



JAEA-Evaluation

2015-015

DOI:10.11484/jaea-evaluation-2015-015

第2期中期目標期間計算科学技術研究実績評価報告

Review of Research on Advanced Computational Science in FY2010-2014

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

JAEA-Evaluation

March 2016

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

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。
本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。
なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ (<http://www.jaea.go.jp>)
より発信されています。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 研究連携成果展開部 研究成果管理課
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方2番地4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency.
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to
Institutional Repository Section,
Intellectual Resources Management and R&D Collaboration Department,
Japan Atomic Energy Agency.
2-4 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2016

第 2 期中期目標期間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

(2015 年 12 月 25 日受理)

システム計算科学センターにおいては、「独立行政法人日本原子力研究開発機構の中期目標を達成するための計画（中期計画）」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。この研究開発は原子力基礎工学研究のうちの 1 分野として位置づけられていることから、原子力基礎工学研究・評価委員会による助言と評価がなされるが、計算科学技術研究については、それを支援するために原子力基礎工学研究・評価委員会の下に計算科学技術研究専門部会が設置され、課題の詳細な内容等を評価することとなった。

本報告は、第 2 期中期目標期間（平成 22 年度～平成 26 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、それに対する計算科学技術研究専門部会による評価をとりまとめたものである。

Review of Research on Advanced Computational Science in FY2010-2014

Center for Computational Science & e-Systems

Japan Atomic Energy Agency
Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken

(Received December 25, 2015)

Research on advanced computational science for nuclear applications, based on “the plan for meeting the mid-term goal of the Japan Atomic Energy Agency”, has been performed at Center for Computational Science & e-Systems (CCSE), Japan Atomic Energy Agency.

CCSE established the committee consisting outside experts and authorities which does research evaluation and advices for the assistance of the research and development.

This report summarizes the followings.

- (1) Results of the R&D performed at CCSE in the period of the midterm plan (April 1st, 2010 - March 31st, 2015)
- (2) Results of the evaluation on the R&D by the committee in the period of the midterm plan (April 1st, 2010 - March 31st, 2015)

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. 計算科学技術研究専門部会	2
3. 計算科学技術研究における研究計画	4
3. 1 中期計画	4
3. 2 年度計画	4
4. 研究実績と評価意見	6
4. 1 平成 22 年度	6
4. 2 平成 23 年度	15
4. 3 平成 24 年度（中間評価）	27
4. 4 平成 25 年度	35
4. 5 平成 26 年度（事後評価・事前評価）	47
付録 1 平成 22 年度計算科学技術研究実績	55
付録 2 平成 23 年度計算科学技術研究実績	83
付録 3 平成 24 年度計算科学技術研究実績	109
付録 4 平成 25 年度計算科学技術研究実績	131
付録 5 平成 26 年度計算科学技術研究実績	155

Contents

1. Introduction	1
2. Evaluation Committee	2
3. R&D Plans for the Advanced Computational Science Research of CCSE/JAEA	4
3.1 Midterm Plan	4
3.2 Plan for Fiscal Year (FY2010, FY2011, FY2012, FY2013, FY2014)	4
4. Results of the R&D and the Evaluation Comments	6
4.1 FY2010	6
4.2 FY2011	15
4.3 FY2012 (Interim Evaluation)	27
4.4 FY2013	35
4.5 FY2014 (Result and In-advance Evaluation)	47
Appendix1 List of Achievements in FY2010	55
Appendix2 List of Achievements in FY2011	83
Appendix3 List of Achievements in FY2012	109
Appendix4 List of Achievements in FY2013	131
Appendix5 List of Achievements in FY2014	155

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、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、気象や環境等、生物学的・理工学的課題の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（平成 26 年度までは独立行政法人）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工学研究の重要な柱として中期計画に盛り込み、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。

この研究開発は原子力基礎工学研究のうちの 1 分野として位置づけられていることから、機構の原子力基礎工学研究・評価委員会（以下「委員会」という。）によって研究に対する助言と評価がなされるが、計算科学技術研究については、委員会の助言・評価を支援するため、委員会の下に計算科学技術研究専門部会（以下「専門部会」という。）が設置され、課題の詳細な内容等の評価することとなった。また、この専門部会の評価結果は、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、第 2 期中期目標期間（平成 22 年度～平成 26 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専門部会の評価結果をとりまとめたものであり、第 2 節に専門部会の構成、第 3 節に研究の計画、第 4 節に研究成果と専門部会の評価意見、さらに付録に年度ごとの研究開発実績が記載されている。なお、平成 22 年度の評価については、当該年度末に実施される予定であったが、東日本大震災の影響により平成 23 年度に延期して実施された。また、平成 24 年度の評価は第 2 期中期目標期間の中間評価として実施され、平成 26 年度の評価は第 2 期中期目標期間の事後評価及び第 3 期中長期目標期間（平成 27 年度～平成 32 年度）の事前評価として実施された。

2. 計算科学技術研究専門部会

本専門部会は、平成 23 年 2 月 9 日に設置された。専門部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 計算科学技術研究専門部会構成（敬称略）

部会長	竹田 敏一	福井大学附属国際原子力工学研究所 所長（～平成 24 年度） 福井大学附属国際原子力工学研究所 特任教授（平成 25 年度～）
専門委員	小柳 義夫	工学院大学 情報学部長（～平成 22 年度） 神戸大学大学院システム情報学科 特命教授（平成 23 年度～）
	加古 孝 （平成 23 年度まで）	電気通信大学 大学院情報理工学科長・情報理工学部長
	笠原 博徳	早稲田大学理工学術院基幹理工学部情報理工学科 教授
	越塚 誠一	東京大学大学院工学系研究科 教授
	曾根田 直樹	電力中央研究所材料科学研究所 上席研究員（～平成 22 年度） 電力中央研究所材料科学研究所 副所長（平成 23 年度～）
	樋渡 保秋	豊田理化学研究所 フェロー（～平成 22 年度） 金沢大学 名誉教授（平成 23 年度～）

表 2. 2 計算科学技術研究専門部会開催状況（1 / 2）

回	開催日時	開催場所	主たる議題	特記事項
1	平成 23 年 5 月 7 日 14:30～16:35	航空会館 504 会議室（東京都港区新橋）	・評価体制の変更について ・評価の方法について ・平成 22 年度の実績について	
2	平成 24 年 1 月 17 日 15:30～17:30	日本原子力研究開発機構 東京事務所第 5 会議室 （東京都千代田区内幸町）	・前回の意見の活用状況について ・平成 23 年度の実績について	
3	平成 24 年 11 月 19 日 14:00～17:00	日本原子力研究開発機構 東京事務所第 5 会議室 （東京都千代田区内幸町）	・研究評価（中間評価）の目的と方法について ・対象期間の研究の実績について	第 2 期の 中間評価
4	平成 26 年 1 月 8 日 14:00～17:00	日本原子力研究開発機構 東京事務所第 5 会議室 （東京都千代田区内幸町）	・前回の意見の活用状況について ・平成 25 年度の実績について	

表 2. 2 計算科学技術研究専門部会開催状況 (2 / 2)

回	開催日時	開催場所	主たる議題	特記事項
5	平成 26 年 11 月 5 日 15:00~17:30	日本原子力研究開発機構 東京事務所第 5 会議室 (東京都千代田区内幸 町)	・研究評価 (事後・事前評 価) の目的と方法について ・研究の実績と今後の方向 性について	第 2 期の 事後評価 第 3 期の 事前評価

3. 計算科学技術研究における研究計画

3. 1 中期計画

計算科学技術研究については、「独立行政法人日本原子力研究開発機構の中期目標を達成するための計画（中期計画）（平成 22 年 4 月 1 日～平成 27 年 3 月 31 日）」に次のとおり定められた。

原子力施設の耐震性評価に資するため、グリッド等先端計算機システムを活用して、弾塑性解析技術を開発し、原子力施設全体において新基準地震動を用いた挙動解析を可能とする。

原子炉構造材料における劣化現象の解明、燃料関連アクチノイド化合物の物質特性の予測並びに高効率な熱電材料、電源材料及び超伝導材料の構造と機能の関係解明のための高精度シミュレーション技術を開発する。

3. 2 年度計画

中期計画を実現するための平成 22 年度～平成 26 年度までのそれぞれの年度計画は、以下のよう定められた。

(1) 平成 22 年度計画

三次元仮想振動台に弾塑性解析機能を追加し、100 万自由度規模の解析と検証を行う。また、先端計算機システムを活用し、三次元仮想振動台や J-PARC 等から出力される 100GB 規模のデータを即日解析可能とする機能を試作、評価する。

原子炉構造材料に対しては、合金・不純物元素（炭素、マンガン）が粒界脆化効果に与える影響を評価する。アクチノイド化合物に対しては、核燃料・二酸化プルトニウム中の酸素欠損の電子状態を計算可能とするシミュレーション技術を開発し、実験との比較を通して計算の妥当性を評価する。機能材料については、鉄系超伝導材料を主な対象として、電子格子相互作用を評価可能なシミュレーション技術を開発し、量子ビーム実験との比較検証を行う。

(2) 平成 23 年度計画

原子力施設全体において新基準地震動を用いた挙動解析を可能とするため、平成 22 年度（2010 年度）に開発した弾塑性解析機能の高度化に向けた機構内施設の事例解析と機能評価を行う。また、三次元仮想振動台から出力されるテラバイト規模の膨大なデータから、耐震性評価において重要となる領域を瞬時に特定可能な大規模データ可視化解析技術を開発する。

原子炉構造材料に対しては、照射によって生じるヘリウム及び空孔の粒界脆化効果を計算可能とするシミュレーション技術を開発する。アクチノイド化合物については、二酸化プルトニウムの第一原理計算結果を基に熱物性値を求める技術を開発する。機能材料については、絶縁体材料表面での熱電特性を計算するシミュレーション技術を開発する。

(3) 平成 24 年度計画

原子力施設全体の弾塑性解析を効率的に実施可能とするため、全体の挙動を概要解析し、塑性化が予測される部分領域を詳細に解析するシミュレーション技術を開発する。また、複雑な三次元構造を持つ機器や建屋の挙動を効率的に解析するために、構造物内部の物理量分布も対話的に確認できる可視化技術を開発する。

原子炉構造材料に対しては、材料中の転位が空孔や格子間原子などを吸収する速度を評価する。アクチノイド化合物については、核燃料中の酸素挙動をシミュレーションし、熱物性への影響を評価する。機能材料については、材料における表面及び界面構造と機能の関係を評価可能とするシミュレーション技術を開発する。

(4) 平成 25 年度計画

開発した弾塑性解析機能の妥当性を評価するために、機構内実験施設の地震観測データ等と計算結果を比較し、機能の確認と検証を行う。また、耐震解析結果等のスーパーコンピュータ上の大量データを効率的に分析するため、平成 23 年度（2011 年度）及び平成 24 年度（2012 年度）に開発したデータ可視化技術を並列分散技術により統合し、利用者の手元で対話的に可視化できるシステムを構築する。

原子炉構造材料については、鉄鋼材料の粒界脆化につながる不純物の拡散偏析を予測するシミュレーション技術を開発する。アクチノイド化合物については、ウラン、ネプツニウム、アメリカシウム各二酸化化合物の熱物性値を求める技術を開発する。機能材料については、界面超伝導状態を求め、その機能を評価可能な計算技術を開発する。

(5) 平成 26 年度計画

開発した弾塑性解析技術とデータ可視化技術を用いて、新基準地震動レベルの入力を用いた原子力施設全体の弾塑性解析を行う。

原子炉構造材料については、これまでに開発した脆化評価のための高精度シミュレーション手法を統合し、鉄鋼材料の破壊靱性を評価する。アクチノイド化合物については、これまでに開発した各アクチノイド単体酸化物の高精度熱物性評価シミュレーション手法を混合酸化物に適用し、熱物性の評価を行う。機能材料については、これまでに開発した表面及び界面での発現機能を予測する高精度シミュレーション手法を拡張し、薄膜多層構造に出現する機能の予測を行う。

4. 研究実績と評価意見

4. 1 平成 22 年度

中期計画及び平成 22 年度計画に沿って実施した研究開発の実績について、表 4. 1 にまとめた。また、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 1 に一覧を掲載する。

専門部会において、表 4. 1 の内容を説明し、質疑応答等を経て議論した上で、専門委員からいただいた評価意見を表 4. 2 に記載する。

表 4. 1 平成 22 年度研究開発実績及び成果の意義等 (1 / 2)

	中期計画	H22 年度計画	H22 の実績・成果	成果の意義	評価の視点【注】、特に優れた成果等
1	原子力施設の耐震性評価に資するため、グリッド等先端計算機システムを活用して、弾塑性解析技術を開発し、原子力施設全体において新基準地震動を用いた挙動解析を可能とする。	三次元仮想振動台に弾塑性解析機能を追加し、100 万自由度規模の解析と検証を行う。	<p>○三次元仮想振動台コードに非線形ループの取扱いや Swift 則等の構成式を追加し、弾塑性解析機能を整備した。</p> <p>○構築した三次元仮想振動台コードの検証作業の一環として、HTTR の中間熱交換器支持構造部試験体を対象とした 100 万自由度規模の弾塑性解析を実施し、開発コードが既存解析コードと同等の結果を計算することを確認した。</p> <p>○三次元仮想振動台コードによる HTTR の中間熱交換器支持構造部試験体を対象とした解析結果と加振実験結果との比較を実施し、一致する結果が得られることを確認した。</p>	<p>○三次元仮想振動台への弾塑性解析機能の追加により、耐震指針の改訂に伴い要求されている、従来より厳しい極めて稀な大地震に対する原子力施設の挙動をも予測するために必要な機能を整備することができた。</p> <p>○開発コードの V&V(検証と妥当性確認)を着実に進め、原子力施設を構成する部品レベルの弾塑性解析が問題なく実施できることを確認することで、来年度に予定している建屋・機器レベルの弾塑性解析を実施するための準備を整えた。</p>	<p>○仮想振動台コードによる耐震シミュレーションの精緻化を目的として実施した流体と構造の連成解析に関する業績が高く評価され、日本原子力学会計算科学技術部会奨励賞を受賞した。</p> <p>○建設部からの要請に基づき、機構内施設(核サ研再処理施設)の耐震安全性評価に対し技術協力を実施した。</p> <p>○外部資金「原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション」(250 百万円/5 年)において、東京大学、東京電力等と共同研究を実施し、産学連携の基盤を確立できた。</p> <p>○文部科学省の主導する「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム次世代ものづくり分野」において、「原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発」(180 百万円/6 年)が正式課題として採択され、準備研究を実施した。</p>
		また、先端計算機システムを活用し、三次元仮想振動台や J-PARC 等から出力される 100GB 規模のデータを即日解析可能とする機能を試作、評価する。	<p>○マルチコア技術を活用した大規模データの高速処理技術を開発し、J-PARC の中性子ビームラインを用いた実験において生成される 100GB 規模のデータの処理に適用することで、従来 2.5 日を要していた処理時間を 10 分に短縮した。</p> <p>○分散処理技術を活用した大規模データの高速処理技術を開発し、三次元仮想振動台から出力される 100GB 規模のデータの処理に適用することで、一時間以内で処理可能であることを確認した。</p>	<p>○J-PARC において生成される実験データの処理時間を 10 分に短縮することで、通常 1 時間ごとに繰り返し実施される実験の間に解析を終了し、実験計画を動的に変更できるようになることから、実験の効率化に貢献できる。</p> <p>○原子力施設全体規模の弾塑性解析において出力されるデータ(TB 規模)を即日解析できる見通しを立てることができた。これにより、施設全体規模の弾塑性解析結果の妥当性を検証する作業の効率化が期待できる。</p>	<p>○先端的計算機技術を活用した大規模データ解析技術が高く評価され、全 NEC C&C システムユーザー会に入選するとともに、日本原子力学会計算科学技術部会奨励賞を受賞した。</p> <p>○所内連携融合資金(7 百万/年)を獲得し、基礎工、J-PARC との協力の下、大規模データ処理に関する研究成果を活用した J-PARC データ処理のためのテスト環境を構築するとともに、J-PARC が構築する実運用環境の設計に関しても技術協力を行った。</p> <p>○開発した大規模データ高速処理技術を核融合炉内のプラズマモニタリングシステムに適用し、プラズマの安定性解析処理を 1 秒以内で実施可能とした。これにより、核融合プラズマの実時間安定性制御の実現に関する課題の一つを解決することに貢献した。</p>

表4. 1 平成22年度研究開発実績及び成果の意義等(2/2)

	中期計画	H22年度計画	H22の実績・成果	成果の意義	評価の視点【注】、特に優れた成果等
2	原子炉構造材料における劣化現象の解明、燃料関連アクチノイド化合物の物質特性の予測並びに高効率な熱電材料、電源材料及び超伝導材料の構造と機能の関係解明のための高精度シミュレーション技術を開発する。	原子炉構造材料に対しては、合金・不純物元素(炭素、マンガン)が粒界脆化効果に与える影響を評価する。 アクチノイド化合物に対しては、核燃料・二酸化プルトニウム中の酸素欠損の電子状態を計算可能とするシミュレーション技術を開発し、実験との比較を通して計算の妥当性を評価する。	○第一原理計算手法を用いて、鉄の結晶粒界に炭素、マンガンが偏析した場合の水素脆化効果を評価した。その結果、炭素、マンガンともに水素の粒界偏析を抑制する一方、炭素は水素の表面偏析を抑制し、マンガンは逆に水素の表面偏析を促進するという新たな知見を得た。 ○二酸化プルトニウム中の酸素欠損に対し、相対論的効果及び強相関効果を含めた第一原理計算により、電子状態を計算可能とする技術を開発し、それを用いて酸素欠損による具体的な物性値変化(結晶定数や機械的特性の変化等)を計算した。また、対応する実験結果との比較を通して、開発した計算技術の妥当性を確認し、欠陥により現れた状態が絶縁性を低下させるという知見を得た。	○原子炉構造材に対するミクロな粒界脆化効果は、従来、純鉄に対する第一原理計算を主な手段として進展してきたため、脆化の定性的評価に終始してきたが、当該研究により、始めて実際に用いられている合金の効果が探査可能となった。実際、今年度、合金故の粒界脆化の定量評価(マンガンの粒界析出等)を行い、新たな知見を得るなど、実際に用いられている炉鋼材の脆化という課題に対し、定量的評価を可能とする研究の足がかりを得ることができた。 ○二酸化プルトニウムは、物理的にはモット絶縁体に分類され、強い電子間相互作用により絶縁性が発現するため、その理論的取り扱いが困難である一方、プルトニウムの物性を支配する最外殻電子は5f軌道に属するため相対論的効果を無視できないことも知られており、両者を的確に考慮し、定量的な評価を実現するための第一原理計算手法の確立が求められている。当該研究では、この手法を確立し、且つ、膨大な計算量が見込まれた酸素欠陥等の計算にも成功した。酸素欠陥については、上記の二つの効果を考慮した高精度計算は世界で初めての成果であり、これにより、核燃料の物性予測が基本的に可能となったことを意味しており、今後の研究進展にとって大きな一歩を踏み出せたと考える。	○炉鋼材脆化に関連し、鉄鋼材の水素脆化の研究を進めた結果、得られた新たな知見が注目され、本研究成果に関連する招待講演を、アルミニウム国際会議、鉄鋼協会主催の水素フォーラムで行った。 ○関連する技術として、水素を精確に取り扱う分子動力学手法の開発に対し、分子化学会から奨励賞を分子シミュレーション研究会より学術賞を受賞した。 ○二酸化プルトニウムについての計算においては、論文を次世代炉部門と共著で執筆し、Physical Review B 誌にて出版された他、酸素欠陥の初期的計算結果は、SNA+MC2010 で発表する等、成果の積極的公表を進めた。 ○燃料として、最も重要な物性量の一つである比熱の評価に始めて成功し、従来、殆ど考慮されていなかったショットキー比熱成分を考慮することで、高温での比熱の正確な評価に道を拓くことができた。
	機能材料については、鉄系超伝導材料を主な対象として、電子格子相互作用を評価可能なシミュレーション技術を開発し、量子ビーム実験との比較検証を行う。	○電子格子相互作用を評価可能とするシミュレーション技術を開発し、その技術を用いて格子振動の分散を求め、量子ビーム実験結果と比較し、開発した技術の妥当性を確認した。また、実験との比較結果から鉄系超伝導材料の磁性出現の有無と格子振動の分散に相関があるという知見を得た。	○原子力機構においては、大型量子ビーム施設を用いて、他の研究施設では測定することが不可能な高精度実験が可能であり、それらを用いた機能材料研究への画期的進展が各方面(学术界及び産業界)から強く期待されている。しかしながら、その高精度測定データも計算機シミュレーションにより、対応するモデルや理論的予測と比較検証することで始めて有効なデータとなることから、シミュレーションの役割は益々、重要となっている。本研究は、そうした背景の下、最近発見された鉄系超伝導体の格子振動に対し、SPring-8を用いて得られた測定結果をシミュレーションを通して分析した成果であり、超伝導にとって重要な役割を果たす格子振動の役割を世界で初めて、系統的に明らかにした成果と位置付けられる。	○当該年度は、二つの量子ビーム研究施設(J-PARC と SPring-8)の鉄系超伝導機構解明に向けた取り組みに協力するため、研究開発を実施した。J-PARC により得られた中性子散乱データのモデリングとその解析では、現在、最も論争点となっている問題に対し、一つの解を与える理論的帰結を与えるなど、着実な成果を得た。また、SPring-8 に対する格子振動データに対しては、系統的計算結果を提供することで、量子ビームが論文にて公表したデータに対し妥当な解釈を与えることができた。	

【注】評価の視点:原子力機構における自己評価の際の視点

○原子力研究開発の科学技術基盤を維持・強化し、新たな原子力利用技術を創出するため、年度計画に基づき、産業界等のニーズを踏まえつつ、適切に研究開発を進めるなど、中期計画達成に向けて当該年度に実施すべきことを行ったか。

表 4. 2 平成 22 年度評価意見 (1 / 2)

評価項目	評価に関する意見・コメント		
	計画進捗度	特に優れた成果等	その他当該研究に関するご意見等
<p>【年度計画】</p> <p>三次元仮想振動台に弾塑性解析機能を追加し、100 万自由度規模の解析と検証を行う。</p> <p>また、先端計算機システムを活用し、三次元仮想振動台や J-PARC 等から出力される 100GB 規模のデータを即日解析可能とする機能を試作、評価する。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 22 年度には、100 万自由度の解析・検証は終了しており、さらに 1000 万自由度超の問題に対する解析手法を開発済みであり、年度計画通り進捗している。 三次元仮想振動台に弾塑性解析機能を加え、HTTR の支持構造部に適応し、計算結果と実験とを比較したことは計画通り進捗している。今後、さらに自由度を増やし、多くの要素からなる大きなシステムを取り扱えるようにすることが期待される。 大規模データの解析を Cell Processor により高速化するシステムについては、試料の冷却時間内に計算を終了するという本年度計画目標を実現した。この経験を生かして、より実的なデータ解析システムを実現することが期待される。 弾塑性解析機能の追加、中規模な解析での解析精度の確認および計算効率の確認、大規模データの即日解析システムの構築など、数億自由度の解析に向けて計画を 100% 達成している。 原子力分野で、Ss を超える地震力に対する残余のリスクの条件に対する耐震解析は重要。特に弾塑性の考慮は重要。その中期計画に対して着実に研究は進んでいる。 	<ul style="list-style-type: none"> プラズマモニタリング、次世代耐震シミュレーションに関する研究開発も応用として成果を出している点評価できる。さらに学術的に優れた成果(全 NECC&C システムユーザー会の入選、原子力学会部会賞を受賞) も出している。 解析結果の検証のために、市販解析コードとの比較や実構造物を用いた試験との比較など、緻密に検証を重ねており、信頼性の高いシステムが構築されていると考える。 大規模データの処理を CELL を用いて極めて高速に処理する高い技術が確立されており、広い範囲のアプリケーションに応用されている。 外部資金の研究実施により、独自の高い技術により外部貢献を果たすとともに、戦略的に技術開発も進めている。 HTTR 解析や CREST への参加など、積極的に外部の研究者と共同研究を進めていることは評価できる。 	<ul style="list-style-type: none"> 原子力施設の耐震評価は、今後、施設全体に発展することを期待します。その場合、地震時の不具合は接合部で発生する確率が大きいため、部品単位に計算を分割する際、接合部を境界にすると問題が生じる可能性があるため、うまい方法を導出して下さい。 三次元仮想実験台については、計算結果の検証に工夫を要する。実験との比較においてはより定量的な分析が必要である。またシミュレーションの適正性については、他のソフトウェアによる結果との比較、異なるメッシュでの計算の比較などの可能性が考えられる。 データ解析システムについては、Cell Processor というコンピュータ科学的にもおもしろいプロセッサを用いたことはこの時点では適当であったが、技術の動向は急速に動いており、今後はマルチコア PC、GPU、メニーコアなどの技術をつかって高速なデータ解析システムを構築することが期待される。 テスト段階の 100 万自由度の解析システムがそのまま数億自由度の解析で所期の性能を発揮するかは確実ではないことには留意する必要がある。 研究成果は論文等にまとめて外部へもっと発信して欲しい。

