



JAEA-Evaluation

2026-003

DOI:10.11484/jaea-evaluation-2026-003

令和6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 FY2024

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

June 2026

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
原子力科学研究所 プロモーション・オフィス 科学技術情報課
〒 319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方 2 番地 4
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, Promotion Office, Nuclear Science Research Institute, Japan Atomic Energy Agency.
2-4 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195, Japan
E-mail: ird-support@jaea.go.jp

令和 6 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

(2026 年 4 月 30 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 6 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 FY2024**

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

(Received April 30 , 2026)

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 FY2024 (April 1st, 2024 - March 31st, 2025) 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6年度評価	5
付録 令和6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 (FY2024)	3
4. Results of the R&D and the Evaluation Comments	5
4.1 FY2024 Evaluation	5
Appendix List of Achievements in FY2024	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6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
	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 7 年 2 月 18 日 10:00～12:00	オンライン	<ul style="list-style-type: none"> ・ 前回議事録等の確認について ・ 第 4 期中長期計画及び令和 6 年度研究計画について ・ 令和 6 年度の研究実績について ・ 今後のスケジュールについて 	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6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環境で動作可能な汎用性の高い行列計算ライブラリを開発する。

可視化技術の研究開発では、遠隔VR可視化システムにおけるデータ分析機能を開発する。

シミュレーション技術の研究開発では、核燃料物質の第一原理計算の収束性を改善する手法を開発するとともに、気液二相流解析の高速計算技術を開発する。

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おいて、データ同化のための観測手法を最適化する。

機械学習技術の研究開発では、照射欠陥を含む三元素系合金に対して機械学習分子動力学による物性評価技術を開発するとともに、より少ない原子数の第一原理計算に基づいて原子間力を機械学習する低コスト手法を開発する。

開発技術による原子力研究開発の DX 支援及びイノベーション創出に向けて機構内外の組織との連携を推進する。

4. 研究実績と評価意見

4.1 令和6年度評価

中長期計画及び令和6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7年2月18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 6 年度研究開発実績の自己評価及び委員評価（令和 7 年 2 月 18 日時点）（1/4）

令和 6 年度計画	システム計算科学センター(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 環境で動作可能な汎用性の高い行列計算ライブラリを開発する。</p> <p>可視化技術の研究開発では、遠隔 VR 可視化システムにおけるデータ分析機能を開発する。</p> <p>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速計算技術を開発する。</p> <p>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おいて、データ同化のための観測手法を最適化する。</p> <p>開発技術による原子力研究開発の DX 支援及びイノベーション創出に向けて機構内外の組織との連携を推進する。</p> <p>(HPC・DX 基盤技術開発室)</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計算ライブラリ PARCEL を開発した(3 月末までに公開予定)。 ○遠隔 VR 可視化システム PBVR における情報可視化機能、汎用 UI を開発した(3 月末までに公開予定)。 ○圧縮性半陰解法を開発し、気液二相流解析を一桁高速化した。 ○3 次元乱流解析のアンサンブルデータ同化における観測点最適化手法を開発し、従来の一様サンプリングに比べて観測点数を一桁以上削減した。 <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ける高性能計算を実現する行列計算ライブラリを用いることで、科学技術計算コードの開発コスト削減が期待できる。 ○VR 空間で 3 次元データを見るだけでなく、定量的なデータ分析も行える環境が実現した。 ○気液二相流解析の計算コストを削減し、大規模・長時間の解析を可能とした。 ○データ同化で最もコストがかかる観測の最適化に向けた理論的指針を示した。 	<ul style="list-style-type: none"> ・CPU/GPU を用いた行列計算のライブラリを整備し、公開予定であることは高く評価できる。 ・可視化技術についても公開予定であることは高く評価できる。 ・行列計算ライブラリ PARCEL、遠隔 VR 可視化システム PBVR の追加機能のリリースは、大きな成果と言える。 ・気液二相流解析の高速化、最適化手法の観測点数削減は、大きな成果と言える。 ・各研究テーマともよく進捗している。 ・いつもながらわかりやすい成果を上げていらっしゃると感じました。 ・十分な達成度だと思います。 <ul style="list-style-type: none"> ・重点サンプリングによる効率的なデータ同化を行う手法の開発は科学的な意義が高い。 ・計算コスト削減により、評価のためのシミュレーションが現実的なものとなり、科学的意義は大きい。 ・気液二相流解析の RM を作成いただき有難うございます。令和 10 年までは流動様式再現に特化した研究と理解しましたが、燃料バンドルでは限界熱流束の評価に結び付けてこそ意義があると考えます。限界熱流束評価への道筋を予め計画して、研究を進めていただきたいと思います。また、今後の流動様式毎の解析手法検証も、どんな物理量を実験と比較して精度目標をどうするのかなど、合理的な計画策定をお願いします。大いに期待しております。 ・富岳 NEXT を見据えたライブラリ開発は計算科学コミュニティへの貢献が大きく、今後の波及効果はその価値を決める。公開サイトの閲覧数・ユニークユーザー数、ダウンロード数などのエビデンスを継続的に把握するようにされたい。 ・データ同化の事例は、シミュレーション側から観測へのフィードバックとして良い事例となる。 ・可視化技術については、継続して機能拡張がなされており、受賞を受けた点が評価できる。一方で、ユーザーインターフェイスは従来のパラダイムを踏襲しており、今後、LLM の恩恵にあずかる自然言語 UI の研究にも期待したい。 ・風洞実験を対象に、データ同化の観測最適化手法を開発されているとのことですが、実気象場に適用する際には、風洞実験と比較して観測点数が限られると考えられます。例えば、ダスト飛散解析などに実気象場で適用する際の課題や今後の展望について、ご教示いただけますでしょうか？

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 7 年 2 月 18 日時点）（2/4）

令和 6 年度計画	システム計算科学センター (CCSE) 実績報告	外部有識者 意見・コメント
	<p>(3) 機構内外のニーズへの適合・貢献</p> <ul style="list-style-type: none"> ○機構次期スパコンへの移行、富岳から富岳 NEXT への移行、あるいは、多様な CPU/GPU 環境の第二階層スパコンの利用に向けて、このような行列計算ライブラリに高いニーズがあることから、機構内外のユーザーに貢献できる。 ○遠隔 VR 可視化は機構内（基礎工、核サ研、他）、産業界で高いニーズがあり、機構内外のユーザーに貢献できる。 ○気液二相流解析の高精度・高速計算手法は機構内（基礎工、大洗、他）で高いニーズがあり、機構内連携によって開発技術を提供した。 ○アンサンブルデータ同化は機構内（福島、安セ、他）で高いニーズがあり、機構内連携によって開発技術を提供した。 	<ul style="list-style-type: none"> ・機構内でのニーズに適合し、貢献できている。 ・遠隔 VR 可視化は他分野に適用可と思われ、機構外のニーズを積極的に収集して適用されることを期待。 ・機構内のニーズとマッチングし、連携して成果を出している点は評価できる。 ・汎用性の高いライブラリを開発されていますので、引き続き情報公開と普及に向けてご尽力いただければ幸いです。 ・遠隔 VR 可視化は、地層処分技術に関する住民説明などにも活用できると考えます。「技術を提供」とありますが、その後のフィードバック体制はどのように構築されているのでしょうか？
	<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：6 件 ○外部表彰数：1 件 ○科研費実施数：6 件 <ul style="list-style-type: none"> うち新規 2 件 うち代表 6 件 ○受託研究実施数：2 件 ○0 円共同研究実施数：4 件 ○夏期休暇実習生・特別研究生等：5 件 	<ul style="list-style-type: none"> ・論文掲載は、昨年度の成果でしょうか？今年度は多くの成果が出されていますので、積極的な論文投稿をお願いします。 ・KPI にはありませんが、国内会議が 9 件は少ないのではないのでしょうか？国内での議論を盛り上げ、日本の学術レベル向上にも貢献していただきたいと思います。 ・論文・発表・競争的資金の獲得について、例年なみの高い水準を維持している。 ・夏期休暇実習生や特別研究生の受け入れは、本分野における若手育成の観点からも重要な取り組みであると考えます。これまでも受け入れを行ってきたかと思いますが、その後の進路を追跡し、受け入れの効果を把握する取り組みは行われているのでしょうか？
	<p>(5) その他</p> <ul style="list-style-type: none"> ○原子力研究開発 DX に向けてデジタルツイン WG を主導し、以下の機構内連携を推進。 <p>流体計算</p> <ul style="list-style-type: none"> ・気液二相流解析（原子力システム研究開発事業、基礎工） ・ガス巻き込み評価（大洗） ・ふげん解体用プールエアカーテン設計解析（敦賀） <p>データ同化</p> <ul style="list-style-type: none"> ・PCV 熱流動解析（安セ） ・ダスト飛散解析（福島） <p>可視化</p> <ul style="list-style-type: none"> ・プラント点群データ xR 可視化（敦賀、核サ研） ・環境動態デジタルツイン可視化（基礎工） ・地層処分場デジタルツイン可視化（核サ研） 	<ul style="list-style-type: none"> ・機構内の可視化技術のニーズを広く調査し、3次元点群データに対する可視化への対応へ研究を進めていることは評価できる。 ・流体計算、データ同化、可視化いずれも、機構内のニーズに活用されている。 ・環境動態、地層処分のデジタルツイン可視化は大きな成果。引き続き、ニーズを踏まえた機能拡張等、デジタルツインとしての完成度を高めていただきたい。
<p>評定</p>	<p>自己評価</p> <p>A</p>	<p>委員会評価</p> <p>A：5 名</p>

