



JAEA-Evaluation

2024-001

DOI:10.11484/jaea-evaluation-2024-001

令和 5 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 FY2023

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

October 2024

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 研究開発推進部 科学技術情報課
〒 319-1112 茨城県那珂郡東海村大字村松 4 番地 49
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 Library, Institutional Repository and INIS Section, Research and Development Promotion Department, Japan Atomic Energy Agency.

4-49 Muramatsu, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1112, Japan
E-mail: ird-support@jaea.go.jp

令和 5 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

(2024 年 7 月 26 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 5 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 FY2023**

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

(Received July 26, 2024)

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 FY2023 (April 1st, 2023 - March 31st, 2024) 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. 計算科学技術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	5
4.1 令和 5 年度評価	5
付録 令和 5 年度計算科学技術研究実績	17

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 (FY2023)	3
4. Results of the R&D and the Evaluation Comments	5
4.1 FY2023 Evaluation	5
Appendix List of Achievements in FY2023	17

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5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	筑波大学 放射線・アイソトープ地球システム研究センター 国際連携データ解析部門 教授

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 6 年 2 月 20 日 10:00～12:00	オンライン	<ul style="list-style-type: none"> ・ 第 4 期中長期計画及び 令和 5 年度研究計画について ・ 令和 5 年度の全体概況及び研究開発 の DX 推進について ・ 令和 5 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、福島の実験環境回復、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5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、複数のCPU/GPU環境で動作可能なより汎用性の高い行列解法を開発する。

可視化技術の研究開発では、遠隔VR可視化システムの複数クライアント通信機能を開発する。

シミュレーション技術の研究開発では、核燃料物質の磁性状態を再現する高精度第一原理計算手法を開発するとともに、気液二相流解析における省メモリの界面モデルを開発する。

データ同化技術の研究開発では、風洞実験スケールの流体解析にデータ同化手法を適用

し、データ同化精度を検証する。

機械学習技術の研究開発では、機械学習分子動力学による三元素系合金の物性評価技術を開発するとともに、核燃料物質の原子配置の機械学習を予備的な学習により効率化する手法を開発する。

DXを進める機構内外の組織と連携し、イノベーション創出に向けインパクトの大きい先端技術の有効性を評価する。

4. 研究実績と評価意見

4.1 令和 5 年度評価

中長期計画及び令和 5 年度計画に沿って実施した研究開発の実績及び委員からいただいた意見・コメントについて、表 4.1 及び表 4.2（令和 6 年 2 月 20 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。

This is a blank page.

表 4.1 令和 5 年度研究開発実績の自己評価及び委員評価（令和 6 年 2 月 20 日時点）（1/4）

令和 5 年度計画	CCSE	外部有識者
	実績報告	意見・コメント
<p>課題①</p> <p>高性能計算技術の研究開発では、複数の CPU/GPU 環境で動作可能なより汎用性の高い行列解法を開発する。可視化技術の研究開発では、遠隔 VR 可視化システムの複数クライアント通信機能を開発する。シミュレーション技術の研究開発では、気液二相流解析における省メモリの界面モデルを開発する。データ同化技術の研究開発では、風洞実験スケールの流体解析にデータ同化手法を適用し、データ同化精度を検証する。</p> <p>DX を進める機構内外の組織と連携し、イノベーション創出に向けインパクトの大きい先端技術の有効性を評価する。</p> <p>（高度計算機技術開発室）</p>	<p>(1) 研究開発の達成度(実績・成果)</p> <ul style="list-style-type: none"> ○複数の CPU/GPU 環境で高効率に動作する汎用性の高い行列解法を開発し、従来の CPU/GPU 専用の行列解法と同等の処理速度を達成した。 ○遠隔 VR 可視化システムの複数クライアント通信機能を開発し、遠隔地のユーザが HMD 上の VR 空間を共有する協働解析環境を実現した。 ○界面追跡型気液二相流解析における高精度界面モデルの省メモリ実装を開発し、円管内気泡乱流の実証解析に成功した。 ○風洞実験スケールの 3 次元乱流解析においてアンサンブルデータ同化手法(LETKF)の精度検証を実施し、従来手法(ナッジング)を上回るデータ同化精度を達成した。 <p>(2) 成果の科学的意義</p> <ul style="list-style-type: none"> ○多様な CPU/GPU 環境のエクサスケール計算機において低開発コストで高性能計算を実現する手法を確立した。 ○従来の CAVE のような大規模施設に集まらずに、遠隔地の専門家が HMD 上の VR 空間で手軽に協働解析作業を行える環境を実現した。 ○従来手法による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することで、気泡流を高精度に再現できることを実証した。 ○風洞実験スケールの 3 次元乱流解析におけるデータ同化数値実験に成功したことで、高解像度の乱流解析でもアンサンブルデータ同化が可能であることを実証した。 	<ul style="list-style-type: none"> ・研究開発課題は計画通り達成されている。 ・いずれのテーマにおいても、従来に対して高速化、高精度化などが達成できており、成果が上げられている。 ・SYCL の適用により、現状の性能を示したことは有用な情報になります。公開時にはライブラリ自体に加えて、SYCL 利用時のノウハウなどもドキュメント化すると、ユーザに大いに参考になると思います。 ・可視化技術は、着実に機能と DL 数の向上が見られます。機構内外ユーザとの連携を進め、コミュニティ醸成に取り組むことで息の長い活動を目指してほしいと思います。 ・二相流解析では、更なる省メモリ実装にはビットエンコード技術が役立つと思います。GPU ではインストラクションに応じたビット幅での演算になると思います。 ・汎用的で有用な技術開発が行われている。特に CPU/GPU 環境で動作する汎用性の高い手法に関しては、広く興味を持たれるはずである。用いた手法と高速化の結果の詳細を公表し、知見を共有していただきたい。(HPCI 課題や富岳成果創出加速プログラムの成果報告会や研究交流会などで発表いただけるとありがたい。) ・すべての課題において十分な達成度を示している。特に風洞実験スケールの 3 次元乱流解析におけるアンサンブルデータ同化手法(LETKF)によって高いデータ同化精度を実現したという成果は、研究開発の領域において顕著な進歩を示しており、より正確な気象予測や環境モデリングに貢献する可能性を秘めている。アンサンブルデータ同化手法の採用により、将来的な応用範囲の拡大が期待される。 ・複数の CPU/GPU 環境で高効率に動作する行列解法に関する研究及びライブラリの整備は高く評価できる。また、様々なタイプのスーパーコンピュータに適用できるように発展させるとの今後の方向性は適切である。 ・いずれのテーマの成果も、原子力研究開発の加速に資すると同時に、原子力以外への展開も期待でき、科学的意義においても高く評価される。 ・性能ポータビリティの観点から SYCL のような言語を使った実装は意義が高く、様々な環境での性能特性が非常に有用な情報となります。 ・データ同化技術の成果は、機構外連携にも活用されており評価できると思います。 ・すべての課題における科学的意義があると思う。特に CPU/GPU 環境のエクサスケール計算機における高性能計算手法の確立は、異なるハードウェア環境での計算効率と柔軟性を大幅に向上させることに寄与すると思う。エクサスケール計算機の導入により、多岐にわたる分野でのシミュレーションの精度とスピードが飛躍的な向上が期待できる点で科学的な意義が大きいと思う。