表 4. 2 平成 22 年度評価意見 (2 / 2)

評価項目	評価に関する意見・コメント		
	計画進捗度	特に優れた成果等	その他当該研究に関するご意見等
<p>【年度計画】</p> <p>原子炉構造材料に対しては、合金・不純物元素（炭素、マンガン）が粒界脆化効果に与える影響を評価する。</p> <p>アクチノイド化合物に対しては、核燃料・二酸化プルトニウム中の酸素欠損の電子状態を計算可能とするシミュレーション技術を開発し、実験との比較を通して計算の妥当性を評価する。</p> <p>機能材料については、鉄系超伝導材料を主な対象として、電子格子相互作用を評価可能なシミュレーション技術を開発し、量子ビーム実験との比較検証を行う。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 原子炉構造材料の劣化メカニズムの原子分子レベルからの解明、アクチノイド燃料のシミュレーションによる実験結果の予測、熱電・超伝導材料のシミュレーションによる物性機能と構造の関係解明に対する研究は年度計画通り進捗している。 原子炉構造材料の劣化の解明のため、鉄中の炭素とマンガンが水素脆化に及ぼす影響を第一原理分子動力学で解明したことは年度計画の通り進捗していると認められる。今後は、現実の材料に近いもののシミュレーションが可能となることが期待される。 アクチノイド化合物の電子状態を、LDA に強相関や相対論効果を入れてより精密な第一原理シミュレーションを行い、酸素欠陥の影響を明らかにしたことは評価できる。今後は、種々の物性値などの定量的な分析が期待される。 鉄系超伝導材料の電子と格子の相互作用については、第一原理計算を行い、中性子や Spring-8 による測定結果と比較するまでに至ったことは大きな進歩である。今後は、より定量的な解明が望まれる。 粒界脆化、二酸化プルトニウムの酸素欠損、鉄系超伝導材料の格子振動の計算のいずれにおいても計画を 100%達成している。 福島第一発電所への対応として第一原理計算によりゼオライトへのセシウムの吸着性の研究、あるいは土壌へのセシウムの吸着性の検討がなされており、当初目標以外に震災という重大な事態に対応すべく新たな知見を定量的に提示した意義は大きい。 今年度の 3 つのテーマに対して、着実に成果を出している。 第一原理計算では多数の優れた論文を出しており、高く評価できる。 	<ul style="list-style-type: none"> 第一原理、強相関、相対論を取り入れた手法を用いた PuO₂ 酸素欠損の熱物性の評価は独創的研究であり、実用的にも優れた成果である。 結晶粒界の第一原理計算では、第 I 期の純鉄の計算から、合金元素の影響を考慮にいたした計算に発展しており、粒界エネルギー計算のための高い技術基盤が構築されていると評価できる。 二酸化プルトニウムの計算における f 軌道電子の高精度計算など、困難な計算を実施しつつ、結果を比熱や格子定数といった検証可能な物性値を求めることにつなげている。また 0 K での計算結果から得られた比熱の温度依存性を求めるなど、非常に有用な解析結果が得られているなど、高い技術力とともに現実問題の解決に有効な解析結果を得ることに成功している。 鉄系高温超伝導体の格子振動については、Spring-8 と第一原理計算という実験と計算の先端技術を用いることで鉄の磁性の影響を明確にとらえることに成功している。 土壌やゼオライトにおける Cs の解析を始めており、福島事故で大きな問題となっている Cs による土壌汚染に対して貢献しようとしていることは意欲的で評価できる。 	<ul style="list-style-type: none"> 材料シミュレーション研究では、優れた研究成果を出しており、実用性も大事だが学問的にマイクロからメゾに至る過程の基礎を確立してもらいたい。 本項では原子力工学に関係した広範な物質の計算科学研究を行っているが、いずれもレベルが高く、今後の発展が期待される。 原子力構造材料の計算では、マルチスケールシミュレーションの技術向上において大きな成果をあげている。今後は照射環境等、原子力に特有な環境下で、具体的な機器部材を対象に、これまでに培っている技術を適用していただくとさらに有用な成果が得られると考える。 多数の論文発表があり、優れた成果である。3 つの研究テーマ・成果と、担当した研究員および論文との対応の説明が欲しい。どのテーマとも関係していない論文もあるように思われる。 他と共同研究することで、マルチスケールの課題に取り組んでもいいと思う。
<p>中期計画・年度計画にとらわれず、全体を通じて、当該分野の研究開発についてコメント（今後の方向性、改善点、その他）があればご記入の程お願いします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 優れた成果がでてきており、実用性へ展開されようとしておられますが、基礎学問としてのより一層の充実もやってほしい。 研究成果について多くの論文を発表し、国内・国際会議でも種々の発表を行っていることは評価できる。傾向として、コンピュータ科学の分野の成果については、論文発表が少ない傾向がある。この分野についても、会議発表のみならず、ちゃんとした論文を書く（そのために、価値のある結果を作り出す）ことが重要である。 いずれの研究分野においても、5 か年のプロジェクト全体を見渡した目標と、達成に向けたスケジュール、各個別検討課題の位置づけ、などがわかるまとめの図を作成していただくとありがたい。特に、原子炉構造材料とエネルギー関連機能材料では、毎年、研究対象・内容が変化するので、それらの相関が分かる 5 か年の全体として見通しを示していただくとよいと考える。 		

4. 2 平成 23 年度

中期計画及び平成 23 年度計画に沿って実施した研究開発の実績について、表 4. 3 にまとめた。また、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 2 に一覧を掲載する。

専門部会において、表 4. 3 の内容を説明し、質疑応答等を経て議論した上で、専門委員からいただいた評価意見を表 4. 4 に記載する。

This is a blank page.

表 4. 3 平成 23 年度研究開発実績及び成果の意義等 (1 / 3)

	中期計画	H23 年度計画	H23 の実績・成果	成果の意義	評価の視点【注】、特に優れた成果等
1	原子力施設の耐震性評価に資するため、グリッド等先端計算機システムを活用して、弾塑性解析技術を開発し、原子力施設全体において新基準地震動を用いた挙動解析を可能とする。	原子力施設全体において新基準地震動を用いた挙動解析を可能とするため、平成 22 年度(2010 年度)に開発した弾塑性解析機能の高度化に向けた機構内施設の事例解析と機能評価を行う。	<p>○機構内施設の事例解析として、機構再処理施設建屋を対象として 3 月 11 日に発生した東北地方太平洋沖地震の地震波を入力波とした地震応答解析をすすめ、モデル作成および予備解析としての弾塑性解析を実施した。弾塑性解析に関しては現在実施中であり、今年度中に終了予定。</p> <p>○機能評価については、開発コードを用いたシミュレーション結果と既存コード(Abaqus、FINAS)との結果比較を実施し、合致することを確認した。また、現在実施中の再処理室施設の弾塑性解析についても結果が得られ次第評価する予定。</p> <p>○予備解析(弾性解析)において、従来の耐震安全性評価において用いられている手法(質点系モデル)では再現できなかった 5Hz 近傍に存在する主要な卓越周波数における応答の再現に成功した。</p> <p>○今後の高度化に向けて、長時間を要する弾塑性解析の効率化が必須と見込まれることから、並列計算のための最適領域分割数を予測する手法を考案し、従来手法と比較して計算時間を 1/10~1/30 に短縮した。</p>	<p>○H22 年度は 100 万自由度規模での試作・検証であったが H23 年度計画が達成できれば、原子力施設全体の規模における弾塑性解析に向けた目処や今後改善すべき事項が明確になると考える。</p> <p>○3 月 11 日に発生した基準地震動を上回るレベルの大規模地震動を入力とした弾性解析において、従来手法では再現できなかった主要な卓越周波数における応答を再現できたことで、現在大きな課題となっている極めて稀な大規模地震に対する原子力施設の耐震安全性評価に対する三次元仮想振動台の有用性を示した。</p> <p>○弾塑性解析実行時間を短縮する手法を実現することで、来年度に実施予定である原子力施設全体の弾塑性解析を実用可能な時間で実施するために必要な機能の整備をすすめた。</p>	<p>○3次元モデルを用いた地震応答シミュレーションを建設部と協力実施し、従来モデル(質点系モデル)と比較して、建屋屋根構造内に発生する力が緩和されることを明らかにした。</p> <p>○外部資金「原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション」(250 百万円/5 年)において、東京大学、東京電力等と共同研究を実施し、地盤から建屋・機器の応答解析、炉内熱核反応に至るシミュレーションコードを連携するためのシステム環境の整備を進めた。</p> <p>○文部科学省の主導する「次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム次世代ものづくり分野」において、東京大学等と「原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発」(180 百万円/6 年)を推進し、「京」上で動作する次世代耐震シミュレーションコードの開発に向けたプロトタイプコードの整備を進めた。</p>
		また、三次元仮想振動台から出力されるテラバイト規模の膨大なデータから、耐震性評価において重要となる領域を瞬時に特定可能な大規模データ可視化解析技術を開発する。	<p>○三次元仮想振動台から出力されるテラバイト規模の膨大なデータから、耐震性評価において重要となる領域(Region of Interest: ROI)であると想定される領域の情報を選択的に詳細表示することで、ROI を瞬時に特定可能な可視化解析技術を開発した。</p> <p>○開発した可視化解析技術を HTTR の格納容器内機器を対象とした時刻歴応答解析データの解析に適用し、従来の可視化解析手法では発見困難な微小領域(補助冷却系と配管の接合部)における応力集中を発見することができた。</p>	<p>○原子力施設全体規模の弾塑性解析において出力されるデータ(TB 規模)における ROI の特定を瞬時に実施可能とすることで、従来の可視化解析技術では膨大な時間を要していた施設全体規模の弾塑性解析結果の妥当性を検証する作業の効率化が期待できる。</p>	<p>○開発した可視化解析技術を核融合のプラズマシミュレーション結果や、量子ビーム施設を用いた自動車エンジン内のオイル挙動に関する観測データの解析に適用し、有用性を例証することで、原子力分野における大規模シミュレーションや実験結果に幅広く適用可能な汎用性の高い共通基盤技術であることを示した。</p> <p>○H22 年度に実施した核融合炉内のプラズマモニタリングデータの高速処理を進め、炉内プラズマの観測データにもとづくプラズマ安定性解析入力データ生成から安定性解析終了に至る一連の処理を 3 秒以内(プラズマの不安定性発生後、崩壊に至るまでに要する時間内)で実施可能とし、コードを核融合部門に提供した。</p> <p>○前期中期計画の一環として実施した、概念モデルを活用した大規模シミュレーション結果解析技術が高く評価され、電気学会 電子・情報・システム部門論文奨励賞を受賞した。</p>

表 4. 3 平成 23 年度研究開発実績及び成果の意義等 (2 / 3)

	中期計画	H23 年度計画	H23 の実績・成果	成果の意義	評価の視点【注】、特に優れた成果等
					<p><震災対応> ○文科省の進める「放射線量等分布マップの作成」事業に参画し、福島県全域 2000 箇所、10000 点以上に上る資料を対象とした観測結果を取り纏め、他に例を見ない詳細データを格納した DB を開発するとともに、放射線量分布マップを公開し、除染活動や避難区域の見直しの礎となるデータを提供した。 ○核不拡散部門と連携して、核物質輸送シミュレーションコードの計算アルゴリズムを見直し、これまで一カ月経過しても収束しなかった北半球全域規模の輸送シミュレーションを2日で実行可能とした。この結果、福島原発の各物質放出事故によって北半球全域で観測された Xe の放出過程を詳細に解析できるようになった。さらに、今年度中に GPU を活用して即日解析可能とし、核不拡散部門が求められている 24 時間以内の解析結果報告義務に応えられる性能を実現する予定である。</p>
2	<p>原子炉構造材料における劣化現象の解明、燃料関連アクチノイド化合物の物質特性の予測並びに高効率な熱電材料、電源材料及び超伝導材料の構造と機能の関係解明のための高精度シミュレーション技術を開発する。</p>	<p>原子炉構造材料に対しては、照射によって生じるヘリウム及び空孔の粒界脆化効果を計算可能とするシミュレーション技術を開発する。</p> <p>アクチノイド化合物については、二酸化プルトニウムの第一原理計算結果を基に熱物性値を求める技術を開発する。</p>	<p>○前年度までの成果である第一原理計算結果を最も良く再現する原子間ポテンシャルを用い、照射によって生じるヘリウム及び空孔の粒界脆化効果を計算可能とする分子動力学シミュレーション技術を開発した。その計算結果は、実験及び観察結果との良好な一致を示した。 ○分子動力学シミュレーションの結果から、照射により生じるヘリウムバブルは、粒界に位置した場合、そのエネルギーが低下するという知見を得た。これは、ヘリウムバブルが粒界にて主に観察されるという従来の実験観察結果と符合している。 ○分子動力学シミュレーションにより、微小な粒界バブルは、同様の粒内バブルより空孔を放出しやすく、従って、粒界バブルでの空孔数は、粒内バブルのそれと比べて少ないという知見を得た。これは、観測により検証可能な知見であり、かつ粒界バブルによる脆化効果を議論する上で基礎となる知見を得た事を意味する。</p> <p>○二酸化プルトニウムの第一原理計算において、プルトニウムの外殻電子の相対論的効果と強相関効果を各々、比較検証することで、基底状態が常磁性絶縁体となるメカニズムを明らかにし、熱物性値予測を可能にするシミュレーション技術の開発に成</p>	<p>○核融合炉ブランケット第一壁など高照射環境にさらされた構造材においては、ヘリウム原子が核変換によって生成され、それらは同じく照射によって生成された空孔と結合し、やがてヘリウムバブルに成長する。もし、そのヘリウムバブルが面状の格子欠陥である粒界に形成されると面が剥離し深刻な材料脆化をもたらすと予想されるが、ヘリウム原子は実験的に観測が困難な粒子であるため、計算科学による解析に対する期待が大きい。こうした背景の下、今年度の成果は、第一原理計算という最も微視的なシミュレーション手法の結果を再現する分子動力学シミュレーション技術を確認し、ヘリウムバブルの生成や粒界での安定性等の脆化効果を直接、解析できる結果を得たことである。これは、照射による材料の脆化という原子力材料研究開発上の重要課題にアプローチできるシミュレーション基盤を構築できたことを意味している。また、この成果は、将来、更にスケールの大きな現象である粒界でのヘリウムのバブル形成・成長を、速度論方程式を用いて予測する際に基礎となる情報の取得に目処を付けたことも意味している。</p> <p>○アクチノイド化合物を含む新型核燃料の計算科学による物性予測は、今後、実験及び観察に係る研究開発費が削減されていく状況下において、最も期待されている研究手段である。しかし、アクチノイド化合物の性質を正確に予測するためには、アクチノイド元素の外殻</p>	<p><震災対応> ○当該研究課題において用いてきた高精度の第一原理計算手法を利用し、高濃度汚染水等の除染に利用されている複数のゼオライト等の吸着性能を調べ、実験・観察では判別できないセシウムの安定吸着サイト等を明らかにした。</p>

表 4. 3 平成 23 年度研究開発実績及び成果の意義等 (3 / 3)

中期計画	H23 年度計画	H23 の実績・成果	成果の意義	評価の視点【注】、特に優れた成果等
		<p>功した。</p> <p>○核燃料の研究開発上、熱物性量として、最も重要な比熱の計算手法を開発した。その手法を用いて、二酸化プルトニウムの高温での比熱の温度変化を計算した結果、従来の計算と実験の不一致が改善され、実験をほぼ再現する結果を得た。</p> <p>○燃料において予測すべき熱物性量として、比熱に次いで重要な熱伝導率の計算を行うことを目的とし、上記の高精度第一原理計算を基に、原子間ポテンシャルを計算するプログラムを開発した。</p>	<p>軌道にある電子の相対論的効果を見落とさず、更に、強相関効果をも考慮する事が必須である。前年度、その二つの効果の重要性を確認し、正確な基底状態の再現に成功したが、今年度は、その得られた基底状態を基に、二酸化プルトニウムの比熱において、実験結果を再現するために必要な手法(ショットキー型比熱の効果を考慮し、結果に含める)を開発した。得られた結果は、実験値を良く再現した他、計算科学的手法の限界とされた実験値との差の原因が明確になる等、核燃料の研究開発分野で、一つのブレークスルーを成し得たと位置づけられる。今後、他の核燃料中の化合物に対しても同様の手法を適用することで正確な比熱を得られると考えられ、最終目標のアクチナイド混合化合物である MOX 及び新型核燃料の比熱の物性予測に大きく近づく成果を得た。</p>	
	<p>機能材料については、絶縁体材料表面での熱電特性を計算するシミュレーション技術を開発する。</p>	<p>○表面に特殊な機能を持つ絶縁体を調べ、その絶縁体が超伝導状態となった場合の材料表面での熱伝導率と熱電特性を計算するシミュレーション技術(理論及び計算コード)を開発した。</p> <p>○上記計算を高効率で実行するため、新規なシミュレーション技術として、超並列化向き的高速なアルゴリズムを考案した。</p> <p>○上記の新たな計算アルゴリズムの有効性の検証のため、超伝導体で観測された準粒子干渉効果を例として、テスト計算を実施したところ、実験の再現に成功した上、その現象が起こるメカニズムの解明に成功した。</p> <p>○多項式展開法を採用した実空間第一原理計算手法の開発に着手した。H24 年度末までに開発を終了させ、熱電特性のみならず触媒機能等の物性も評価可能とする予定である。</p>	<p>○エネルギー機能材料を開発するに当たっては、材料の結晶構造から電子状態を第一原理計算により、高精度に求め、結晶構造と得られる電子状態との関係を議論する必要がある。しかし、最近では単なる結晶ではなく、表面や界面の機能も利用することで、従来にはない機能が得られることが分かっており、それらを取り扱うための大規模第一原理計算手法の開発が戦略的に重要になると考えられている。当該年度は、その開発に着手し、絶縁体材料表面での熱伝特性の計算を実現すると同時に、特に、表面及び界面の計算を容易に実行可能とする大規模並列化向きアルゴリズム(多項式展開法)を考案した他、その計算手法の有効性を検証するため、超伝導体の表面で観測されている準粒子干渉効果による実空間像を計算し、再現できることを確かめた。これにより、エネルギー機能材料の計算機シミュレーションによる物質設計という中期目標達成のためのツール開発に目処をつけた。</p>	<p>○当該研究の一環として実施してきた材料機能発現機構解明のためのコード開発及び並列化に関する論文が日本応用数理学会のベストオーサー賞を受賞。</p> <p><震災対応></p> <p>○当該研究課題にて利用している大規模第一原理計算の技術を活用し、土壌粘土鉱物へのセシウム吸着化学形態を調べ、吸着による鉱物の特性変化やその知見を活かした除染技術を考案した。</p>

【注】評価の視点:原子力機構における自己評価の際の視点

○原子力研究開発の科学技術基盤を維持・強化し、新たな原子力利用技術を創出するため、年度計画に基づき、産業界等のニーズを踏まえつつ、適切に研究開発を進めるなど、中期計画達成に向けて当該年度に実施すべきことを行ったか。

☆震災経験の反映、技術の移転や人的資源の適切な配置等の対応や、特に汚染状況の把握手法や除染技術などの技術の標準化への取組に努めたか。

☆研究プロジェクトについて、優先度を踏まえた上で整理統合を行い重点化したか。

表 4. 4 平成 23 年度評価意見 (1 / 2)

評価項目	評価に関する意見・コメント		
	計画進捗度	特に優れた成果等	その他当該研究に関するご意見等
<p>【年度計画】</p> <p>原子力施設全体において新基準地震動を用いた挙動解析を可能とするため、平成 22 年度 (2010 年度) に開発した弾塑性解析機能の高度化に向けた機構内施設の事例解析と機能評価を行う。</p> <p>また、三次元仮想振動台から出力されるテラバイト規模の膨大なデータから、耐震性評価において重要となる領域を瞬時に特定可能な大規模データ可視化解析技術を開発する。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 平成 23 年度計画は十分に達成している。三次元仮想振動台、大規模データの可視化の研究は計画以上の成果を出している。 三次元仮想振動台による耐震挙動解析は、アルゴリズムの改良および領域分割の最適化により、かなりの高速化を実現しており、計画通り進捗している。大規模データ可視化についても、時間軸を考慮したデータ解析で応力についての新しい知見が得られた。また福島対応については、W-SPEEDI において収束制の高いアルゴリズム (BiCGStab) を採用することにより計算を高速化、安定化することができた。全体的に順調に進捗している。 H23 年度計画を福島対応も行いながら着実に進めている。福島対応でも放射線量等データベースの開発及び分布マップの公開、W-SPEEDI の高速化等成果を上げている。 当初計画通り/それ以上の進捗度が伺える。 	<ul style="list-style-type: none"> 三次元仮想振動台により原子力施設の耐震安全性評価を実施し、従来の質点化モデルでは再現できない 5Hz 近傍のひずみピークを解析できた点は大きな成果である。 三次元仮想振動台において、東北太平洋地震の振動データを入力し、測定値をよりよく再現することが出来たことは注目に値する。将来的にはストレステストなどに応用される可能性がある。 福島対応において、核物質輸送シミュレーションコード W-SPEEDI を北半球全域規模に適用すると 1 カ月かかっても収束しなかったのに対し、2 時間で求解できるようにしたことは実用的意義が高い。 三次元仮想振動台による耐震性評価は従来の質量・ばねモデル系では得られない優位な結果をもたらした。 	<ul style="list-style-type: none"> 開発された三次元仮想振動台は高精度のものであることが示されたので、今後、種々の原子力プラントのストレステストへ応用すれば、信頼ある結果が得られると期待できる。JAEA として、本方法をもっとアピールしてもらいたい。 このような研究は世界中で行われていると思うが、その中で優位点や遅れている点などを明確に意識すべきだと思う。 三次元仮想振動台のより普遍的な性質を明らかにすると共に、その存在をより積極的にアピールすることに努めてほしい。三次元仮想振動台の名前は当該専門分野外の者には親しみが持てない。
<p>【年度計画】</p> <p>原子炉構造材料に対しては、照射によって生じるヘリウム及び空孔の粒界脆化効果を計算可能とするシミュレーション技術を開発する。</p> <p>アクチノイド化合物については、二酸化プルトニウムの第一原理計算結果を基に熱物性値を求める技術を開発する。</p> <p>機能材料については、絶縁体材料表面での熱電特性を計算するシミュレーション技術を開発する。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 平成 23 年度の計画は十分達成している。 原子炉構造材料の劣化については、マルチスケールシミュレーションにより、劣化メカニズムを原子・分子レベルから解明した。アクチノイド化合物については、電子の相対論効果、強相関晃華、多軌道効果を取り入れた計算を行い、実験データによく合う結果を得た。熱電および超伝導材料に関しては、電子の強相関効果を高精度に計算することが出来た。また福島対応については、ゼオライト等の除染剤の効果を原子分子レベルで明らかにするとともに、土壌の年度鉱物へのセシウム吸着を原子分子レベルで解明した。いずれも計画は順調に進捗している。 計画通り順調に進み、PuO₂ の高精度計算、第 1 原理計算の高速化の枠組等重要な成果が出ていると考えます。また福島対応のアンモニアが高い除染能力を持つ可能性があることを理論的に示したのは興味深い。 当初計画通り/それ以上の進捗度が伺える。 	<ul style="list-style-type: none"> PuO₂ の比熱の温度依存性を、これまで取り入れられていない励起状態の効果を含めて評価でき、実験値を再現できたことは優れた成果である。計算科学の重要性が示された。 センターが柏に移転したことにより、東大柏キャンパスとの連携が実現し、スーパーコンピュータを利用した第一原理計算などに関して、プラスの効果を生み出している。 PuO₂ の高精度計算により熱物性の正確な定量的予測手法を確立したこと、アンモニアがセシウム除染能力を持つことを理論的に示したことは特に優れた成果と考えます。 二酸化プルトニウムの第一原理計算結果を基にした熱物性値を求める計算技術開発 (マルチスケール手法) はこの分野で極めて独創的かつ応用の効く成果であるが、これに留まらずより高度なレベルの研究イニシアティブを発揮できるよう万全の体制で臨んでほしい。 	<ul style="list-style-type: none"> 計算科学を用い材料物性を基礎から研究することが、今後 JAEA 内でより大規模で実施する価値があることを、本成果をもとにもっとアピールしてもらいたい。 今後、「京コンピュータ」を活用する、より大規模で精密な研究が期待される。 ヘリウム及び空孔の粒界脆化効果の計算機シミュレーションについては、(例えば) ヘリウム元素の量子性を考慮するなどの問題の検討も重要な課題である。

表 4. 4 平成 23 年度評価意見 (2 / 2)

評価項目	評価に関する意見・コメント
<p>中期計画・年度計画にとらわれず、全体を通じて、当該分野の研究開発についてコメント（今後の方向性、改善点、その他）があればご記入の程お願いします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ 原子力プラントの安全性、信頼性の高精度評価には、計算科学をより発展することが重要であり、JAEA 内でソフト開発の重要性をより認識していただきたい。 ・ 機構内の他組織や、東京大学など外部との連携が積極的に行われるようになったことは高く評価したい。最先端の研究動向を踏まえ、競争力のある研究活動を期待する。とくに、京コンピュータを活用することにより、これまで出来なかったシミュレーションが可能になり、新しい知見が得られることが期待されており、その面での進展にも期待する。 ・ 福島原発の早期安全解決、除染、今後の地震、津波等の災害から既存原発安全性解析等の研究にさらに注力し、それらの成果を国民に分かりやすく発表していくことを御検討いただければと考えます。 ・ 中期計画・年度計画の進捗状況は予定通り/それ以上であるように伺える。これに加えて、H23 年度には、福島原発事故対応の臨時研究課題も行われたようであるが、研究員の増員なしで、純粋に研究課題を増やすやり方では、本来の研究（中期計画課題）と臨時の研究課題（福島原発事故に関する課題）のいずれもが中途半端あるいは、力量不足にならないとも限らない。研究員の増員が望めないのであれば、H24 年度は、思い切った全体の研究課題のシフトなども含めた有効な方策を講じることも検討する必要があるように思う。

4. 3 平成 24 年度（中間評価）

中期計画及び平成 24 年度計画に沿って実施した研究開発の実績について、平成 22 年度～平成 24 年度を総括した自己評価を表 4. 5（中列）にまとめた。また、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 3 に一覧を掲載する。

専門部会において、平成 22 年度～平成 24 年度の実績・成果を説明し、質疑応答等を経て議論した上で、専門委員からいただいた中間評価意見を表 4. 5（右列）に記載する。

This is a blank page.

