (Seoul
(online)), Korea, Dec. 16, 2022).
- (10) Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake, Egusa Daisuke, Abe Eiji,
"DFT calculation of kink boundary migration in LPSO structure",
5th International Symposium on Long-Period Stacking/Order Structure and Mille-
feuille Structure (LPSO/MFS2022), (Tokyo, Japan, Dec. 11-14, 2022).

<国内会議>

- (1) 志賀 基之,
"経路積分法を用いた量子振動動力学のための新たな近似",
第 24 回理論化学討論会, (金沢, 日本, 2022 年 5 月 17-20 日).
- (2) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Ab initio study of nuclear quantum effects in water",
第 24 回理論化学討論会, (金沢, 日本, 2022 年 5 月 17-20 日).
- (3) 奥村 雅彦,

- "粘土鉱物の機械学習分子動力学法シミュレーション",
原子層鉱物の機能開拓に向けた計算・計測連携研究会, (筑波, 日本, 2022 年 5 月 17 日).
- (4) 永井 佑紀,
"自己学習ハイブリッドモンテカルロ法",
Advance/NeuralMD 新機能紹介セミナー, (柏(online), 日本, 2022 年 6 月 22 日).
- (5) 山口 瑛子, 中尾 淳, 奥村 雅彦,
"雲母の構造が剥離強度に与える影響の定量的評価",
日本土壌肥料学会 2022 年度東京大会, (東京, 日本, 2022 年 9 月 13-15 日).
- (6) 宇野 功一郎, 中尾 淳, 奥村 雅彦, 小暮 敏博, 和穎 朗太, 山口 瑛子, 矢内 純太,
"放射性セシウム捕捉ポテンシャルの溶液条件は移行リスクの推定に最適か?",
日本土壌肥料学会 2022 年度東京大会, (東京, 日本, 2022 年 9 月 13-15 日).
- (7) 山田 進, 沼田 良明, 佐藤 朋樹, 飛田 康弘, Wei S.,
"被ばく低減のための環境・線源分布のデジタル化技術の開発,4; 線源逆推定エンジンの
研究開発; 建屋内での大規模解析",
日本原子力学会 2022 年秋の大会, (日立, 日本, 2022 年 9 月 7-9 日).
- (8) 中村 博樹, 町田 昌彦, 加藤 正人,
"機械学習分子動力学による(Ca,Sr)F₂の高温物性の評価",
日本原子力学会 2022 年秋の大会, (日立, 日本, 2022 年 9 月 7-9 日).
- (9) 阿部 弘亨, 高鍋 和広, 中山 哲, 山口 正剛, Yang Huilong, 叶野 翔,
"Cr 被覆型事故耐性燃料の開発,1; Cr 表面における水素発生に関する実験的, 理論的研
究",
日本原子力学会 2022 年秋の大会, (日立, 日本, 2022 年 9 月 7-9 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,11; 福島県木造家屋内外の空間線量率分布特徴につ
いて",
日本原子力学会 2022 年秋の大会, (日立, 日本, 2022 年 9 月 7-9 日).
- (11) Kim Minsik, Malins Alex, 町田 昌彦, 吉村 和也, 吉田 浩子, 斎藤 公明,
"福島県木造家屋内外の空間線量率分布の特徴",
令和 4 年度環境創造センター成果報告会, (三春(online), 日本, 2022 年 9 月 29 日).
- (12) 奥村 雅彦,
"粘土鉱物分子動力学シミュレーションの新展開; 機械学習分子動力学法",
第 65 回粘土科学討論会, (松江, 日本, 2022 年 9 月 7-8 日).
- (13) 山口 瑛子, 永田 光知郎, 小林 恵太, 田中 万也, 小林 徹, 谷田 肇, 矢板 毅, 吉村 崇,
奥村 雅彦, 高橋 嘉夫,
"分子レベルの情報に基づいたラジウムの環境挙動解明",
日本放射化学会第 66 回討論会(2022), (東京, 日本, 2022 年 9 月 15-17 日).
- (14) 永田 光知郎, 山口 瑛子, 小林 徹, 下条 晃司郎, 横山 啓一, 谷田 肇, 矢板 毅, 高橋
嘉夫, 吉村 崇,
"In vitro で形成させたヒドロキシアパタイトに吸着した Ra-226 の局所構造解析",