表 4.1 令和 6 年度研究開発実績の自己評価及び委員評価（令和 6 年 2 月 20 日時点）（2/4）

令和 5 年度計画	CCSE	外部有識者
	実績報告	意見・コメント
	<p><u>(3) 機構内外のニーズへの適合・貢献</u></p> <p>○複数の CPU/GPU 環境で高効率に動作する数値計算ライブラリは機構スパコンのみならず、次世代スパコン等でも高いニーズがあるため、今後、CPU/GPU 高汎用性実装を用いて行列計算ライブラリを整備し、R6 年度に公開予定。</p> <p>○開発した遠隔 VR 可視化システムを炉設計プラットフォーム（高速炉・新型炉研究開発部門）、地層処分場デジタルツイン（核燃料・バックエンド研究開発部門）、CFD 機器設計（荏原製作所）に提供するとともに、多地点遠隔 VR 可視化システムを今年度中に整備・公開予定。</p> <p>○開発した高精度界面モデルを熱流動解析コード JUPITER（原子力基礎工学研究センター）に提供し、今後、共同でバンドル体系の実証解析を実施予定。</p> <p>○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 課題を推進している。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・風況乱流解析と風洞実験を組み合わせるデータ同化は先進的であり、放射性物質の大気拡散の予測に向けてニーズが高い。また、原子力規制庁の事業に発展したことは高く評価できる。 ・数値計算ライブラリは機構内のみならず、一般のニーズにも適合する。 ・VR 可視化技術は機構内のデジタルツインの実現のみならず、産業界でも設計の高効率化等に貢献する。企業の受託も受けているので、PoC を通して改善し実用化していただきたい。 ・高精度界面モデルは、基礎工開発の JUPITER への実装で低ボイド率におけるボイド率分布や速度分布の高速・高精度解析に貢献している。一方、混相流解析は企業でもニーズが高いが、評価したいのは沸騰場での伝熱低下など安全性や性能劣化につながる現象で、高ボイドで気泡流とは全く異なる複雑な流動様式である。ステップを踏んで進めることが重要なのは理解できるが、どんなアウトカムを目指すのかを明確にし、その実現のために各年度で何を達成するのかをもう少し明確にして進めていただけるとよい。 ・風況デジタルツインは、原子力以外のエネルギーや環境評価の様々なニーズに適合し、イノベーション創出が期待できる。 ・疎行列計算ライブラリはニーズが多い一方で、ユーザの導入に向けてのサポートも必要になるかもしれません。この点も含めて取り組んでいただくと助かります。個人的には大きな期待を寄せております。 ・計算技術のいずれも計算科学を推進する上での重要な要素技術で計算科学コミュニティに貢献できるものだと思います。アウトリーチ活動は機構のプレゼンスを高める手段ですので、本質的な業務に加えて、活動を継続していただきたいと思います。 ・すべての課題において、機構内外のニーズへ貢献が出来ていると考える。 ・特に遠隔 VR 可視化システムは、幅広い分野においてそのニーズに適合し、大きな貢献をもたらすことが期待される。このシステムにより、複雑なデータやプロセスを直感的かつ詳細に理解することが可能となり、チームメンバー間のコミュニケーションの向上、迅速な意思決定、設計プロセスの効率化が促進される。また、多地点からのアクセスを可能とすることで、地理的制約を超えた協業が実現できる。このように、開発されたシステムは、技術的な進歩だけでなく、組織的な協働やイノベーションの促進にも寄与することが期待され、地層処分デジタルツインや民間会社による機器設計のニーズに適合していると考えます。
	<p><u>(4) 参考指標、優れた成果等</u></p> <p>○査読付き論文掲載数:6 件</p> <p>○IF3.0 以上の論文掲載数:2 件</p> <p>○外部表彰数:1 件</p> <p>○科研費実施数:7 件 うち新規 3 件 うち代表 6 件</p> <p>○政府系受託研究実施数:2 件</p> <p>○0 円共同研究実施数:5 件</p> <p>○夏期休暇実習生・特別研究生等:1 件</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・論文発表及び外部資金獲得は着実に実施されている。 ・論文発表、外部資金獲得において、優れた成果を上げている。 ・多くの実習生、研究生の受け入れ、人材育成に貢献されている。 ・昨年度と同水準を維持しており、外部資金獲得の実績も十分あります。また、人材育成の観点からは研究生などの受入を積極的に行っている点が評価できます。 ・十分な研究成果を上げており、科研費獲得につながっていることも評価できる。 ・特にこの分野における人材育成は重要な課題であるが、夏期休暇実習生・特別研究生等の受入を実施していることが評価できる。
	<p><u>(5) 人文・社会科学からの視点</u></p> <p>○第 6 期科学技術・イノベーション基本計画の方針を意識した研究開発のマネジメントを進めている。また、基礎研究段階から機構内外の様々なステークホルダーの関与を求めるために、機構内では開発技術を活用した DX 推進に係るワーキンググループを設置して対話を重ねるとともに、機構外では、産業界、大学、国研等の連携機関のニーズを適宜ヒアリングし、それらを反映した研究開発に取り組んでいます。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・研究開発の DX は非常に期待される。引き続き機構内外のニーズをヒアリングして上で、コンセプトを明確にし、システム構築を進めていただきたい。デジタルツインは商用炉に向けた展開も視野に入れ、基盤技術構築としての貢献を意識いただけるとよいと考える。 ・新興技術のガバナンスにおいては、予見性、先見性をキーワードに、技術や社会の未来洞察活動を行い、研究開発の方向性や実践のあり方を適宜に変化させることの重要性が指摘されている。本計画で謳われている機構内外の DX への貢献においてもこうした視点を活かし、中長期の展望を持ったうえで、足元で取り組むべき事柄を意識するループを持つことが望ましい。計算科学の分野は今後どういう形で DX に貢献するのか、それが原子力や再生エネルギーの分野でどうなのか、といった、未来洞察を意識する場を部門内、開発室内で定期的に持って、意識づけをしつつ仕事を進めていただくことも一案ではないか。 ・環境動態デジタルツインにおける仮想空間シミュレーションは、将来の原子力発電所の過酷事故への備えとなるべきものである。現在、日本では事故対応に関する議論が不足していると思われるが、科学的成果を創出することによって、過酷事故への備えの必要性に関する議論につなげていただきたい。
	<p><u>(6) その他</u></p>	<ul style="list-style-type: none"> ・なし

表 4.1 令和 5 年度研究開発実績の自己評価及び委員評価（令和 6 年 2 月 20 日時点）（3/4）

令和 5 年度計画	CCSE	外部有識者
	実績報告	意見・コメント
<p>課題②</p> <p>シミュレーション技術の研究開発では、核燃料物質の磁性状態を再現する高精度第一原理計算手法を開発する。</p> <p>機械学習技術の研究開発では、機械学習分子動力学による三元素系合金の物性評価技術を開発するとともに、核燃料物質の原子配置の機械学習を予備的な学習により効率化する手法を開発する。</p> <p>DX を進める機構内外の組織と連携し、イノベーション創出に向けインパクトの大きい先端技術の有効性を評価する。（シミュレーション技術開発室）</p>	<p>(1) 研究開発の達成度(実績・成果)</p> <p>○従来の第一原理計算より高精度な手法を核燃料物質へ適用し、磁性状態に関しこれまで知られていた実験との齟齬を改善することに成功した。</p> <p>○機械学習分子動力学計算によりステンレス合金の振動特性の実験結果を初めて高精度に再現した。</p> <p>○機械学習分子動力学において予備的な学習を用いてデータを選別する手法を開発し、従来の 1/7 のデータ数で同等の学習精度を達成することに成功した。</p> <p>(2) 成果の科学的意義</p> <p>○核燃料物質の第一原理計算では低温で観測される磁性状態に関し、実験との齟齬が課題となっていた。高精度手法により実験と矛盾しない結果が得られたことで、物性評価における磁性状態の取り扱いに関する指針が得られた。</p> <p>○ステンレス合金ではこれまで磁性の効果をとり入れた原子シミュレーションができなかったが、これを取り入れた計算を初めて可能にし、実験で観測される振動特性を磁性状態の影響まで含め高精度に再現した。</p> <p>○ウラン、プルトニウムなどの核燃料の第一原理計算は計算コストが高いため、これを大量に行う必要がある機械学習分子動力学手法の応用は行われていない。必要なデータ数を削減したことで今後の応用が可能となる。</p> <p>(3) 機構内外のニーズへの適合・貢献</p> <p>○高速炉・新型炉研究開発部門との連携において核燃料物質の原子シミュレーション技術を MOX 燃料模擬物質を対象とした実験結果の解析に活用している。</p> <p>○ADS 炉等の新型炉に加え、産業上も重要なステンレス鋼のシミュレーションによる物性評価に向けて計算手法を整備し、照射影響の評価を実施できる見込みを得た。</p> <p>○開発手法をステンレス合金に応用した他、高速炉・新型炉研究開発部門との連携(グラファイト照射挙動評価)で応用し、これまで知られていなかった照射挙動を機械学習分子動力学計算で発見した。今後、これまで困難であった核燃料物質の物性評価において応用を進める。</p>	<p>・研究開発課題は計画通り達成されている。</p> <p>・いずれのテーマにおいても、従来に対して高精度化が達成できており、優れた成果が上げられている。</p> <p>・計算科学とデータ科学の手法を組み合わせた取り組みにより、精度改善、時間短縮、応用事例の拡大など、先進的な取り組みが評価できると思います。</p> <p>・複数のテーマで手法開発と興味深い応用の成果が得られている。特に機械学習ポテンシャルなど、機械学習と第一原理計算の組み合わせに関しては、世界的競争の激しい中でオリジナリティの高い手法提案を行っており、高く評価できる。</p> <p>・すべての課題において十分な達成度を示している。特に機械学習において 1/7 という十分に少ないデータ数で学習精度を達成できたということは、達成度という点においても十分であると考えます。</p> <p>・核燃料物質の磁性状態を再現できる第一原理計算手法の開発は特に原子力分野において意義があると高く評価できる。</p> <p>・機械学習を用いてステンレスの磁性を評価できる手法の開発は先端的である。</p> <p>・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極めて高く評価される。</p> <p>・少ないサンプル数で精度のよい学習を行う取り組みは、応用を進める上で重要な技術になると思います。今後、適用範囲を広げると共に結果の分析から更なる改善手法に取り組まれるとよいと思います。</p> <p>・すべての課題において説明された科学的意義があると考えられる。特に、核燃料物質の磁性状態を再現する高精度第一原理計算手法を、MOX 燃料模擬物質を対象とした実験に適用し、従来の問題点を解決できたことは科学的意義が大きいと考える。</p> <p>・基盤研究のみならず、機構内のニーズに対し着実に成果を上げられていることが高く評価される。また、ガラスや鉄鋼分野など、企業との連携により他分野貢献が進められていることも極めて高く評価される。</p> <p>・機構内のニーズに基づいて興味深いテーマ設定が行われ、基礎科学としての成果が上がっていることを評価する。シミュレーションの成果が機構内でどのように生かされているかも見せていただきたい。</p> <p>・すべての課題において、機構内外のニーズへ貢献が出来ていると考える。高速炉・新型炉研究開発部門との連携で、これまで知られていなかったグラファイト照射挙動を機械学習分子動力学計算で発見したことは、ニーズに十分に応えた例であると考えます。</p>