表 4. 5 平成 22 年度～平成 24 年度を総括した自己評価及び専門部会評価意見 (1 / 3)

中期計画	具体的な研究課題と達成目標	自己評価		専門部会評価	
		評価	達成内容/今後の計画/評価理由	評価	ご意見等/妥当性確認/評価理由
I. 国民に対して提供するサービスその他の業務の質の向上に関する目標を達成するためとすべき措置					
4. エネルギー利用に係る技術の高度化と共通的科学技術基盤の形成					
(3) 原子力基礎工学研究					
6) 計算科学技術研究					
原子力施設の耐震性評価に資するため、グリッド等先端計算機システムを活用して、弾塑性解析技術を開発し、原子力施設全体において新基準地震動を用いた挙動解析を可能とする。	<p><u>原子力施設耐震性評価用仮想振動台技術の研究</u></p> <ul style="list-style-type: none"> 三次元仮想振動台に弾塑性解析機能を追加し、事例解析と検証を行う。 原子力施設全体の挙動を概要解析し、塑性化が予測される部分領域を詳細に解析するシミュレーション技術を開発する。 <p>三次元仮想振動台や J-PARC 等から出力される 100GB 規模のデータを即日解析可能とする機能を試作、評価する。</p> <p>テラバイト規模データから、注目すべき領域を瞬時に特定可能な大規模データ可視化解析技術を開発する。</p> <p>複雑な三次元構造を持つ機器や建屋の挙動を効率的に解析するために、構造物内部の物理量分布も対話的に確認できる可視化技術を開発する。</p>	【達成内容/今後の計画】	<ul style="list-style-type: none"> 三次元仮想振動台コードに、振動による塑性変形も含めて計算できる弾塑性解析機能を追加し、高温工学試験研究炉 (HTTR) の一部を対象とした 197 万自由度の弾塑性解析を実施するとともに、当該解析結果と加振実験の結果及び既存コードの解析結果とを比較し、一致することを確認した。さらに、東海研究開発センター核燃料サイクル工学研究所の再処理施設を対象に東北地方太平洋沖地震の地震波を入力データとした解析と機能評価を実施した。その結果、従来の質点系モデル解析では再現困難であった主要な卓越振動数が再現できるようになった。また、床応答値の水平分布や耐震壁の塑性ひずみ発生位置などの詳細な計算も可能となった。現在、計算時間短縮のため、施設全体の挙動を概要解析し、塑性化が予測される部分領域を詳細に解析する技術を開発中である。今後は、<u>フラジリティ評価等への活用に向け、改良や有用性例証を進める計画である。</u> マルチコア技術や分散処理技術を活用した大規模データの高速処理技術を開発し、三次元仮想振動台や J-PARC 実験から出力される 100GB 規模のデータの処理が 1 時間以内で可能であることを確認した。さらに、テラバイト規模のデータから注目すべき領域を瞬時に特定可能な可視化解析技術を開発するとともに、HTTR の一部を対象とした時刻歴応答解析データ (約 3TB) に適用し、応力が大きく変化する箇所を瞬時に特定できることを確認した。現在、三次元構造を効率的に解析するための可視化技術を開発中である。今後は、<u>開発した可視化技術を原子力施設全体規模の解析に適用し、評価・改良する計画である。</u> 三次元仮想振動台開発において、大規模有限要素解析に適した領域分割手法を考案し、日本計算工学会論文賞を受賞した (H22/6)。(6-1) また、注目すべき領域を瞬時に特定可能な大規模データ可視化解析技術に関連する論文で電気学会電子・情報・システム部門論文奨励賞を受賞した (H23/9)。 	【ご意見等】	<ul style="list-style-type: none"> 三次元仮想振動台に弾塑性解析機能を追加し、原子力施設全体の解析を目指す取り組みはこれまでのところ順調に進展している。しかし、現状で実証されているのは約 200 万自由度の解析であり、H24 年度に開発中のズームイン解析技術 (施設全体の挙動を概要解析し、塑性化が予測される部分領域を詳細に解析する技術) が目標達成のカギとなるので、その成果を見極めたい。 テラバイト (TB) 規模データから、注目すべき領域 (ROI) を瞬時に特定可能な大規模データ可視化解析技術は、独創性及び実用性が高い成果を創出している。なお、大規模データからリスク要因を検出する課題については、統計数理研究所、RIST、筑波大学などが研究を始めているので連携を検討してみてもどうか。

表4. 5 平成22年度～平成24年度を総括した自己評価及び専門部会評価意見(2/3)

中期計画	具体的な研究課題と達成目標	自己評価		専門部会評価	
		評価	達成内容/今後の計画/評価理由	評価	ご意見等/妥当性確認/評価理由
原子炉構造材料における劣化現象の解明、燃料関連アクチノイド化合物の物質特性の予測並びに高効率な熱電材料、電源材料及び超伝導材料の構造と機能の関係解明のための高精度シミュレーション技術を開発する。	<p>高精度シミュレーション技術の研究</p> <ul style="list-style-type: none"> 原子炉構造材料に対しては、合金・不純物元素(C, Mn)が粒界脆化効果に与える影響を評価するとともに、照射によって生じるHe及び空孔の粒界脆化効果を計算可能とするシミュレーション技術を開発し、材料中の転位が空孔や格子間原子などを吸収する速度を評価する。 アクチノイド化合物に対しては、核燃料・PuO₂中の酸素欠損の電子状態を計算可能とするシミュレーション技術を開発し、実験との比較を通して計算の妥当性を評価する。また、PuO₂の第一原理計算結果を基に熱物性値を求める技術を開発するとともに、核燃料中の酸素挙動をシミュレーションし、熱物性への影響を評価する。 機能材料については、鉄系超伝導材料を主な対象として、電子格子相互作用を評価可能なシミュレーション技術を開発し、量子ビーム実験との比較検証を行う。また、絶縁体材料表面での熱電特性や材料における表面及び界面構造と機能の関係を評価可能とするシミュレーション技術を開発する。 		<p>【達成内容/今後の計画】</p> <ul style="list-style-type: none"> 第一原理計算手法を用い、原子炉構造材料の主材質である鉄の結晶粒界にC及びMnが偏析した場合の水素脆化効果を評価し、C及びMnともにHの粒界偏析を抑制する一方、CはHの表面偏析を抑制し、MnはHの表面偏析を促進するという新知見を得た。また、照射によって生じるHe及び空孔の粒界脆化効果を計算可能なシミュレーション技術を開発した。現在、材料中の転位が空孔や格子間原子などを吸収する速度を評価している。今後は、これまでマイクロ・メソスケール解析で得られた知見をもとにマクロスケールでの解析を行い、代表的な照射脆化メカニズムの解明を目指す。 PuO₂中の酸素欠損に対し、相対論的効果及び強相関効果を含めた第一原理計算で電子状態を計算可能とする技術を開発し、酸素欠損による物性値変化(結晶定数や機械的特性の変化等)の計算結果と対応する実験結果との比較を通して、計算の妥当性を確認した。さらに、PuO₂の熱物性値(高温での比熱)を求める技術を開発し、計算結果と実験とを比較することにより、比熱へ重要な寄与を及ぼす諸要因として、Puの振動、Oの振動及び熱膨張のほか、ショットキー成分が重要であることを見だし、世界で初めて高温域(1400K)まで実験値を忠実に再現することに成功した。現在、核燃料中の酸素挙動をシミュレーションし、熱物性への影響を評価している。今後は、核燃料物質の物性予測を目指す。 鉄系超伝導材料を主な対象として電子格子相互作用を評価可能とするシミュレーション技術を開発し、SPRING-8における実験結果と比較した。その結果、開発した技術の妥当性を確認した。また、絶縁材料の熱電特性を計算するシミュレーション技術を開発した。表面に他の物質を接合した場合の特性も考慮し、表面状態の特異性により、熱伝導が結晶方位に対し、異方性を示す可能性があることを見いだした。これは、様々な絶縁材料の熱輸送特性を理解する上で重要な知見である。現在、表面及び界面構造と機能の関係を評価可能とするシミュレーション技術を開発中である。今後は、シミュレーションと実験の比較を通して物性機能と構造の関係解明を目指す。 構造材脆化研究に関連して、水素を精確に取り扱える分子動力学手法を開発し、分子化学会奨励賞(H22/9)及び分子シミュレーション研究会学術賞(H22/11)を受賞した(6-4)。また、機能材料研究の一環として実施したコード開発及び並列化に関する論文で日本応用数学会ベストオーサー賞を受賞した(H23/9)。さらに、最先端の計算機の性能を極限まで追求した計算機利用技術を開発し、技術普及に努めたなどの業績が顕著であるとして日本応用数学会業績賞を受賞した(H24/4)。 		<p>【ご意見等】</p> <ul style="list-style-type: none"> 原子炉構造材料における劣化現象の解明に向けたシミュレーションでは、第1期の成果(純粋な鉄)を高度化し、合金元素、不純物元素を含む系での評価を実現し、水素偏析に対する新知見を得たほか、き裂の進展に追従して破壊表面に吸着する「モバイル水素効果」を世界で初めて提案するなど、興味深い成果を上げ、産業界からも注目されている。また、水素を精確に取り扱える分子動力学手法は学術的にも高い成果である。 PuO₂中の酸素欠損に対し、相対論的効果及び強相関効果を含めた第一原理計算で電子状態を計算可能とする技術を開発したことは、電子相関が強い系での第一原理計算は困難とされていた従来の限界を打破し、計算科学の適用性拡大に繋がる成果である。 鉄系超伝導材料を主対象として新たな知見を発見し、興味深い成果を上げている。当該研究の一環として実施した計算機利用技術開発は、その普及も含め業績が顕著であるとして日本応用数学会業績賞を受賞しており第三者の評価も高い。 いずれの成果も、従来の計算科学の限界を打破し、高精度なシミュレーションを実現しており、計算科学という学術領域全般への貢献も高く評価できる。

表4. 5 平成22年度～平成24年度を総括した自己評価及び専門部会評価意見(3/3)

中期計画	具体的な研究課題と達成目標	自己評価		専門部会評価	
		評価	達成内容/今後の計画/評価理由	評価	ご意見等/妥当性確認/評価理由
(記載なし)	※東京電力福島第一原子力発電所事故対応		【達成内容】 <ul style="list-style-type: none"> 外部資金事業の一環として、放射性物質の分布状況の観測結果データベースの構築及び分布マップ公開に協力した。本業務には大量アクセスへの対応や改ざん防止等が急務となるため、計算機技術の研究者と情報セキュリティに詳しい技術者が一体的に取り組むことにより安定運用を実現した。データベースに関しては登録データを避難区域見直しの基礎データとして国に提出し、分布マップはピーク時には約10万人/日が閲覧するなど国民の高い関心に応えた。(F6-1) 土壌除染や汚染水処理を効率良く実施する手法の開発に資するため、第一原理計算手法を活用し、土壌粘土鉱物のセシウムイオン交換特性及びゼオライトのセシウム吸着能の評価を原子・分子レベルで明らかにする研究に着手し、土壌粘土鉱物(雲母様鉱物)のフレイドエッジサイトを原子・分子レベルで再現し、フレイド状態で初めてセシウムが強く吸着可能となることを発見したほか、生体内に放射性セシウムがどのように吸収され、どのように輸送されるかを解明するため、細胞膜上の陽イオン輸送タンパク透過能の評価に着手し、イオンチャネルの透過能を第一原理的手法にて世界で初めて評価した。これらのデータは環境中のセシウム挙動の把握や除染の高効率化に向けた基礎的知見となる。 		【ご意見等】 <ul style="list-style-type: none"> 福島原発の事故に対し、これまでの研究ノウハウを活用して、迅速に新たな取り組みに着手した点は、高く評価する。とくに土壌(粘土鉱物)への放射性セシウム吸着について、カリウムとの交換エネルギーを定量的に算出し、そのメカニズムの解明に役立つ知見を得たこと、セシウムのゼオライト吸着や細胞膜輸送特性のシミュレーションは学術的にも高い成果である。 計算科学は、実験や観測が困難な事象についても解析出来る可能性を有することから、今後とも福島対応では多様なニーズがあり得る。他方、福島対応が優先されることで実験や観測が手薄になった既存研究においても計算科学への期待が高まる可能性もあり得る。このため、適切なりソースが提供されることを条件として、今後とも計算科学の適用先を幅広く検討し、引き続き積極的に福島原発事故に対応することを強く期待する。
	【計算科学技術研究の評価】	S	【評価理由】 <ul style="list-style-type: none"> 「具体的な研究課題と達成目標」に記載した項目と内容の達成に向け、順調に遂行している。さらに、大規模データの高速処理技術開発ではJ-PARC実験で生成された100GB規模のデータ処理で従来2.5日を要していた処理を10分に短縮するなど劇的な効率化が期待できる成果を挙げ、PuO₂の熱物性予測では相対論的効果及び強相関効果を含めた第一原理計算を実現し、世界で初めて高温域(1400K)まで実験値を再現するなど目標を上回る成果を挙げている。また、限られた人的資源で「中期計画」を推進しつつ、福島技術本部と連携し、東京電力福島第一原子力発電所事故への対応にも取り組み、国や国民のニーズに応えている。 	S	【妥当性確認/評価理由】 <p>「具体的な研究課題と達成目標」に記載された項目と内容の達成に向け、順調に進捗している。さらにアクチノイド化合物の高精度シミュレーションで、相対論的効果及び強相関効果を含めた第一原理計算を実現したことによりPuO₂の熱物性について世界で初めて高温域まで実験値を再現するなど、従来の計算科学の限界を打破する成果を上げており高く評価する。また、開発した技術の普及に努め、計算科学分野の底上げにも貢献しており、日本応用数理学会業績賞受賞など第三者の評価も高い。</p>

【補足】評価区分(S~C)の説明

評価	評価基準
S	特に優れた実績を上げている。
A	計画通りまたは上回って履行し、目標に向かって順調、または目標を上回るペースで実績を上げている。 (計画達成度 100%以上)
B	計画通りに履行していると言えない面もあるが、工夫や努力によって、計画を達成し得ると判断される。 (計画達成度 70%以上 100%未満)
C	計画の履行が遅れており、目標達成のためには業務の改善が必要である。 (計画達成度 70%未満)

4. 4 平成 25 年度

中期計画及び平成 25 年度計画に沿って実施した研究開発の実績について、表 4. 6 にまとめた。また、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 4 に一覧を掲載する。

専門部会において、表 4. 6 の内容を説明し、質疑応答等を経て議論した上で、専門委員からいただいた評価意見を表 4. 7 に記載する。

This is a blank page.

表4. 6 平成25年度研究開発実績及び成果の意義等(1/2)

	中期計画	H25 年度計画	H25 の実績・成果	成果の意義	評価の視点【注】、特に優れた成果等
1	原子力施設の耐震性評価に資するため、グリッド等先端計算機システムを活用して、弾塑性解析技術を開発し、原子力施設全体において新基準地震動を用いた挙動解析を可能とする。	開発した弾塑性解析機能の妥当性を評価するために、機構内実験施設の地震観測データ等と計算結果を比較し、機能の確認と検証を行う。 また、耐震解析結果等のスーパーコンピュータ上の大量データを効率的に分析するため、平成23年度(2011年度)及び平成24年度(2012年度)に開発したデータ可視化技術を並列分散技術により統合し、利用者の手元で対話的に可視化できるシステムを構築する。	○開発した弾塑性解析機能の妥当性を評価するために、機構内実験施設を対象とし、東北地方太平洋沖地震時の地震波を入力とした応答解析を完了した。また、地震観測データや既存計算結果との比較を実施し開発した弾塑性解析機能の確認を行った。現在、さらに壁のひび割れ箇所等の情報を整理中。 ○平成23年度に開発した大量データから重要な領域(例:耐震性評価における塑性化領域)を抽出する技術、および、平成24年度に開発した複雑な三次元構造をもつ機器や建屋のデータを透過的に可視化する技術に関し、並列分散技術を適用することでスーパーコンピュータと利用者端末間のデータ転送量の低減を実現し、遠隔可視化を対話的に実施可能なシステムを開発した。 ○開発したシステムを数テラバイトの耐震性評価解析データに適用し、大量データを転送することなく利用者の手元で対話的に可視化できることを確認した。	○観測結果と解析結果の比較結果より、原子力施設の耐震性評価に対する三次元仮想振動台の弾塑性解析機能の有用性を例示。 ○従来手法では耐震解析結果等のスーパーコンピュータ上の大量データを利用者端末まで転送するデータ転送時間、および、転送した大量データを保存するディスク容量が解析作業のボトルネックとなっていたが、並列分散技術によってこの問題を解消したことで、遠隔地における大規模データの解析作業を大幅に効率化できる。	○安全研究センターと連携して、耐震余裕評価に必要な入力データの整備を完了した。 ○HTTRからの要請に基づき、圧力容器モデルの耐震評価結果検証のための入力地震動データとして、3次元建屋モデルの応答結果を提供した。 ○建設部と協力し、仮想振動台に新規履歴モデルを導入したことで、免震建物の擁壁への衝突解析を実現した。 ○文部科学省 HPCI 戦略プログラムに戦略機関として参画し、「京」を活用した耐震シミュレーション技術を開発した。本技術を用いて、HTTRの観測データ再現解析の検証を進めるとともに、産業界と連携しポンプや化学プラントの詳細な一体解析を実施した。 ○外部資金研究として実施している文科省イニシアティブの確率的リスク評価の高度化に関する研究開発において、柏崎刈羽原子力発電所7号機建屋の3次元モデルを整備し、感度解析を実施して機器のフラジリティ評価にかかわる重要パラメータを選定した。 ○文科省平成25年度高性能汎用計算機高度利用事業『HPCI戦略プログラム』分野4「次世代ものづくり」に参画し、京コンピュータにおける大規模流体計算技術の開発を実施した。また、開発した計算技術およびこれを用いた応用研究によって SC13 Best Poster Award、日本物理学会若手奨励賞を受賞した。 ○これまでに開発したデータ可視化技術を燃料溶融複雑系シミュレーション(原子力基礎工学部門)、および、核融合プラズマ乱流シミュレーション(核融合研究開発部門)に適用し、その有効性を例証した。特に、後者についてはデータ転送が困難な規模の京コンピュータ上の大量データを並列分散技術によって可視化することに初めて成功した。
2	原子炉構造材料における劣化現象の解明、燃料関連アクチノイド化合物の物質特性の予測並びに高効率な熱電材料、電源材料及び超伝導材料の構造と機能の関係解明のための高精度シミュレーション	原子炉構造材料については、鉄鋼材料の粒界脆化につながる不純物の拡散偏析を予測するシミュレーション技術を開発する。	○炉鋼材中の不純物偏析による粒界脆化効果を評価するため、不純物粒界偏析量を予測するレート方程式シミュレーションコードに高温時の熱拡散偏析を担う空隙ドラック(引きずり)効果を取り入れた。 ○開発したコードを用い、不純物粒界偏析量の温度等のパラメータに対する依存性を評価し、熱拡散による不純物偏析予測が可能であることを確認した。	○従来の理論解析では、照射効果による(格子間原子による)拡散のみが考慮されていたが、今回、初めて、熱拡散の効果を考慮し且つ、数値シミュレーションに取り入れることに成功。 ○軽水炉材料における粒界偏析シミュレーションの精度向上とともに、高速炉や核融合炉材料等、より高い運転温度の炉材料における粒界偏析シミュレーションの精度向上にも適用可能であることが判明。 ○コード開発のため発案した手法は、原子力材料中に含まれる多様な溶質及び不純物元素への拡張が見込まれる。現実的な材料組成での拡散偏析評価への道を拓く。	

表4. 6 平成25年度研究開発実績及び成果の意義等(2/2)

	中期計画	H25年度計画	H25の実績・成果	成果の意義	評価の視点【注】、特に優れた成果等
	技術を開発する。	アクチノイド化合物については、ウラン、ネプツニウム、アメリシウムの各二酸化化合物の熱物性値を求める技術を開発する。	○酸化核燃料の高温物性評価のため、ウラン、ネプツニウム、アメリシウムの各二酸化化合物に対し、格子振動に由来する比熱を第一原理計算から算出した。 ○格子振動以外の成分についても計算を実施し、実験値とのずれを最大でも10%以内に抑えることに成功した。	○プルトニウムはもとより、ウラン、ネプツニウム、アメリシウムも含めて酸化アクチナイド(核燃料構成物質)の高温での比熱を計算科学で評価できることを初めて明らかにした。 ○核燃料構成物の大半をカバーしたことで、混合物の計算が可能になれば、計算による評価が困難であった核燃料自体の評価が可能となる(来年度実施予定)。	○国際会議 ACTINIDES2013(7/21-7/26)においてポスター賞受賞。 ○原子力学会出版の「アクチノイド物性研究のための計算科学入門」の執筆・出版。 ○アクチノイド計算科学スクールの講師を務める等の実績により、理事長表彰「模範賞」を受賞。
		機能材料については、界面超伝導状態を求め、その機能を評価可能な計算技術を開発する。	○物質界面での有用な機能を探査するため、界面での超伝導特性を評価可能な理論を構築した。 ○界面にて重要となる効果(スピン軌道相互作用)を取り入れた材料物性評価手法を開発し、新しい超伝導理論の枠組みを構築した。	○界面で特有な量子状態を示す物質群の機能を明らかにするため、最も困難と目されている超伝導機能を記述する理論の構築に成功。 ○従来の知見と異なり、超伝導磁束量子がスピン分極するという新概念を提案。	○関連論文が日本物理学会の英文論文誌の Most Cited Articles in 2012 from Vol.80(2011)に選出。
3	無し	無し(計算科学のこれまでのノウハウを活用して、福島技術本部の活動を支援)	○福島県、京都大学、福島技術本部と連携し、福島県空間線量率測定事業を推進し、福島県下を走行する路線バスに車載型空間線量率測定器を搭載して、測定データの集約、補正、可視化処理を自動化することで、地域住民の居住エリアにおける空間線量率情報を迅速に発信する福島県空間線量率測定情報発信システムの本格運用を開始した。 ○福島技術本部と連携し原子力規制庁より受託して進めている、平成25年度東京電力福島第一原子力発電所事故による環境モニタリング等データベースの構築を完了し、11月より一般公開を開始した。	○公共交通機関に測定器を搭載し、データ集約、補正、可視化に係る処理を自動化することで、福島県内に地域する住民にとって関心の高い身近な空間線量率分布情報や経時変化情報をタイムリーに発信するとともに、空間線量率測定事業の運用コストを大幅に低減し、今後長期にわたる測定が要求される測定に対する一つの解決策を示した。 ○福島技術本部と連携し、これまで各省庁、自治体が独立に公表していたため測定結果の相互比較が困難であった福島第一原発事故に係る環境モニタリングデータを集約、統合したナショナルデータベースを構築して、統一的形式でデータを公表することで、環境モニタリングデータの相互比較を可能とした。	○福島県空間線量率測定情報発信システムの一般公開に関するプレス発表を実施し、5件(NHK 全国版、地方版、福島中央テレビ、テレビユー福島、福島テレビ)のテレビ報道および3社(読売新聞、福島民友、福島民報)の新聞掲載が行われた。 ○福島県空間線量率測定情報発信事業が、テレビ東京の番組(ワールドビジネスサテライト「放射線見極め除染せよ」)において紹介された。 ○これまで福島県4市を対象に実施していた福島県空間線量率測定事業を福島県全域に事業拡大することに伴い、H25年1月に福島県と共同でプレス発表を実施。 ○規制庁より「平成25年度東京電力福島第一原子力発電所事故による環境モニタリング等データベースの構築」事業を受託した(350百万円/年)。 ○福島県空間線量率測定システムおよび環境モニタリングデータベースの構築において得られた成果に基づき、IAEAが主導する国際協力研究事業(食糧・農業に影響を及ぼす原子力災害への対策)に「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」を提案し、採択された。