- 日本放射化学会第 66 回討論会(2022), (東京, 日本, 2022 年 9 月 15-17 日).
- (15) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
 "Nuclear quantum effects in water and its isotopologous from ab initio path integral molecular dynamics",
 第 16 回分子科学討論会(2022 横浜), (横浜, 日本, 2022 年 9 月 19-22 日).
- (16) 山口 瑛子, 栗原 雄一, 永田 光知郎, 小林 恵太, 田中 万也, 小林 徹, 谷田 肇, 矢板 毅, 吉村 崇, 奥村 雅彦, 高橋 嘉夫,
 "ラジウムの粘土鉱物への吸着構造解明とそのラジウムの環境挙動への示唆",
 日本地球化学会第 69 回年会, (高知, 日本, 2022 年 9 月 5-12 日).
- (17) 志賀 基之,
 "第一原理経路積分法に基づく量子振動動力学",
 第 16 回分子科学討論会(2022 横浜), (横浜, 日本, 2022 年 9 月 19-22 日).
- (18) 板倉 充洋, 都留 智仁, 山下 真一郎, 橋本 直幸,
 "金属積層造形による新規低放射化ハイエントロピー合金の作製 II,4; 積層欠陥エネルギーに及ぼす合金及び磁性の効果",
 日本原子力学会 2022 年秋の大会, (日立, 日本, 2022 年 9 月 7-9 日).
- (19) 永井 佑紀, 品岡 寛,
 "スパースモデリングを用いた超伝導準古典理論; 自己無撞着方程式の高速解法",
 日本物理学会 2022 年秋季大会(物性), (東京, 日本, 2022 年 9 月 6-8 日).
- (20) 永井 佑紀,
 "機械学習による材料物性シミュレーションの高速化",
 アドバンス・シミュレーション・セミナー2022(第 3 回), (柏(online), 日本, 2022 年 9 月 30 日).
- (21) 志賀 基之,
 "第一原理分子動力学の現在と未来",
 理論化学レクチャーシリーズ 3, (online, 日本, 2022 年 10 月 28 日, 11 月 1 日).
- (22) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
 "On nuclear quantum effects and their effect on hydrogen bonds in water",
 第 5 回ハイドロジェノミクス研究会, (online, 日本, 2022 年 10 月 6-7 日).
- (23) 志賀 基之,
 "コンピューショナル・グリーンケミストリーに向けて",
 量子化学探索講演会 2022, (横浜(online), 日本, 2022 年 11 月 10 日).
- (24) 吉田 浩子, Kim Minsik, Malins Alex, 町田 昌彦,
 "空間線量率測定に基づく木造住家の代表的な線量低減係数の評価とその適用",
 第 4 回日本保健物理学会・日本放射線安全管理学会合同大会, (福岡, 日本, 2022 年 11 月 24-26 日).
- (25) 伊東 祐斗, 江草 大佑, 山口 正剛, 阿部 英司,
 "一般化積層欠陥エネルギーに基づく hcp-Mg における変形異方性の検証",
 軽金属学会第 143 回秋期大会, (東京, 日本, 2022 年 11 月 11-13 日).

- (26) 清水 一行, 戸田 裕之, 藤原 比呂, 平山 恭介, 山口 正剛,
 "Al-Zn-Mg 合金における T 相の水素トラップと水素脆化防止",
 軽金属学会第 143 回秋期大会, (東京, 日本, 2022 年 11 月 11-13 日).
- (27) 志賀 基之,
 "PIMD コードを用いた並列分子シミュレーション",
 NIMS ナノシミュレーションワークショップ 2022, (東京, 日本, 2022 年 12 月 15 日).
- (28) 永井 佑紀,
 "超伝導準結晶における自発的磁束ピン留め",
 第 28 回渦糸物理ワークショップ, (相模原, 日本, 2022 年 12 月 15-17 日).
- (29) 永井 佑紀, 岩崎 祐昂, 北原 功一, 木村 薫, 志賀 基之,
 "準結晶・近似結晶における異常高温比熱解明への試み; 機械学習分子動力学シミュレーションからのアプローチ",
 新学術領域研究第 9 回領域会議, (神戸, 日本, 2022 年 12 月 20-22 日).
- (30) 永井 佑紀,
 "Julia による科学技術計算",
 京都大学; ソースコードから始まる異分野交流, (京都, 日本, 2023 年 1 月 13 日).
- (31) 永井 佑紀, 田中 佳織,
 "超伝導化した準結晶における諸性質について",
 研究会「準周期電子状態とマルチフラクタリティ・ハイパーユニフォーミティ」, (盛岡, 日本, 2023 年 1 月 31 日・2 月 2 日).
- (32) 奥村 雅彦,
 "機械学習分子動力学法; 基礎・応用・発展",
 早稲田大学凝縮系物質科学研究所講演会, (東京, 日本, 2023 年 2 月 6 日).