表 4.1 令和 5 年度研究開発実績の自己評価及び委員評価（令和 6 年 2 月 20 日時点）（4/4）

令和 5 年度計画	CCSE	外部有識者
	実績報告	意見・コメント
	<p>(4) 参考指標、優れた成果等</p> <ul style="list-style-type: none"> ○査読付き論文掲載数:16 件 ○IF3.0 以上の論文掲載数:8 件 ○外部表彰数:1 件 ○プレス発表:2 件 ○科研費実施数:11 件 <ul style="list-style-type: none"> うち新規 4 件 うち代表 6 件 ○受託研究実施数:5 件 ○0 円共同研究実施数:9 件 ○夏期休暇実習生・特別研究生等:13 件 	<ul style="list-style-type: none"> ・IF の高い論文が多数発表されており、顕著な成果であると評価できる。 ・論文発表、外部資金獲得において成果を上げられており、特に受託研究実施数が多く、外部のニーズを捉えた研究を実施されている点で評価される。 ・実習生・研究性を多く受け入れ、人材育成にも貢献されている。 ・昨年度と同水準を維持しており、外部資金獲得の実績も十分と思います。また、人材育成の観点からは研究生などの受け入れに積極的に行っている点は評価できます。 ・多数の論文発表が行われており、外部資金も獲得できている。若手人材の育成についても評価できる。 なお、掲載された論文誌の IF に関する記載が多いが、これらは必ずしも評価指標として適切とはいえないのではないかと。 ・十分な研究成果を上げており、科研費獲得につながっていることも評価できる。 ・特にプレス発表となった「ラジウムを含む様々な元素の土壌への吸着機構を解明」は、これまで把握が困難であった吸着機構を、第一原理計算を実験と組み合わせで解明したことは評価でき、今後の地層処分への貢献も期待できる。
	<p>(5) 人文・社会科学からの視点</p> <p>○廃炉および廃棄物地層処分に関わる国プロに参画し、廃炉の現場で使用するソフトウェアの開発や環境動態研究に取り組み、社会課題解決への貢献を目指している。また、産業界との連携を通して、材料分野における社会ニーズを把握し、機械学習分子動力学計算を活用したイノベーション創出に向けた取り組みを推進した。開発技術を実装して公開したオープンソースコード PIMD については、民間のクラウド型材料計算プラットフォーム Quloud で利用可能になるなど普及が進んでいる。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・社会ニーズに応える基盤・応用研究を進められており、極めて高く評価される。産業界との連携によるニーズ把握が、具体的な社会課題解決のテーマ創出につながっている。機械学習分子動力学計算の活用で、更なるイノベーション創出が期待される。 ・IMD については、公開だけでなく、普及に向けた活動も継続していただきたいと思います。 ・未来洞察活動の重要性に加えて、本室の研究についてはいわゆる社会実装（実用化）がより強く意識される段階にあるテーマが多いことから、より具体的な ELSI（倫理的・法的・社会的課題）の議論、すなわち、それを社会実装したときにどういう範囲で意思決定に活かすのか、それが一般の人たちにどう影響するか、といった含意についての議論を積極的に意識した研究展開を進めてほしい。ELSI に関する研究者や実務家から話を聞き、意見交換をする機会を意識的に増やすことが有用ではないか。 ・福島第一原子力発電所の廃炉では、高線量のために現場でのトライアンドエラーが困難となっている。そのため、現場を模擬したデジタルツイン上で、廃炉技術のトライアンドエラーを実施することが必須となると考える。廃炉デジタルツインは、今後の福島第一原子力発電所の廃炉における不可欠な技術となりうるかと考える。
	<p>(6) その他</p> <ul style="list-style-type: none"> ○J-PARC、AGC(株)と連携し、ガラス材料へ機械学習分子動力学を応用し実験を高精度に再現するとともに構造に関する新たな知見を得た成果が Scientific Reports 誌(IF=5.0)に掲載。 ○物質科学研究センター、先端基礎研究センター、東京大学、大阪大学と連携し、ラジウム等の粘土鉱物への吸着メカニズムを解明した環境動態研究の成果が、Journal of Colloid and Interface Science 2024 (IF=9.9)に掲載。 ○日本製鉄および上智大と連携し、実用鉄鋼材料の水素脆化を計算と実験で解析した成果が International Journal of Hydrogen Energy 誌(IF=7.1)に掲載。 	<ul style="list-style-type: none"> ・ラジウムを含む様々な元素の土壌への吸着機構を解明したことは、地層処分に関する知見を広げることに貢献したと評価できる。 ・機械学習分子動力学の研究成果が、ガラス材料における企業との共同研究に発展したことは高く評価できる。

表 4.2 令和 5 年度研究開発実績の委員の意見・コメント（令和 6 年 2 月 20 日時点）

意見・コメント
<ul style="list-style-type: none"> ・デジタルツインやマテリアル DX といった日本原子力研究開発機構全体での DX 推進に関わっており、高く評価できる。特に、これまでシステム計算科学センターが取り組んできた可視化技術やデータ同化技術は、DX のための基盤として広く展開していくことが期待される。 ・年度毎の達成目標がわからないので評価が難しい。「・・・の開発」「・・・の確立」といっても何をもって開発し、確立したと判断するのか、キーメトリックの明確化と可能な範囲での定量化が必要ではないか。また、TLR(技術成熟度)を、中長期計画でどのように上げていくことを目指しているのか、令和 10 年での技術の出口戦略をどのように考えているのか、内容的にも時期的にも社会のニーズにマッチしているのか等、様々な観点からロードマップの精緻化や状況に応じた見直しも必要ではないだろうか。 ・評価項目(5)については、①②とも書かれている内容が項目の範疇でないように思いました。書きにくい項目であると思いますので、可能でしたら、評価項目を適切に改めてもよいのではないかと思います。 ・DX 推進については、センター内にある多様なニーズと要素技術を整理し、共通技術の抽出により開発の効率化・効果の最大化を図る方針であると思います。計画立案後もマイルストーンを設け、着実に推進していただきたいと思います。 ・生成系 AI の活用については、機構内だけで進めるのではなく、アウトソーシングを活用するの一手ではないかと思えます。 ・機構において行われている計算科学技術研究の中には基礎研究の色合いが濃いものが多いが、年次で報告いただいている成果、進捗はめざましい。そうであればこそ、今後において予期される社会へのインパクトも否応なく増大する。計算科学分野の発展の一般的な状況に鑑みても、その度合いは今後もさらに強まりこそすれ、減ずることは考えにくい。過去の事例、他分野の事例に対する実証的な研究や実務的な経験に基礎を置く新興技術ガバナンス研究の見地からは、こうした場合には早い段階から社会へのインパクトを正負両面ともに予見的、先見的に把握し、常に先手を意識した対処を研究開発や関連政策に加えて戦略的に対応し、また常にその修正を続けることが必要とされる。その際には、研究開発の上流段階、すなわち基礎研究段階から多様なステークホルダーの関与を得るアップストリーム・エンゲージメントの有用性がかねて指摘されている。また、研究者自身が社会へのインパクトを意識して自律的にそうした対処を行う責任ある研究・イノベーション(RRI: Responsible Research and Innovation)の考え方がすでに各国の科学技術政策、研究資金配分機関のポリシー等に反映されてきている。我が国の第 6 期科学技術・イノベーション基本計画もこうした潮流と軌を一にしており、機構においてもこれを意識した研究開発の展開が望まれる。具体的には、基礎研究に近いテーマの研究開発に従事する研究者も、潜在的なインパクトの影響が及ぶステークホルダーの声を直接聞いたり、関連する人文・社会科学研究を展開している研究者と知的な交流をしたりする機会を増やすことがまずは重要であろう。業務多忙の折とは考えるが、まずは研修や講演会等の既存の枠組みを活用してもよいと思われるので、積極的な機会づくりをお願いしたい。 ・両室共に、機構のニーズに沿った成果が上がっていることを高く評価します。センターの成果が機構内でどのように生かされているかを見せていただけるとありがたいです。 ・人文・社会科学からの視点での取り組みについては、システム計算科学センターだけで取り組むのは難しいのではないのでしょうか。ELSI/RRI に機構全体で取り組み、そこにセンターも参加して、センターの研究にフィードバックするほうが建設的であるように思えます。

付録

令和 5 年度計算科学技術研究実績

This is a blank page.

令和 5 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	4	0	4
シミュレーション技術開発室	25	1	26
システム計算科学センター	1	1	2
合計	30	2	32

【高度計算機技術開発室】

< 査読有り研究論文 >

- (1) Idomura Yasuhiro, Dif-Pradalier Guilhem, Garbet Xavier, Sarazin Yanick, Tore Supra Teams,
"Full- f gyrokinetic simulations of Ohmic L-mode plasmas in linear and saturated Ohmic confinement regimes",
Physics of Plasmas, Vol.30, No.4, pp.042508_1-042508_18 (2023).
- (2) Watanabe Seiya, Kawahara Jun, Aoki Takayuki, Sugihara Kenta, Takase Shinsuke, Moriguchi Shuji, Hashimoto Hirota,
"Free-surface flow simulations with floating objects using lattice Boltzmann method",
Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics, Vol.17, No.1, pp.2211143_1-2211143_23 (2023).
- (3) Kawamura Takuma, Hasegawa Yuta, Idomura Yasuhiro,
"Interactive steering on in situ particle-based volume rendering framework",
Journal of Visualization, Vol.27, No.1, pp.89-107 (2024).
- (4) Hasegawa Yuta, Onodera Naoyuki, Asahi Yuichi, Ina Takuya, Imamura Toshiyuki, Idomura Yasuhiro,
"Continuous data assimilation of large eddy simulation by lattice Boltzmann method and local ensemble transform Kalman filter (LBM-LETKF)",
Fluid Dynamics Research, Vol.55, No.6, pp.065501_1-065501_25 (2023).