【注】評価の視点:原子力機構における自己評価の際の視点

○原子力研究開発の科学技術基盤を維持・強化し、新たな原子力利用技術を創出するため、年度計画に基づき、社会のニーズを踏まえつつ、適切に研究開発を進めるなど、中期計画達成に向けて当該年度に実施すべきことを行ったか。

☆研究プロジェクトについて、優先度を踏まえた上で整理統合を行い重点化したか。

表 4. 7 平成 25 年度評価意見 (1 / 3)

評価項目	評価に関する意見・コメント		
	計画進捗度	特に優れた成果等	その他当該研究に関するご意見等
<p>【年度計画】 開発した弾塑性解析機能の妥当性を評価するために、機構内実験施設の地震観測データ等と計算結果を比較し、機能の確認と検証を行う。また、耐震解析結果等のスーパーコンピュータ上の大量データを効率的に分析するため、平成 23 年度 (2011 年度) 及び平成 24 年度 (2012 年度) に開発したデータ可視化技術を並列分散技術により統合し、利用者の手元で対話的に可視化できるシステムを構築する。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 三次元仮想振動台による振動数分布は実測データとよく一致しており、建物のひび割れ予測にも適用されている。データの可視化技術開発についても、並列分散技術を用いたシステム構築を完了しており、25 年度の計画は十分クリアしている。 三次元モデルによるシミュレーションにより、機構内実験施設の地震に対する応答の観測データ (「施設の地震観測データ」という表現は誤解しやすいので注意) が再現された。また、三次元複雑構造物などのシミュレーション結果を、粒子モデルによって高い並列効率でレンダリングおよびデータ転送・表示を行うことができた。また福島対応として、路線バス等による空間線量を測定し、これを標準化する XML 形式を定め、国際的にも提案・採択した。いずれも、計画は順調に進捗していると見なされる。 弾塑性を考慮した大規模 3 次元耐震解析コードが計画通り開発された。大規模データの可視化ができるようなツールが計画通り開発された。 研究計画は 100% 達成されている。福島対応では、短期間で実用性の高いシステム構築を達成しており、高く評価できると考えます。 いずれも当初の目標を達成したと評価される。 	<ul style="list-style-type: none"> 三次元仮想振動台の研究開発は今後、原子力プラントの耐震性評価に力を発揮すると期待される。可視化技術の開発とあわせて、本成果を多くの電力、メーカ、研究書等に使えるようにしてもらいたい。非常に優れた研究成果と評価します。 仮想実験台による三次元シミュレーションが、単純な質点系のモデルよりもはるかに精度の高い結果を出したことは優れた成果である。種々の施設や、異なる地震動などのケースに対してシミュレーションを行い、実験との対応について定量的に分析することが期待される。 大規模 3 次元耐震解析に関しては、実際の東日本大震災時の核燃料施設の建屋の解析を実施し、その破損状況を説明できるような結果が得られ、先端的かつ有用な研究成果であると評価できる。データ可視化については、国内の最新技術を導入することで、高速で効率的な可視化が可能になり、先端的かつ実用的は研究成果であると評価できる。(大量データの効率的分析に関連して) 路線バスを利用した環境放射線のモニタリングの実装を行うといった、福島事故に対する直接的な高い貢献を行った。 三次元仮想振動台については、現実の複雑な建屋の振動の観測データの再現に成功しており、極めて実用性の高い成果が得られていると考えます。大規模データの可視化技術に関しては、24 年度の可視化技術に続き、対話的可視化が可能な技術開発に成功しており、これも極めて実用性の高い成果と考えます。空間線量率測定および放射線量分布データベースは JAEA 殿の重要な社会貢献の 1 つと考えます。 ①三次元仮想振動台における弾塑性解析機能評価試験の周波数成分解析結果が実在観測データを良く再現したこと。②スパコンと PC 間のデータ転送量の大幅削減と画像生成時間の大幅短縮が得られたこと。①および②は汎用性があることから眼下の研究対象のみならず基盤ソフトウェア技術として世に出させるべく成果の戦略的利活用を期待する。 	<ul style="list-style-type: none"> 研究成果をもっと PR してもらいたい。機構の中でも、非常に優れた成果だと考えます。 PBVR については、どのようなデータに対し適用可能かを明確にし、何らかの形でオープンにし、利用を広めるべきである。また、環境モニタリングの標準 XML 形式については、EMML (例) などの名前をつけ、さらに普及に努めることが期待される。 研究開発および福島対応においては申し分のない成果が得られたと高く評価させていただきます。また計算科学技術が社会にとって非常に重要な技術・知見を提供できるものであることを改めて示す良い例であると考えます。これを踏まえ、以下の点を申し上げておきたい。①仮想振動台の適用先は当面 JAEA 殿の所内ニーズに限られているように見受けられるが、広く国内 (あるいは必要があれば国外) の原子力施設に適用できる重要な技術と考えます。規制に絡む適用の場合には V&V などの問題も生じるかもしれないが、そのような可能性も含めて、広く国内の原子力施設への適用を視野に入れたアピール・調整・戦略などを、研究活動と平行して進めていただければと思います。②可視化技術については、24 年度、25 年度において大規模複雑構造物の中でどの部位に注目すべきか、全体挙動はどうなるのか、といった情報を用意に入手できる技術が確立された。一方で、特定された部位を詳細に定量的に分析する技術が必要であるが、これに関しては新たな技術開発は必要なのか、ご検討いただきたい。(すでに技術開発は終了しているのかもしれませんが。) ③もう 1 点、可視化技術については、汎用的な技術として広く普及を図ることも国立研究所の重要な使命ではないかと考えます。これについても基礎工学部門や核融合部門など所内連携にとどまっていますが、外部への技術の普及ということも進めていただければと思います。 福島対応に関する研究成果については、マスメディアへの配慮としても、成果の性格を十分分かり易いように説明を果たす努力が期待される。

表 4. 7 平成 25 年度評価意見 (2 / 3)

評価項目	評価に関する意見・コメント		
	計画進捗度	特に優れた成果等	その他当該研究に関するご意見等
<p>【年度計画】 原子炉構造材料については、鉄鋼材料の粒界脆化につながる不純物の拡散偏析を予測するシミュレーション技術を開発する。アクチノイド化合物については、ウラン、ネプツニウム、アメリシウム各二酸化化合物の熱物性値を求める技術を開発する。機能材料については、界面超伝導状態を求め、その機能を評価可能な計算技術を開発する。</p>	<ul style="list-style-type: none"> 原子炉構造材料における劣化現象の解明、燃料関連アクチノイド化合物の物質特性の予測並びに高効率な熱電材料、電源材料及び超伝導材料の構造と機能の関係解明のための高精度シミュレーション技術の開発の3課題とも 25 年度の計画をすでに達成していると評価します。 鉄鋼材料の放射線下の粒界脆化について、空孔の効果も入れた不純物移動のシミュレーションにより、従来モデルより精度の高い結果を得た。アクチノイド酸化物、とくに磁性秩序のある化合物について、計算方法の工夫により比熱の温度変化を再現できた。熱電材料および超伝導材料について、電子の強い相関をいれたシミュレーション技術を高度化した。福島対応では、セシウムの土壌吸着機構を解明した。いずれも、計画通り順調に進捗していると見られる。 原子炉材料の劣化に関わる分子・原子レベルの基礎的プロセスの研究、核燃料の物性予測の研究、熱電及び超伝導材料に関する研究など、材料シミュレーションに関する当初の計画に対して研究は着実に進捗している。 研究計画は 100%達成されている。福島対応では、セシウム吸着の形態を明らかにし、今後の除染技術開発の方向性を示す重要な成果と考えます。 中期計画当該年度 (25 年度) の研究計画は当初の目標を十分に達成したと評価される。 	<ul style="list-style-type: none"> ショットキー成分を考慮した比熱の計算科学技術の進展、トポロジカル物質の表面での熱流・スピン流のシミュレーション技術の開発等、優れた成果を出されています。 リン等の不純物粒界偏析の評価において、空孔ドラッグ効果の重要性を指摘し、軽水炉では効果が小さいが、高速炉や核融合など高温での運転においては影響が大きいことを見出した事は優れた成果である。 多数のジャーナル論文を発表するなど、学術的な成果の発信について高く評価できる。セシウムの土壌汚染のメカニズムの解明に資する知見を得るなど、福島事故に対する学術的に優れた貢献を行った。 原子炉構造材料・劣化現象に関しては、着実に成果が得られていると考えます。酸化物燃料に関しては、核燃料という取扱いに高度な技術が必要な分野において計算科学が果たす役割は大きいと思います。その意味で、精度上まだ若干の改善の余地があるとはいえ、実験結果を実用的な範囲内で再現できる技術を確立した意義は非常に高いと考えます。材料科学研究の中で、第一原理計算技術は欠くことのできない技術となっています。その中で、機能材料の研究に向けた大規模第一原理計算技術を確立したことは高く評価できると考えます。 ①アクチノイド酸化物の熱物性の定量予測を可能とする計算手法の開発から酸化物核燃料の物性予測に確かな道を拓いた。②計算化学の手法を用いて Cs 汚染廃棄土壌の吸着機構の科学的理解に貢献した。 	<ul style="list-style-type: none"> 基礎的・基盤的な計算科学の研究であり、機構の中でこのような分野を今後とも伸ばしてもらいたい。 セシウム土壌吸着機構の研究は進んでいるが、今後、汚染土壌の減量化にどのように活かして行くかが課題である。 セシウム吸着の研究は、福島対応という JAEA 殿の重要な事業の中でも計算科学が果たした非常に意義のある成果だと思いますので、ぜひこの先の実用化に向けてさらに計算科学技術の適用を進めていただきたいと思います。原子炉材料の研究に関しては、26 年度からのマクロ物性につながる研究が正念場と考えます。良い成果を期待します。一方、研究成果のご説明を伺う限り、研究対象 (あるいは考えている応用先) がやや曖昧で発散している印象を受けました。これはシミュレーション技術開発がプロジェクトの目的であるためかもしれませんが、研究計画のゴールが「マイクロ→メゾ→マクロ解析」(いわゆるマルチスケール解析)であることを考えると、ある程度対象を絞り技術の有用性を具体的に示せるような方策をとることも1つの方法ではないかと考えます。また、酸化物燃料や機能材料で開発されている第一原理計算の技術が材料劣化研究で使われていないことには、いささかもったいない感じもいたします。 研究成果の性格によっては実験との照合がなくとも科学の新規性・先進性の観点から価値がある場合もある。この場合の成果の信憑性については別の観点から行う。

表4. 7 平成25年度評価意見(3/3)

評価項目	評価に関する意見・コメント
<p>中期計画・年度計画にとらわれず、全体を通じて、当該分野の研究開発についてコメント(今後の方向性、改善点、その他)があればご記入の程お願いします。</p>	<ul style="list-style-type: none"> ・ 計算科学の分野は非常に基礎的な学問分野であり、基礎的な原理に戻り、物理現象を理解し、さらには新しい物質、研究分野を開拓することは、機構の重要な役割の一つと考えます。今後とも、この分野の更なる発展を期待します。 ・ 全体的に、自分たちの研究結果についてはよく記述されているが、同様な研究は国内・国外で行われている可能性が高いので、それらをよく精査し、自分たちの成果がその中でどう位置づけられるかについて検討すべきである。 ・ 福島原発事故では、津波波高の予測、耐震解析、放射性物質の大気拡散解析、過酷事故解析など、計算科学技術に関する多くの問題が明らかになったが、これは計算科学技術が原子力にとって重要性を増していることの証でもある。そして、計算科学技術は、核燃料、熱流動、安全、材料科学など原子力におけるさまざまな分野に共通的である。従って、計算科学技術に関する基礎的な研究はもとより、その工学的な研究についてはこれからも原子力研究開発機構の他の部門と連携しながら広がりを持って進めてほしい。福島事故に対する直接的な貢献についても、これまでと同じく進めていってほしい。 ・ 計算科学技術は今後の技術の中核をなす技術であることは明確です。JAEA 殿が原子力分野での中核国立研究所であることを考えれば、原子力分野の計算科学技術を強く牽引する役割をぜひとも果たしていただきたいと思います。ヨーロッパや米国では原子力材料に関する計算科学研究に大きな資金が付き、大学を交えた巨大プロジェクトの中で技術開発が強力に進められています。ORNL では CASTLE のような材料劣化・燃料・熱流動・構造を含めた大規模計算科学プロジェクトが進んでおり、エネルギー機能材料も含めれば、米国には Materials Genome Initiative のような国家主導の計算科学プロジェクトが推進されています。システム計算科学センター殿が目指されている方向と基本的な違いはないと思っていますので、大学等(場合によっては産業界)との連携のもと「主導的な役割」をぜひとも果たしていただきたいと思います。 ・ 計算科学センターの研究の成果として考えた場合、当該年度の計画の達成度なり進捗度が善過ぎるのは必ずしも手放しでは歓迎されない。当センターの役割として、計算科学の将来発展を導く姿勢も重要であると考えます。計算条件や精度の改善、計算資源(スパコン)計画などについても積極的に取り組んでほしい。

4. 5 平成 26 年度（事後評価・事前評価）

中期計画及び平成 26 年度計画に沿って実施した研究開発の実績について、平成 22 年度～平成 26 年度を総括した自己評価を表 4. 8（左列）まとめた。また、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 5 に一覧を掲載する。

専門部会において、平成 22 年度～平成 26 年度の実績・成果を説明し、質疑応答等を経て議論した上で、専門委員からいただいた第 2 期中長期目標期間に対する事後評価意見を表 4. 8（右列）に記載する。

さらに、以下に示す計算科学技術研究における今後の取組について、第 3 期中長期目標期間に向けた自己評価と専門部会の事前評価意見を表 4. 9 にまとめた。



第3期中長期計画

事前評価

○中長期計画(目的、実施内容)

目的:

実験や観測が困難な原子力分野の諸現象の解明、予測に計算科学で貢献

実施内容:

- ① 原子炉過酷事故解析や環境影響評価など、工学系、生態系をも含む複雑現象のシミュレーション技術を開発
- ② ①に向けて、これまで蓄積してきた原子・分子レベルの挙動解析技術を発展
- ③ ①に必要な大規模計算技術、大規模データ解析技術を開発
- ④ 耐震評価用三次元モデルにおいて、モデル化因子が解析結果に与える影響を評価するためのデータを取得

第2期 ⇒ 原子・分子レベルの基本的現象を高精度にシミュレーションする技術
福島支援研究を通じて得た実社会及び実環境下での複雑現象解析技術

第3期 ⇒ 第2期の経験・知見を融合させ計算科学の新たな可能性を先導



第3期中長期計画

事前評価

○実施計画・体制(職員:17名)

年度	H27	H28	H29	H30	H31	H32	H33
複雑現象のシミュレーション	過酷事故における過酷現象のシミュレーション技術の開発	過酷事故における過酷現象のシミュレーション技術の開発	過酷事故における過酷現象のシミュレーション技術の開発	過酷事故における過酷現象のシミュレーション技術の開発	過酷事故における過酷現象のシミュレーション技術の開発	過酷事故における過酷現象のシミュレーション技術の開発	過酷事故における過酷現象のシミュレーション技術の開発
分子・原子レベル挙動解析	シミュレーションの精度向上のための基礎技術の開発	シミュレーションの精度向上のための基礎技術の開発	シミュレーションの精度向上のための基礎技術の開発	シミュレーションの精度向上のための基礎技術の開発	シミュレーションの精度向上のための基礎技術の開発	シミュレーションの精度向上のための基礎技術の開発	シミュレーションの精度向上のための基礎技術の開発
大規模計算技術	大規模計算技術の開発	大規模計算技術の開発	大規模計算技術の開発	大規模計算技術の開発	大規模計算技術の開発	大規模計算技術の開発	大規模計算技術の開発
耐震評価用三次元モデル	耐震評価用三次元モデルの開発	耐震評価用三次元モデルの開発	耐震評価用三次元モデルの開発	耐震評価用三次元モデルの開発	耐震評価用三次元モデルの開発	耐震評価用三次元モデルの開発	耐震評価用三次元モデルの開発

○他機関・部署との連携

- ・ IAEA(国際原子力機関)及びCEA(仏国原子力庁)との国際連携
- ・ 放射性物質の環境影響評価、汚染土の処理等に関する知見を有する米国UCB(カリフォルニア大)、PNNL(パシフィックノースウエスト国立研究所)との国際連携
- ・ 計算科学の先駆的な研究を行っているポスト京計画参加機関、東京大学等の連携
- ・ ゼネコン、メーカー等産業界との連携 …など、積極的に連携を展開

This is a blank page.

表4. 8 平成22年度～平成26年度を総括した自己評価及び専門部会事後評価意見(1/2)

自己点検		専門部会評価	
自己点検内容	自己評価	評価	評価理由/ご意見
<p>(1) 研究開発の達成度(成功・不成功の原因の把握・分析)</p> <p>○原子力施設耐震性評価用弾塑性解析技術の研究では、</p> <ul style="list-style-type: none"> ・三次元仮想振動台コードに弾塑性解析機能を追加し、機構の再処理施設の東北地方太平洋沖地震時観測データ等と比較し、妥当性を確認するとともに、計算時間短縮のため、施設全体の挙動を概要解析し、塑性化が予測される部分領域を詳細に解析する技術(二段階解析手法)を開発し、従来は困難とされていた規模の弾塑性解析に成功した。 ・大規模計算データの効率的な解析に必要な技術として、高速データ処理技術やテラバイト規模のデータから注目すべき領域(ROI)を瞬時に特定可能な大規模データ可視化解析技術等を開発した。 <p>○高精度シミュレーション技術の研究では、</p> <ul style="list-style-type: none"> ・第1期の成果(純粋な鉄)を高度化し、合金元素、不純物元素を含む系での評価を実現し、水素偏析に対する新知見を得たほか、き裂の進展に追隨して破壊表面に吸着する「モバイル水素」による強い脆化効果を世界で初めて提案した、粒界の原子間結合力が鉄鋼材料の破壊靱性値に大きな影響を及ぼすメカニズムを明らかにしたなど、新たな知見を得た。 ・アクチノイド酸化物(混合酸化物を含む)に対し、相対論的効果及び強相関効果を含めた第一原理計算で電子状態を計算可能とする技術を開発し、電子相関が強い系での第一原理計算は困難とされていた従来を打破した。 ・鉄系超伝導材料を主対象として電子格子相互作用を評価可能とするシミュレーション技術を開発し、SPring-8での実験結果と比較し、妥当性を確認した。また、トポロジカル超伝導体の特異な熱伝導率異方性を示す、超伝導磁束量子がスピン分極するといった新たな知見を得た。 <p>○福島第一原子力発電所事故対応では、</p> <ul style="list-style-type: none"> ・国からの受託事業の一環として、放射線量等の観測結果データベース(DB)の構築及び分布マップ公開に協力した。DBに関しては登録データを避難区域見直しの基礎データとして国に提出し、分布マップはピーク時には約10万人/日が閲覧するなど国民の高い関心に応えた。 ・土壌(粘土鉱物)への放射性セシウム吸着について、高精度シミュレーション研究のノウハウを活用し、吸着エネルギーの算出、共有結合性を有するケースの存在、典型的な粘土鉱物表面を類型化し各代表面に対するセシウムの吸着位置プロファイルを求めるなど、吸着メカニズムの解明に役立つ知見を得た。 <p>以上、従来、計算科学の限界を打破する計算技術を開発し、それによって種々の新知見を導出したことを踏まえ、顕著な成果が得られたと評価した。</p> <p>なお、成功の原因については、</p> <ul style="list-style-type: none"> ・従来困難とされてきた計算を実現するには、計算機の性能を極限まで引き出す必要があり、対象とする現象の理論に近いところから、計算手法、計算機ハードウェア、ネットワーク技術等の研究者・技術者の一体的な協力体制(計算技術、計算機技術、IT基盤技術の三位一体)の構築 ・国の京コンピュータ計画に参画することで最先端の計算機を活用可能な環境を整備 <p>が有効であったと分析している。</p>	A	A	<p>・従来を打破する技術が開発され、有用性や独創性の高い顕著な成果が創出された。</p>
<p>(2)効果・効用(アウトカム)、波及効果(インパクト)</p> <p>○原子力施設耐震性評価用弾塑性解析技術の研究では、東北地方太平洋沖地震後の機構内施設の耐震性評価の妥当性を裏付けるデータとして、三次元解析結果が活用された。開発した大規模三次元解析計算技術を基に、モデル化手法を確立することで、実用化に向けた取組みに進むことが期待できる。</p> <p>○可視化技術を含む大規模データ解析技術の開発では、耐震性評価の解析はもとより、J-PARC 実験結果の解析、核融合プラズマ安定性解析等を劇的に高速化し、解析の効率化に貢献した他、震災後は燃料熔融解析、放射性物質環境動態、地下水・汚染水挙動解析にも活用された。多様な計算機上で動作するように整備し、一般公開することで、大規模可視化解析の分野での多大な貢献が期待できる。</p> <p>○高精度シミュレーション技術の研究では、従来、計算科学の限界を打破し、高精度なシミュレーションを実現しており、日本応用数学会の論文賞及び業績賞を受賞するなど、計算科学という学術領域全般への大いに貢献したと評価した。また、その結果、鉄鋼材料の脆化や超伝導体に関して従来、定説を覆すような新知見を得て、「Nature Physics」等IFの高い雑誌への掲載や日本物理学会英論文誌の「2012 Most Cited Articles」、「Editor's Choice」、英国物理学会の注目論文「IOP Select」に選出されるなど、各学術分野で注目されるインパクトのある成果を創出したと評価した。</p> <p>○高精度なシミュレーションを実現するために開発した高精度計算ルーチン群については、国策である京コンピュータのユーザ団体からも要請を受け、一般公開しており、我が国の競争力向上にも貢献したと評価した。</p> <p>以上、耐震性評価用弾塑性解析、可視化技術では機構内を中心に着実に効用が積み上げられ、今後の取組みにより機構外での貢献、将来的な成果の創出が期待できること、高精度シミュレーション技術では、学術的インパクトの高い、顕著な成果が得られたと評価した。</p>	A	A	<p>・アウトカム、インパクトに加え、適用範囲の広さ、今後の成果創出の期待とも大いに評価できる。</p>

表 4. 8 平成 22 年度～平成 26 年度を総括した自己評価及び専門部会事後評価意見 (2 / 2)

自己点検		専門部会評価	
自己点検内容	自己評価	評価	評価理由/ご意見
<p>(3) 他機関・部署との連携の妥当性</p> <p>○国内機関との間で毎年 12～16 件、国外機関とは 5 件程度の共同研究・協力協定を実施し、研究開発の効率化に努めた。また、東日本大震災以降は 1F 事故対応等、当初予定になかった分野のシミュレーションが必要になったが、関連するノウハウを持つ大学や研究機関との連携体制を迅速に構築し、円滑に研究を推進できた。</p> <p>○機構内連携については、27 件に及ぶ協力を機構横断的に推進した。</p> <p>以上、1F 事故対応を含め、機構内外との連携は妥当と評価した。</p>	B	B～A	<p>・計算科学はその学際性に特徴があり、分野間の連携、組織間の連携が極めて有効である。今後も積極的に推進すべき。</p>