【システム計算科学センター】

<国際会議>

- (1) Dercon Gerd, Albinet Franck, Saito Kimiaki, Takemiya Hiroshi, Machida Masahiko, Eguchi Tetsuya, Smolders Erik, Blackburn Carl, Heng Lee,
 "Artificial intelligence for monitoring and remediating radioactive contamination in agriculture",
 IAEA Technical Meeting on the Importance of Communicating Scientific Facts: Addressing Radiation Concerns in Societies - the Role of Science Technology and Society, (Mol, Belgium, Nov. 2-4, 2022).

<国内会議>

- (1) Shi Wang, Machida Masahiko, Yamada Susumu, Yoshida Toru, Hasegawa Yukihiro, Okamoto Koji,
 "Development of exposure reduction technologies by digitalization of environment and radioactive source distribution, 3; LASSO theory and demonstration for inverse estimation on radioactive source distributions",
 日本原子力学会 2022 年秋の大会, (日立, 日本, 2022 年 9 月 7-9 日).

- (2) 町田 昌彦, Shi Wang, 山田 進, 宮村 浩子, 沼田 良明, 佐藤 朋樹, 飛田 康弘, 吉田 亨, 柳 秀明, 古立 直也, 長谷川 幸弘, 岡本 孝司,
"被ばく低減のための環境・線源分布のデジタル化技術の開発,2; 線源逆推定・線量率推定・可視化エンジンの研究開発: 計画及び進捗",
日本原子力学会 2022 年秋の大会, (日立, 日本, 2022 年 9 月 7-9 日).
- (3) 町田 昌彦,
"原子炉建屋内での放射線源の逆推定手法の開発(国プロの研究開発進捗報告)",
日本原子力学会部会連絡会ウィークリーウェビナー(第 21 回); 計算科学技術部会 1,
(online, 日本, 2022 年 9 月 30 日).
- (4) 町田 昌彦, Liu Xudong, 谷村 直樹, 斎藤 公明,
"福島における放射性物質分布調査,16; 機械学習を用いた空間線量率変化モデルの開発",
日本原子力学会 2022 年秋の大会, (日立, 日本, 2022 年 9 月 7-9 日).
- (5) 宮村 浩子, 佐藤 朋樹, 沼田 良明, 飛田 康弘, 町田 昌彦,
"被ばく低減のための環境・線源分布のデジタル化技術の開発,5; インタラクティブ可視化エンジンの研究開発; MR デバイスの活用",
日本原子力学会 2022 年秋の大会, (日立, 日本, 2022 年 9 月 7-9 日).

3. 技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

- (1) システム計算科学センター,
"令和 3 年度計算科学技術研究実績評価報告",
JAEA-Evaluation 2022-004, 38p. (2022).
- (2) システム計算科学センター,
"令和 3 年度研究開発・評価報告書評価課題「計算科学技術研究」(事後／事前評価),
JAEA-Evaluation 2022-003, 61p. (2022).
- (3) 高性能計算技術利用推進室,
"令和 3 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 2022-035, 219p. (2023).

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- ・ 山口 瑛子, 奥村 雅彦他
"水に溶けたラジウムの姿を世界で初めて分子レベルで観測—キュリー夫妻による発見から 124 年、ラジウムの分子レベル研究の幕開け—" (2022/9/27).

5. 研究発表会等の開催

- (1) 第 34 回 CCSE ワークショップ
原子力材料研究開発における DX 推進の現状と将来:
原子力材料研究開発の革新と新展開
2023 年 2 月 24 日、オンライン.