< 査読無し会議論文 >

- (1) 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 長谷川 雄太, 朝比 祐一, 稲垣 厚至, 下瀬 健一, 平野 洪賓,
"アンサンブルカルマンフィルタを用いた都市風況解析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 28 回計算工学講演会", Vol.28, 4p. (2023).
- (2) Idomura Yasuhiro,
"Isotope and plasma size scaling in ion temperature gradient driven turbulence",
Europhysics Conference Abstracts (Internet), "47th European Physical Society

Conference on Plasma Physics (EPS 2021)", Vol.45A, 4p. (2021).

【シミュレーション技術開発室】

<査読有り研究論文>

- (1) Suzudo Tomoaki, Ebihara Kenichi, Tsuru Tomohito, Mori Hideki,
"Emergence of crack tip plasticity in semi-brittle α -Fe",
Journal of Applied Physics, Vol.135, No.7, pp.075102_1-075102_7 (2024).
- (2) 鈴木 知明, 海老原 健一, 都留 智仁, 森 英喜,
"機械学習ポテンシャルを用いた BCC 鉄へき開の大規模原子シミュレーション",
材料, Vol.73, No.2, pp.129-135 (2024).
- (3) 小林 恵太, 中村 博樹, 板倉 充洋, 町田 昌彦, 奥村 雅彦,
"機械学習分子動力学法による核燃料物質の高温物性評価",
まてりあ, Vol.62, No.3, pp.175-181 (2023).
- (4) Nagai Yuki, Tanaka Akinori, Tomiya Akio,
"Self-learning Monte Carlo for non-Abelian gauge theory with dynamical fermions",
Physical Review D, Vol.107, No.5, pp.054501_1-054501_16 (2023).
- (5) Ebihara Kenichi, Sekine Daiki, Sakiyama Yuji, Takahashi Jun, Takai Kenichi,
Omura Tomohiko,
"Numerical interpretation of thermal desorption spectra of hydrogen from high-carbon ferrite-austenite dual-phase steel",
International Journal of Hydrogen Energy, Vol.48, No.79, pp.30949-30962 (2023).
- (6) 山田 進, 町田 昌彦, 有川 太郎,
"シルトフェンスによる懸濁粒子の水底堆積促進効果; シミュレーションによる矩形開水路での放射性物質の拡散抑制評価",
日本原子力学会和文論文誌, Vol.22, No.2, pp.73-86 (2023).
- (7) Shi Wei, Machida Masahiko, Yamada Susumu, Yoshida Toru, Hasegawa Yukihiro, Okamoto Koji,
"LASSO reconstruction scheme for radioactive source distributions inside reactor building rooms with spectral information and multi-radionuclide contaminated situations",
Annals of Nuclear Energy, Vol.184, pp.109686_1-109686_12 (2023).
- (8) Shimizu Kazuyuki, Toda Hiroyuki, Fujihara Hiro, Yamaguchi Masatake, Uesugi Masayuki, Takeuchi Akihisa, Nishijima Masahiko, Kamada Yasuhiro,
"Hydrogen embrittlement and its prevention in 7XXX aluminum alloys with high Zn concentrations",
Corrosion, Vol.79, No.8, pp.818-830 (2023).
- (9) Shi Wei, Machida Masahiko, Yamada Susumu, Yoshida Toru, Hasegawa Yukihiro, Okamoto Koji,
"Inverse estimation scheme of radioactive source distributions inside building rooms

- based on monitoring air dose rates using LASSO; Theory and demonstration",
 Progress in Nuclear Energy, Vol.162, pp.104792_1-104792_19 (2023).
- (10) Yamaguchi Masatake, Ebihara Kenichi, Tsuru Tomohito, Itakura Mitsuhiro,
 "First-principles calculations of hydrogen trapping energy on incoherent interfaces
 of aluminum alloys",
 Materials Transactions, Vol.64, No.11, pp.2553-2559 (2023).
- (11) Tang Jianwei, Wang Yofei, Fujihara Hiro, Shimizu Kazuyuki, Hirayama Kyosuke,
 Ebihara Kenichi, Takeuchi Akihisa, Uesugi Masayuki, Toda Hiroyuki,
 "Stress corrosion cracking induced by the combination of external and internal
 hydrogen in Al-Zn-Mg-Cu alloy",
 Scripta Materialia, Vol.239, pp.115804_1-115804_5 (2024).
- (12) Kobayashi Keita, Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Itakura Mitsuhiro,
 Machida Masahiko, Urata Shingo, Suzuya Kentaro,
 "Machine learning molecular dynamics reveals the structural origin of the first sharp
 diffraction peak in high-density silica glasses",
 Scientific Reports (Internet), Vol.13, pp.18721_1-18721_12 (2023).
- (13) 宇野 功一郎, 中尾 淳, 奥村 雅彦, 山口 瑛子, 小暮 敏博, 矢内 純太,
 "放射性セシウム捕捉ポテンシャルから推定される K_a 値と実測 K_a 値との誤差要因の解
 明",
 日本土壌肥料学雑誌, Vol.94, No.5, pp.376-384 (2023).
- (14) Ito Yuto, Egusa Daisuke, Yamaguchi Masatake, Abe Eiji,
 "Non-stoichiometric *fcc*-base GdO_x precipitations in a Mg-Zn-Gd alloy",
 Materials Transactions, Vol.64, No.8, pp.2022-2025 (2023).
- (15) 比嘉 良太, 藤原 比呂, 戸田 裕之, 小林 正和, 海老原 健一, 竹内 晃久,
 "Al-Zn-Mg 合金における水素脆化発生挙動のマルチモーダル 3D イメージベース解析",
 軽金属, Vol.73, No.11, pp.530-536 (2023).
- (16) Moriyama Junichiro, Takakuwa Osamu, Yamaguchi Masatake, Ogawa Yuhei,
 Tsuzaki Kaneaki,
 "The Contribution of Cr and Ni to hydrogen absorption energy in Fe-Cr-Ni austenitic
 systems; A First-principles study",
 Computational Materials Science, Vol.232, pp.112650_1-112650_11 (2024).
- (17) Kim Minsik, Malins Alex, 町田 昌彦, 吉村 和也, 斎藤 公明, 吉田 浩子,
 "福島県木造家屋内外の空間線量率の分布調査; 線量低減係数の実態",
 日本原子力学会和文論文誌(インターネット), Vol.22, No.4, pp.156-169 (2023).
- (18) 志賀 基之, Thomsen Bo, 永井 佑紀,
 "ソフトウェア紹介「PIMD」",
 アンサンブル, Vol.25, No.4, pp.303-310 (2023).
- (19) Shiga Motoyuki, Thomsen Bo, Kimizuka Hajime,
 "Inelastic neutron scattering of hydrogen in palladium studied by semiclassical

- dynamics",
Physical Review B, Vol.109, No.5, pp.054303_1-054303_12 (2024).
- (20) Urakawa Yutaka, Egusa Daisuke, Itakura Mitsuhiro, Abe Eiji,
"Anomalous local lattice softening around kink boundaries in a mille-feuille structured dilute Mg-Zn-Y Alloy",
Materials Transactions, Vol.64, No.5, pp.1065-1071 (2023).
- (21) Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake, Egusa Daisuke, Abe Eiji,
"DFT calculation of high-angle kink boundary in 18R-LPSO alloy",
Materials Transactions, Vol.64, No.4, pp.813-816 (2023).
- (22) Kwon Hyukjoon, Shiga Motoyuki, Kimizuka Hajime, Oda Takuji,
"Accurate description of hydrogen diffusivity in bcc metals using machine-learning moment tensor potentials and path-integral methods",
Acta Materialia, Vol.247, pp.118739_1-118739_11 (2023).
- (23) Yamaguchi Akiko, Kurihara Yuichi, Nagata Kojiro, Tanaka Kazuya, Higaki Shogo, Kobayashi Toru, Tanida Hajime, Ohara Yoshiyuki, Yokoyama Keiichi, Yaita Tsuyoshi, Yoshimura Takashi, Okumura Masahiko, Takahashi Yoshio,
"Molecular geochemistry of radium: A key to understanding cation adsorption reaction on clay minerals",
Journal of Colloid and Interface Science, Vol.661, pp.317-332 (2024).
- (24) Miyazaki Hidetoshi, Akatsuka Tatsuyoshi, Kimura Koji, Egusa Daisuke, Sato Yohei, Itakura Mitsuhiro, Takagi Yasumasa, Yasui Akira, Ozawa Kenichi, Mase Kazuhiko, Tokunaga Toko, Hayashi Koichi, Hagihara Koji, Abe Eiji,
"Investigation of the electronic structure of the $Mg_{99.2}Zn_{0.2}Y_{0.6}$ alloy using X-ray photoelectron spectroscopy",
Materials Transactions, Vol.64, No.6, pp.1194-1198 (2023).
- (25) Sato Yohei, Egusa Daisuke, Miyazaki Hidetoshi, Kimura Koji, Itakura Mitsuhiro, Terauchi Masami, Abe Eiji,
"STEM-EELS/EDS chemical analysis of solute clusters in a dilute mille-feuille-type Mg-Zn-Y alloy",
Materials Transactions, Vol.64, No.5, pp.950-954 (2023).

< 査読無し研究論文 >

- (1) 町田 昌彦, 山田 進, Kim Minsik, 奥村 雅彦, 宮村 浩子, 志風 義明, 佐藤 朋樹, 沼田 良明, 飛田 康弘, 山口 隆司, 鈴木 政浩, 岡本 孝司, Shi Wei, 吉田 亨, 古立 直也, 柳 秀明, 長谷川 幸弘,
"1F 廃炉に向けた放射線源逆推定及び線源対策に係るデジタル技術の研究開発; 3D-ADRES-Indoor:デジタル技術を集約するプラットフォームの現状紹介",
RIST News, No.69, pp.2-18 (2023).
- (2) 山口 正剛,
"液体金属脆化の元素選択性と脆化メカニズム; 第一原理計算",

まであり, Vol.62, No.10, pp.646-651 (2023).