補足説明

- ・研究開発の達成度: 成功・不成功の原因の把握・分析、当初の研究計画の妥当性、計画外の成果(1F 事故対応)等を含む。
- ・他機関・部署との連携: 機構内部の他部門との連携も含む。

【補足】評価区分(S～D)の説明

<p>評価区分(基準)(総合科学技術・イノベーション会議 評価専門調査会 研究開発法人部会(第 5 回)より)</p> <p>S: 目的・業務・中長期目標等に照らし、研究成果、取組等について諸事情を踏まえて総合的に勘案した結果、適正、効果的かつ効率的な研究開発運営の下で、「研究開発成果の最大化」に向けて特に顕著な成果の創出や将来的な成果の創出の期待等が認められる。</p> <p>A: 目的・業務・中長期目標等に照らし、研究成果、取組等について諸事情を踏まえて総合的に勘案した結果、適正、効果的かつ効率的な研究開発運営の下で、「研究開発成果の最大化」に向けて顕著な成果の創出や将来的な成果の創出の期待等が認められる。</p> <p>B: 目的・業務・中長期目標等に照らし、研究成果、取組等について諸事情を踏まえて総合的に勘案した結果、「研究開発成果の最大化」に向けて成果の創出や将来的な成果の創出の期待等が認められ、着実な研究開発運営がなされている。</p> <p>C: 目的・業務・中長期目標等に照らし、研究成果、取組等について諸事情を踏まえて総合的に勘案した結果、「研究開発成果の最大化」又は「適正、効果的かつ効率的な研究開発運営」に向けてより一層の工夫、改善等が期待される。</p> <p>D: 目的・業務・中長期目標等に照らし、研究成果、取組等について諸事情を踏まえて総合的に勘案した結果、「研究開発成果の最大化」又は「適正、効果的かつ効率的な研究開発運営」に向けて抜本的な見直しを含め特段の工夫、改善等が求められる。</p>
--

表 4. 9 第 3 期中長期目標期間に向けた自己評価及び専門部会事前評価意見

自己点検内容	専門部会評価	
	評価	評価理由/ご意見
<p>(1) 研究開発課題の選定の妥当性 *1</p> <p>○実験や観測が困難な事象を解析するニーズが多い原子力分野において、計算科学研究は極めて重要である。これまで開発した原子・分子レベルの基本的な現象を高精度にシミュレーションする技術と福島支援研究を通じて培った解析技術とを融合、発展させて、長期環境動態や過酷事故時の複雑現象を生態系、工学系を含めた系全体としてシミュレーション可能にする技術の研究を進めることで、計算科学を先導する新たな技術と知見が得られることから、課題の選定は妥当と評価した。また、蓄積してきた学術的成果、計算技術を活用・高度化して、1F 事故後の重要課題の解決に貢献するなど、社会貢献を目指すという方向性は妥当と評価した。</p>	<p>■妥当</p> <p>□要改善</p>	<p>・計算科学の応用面は今後も増加することが確実であり、原子力研究での計算科学のより一層の充実が望まれる。</p>
<p>(2) 計画・実施体制の妥当性</p> <p>○計画については、目標達成へ向けて、国のポスト京計画など計算機の性能向上を踏まえて、効率的に段階を踏んだ計画となっていると考えられる。実施体制については、第 2 期中期計画において実績を有する計算技術、計算機技術、IT 基盤技術三位一体の実施体制を継続する。以上により、計画・実施体制は妥当と評価した。</p>	<p>■妥当</p> <p>□要改善</p>	<p>・第二期中期計画では優れた成果を達成しており、その体制を継続するのは妥当である。</p>
<p>(3) 他機関・部署との連携の妥当性</p> <p>○以下を踏まえ、計算科学の観点から福島事故対応や原子力の安全性向上等に向けて基盤技術を開発していく上で妥当な連携が計画されていると評価した。さらに、計算科学の学際性も踏まえ、今後とも積極的に連携を展開する所存である。</p> <ul style="list-style-type: none"> ・IAEA(国際原子力機関)及び CEA(仏国原子力庁)との連携は、原子力分野の計算科学の国際化、効率的推進及び成果普及の観点から重要な連携である。 ・米国 UCB(カリフォルニア大学バークレー校)及び PNNL(ノースパシフィック国立研究所)は、1F 事故後重要課題である環境の評価、汚染度の処理等に関する知見を有しており、効率的に対応する上で有用な連携である。 ・東京大学及び国のポスト京計画(の参加機関)は、計算科学・計算機科学分野の先駆的な研究を行っており、計算科学研究の効率化及び先端的計算資源の利用環境の確保という観点で、極めて有効な連携相手である。また、機構の成果を普及し、原子力分野の計算科学を先導する観点でも有効な連携でもある。 ・産業界への波及に向け、ゼネコン、自動車会社等との連携も始まっている。 ・機構内連携については、引き続き機構横断的に推進する。 	<p>■妥当</p> <p>□要改善</p>	<p>・第二期中期計画で取った連携体制を引き続き実施することは効果的であると期待できる。</p>

補足説明

*1 研究開発課題の選定の妥当性: 方向性・目的・目標等の妥当性を含む。

付録1

平成 22 年度計算科学技術研究実績

This is a blank page.

平成 22 年度 計算科学技術研究実績

1. 研究論文、査読付き会議論文等

室	研究内容	研究論文	査読付き会議論文
高度計算機技術開発室	グリッド技術開発、超高速ネットワーク技術開発、計算技術	2	6
	耐震計算科学技術開発	2	2
シミュレーション技術開発室	材料シミュレーション技術開発	20	13
合計		24	21

(平成 23 年 3 月 31 日現在)

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発等】

<研究論文>

- 立川 崇之、中島 康平、Kim G.、木野 千晶、手島 直哉、鈴木 喜雄、武宮 博
“グリッド上における統合シミュレーションの連携実行フレームワーク”
FUJITSU ファミリー会論文集(インターネット), 2010
- 宮村 浩子、林 幸子、鈴木 喜雄、武宮 博
“時系列データを眺める技術; データの時間変化を見逃さないためにはどうしたらいいか”
FUJITSU ファミリー会論文集(インターネット), 2010

<査読付き会議論文>

- Tatekawa Takayuki, Mizuno Shuntaro,
“Analytic approaches to the structure formation in the accelerating universe”
Dark Energy; Theories, Developments, and Implications, 2010, Vol.241, No.294
- Kim G., Suzuki Yoshio, Teshima Naoya,
“Network computing infrastructure to share tools and data in global nuclear energy partnership”, Journal of Power and Energy Systems (Internet), 2010, Vol. 4, No. 1, PP.180-190
- Tashiro Toru, Tatekawa Takayuki,
“Brownian dynamics around the core of self-gravitating systems”
Journal of the Physical Society of Japan, 2010, Vol. 79, No. 6, PP.063001_1-063001_4
- Tatekawa Takayuki, Nakajima Kohei, Kim G., Teshima Naoya, Suzuki Yoshio, Takemiya Hiroshi,
“Development of simple orchestration application framework and its application to burning plasma simulation”

High Performance Computing on Vector Systems, 2010, Vol. 107, No. 120 (11th Teraflop Workshop)

- Tatekawa Takayuki, Nakajima Kohei, Teshima Naoya, Kim G., Suzuki Yoshio, Takemiya Hiroshi, Hayashi Nobuhiko, Iba Katsuyuki,
“Simple orchestration application framework to control “Burning Plasma Integrated Code””
Proceedings of 3rd International Joint Conference on Computational Sciences and Optimization (CSO 2010), 2010, Vol.322, No.326 (3rd International Joint Conference on Computational Sciences and Optimization (CSO 2010)/2010 International Workshop on HPC and Grid Applications (IWHGA 2010))
- 宮村 浩子、中島 康平、鈴木 喜雄、林 幸子、武宮 博、中島 憲宏
“シミュレーション結果の評価支援のためのデータ調査システム”
全 NEC C&C システムユーザー会平成 21 年度論文集(CD-ROM), 2010 (全 NEC C&C ユーザーフォーラム & iEXPO 2009)

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】

<研究論文>

- Watanabe Tadashi,
“Numerical simulation of dispersed flows and evaluation of interfacial area and volume fraction”
Computers & Fluids, 2006, Vol. 35, No. 10, PP. 1169-1176
- 櫛田 慶幸、武宮 博
“Cell プロセッサにおける境界値問題のための有限要素法の高実装”
日本計算工学会論文集(インターネット), 2010, Vol. 2010

<査読付き会議論文>

- Watanabe Tadashi,
“Oscillation and rotation of levitated liquid droplet”
Proceedings of European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECCOMAS CFD 2006) (CD-ROM), 2006 (European Conference on Computational Fluid Dynamics (ECCOMAS CFD 2006))
- Yamada Tomonori, Kushida Noriyuki, Araya Fumimasa, Nishida Akemi, Nakajima Norihiro,
“Component-wise meshing approach and evaluation of bonding strategy on the interface of components for assembled finite element analysis of structures”
Key Engineering Materials, 2011, Vol. 452-453, PP. 701-704 (9th International Conference on Fracture and Damage Mechanics (FDM-19))

【シミュレーション技術開発室・材料シミュレーション】

<研究論文>

- Shiga Motoyuki, Tachikawa Masanori,
 “*Ab initio* quantum mechanical/molecular mechanical molecular dynamics using multiple-time-scale approach and perturbation theory”
 Molecular Simulation, 2007, Vol.33, No.1-2, PP.174-184
- Ishibashi Hiroaki, Hayashi Aiko, Shiga Motoyuki, Tachikawa Masanori,
 “Geometric isotope effect on the $N_2H_7^+$ cation and $N_2H_5^-$ anion by *ab initio* path integral molecular dynamics simulation”
 ChemPhysChem, 2008, Vol.9, No.3, PP.383-387
- Shiga Motoyuki, Nakayama Akira,
 “*Ab initio* path integral ring polymer molecular dynamics; Vibrational spectra of molecules”
 Chemical Physics Letters, 2008, Vol.451, No.4-6, PP.175-181
- Shiga Motoyuki, Suzuki Kimichi, Tachikawa Masanori,
 “The Chemical shift of deprotonated water dimer; *Ab initio* path integral simulation”
 Journal of Chemical Physics, 2010, Vol.132, No.11, PP.114104_1-114104_7
- Ivanov S. D., Witt A., Shiga Motoyuki, Marx D.,
 “On artificial frequency shifts in infrared spectra obtained from centroid molecular dynamics; Quantum liquid water”
 Journal of Chemical Physics, 2010, Vol.132, No.3, PP.03110_1-03110_4
- Suzuki Kimichi, Tachikawa Masanori, Shiga Motoyuki,
 “Efficient *ab initio* path integral hybrid Monte Carlo based on the fourth-order Trotter expansion; Application to fluoride ion-water cluster”
 Journal of Chemical Physics, 2010, Vol.132, No.14, PP.144108_1-144108_7
- Fujisaki Hiroshi, Shiga Motoyuki, Kidera Akinori,
 “Onsager-Machlup action-based path sampling and its combination with replica exchange for diffusive and multiple pathways”
 Journal of Chemical Physics, 2010, Vol.132, No.13, PP.134101_1-134101_8
- Nagai Yuki, Kato Yusuke,
 “Impurity scattering rate and coherence factor in vortex core of sign-reversing s-wave superconductors”
 Physical Review B, 2010, Vol.82, No.17, PP.174507_1-174507_12
- Ota Yukihiro, Nakai Noriyuki, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko, Inotani Daisuke, Ohashi Yoji, Koyama Tomio, Matsumoto Hideki,
 “Ambegaokar-Baratoff relations for Josephson critical current in heterojunctions with multigap superconductors”

- Physical Review B, 2010, Vol. 81, No. 21, PP. 214511_1-214511_6
- Yoshikawa Takehiro, Sugawara Shuichi, Takayanagi Toshiyuki, Shiga Motoyuki, Tachikawa Masanori,
 “Theoretical study on the mechanism of double proton transfer in porphycene by path-integral molecular dynamics simulations”
 Chemical Physics Letters, 2010, Vol. 496, No. 1-3, PP. 14-19
 - 山田 進、五十嵐 亮、奥村 雅彦、今村 俊幸、町田 昌彦
 “量子多体系・高精度シミュレーションの研究開発；密度行列繰り込み群法の超並列化と大規模計算”
 応用数理, 2010, Vol. 20, No. 2, PP. 132-147
 - Ribas-Arino J., Shiga Motoyuki, Marx D.,
 “Mechanochemical transduction of externally applied forces to mechanophores”
 Journal of the American Chemical Society, 2010, Vol. 132, No. 30, PP. 10609-10614
 - Imamura Toshiyuki, Kano Takuma, Yamada Susumu, Okumura Masahiko, Machida Masahiko,
 “High-performance quantum simulation for coupled Josephson junctions on the earth simulator; A Challenge to the Schrödinger equation on 256^4 grids”
 International Journal of High Performance Computing Applications, 2010, Vol. 24, No. 3, PP. 319-334
 - Nakamura Hiroki, Machida Masahiko
 “Magnetic ordering in blocking layer and highly anisotropic electronic structure of high- T_c iron-based superconductor $Sr_2VFeAsO_3$: LDA+ U study”
 Physical Review B, 2010, Vol. 82, No. 9, PP. 094503_1-094503_5
 - Nakamura Hiroki, Machida Masahiko, Kato Masato,
 “Effects of spin-orbit coupling and strong correlation on the paramagnetic insulating state in plutonium dioxides”
 Physical Review B, 2010, Vol. 82, No. 15, PP. 155131_1-155131_6
 - Ota Yukihiro, Machida Masahiko, Koyama Tomio,
 “Shapiro steps as a direct probe of $\pm s$ -wave symmetry in multigap superconducting Josephson junctions”
 Physical Review B, 2010, Vol. 82, No. 14, PP. 140509_1-140509_4
 - Suzudo Tomoaki, Kaburaki Hideo,
 “An Evolutional approach to the numerical construction of polycrystalline structures using the Voronoi tessellation”
 Physics Letters A, 2009, Vol. 373, No. 48, PP. 4484-4488
 - Yamaguchi Masatake, Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiro, Kadoyoshi Tomoko, Suzudo Tomoaki, Kaburaki Hideo,
 “First-principles study on the grain boundary embrittlement of metals by solute segregation, 2; Metal (Fe, Al, Cu)-Hydrogen (H) systems”

Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Material, 2011, Vol.42, No.2, PP.330-339

- Yamaguchi Masatake,
“First-principles study on the grain boundary embrittlement of metals by solute segregation, 1; Iron(Fe)-Solute(B, C, P, and S) systems”
Metallurgical and Materials Transactions A: Physical Metallurgy and Material, 2011, Vol.42, No.2, PP.319-329
- Osawa Kazuhito, Goto Junya, Yamakami Masahiro, Yamaguchi Masatake, Yagi Masatoshi,
“Trapping of multiple hydrogen atoms in a tungsten monovacancy from first principles”
Physical Review B, 2010, Vol.82, No.18, PP.184117_1-184117_6

<査読付き会議論文>

- Igarashi Ryo, Ogata Masao,
“Partial order of frustrated Potts model”
Journal of Physics; Conference Series, 2010, Vol.200, PP.022019_1-022019_4
(International Conference on Magnetism 2009 (ICM 2009))
- Ota Yukihiro, Machida Masahiko, Koyama Tomio,
“Inter-grain Josephson currents in two-gap superconductors”
Physica C, 2010, Vol.470, No. Suppl.1, PP.S489-S490 (9th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (M²S-IX))
- Ota Yukihiro, Machida Masahiko, Koyama Tomio, Matsumoto Hideki,
“Collective modes and Josephson vortices in a heterotic Josephson junction between single- and two-gap superconductors”
Physica C, 2010, Vol.470, No. Suppl.1, PP.S882-S883 (9th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (M²S-IX))
- Machida Masahiko, Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Nakai Noriyuki, Nakamura Hiroki, Hayashi Nobuhiko,
“Phenomenological theory for $\pm s$ -wave superconducting states of iron-based superconductors”
Physica C, 2010, Vol.470, No. Suppl.1, PP.S372-S374 (9th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (M²S-IX))
- Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“Pressure effects on iron-based superconductors; A First-principles study”
Physica C, 2010, Vol470, No. Suppl.1, PP.S387-S388 (9th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (M²S-IX))
- Nakamura Hiroki, Machida Masahiko, Baron A., Fukuda Tatsuo, Shamoto Shinichi,
“Magnetic structure and phonon spectra of iron-based superconductors; A

First-principle study”

Physica C, 2010, Vol. 470, No. Suppl. 1, PP. S430–S432 (9th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (M²S-IX))

- Ota Yukihiro, Machida Masahiko, Koyama Tomio, Matsumoto Hideki,
“Anomalous Josephson vortex solutions in Josephson junctions with multiple tunneling channels”
Physica C, 2010, Vol. 470, No. 20, PP. 1137–1140 (22nd International Symposium on Superconductivity (ISS 2009))
- Machida Masahiko, Nakamura Hiroki,
“Two-dimensionality of electronic structure and strong Fermi surface nesting in highly anisotropic iron-based superconductors”
Physica C, 2010, Vol. 470, No. 20, PP. 1002–1006 (22nd International Symposium on Superconductivity (ISS 2009))
- Nakamura Hiroki, Machida Masahiko, Koyama Tomio, Hamada Noriaki,
“First-principles calculations for anisotropy of iron-based superconductors”
Physica C, 2010, Vol. 470, No. 20, PP. 1066–1069 (22nd International Symposium on Superconductivity (ISS 2009))
- Ota Yukihiro, Machida Masahiko, Koyama Tomio,
“Theory of Josephson effects in iron-based multi-gap superconductor junctions”
Journal of Physics; Conference Series, 2010, Vol. 248, PP. 012090_1–012090_8
(International Conference on Theoretical Physics (Dubna-Nano 2010))
- Machida Masahiko, Ota Yukihiro, Sasa Narimasa, Koyama Tomio, Matsumoto Hideki,
“Theory and simulation of electromagnetic wave emission from intrinsic Josephson junctions”
Journal of Physics; Conference Series, 2010, Vol. 248, PP. 012037_1–012037_8
(International Conference on Theoretical Physics (Dubna-Nano 2010))
- Koyama Tomio, Ota Yukihiro, Machida Masahiko,
“Electrodynamics and intrinsic Josephson effects in multi-gap superconductors”
Journal of Physics; Conference Series, 2010, Vol. 248, PP. 012036_1–012036_6
(International Conference on Theoretical Physics (Dubna-Nano 2010))
- Suzudo Tomoaki, Kaburaki Hideo, Itakura Mitsuhiro,
“Modeling of subgrain growth kinetics; 3D Monte-Carlo simulation”
Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol. 1225E (Internet), 2010
(Materials Research Society 2009 Fall Meeting)

2. 国際会議、国内会議での発表等

【システム計算科学センター】

<査読無し論文>

- Nakajima Norihiro, Nishida Akemi, Suzuki Yoshio, Yamada Tomonori, Takemiya Hiroshi, Iyoku Tatsuo,
“Structural simulation and modeling for assembly in real space”
Proceedings of Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and the 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010) (USB Flash Drive), 2010 (Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010))
- 蕪木 英雄、寺倉 清之
“破壊・フラクチャの物理”
破壊・フラクチャの物理(岩波講座物理の世界), 2007

<口頭発表>

- Kaburaki Hideo, Li J., Sidney Y., Kimizuka Hajime,
“Dynamical behavior of heat conduction in solid argon”
11th Granada Seminar on Computational and Statistical Physics, 2010
- Kaburaki Hideo, Kadoyoshi Tomoko, Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake,
“Brittle to ductile transition in the fracture process of an α -iron single crystal containing a grain boundary; Molecular dynamics simulation”
Materials Research Society 2010 Fall Meeting, 2010

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発等】

<査読無し論文>

- 宮村 浩子
“大規模木構造データの可視化・解析システム VAULT”
京都大学数理解析研究所講究録 1644, 2009, PP. 12-19
- 宮村 浩子、大坐畠 智、中尾 彰宏、川島 幸之助、鈴木 喜雄
“対話的操作を用いた重要ノード発見のためのネットワークの可視化”
電気学会研究会資料, 産業計測制御研究会 (IIC-10-85), 2010, PP. 27-32 (電気学会産業計測制御研究会)
- 宮村 浩子、大坐畠 智、中尾 彰宏、川島 幸之助、鈴木 喜雄
“重要ノードに着目した大規模ネットワークの可視化システム”
信学技報, 2010, Vol. 109, No. 448, PP. 357-362 (電子情報通信学会 NS 研究会)
- 宮村 浩子、呉田 昌俊、瀬川 麻里子、久保 純、斎藤 隆文、鈴木 喜雄、武宮 博
“多重スケール解析による霧状液体の可視化”
電気学会研究会資料, 産業計測制御研究会 (IIC-10-73), 2010, PP. 7-12 (電気学会産業計測制御研究会)
- Miyamura Hiroko, Hayashi Sachiko, Suzuki Yoshio, Takemiya Hiroshi,
“Spatio-temporal mapping; A Technique for overview visualization of time-series

datasets”

Proceedings of Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and the 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010) (USB Flash Drive), 2010 (Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010))

- 宮村 浩子、品野 勇治、大坐島 智
 “大規模グラフの適応的表示”
 可視化情報, 2010, Vol. 30, No. Suppl. 1, PP. 273-276 (第 38 回可視化情報シンポジウム)
- 宮村 浩子、鈴木 喜雄、武宮 博
 “時空間データの可視化”
 可視化情報, 2010, Vol. 30, No. Suppl. 1, PP. 269-272 (第 38 回可視化情報シンポジウム)
- 鈴木 喜雄、立川 崇之、Kim G、木野 千晶、宮村 浩子、手島 直哉、林 幸子、青柳 哲雄、武宮 博、中島 憲宏
 “原子カグリッド基盤 AEGIS の研究開発”
 日本計算工学会論文集(インターネット), 2010, Vol. 15, No. 2, PP. 1051-1054 (第 15 回日本計算工学講演会)
- Kim G., Nakajima Kohei, Teshima Naoya, Tatekawa Takayuki, Suzuki Yoshio, Takemiya Hiroshi,
 “Full-scale 3D vibration simulator for an entire nuclear power plant on the simple orchestration application framework”
 Proceedings of Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and the 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010) (USB Flash Drive), 2010 (Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010))
- Tatekawa Takayuki, Teshima Naoya, Suzuki Yoshio, Takemiya Hiroshi,
 “Fault-tolerant mechanism of both job execution and file transfer for integrated nuclear energy simulation”
 Proceedings of Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and the 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010) (USB Flash Drive), 2010 (Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010))
- Suzuki Yoshio, Kushida Noriyuki, Tatekawa Takayuki, Teshima Naoya, Caniou Y., Guivarch R., Dayde M., Ramet P.,
 “Development of an international matrix-solver prediction system on a French-Japanese international grid computing environment”
 Proceedings of Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and the 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010) (USB Flash Drive), 2010 (Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd

Monte Carlo (SNA + MC 2010))

- 宮村 浩子、大坐島 智、中尾 彰宏、川島 幸之助
“大規模ネットワークデータの適応的可視化”
信学技報, 2010, Vol. 110, No. 190, PP. 103-108 (電子情報通信学会ネットワークシステム研究会)
- 北村 竜明、坂本 健作、高瀬 和之
“レーザー溶接シミュレーションのための予備的検討”
可視化情報, 2010, Vol. 30, No. Suppl. 2, PP. 359-360 (可視化情報学会全国講演会, 鹿児島 2010)

<口頭発表>

- Tatekawa Takayuki, Sakagami Masaaki, Taruya Atsushi, Okamura Takashi, Ruffo S.,
“Transient states in two-dimensional long-range interacting system”
24th International Conference on Statistical Physics (STATPHYS-24), 2010
- 井戸村 泰宏, Jolliet S.
“超並列マルチコア環境における核融合プラズマ乱流シミュレーションの性能評価”
次世代スーパーコンピューティング・シンポジウム 2010 及び第 1 回戦略プログラム 5
分野合同ワークショップ, 2011
- Kim G., Nakajima Kohei, Teshima Naoya, Tatekawa Takayuki, Suzuki Yoshio, Takemiya
Hiroshi,
“Long-time simulation of full-scale 3D vibration simulator for an entire nuclear
power plant by coupling HPC machines on grid”
International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and
Analysis (SC '10), 2010
- Tatekawa Takayuki, Sakagami Masaaki, Taruya Atsushi, Okamura Takashi, Ruffo S.,
“Transient states in two-dimensional N-body systems”
13th Slovenia-Japan Seminar on Nonlinear Science and Waseda AICS Symposium on
Nonlinear and Nonequilibrium Phenomena in Complex Systems, 2010
- Miyamura Hiroko, Suzuki Yoshio, Takemiya Hiroshi,
“Visualization system for time-series datasets”
Mini-Symposium in SC '10, 2010
- 平山 俊雄、久米 悦雄、清水 大志
“原子力研究開発を推進するスーパーコンピュータと原子力アプリケーション”
サイエンティフィック・システム研究会 2010 年度科学技術計算分科会会合, 2010