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 7 年 2 月 18 日時点）（3/4）

令和 6 年度計画	システム計算科学センター(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、核燃料物質の第一原理計算の収束性を改善する手法を開発する。</p> <p>機械学習技術の研究開発では、照射欠陥を含む三元素系合金に対して機械学習分子動力学による物性評価技術を開発するとともに、より少ない原子数の第一原理計算に基づいて原子間力を機械学習する低コスト手法を開発する。</p> <p>開発技術による原子力研究開発のDX支援及びイノベーション創出に向けて機構内外の組織との連携を推進する。</p> <p>(AI・DX 基盤技術開発室)</p>	<p>(1) 研究開発の達成度(実績・成果)</p> <p>○核燃料物質 PuO₂ の第一原理計算において実験で観測される非磁性状態に計算を限定することで計算を効率化し、機械学習に必要な数百ケースの計算を実施。さらに機械学習分子動力学において既存の力場で再現できない部分のみを学習する手法により第一原理計算の原子数を削減し計算負荷を 1/3 以下にした。</p> <p>○機械学習分子動力学計算によりステンレス合金の複雑な磁性をモデル化することで照射欠陥の移動特性を評価可能とした。</p> <p>(2) 成果の科学的意義</p> <p>○PuO₂ 等の超ウラン元素は第一原理計算の計算コストが高いという課題があった。これらの課題を解決することで機械学習分子動力学計算を可能にし、従来困難であった計算による融点の再現が可能となった。</p> <p>○ステンレス合金はこれまで複雑な磁性のため原子シミュレーションが困難であったが、機械学習分子動力学計算によりこれを可能とし、照射損傷のモデル化において重要となる空孔の移動特性を評価し実験値を再現した。</p> <p>(3) 機構内外のニーズへの適合・貢献</p> <p>○新型炉部門および LANL 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、MOX 燃料の物性評価モデルの高度化に貢献している。</p> <p>○炉内構造材料であるステンレス鋼のシミュレーションによる照射影響の評価を実施可能とし、原子力基礎工学研究センターが行っている事故耐性燃料被覆管への応用展開を開始。</p>	<p>・第一原理計算や分子動力学に機械学習を組み合わせる研究を行い優れた成果が得られた。</p> <p>・第一原理計算負荷軽減手法の開発と機械学習の導入により、計算負荷低減に成功しており、大きな成果と言える。</p> <p>・各研究テーマともよく進捗している。</p> <p>・十分な達成度だと思います。</p> <p>・従来困難であった超ウラン元素の融点、ステンレス合金の照射損傷のメカニズムに本質的な現象がシミュレーションで再現できたことは科学的意義が大きい。</p> <p>・融点予測は多くのニーズがあると思われるため、十分な検証と手法の活用、また手法の高度化も検討いただきたい。</p> <p>・機械学習原子間力モデルに関しては従来からユニークな試みをされていますが、今回の結果も融点や空孔移動特性というかなり難しい物理量の計算を高い精度で実現できているのが驚きでした。手法がどこまで汎用的なのかはよくわかりませんが、材料研究者にとって重要な成果ですので、できればアプリとして公開していただけると良いと思います。</p> <p>・機構内での事故耐性燃料への応用展開は高く評価できる。</p> <p>・新型炉開発、事故耐性燃料開発と、いずれも重要度の高いニーズに対して貢献されている。</p> <p>・「廃炉の現場で放射線源を推定するシステム」についてはわかりましたが、機械学習分子動力学計算の成果がどのように機構内外のニーズに適合するかについては、時間不足(資料不足)のためかあまりよくわかりませんでした。これはセンターの優れた研究を継続する上で重要なポイントだと思いますので、シミュレーションがどのように他部署で生かされたのか、あるいは今後どのように使われる可能性があるのかがわかる資料があれば、次回にでもぜひお見せいただければと思います。</p>

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 7 年 2 月 18 日時点）（4/4）

令和 6 年度計画	システム計算科学センター(CCSE) 実績報告	外部有識者 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:18 件 ○IF3.0 以上の論文掲載数:9 件 ○外部表彰数:2 件 ○プレス発表:1 件 ○科研費実施数:9 件 うち新規 4 件 うち代表 7 件 ○受託研究実施数:7 件 ○0 円共同研究実施数:8 件 ○夏期休暇実習生・特別研究生等:11 件 	<ul style="list-style-type: none"> ・多数の査読付き論文が掲載されたことは評価できる。 ・論文掲載、特に IF3.0 以上が半分で、日本のこの分野のプレゼンス向上に貢献されている。 ・特に AI, DX に関しては、特許についての KPI も必要ではないでしょうか。 ・論文については高い水準にある。 ・評価の点からは年度推移の情報がほしい。 ・基礎研究として、優れた成果を上げていらっしゃると思います。 ・夏期休暇実習生や特別研究生の受け入れは、本分野における若手育成の観点からも重要な取り組みであると考えます。これまでも受け入れを行ってきたかと思いますが、その後の進路を追跡し、受け入れの効果を把握する取り組みは行われているのでしょうか？
	<p>(5) その他</p> <ul style="list-style-type: none"> ○機械学習分子動力学手法を、常陽でのラジウム核変換によるがん治療薬製造のための酸化ラジウム融点評価へ応用し、規制庁への申請に必要なデータを提供。 ○東京大学、Spring-8 と連携し、セシウム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、Science of The Total Environment 2024 (IF=8.2) に掲載。 ○福島部門と連携し、廃炉作業における被ばく低減を目的とした、作業現場で放射線源を推定するシステムを開発。 	<ul style="list-style-type: none"> ・機構内での常陽の再稼働に向けて医療用 RI のためにラジウムの融点を計算によって評価したことは高く評価できる。 ・物性評価、メカニズム解明、評価システム開発など、開発した解析手法をベースに、様々な成果を産み出していることが評価される。 ・セシウムの吸着メカニズムを解明した点は素晴らしい成果と言える。今後、除染に向けた技術開発に期待したい。 ・セシウム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は、非常に優れた成果であると考えます。今後の展開として、これが革新的な粘土鉱物を活用した除染技術の開発につながる可能性はあるのでしょうか。今後のさらなる発展にも大いに期待しております。 また、作業現場で放射線源を推定するシステムについては、機構内で実施している帰還困難区域における線量評価などにも適用可能な技術であると考えます。敷地外への適用についてもご検討いただければと思います。
<p>評価</p>	<p>自己評価</p> <p>A</p>	<p>委員会評価</p> <p>A : 5名</p>