- (3) 山口 瑛子, 奥村 雅彦, 高橋 嘉夫,
"水に溶けたラジウムを分子レベルで初観測",
Isotope News, No.789, pp.20-23 (2023).

- (4) 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",
放射化学, No.47, pp.41-42 (2023).

<査読有り会議論文>

- (1) Shi Wei, Machida Masahiko, Yamada Susumu, Yoshida Toru, Hasegawa Yukihiro, Okamoto Koji,
"LASSO reconstruction scheme to predict radioactive source distributions inside reactor building rooms; Theory & demonstration",
Proceedings of Waste Management Symposia 2023 (WM2023) (Internet), "Waste Management Symposia 2023 (WM2023)", 8p. (2023).

【システム計算科学センター】

<査読有り研究論文>

- (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,
"福島第一原発港湾から流出した放射性ストロンチウム ^{90}Sr (^{89}Sr)量の経時変化の推定;
原発事故から 2022 年 3 月までの流出量変化の分析と福島沿岸および沖合への環境影響
評価",
日本原子力学会和文論文誌(インターネット), Vol.22, No.4, pp.119-139 (2023).

<査読有り会議論文>

- (1) Machida Masahiko, Shi Wei, Yamada Susumu, Miyamura Hiroko, Yoshida Toru, Hasegawa Yukihiro, Okamoto Koji, Aoki Yuto, Ito Rintaro, Yamaguchi Takashi, Suzuki Masahiro,
"LASSO reconstruction scheme to predict radioactive source distributions inside reactor building rooms; Practical applications",
Proceedings of Waste Management Symposia 2023 (WM2023) (Internet), "Waste Management Symposia 2023 (WM2023)", 11p. (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) Asahi Yuichi, Hasegawa Yuta, Onodera Naoyuki, Shimokawabe Takashi, Shiba Hayato, Idomura Yasuhiro,
"Generating observation guided ensembles for data assimilation with denoising diffusion probabilistic model",
40th International Conference on Machine Learning (ICML 2023), (Honolulu, U.S.A., Jul. 21-27, 2023).

- (2) Hasegawa Yuta,
 "Panel on high performance computing; Exascale CFD plan in JAEA-CCSE: Towards digital twin of urban wind environment",
 20th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-20), (Washington, D.C., U.S.A., Aug. 20-25, 2023).
- (3) Asahi Yuichi, Hasegawa Yuta, Padioleau Thomas, Millan Aymeric, Bigot Julien, Grandgirard Virginie, Obrejan Kevin,
 "Performance portability of Ensemble Kalman Filter using C++ senders/receivers",
 2023 Open Accelerated Computing Summit (OACS), (online, Oct. 4, 2023).
- (4) Ina Takuya, Idomura Yasuhiro, Imamura Toshiyuki,
 "Performance evaluation of multi-precision conjugate gradient method in CPU/GPU environment using SYCL",
 6th R-CCS International Symposium (RCCS-IS6), (Kobe, Japan, Jan. 29-30, 2024).
- <国内会議>
- (1) Sitompul Yos, Aoki Takayuki, Watanabe Seiya, Sugihara Kenta, Takaki Tomohiro,
 "Heat transfer study in foam formation using LBM with MPF model and AMR method",
 第 28 回計算工学講演会, (つくば, 日本, 2023 年 5 月 3 日-6 月 2 日).
- (2) Asahi Yuichi, Maeyama Shinya, Bigot Julien, Garbet Xavier, Grandgirard Virginie, Obrejan Kevin, Padioleau Thomas, Fujii Keisuke, Shimokawabe Takashi, Watanabe Tomohiko, Idomura Yasuhiro, Onodera Naoyuki, Hasegawa Yuta, Aoki Takayuki,
 "Targeting exa-scale systems: Performance portability and scalable data analysis",
 JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 15 回シンポジウム, (東京, 日本, 2023 年 7 月 6-7 日).
- (3) 杉原 健太, 青木 尊之, 小野寺 直幸, 下川辺 隆史, 井戸村 泰宏, 山下 晋, 河村 拓馬, 伊奈 拓也,
 "原子力气液二相流体解析における界面捕獲手法の高度化",
 JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 15 回シンポジウム, (東京, 日本, 2023 年 7 月 6-7 日).
- (4) 小野寺 直幸, 下川辺 隆史, 井戸村 泰宏, 河村 拓馬, 朝比 祐一, 長谷川 雄太, 伊奈 拓也, 下村 和也, 稲垣 厚至, 平野 洪賓, 下瀬 健一,
 "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 15 回シンポジウム, (東京, 日本, 2023 年 7 月 6-7 日).
- (5) 森井 雅大, 坂本 尚久, 河村 拓馬,
 "粒子ベースレンダリングの高速化のための多重カーネルノイズ除去オートエンコーダ",
 第 51 回可視化情報シンポジウム, (小樽, 日本, 2023 年 8 月 1 日).
- (6) 河村 拓馬, 井戸村 泰宏,
 "粒子ベースレンダリングによる大規模アンサンブルデータの効率的な統計量可視化",

- 第 51 回可視化情報シンポジウム, (小樽, 日本, 2023 年 8 月 1 日).
- (7) 三好 健斗, 長崎 孝夫, 青木 尊之, 杉原 健太,
"PLIC-VOF 法と高さ関数法を用いた核沸騰の大規模数値シミュレーション",
日本混相流学会混相流シンポジウム 2023, (札幌, 日本, 2023 年 8 月 1 日).
- (8) Sitompul Yos, Aoki Takayuki,
"Advancements in multi-phase flow simulation using the Lattice Boltzmann Method:
From two-phase dynamics to turbulent bubbles and liquid-gas foam",
第 37 回 LBM 研究会, (東京, 日本, 2023 年 11 月 10 日).
- (9) 長谷川 雄太, 井戸村 泰宏, 小野寺 直幸, 朝比 祐一,
"格子ボルツマン法-局所アンサンブル変換カルマンフィルタにおける状態変数ベクトル
の選定について",
第 37 回数値流体力学シンポジウム, (名古屋, 日本, 2023 年 12 月 15-17 日).
- (10) 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 長谷川 雄太, 朝比 祐一, 稲垣 厚至, 下瀬 健一, 平野 洪
賓,
"適合細分化格子ボルツマン法による東京都市街区内の風況ラージエディシミュレーシ
ョン",
第 37 回数値流体力学シンポジウム, (名古屋, 日本, 2023 年 12 月 15-17 日).
- (11) 杉原 健太, 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 山下 晋,
"Multi-phase field 法を用いた気泡流解析",
第 37 回数値流体力学シンポジウム, (名古屋, 日本, 2023 年 12 月 15-17 日).
- (12) Sitompul Yos, 青木 尊之, 渡辺 勢也, 杉原 健太, 高木 知弘,
"気液二相流シミュレーションによる泡沫による断熱解析",
第 37 回数値流体力学シンポジウム, (名古屋, 日本, 2023 年 12 月 15-17 日).
- (13) 長崎 孝夫, 青木 尊之, 杉原 健太, 内田 遥己,
"PLIC-VOF 法を用いたプール核沸騰の数値シミュレーション",
第 37 回数値流体力学シンポジウム, (名古屋, 日本, 2023 年 12 月 15-17 日).
- (14) 森井 雅大, 坂本 尚久, 河村 拓馬,
"多重カーネルノイズ除去オートエンコーダを使った粒子ベースレンダリングの画質改
善",
第 37 回数値流体力学シンポジウム, (名古屋, 日本, 2023 年 12 月 15-17 日).
- (15) 小野寺 直幸,
"原子力防災に向けた風況デジタルツイン開発",
第 35 回 CCSE ワークショップ「原子力計算科学技術を活用したイノベーション創出」,
(柏(online), 日本, 2024 年 2 月 2 日).
- (16) 河村 拓馬,
"xR 技術を駆使した大規模原子力データの可視化",
第 35 回 CCSE ワークショップ「原子力計算科学技術を活用したイノベーション創出」,
(柏(online), 日本, 2024 年 2 月 2 日).

【シミュレーション技術開発室】

<国際会議>

- (1) Okumura Masahiko,
"Machine learning molecular dynamics; A Fast and highly accurate simulation method for materials",
4th International Conference on Data-Driven Plasma Science (ICDDPS-4), (Onna, Japan, Apr. 16-21, 2023).
- (2) Shiga Motoyuki,
"Probing quantum effects in materials by ab initio path integral simulations",
CECAM Flagship School on Path Integral Quantum Mechanics, (Tel Aviv, Israel, Jun. 4-8, 2023).
- (3) Yamaguchi Akiko, Okumura Masahiko, Takahashi Yoshio,
"Investigation of factors controlling adsorption structures of cations on clay minerals based on EXAFS, HERFD-XANES, and ab initio calculation",
33rd Goldschmidt Conference (Goldschmidt 2023), (Lyon, France, Jul. 9-14, 2023).
- (4) Okumura Masahiko, Kobayashi Keita, Yamaguchi Akiko,
"Super-hydrated kaolinite under high pressure; A Machine learning molecular dynamics study",
33rd Goldschmidt Conference (Goldschmidt 2023), (Lyon, France, Jul. 9-14, 2023).
- (5) Yamaguchi Akiko, Okumura Masahiko, Takahashi Yoshio,
"Factors controlling adsorption structures of cations on clay minerals investigated by EXAFS measurement and ab initio calculation",
Water-Rock Interaction (WRI-17)/ Applied Isotope Geochemistry (AIG-14), (Sendai, Japan, Aug. 18-22, 2023).
- (6) Takahashi Yoshio, Yamaguchi Akiko, Yomogida Takumi,
"Molecular geochemistry; Systematic understanding of geochemical behaviors of various elements based on XAFS",
Water-Rock Interaction (WRI-17)/ Applied Isotope Geochemistry (AIG-14), (Sendai, Japan, Aug. 18-22, 2023).
- (7) Shiga Motoyuki,
"Path integral Brownian chain molecular dynamics; A Semiclassical approach for vibrational spectra",
34th IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2023), (Kobe, Japan, Aug. 4-8, 2023).
- (8) Nagai Yuki, Okumura Masahiko, Kobayashi Keita, Shiga Motoyuki,
"Self-learning hybrid Monte Carlo method; A First-principles approach",
34th IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2023), (Kobe, Japan, Aug. 4-8, 2023).