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】

<査読無し論文>

- 西田 明美

“構造物の衝撃解析の最先端”

建築構造力学における最近の発展と展望, 2, 2010, PP. 1-10 (日本建築学会応用力学シンポジウム「建築構造力学の最近の発展と展望, 2」)

- 西田 明美
“原子カプラント全容解析のための接合部連成モデリングの研究開発”
第4回原子力システム研究開発事業平成21年度成果報告会資料集(CD-ROM), 2010, PP. 25-26 (原子力システム研究開発事業平成21年度成果報告会)
- 山田 知典、河合 浩志
“マルチコア環境における複数右辺項を有する構造解析ソルバーの性能評価”
計算工学講演会論文集, 2010, Vol. 15, No. 1, PP. 179-180 (第15回日本計算工学講演会)
- Kino Chiaki, Tatekawa Takayuki, Teshima Naoya, Kim G., Suzuki Yoshio, Araya Fumimasa, Nishida Akemi, Takemiya Hiroshi,
“Application integration control system for multi-scale and multi-physics simulation”
Proceedings of Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and the 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010) (USB Flash Drive), 2010 (Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010))
- Uzawa Ken, Watanabe Tadashi, Nishida Akemi, Takemiya Hiroshi,
“Numerical analysis of free-surface flows by using OpenFOAM”
Proceedings of Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and the 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010) (USB Flash Drive), 2010 (Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010))
- Yamada Tomonori,
“Full scale seismic simulation of a nuclear reactor with parallel finite element analysis code for assembled structure”
Proceedings of Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and the 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010) (USB Flash Drive), 2010 (Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010))
- Zhou Z., Ito Takumi, Kuwamura Hitoshi,
“Experimental study of ductile crack propagation in steel members Proceedings of 9th Pacific Structural Steel Conference (PSSC 2010), Vol.2 2010, PP. 1037-1042 (9th Pacific Structural Steel Conference (PSSC 2010))
- Zhou Z., Nishida Akemi, Kuwamura Hitoshi,
“Applicability of finite element method to collapse analysis of steel connection under compression”

Proceedings of Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and the 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010) (USB Flash Drive), 2010 (Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010))

- 崎野 良比呂、西田 明美
“鉄骨部材の破壊モードと耐衝撃性”
建築物の耐衝撃設計に関するワークショップ 2010 資料集, 2010, PP. 143-152 (建築物の耐衝撃設計に関するワークショップ 2010)
- 西田 明美
“衝撃解析用ソフトの現状”
建築物の耐衝撃設計に関するワークショップ 2010 資料集, 2010, PP. 87-96 (建築物の耐衝撃設計に関するワークショップ 2010)
- Nishida Akemi, Araya Fumimasa, Kushida Noriyuki, Kondo Makoto, Sakai Michiya, Shiogama Yuzo,
“Elastic-plastic connection model describing dynamic interactions of component connections”
Proceedings of Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and the 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010) (USB Flash Drive), 2010 (Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010))
- Kushida Noriyuki,
“On-the-fly computing on many-core processors in nuclear applications”
Proceedings of Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and the 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010) (USB Flash Drive), 2010 (Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010))

<口頭発表>

- 西田 明美、新谷 文将、鈴木 喜雄、木野 千晶、武宮 博、中島 憲宏
“システム統合化の現状と課題”
第 21 回 CCSE ワークショップ, 2010
- 木野 千晶、鈴木 喜雄、武宮 博
“オントロジー指向アーキテクチャーによる認識処理手法の基礎的検討”
電子情報通信学会知能ソフトウェア工学研究会, 2010
- Yamada Tomonori,
“Construction of a computing framework for vibration simulation of nuclear power plant in its entirety”
9th World Congress on Computational Mechanics and 4th Asian Pacific Congress on

- Computational Mechanics (WCCM/APCOM 2010), 2010
- Watanabe Tadashi,
 “Numerical simulation of liquid sloshing using arbitrary Lagrangian-Eulerian level set method”
 International Conference of Multiphysics 2010, 2010
 - 西田 明美
 “音響周波数コムによる構造物のシステム解析, 1; 全体概要”
 平成 22 年度第 1 回東京工業大学共同研究「シェル・空間構造の減衰と制振・免震に関する研究」に関するワークショップ, 2010
 - 西田 明美
 “原子力発電施設の耐震シミュレーションと次世代スパコン”
 日本原子力学会第 8 回放射線遮蔽研究専門委員会, 2010
 - 櫛田 慶幸、藤林 健一、呉田 昌俊、瀬川 麻里子、篠原 武尚、武宮 博
 “非均質マルチコアプロセッサを用いた中性子イメージングのための高速データ処理” 日本原子力学会 2011 年春の年会, 2011

【シミュレーション技術開発室・材料シミュレーション】

< 査読無し論文 >

- 山口 正剛、松本 淳、町田 昌彦
 “日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター・シミュレーション技術開発室 研究紹介”
 応用数理, 2010, Vol. 20, No. 1, PP. 67-69
- 山口 正剛
 “第一原理計算による粒界脆化メカニズムの解明”
 ふえらむ, 2010, Vol. 15, No. 12, PP. 755-761
- Yamaguchi Masatake, Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiro, Kadoyoshi Tomoko, Suzudo Tomoaki, Kaburaki Hideo,
 “First-principles study on the decohesion of grain boundary by hydrogen trapping in Aluminum and other metals”
 Proceedings of 18th International Symposium on Processing and Fabrication of Advanced Materials (PFAM-18), 2009, Vol. 65, No. 74 (18th International Symposium on Processing and Fabrication of Advanced Materials (PFAM-18))
- Yamaguchi Masatake, Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiro, Suzudo Tomoaki, Kaburaki Hideo,
 “First-principles study of the grain-boundary embrittlement of metals”
 Proceedings of Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and the 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010) (USB Flash Drive), 2010 (Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd

Monte Carlo (SNA + MC 2010))

- Yamaguchi Masatake, Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiro, Suzudo Tomoaki, Kaburaki Hideo,
 “Decohesion of Al grain boundary by hydrogen and liquid metals; A First-principles study”
 Proceedings of 12th International Conference on Aluminium Alloys (ICAA-12), 2010, PP.1413-1420 (12th International Conference on Aluminium Alloys (ICAA-12))
- Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake, Kaburaki Hideo, Suzudo Tomoaki,
 “Evaluation of local stress and local hydrogen concentration at grain boundary using three-dimensional polycrystalline model”
 Proceedings of Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and the 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010) (USB Flash Drive), 2010 (Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010))
- Suzudo Tomoaki, Golubov S., Stoller R., Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito, Kaburaki Hideo,
 “Kinetic Monte Carlo annealing simulation of cascade damage in α -Fe
 Proceedings of Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and the 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010) (USB Flash Drive), 2010 (Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010))

<口頭発表>

- 奥村 雅彦、大西 弘明、山田 進、坂井 徹、町田 昌彦
 “並列化密度行列繰り込み群法による光学格子系の解析；基底状態から非平衡状態へ”
 次世代情報機能・材料分野 公開研究会「新物質とエネルギー」, 2010
- 太田 幸宏、町田 昌彦、小山 富男
 “複数個(2, 3 個)の秩序パラメータをもつ超流動, 超伝導の非自明な数理”
 非線形現象の数値シミュレーションと解析 2010, 2010
- Ota Yukihiro, Machida Masahiko, Koyama Tomio, Matsumoto Hideki,
 “Theory of Josephson effects in Josephson junctions with multiple tunneling channels; Phase sensitive tests for iron-pnictide superconductors”
 7th International Symposium on Intrinsic Josephson Effects and Plasma Oscillations in High-Tc Superconductors (PLASMA 2010), 2010
- Ota Yukihiro, Machida Masahiko, Koyama Tomio,
 “Theory of charge dynamics in an array of intrinsic Josephson junctions with multi-gap superconductors”

- 2010 International Symposium on Physics of Quantum Technology, 2010
- Machida Masahiko, Sasa Narimasa, Ota Yukihiro, Koyama Tomio, Matsumoto Hideki,
“Analytical modelling of electromagnetic wave emission from single Josephson junctions and in-phase resonant IJJ”
7th International Symposium on Intrinsic Josephson Effects and Plasma Oscillations in High-Tc Superconductors (PLASMA 2010), 2010
 - 志賀 基之、藤崎 弘士
“水素・重水素移動反応の量子統計力学的第一原理計算”
第13回理論化学討論会, 2010
 - Ota Yukihiro, Machida Masahiko, Koyama Tomio,
“Theory for macroscopic quantum tunneling in two-gap superconductors; Corrections from Josephson-Leggett modes”
Summer School on Diversities in Quantum Computation/Information, 2010
 - 永井 佑紀、黒木 和彦、町田 昌彦、青木 秀夫
“多軌道系超伝導体における不純物効果”
日本物理学会 2010 年秋季大会(物性), 2010
 - 永井 佑紀、加藤 雄介
“鉄系超伝導体の渦糸近傍での不純物散乱におけるコヒーレンス因子”
日本物理学会 2010 年秋季大会(物性), 2010
 - 山田 進、五十嵐 亮、奥村 雅彦、山本 篤史、町田 昌彦
“格子点のクラスタ化による準2次元ハバードモデルに対する DMRG 法の有効性”
日本物理学会 2010 年秋季大会(物性), 2010
 - Igarashi Ryo, Okumura Masahiko, Yamada Susumu, Machida Masahiko,
“Ground state and some excited states of asymmetric 5-leg spin tube”
International Workshop on Statistical Physics of Quantum Systems, 2010
 - 志賀 基之、藤崎 弘士
“水素・重水素移動反応の量子統計力学的第一原理計算”
第4回分子科学討論会, 2010
 - Shiga Motoyuki, Tachikawa Masanori,
“Ab initio path integral simulations; A Fully quantum approach”
Molecular and Ionic Clusters Conference (MIC 2010), 2010
 - Shiga Motoyuki,
“Molecular modelling of aqueous actinides”
Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010), 2010
 - Yamada Susumu, Onishi Hiroaki, Igarashi Ryo, Okumura Masahiko, Machida Masahiko,
“Parallel DMRG with multi-site clustering toward more than 10-leg ladders”
International Workshop on Density Matrix Renormalization Group and Other Advances

- in Numerical Renormalization Group Methods (DMRG 2010), 2010
- 中村 博樹、町田 昌彦
 “鉄系超伝導体における軽元素混入効果の第一原理計算による評価”
 日本物理学会 2010 年秋季大会(物性), 2010
 - Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki, Okumura Masahiko, Igarashi Ryo, Onishi Hiroaki, Machida Masahiko,
 “High performance computing of density matrix renormalization group method for 2-dimensional model; Parallelization strategy toward peta computing”
 Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010), 2010
 - 太田 幸宏、町田 昌彦、小山 富男
 “多ギャップ超伝導体 SIS ジョセフソン接合におけるシャピロ・ステップ”
 日本物理学会 2010 年秋季大会(物性), 2010
 - 太田 幸宏、町田 昌彦、小山 富男
 “多ギャップ超伝導体ジョセフソン接合における巨視的量子トンネル”
 日本物理学会 2010 年秋季大会(物性), 2010
 - Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo, Yamaguchi Masatake,
 “Development of EAM potential for impurity atoms in BCC iron based on quantum calculations”
 Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010), 2010
 - Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo, Yamaguchi Masatake,
 “Stability of BCC iron screw dislocation core structure; A High-precision DFT calculation”
 Materials Research Society 2010 Fall Meeting, 2010
 - 志賀 基之
 “水素・重水素の量子統計力学を反映した量子論的分子シミュレーション”
 第 24 回分子シミュレーション討論会, 2010
 - 中井 宣之、永井 佑紀、町田 昌彦
 “鉄砒素系超伝導体に対する渦糸周りの低励起状態のエネルギー依存性”
 日本物理学会 2010 年秋季大会(物性), 2010
 - 中井 宣之、永井 佑紀、町田 昌彦
 “平均場理論を用いた不純物と渦糸による低励起状態の空間構造研究”
 日本物理学会 2010 年秋季大会(物性), 2010
 - Igarashi Ryo, Okumura Masahiko, Yamada Susumu, Machida Masahiko,
 “Ground state and some excited states of asymmetric 5-leg spin tube”
 International Workshop on Density Matrix Renormalization Group and Other Advances in Numerical Renormalization Group Methods (DMRG 2010), 2010

- 五十嵐 亮、奥村 雅彦、山田 進、町田 昌彦
 “5-leg スピンチューブ系の相図”
 日本物理学会 2010 年秋季大会(物性), 2010
- Igarashi Ryo,
 “Development of the simulation framework for quantum many-body systems”
 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC '10), 2010
- Yamada Susumu, Igarashi Ryo, Okumura Masahiko, Yamamoto Atsushi, Machida Masahiko,
 “Efficiency of parallel DMRG method with multi-site clustering for quasi-two-dimensional quantum systems”
 New Development of Numerical Simulations in Low-Dimensional Quantum Systems: From Density Matrix Renormalization Group to Tensor Network Formulations, 2010
- 山田 進、五十嵐 亮、奥村 雅彦、山本 篤史、町田 昌彦
 “DMRG 法における大規模固有値計算の並列化; 次世代スパコン「京」での高性能計算に向けて”
 計算物質科学イニシアティブ(CMSI)第1部会研究会「新量子相・新物質の基礎科学」, 2010
- 永井 佑紀、黒木 和彦
 “中性子散乱実験による鉄系超伝導体のペアリング状態の判別方法”
 日本物理学会第 66 回年次大会, 2011
- Ota Yukihiro, Machida Masahiko, Koyama Tomio,
 “Enhancement of macroscopic quantum tunneling in Josephson junctions with multigap superconductors through zero-point fluctuations of Josephson-Leggett mode”
 American Physical Society 2011 March Meeting, 2011
- 太田 幸宏、町田 昌彦、小山 富男
 “超伝導-トポロジカル絶縁体接合系の輸送理論とジョセフソン効果”
 日本物理学会第 66 回年次大会, 2011
- 太田 幸宏、町田 昌彦、小山 富男
 “鉄砒素系固有ジョセフソン接合における新しい接合間結合と集団励起モード”
 日本物理学会第 66 回年次大会, 2011
- Machida Masahiko, Nakamura Hiroki,
 “Orbital-ordering and in-plane anisotropy in low-moment ground-state of parent compounds of iron-based superconductors”
 American Physical Society 2011 March Meeting, 2011
- 太田 幸宏、町田 昌彦、小山 富男
 “鉄砒素系固有ジョセフソン接合における新しい接合間結合と集団励起モード”
 日本物理学会第 66 回年次大会, 2011
- 太田 幸宏、町田 昌彦、小山 富男

“マルチギャップ超伝導における巨視的量子トンネル”

東北大学電気通信研究所共同プロジェクト研究会「環境負荷低減に資する超伝導計算機技術に関する研究」, 2011

- 山田 進、五十嵐 亮、大西 弘明、山本 篤史、奥村 雅彦、町田 昌彦
 “並列 DMRG 法を用いた準 2 次元ハバードモデルの超伝導関連シミュレーション”
 日本物理学会第 66 回年次大会, 2011
- 山本 篤史、山田 進、町田 昌彦
 “光格子中における冷却フェルミ原子気体のダイナミクス”
 日本物理学会 2010 年秋季大会(物性), 2010/09
- Sasa Narimasa,
 “Large scale numerical simulation for superfluid turbulence”
 Joint International Conference of 7th Supercomputing in Nuclear Application and 3rd Monte Carlo (SNA + MC 2010), 2010
- 町田 昌彦、中村 博樹、加藤 正人
 “第一原理計算によるアクチナイド酸化物の物性評価”
 日本原子力学会 2011 年春の年会, 2011
- 中村 博樹、町田 昌彦、加藤 正人
 “第一原理計算に基づく二酸化プルトニウムの比熱の評価”
 日本原子力学会 2011 年春の年会, 2011
- 海老原 健一、山口 正剛、西山 裕孝、鬼沢 邦雄、松澤 寛
 “原子炉圧力容器鋼の高照射量領域の照射脆化予測, 6; 粒界偏析シミュレーション”
 日本原子力学会 2010 年秋の大会, 2010
- 山口 正剛、海老原 健一、蕪木 英雄
 “第一原理計算による粒界脆化の研究; 最近のまとめ”
 東北大学金属材料研究所ワークショップ「原子炉圧力容器鋼照射脆化機構研究の最近の進展」, 2010
- 山口 正剛、海老原 健一、板倉 充洋、鈴木 知明、蕪木 英雄
 “第一原理計算による粒界水素脆性の研究”
 日本鉄鋼協会第 160 回秋季講演大会, 2010
- Ebihara Kenichi, Yamaguchi Masatake, Nishiyama Yutaka, Onizawa Kunio, Matsuzawa Hiroshi,
 “Study of effect of carbon on irradiation-induced grain-boundary phosphorous segregation in reactor pressure vessel using first-principles-based rate theory model”
 Nuclear Materials 2010 (NuMat 2010), 2010
- 鈴木 知明、山口 正剛、都留 智仁、濱口 大、Golubov S.、Stoller R.
 “キネティックモンテカルロ法によるカスケード損傷のアニーリング解析”
 日本金属学会 2010 年秋期(第 147 回)大会, 2010

- 山口 正剛
“第一原理計算による鉄の粒界水素脆性の研究”
「水素の存在状態解析と水素脆化の基礎」フォーラム, 2010
- 海老原 健一、山口 正剛、西山 裕孝
“第一原理に基づいたレート理論モデルによる照射誘起粒界リン偏析における空孔ドラッグ効果の影響の考察”
日本原子力学会 2011 年春の年会, 2011
- 山口 正剛、宇田川 豊、阿部 弘亨、関村 直人
“Zr-Nb 合金の水素化および照射効果に関する研究, 2; hcp Zr 中の溶質元素 (Nb, Fe, Cr etc.) の挙動に関する第一原理計算”
日本原子力学会 2011 年春の年会, 2011
- Matsumoto Atsushi,
“Global conformational changes of ribosome observed by normal mode fitting for 3D cryo-EM structures”
第 3 回京阪奈計算生物物理セミナー, 2010

3. 技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

- 樋口 健二、平塚 篤、圓戸 辰郎、太田 幸宏、町田 昌彦
“テラヘルツ電磁波発振シミュレーション・プログラムの並列処理”
JAEA-Data/Code 2010-025, 2011
- システム計算科学センター
“平成 21 年度シミュレーション工学研究実績評価報告”
JAEA-Review 2011-006, 2011
- 情報システム管理室
“平成 21 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 2010-058, 2010

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- 2010 年 9 月 3 日 (金) 電気新聞 1 面
「プラント全体一括設計」
- 2011 年 2 月 1 日 (火) 日刊工業新聞 26 面
「計算科学の研究協力へ：東大・原子力機構が覚書」
- 2011 年 2 月 9 日 (水) 日本経済新聞夕刊 1 面
「原発の耐震性スパコンで評価」

5. 研究発表会等の開催

- 7th International Symposium on Intrinsic Josephson Effects and Plasma Oscillations in High-Tc Superconductors (Plasma2010) (H22 年 4 月 29 日-5 月 2 日)

- Ultra-cold Fermi Gas: Superfluidity and Strong Correlation (USS-2010) (H22年5月13日-15日)
- HPC最先端シミュレーション技術に関するジョイントシンポジウム(H22年7月29日-30日)(東京大学生産技術研究所、宇宙航空研究開発機構と共催)
- Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2010 Tokyo (SNA+MC2010) (H22年10月17日-21日)(日本原子力学会、OECD/Nuclear Energy Agency、日本原子力学会計算科学技術部会と共催)
- Mini-Symposium in SC'10 (The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis) (H22年11月16日-18日)
- 第18回渦糸物理国内会議(VPWJ2010) (H22年12月1日-3日)
- 第22回CCSEワークショップ (H23年2月4日)
 “原子力耐震計算科学の現状と将来”(参加者:77名(機構外58名、機構内19名))
- マテリアルチームセミナー(計3回開催)
 H22年4月9日:石原純夫(東北大学)講演
 「多自由度相間電子系における光誘起現象」
 10月25日:村上修一(東京工業大学)講演
 「トポロジカル絶縁体の物理」
 12月15日:白川知功(理化学研究所)講演
 「変分クラスター近似法とその応用」
- CREST 特定課題推進チームセミナー(計5回開催)
 H22年4月22日:奥村雅彦、段下一平(理化学研究所)講演
 「最新の計算科学による原子ガス物理の新展開」
 4月22日:Y. Shukurinov (JINR, ロシア)講演
 「超伝導固有ジョセフソン接合」
 4月27日:土屋俊二(東京理科大学)講演
 「冷却原子ガスの擬ギャップの機構解明」
 11月17日:河野昌仙(物質・材料研究機構)講演
 「1次元ハバードモデルのモット転移近傍での1粒子スペクトル関数の性質」
 H23年2月1日:柳澤孝(産業技術総合研究所)講演
 「量子モンテカルロ法による2次元ハバードモデルの研究」

6. 受賞等

- FUJITSU ファミリー論文(2010) 奨励論文賞受賞
 宮村(中村)浩子、林 幸子、鈴木 喜雄、武宮 博
 「時系列データの俯瞰的可視化～大規模時系列データの特徴領域に焦点をあてるために～」
 FUJITSU ファミリー会、平成22年5月

- ・ 平成 21 年度計算工学会論文賞受賞
 山田 知典、荻野 正雄、吉村 忍
 「balancing領域分割法の最適領域分割数の予測とその数値検証」
 日本計算工学会、平成 22 年 6 月
- ・ 分子科学会奨励賞受賞
 志賀 基之
 「水素の量子統計的ゆらぎを考慮した第一原理分子動力学計算」
 分子科学会、平成 22 年 9 月
- ・ 全 NEC C&C システムユーザー会ユーザ事例論文 (2010) 「入選」受賞
 宮村 (中村) 浩子、大坐島 智、中尾 彰宏、川島 幸之助、手島 直哉、鈴木 喜雄、
 武宮 博
 「大規模ネットワークデータの可視化～大量のデータの流れを見る～」
 全 NEC C&C システムユーザー会、平成 22 年 11 月
- ・ 分子シミュレーション研究会学術賞受賞
 志賀 基之
 「水素・重水素の量子統計力学を反映した量子論的分子シミュレーション」
 分子シミュレーション研究会、平成 22 年 11 月

7. 特許等の状況

(1) 特許の出願及び登録

なし。

(2) 成果の活用 (利用許諾) による収入 (H23 年 3 月末現在)

件名 (成果の内容)	契約先 (販売者)	権利/契約種別	H22 年度収入額
AVS/Express 並列化支援 ツール	株式会社ケイ・ジ ー・ティ	プログラム著作 権/利用許諾	299,250 円
並列分子動力学ステンシ ル 他 2 件	株式会社日本総研 ソリューションズ	プログラム著作 権/利用許諾	934,094 円

8. 外部資金の獲得に関連する事項

室	予算額(千円) (件数)
高度計算機技術開発室	28,865 (7)
シミュレーション技術開発室	62,012 (11)

【高度計算機技術開発室】

- (1) 原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション (科学技術振興機構) 22,100 千円
- (2) 大規模時系列ボリュームデータ解析・可視化のための高次元データポケットの生成 (文部科学省: 科研費(若手 B)) 650 千円

- (3) 大規模分散環境を用いた P2P ネットワーク流通ファイル制御システムの研究（日本学術振興会：科研費(基盤 B)） 650 千円
- (4) 自己重力系・長距離系の準平均進化（文部科学省：科研費(若手 B)） 1,170 千円
- (5) 国際熱核融合実験炉 ITER のリアルタイムモニタリングシステムの開発（文部科学省：科研費(若手 B)） 650 千円
- (6) 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発（次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム） 2,475 千円
- (7) 浮遊液滴の回転振動特性と内部・外部流動に関する研究（日本学術振興会：科研費(基盤 C)） 1,170 千円
- 【シミュレーション技術開発室】
- (8) ミクロ・メゾ・マクロの各スケールのシミュレーション研究基礎の構築、各スケールに跨るマルチスケール・マルチフィジックス研究（科学技術振興機構） 51,272 千円
- (9) 水素による原子レベルの粒界き裂発生に関する計算科学的研究開発（JFE スチール株式会社） 2,205 千円
- (10) 高照射量領域の照射脆化予測（原子力安全基盤機構(JNES)） 662 千円
- (11) 先進燃料被覆管材料の水素化および照射効果の解明に関する研究（東北大学金属材料研究所） 135 千円
- (12) IASCC 進展に関する機構論的研究（原子力安全基盤機構(JNES)） 1,564 千円
- (13) 量子多体問題に対する並列シミュレーション手法の研究開発（日本学術振興会：科研費(基盤 C)） 1,300 千円
- (14) 粒子描像による固体の熱伝導機構の解明（日本学術振興会：科研費(基盤 C)） 1,170 千円
- (15) 水素・重水素移動反応の量子統計力学的第一原理計算（文部科学省：科研費(若手 B)） 2,990 千円
- (16) 微細加工超伝導検出器アレーによる中性子イメージング（日本学術振興会：科研費(基盤 A)） 104 千円
- (17) 散逸系の局在パターン生成における非局所的効果の数理的研究と応用（日本学術振興会：科研費(基盤 B)） 130 千円
- (18) 量子ゆらぎと熱ゆらぎを考慮した高次系生体分子クラスターの分子論的解明（文部科学省：科研費(特定領域)） 480 千円