表 4.2 令和 6 年度研究開発実績の委員の意見・コメント（令和 7 年 2 月 18 日時点）

意見・コメント
<p>・システム計算科学センターが機構全体の DX 化に貢献するという役割を担うことは意欲的であり、ぜひ頑張っていたきたい。</p> <p>・機構における研究系DXニーズを調べて整理し、可視化解析や計算機等について将来の方向を見出したことは高く評価できる。</p> <p>・DX化については、生成AIなど進展の著しい新しい分野を取り入れていくことが求められていると考えられ、外部との連携が望まれる。</p> <p>・独自の LLM 開発に着手したことは意欲的である。</p> <p>・今回の組織改編による DX 推進強化を機に、デジタルツインの加速に期待します。紹介されているデジタルツインのうち、廃炉については必要な技術が整備され検証を経てプラットフォーム化でしょうか。一方その他はまだ全体像が見えづらく、どのような機能や技術を盛り込むのか、どのように使用するのか、具体化していただきたいと思います。</p> <p>・機構内のニーズ(概況説明 p.10)が非常に多く、しかもどれも重要に思います。リソースをどのように配分して、個々の技術が必要な時期もふまえ、どのように優先度をつけて遂行していくのか、全体計画も必要かと思います。</p> <p>・一方で、日本における原子力分野における AI の活用は、業務効率向上、点検合理化、リスク評価信頼性向上など限定的で、欧米に比べてかなり遅れていると言えます。例えば、欧州ではSMR開発に活用され、ASSAS (Artificial intelligence for Simulation of Severe AccidentS) project なども進められています。一般産業のみならず原子力の分野でも AI 後進国とならぬよう、海外の研究もベンチマークしつつ、機構内ニーズに留まらない積極的なAI、DXの推進により、日本の原子力における AI,DX をリードされることを期待します。また、国際連携も積極的に進めるべきだと思います。</p> <p>・組織改編による中長期計画の変更に伴い、機構内ニーズの調査・研究戦略の再立案を迅速に行い、継続的な研究成果の創出を維持している点は高く評価できると思います。</p> <p>・DX 推進のウェイトを大きくしたことに伴い、今後、AI 人材の確保が重要になるかと思いますが、企業との競合もあり優秀な人材の確保は難しい状況が続くと思います。大学など外部組織との連携により DX 推進を進めることも検討の余地があると思います。一方で、機構における DX 推進において自ら保持すべきコア技術は何かを再検討し、限られた資源での戦略を考えることが重要かと思います。</p> <p>・委員会冒頭の概要説明でご紹介いただいた表「JAEA における研究系 DX ニーズ」が、機構におけるシステム計算科学センターの位置付けと将来計画を理解する上で理解の助けとなり、非常に良い資料でした。</p> <p>このような各部署からの聞き取りと情報の整理をもとに、センターでの研究内容をお考えいただくのは、機構全体にとってプラスであると思われます。</p> <p>そのような機構のミッション達成を目指す活動が重要な一方で、センターに所属する研究者が独自の発想で短中期的な研究課題を設定し、機構の他の部署や国内外の研究コミュニティにむけて発信し、周囲を巻き込んで行くことができれば、優秀な研究人材の活用と若手育成にもつながり、それもまた日本の国益と機構の長期的ミッションに沿った活動であると考えます。</p> <p>一方に偏るのではなく、ぜひバランスをとって進めていただければと思います。</p> <p>・HPC・DX 基盤技術における基礎的乱流解析のデータ同化技術の開発は、原子力基礎工学研究センターへの業務移管をもって終了しました。今後も連携は継続されるとのことですが、業務移管により、これまで学術論文の発表や海外での受賞など、優れた成果を上げてきた研究の方向性が転換されることは非常に残念に思います。</p> <p>この終了に伴い、データ同化に関わっていた人的リソースをどのように活用・展開していくのが重要な課題となります。また、その展開のためにデータ同化技術の開発を終了せざるを得なかった理由や、スクラップアンドビルドの観点からの説明が示されることが望ましいと考えます。</p> <p>AI・DX 基盤技術における高精度第一原理計算シミュレーション技術の開発についても、同様の視点での検討が必要ではないかと考えます。</p>

付録

令和 6 年度計算科学技術研究実績

This is a blank page.

令和6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
HPC・DX 基盤技術開発室	1	5	6
AI・DX 基盤技術開発室	17	4	21
システム計算科学センター	3	0	3
合計	21	9	30

【HPC・DX 基盤技術開発室】

< 査読有り研究論文 >

- (1) Watanabe Tsutomu, Ishikawa Shuhei, Kawashima Masayuki, Shimoyama Ko, Onodera Naoyuki, Hasegawa Yuta, Inagaki Atsushi,
"Structure of drifting snow simulated by Lagrangian particle dispersion model coupled with large-eddy simulation using the lattice Boltzmann method",
Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, Vol.250, pp.105783_1-105783_17 (2024).

< 査読有り会議論文 >

- (1) Seki Akiyuki, Saito Kimiaki, Takemiya Hiroshi,
"Current status of the environmental monitoring database on the accident at Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant",
Journal of Radiological Protection, "15th International Congress of the International Radiation Protection Association (IRPA-15)", Vol.41, No.3, pp.S89-S98 (2021).
- (2) Kawamura Takuma, Shimomura Kazuya, Osaki Tsukasa, Idomura Yasuhiro,
"Extension of particle-based in-situ visualization for multipoint VR visualization",
EPJ Web of Conferences,"Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo (SNA + MC 2024)",Vol.302, pp.11002_1-11002_8 (2024).
- (3) Hasegawa Yuta, Idomura Yasuhiro, Onodera Naoyuki,
"GPU-enabled ensemble data assimilation for mesh-refined lattice Boltzmann method",
EPJ Web of Conferences, "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo (SNA + MC 2024)", Vol.302, pp.03005_1-03005_9 (2024).
- (4) Sitompul Yos., Sugihara Kenta, Onodera Naoyuki, Idomura Yasuhiro,
"Gas entrainment simulation for fast reactors using freesurface lattice Boltzmann method",

- EPJ Web of Conferences, "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo (SNA + MC 2024)", Vol.302, pp.05004_1-05004_10 (2024).
- (5) Sugihara Kenta, Onodera Naoyuki, Sitompul Yos., Idomura Yasuhiro, Yamashita Susumu,
"Bubble flow analysis using multi-phase field method",
EPJ Web of Conferences, "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo (SNA + MC 2024)", Vol.302, pp.03002_1-03002_10 (2024).

< 査読無し会議論文 >

- (1) 長谷川 雄太, 井戸村 泰宏, 小野寺 直幸,
"LBM-LETKF を用いた 3 次元角柱周りの流れの少数観測点に対するデータ同化実験",
計算工学講演会論文集(CD-ROM), "第 29 回計算工学講演会", Vol.29, p.4 (2024).
- (2) 小野寺 直幸, 杉原 健太, 伊奈 拓也, 井戸村 泰宏,
"圧縮性 Navier-Stokes 方程式の定式化による気液二相流体計算の Poisson 高速化",
計算工学講演会論文集(CD-ROM), "第 29 回計算工学講演会", Vol.29, p.3 (2024).
- (3) 朝比 祐一, 前山 伸也, 藤井 恵介,
"サブグリッドスケール項の機械学習モデリング",
計算工学講演会論文集(CD-ROM), "第 28 回計算工学講演会", Vol.28, p.4 (2023).
- (4) 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)による二次元等方乱流のデータ同化",
計算工学講演会論文集(CD-ROM), "第 28 回計算工学講演会", Vol.28, p.5 (2023).
- (5) 長谷川 雄太, 小野寺 直幸, 朝比 祐一, 井戸村 泰宏,
"格子ボルツマン法に基づく都市風況解析の Tesla A100 GPU における性能測定",
第 35 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 35 回数値流体力学シンポジウム", p.3 (2021).

【AI・DX 基盤技術開発室】

< 査読有り研究論文 >

- (1) Fujihara Hiro, Toda Hiroyuki, Ebihara Kenichi, Kobayashi Masakazu, Mayama Tsuyoshi, Hirayama Kyosuke, Shimizu Kazuyuki, Takeuchi Akihisa, Uesugi Masayuki,
"Assessment of hydrogen embrittlement behavior in Al-Zn-Mg alloy through multi-modal 3D image-based simulation",
International Journal of Plasticity, Vol.174, pp.103897_1-103897_22 (2024).
- (2) Yamamoto Yojiro, Hayakawa Sho, Okita Taira, Itakura Mitsuhiro,

- "Meso-timescale atomistic simulations on coalescence process of He bubbles in Fe by SEAKMC method",
 Computational Materials Science, Vol.229, pp.112389_1-112389_9 (2023).
- (3) Ahmed Abrar, Uttarasak Kanokwan, Tsuchiya Taiki, Lee Seungwon, Nishimura Katsuhiko, Nunomura Norio, Shimizu Kazuyuki, Hirayama Kyosuke, Toda Hiroyuki, Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito, Ikeno Susumu, Matsuda Kenji,
 "Morphology evolution of β -phase in Al-Mg-Si alloys during aging treatment",
 Journal of Alloys and Compounds, Vol.988, pp.174234_1-174234_9 (2024).
- (4) Higa Ryota, Fujihara Hiro, Toda Hiroyuki, Kobayashi Masakazu, Ebihara Kenichi, Takeuchi Akihisa,
 "Multi-modal 3D image-based simulation of hydrogen embrittlement crack initiation in Al-Zn-Mg alloy",
 Materials Transactions, Vol.65, No.8, pp.899-906 (2024).
- (5) Okada Kazuho, Shibata Akinobu, Kimura Yuji, Yamaguchi Masatake, Ebihara Kenichi, Tsuji Nobuhiro,
 "Effect of carbon segregation at prior austenite grain boundary on hydrogen-related crack propagation behavior in 3Mn-0.2C martensitic steels",
 Acta Materialia, Vol.280, pp.120288_1-120288_14 (2024).
- (6) Nakata Yuto, Sasaki Takehiko, Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
 "Theoretical study of cellobiose conversion by supported metal catalysts",
 Chemical Physics Letters, Vol.845, pp.141285_1-141285_9 (2024).
- (7) Nagai Yuki, Iwasaki Yutaka, Kitahara Koichi, Takagiwa Yoshiki, Kimura Kaoru, Shiga Motoyuki,
 "High-temperature atomic diffusion and specific heat in quasicrystals",
 Physical Review Letters, Vol.132, No.19, pp.196301_1-196301_6 (2024).
- (8) Tsuchiya Jun, Shiga Motoyuki, Tsuneyuki Shinji, Thompson Elizabeth C.,
 "Nuclear quantum effect on the elasticity of ice VII under pressure; A Path-integral molecular dynamics study",
 Physical Review Research (Internet), Vol.6, No.2, pp.023302_1-023302_6 (2024).
- (9) Yamaguchi Masatake, Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiro, Tsuru Tomohito,
 "Quantitative estimation method of the effect of segregated solute on hydrogen-enhanced decohesion at a grain boundary",
 Scripta Materialia, Vol.255, pp.116366_1-116366_5 (2025).
- (10) Nagai Yuki, Tomiya Akio,
 "Self-learning Monte Carlo with equivariant Transformer",
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol.93, No.11, pp.114007_1-114007_8 (2024).
- (11) Thomsen Bo, Nagai Yuki, Kobayashi Keita, Hamada Ikutaro, Shiga Motoyuki,
 "Self-learning path integral hybrid Monte Carlo with mixed *ab initio* and machine