6. 受賞等

(1) 日本シミュレーション学会 Outstanding Presentation Award

河村 拓馬

“VR Extension of Particle-based Remote Visualization Application”

(The 41th JSST Annual International Conference on Simulation Technology、
2022 年 8 月 31 日-9 月 2 日) (受賞日：12 月 10 日)。

(2) 日本放射化学会第 66 回討論会 (2022) 若手優秀賞

山口 瑛子

「分子レベルの情報に基づいたラジウムの環境挙動解明」

(日本放射化学会第 66 回討論会、2022 年 9 月 17 日)。

(3) 第 55 回(2022 年度)日本原子力学会技術賞

中山 浩成、小野寺 直幸、佐藤 大樹

「局所域高分解能大気拡散・線量評価システム」

(日本原子力学会春の年会、2023 年 3 月 14 日)。

7. 特許等の状況

(1) 特許の出願及び登録

出願：アルミニウム合金材の水素脆化防止方法および水素脆化防止剤 (山口 正剛)

特願 2022-063424 (2022 年 4 月 6 日)。

出願：線源推定装置及び線源推定方法 (町田 昌彦)

特願 2022-083279 (2022 年 5 月 20 日)。

出願：観測点決定装置及び観測点決定方法 (町田 昌彦)

特願 2022-083280 (2022 年 5 月 20 日)。

(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	3,308,313 円

8. 外部資金の獲得に関連する事項

室	予算額 (千円) (件数)	科研費 (代表)	科研費 (分担)
高度計算機技術開発室	53,028 (9)	6 (うち新規 3)	1 (うち新規 0)
シミュレーション 技術開発室	40,324 (17)	11 (うち新規 3)	3 (うち新規 3)
システム計算科学 センター	232,540 (2)	0	1 (うち新規 0)
合計	325,892 (28)	17 (うち新規 6)	5 (うち新規 3)

【高度計算機技術開発室】

- (1) 【継続】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) 42,378 千円
- (2) 【継続】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 (文部科学省) 2,200 千円 (分担)
- (3) 【継続】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) (東京工業大学) 260 千円 (分担)
- (4) 【継続】GPU スーパーコンピュータを用いた沸騰多相流挙動解析 (日本学術振興会：科研費 (基盤 C)) 1,300 千円
- (5) 【継続】大規模分散 GPGPU シミュレーションの対話的 In-Situ 可視化 (日本学術振興会：科研費 (基盤 C)) 1,300 千円
- (6) 【継続】観測密度を上回る高解像度の都市風況 LES に対するデータ同化手法の開発 (日本学術振興会：科研費 (若手研究)) 1,300 千円
- (7) 【新規】GPU スーパーコンピュータを用いた 1m 解像度リアルタイム風況デジタルツイン (日本学術振興会：科研費 (基盤 B)) 2,730 千円
- (8) 【新規】ハイブリッド混合精度処理によるエクサスケール反復解法ライブラリの開発 (日本学術振興会：科研費 (基盤 C)) 780 千円
- (9) 【新規】大域的 5 次元第一原理モデルのエクサスケール乱流計算による水素同位体混合現象の解明 (日本学術振興会：科研費 (基盤 C)) 780 千円

【シミュレーション技術開発室】

- (1) 【継続】「ナノ～マクロを繋ぐトモグラフィ：界面の半自発的剥離」、「界面のナノスケール・イメージベース計算物理解析」 (科学技術振興機構：CREST) 10,677 千円 (分担)
- (2) 【継続】金属被覆ジルコニウム合金型事故耐性燃料の開発 (化学的作用の確認・物理的安定性) (文部科学省：原子力システム研究開発事業) 606 千円
- (3) 【新規】3D 造形革新燃料製造のシミュレーション共通基盤技術 (文部科学省：原子力システム研究開発事業) 2,000 千円 (分担)
- (4) 【継続】粘土鉱物により放射性核種は還元されるか？ー放射性廃棄物地層処分と関連してー (日本学術振興会：科研費 (挑戦的研究 (萌芽)) 260 千円
- (5) 【継続】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)) 910 千円
- (6) 【継続】サブナノ分解能応力下その場観察法の開拓による新たな照射子化機構の解明 (日本学術振興会：科研費 (基盤 A) 520 千円
- (7) 【継続】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
- (8) 【継続】モデリングによるキンク形成・強化のメカニズム解明 (日本学術振興会：科研費 (新学術領域研究)) 5,278 千円
- (9) 【継続】遅延時間型超伝導検出器による中性子イメージングの位置分解能向上と検出効率改善 (日本学術振興会：科研費 (基盤 A)) 200 千円 (分担)