9. 産学官との連携に関連する事項

室	研究内容	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	グリッド技術開発等	6	0	0	2
	耐震計算科学技術開発	1	0	2	0

シミュレーション 技術開発室	材料シミュレーショ ン	0	0	5	0
合計		7	0	7	2

●共同研究

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発等】

- ・ 産学官連携計算ポータル・サービス・モデル構築のための技術的・制度的基盤に関する調査研究（株式会社情報数理研究所）
- ・ 統合シミュレーション技術を用いた生体シミュレーションに関する研究（北陸先端科学技術大学院大学情報科学センター）
- ・ グリッドを活用した先進的大規模計算解析システム開発に関する研究（山口大学メディア基盤センター）
- ・ グリッド環境における物性解析・材料設計シミュレーション（大阪大学産業科学研究所）
- ・ グリッド環境における Pu 含有燃料の MD 法による大規模材料シミュレーション（九州大学、近畿大学）
- ・ 核融合シミュレーションにおける大容量データ処理技術に関する研究（大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 核融合科学研究所）

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】

- ・ 大規模有限要素シミュレーションの結果可視化に関する研究（株式会社竹中工務店）

●受託研究

【高度計算機技術開発室・耐震計算科学技術開発】

- ・ 原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション（科学技術振興機構）
- ・ 次世代計算機プロジェクトにおける戦略分野「ものづくり分野」の研究開発（文部科学省）

【シミュレーション技術開発室・材料シミュレーション】

- ・ ミクロ・メゾ・マクロの各スケールのシミュレーション研究基礎の構築、各スケールに跨るマルチスケール・マルチフィジックス研究の実施（科学技術振興機構）
- ・ 水素による原子レベルの粒界き裂発生に関する計算科学的研究開発（JFE スチール株式会社）
- ・ 高照射量領域の照射脆化予測（原子力安全基盤機構(JNES)）
- ・ 先進燃料被覆管材料の水素化および照射効果の解明に関する研究（東北大学金属材料研究所）
- ・ IASCC 進展に関する機構論的研究（原子力安全基盤機構(JNES)）

●研究協定

【高度計算機技術開発室・グリッド技術開発等】

- ・ ITBL 研究開発に関する協力協定
- ・ 高機能・超低消費電力スピンドバイス・ストレージ基盤技術の開発に関する連携協定（東

北大学電気通信研究所、株式会社日立製作所、富士通株式会社、株式会社東芝、富士電機デバイステクノロジー株式会社、株式会社アルバック、株式会社三菱総合研究所)

10. 機構内の他部門との連携に関する事項

研究の実施にあたっては、原子力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 22 件に及ぶ機構内連携を実施した。

(1) 損傷頻度評価

部署：(東海)安全研究センター

概要：3次元モデルを用いる大規模耐震解析システムを提供し、建屋および機器の地震時応答解析を高精度化。

(2) ROSA 計画に関する実験と解析

部署：(東海)安全研究センター

概要：解析プログラムや可視化ソフト等の実行環境を整備し、安全評価コードの検証作業を支援。

(3) 耐震解析技術に関する研究開発

部署：(大洗)高温工学試験研究炉部、(東濃)地層処分研究開発部門

概要：大規模耐震解析システムやモデルデータを提供し、施設の耐震性評価を支援。

(4) 地下構造物の振動解析に関する技術協力

部署：(東濃)地層処分研究開発部門

概要：データの妥当性評価及び有用データの自動抽出を行うシステムを提供し、振動実験データの解析を効率化。

(5) 原子炉内の熱流動解析に関する技術協力

部署：(東海)原子力基礎工学研究部門、(東海)安全研究センター

概要：異なる解析間のデータの授受を実現するシステムを提供し、炉内構造物と炉内核熱・熱流動との解析を連成化。

(6) 施設の耐震強度評価

部署：敦賀本部、(大洗)次世代部門

概要：機構内実験施設の耐震強度解析および評価

(7) J-PARC 情報システムにおける個人認証セキュリティ技術

部署：(東海)量子ビーム応用研究部門

概要：センターの持つセキュリティに関する知見及びノウハウを提供し、ネットワークシステム設計を支援。

(8) ITER のための核融合遠隔実験支援システム開発

部署：(那珂)核融合研究開発部門

概要：セキュリティを考慮したネットワーク基盤システムを提供し、核融合遠隔実験システムの通信路の安全化。

(9) 炉内核熱連成振動解析の可視化

部署：(東海)安全研究センター

概要：可視化システムを提供し、連成振動解析プログラムの出力結果の解析を効率化。

(10) 並列分散技術の IMAGINE システムへの適用

部署：(東海)原子力基礎工学部門

概要：分散して設置された計算機群の同時利用を可能とする基盤システムを提供し、線量計算の実行を効率化。

(11) 原子炉圧力容器鋼の高経年化対策研究(照射脆化予測)

部署：(東海)安全研究センター

概要：脆化予測に必要な基礎パラメータを提供するため、第一原理計算にて定量的な計算を実施。

(12) 燃料被覆管ジルコニウム合金の水素脆化に関する研究

部署：(東海)安全研究センター

概要：高燃焼度燃料被覆管材 Zr 合金の実機適用性の評価のために、最新の理論計算手法を導入し、材料の腐食、水素化、照射による劣化挙動を解明し、高燃焼度燃料としての実機適用性および安全基準の合理化に対して技術的知見を供する。

(13) 超伝導ナノ構造物性のシミュレーション研究と実験による検証

部署：(東海)先端基礎研究開発センター

概要：実験結果を解釈し、新たな実験を提案するため、メゾシミュレーションを行う。

(14) 応力腐食割れ、照射材料の数値シミュレーション研究

部署：(東海)原子力基礎工学研究部門

概要：応力腐食割れのいくつかの仮説メカニズムを検証、選択（脆化元素＝酸素 or 水素）するためシミュレーションを行う。

(15) 中性子検出器開発に関わるシミュレーション研究と実験による検証

部署：(東海)量子ビーム応用研究部門、J-PARC センター

概要：実験及び開発研究を先導（設計支援を含む）するため、高精度シミュレーションを行い、データを提供する。

(16) 高温中性子照射、SiC 半導体性能向上、第一原理計算の並列化手法の研究

部署：(高崎)量子ビーム応用研究部門

概要：シミュレーションコード開発という目的に対し、並列手法開発に関連した技術支援を行う。

(17) アクチニド化合物の基礎物性値評価シミュレーション研究

部署：(大洗)次世代原子力システム研究開発部門、(東海)原子力基礎工学研究部門、(東海)先端基礎研究センター

概要：物性評価のため、高精度並列シミュレーション手法の構築と実験結果の説明及び予測の実施を行う。

(18) 分子動力学計算と実験による MA 含有 MOX の熱物性と微視的構造の評価

部署：(大洗)次世代原子力システム研究開発部門、(東海)原子力基礎工学研究部門、(東海)先端基礎研究センター

概要：MA 含有 MOX 燃料の物性評価のため、高精度シミュレーション手法を確立し、実

験結果の予測やその解釈を行う

(19) 構造材料照射に関わる材料強度等の物性評価シミュレーション研究

部署：(東海)原子力基礎工学研究部門

概要：材料強度基礎パラメータの導出し提供するためモデリング及びシミュレーションを行う。

(20) Fe 中における He の拡散と結合状態に関する原子論的モデリング

部署：(東海)核融合研究開発部門

概要：核融合環境化での長期の中性子照射による材料組織変化を予測するモデルを確立する。

(21) 生体分子シミュレーションコード開発

部署：(関西)量子ビーム応用研究部門

概要：シミュレーションコード開発を目標として、機能改良等を共同（分担して）で行う。

(22) ガラス溶融固化シミュレーション高速化

部署：(東海)核燃料サイクル研究開発部門

概要：ガラス固化プロセスの温度や流量等の運転パラメータの最適化をするために膨大な計算を効率化する。

1 1. 国際協力

国際協力の一覧を以下に示す。

(1) フラウンホファー研究機構スカイ研究所 (SCAI)：独国

“計算科学技術の研究開発に関する日本原子力研究開発機構とフラウンホファー研究機構科学計算アルゴリズム研究所(SCAI)との間の覚書”

(1998 年度～)

(2) シュツットガルト大学高度計算機センター (HLRS)：独国

“計算科学技術の分野における協力に関する日本原子力研究開発機構とシュツットガルト大学との間の取決め”

1999 年度～)

(3) ツールーズ情報研究所 (IRIT)、並列情報学研究所 (LIP)：仏国

“ハイパフォーマンス疎行列代数演算のためのツールの研究開発協力に関する日本原子力研究開発機構とツールーズ情報処理研究所、並列情報学研究所との間の覚書”

(2005 年度～)

(4) 原子力庁 (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～)

(5) ドレスデン工科大学 (TUD) : 独国

“高並列化アルゴリズムのパフォーマンス解析に関するドレスデン工科大学情報サービス・高性能計算センターとの間の覚書”

(2007 年度～)

付録2
平成 23 年度計算科学技術研究実績

This is a blank page.

平成 23 年度 計算科学技術研究実績

1. 研究論文、査読付き会議論文等

室	研究論文	査読付き会議論文
高度計算機技術開発室	1 0	1 2
シミュレーション技術開発室	2 4	1 2
合計	3 4	2 4

(平成 24 年 3 月 31 日現在)

【高度計算機技術開発室】

<研究論文>

- Tashiro Toru, Tatekawa Takayuki,
“Stochastic Dynamics Toward the Steady State of Self-gravitating Systems” ,
Numerical Simulations of Physical and Engineering Processes (Intech) pp.301-318
(2011)
- Miyamura Hiroko, Hayashi Sachiko, Suzuki Yoshio, Takemiya Hiroshi,
“Spatio-temporal Mapping -A Technique for Overview Visualization of Time-series
Datasets-” ,
Progress in Nuclear Science and Technology, Vol.2, pp.603-608 (2011)
- 山田 知典, 塩谷 隆二, 吉村 忍
原子力発電施設の大規模耐震シミュレーションの進展,
シミュレーション Vol.30, No.2, PP.65-69 (2011)
- Kushida Noriyuki,
“On-the-fly Computing on Many-core Processors in Nuclear Applications” ,
Progress in Nuclear Science and Technology, Vol.2, pp.663-669 (2011)
- Tatekawa Takayuki, Teshima Naoya, Suzuki Yoshio, Takemiya Hiroshi,
“Fault-tolerant Mechanism of Both Job Execution and File Transfer for Integrated
Nuclear Energy Simulation” ,
Progress in Nuclear Science and Technology, Vol. 2, pp. 591-597 (2011)
- Kim G., Nakajima Kohei, Teshima Naoya, Tatekawa Takayuki, Suzuki Yoshio, Takemiya
Hiroshi,
“Full-scale 3D Vibration Simulator for an Entire Nuclear Power Plant on the Simple
Orchestration Application Framework” ,
Progress in Nuclear Science and Technology, Vol. 2, pp.634-638 (2011)
- Zhou Z., Nishida Akemi, Kuwamura Hitoshi,
“Applicability of Finite Element Method to Collapse Analysis of Steel Connection
under Compression” ,
Progress in Nuclear Science and Technology, Vol. 2, pp.481-485 (2011)
- Quinay P. E. B., Ichimura Tsuyoshi, Hori Muneo, Wijerathne M. L. L., Nishida Akemi,
“Seismic Structural Response Analysis Considering Fault-Structure System;

- Application to Nuclear Power Plant Structures” ,
 Progress in Nuclear Science and Technology, Vol. 2, pp.516-523 (2011)
- Nishida Akemi, Araya Fumimasa, Kushida Noriyuki, Kondo Makoto, Sakai Michiya, Shiogama Yuzo,
 “Elastic-plastic Connection Model Describing Dynamic Interactions of Component Connections” ,
 Progress in Nuclear Science and Technology, Vol. 2, pp.576-581 (2011)
 - 宮村 浩子, 大坐島 智, 中尾 彰宏, 川島 幸之助, 手島 直哉, 鈴木 喜雄, 武宮 博
 大規模ネットワークデータの可視化; 大量のデータの流れを見る,
 全 NUA C&C システムユーザー会平成 22 年度論文集 (CD-ROM) (2011)

<査読付き会議論文>

- Kushida Noriyuki, Fujibayashi Kenichi, Takemiya Hiroshi,
 “Development of a High-speed Eigenvalue-solver for Constant Plasma Monitoring on a Cell Cluster System” ,
 Procedia Computer Science, Vol.4, pp.898-907 (2011)
- Miyamura Hiroko, Kureta Masatoshi, Segawa Mariko, Kubo Jun, Saito Takafumi, Suzuki Yoshio, Takemiya Hiroshi,
 “Visualization of Blurred Images of Liquid by Multi-scale Analysis” ,
 Proceedings of 11th Asian Symposium on Visualization (ASV-11) (CD-ROM) (2011)
- Kushida Noriyuki, Takemiya Hiroshi, Tokuda Shinji
 “Eigenvalue Solution on the Heterogeneous Multicore Cluster for Nuclear Fusion Reactor Monitoring” ,
 Proceedings of International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC '09) (USB Flash Drive)
- Kushida Noriyuki,
 “Element-wise Implementation of Iterative Solvers for FEM Problems on the Cell Processor; An Optimization of the FEM for a Low B/F Ratio Processor” ,
 Proceedings of 19th Euromicro International Conference on Parallel, Distributed and Network-Based Computing (PDP 2011), PP.401-408
- Suzuki Yoshio,
 “Cerebral Methodology Based Computing to Estimate Real Phenomena from Large-scale Nuclear Simulation” ,
 Proceedings of 19th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-19) (CD-ROM), 2011
- Uzawa Ken, Watanabe Tadashi,
 “Effects of Turbulence Near a Free Surface on the Dynamics of Two-phase Flow” ,
 ICONE19 (16-19, May 2011, Makuhari, Japan)
- Nishida Akemi, Ohashi Yasuhiro, Obi Hiroto, Takeuchi Yoshitaka, Takuji Hamamoto,

- “Design Examples in Tentative AIJ Guideline” ,
 9th International Conference on Shock & Impact Loads on Structures (SiLOS) (Fukuoka, Japan, Nov. 16-18, 2011)
- Nishida Akemi, Iigaki Kazuhiko,
 “Impact Response Analysis of a Coaxial Double-pipe Structure by using Spectral Element Method” ,
 PVP2011(July, 17-21, 2011, Maryland, USA)
 - Idomura Yasuhiro, Jolliet S.,
 “Performance evaluations of gyrokinetic Eulerian code GT5D on massively parallel multi-core platforms” ,
 Proceedings of International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC '11) (USB Flash Drive) (2011)
 - Zhou Z., Kuwamura Hitoshi, Nishida Akemi,
 “Effect of Micro Voids on Stress Triaxiality-plastic Strain States of Notched Steels” ,
 Procedia Engineering, Vol.10, pp.1433-1439 (2011)
 - Miyamura Hiroko, Ozahata Satoshi, Shinano Yuji, Miyashiro Ryuhei,
 “Adaptive View-dependent Tree Graph Visualization” ,
 Proceedings of 8th International Joint Conference on Computer Science and Software Engineering (JCSSE-2011), pp.187-192 (2011)
 - Kushida Noriyuki,
 “Acceleration of Infrasound and Radioactive Transfer Simulation with Multicore Processors” ,
 Proceedings of 20th Euromicro International Conference on Parallel, Distributed and Network-Based Computing (PDP 2012), pp.7-8 (2012)

【シミュレーション技術開発室】

<研究論文>

- Kunimi Masaya, Nagai Yuki, Kato Yusuke,
 “Josephson Effects in One-dimensional Supersolids” ,
 Physical Review B, Vol.84, No.9, pp.094521_1-094521_9 (2011)
- Nakai Noriyuki, Nakamura Hiroki, Ota Yukihiro, Nagai Yuki, Hayashi Nobuhiko, Machida Masahiko,
 “First-principles-based s_{\pm} -wave Modeling for Iron-based Superconductors; Specific Heat and Nuclear Magnetic Relaxation Rate” ,
 Physical Review B, Vol.82, No.9, pp.094501_1-094501_5 (2010)
- Nagai Yuki, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 “Superconducting Gap Function in the Organic Superconductor $(\text{TMTSF})_2\text{ClO}_4$ with Anion Ordering; First-principles Calculations and Quasiclassical Analysis for Angle-resolved Heat Capacity” ,

- Physical Review B, Vol. 83, No. 10, pp.104523_1-104523_8 (2011)
- Yamada Susumu, Okumura Masahiko, Imamura Toshiyuki, Machida Masahiko,
 “Direct Extension of the Density-matrix Renormalization Group Method Toward
 Two-dimensional Large Quantum Lattices and Related High-performance Computing” ,
 Japan Journal of Industrial and Applied Mathematics, Vol. 28, No. 1, pp. 141-151 (2011)
 - Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 “First-principles Studies for the Hydrogen Doping Effects on Iron-based
 Superconductors” ,
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 80, No. 7, pp. 073705_1-073705_4 (2011)
 - Nagai Yuki, Kuroki Kazuhiko,
 “Determination of the Pairing State in Iron-based Superconductors through Neutron
 Scattering” ,
 Physical Review B, Vol. 83, No. 22, pp. 220516_1-220516_4 (2011)
 - Koizumi Akihito, Suzuki Kimichi, Shiga Motoyuki, Tachikawa Masanori,
 “A Concerted Mechanism between Proton Transfer of Zundel Anion and Displacement of
 Counter Cation” ,
 Journal of Chemical Physics, Vol. 134, No. 3, pp. 031101_1-031101_3 (2011)
 - 志賀 基之
Ab initio 経路積分法：量子多体系の第一原理計算,
 Molecular Science(インターネット), Vol. 5, No. 1, pp. A0038_1-A0038_9 (2011)
 - Dopieralski P., Anjukandi P., Ruckert M., Shiga Motoyuki, Ribas-Arino J., Marx D.,
 “On the Role of Polymer Chains in Transducing External Mechanical Forces to
 Benzocyclobutene Mechanophores”
 Journal of Materials Chemistry, Vol. 21, No. 23, pp. 8309-8316 (2011)
 - Fujishima Hironobu, Mine Makoto, Okumura Masahiko, Yajima Tetsu,
 “Decay of Resonance Structure and Trapping Effect in Potential Scattering Problem
 of Self-focusing Wave Packet” ,
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 80, No. 18, pp. 084003_1-084003_7 (2011)
 - Ebihara Kenichi, Yamaguchi Masatake, Nishiyama Yutaka, Onizawa Kunio, Matsuzawa
 Hiroshi,
 “Effect of Carbon on Irradiation-induced Grain-boundary Phosphorus Segregation in
 Reactor Pressure Vessel Steels Using First-principles-based Rate Theory Model” ,
 Journal of Nuclear Materials, Vol. 414, No. 2, pp. 328-335 (2011)
 - Sasa Narimasa, Machida Masahiko,
 “Large Scale Numerical Simulation for Superfluid Turbulence” ,
 Progress in Nuclear Science and Technology, Vol. 2, pp. 609-612 (2011)
 - Sasa Narimasa, Kano Takuma, Machida Masahiko, Lvov V. S., Rudenko O., Tsubota Makoto,
 “Energy Spectra of Quantum Turbulence : Large-scale Simulation and Modeling” ,
 Physical Review B, Vol. 84, No. 5, pp. 054525_1-054525_6 (2011)
 - Koyama Takehide, Ozaki Yuzuru, Ueda Koichi, Mito Takeshi, Kohara Takao, Waki Tsuyoshi,

Tabata Yoshikazu, Michioka Chiaki, Yoshimura Kazuyoshi, Suzuki Michito, Nakamura Hiroyuki,

“Partial Gap Opening on the Fermi Surface of the Noncentrosymmetric Superconductor $\text{Mo}_3\text{Al}_2\text{C}$ ” ,

Physical Review B, Vol. 84, No. 21, pp. 212501_1-212501_4 (2011)

- Kobayashi Hisao, Ikeda Shugo, Yoda Yoshitaka, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“Orthorhombic Fluctuations in Tetragonal $A\text{Fe}_2\text{As}_2$ ($A = \text{Sr}$ and Eu)” ,
Physical Review B, vol. 84, No. 18, pp. 184304_1-184304_7 (2011)
- Sugawara Shuichi, Yoshikawa Takehiro, Takayanagi Toshiyuki, Shiga Motoyuki,
Tachikawa Masanori,
“Quantum Proton Transfer in Hydrated Sulfuric Acid Clusters: A Perspective from
Semiempirical Path Integral Simulations” ,
Journal of Physical Chemistry A, Vol. 115, No. 42, pp. 11486-11494 (2011).
- Daido Masashi, Koizumi Akihito, Shiga Motoyuki, Tachikawa Masanori,
“Nuclear Quantum Effect on the Structure of Guanine Cytosine Pair” ,
Theoretical Chemistry Accounts, Vol. 130, No. 2-3, pp. 385-391 (2011).
- Koizumi Akihito, Suzuki Kimichi, Shiga Motoyuki, Tachikawa Masanori,
“Ab initio Path Integral Simulation of $\text{AgOH}(\text{H}_2\text{O})$ ” ,
International Journal of Quantum Chemistry, Vol. 112, No. 1, pp. 136-139 (2011).
- Sugimoto Masataka, Shiga Motoyuki, Tachikawa Masanori,
“Nuclear Quantum Effect on the Dissociation Energies of Cationic Hydrogen Clusters” ,
Computational Theoretical Chemistry Vol. 975, No. 1-3, pp. 31-37 (2011)
- Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Machida Masahiko,
“Efficient Numerical Self-Consistent Mean-Field Approach for Fermionic Many-Body
Systems by Polynomial Expansion on Spectral Density” ,
Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 81, No. 2, pp. 024710_1-024710_6 (2012)
- Imai Yoshinori, Takahashi Hideyuki, Kitagawa Kentaro, Matsubayashi Kazuyuki, Nakai
Noriyuki, Nagai Yuki, Uwatoko Yoshiya, Machida Masahiko, Maeda Atsutaka,
“Microwave Surface Impedance Measurements of LiFeAs Single Crystals” ,
Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 80, No. 1, pp. 013704_1-013704_4 (2011)
- Ebihara Kenichi, Kaburaki Hideo,
“Numerical Modeling of Thermal Desorption Spectra of Hydrogen: A Review of Thermal
Desorption Models” ,
ISIJ International, Vol. 52, No. 2, pp. 181-186 (2012)
- Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake, Kaburaki Hideo, Suzudo
Tomoaki,
“Evaluation of Stress and Hydrogen Concentration at Grain Boundary of Steels Using
Three-dimensional Polycrystalline Model” ,
Progress in Nuclear Science and Technology, Vol. 2, pp. 38-43 (2011)
- Suzudo Tomoaki, Golubov S. I., Stoller R. E., Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito,

Kaburaki Hideo,

“Annealing Simulation of Cascade Damage in α -Fe - Damage Energy and Temperature Dependence Analyses” ,

Journal of Nuclear Materials, Vol. 423, No. 1-3, pp. 40-46 (2012)