- learning potentials for modeling nuclear quantum effects in water",
Journal of Chemical Physics, Vol.161, No.20, pp.204109_1-204109_18 (2024).
- (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,
"除染・耕作活動による空間線量率の低減効果; 3D-ADRES を用いた PHITS シミュレーションによる詳細評価",
環境放射能除染学会誌, Vol.12, No.2, pp.39-53 (2024).
- (13) Shi Wei, Machida Masahiko, Yamada Susumu, Okamoto Koji,
"Uncertainty analysis of the inverse LASSO estimation scheme on radioactive source distributions inside reactor building rooms from air does rate measurements",
Progress in Nuclear Energy, Vol.184, pp.105710_1-105710_10 (2025).
- (14) Uno Koichiro, Okumura Masahiko, Nakao Atsushi, Yamaguchi Akiko, Yanai Junta,
"Cesium stability on the interlayers of K- or Rb-fixing micaceous minerals investigated by both experimental and numerical simulation methods",
Science of the Total Environment, Vol.949, pp.175012_1-175012_8 (2024).
- (15) Sasa Narimasa,
"Small dispersion limit of momentum conservation law",
JSIAM Letters, Vol.16, pp.37-40 (2024).
- (16) Yamaguchi Akiko, Okumura Masahiko, Kawamura Naomi, Takahashi Yoshio,
"Adsorption structures and bonding states of cesium and barium adsorbed on various sites of vermiculite",
Science of the Total Environment, Vol.964, pp.178585_1-178585_13 (2025).
- (17) Fujisawa Yuita, Krishnadas Anjana, Nakamura Tomonori, Hsu Chia-Hsiu, Smith Barnaby R. M, Pardo-Almanza Markel, Hiyane Hoshu, Nagai Yuki, Machida Tadashi, Okada Yoshinori,
"Imaging Josephson vortices on curved junctions",
Physical Review B, Vol.110, No.22, pp.224511_1-224511_5 (2024).

< 査読無し研究論文 >

- (1) 山口 瑛子,
"多種イオンの粘土鉱物への吸着反応の系統的理解とその環境動態解明への適用",
放射化学, No.48, pp.56-59 (2023).
- (2) 小林 恵太,
"機械学習分子動力学法による高密度シリカガラスの構造解析",
New Glass, Vol.39, No.2, pp.13-17 (2024).
- (3) 山口 正剛,
"金属格子欠陥と第一原理計算; 粒界脆化とすべり変形について",
日本原子力学会誌 ATOMO Σ, Vol.66, No.6, pp.291-294 (2024).

- (4) 山口 瑛子, 高橋 嘉夫, 奥村 雅彦,
 "土壌の金属イオンの吸着挙動を解明",
 Isotope News, No.796, pp.21-23 (2024).
- (5) 数納 広哉, 町田 昌彦, 土肥 輝美, 大村 嘉人,
 "計算化学が紐解く放射性 Cs を長期間保持する地衣類の謎 -地衣類代謝物のアルカリイオン錯体形成力と地衣類のアルカリイオン捕集機構-",
 Isotope News, No.781, pp.8-12 (2022).

< 査読有り会議論文 >

- (1) Yamada Susumu, Yoshida Toru, Hasegawa Yukihiro, Machida Masahiko,
 "Effectiveness of fused LASSO for prediction of distribution of radioactive materials in reactor buildings",
 Proceedings of Waste Management Symposia 2024 (WM2024) (Internet), "Waste Management Conference 2024 (WM2024)", p.15 (2024).
- (2) Tomiya Akio, Nagai Yuki,
 "Equivariant transformer is all you need",
 Proceedings of Science (Internet), "40th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2023)", Vol.453, pp.001_1-001_7 (2024).
- (3) Yamada Susumu, Machida Masahiko, Tanimura Naoki,
 "Selection method for observation points using Bayesian LASSO at estimating radiation source distribution from air dose rates",
 EPJ Web of Conferences, "Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo (SNA + MC 2024)", Vol.302, pp.16004_1-16004_10 (2024).
- (4) Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 "Effects of magnetic ordering on the ground-state energy of plutonium dioxide; A Study using adiabatic connection fluctuation-dissipation theory",
 Proceedings of 31st International Conference on Nuclear Engineering (ICONE31) (Internet), "31st International Conference on Nuclear Engineering (ICONE31)", p.5 (2024).

【システム計算科学センター】

< 査読有り研究論文 >

- (1) Ayoub Ali, Wainwright Haruko, Sansavini Giovanni, Gauntt Randall, Saito Kimiaki,
 "Resilient design in nuclear energy; Critical lessons from a cross-disciplinary analysis of the Fukushima Dai-ichi Nuclear accident",
 iScience (Internet), Vol.27, No.4, pp.109485_1-109485_15 (2024).

- (2) Idomura Yasuhiro,
 "Full-f gyrokinetic simulations of hydrogen isotope mixing in tokamak plasmas",
 Physics of Plasmas, Vol.31, No.10, pp.102504_1-102504_10 (2024).
- (3) Yoshida Maiko, McDermott Rachael M., Angioni Clemente, Camenen Yann, Citrin Jonathan, Jakubowski Marcin, Hughes Jerry W., Idomura Yasuhiro, Mantica Paola, Mariani Alberto, Mordijck Saskia, Paul Elizabeth J., Tara Tuomas, Verdoolaege Geert, Zocco Alessandro, Casson Francis J, Dif-Pradalier Guilhem, Duval Basil, Grierson Brian A., Kaye Stanley M., Manas Pierre, Malsov Mikhail, Odstreil Tomas, Rice J. E., Schmitz Lothar, Sciortino Francesco, Solano Emilia, Steabler Gary, Valovič Martin, Wolfrum Elisabeth, Snipes Joseph A., ITPA Transport and Confinement Group,
 "Transport and confinement physics Chapter 2 of the special issue: on the path to tokamak burning plasma operation",
 Nuclear Fusion, Vol.65, No.3, pp.033001_1-033001_132 (2025).

< 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, Malins Alex, 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の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開発状況-",
 RIST News, No.68, pp.3-19 (2022).
- (2) 町田 昌彦, 山田 進, Kim Minsik, 田中 伶詞, 飛田 康弘, 岩田 亜矢子, 青木 勇斗, 青木 和久, 柳澤 憲一, 山口 隆司, 鈴木 政浩, 岡本 孝司, 高橋 弘毅, 加藤 徹, 山下 圏, 土井 章男, 松本 陽司, 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 FrontEnd: 廃炉現場で用いるファストデジタルツイン技術-",
 RIST News, No.70, pp.3-22 (2024).

2. 国際会議、国内会議での発表等

【HPC・DX 基盤技術開発室】

< 国際会議 >

- (1) Aoki Takayuki, Yoshiizumi Akira, Matsushita Shintaro, Sugihara Kenta,
 "A Free-swimming simulation of water strider",
 5th International Conference on Numerical Methods in Multiphase Flows (ICNMMF-5), (Reykjavik, Iceland, Jun. 26-28, 2024).
- (2) Nagasaki Takao, Aoki Takayuki, Sugihara Kenta, Uchida Haruki,
 "Numerical simulation of nucleate pool boiling using PLIC-VOF method",

5th International Conference on Numerical Methods in Multiphase Flows (ICNMMF-5), (Reykjavik, Iceland, Jun. 01, 2024).