- (9) Shiga Motoyuki,
 "Brownian chain molecular dynamics; A Path integral approach for vibrational spectra",
 5th Conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023),
 (Sapporo, Japan, Sep. 4-9, 2023).
- (10) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
 "Telling hydrogen isotopologues in bulk water apart using path integral molecular dynamics and machine learning potentials",
 5th Conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (TACC2023),
 (Sapporo, Japan, Sep. 4-9, 2023).
- (11) Nagai Yuki, Iwasaki Yutaka, Takagiwa Yoshiki, Kitahara Koichi, Kimura Kaoru, Shiga Motoyuki,
 "Atomic diffusion due to hyperatomic fluctuation for quasicrystals and their approximants",
 International Conference on Complex Orders in Condensed Matter; Aperiodic Order, Local Order, Electronic Order, Hidden Order, (Evian, France, Sep. 24-29, 2023).
- (12) Ebihara Kenichi, Fujihara Hiro, Shimizu Kazuyuki, Yamaguchi Masatake, Toda Hiroyuki,
 "Numerical simulation of hydrogen entering a second phase particle in aluminum",
 International Hydrogen Conference 2023 (IHC2023), (Park City, U.S.A., Sep. 17-21, 2023).
- (13) Shiga Motoyuki,
 "Brownian chain molecular dynamics; A Semiclassical path integral approach",
 6th International Conference on Molecular Simulation (ICMS 2023), (Taipei, Taiwan, Oct. 6-9, 2023).
- (14) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
 "Machine learning potentials and path integral molecular dynamics for modelling water and its isotopologues",
 Hierarchical Structure and Machine Learning (HISML) 2023, (Kashiwa, Japan, Oct. 2-13, 2023).
- (15) Nagai Yuki,
 "Self-learning Monte Carlo method for electrons, atoms, and quarks and gluons",
 East Asia Joint Seminars On Statistical Physics 2023, (Yokohama, Japan, Oct. 11-13, 2023).
- (16) Nagai Yuki, Tomiya Akio,
 "Self-learning Monte Carlo method with equivariant Transformer",
 Large-scale lattice QCD simulation and application of machine learning, (Tsukuba, Japan, Nov. 23-25, 2023).

- (17) Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito, Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiko,
 "First-principles calculations of hydrogen trapping energy on incoherent interfaces
 in aluminum alloys",
 Advanced Materials Research Grand Meeting (MRM2023/IUMRS-ICA2023), (Kyoto,
 Japan, Dec. 11-16, 2023).
- (18) Nagai Yuki,
 "The Self-learning Monte Carlo method: Accelerating simulations with machine
 learning",
 7th Model Calculation Seminars, (Kashiwa, Japan, Dec. 26, 2023).
- (19) Okumura Masahiko,
 "Machine learning molecular dynamics simulations of materials with complex
 structures",
 7th International Symposium on Frontiers in Materials Science (FMS 2024),
 (Hsinchu, Taiwan, Jan. 21-24, 2024).
- (20) Yamada Susumu, Machida Masahiko,
 "Inverse estimation of radiation source distribution from air dose rates: Introduction
 of Digital Platform 3D-ADRES-Indoor",
 6th R-CCS International Symposium (RCCS-IS6), (Kobe, Japan, Jan.29-30, 2024).
- <国内会議>
- (1) 永井 佑紀, 岩崎 祐昂, 北原 功一, 木村 薫, 志賀 基之,
 "機械学習分子シミュレーションを用いた、準結晶における高次元性の解析",
 Deep learning and Physics Online (第 50 回), (online, 日本, 2023 年 4 月 27 日).
- (2) 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圧縮応力下における hcp 金属の変形異方性",
 軽金属学会第 144 回春期大会, (高松, 日本, 2023 年 5 月 12-14 日).
- (3) 山口 瑛子, 奥村 雅彦, 高橋 嘉夫,
 "化学種解析と第一原理計算による粘土鉱物への金属イオンの吸着構造の系統的理解",
 日本地球惑星科学連合 2023 年大会 (JpGU Meeting 2023), (千葉, 日本, 2023 年 5 月
 21-26 日).
- (4) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
 "Application of machine learning potentials in path integral molecular dynamics
 simulations",
 第 25 回理論化学討論会, (横浜, 日本, 2023 年 5 月 16-19 日).
- (5) 山口 正剛,
 "計算科学で水素を見出す; アルミ合金水素脆化抑止法の開発",
 新技術説明会 2023, (online, 日本, 2023 年 6 月 1 日).
- (6) 永井 佑紀,
 "Julia による科学技術計算; 大規模並列計算について",
 数学と物理における Julia の活用, (福岡, 日本, 2023 年 7 月 10-12 日).

- (7) 永井 佑紀,
"精度が保証された機械学習分子動力学シミュレーション; 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法",
大阪大学サイバーメディアセンター; セミナーシリーズ「物理学・応用数学の数値計算最前線」, (柏(online), 日本, 2023年7月26日).
- (8) 奥村 雅彦,
"統合機械学習分子動力学システムの構築",
JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第15回シンポジウム, (東京, 日本, 2023年7月6-7日).
- (9) 永井 佑紀, 富谷 昭夫,
"同変トランスフォーマーによる自己学習モンテカルロ法",
学術変革領域「学習物理」物性関係討論会, (東京, 日本, 2023年7月26-27日).
- (10) Kim Minsik, 吉村 和也, 佐久間 一幸, Malins Alex, 阿部 智久, 中間 茂雄, 町田 昌彦, 齋藤 公明, 長谷川 幸弘, 柳 秀明,
"3D-ADRES による詳細な環境モデルを用いたシミュレーション解析; 除染活動・耕作による空間線量率低減効果の予測",
第12回環境放射能除染研究発表会, (福島, 日本, 2023年8月30-31日).
- (11) 中村 博樹,
"核燃料物性評価のためのマイクロシミュレーション",
日本原子力学会核燃料部会第33回「核燃料・夏期セミナー」, (水戸, 日本, 2023年8月28-29日).
- (12) Kim Minsik, 吉村 和也, 佐久間 一幸, Malins Alex, 阿部 智久, 中間 茂雄, 町田 昌彦, 齋藤 公明,
"市街地の空間線量率の経時変化に対する人為的な影響, 2; 3D-ADRES による詳細な環境モデルを用いたシミュレーション解析による検討",
日本原子力学会 2023年秋の大会, (名古屋, 日本, 2023年9月6-8日).
- (13) 山口 瑛子, 高橋 嘉夫, 奥村 雅彦,
"粘土鉱物吸着構造の系統的理解; EXAFS 実験と第一原理計算の相補利用",
日本土壌肥料学会 2023年度愛媛大会, (松山, 日本, 2023年9月7-14日).
- (14) 宇野 功一郎, 中尾 淳, 奥村 雅彦, 小暮 敏博, 山口 瑛子, 武田 晃, 丸山 隼人, 信濃 卓郎, 矢内 純太,
"元素置換型黒雲母を用いた Cs, K の土壌植物間移行メカニズムの解明",
日本土壌肥料学会 2023年度愛媛大会, (松山, 日本, 2023年9月7-14日).
- (15) 山口 瑛子, 高橋 嘉夫, 奥村 雅彦,
"系統的な第一原理計算による粘土鉱物吸着構造決定要因の推定",
日本原子力学会 2023年秋の大会, (名古屋, 日本, 2023年9月6-8日).
- (16) 小林 恵太, 山口 瑛子, 奥村 雅彦,
"機械学習分子動力学法による高圧水和カオリナイトの解析",
日本原子力学会 2023年秋の大会, (名古屋, 日本, 2023年9月6-8日).