- (10) 【継続】 元素組み換え雲母を利用したセシウム土壌－植物間移行制御の機構解明（日本学術振興会：科研費（基盤 B）） 1,040 千円
- (11) 【継続】 電子と原子核の量子論に基づく水素エネルギー材料の第一原理設計（日本学術振興会：科研費（基盤 B）） 1,053 千円
- (12) 【新規】 対称性を考慮したニューラルネットワークによる有効模型構築（日本学術振興会：科研費（基盤 C）） 1100 千円
- (13) 【新規】 機械学習分子シミュレーションによる準結晶の高次元性の解析:異常高温比熱の解明（日本学術振興会：科研費（新学術領域研究（研究領域提案型）公募研究） 1,600 千円
- (14) 【新規】 量子多体問題に表れる固有値計算に対する高速化・高精度化手法の研究開発（日本学術振興会：科研費（基盤 C）） 910 千円
- (15) 【新規】 「学習物理学」の創生－機械学習と物理学の融合新領域による基礎物理学の変革（日本学術振興会：科研費（学術変革領域研究（A）） 200 千円（分担）
- (16) 【新規】 ニューラルネットワークで創生する新しい物性物理学（日本学術振興会：科研費（学術変革領域研究（A）） 2,600 千円（分担）
- (17) 【新規】 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法に関する技術指導（アドバンスソフト株式会社）（技術指導契約） 450 千円
- 【システム計算科学センター】
- (1) 【継続】 廃炉・汚染水対策事業費補助金（原子炉建屋内の環境改善のための技術の開発（被ばく低減のための環境・線源分布のデジタル化技術の開発））（分担）（資源エネルギー庁） 232,410 千円
- (2) 【継続】 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 B） 130 千円（分担）

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	技術指導契約	研究協定
高度計算機技術開発室	4	0	2	0	0
シミュレーション 技術開発室	11	0	3	1	0
高性能計算技術 利用推進室	0	1	0	0	0
システム計算科学 センター	1	0	0	0	1
合計	16	1	5	1	1

●共同研究

【高度計算機技術開発室】

- (1) 【新規】広域気象場一局所風況観測一局所風況解析を連携したリアルタイム風況予測に関する研究（防災科学技術研究所、東京工業大学）
- (2) 【新規】GPU スーパーコンピュータ向け大規模数値流体力学シミュレーションに関する研究（東京大学、東京工業大学）
- (3) 【新規】大規模シミュレーションに対する In-Situ 情報可視化技術に関する研究（京都大学、神戸大学）
- (4) 【新規】大規模 CFD シミュレーションの In-Situ 制御に関する研究（株式会社荏原製作所）

【シミュレーション技術開発室】

- (1) 【継続】大規模複雑人工物構造材料の劣化予測技術構築に関する研究（東京大学）
- (2) 【継続】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) 【継続】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）
- (4) 【継続】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）
- (5) 【継続】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）
- (6) 【継続】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）
- (7) 【継続】雲母系鉱物のセシウム吸着等の機能に関する実験及び計算科学研究（京都府立大学）
- (8) 【継続】無機材料探索に向けた自己学習ハイブリッドモンテカルロ法を活用した機械学習分子動力学シミュレーション手法の研究（株式会社東芝）
- (9) 【新規】機械学習ポテンシャルを用いた無機材料物性評価研究（AGC 株式会社）
- (10) 【新規】計算科学による有機無機ハイブリッドペロブスカイトの物性評価研究（早稲田大学、宇宙航空研究開発機構）
- (11) 【新規】有機物分子の錯体形成に係る計算科学研究（法政大学）

【システム計算科学センター】

- (1) 【新規】大規模並列行列計算ライブラリの研究開発（理化学研究所）

●委託研究

【高性能計算技術利用推進室】

- (1) 【新規】放射線イメージングにおける機械学習の適用および信号処理手法の高度化に関する研究（慶応義塾大学）

●受託研究

【高度計算機技術開発室】

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

●研究協定

【システム計算科学センター】

- (1) 【継続】「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 27 件に及ぶ機構内連携を実施している（令和 5 年 1 月 13 日現在）。

【高度計算機技術開発室】

- (1) 【継続】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) 【継続】汚染物質拡散解析の計算技術開発
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：汚染物質拡散解析に係る高性能計算技術、計算モデル、データ同化技術、機械学習技術、および可視化技術の開発
- (3) 【継続】航空機モニタリングに基づく地上線量率の推定技術開発
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：航空機モニタリングデータ、地形データ、衛星写真データを用いた地上線量率推定の逆問題解析における機械学習技術の開発
- (4) 【新規】多相熱流動解析の計算技術開発
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：多相熱流動解析に係る高性能計算技術、計算モデル、および可視化技術の開発
- (5) 【新規】ARKADIA における可視化技術開発
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：ARKADIA における炉心解析データの高速可視化技術の開発