<国内会議>

- (1) 長崎 孝夫, 青木 尊之, 杉原 健太, 内田 遥己,
"PLIC-VOF 法を用いた沸騰の数値シミュレーション",
第 29 回計算工学講演会, (神戸, 日本, 2024 年 6 月 10-12 日).
- (2) 河村 拓馬, 井戸村 泰宏,
"粒子シフト技術を用いた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統計量可視化",
第 52 回可視化情報シンポジウム, (那覇, 日本, 2024 年 7 月 19-21 日).
- (3) 長谷川 雄太, 井戸村 泰宏, 小野寺 直幸, 河村 拓馬,
"乱流データ同化における速度場の可視化による精度評価の試み",
第 52 回可視化情報シンポジウム, (那覇, 日本, 2024 年 7 月 19-21 日).
- (4) 小野寺 直幸, 下川辺 隆史, 井戸村 泰宏, 河村 拓馬, 長谷川 雄太, 伊奈 拓也, 稲垣 厚至, 平野 洪賓, 下瀬 健一, 小田 僚子, 和田 泰輔,
"都市街区の風況デジタルツインの実現に向けたデータ同化手法および観測システムの開発",
JHPCN: 学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点第 16 回シンポジウム, (東京, 日本, 2024 年 7 月 11-12 日).
- (5) 杉原 健太, 青木 尊之, 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, 河村 拓馬, 朝比 祐一, 下川辺 隆史, 伊奈 拓也, 山下 晋,
"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 16 回シンポジウム, (東京, 日本, 2024 年 7 月 11-12 日).
- (6) 松岡 清吉, 洲鎌 英雄, 井戸村 泰宏,
"改良型多粒子衝突項を用いた不純物プラズマの新古典輸送解析",
第 41 回プラズマ・核融合学会年会, (東京, 日本, 2024 年 11 月 17-20 日).
- (7) Sitompul Yos, Sugihara Kenta, Watanabe Seiya, Idomura Yasuhiro,
"Efficient gas entrainment for fast reactors using two-phase lattice Boltzmann method",
第 38 回数値流体力学シンポジウム, (東京, 日本, 2024 年 12 月 11-13 日).
- (8) 下畑 和希, 青木 尊之, Sitompul Yos, 渡辺 勢也,
"巨岩を多数含んだ土石流の AMR 法を用いた 3 次元シミュレーション",
第 38 回数値流体力学シンポジウム, (東京, 日本, 2024 年 12 月 11-13 日).
- (9) 長崎 孝夫, 青木 尊之, 杉原 健太, 西村 真人, 中島 聖, 中村 和博, 丸井 堅太郎,
"PLIC-VOF 法を用いた高熱流束プール沸騰の数値シミュレーション",
第 38 回数値流体力学シンポジウム, (東京, 日本, 2024 年 12 月 11-13 日).

- (10) 長崎 孝夫, 青木 尊之, 杉原 健太, 内田 遥己,
 "PLIC-VOF 法を用いた核沸騰の数値シミュレーション",
 第 61 回日本伝熱シンポジウム, (神戸, 日本, 2024 年 5 月 29-31 日).
- (11) 長崎 孝夫, 青木 尊之, 杉原 健太,
 "高熱流束プール沸騰の数値解析",
 混相流シンポジウム 2024, (富山, 日本, 2024 年 9 月 4-6 日).
- (12) 青木 尊之, 下畑 和希, 渡辺 勢也, Sitompul Yos, Dawei Shen,
 "多数の巨礫を含んだ土石流と堰堤の 3 次元シミュレーション",
 令和 6 年度砂防学会研究発表会(和歌山大会), (和歌山, 日本, 2024 年 5 月 15-17 日).
- (13) 下畑 和希, 青木 尊之, Sitompul Yos, 渡辺 勢也, Dawei Shen,
 "巨岩を含んだ土石流シミュレーション",
 第 29 回計算工学講演会, (神戸, 日本, 2024 年 6 月 10-12 日).
- (14) 下畑 和希, 青木 尊之, Sitompul Yos, 渡辺 勢也,
 "多数の巨大岩石を含んだ非ニュートン性泥流の 3 次元土石流シミュレーション",
 混相流シンポジウム 2024, (富山, 日本, 2024 年 9 月 4-6 日).
- (15) 下村 和也, 河村 拓馬, 井戸村 泰宏, 尾崎 司,
 "CFD シミュレーション制御のための遠隔 VR in-situ 可視化",
 日本原子力学会 2025 年春の年会, (online, 日本, 2025 年 3 月 12-14 日).
- (16) 杉原 健太, Sitompul Yos, 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泡流動解析への PID 制御の適用",
 日本原子力学会 2025 年春の年会, (online, 日本, 2025 年 3 月 12-14 日).
- (17) Sitompul Yos, Sugihara Kenta, Watanabe Seiya, Idomura Yasuhiro,
 "Validation of a two-phase Lattice Boltzmann Method with local mesh refinement for
 gas entrainment simulation in fast reactors",
 日本原子力学会 2025 年春の年会, (online, 日本, 2025 年 3 月 12-14 日).
- (18) 山口 瑛子, 高橋 嘉夫, 奥村 雅彦,
 "高分解能測定とシミュレーションの相補的利用による XANES の新展開: 黒雲母風化
 反応の解明",
 日本地球惑星科学連合 2024 年大会(JpGU Meeting 2024), (千葉, 日本, 2024 年 5 月 26-
 31 日).

【AI・DX 基盤技術開発室】

< 国際会議 >

- (1) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
 "Self learning path integral hybrid Monte Carlo with mixed potentials",
 ACS on Campus, (Tokyo, Japan, May. 15, 2024).
- (2) Kobayashi Keita, Yamaguchi Akiko, Okumura Masahiko,
 "Machine learning molecular dynamics study of hydrated kaolinite under high

- pressure",
61st Annual Meeting of The Clay Minerals Society, (Honolulu, U.S.A., Jun. 03-06, 2024).
- (3) Hiraguchi Atsuki, Zheng Xiaojin, Underwood Thomas R, Kobayashi Keita, Yamaguchi Akiko, Itakura Mitsuhiro, Machida Masahiko, Rosso Kevin M., Bourg Ian C, Okumura Masahiko,
"Large-scale molecular dynamics simulations of cesium diffusion in systems with clay particles and water molecules",
61st Annual Meeting of The Clay Minerals Society, (Honolulu, U.S.A., Jun. 03-06, 2024).
- (4) Okumura Masahiko, Kobayashi Keita,
"Molecular dynamics study of ice in/on kaolinite under extreme conditions",
61st Annual Meeting of The Clay Minerals Society, (Honolulu, U.S.A., Jun. 03-06, 2024).
- (5) Yamaguchi Akiko, Takahashi Yoshio, Okumura Masahiko,
"Advancing understanding of biotite weathering reactions: XAFS and *ab initio* simulation insights",
61st Annual Meeting of The Clay Minerals Society, (Honolulu, U.S.A., Jun. 03-06, 2024).
- (6) Okumura Masahiko,
"Machine learning molecular dynamics simulations: An Application of machine learning for material science",
51st IEEE International Conference on Plasma Science & 4th Asia-Pacific Conference on Plasma and Terahertz Science (ICOPS & APCOPTS 2024), (Beijin, China, Jun. 16-20, 2024).
- (7) Yamaguchi Akiko, Takahashi Yoshio, Okumura Masahiko,
"Oxidation of iron in mica induced by weathering investigated by HERFD-XANES measurements and *ab initio* calculations",
Goldschmidt Conference (Goldschmidt 2024), (Chicago, U.S.A., Aug. 18-23, 2024).
- (8) Takahashi Yoshio, Yamaguchi Akiko, Yomogida Takumi,
"Contribution of environmental radiochemistry to geochemistry",
Goldschmidt Conference (Goldschmidt 2024), (Chicago, U.S.A., Aug. 18-23, 2024).
- (9) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Inclusion of nuclear quantum effects in water from room temperature to sub- and supercritical conditions",
60th Symposium on Theoretical Chemistry 2024, (Braunschweig, Germany, Sep. 02-06, 2024).