- (17) 中村 博樹, 町田 昌彦, 渡部 雅, 加藤 正人,
 "CaF₂ のブレディック転移と物性変化,²; 機械学習分子動力学による解析",
 日本原子力学会 2023 年秋の大会, (名古屋, 日本, 2023 年 9 月 6-8 日).
- (18) 松川 義孝, 渡邊 大樹, 連川 貞弘, Abad N. M., 牟田 浩明, 吉田 健太, 笠田 竜太, 山口 正剛, 熊野 秀樹, 遠藤 美奈子,
 "軽水炉圧力容器の寿命予測と延命処理について,¹; 照射誘起析出物 G 相 Ni₁₆Si₇Mn₆",
 日本原子力学会 2023 年秋の大会, (名古屋, 日本, 2023 年 9 月 6-8 日).
- (19) 伊東 祐斗, 江草 大佑, 山口 正剛, 阿部 英司,
 "第一原理計算による金属結晶キック発現機構の解明",
 日本金属学会 2023 年秋期(第 173 回)講演大会, (富山, 日本, 2023 年 9 月 19-22 日).
- (20) 森山 潤一郎, 高桑 脩, 山口 正剛, 小川 祐平, 津崎 兼彰,
 "第一原理計算を用いた Fe-Cr-Ni オーステナイト合金中への水素固溶特性の検討; 平均および局所水素濃度に与える Cr・Ni 原子の影響",
 日本鉄鋼協会 2023 年秋季(第 186 回)講演大会, (富山, 日本, 2023 年 9 月 20-22 日).
- (21) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
 "Investigating of the structure of water using machine learning potentials and path integral molecular dynamics",
 第 17 回分子科学討論会(2023 大阪), (豊中, 日本, 2023 年 9 月 12-15 日).
- (22) 志賀 基之,
 "経路積分に基づく半古典動力学による振動スペクトル計算",
 第 17 回分子科学討論会(2023 大阪), (豊中, 日本, 2023 年 9 月 12-15 日).
- (23) 山口 瑛子, 奥村 雅彦, 高橋 嘉夫,
 "粘土鉱物の吸着サイトに応じた吸着イオンの局所構造及び結合性の評価",
 日本地球化学会第 70 回年会, (東京, 日本, 2023 年 9 月 21-23 日).
- (24) 山口 正剛,
 "格子欠陥と第一原理計算; 金属の粒界脆化とすべり変形について",
 第 32 回格子欠陥フォーラム, (仙台, 日本, 2023 年 9 月 16 日).
- (25) 山田 進, 今村 俊幸, 町田 昌彦,
 "初代地球シミュレータと最近の大型計算機におけるハバードモデルに対する LOBPCG 法の計算性能比較",
 情報処理学会第 191 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, (仙台, 日本, 2023 年 9 月 26-27 日).
- (26) 永井 佑紀, 岩崎 祐昂, 北原 功一, 木村 薫, 志賀 基之,
 "機械学習分子動力学を用いた、準結晶における高次元性の解析",
 日本物理学会第 78 回年次大会(2023 年), (仙台, 日本, 2023 年 9 月 16-19 日).
- (27) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
 "Self-learning path integral Monte Carlo methods for accurate modelling of water",
 第 37 回分子シミュレーション討論会, (福井, 日本, 2023 年 12 月 4-6 日).

- (28) 志賀 基之,
"経路積分理論に基づく半古典動力学",
第 37 回分子シミュレーション討論会, (福井, 日本, 2023 年 12 月 4-6 日).
- (29) 志賀 基之,
"並列分子シミュレーションソフトウェア PIMD について",
Quloud-PIMD セミナー; 「PIMD」を活用した材料シミュレーション, (東京, 日本, 2023 年 12 月 13 日).
- (30) 永井 佑紀,
"自己学習ハイブリッドモンテカルロ法; 機械学習ポテンシャル学習の自動化と厳密計算",
Quloud-PIMD セミナー; 「PIMD」を活用した材料シミュレーション, (東京, 日本, 2023 年 12 月 13 日).
- (31) 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",
第 29 回渦糸物理ワークショップ, (仙台, 日本, 2023 年 12 月 18-20 日).
- (32) 海老原 健一, 山口 正剛, 板倉 充洋,
"CCSE における水素脆化研究の取り組み",
第 35 回 CCSE ワークショップ「原子力計算科学技術を活用したイノベーション創出」,
(柏(online), 日本, 2024 年 2 月 2 日).
- (33) 小林 恵太,
"機械学習分子動力学法による機械学習分子動力学による原子力材料科学",
第 35 回 CCSE ワークショップ「原子力計算科学技術を活用したイノベーション創出」,
(柏(online), 日本, 2024 年 2 月 2 日).
- 【システム計算科学センター】
- <国際会議>
- (1) Idomura Yasuhiro,
"Full-f gyrokinetic simulations of LOC-SOC transition using GT5D on Fugaku",
US-Japan Joint Institute Fusion Theory (JIFT) Collaboration Meeting on Exascale Computing, (Toki, Japan, Nov. 12-17, 2023).
- <国内会議>
- (1) Furutachi Naoya, Yoshida Toru, Yanagi Hideaki, Hasegawa Yukihiro, Machida Masahiko,
"Development of a PHITS simulation technique and a numerical method to optimize measures against radioactive sources",
2023 年度核データ+PHITS 合同研究会, (東海, 日本, 2023 年 11 月 15-17 日).
- (2) 町田 昌彦, 宇野 隼平, 谷村 直樹, 斎藤 公明, 吉村 和也,
"市街地の空間線量率の経時変化に対する人為的な影響, 3; LASSO を用いた環境半減期の導出及び人口動態との相関",
日本原子力学会 2023 年秋の大会, (名古屋, 日本, 2023 年 9 月 6-8 日).

- (3) 鈴木 知明, 海老原 健一, 都留 智仁, 森 英喜,
"BCC 鉄におけるき裂先端塑性のシミュレーション解析",
日本金属学会 2023 年秋期(第 173 回)講演大会, (富山, 日本, 2023 年 9 月 19-22 日).
- (4) 町田 昌彦, 村上 昌史, 吉田 幸彦, 佐々木 紀樹, 谷村 直樹,
"蛍光 X 線スペクトル迅速分析に向けた機械学習の研究開発",
2023 年度第 1 回日本分析化学会近畿支部提案公募型セミナー「蛍光 X 線スペクトルデータ解析の新展開」, (大阪, 日本, 2023 年 9 月 22 日).
- (5) 井戸村 泰宏,
"富岳を用いた大域的 full-f ジャイロ運動論シミュレーション",
プラズマシミュレータシンポジウム 2023 (PSS2023), (土岐(online), 日本, 2023 年 9 月 27-28 日).
- (6) 町田 昌彦,
"立木先生と高温超伝導; 高温超伝導状態の豊穡さに気づかれた見識とその後の偉大な業績",
第 29 回渦糸物理ワークショップ, (仙台, 日本, 2023 年 12 月 18-20 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 4 年度計算科学技術研究実績評価報告",
JAEA-Evaluation 2023-001, 38p. (2023).
- (2) 高性能計算技術利用推進室,
"令和 4 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 2023-018, 159p. (2023).
- (3) 杉原 健太, 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 山下 晋
"Optimized phase-field modeling using a modified conservative Allen-Cahn equation for two-phase flows",
JAEA-Research 2023-006, 47p. (2023).
- (4) 山口 諒,
"電子決裁システムに関する仮想環境構築作業報告書",
JAEA-Testing 2023-001, 53p. (2023).

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- ・ 小林 恵太、奥村 雅彦、中村 博樹、板倉 充洋、町田 昌彦、鈴谷 賢太郎 (J-PARC センター)、浦田 新吾 (AGC 株式会社)
“ガラスの複雑な原子構造を高速・高精度な原子シミュレーションで再現！
—ガラスの一見無秩序な構造の中に潜む秩序を解明—” (2023/11/16)
電気新聞掲載 (2023/11/27)
- ・ 山口 瑛子、奥村 雅彦、田中 万也 (先端基礎研究センター)、矢板 毅 (物質科学研究センター)、吉村 崇 (大阪大学放射線科学基盤機構)、高橋 嘉夫 (東京大学大学院理学系研

究科/アイソトープ総合センター)

「大地の謎に迫る！土中に含まれる金属の秘密とは？」—分子スケールのシミュレーションと観測が解き明かす土の性質— (2024/2/13)

電気新聞掲載 (2024/2/16)

・ 小林 恵太

「原子力機構の価値」～原子力の社会実装に向けて～

「核燃料物質の挙動把握」日刊工業新聞連載 (2023/7/11)

・ Thomsen Bo

「原子力機構の価値」～原子力の社会実装に向けて～

「水素を高精度に分析」日刊工業新聞連載 (2023/7/18)

・ 町田 昌彦

「原子力機構の価値」～原子力の社会実装に向けて～

「放射線源の逆推定手法」日刊工業新聞連載 (2023/7/25)

5. 研究発表会等の開催

(1) 第 35 回 CCSE ワークショップ「原子力計算科学によるイノベーション創出」

2024/2/2 開催

(2) CCSE セミナー「生成 AI の概要と DX 推進に向けた応用事例」

2024/1/17 開催

6. 受賞等

(1) グラフィックスアワード特別賞(Visual Computing 賞)

杉原 健太、小野寺 直幸、井戸村 泰宏、山下 晋

(日本計算工学会第 28 回計算工学講演会 2023 年 6 月 1 日)

(2) 日本土壤肥料学会 2023 年度愛媛大会 若手口頭発表優秀賞

山口 瑛子、高橋 嘉夫、奥村 雅彦

(日本土壤肥料学会 2023 年度愛媛大会、2023 年 9 月 13 日)

(3) 日本流体力学会第 37 回数値流体力学シンポジウムベスト CFD グラフィックス・アワード

長崎 孝夫、杉原 健太、青木 尊之、内田 遥己

(日本流体力学会第 37 回数値流体力学シンポジウム、2023 年 12 月 16 日)

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	4,409,445 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	52,547（8）	6（うち新規 1）	0（うち新規 0）
シミュレーション技術開発室	205,885（17）	7（うち新規 4）	5（うち新規 1）
システム計算科学センター	390（1）	0	1（うち新規 1）
合計	258,822（26）	13（うち新規 5）	6（うち新規 2）

【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）42,676 千円（受託研究）
- (2) 【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（荏原製作所）1,941 千円（経費受入型共同研究）
- (3) 【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））1,560 千円
- (4) 【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
- (5) 【継続】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））2,340 千円
- (6) 【継続】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
- (7) 【継続】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））1,300 千円
- (8) 【新規】大規模アンサンブル計算における統計量のリアルタイム In-Situ 可視化（日本学術振興会：科研費（基盤 C））650 千円