【シミュレーション技術開発室】

- (1) 【継続】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、先端基礎研究センター）、核燃料・バックエンド研究開発部門（核

燃料サイクル工学研究所 環境技術開発センター)

概要：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) 【継続】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）、核燃料・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) 【継続】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) 【継続】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) 【継続】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) 【継続】1F 港湾・沿岸モニタリングデータからのインベントリ推定

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) 【継続】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) 【継続】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および高温ガス炉燃料被覆材料の照射特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) 【継続】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) 【継続】燃料デブリの機械的特性の計算

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：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) 【新規】中性子ビーム測定へのベイズ最適化の応用

部署：原子力科学研究部門（J-PARC センター）

概要：ベイズ最適化を用いた材料の中性子ビーム測定効率化

【高性能計算技術利用推進室】

- (1) 【新規】PHITS コードの機能拡張作業
 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：PHITS コードの機能拡張（①anatally の拡張、②ログ表示機能の追加、③線エネルギー付与関数の追加、④生成粒子情報出力機能の追加、⑤タリー出力規格化機能の追加）を行う。
- (2) 【新規】JUPITER コードをレーザー加工シミュレーションに適用するための改変作業
 部署：廃炉環境国際共同研究センター 先進放射線計測研究 Gr.
 概要：JUPITER による水噴流速度の解析計算を安定化できるようレーザー入熱量、水噴流速度、計算格子サイズ等のモデル形状の改良や機能追加を行う。
- (3) 【新規】核熱結合シミュレーションコード NASCA の並列化作業
 部署：原子力基礎工学研究センター 炉物理・熱流動研究 Gr.
 概要：NASCA コードの SGI8600 への CPU 移植及び並列化を行う。
- (4) 【新規】緊急時海洋環境放射能評価システム STEAMER の最適化作業
 部署：原子力基礎工学研究センター 環境動態研究 Gr.
 概要：STEAMER の一連の処理（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）ができる環境整備と最適化を行う。
- (5) 【新規】SPIRAL コードの最適化作業
 部署：高速炉サイクル研究開発センター 炉心・プラント解析評価 Gr.
 概要：SPIRAL コードの主要ソルバの GPU 最適化を行う。
- (6) 【新規】汎用非線形構造解析プログラム FINAS の移植作業
 部署：高速炉サイクル研究開発センター 炉心・プラント解析評価 Gr.
 概要：FINAS コードの SGI8600 上へ移植（COMMON ブロックの改修）を行う。
- (7) 【新規】ガス巻き込み評価に係る渦の最適抽出手法の整備作業
 部署：高速炉サイクル研究開発センター 炉心・プラント解析評価 Gr.
 概要：ParaView 上に、Fluent 等の CFD 解析結果データから流速分布を読み込み、渦に関するパラメータを算出できるよう機能拡張を行う。
- (8) 【新規】FEMAX-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：スレッド並列化対象ループの OpenMP 化を行う。
- (9) 【新規】モンテカルロ臨界計算コード Solomon の並列化作業
 部署：安全研究センター 臨海安全研究 Gr.
 概要：Solomon コードの SGI8600（CPU 演算部）への移植及び並列化を行う。
- (10) 【新規】2D-EMAT-coupled コードの GPU 移植作業
 部署：敦賀総合研究開発センター プラント技術開発 Gr.
 概要：2D-EMAT-coupled コードの SGI8600（GPGPU 演算部）への移植を行う。
- (11) 【新規】JUPITER コードのデータ変換プログラム作成作業
 部署：原子力基礎工学研究センター 炉物理・熱流動研究 Gr.

概要: JUPITER のジオメトリファイル「Geom ファイル」から構造物要素を読み込み、MicroAVS の「MGF ファイル」の要素データに変換するプログラムを作成する。

11. 国際協力

国際協力の一覧を以下に示す（件数：2 件）。

- (1) 【継続】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～2031 年 12 月 12 日）
- (2) 【継続】国際原子力機関（IAEA）
“国際協力研究事業（食糧・農業に影響を及ぼす原子力災害への対策）「食糧・農業モニタリングデータの収集、管理および提供のためのソフトウェアプラットフォームの研究開発」”（IAEA 主導のもと 10 ヶ国が参加）
（2013 年度～2024 年 7 月 8 日）