- (10) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
 "Accelerating the study of nuclear quantum effects in water with self-learning path integral Monte Carlo",
 Current and Future Computational Approaches to Quantum Many-Body Systems 2024 (CompQMB2024), (Kashiwa, Japan, Sep. 24-27, 2024).
- (11) Matsukawa Yoshitaka, Fujieda Hideto, Muta Hiroaki, Nakamori Fumihiro, Yamaguchi Masatake, Kasada Ryuta, Yoshida Kenta, Yabuuchi Kiyohiro, Endo Minako, Yuya Hideki,
 "Dissolution temperature of Ni-Si-Mn precipitates in steels; When they became compounds",
 Nuclear Materials conference 2024 (NuMat 2024), (Singapore, Singapore, Oct. 14-17, 2024).
- (12) Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 "Exploring magnetic order in actinide dioxides using adiabatic connection fluctuation dissipation theory",
 Nuclear Materials conference 2024 (NuMat 2024), (Singapore, Singapore, Oct. 14-17, 2024).
- (13) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
 "Sub- and supercritical water structure calculated using the self-learning path integral hybrid Monte Carlo method",
 11th Triennial Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics, (Qingdao, China, Oct. 13-18, 2024).
- (14) Okumura Masahiko,
 "Molecular dynamics simulation study of amorphous ice covering interstellar dust",
 Symposium on Next Generation Astrochemistry, (Tokyo, Japan, Nov. 19-22, 2024).
- (15) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
 "Studying nuclear quantum effects in sub- and supercritical water with the SL-PIHMC-MIX method",
 Winter School in Theoretical Chemistry 2024; Solvation and Embedding, (Helsinki, Finland, Dec. 09-12, 2024).
- (16) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
 "Extending the computational limits of path integral methods with the SL-PIHMC-MIX method and machine learned potentials",
 International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics (MPQCP 2025), (Kobe, Japan, Jan. 21-22, 2025).
- (17) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
 "Nuclear quantum effects in sub- and supercritical water investigated at ab initio level with SL-PIHMC-MIX",

- 7th R-CCS International Symposium (RCCS-IS7), (Kobe, Japan, Jan. 23-24, 2025).
- (18) Okumura Masahiko,
"Machine learning molecular dynamics; Basics and applications",
International Conference on High Performance Computing in Asia-Pacific Region
(HPC ASIA 2025), (Hsinchu, Taiwan, Feb. 19-21, 2025).
- (19) Hiraguchi Atsuki, Zheng Xiaojin, Underwood Thomas R., Kobayashi Keita,
Yamaguchi Akiko, Itakura Mitsuhiro, Machida Masahiko, Rosso K. M., Bourg I. C.,
Okumura Masahiko,
"Free energy landscapes of cesium adsorption from mesopore to the interlayer of
montmorillonite; Classical molecular dynamics simulation studies",
American Chemical Society Meetings & Expos (ACS Spring 2025), (San Diego, U.S.A.,
Mar. 23-27, 2025).
- (20) Okumura Masahiko,
"Machine learning molecular dynamics simulations of clay minerals",
American Chemical Society Meetings & Expos (ACS Spring 2025), (San Diego, U.S.A.,
Mar. 23-27, 2025).

<国内会議>

- (1) 山口 瑛子, 高橋 嘉夫, 奥村 雅彦,
"高分解能測定とシミュレーションの相補的利用による XANES の新展開: 黒雲母風化
反応の解明",
日本地球惑星科学連合 2024 年大会(JpGU Meeting 2024), (千葉, 日本, 2024 年 5 月 26-
31 日).
- (2) 森山 潤一郎, 高桑 脩, 山口 正剛,
"第一原理計算を用いた Fe-Cr-Ni 合金の水素固溶特性に対する合金成分の影響: Cr, Ni
原子の水素溶解エネルギーに対するアナジー効果",
日本材料学会第 9 回マルチスケール材料力学シンポジウム, (長崎, 日本, 2024 年 5 月 24
日).
- (3) 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 16 回シンポジウム, (東京, 日
本, 2024 年 7 月 11-12 日).
- (4) 平口 敦基, Zheng Xiaojin, Underwood Thomas R., 小林 恵太, 山口 瑛子, 板倉 充洋,
町田 昌彦, Rosso Kevin M., Bourg Ian C., 奥村 雅彦,
"分子動力学シミュレーションを用いた粘土鉱物-水系におけるセシウム吸着拡散現象の
自由エネルギー評価",
日本原子力学会 2024 年秋の大会, (仙台, 日本, 2024 年 9 月 11-13 日).
- (5) 奥村 雅彦, 山口 瑛子, 小林 恵太,

- "機械学習分子動力学法による粘土鉱物-水分子相互作用の解析",
日本原子力学会 2024 年秋の大会, (仙台, 日本, 2024 年 9 月 11-13 日).
- (6) 中村 博樹, 小林 恵太, 奥村 雅彦, 板倉 充洋, 町田 昌彦, 渡部 雅, 加藤 正人,
"機械学習分子動力学による二酸化プルトニウムの物性評価",
日本原子力学会 2024 年秋の大会, (仙台, 日本, 2024 年 9 月 11-13 日).
- (7) 山口 瑛子, 高橋 嘉夫, 奥村 雅彦,
"XANES の実験とシミュレーションの相補的利用による黒雲母風化素過程の解明",
日本原子力学会 2024 年秋の大会, (仙台, 日本, 2024 年 9 月 11-13 日).
- (8) 山口 瑛子, 高橋 嘉夫, 奥村 雅彦,
"XANES のシミュレーションと高分解能測定による風化黒雲母中の Fe 酸化反応の解明",
日本放射化学会第 68 回討論会(2024), (静岡, 日本, 2024 年 9 月 23-25 日).
- (9) 山口 瑛子, 高橋 嘉夫, 奥村 雅彦,
"黒雲母風化作用における素過程の解明; XANES の高分解能測定と第一原理計算の相補的利用",
2024 年度日本地球化学会第 71 回年会, (金沢, 日本, 2024 年 9 月 18-20 日).
- (10) 高橋 嘉夫, 近藤 裕介, 吉田 舜太郎, 末岡 優里, 増田 曜子, 松井 洋平, 妹尾 啓史, 山口 瑛子,
"スメクタイト中の鉄の酸化還元反応が大気環境に与える影響",
2024 年度日本地球化学会第 71 回年会, (金沢, 日本, 2024 年 9 月 18-20 日).
- (11) 竹本 亜優, 大野 智洋, 河合 敬宏, 山口 瑛子, 高橋 嘉夫,
"リュウグウ試料中の微量元素スペシエーション; 硫化物が支配的な古海洋での元素の水溶解性への示唆",
2024 年度日本地球化学会第 71 回年会, (金沢, 日本, 2024 年 9 月 18-20 日).
- (12) 大野 智洋, 河合 敬宏, 竹本 亜優, 山口 瑛子, 菅 大暉, 上相 真之, 山下 翔平, 高橋 嘉夫,
"多種の元素の価数分析による Ryugu 母天体中の酸化還元環境復元",
2024 年度日本地球化学会第 71 回年会, (金沢, 日本, 2024 年 9 月 18-20 日).
- (13) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Development of machine learning potentials for studying ambient and high temperature water",
第 18 回分子科学討論会(京都), (京都, 日本, Sep, 2024 年 9 月 18-21 日).
- (14) Kim Minsik, 佐久間 一幸, 志風 義明, 操上 広志, 三上 智, 長尾 郁弥, 町田 昌彦, 斎藤 公明,
"福島における放射性物質分布調査(15) 福島第一原子力発電所事故後に整備された統合マップデータを用いた時系列の解析; 農地における除染の統計的な評価",
日本原子力学会 2024 年秋の大会, (仙台, 日本, 2024 年 9 月 11-13 日).
- (15) 小林 恵太, 中村 博樹, 奥村 雅彦, 板倉 充洋, 町田 昌彦,

- "蛍石構造における比熱異常の局所秩序変数を用いた特徴づけ～機械学習分子動力学法による解析",
日本原子力学会 2024 年秋の大会, (仙台, 日本, 2024 年 9 月 11-13 日).
- (16) 森山 潤一郎, 山口 正剛, 高桑 脩,
"Fe-Cr-Ni 合金の水素固溶特性に対する合金成分の影響: Cr: Ni 原子の水素溶解エネルギーに対するアナジー効果の第一原理計算",
日本鉄鋼協会 2024 年秋季大会(第 188 回), (豊中, 日本, 2024 年 9 月 18-20 日).
- (17) 山口 正剛, 海老原 健一, 板倉 充洋, 都留 智仁,
"水素による粒界凝集エネルギー低下に対する偏析元素影響の定量的評価法",
日本鉄鋼協会 2024 年秋季大会(第 188 回), (豊中, 日本, 2024 年 9 月 18-20 日).
- (18) 松川 義孝, 藤枝 秀斗, 寺尾 公志, 連川 貞弘, 牟田 浩明, 中森 文博, 笠田 竜太, 吉田 健太, 佐藤 充孝, 藪内 聖皓, 山口 正剛, 遠藤 美奈子, 熊野 秀樹,
"軽水炉圧力容器の寿命予測と延命処理について(2) Ni-Si-Mn 析出物に関する状態図の現状と課題",
日本原子力学会 2024 年秋の大会, (仙台, 日本, 2024 年 9 月 11-13 日).
- (19) 藤枝 秀斗, 松川 義孝, 連川 貞弘, 渡邊 大樹, 牟田 浩明, 山口 正剛, 笠田 竜太, 吉田 健太, 佐藤 充孝, 藪内 聖皓, 遠藤 美奈子, 熊野 秀樹,
"bcc 鉄における Γ_2 相 Ni_3SiMn_2 の再固溶温度の調査",
日本金属学会 2024 年秋期(第 175 回)講演大会, (豊中, 日本, 2024 年 9 月 18-20 日).
- (20) 伊東 祐斗, 江草 大祐, 山口 正剛, 阿部 英司,
"計算科学による hcp 金属結晶キルク発現機構の解明",
日本金属学会 2024 年秋期(第 175 回)講演大会, (豊中, 日本, 2024 年 9 月 18-20 日).
- (21) 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, 斎藤 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・耕作活動による空間線量率の低減効果及び将来予測-その 2-",
第 13 回環境放射能除染研究発表会, (いわき, 日本, 2024 年 9 月 4-5 日).
- (22) 古立 直也, 柳 秀明, 吉田 亨, 山田 進, 長谷川 幸弘, 町田 昌彦,
"機械学習技術により推定された放射線源に対する線源対策最適化手法の開発",
日本原子力学会 2024 年秋の大会, (仙台, 日本, 2024 年 9 月 11-13 日).
- (23) Shiga Motoyuki,
"Quantum molecular dynamics with neural network potentials",
令和 6 年度化学系学協会東北大会, (秋田, 日本, 2024 年 9 月 14-15 日).
- (24) 平口 敦基,
"トポロジカルデータ解析を用いた格子ゲージ理論の閉じ込めの研究",
京都大学基礎物理学研究所研究会「熱場の量子論とその応用」, (京都, 日本, 2024 年 9 月 9-11 日).
- (25) 奥村 雅彦,