【シミュレーション技術開発室】

- (1) 【継続】令和 5 年度開始廃炉・汚染水・処理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高性能化開発）（資源エネルギー庁）163,780 千円（分担）（受託研究）
- (2) 【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) (受託研究)
- (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) 2,000 千円 (分担)
- (4) 【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：原子力システム研究開発事業) 543 千円 (受託研究)
- (5) 【新規】令和 5 年度高レベル放射性廃棄物等の地層処分に関する技術開発事業「地層処分安全評価確証技術開発 (核種移行総合評価技術開発)」(資源エネルギー庁) 10,542 千円 (分担) (受託研究)
- (6) 【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 (分担)
- (7) 【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)) 533 千円 (分担)
- (8) 【継続】対称性を考慮したニューラルネットワークによる有効モデル構築 (日本学術振興会：科研費 (基盤 C)) 1,690 千円
- (9) 【継続】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) 2,210 千円
- (10) 【継続】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)) 1,170 千円
- (11) 【継続】「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)) 650 千円 (分担)
- (12) 【継続】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)) 650 千円 (分担)
- (13) 【新規】核燃料物質に特化した機械学習分子動力学法の開発 (日本学術振興会：科研費 (基盤 C)) 2,210 千円
- (14) 【新規】機械学習分子動力学法による星間塵表面モデルの作成と検証 (日本学術振興会：科研費 (学術変革領域研究 (A))) 2,470 千円
- (15) 【新規】XANES とシミュレーションによる風化黒雲母の吸着反応の原子スケールからの理解 (日本学術振興会：科研費 (若手研究)) 2,470 千円
- (16) 【新規】第一原理半古典分子動力学による物質中水素の量子振動スペクトル計算 (日本学術振興会：科研費 (基盤 C)) 2,600 千円
- (17) 【新規】鉍物の水素同位体効果の解明：第一原理経路積分分子動力学計算法と高圧実験による展開 (日本学術振興会：科研費 (基盤 B)) 650 千円 (分担)
- 【システム計算科学センター】
- (1) 【新規】遅延時間型超伝導検出器による中性子イメージングの位置分解能向上と検出効率改善 (日本学術振興会：科研費 (基盤 A) 390 千円 (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	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	9	0	3	0
高性能計算技術利用推進室	0	1	0	0
システム計算科学センター	1	0	0	1
合計	14	1	6	1

●共同研究

【高度計算機技術開発室】

- (1) 【継続】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) 【継続】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) 【継続】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) 【継続】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）

【シミュレーション技術開発室】

- (1) 【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）
- (2) 【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）
- (3) 【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）
- (4) 【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）
- (5) 【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）
- (6) 【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）
- (7) 【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開発による原子力計算科学基盤技術の高度化（株式会社東芝）
- (8) 【継続】有機物分子の錯体形成に係る計算科学研究（法政大学）
- (9) 【新規】計算科学を用いた無機材料物性に関する物性評価研究（AGC 株式会社）

【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) 【継続】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) 【新規】令和5年度開始廃炉・汚染水・処理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高性能化開発））（資源エネルギー庁）
- (3) 【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（荏原製作所）

【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ー：界面の半自発的剥離、界面のナノスケール・イメージベース計算物理解析（科学技術振興機構）
- (2) 【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) 【新規】令和5年度高レベル放射性廃棄物等の地層処分に関する技術開発事業「地層処分安全評価確証技術開発（核種移行総合評価技術開発）」（資源エネルギー庁）

●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. 機構内の他部門との連携に関連する事項

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

【高度計算機技術開発室】

- (1) 【継続】汚染物質拡散解析の計算技術開発（原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター））
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
- (2) 【継続】多相熱流動解析の計算技術開発（原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター））
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
- (3) 【継続】ARKADIAにおける可視化技術開発（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））
ARKADIAにおける炉心解析データの高速可視化技術の開発
- (4) 【新規】空間線量率モニタリングデータベースシステムの開発（安全研究・防災支援部門）
空間線量率モニタリングデータベースの構築および解析、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（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））
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（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））
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（福島研究開発部門（廃炉環境国際共同研究センター））
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（原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター））
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（福島研究開発部門（廃炉環境国際共同研究センター））
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ー推定（福島研究開発部門（福島環境安全センター））
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（原子力科学研究部門（J-PARC センター））
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（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））
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】 中性子ビーム測定へのベイズ最適化の応用（原子力科学研究部門（J-PARC センター））
ベイズ最適化を用いた材料の中性子ビーム測定効率化
- (10) 【新規】 環境中空間線量率 3 次元分布計算システム(3D-ADRES)の開発（福島研究開発部門）
放射線輸送コード PHITS による環境中空間線量率評価のプラットフォームを構築する。
- (11) 【新規】 スパースモデリングによる線源逆推定技術の開発（福島研究開発部門）
機械学習（スパースモデリング・LASSO）技術を適用して原子力施設における線源分布の逆推定技術を開発する。

- (12) 【新規】原子核物理計算手法の GPU 最適化（原子力科学研究部門（先端基礎研究センター））

CPU スパコン向けに開発されてきた原子核物理計算手法を GPU 向けに最適化する。

- (13) 【新規】機械学習による廃棄物識別技術の開発（バックエンド統括本部）

廃棄物のマルチモーダル計測データを活用して、廃棄物を識別する機械学習技術を開発。

- (14) 【新規】核燃料再処理における TRU 抽出溶媒の反応経路探索技術の開発（高速炉・新型炉研究開発部門）

核燃料再処理における TRU 抽出溶媒のシミュレーションにおける反応経路探索に係る機械学習技術を開発。

【高性能計算技術利用推進室】

- (1) 【新規】熱過渡応力の確率論的評価に係るプログラムの開発（高速炉・新型炉研究開発部門 大洗研究所 高速炉サイクル研究開発センター 高速炉解析評価技術開発部 炉心・プラント解析評価グループ）

ARKADIA の一部を構成する原子炉構造設計最適化手法の開発の一環として、これまで Windows 環境にて整備された（Excel VBA により作成された）プログラムと同様の計算機能を有し、かつ、Linux 環境であるスパコン上で実行可能なプログラム（Python スクリプト）を開発する。

- (2) 【新規】GPU 版 JUPITER の最適化作業（原子力科学研究部門 原子力科学研究所 原子力基礎工学研究センター 核工学・炉工学ディビジョン 炉物理・熱流動研究グループ）
「tvd_runge_kutta_3」の関数の一部の「Level_Set」を GPU 化。「tvd_runge_kutta_3」にはカーネル化に適したループ構造と CPU 間の袖領域通信が残っているため、GPU 化の範囲を拡大し GPU 最適化を行う。

- (3) 【新規】FEMAXI-8 の高速化（安全研究・防災支援部門 安全研究センター 原子炉安全研究ディビジョン 燃料安全研究グループ）
修正作業が必要となる主要箇所と目されるエラー出力処理等を対象に、OpenMP 対応のための修正作業を行う。

- (4) 【新規】Simulation of EMAT in 2D geometries using FEM の GPU 移植（高速炉・新型炉研究開発部門 敦賀総合研究開発センター 高速炉プラント技術開発部 ナトリウム技術開発グループ）
FLEXPART の並列化版は機構の大型計算機で実施する場合、不具合が発生している原因を特定し、移植・高速化を行う。

- (5) 【新規】FLEXPART コードの高速化（核不拡散・核セキュリティ総合支援センター CTBT 技術協力室）
並列版 FLEXPART コードの CPU 最適化を行う。

- (6) 【新規】燃料デブリ取出し技術への適用に向けたレーザー加工技術シミュレーション手法の開発（福島研究開発部門 福島研究開発拠点 廃炉環境国際共同研究センター 遠隔技術ディビジョン 先進放射線計測研究グループ）
レーザーとウォータージェットを同時に走査して、表面から物質を削る新たな解析モデルを作成し、シミュレーション技術の開発を行う。

- (7) 【新規】福島第一原子力発電所の燃料デブリ取出し技術へのレーザー加工技術適用に向けたシミュレーション手法の開発（福島研究開発部門 福島研究開発拠点 廃炉環境国際共同研究センター 遠隔技術ディビジョン 先進放射線計測研究グループ）
 (6)の解析結果を踏まえ、実験と比較検討を行えるように解析手法の開発を行う。
- (8) 【新規】汎用非線形構造解析プログラムの開発整備（高速炉・新型炉研究開発部門 大洗研究所 高速炉サイクル研究開発センター 高速炉解析評価技術開発部 炉心・プラント解析評価グループ）
 スパコンでの大型炉心の構造計算に向け、拡張書式を使用した場合のリスタート機能の開発及び FINAS ソルバの高速化を行う。
- (9) 【新規】PHITS の改良（原子力科学研究部門 原子力科学研究所 原子力基礎工学研究センター 化学・環境・放射線ディビジョン 放射線挙動解析研究グループ）
 VR 機器を用いた放射線教材で扱うファイル形式で PHITS の計算結果を出力する機能を開発する。
- (10) 【新規】PHITS ユーザ入力支援ソフト PHITS-PAD の開発（原子力科学研究部門 原子力科学研究所 原子力基礎工学研究センター 化学・環境・放射線ディビジョン 放射線挙動解析研究グループ）
 PHITS-PAD（Windows 及び Mac 版）に対し、ファイルの再読込、一次保存ファイル、置換（例：真ん中以降のみ置換）等の機能追加・修正等を継続し、公開に向けて整備を行う。

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）