- "機械学習分子動力学法; 基礎と応用",
集積回路研究会(ICD), (金沢, 日本, 2024年9月26-27日).
- (26) 山口 正剛, 都留 智仁, 海老原 健一, 板倉 充洋,
"アルミニウム合金中整合非整合界面の水素トラップと剥離の第一原理計算",
軽金属学会第147回秋期大会, (太田, 日本, 2024年11月8-10日).
- (27) 海老原 健一, 藤原 比呂, 清水 一行, 山口 正剛, 戸田 裕之,
"Al-Zn-Mg合金中の第二相粒子への水素侵入による水素脆化抑制に関する数値的考察",
軽金属学会第147回秋期大会, (太田, 日本, 2024年11月8-10日).
- (28) 山田 進,
"観測した空間線量値から放射線源を逆推定する機械学習技術の研究開発",
第18回放射線計測フォーラム福島, (東京, 日本, 2024年11月15日).
- (29) 小林 恵太, 中村 博樹, 奥村 雅彦, 板倉 充洋, 町田 昌彦,
"機械学習分子動力学法を用いた蛍石構造における高温比熱異常の解析",
第38回分子シミュレーション討論会, (姫路, 日本, 2024年12月2-4日).
- (30) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Finding the best functional for modelling sub- and supercritical water with SL-PIHMC-MIX",
第38回分子シミュレーション討論会, (姫路, 日本, 2024年12月2-4日).
- (31) Shiga Motoyuki,
"Hydrogenomics x machine learning potentials",
第34回日本MRS年次大会, (横浜, 日本, 2024年12月16-18日).
- (32) 山口 瑛子, 奥村 雅彦, 高橋 嘉夫,
"ラジウムの水和構造および粘土鉱物吸着構造の解明",
第38回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, (つくば, 日本, 2025年1月10-12日).
- (33) 山口 瑛子, 高橋 嘉夫, 奥村 雅彦,
"セシウムの粘土鉱物吸着反応における吸着サイトの変化と結合性の評価",
日本原子力学会2025年春の年会, (online, 日本, 2025年3月12-14日).
- (34) 海老原 健一, 山口 正剛, 板倉 充洋,
"ひずみ誘起空孔を含む純鉄の水素昇温脱離スペクトルの改良モデルによる再現",
日本鉄鋼協会2025年春季大会(第189回), (八王子, 日本, 2025年3月8-10日).
- (35) Kobayashi Keita,
"Machine-learning molecular dynamics of ThO₂",
37th CCSE Workshop "New Developments in Computational Science Research on Nuclear Fuel Materials", (online, Japan, Mar. 25, 2025).
- (36) Nakamura Hiroki,
"First-principles calculation and machine learning molecular dynamics for plutonium dioxide",

- 37th CCSE Workshop "New Developments in Computational Science Research on Nuclear Fuel Materials", (online, Japan, Mar. 25, 2025).
- (37) 平口 敦基, Zheng Xiaojin, Underwood Thomas R., 小林 恵太, 山口 瑛子, 板倉 充洋, 町田 昌彦, Rosso K. M., Bourg I. C., 奥村 雅彦,
"古典分子動力学シミュレーションを用いたモンモリロナイト層間におけるセシウムイオンとナトリウムイオンの拡散挙動差の解析",
日本原子力学会 2025 年春の年会, (online, 日本, 2025 年 3 月 12-14 日).
- (38) Thomsen Bo, Shiga Motoyuki,
"Simulating Nuclear Quantum Effects in Water Isotopologues using Path Integral Molecular Dynamics and Related Methods",
日本原子力学会 2025 年春の年会, (online, 日本, Mar. 12-14, 2025).
- (39) 山田 進,
"GPU システム上での LOBPCG 法を用いた大規模固有値計算",
情報処理学会第 198 回ハイパフォーマンスコンピューティング研究発表会, (札幌, 日本, 2025 年 3 月 17-19 日).
- (40) 山口 正剛, 海老原 健一, 板倉 充洋,
"鉄刃状転位芯の水素トラップエネルギーの第一原理計算",
日本鉄鋼協会 2025 年春季大会(第 189 回), (八王子, 日本, 2025 年 3 月 8-10 日).
- (41) 奥村 雅彦,
"分子動力学法による星間塵表面アモルファス氷生成シミュレーション",
学術変革領域研究(A)「次世代アストロケミストリー; 素過程理解に基づく学理の再構築」
第 5 回領域全体集会, (札幌, 日本, 2025 年 3 月 3 日).
- (42) 佐々 成正,
"ある 4 波方程式の解について",
応用数理学会第 21 回研究部会連合発表会, (岡山市, 日本, 2025 年 3 月 5-7 日).
- (43) 板倉 充洋,
"マルチカノニカル法によるレアイベント発見手法の開発",
日本原子力学会 2025 年春の年会, (online, 日本, 2025 年 3 月 12-14 日).

【システム計算科学センター】

<国内会議>

- (1) 藤堂 泰, Wang Hao, 關 良輔, Wang Jialei, Wei Shizhao, 井戸村 泰宏,
"ジャイロ運動論的電磁流体力学ハイブリッドシミュレーションモデルの検証",
日本物理学会 2024 年春季大会, (online, 日本, 2024 年 3 月 18-21 日).
- (2) 井戸村 泰宏,
"水素同位体混合現象の full-f ジャイロ運動論シミュレーション",
第 41 回プラズマ・核融合学会年会, (東京, 日本, 2024 年 11 月 17-20 日).
- (3) 町田 昌彦,

"原子力研究開発分野における DX と JAEA の取組み; 廃炉に役立つ DX 技術とは?",
1F DX EXPO2025, (大熊, 日本, 2025 年 2 月 25 日-27 日).

<国際会議>

- (1) Idomura Yasuhiro,
"Full-f gyrokinetic simulations of hydrogen isotope mixing phenomena",
US-Japan Joint Institute Fusion Theory (JIFT) Collaboration Meeting on Exascale
Computing, (Princeton, U.S.A., Feb. 28, 2025).

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 5 年度計算科学技術研究実績評価報告",
JAEA-Evaluation 2024-001, 40p. (2024)
- (2) 高性能計算技術利用推進室,
"令和 5 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 2024-044, 121p. (2025)
- (3) 高久 雄飛, 掛札 豊和, 矢城 重夫, 木村 英雄, 久野 哲也
"一般情報システムのクラウド移行報告書"
JAEA-Testing 2024-006, 31p. (2025)

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- (1) 中尾 淳 (京都府立大学), 奥村 雅彦 (システム計算科学センター)
壊れかけの雲母がセシウムを捕まえる仕組みを解明 (2024/7/31)
- (2) 青柳 登, 池田 篤史 (先端基礎研究センター)、元川 竜平、上田 祐生 (物質科学研究センター)、奥村 雅彦 (システム計算科学センター)、蓬田 匠 (安全研究センター/
原子力基礎工学研究センター)、齊藤 拓巳 (東京大学大学院工学系研究科)、西辻 祥
太郎 (山形大学工学部)、田口 富嗣 (量子科学技術研究開発機構)、佐崎 元 (北海道
大学低温科学研究所)
中性子線とナノテクノロジーを武器に「悪魔のつくった表面」を制御する
—セラミックスの製造技術の課題を克服し、排ガス浄化触媒に新しい未来を! —
(2024/6/12)
- (3) 永井 佑紀 (東京大学情報基盤センター学際情報科学研究部門)、岩崎 祐昂 (物質・
材料研究機構ナノアーキテクトニクス材料研究センター)、北原 功一 (防衛大学校電
気情報学群機能材料工学科)、木村 薫、高際 良樹 (物質・材料研究機構)、志賀 基
之 (システム計算科学センター)
6次元の揺らぎがもたらす準結晶の奇妙な物性
—機械学習分子運動力学シミュレーションで解明— (2024/5/14)

5. 研究発表会等の開催

- (1) CCSE セミナー「デジタルツインの研究開発動向と製造業への応用」
2024/10/31 開催
- (2) 第 37 回 CCSE ワークショップ「核燃料物質の計算科学研究の新展開」
2025/3/25 開催

6. 受賞等

- (1) 第 35 期可視化情報学会 学会賞（論文賞）
河村 拓馬、長谷川 雄太
（第 52 回可視化情報シンポジウム、2024 年 7 月 21 日）
- (2) 日本保健物理学会 2023 年度 論文賞
斎藤 公明、三上 智、木名瀬 栄、佐藤 哲郎、眞田 幸尚
（日本保健物理学会、2024 年 7 月 27 日）

7. 特許等の状況

(1) 特許の出願及び登録

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（2024 年 12 月 16 日）

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

特願 2024-197120（2025 年 2 月 12 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	2,684,020 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）
HPC・DX 基盤技術開発室	43,721（8）	6（うち新規 3）	0（うち新規 0）
AI・DX 基盤技術開発室	219,529（11）	7（うち新規 2）	0（うち新規 0）
システム計算科学センター	（0）	0（うち新規 0）	0（うち新規 0）
合計	263,250（19）	13（うち新規 5）	0（うち新規 0）

【HPC・DX 基盤技術開発室】

- (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）
33,910 千円（受託研究）
- (2) 【新規】流体解析の In-Situ ステアリング技術の開発（荏原製作所）1,911 千円（受託研

究)

- (3) 【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））2,700 千円
- (4) 【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））1,000 千円
- (5) 【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））1,100 千円
- (6) 【継続】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））400 千円
- (7) 【新規】GPU スパコンを用いた原子力気液二相流解析に適した新たな界面モデルの開発（日本学術振興会：科研費（基盤 C））1,100 千円
- (8) 【新規】GPU スパコンを用いた都市風況 LES に対するアンサンブルデータ同化の高速化技術の開発（日本学術振興会：科研費（若手研究））1,600 千円

【AI・DX 基盤技術開発室】

- (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）162,780 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】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）12,000 千円（分担）（受託研究）
- (4) 【新規】原子力施設等防災対策等委託費（高分解能被ばく評価手法の整備）（原子力規制庁）（受託研究）24,842 千円
- (5) 【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））1,400 千円
- (6) 【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））400 千円
- (7) 【継続】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））2,230 千円
- (8) 【継続】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））1,700 千円
- (9) 【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））800 千円
- (10) 【新規】正準変換補間法の力学系への応用（日本学術振興会：科研費（基盤 C））800 千円

- (11) 【新規】機械学習分子動力学による珪酸カルシウム水和物細孔中の水・イオンの輸送現象の解明（日本学術振興会：科研費（基盤 C））1,900 千円

9. 産学官との連携に関連する事項

室	共同研究	委託研究	受託研究	研究協定
HPC・DX 基盤技術開発室	4	0	2	0
AI・DX 基盤技術開発室	7	0	2	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	0	0	0	1
合計	11	1	4	1

●共同研究

【HPC・DX 基盤技術開発室】

- (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）

【AI・DX 基盤技術開発室】

- (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) 【新規】X線イメージング法の高度化に関する研究（大阪公立大学）
- (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、東京大学）

●委託研究

【高性能計算機技術利用推進室】

- (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

【HPC・DX 基盤技術開発室】

- (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】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）

【AI・DX 基盤技術開発室】

- (1) 【継続】令和 6 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機能化開発）に係る補助事業（資源エネルギー庁）
- (2) 【継続】令和 6 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 30 件に及ぶ機構内連携を実施している

【HPC・DX 基盤技術開発室】

- (1) 【継続】汚染物質拡散解析の計算技術開発（原子力科学研究所（原子力基礎工学研究センター）、原子力安全・防災研究所（安全研究センター））
汚染物質拡散解析に係る高性能計算技術、計算モデル、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（原子力科学研究所（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) 【継続】空間線量率モニタリングデータベースシステムの開発（原子力安全・防災研究所（原子力緊急時支援・研修センター））
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。
- (5) 【新規】高速炉熱流動解析の計算技術開発（大洗原子力工学研究所（高速炉サイクル研究開発センター））
ガス巻き込み評価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。
- (6) 【新規】原子力施設 3 次元点群データの可視化技術開発（敦賀廃止措置実証部門（敦賀

廃止措置実証本部))

原子力施設 3次元点群データの xR 可視化技術の開発。

- (7) 【新規】地層処分場デジタルツインの可視化技術開発 (核燃料サイクル工学研究所 (環境技術開発センター))

地層処分場デジタルツインの xR 可視化技術の開発。

【AI・DX 基盤技術開発室】

- (1) 【継続】土壌粘土鉱物への放射性セシウム吸着の解析 (福島廃炉安全工学研究所 (廃炉環境国際共同研究センター)、原子力科学研究所 (物質科学研究センター、先端基礎研究センター)、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 (福島廃炉安全工学研究所 (廃炉環境国際共同研究センター)、原子力科学研究所 (原子力基礎工学研究センター)、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 (福島廃炉安全工学研究所 (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・軽水炉新規構造材料の脆化評価 (原子力科学研究所 (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および軽水炉新規構造材料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 (福島廃炉安全工学研究所 (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推定 (福島廃炉安全工学研究所 (廃炉環境国際共同研究センター))

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 (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 (大洗原子力工学研究所 (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 (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) 【継続】環境中空間線量率 3次元分布計算システム (3D-ADRES) の開発 (福島廃炉安全工学研究所)
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) 【継続】スパースモデリングによる線源逆推定技術の開発 (福島廃炉安全工学研究所)
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) 【継続】原子核物理計算手法の GPU 最適化 (原子力科学研究所 (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) 【継続】機械学習による廃棄物識別技術の開発 (核燃料サイクル工学研究所)
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) 【継続】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 (大洗原子力工学研究所)
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。
- (15) 【新規】事象解析 (大洗原子力工学研究所 (高速炉サイクル研究開発センター))
新型炉運転シミュレーションに機械学習を応用し事故につながる希少事象を抽出。
- (16) 【新規】高温・高圧水の核データ解析 (原子力科学研究所 (原子力基礎工学研究センター)) 炉設計に用いる高温・高圧水の核データを高精度な原子シミュレーションで取得。

【高性能計算技術利用推進室】

- (1) 【新規】FEMAXI-8 コードの高速化作業 (原子力安全・防災研究所 (安全研究センター))
並列化に必要な修正と、並列化時の動作テストを実施する。
- (2) 【新規】LOHDIM-LES の効率的流入境界処理コードの並列化作業 (原子力科学研究所 (原子力基礎工学研究センター))
LOHDIM-LES の解析機能の効率化を図るため、レイノルズ応力のコレスキー分解に基づき時々刻々変化する乱流変動風を効率的に生成できる流入境界処理コードの並列化を実施する。
- (3) 【新規】誘導放射能解析コード DCHAIN-SP の並列化作業 (原子力科学研究所 (原子力基礎工学研究センター))
DCHAIN-SP の加速器体系における残留放射能の詳細分布の評価の様な xyz メッシュで細かく分割されてタリー領域数が多い計算部分の並列化を実施する。
- (4) 【新規】三次元二流体解析コード ACE-3D の 3 方向の並列化作業 (原子力科学研究所 (原子力基礎工学研究センター))
ACE-3D コードの x 方向および y 方向への MPI 並列化を行い、3 方向 (x,y,z) への任意の並列数による MPI 並列解析が可能となるようコードの改良を実施する。

- (5) 【新規】PHITS ユーザー入力支援ソフト PHITS-PAD の開発（原子力科学研究所（原子力基礎工学研究センター））
PHITS の入力ファイル作成を支援するためのテキストエディタ PHITS-PAD のヘルプ機能を開発する。
- (6) 【新規】MicroAVS による ACE-3D 用可視化用ソフトウェアの開発（原子力科学研究所（原子力基礎工学研究センター））
ACE-3D の出力結果を MicroAVS を用いてコンターで可視化する際に、格子間について補間なしでコンターを作図できるプログラムを開発する。
- (7) 【新規】汎用非線形構造解析プログラムの開発整備（大洗原子力工学研究所（高速炉サイクル研究開発センター））
スパコンでの大型炉心の構造計算に向け、FINAS ソルバの高速化および拡張書式を使用した場合のリスタート機能を開発する。

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）

This is a blank page.