< 査読付き会議論文 >

- Shimizu Futoshi, Ogata Shigenobu, Li J.,
 “Theory of Shear Banding in Metallic Glasses and Molecular Dynamics Calculations” ,
 Materials Transactions, Vol. 48, No. 11, pp. 2923-2927 (2007)
- Machida Masahiko, Okumura Masahiko, Yamada Susumu, Ohashi Yoji, Matsumoto Hideki,
 “Stripe Formation in Fermionic Atoms on 2-D Optical Lattice; DMRG Studies for n -leg
 Repulsive Hubbard Ladders” ,
 Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, Vol. 22, No. 3, pp. 275-279 (2009)
- Nakai Noriyuki, Nakamura Hiroki, Ota Yukihiro, Nagai Yuki, Hayashi Nobuhiko, Machida
 Masahiko,
 “Small Jump of Specific Heat and Small Gap in Iron Pnictide Superconductors” ,
 Physica C, Vol. 470, No. Suppl. 1, pp. S368-S369 (9th International Conference on
 Materials and Mechanisms of Superconductivity (M²S-IX)) (2010)
- Okumura Masahiko, Yamada Susumu, Machida Masahiko,
 “Density-matrix Renormalization-group Studies for One-dimensional Polarized
 Anderson-Hubbard Model” ,
 Physica C, 2010, Vol. 470, No. Suppl. 1, pp. S952-S954 (9th International Conference on
 Materials and Mechanisms of Superconductivity (M²S-IX)) (2010)
- Okumura Masahiko, Onishi Hiroaki, Yamada Susumu, Machida Masahiko,
 “Dynamics of Attractively Interacting Fermi Atoms in One-dimensional Optical
 Lattices; Non-Equilibrium Simulations of Fermi Superfluidity” ,
 Physica C, Vol. 470, No. Suppl. 1, pp. S949-S951 (9th International Conference on
 Materials and Mechanisms of Superconductivity (M²S-IX)) (2010)
- Nakai Noriyuki, Machida Masahiko,
 “Simulation Study on the Vortex Penetration in the Presence of the Square Antidot
 Array” ,
 Physica C, Vol. 470, No. 20, pp. 1148-1150 (22nd International Symposium on
 Superconductivity) (2010)
- Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 “First-principles Study of Light-element Doping Effects on Iron-based
 Superconductors” ,
 Physica C, Vol. 471, No. 21-22, pp. 662-665 (23rd International Symposium on
 Superconductivity) (2011)
- Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki, Machida Masahiko,
 “Parallelization Design on Multi-core Platforms in Density Matrix Renormalization

- Group Toward 2-D Quantum Strongly-correlated Systems” ,
 Proceedings of International Conference for High Performance Computing, Networking,
 Storage and Analysis (SC '11) (USB Flash Drive) (2011)
- Suzudo Tomoaki, Kaburaki Hideo, Yamaguchi Masatake,
 “Modeling of the Grain Boundary Segregation of Helium in α -Fe” ,
 Journal of Nuclear Materials, Vol. 417, No. 1-3, pp. 1102-1105 (14th International
 Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM-14)) (2011)
 - Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake, Kaburaki Hideo, Ebihara Kenichi,
 “Multiscale Modeling of Helium-vacancy Cluster Nucleation Under Irradiation; A
 Kinetic Monte-Carlo Approach” ,
 Materials Research Society Symposium Proceedings, Vol. 1215 (Materials Research
 Society 2009 Fall Meeting) (2010)
 - Nagai Yuki, Nakamura Hiroki, Suzuki Katsuhiro, Usui Hidetomo, Kuroki Kazuhiko,
 Machida Masahiko,
 “Theoretical Analysis for Inelastic Neutron Scattering on $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ Using
 Realistic Three-Dimensional 10-Orbital Tight-Binding Model” ,
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 80, Supplement B SB021 (2011)
 - Hiroki Nakamura, Masahiko Machida
 “First-principles Study of Hydrogen-doping Effects on Iron-based
 Superconductors” ,
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 80, No. Suppl. B, pp. SB009_1-009_4 (2011)

2. 国際会議、国内会議での発表等

【システム計算科学センター】

<口頭発表>

- Nakajima Norihiro, Kawamura Takuma, Takemiya Hiroshi, Uzawa Ken, Idomura Yasuhiro,
 Yamada Susumu,
 “Research and Development in Center of Computational Science and e-Systems, JAEA” ,
 International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and
 Analysis (SC '11), (November 12-18, 2011, Seattle, U. S. A.)
- Kaburaki Hideo, Li J., Yip S., Kimizuka Hajime,
 “Molecular Dynamics Simulation of Phonon Transport in the Green-Kubo Formalism of
 Thermal Conductivity”
 Conference on Computational Physics 2011 (CCP 2011), (October 30 - November 3, 2011,
 Gatlinburg, U. S. A.)
- Kaburaki Hideo, Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake,
 “Dislocation Emission from the Transformed Crack Tip of Bcc Iron Bulk Nanocrystal
 - Molecular Dynamics Simulation”
 Materials Research Society 2011 Fall Meeting, (November 28 - December 2, 2011, Boston,
 U. S. A.)

【高度計算機技術開発室】

<査読無し論文>

- 西田 明美、鈴木 喜雄、林 幸子、國友 孝洋、熊澤 峰夫、羽佐田 葉子
原子力施設の振動特性精密評価のためのアクロスによる周波数コムスペクトル計測法, 1;
システム同定と健全性監視にむけた研究の全体概要,
第 58 回理論応用力学講演会講演論文集 (CD-ROM)
- 西田 明美、鈴木 喜雄、林 幸子、國友 孝洋、熊澤 峰夫、羽佐田 葉子
原子力施設の振動特性精密評価のためのアクロスによる周波数コム計測, 2; アクロスによる
構造物の振動特性の精密計測,
第 58 回理論応用力学講演会講演論文集 (CD-ROM)
- 西田 明美、鈴木 喜雄、林 幸子、國友 孝洋、熊澤 峰夫、羽佐田 葉子
原子力施設の振動特性精密評価のためのアクロスによる周波数コムスペクトル計測法, 3;
存否法による 3 次元構造物の多元的振動特性評価,
第 58 回理論応用力学講演会講演論文集 (CD-ROM)
- 西田 明美、飯垣 和彦
二重配管構造の衝撃応答解析,
第 59 回理論応用力学講演会講演論文集 (CD-ROM)
- Quinay P. E. B., Ichimura Tsuyoshi, Hori Muneo, Nishida Akemi,
“A Physical Modeling Approach for Seismic Response Estimation of Nuclear Power Plant
Structures” ,
Proceedings of 3rd ASEAN Civil Engineering Conference/3rd ASEAN Environmental
Engineering Conference/1st Seminar on Asian Water Environments
- 西田 明美
衝撃解析ソフトによる詳細応答評価,
構造物の耐衝撃設計ガイドラインに関するシンポジウム資料集, PP. 105-112
- 鈴木 喜雄、宮村 浩子
原子力施設の耐震シミュレーションのための妥当性評価システムの研究開発,
計算工学講演会論文集 (CD-ROM) , Vol. 16
- 山田 知典
次世代スーパーコンピュータ京における固体有限要素法解析の基礎的検討,
計算工学講演会論文集 (CD-ROM) , Vol. 16
- 河村 拓馬、宮村 浩子
テンソルボリュームデータの可視化,
シミュレーション辞典
- Tatekawa Takayuki, Teshima Naoya, Kushida Noriyuki, Miyamura Hiroko, Kim G., Takemiya
Hiroshi,
“High Performance Computing for Analyzing PB-scale Data in Nuclear Experiments and
Simulations” ,
High Performance Computing on Vector Systems 2011, pp.107-117

- Uzawa Ken, Watanabe Tadashi, Nishida Akemi, Suzuki Yoshio, Takemiya Hiroshi,
“Current Status and Future Direction of Full-scale Vibration Simulator for Entire Nuclear Power Plants” ,
High Performance Computing on Vector Systems 2011, pp.171-184

<口頭発表>

- Tatekawa Takayuki, Teshima Naoya, Suzuki Yoshio, Takemiya Hiroshi,
“Fault-tolerant Mechanism for Integrated Nuclear Energy Simulation on Grid Infrastructure” ,
Mini-Symposium in SC '10, 2010
- 鈴木 喜雄、鵜沢 憲、西田 明美、中島 憲宏
原子力施設のための3次元仮想振動台の研究開発, 2; 組立構造-組立流体連成フレームワーク,
日本原子力学会 2011 年秋の大会, 2011
- 中島 憲宏、西田 明美、鈴木 喜雄、武宮 博、吉村 忍
原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション,
科学技術振興機構戦略的創造研究推進事業「マルチスケール・マルチフィジックス現象の統合シミュレーション」平成 23 年度公開シンポジウム, 2011
- Tatekawa Takayuki, Suzuki Yoshio, Takemiya Hiroshi, Hayashi Nobuhiko, Kamata Isao,
“SOAF: A Grid-based Framework for Intergating Large-scale Long-run Applications” ,
ITER IM Technology Workshop (8-10 June 2011, Cadarache, France)
- 河村 拓馬、宮村 浩子、武宮 博
バイアス関数によるカラーマップ自動調整技術,
ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム, 2011
- Kawamura Takuma,
“Bias Function for Color Map Adjustment for Unstructured Dataset Composed of the Huge Number of Parts” ,
International Workshop of JAEA on SC11 Exhibition booth (12-20 November 2011, Seattle, Washington, USA)
- 鵜沢 憲
気液二相流の乱流モデルの妥当性検証,
第 2 回原子力計算科学セミナー, 2011
- 鵜沢 憲
OpenFOAM による使用済燃料プールのスロッシング解析,
オープン CAE シンポジウム 2011, 2011
- 鵜沢 憲
原子力施設のための 3 次元仮想振動台の研究開発, 4; 気液二相界面近傍における乱流モデルの検証,
日本原子力学会 2011 年秋の大会, 2011
- 西田 明美、鈴木 喜雄、木野 千晶、鵜沢 憲

- 原子力施設のための3次元仮想振動台の研究開発, 1; 全体概要,
日本原子力学会 2011 年秋の大会, 2011
- 立川 崇之、櫛田 慶幸、宮村 浩子、手島 直哉、藤林 健一、武宮 博
原子力分野のための大規模データ解析システムの研究開発,
第16回日本計算工学講演会, 2011
 - Seki Akiyuki,
“Development of Radioactive Contamination map of Fukushima Nuclear Accident” ,
15th Teraflop Workshop, 2012
 - 武宮 博
放射線量等データ公開システムの構築,
放射線量等分布マップシンポジウム, 2012
 - Kawamura Takuma,
“Large-scale Volume Visualization of 3D Virtual Plant Vibration Simulation Data
Using Particle-based Volume Rendering” ,
15th Teraflop Workshop, 2012
 - 関 暁之
マップデータ公開システムの構築,
日本原子力学会 2012 年春の年会, 2012
 - Takemiya Hiroshi,
“Overview of the Next Generation Seismic Simulation Project in the HPCI Strategic
Program” ,
International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and
Analysis (SC '11), (November 12-18, 2011, Seattle, U. S. A.)
 - 熊澤 峰夫、国友 孝洋、西田 明美
「音響周波数コムによる建造物のシステム解析」, 2; 精密な測定データ取得法; 合理的な
データ解析法の提案,
平成 22 年度第 1 回東京工業大学共同研究「シェル・空間構造の減衰と制振・免震に関する
研究」に関するワークショップ, 2010
 - 宮村 浩子、吉田 雅裕、大坐島 智、高橋 成雄、中尾 彰宏、川島 幸之助
大規模ネットワークデータ解析のためのマルチレベルグラフィック,
電子情報通信学会ネットワークシステム研究会, 2012
 - Yamada Tomonori,
“Towards petascale computing in macro-scale solid mechanics” ,
11th US National Congress on Computational Mechanics (USNCCM-11), (July 25-28, 2011,
Minneapolis, U. S. A.)
 - Yamada Tomonori,
“Towards full scale seismic simulation of nuclear power plant” ,
Low Carbon Earth Summit 2011 (LCES 2011), (October 19-26, 2011, Dalian, China)
 - Uzawa Ken,
“Improvement of fluid analysis capability and application to two phase flow” ,

- ・ International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC '11), (November 12-18, 2011, Seattle, U. S. A.)

【シミュレーション技術開発室】

<査読無し論文>

- ・ 奥村 雅彦
フェルミ原子光格子系の基礎知識,
物性研究, Vol. 96, No. 6, PP. 617-656
- ・ 奥村 雅彦、山田 進、町田 昌彦
低次元強相関フェルミ原子光学格子系の密度行列繰り込み群による解析,
素粒子論研究, Vol. 116, No. 2, PP. B15-B17
- ・ 小林 恵太、峰 真如、奥村 雅彦、山中 由也
光学格子中ボース・アインシュタイン凝縮の不安定性の量子場の理論による解析,
素粒子論研究, Vol. 116, No. 2, PP. B64-B66
- ・ 中村 祐介、峰 真如、奥村 雅彦、山中 由也
解析的手法による Bose-Einstein condensate における複素モード出現条件,
素粒子論研究, Vol. 116, No. 2, PP. B67-B69
- ・ 峰 真如、小出 知威、奥村 雅彦、山中 由也
量子力学における H 定理とゆらぎ定理,
素粒子論研究, Vol. 116, No. 2, PP. B110-B112
- ・ 奥村 雅彦、山田 進、町田 昌彦
時間依存密度行列繰り込み群法によるフェルミ原子気体系の解析,
素粒子論研究, Vol. 116, No. 6, PP. F69-F71
- ・ 奥村 雅彦、大西 弘明、山田 進、町田 昌彦
光学格子系における緩和過程の時間依存密度行列繰り込み群法による解析,
素粒子論研究, Vol. 118, No. 1, PP. A25-A27
- ・ 奥村 雅彦、山田 進、町田 昌彦
低次元強相関フェルミ原子光学格子系の密度行列繰り込み群による解析,
素粒子論研究, Vol. 116, No. 6, PP. B15-B17

<口頭発表>

- ・ Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“First-principles Study of Light-element Doping Effects on Iron-based Superconductors”
American Physical Society 2011 March Meeting, 2011
- ・ Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“Hydrogen Doping Effects on Iron-based Superconductors; A First-principles Study”
International Workshop on Novel Superconductors and Super Materials 2011 (NS² 2011),
2011
- ・ 中井 宣之、永井 佑紀、町田 昌彦

- 平均場理論による長周期スピン構造がある場合の1粒子スペクトル,
日本物理学会第66回年次大会, 2011
- Yamamoto Atsushi, Yamada Susumu, Machida Masahiko,
“Analysis of the Single-particle Excitation Spectrum of Ultracold Fermions in 1D Optical Lattices”
American Physical Society 2011 March Meeting, 2011
 - 鈴木 通人
URu₂Si₂の多極子秩序状態の電子構造研究,
日本物理学会第66回年次大会, 2011
 - Suzuki Michito,
“First Principle Theory of Multipole Ordered State in NpO₂”
1st ASRC International Workshop; New Approach to the Exotic Phases of Actinides Compounds under Unconventional Experimental Conditions, 2011
 - 五十嵐 亮、奥村 雅彦、山田 進、町田 昌彦
スピントラップ系のギャップの系統的調査, 2,
日本物理学会第66回年次大会, 2011
 - 山本 篤史、山田 進、町田 昌彦
光格子中における引力相互作用する冷却フェルミ原子の1粒子励起スペクトルの解析,
日本物理学会第66回年次大会, 2011
 - 山田 進、今村 俊幸、奥村 雅彦、五十嵐 亮、山本 篤史、町田 昌彦
次世代計算機「京」での高性能並列計算に向けた密度行列繰り込み群法の超大規模並列化,
第16回日本計算工学講演会, 2011
 - Nagai Yuki, Machida Masahiko,
“Large-scale Self-consistent BdG Calculation in Vortex Lattice System”
1st International Workshop on Superconducting Vortex Matter, 2011
 - 佐々 成正、町田 昌彦
スペクトル法と高次差分による大規模乱流シミュレーションによる精度比較,
第16回日本計算工学講演会, 2011
 - 永井 佑紀、黒木 和彦
中性子散乱実験を用いた鉄系超伝導体のペアリング状態の判別方法,
京都大学基礎物理学研究所研究会「鉄系高温超伝導の物理」, 2011
 - Nagai Yuki, Nakai Noriyuki, Machida Masahiko,
“Direct Large-scale Numerical Demonstration of Quasiparticle Interference in Magnetic Fields; Orthonormal Polynomial Approach”
13th International Workshop on Vortex Matter in Superconductors, 2011
 - Shiga Motoyuki,
“Ab Initio Path Integral Simulations of Hydrogen Bonded Systems”
9th Triennial Congress of the World Association of Theoretical and Computational Chemists (WATOC 2011), 2011
 - Shiga Motoyuki,

“Ab Initio Path Integral Simulations of Hydrogen Bonded Systems”

7th Congress of the International Society for Theoretical Chemical Physics (ISTCP-7),
2011

- 志賀 基之
水素の量子統計的ゆらぎを考慮した第一原理分子動力学計算,
第5回分子科学討論会, 2011
- 志賀 基之
量子統計に従ったプロトン移動反応の経路探索,
化学反応経路探索のニューフロンティア 2011, 2011
- 海老原 健一、蕪木 英雄、高井 健一
デトラップ活性化エネルギー算出のための Choo-Lee の手法の適用性に関する数値解析評価,
日本鉄鋼協会第162回秋季講演大会, 2011
- 永井 佑紀、黒木 和彦
鉄系超伝導体の中性子散乱実験の系統的理論的解析,
日本物理学会 2011 年秋季大会(物性), 2011
- 永井 佑紀、中井 宣之、町田 昌彦
超伝導渦糸格子中の準粒子干渉効果の大規模自己無撞着計算 による解析,
日本物理学会 2011 年秋季大会(物性), 2011
- 中村 博樹、町田 昌彦、加藤 正人
第一原理計算に基づく二酸化プルトニウムの熱物性の評価,
日本原子力学会 2011 年秋の大会, 2011
- 中村 博樹、町田 昌彦
鉄系超伝導体における LDA+U 法による低磁気モーメント状態の解析,
日本物理学会 2011 年秋季大会(物性), 2011
- 山田 進、五十嵐 亮、奥村 雅彦、大西 弘明、山本 篤史、町田 昌彦
準2次元ハバードモデルの d-波相関関数の振る舞い; 並列 DMRG 法によるシミュレーション,
日本物理学会 2011 年秋季大会(物性), 2011
- 小林 恵太、奥村 雅彦、太田 幸宏、山田 進、町田 昌彦
光学格子に閉じ込められた p 軌道冷却フェルミオン原子気体の解析,
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」, 2011
- 鈴木 通人
多極子秩序下における URu₂Si₂ の電子状態研究,
日本物理学会 2011 年秋季大会(物性), 2011
- 山田 進、山本 篤史、奥村 雅彦、今村 俊幸、町田 昌彦
動的密度行列繰り込み群法に現れる線形方程式に対する反復解法の収束性,
反復法の工学への応用と基礎, 2011
- 山田 進、今村 俊幸、町田 昌彦
密度行列繰り込み群法の大規模並列化; 超並列計算機向きの通信手法の提案,
並列固有値解析研究会, 2011
- Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo, Yamaguchi Masatake,

- “Screw Dislocation Kink Dynamics Model in BCC Iron Based on First-principles and Molecular Dynamics Calculations”
Materials Research Society 2011 Fall Meeting, 2011
- 永井 佑紀、中井 宣之、町田 昌彦
渦糸格子系における準粒子干渉効果の大規模数値解析,
第 19 回渦糸物理国内会議, 2011
 - 志賀 基之
量子統計に従ったプロトン移動反応の経路探索－基礎,
第 25 回分子シミュレーション討論会, 2011
 - 志賀 基之、藤崎 弘士
量子統計に従ったプロトン移動反応の経路探索; 応用,
日本物理学会第 67 回年次大会, 2012
 - 蕪木 英雄
分子動力学法による BCC 鉄の延性 - 脆性遷移シミュレーション,
第 1 回マルチスケールマテリアルモデリングシンポジウム, 2011
 - 山口 正剛、亀田 純、海老原 健一、板倉 充洋、蕪木 英雄
鉄の粒界水素脆性における水素のモバイル効果; 第一原理計算,
日本鉄鋼協会第 162 回秋季講演大会, 2011
 - 山口 正剛、亀田 純、海老原 健一、板倉 充洋、蕪木 英雄
鉄の粒界水素脆性における水素のモバイル効果; 第一原理計算とマククリーン式の一般化,
日本金属学会 2011 年秋期(第 149 回)大会, 2011
 - 山口 正剛、宇田川 豊、阿部 弘亨、関村 直人
Zr-Nb 合の腐食、水素化および照射効果に関する研究(5)シミュレーション,
日本原子力学会 2012 年春の年会, 2012
 - Nagai Yuki, Tanaka Kaori, Hayashi Nobuhiko,
“Numerical Method for Mesoscopic Superconductors in the Quasiclassical Theory”
Pathbreaking Phase Sciences in Superconductivity 2012 (PPSS2012), (15, January,
Osaka, Japan)
 - 鈴木 通人
第一原理計算による強相関電子系化合物の量子状態解析,
若手理論研究会, 2011
 - Yamamoto Atsushi, Yamada Susumu, Machida Masahiko,
“Exploration of Strongly-correlated Quantum Phases in Ultracold Fermi Atoms Loaded
on Optical Lattices with Staggered U Alternation”
FIRST-QS²C Workshop on “Emergent Phenomena of Correlated Materials”, 2011
 - 山本 篤史、山田 進、町田 昌彦
光格子中における引力相互作用する冷却フェルミ原子の一粒子励起スペクトルの解析, 2,
日本物理学会 2011 年秋季大会(物性), 2011
 - 山田 進、今村 俊幸、町田 昌彦
量子計算に現れる疎行列ベクトル積の並列化・高速化,

- 第3回原子力計算科学セミナー, 2011
- 山田 進、奥村 雅彦、五十嵐 亮、山本 篤史、町田 昌彦
準2次元ハバードモデルに対するDMRG法の並列化・高速化; 大規模マルチコア並列計算機に向けたチューニング,
「電子相関に対する計算科学手法とその応用」に関する研究会, 2012
 - Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki, Machida Masahiko,
“Dynamical Variation of Eigenvalue Problems in Density-matrix
Renormalization-group Code”
SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing (PP-12), 2012
 - 板倉 充洋、宮代 聡、沖田 泰良
オーステナイト鋼の原子間ポテンシャル開発,
第23回CCSEワークショップ/RACEコロキウム, 2012
 - 中村 博樹、奥村 雅彦、町田 昌彦
第一原理計算によるゼオライトのCs吸着の評価,
日本原子力学会2012年春の年会, 2012
 - Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“First-principles Study on Electronic Structure of Ca-Fe-Pt-As-type Iron-based
Superconductors”
American Physical Society 2012 March Meeting, 2012
 - 永井 佑紀、田中 佳織、林 伸彦
メゾスコピック超伝導体に対する準古典数値計算手法; 円形d波超伝導ナノアイランドの
渦糸束縛状態,
日本物理学会第67回年次大会, 2012
 - Nagai Yuki, Tanaka Kaori, Hayashi Nobuhiko,
“Numerical Method of the Quasiclassical Theory for Mesoscopic Superconductors”
American Physical Society 2012 March Meeting, 2012
 - 山田 進、五十嵐 亮、奥村 雅彦、大西 弘明、山本 篤史、町田 昌彦
閉じ込めポテンシャル中斥力ハバードモデルの超流動相関; DMRGによる評価,
日本物理学会第67回年次大会, 2012
 - 山田 進、奥村 雅彦、五十嵐 亮、山本 篤史、町田 昌彦
密度行列繰り込み群法による準2次元ハバードモデルの超流動相関シミュレーション,
文部科学省「革新的ハイパフォーマンス・コンピューティング・インフラ(HPCI)の構築」;
次世代ナノ統合シミュレーションソフトウェアの研究開発(ナノ)次世代生命体統合シミュ
レーションソフトウェアの研究開発(ライフ)公開シンポジウム, 2012
 - Yamada Susumu, Okumura Masahiko, Igarashi Ryo, Yamamoto Atsushi, Machida Masahiko,
“Superfluid Correlations of Ladder-type Hubbard Model with Trapping Potential”
American Physical Society 2012 March Meeting, 2012
 - Kobayashi Keita, Okumura Masahiko, Ota Yukihiro, Yamada Susumu, Machida Masahiko,
“Haldane Phase of Ultra Cold Atom Gas Loaded on Pseudo-one-dimensional Optical
Lattice”

- American Physical Society 2012 March Meeting, 2012
- 小林 恵太、奥村 雅彦、太田 幸宏、山田 進、町田 昌彦
擬一次元光学格子中のフェルミ原子気体におけるハルデー相の解析,
Ultracold Gases; Superfluidity and Strong-Correlation 2012 (USS-2012), 2012
 - 小林 恵太、太田 幸宏、奥村 雅彦、町田 昌彦
光学格子に閉じ込められたマルチバンドフェルミ原子気体超流動の解析,
第19回渦糸物理国内会議, 2011
 - 小林 恵太、奥村 雅彦、太田 幸宏、山田 進、町田 昌彦
擬一次元光学格子冷却中性フェルミ原子気体におけるハルデー相,
日本物理学会第67回年次大会, 2012
 - 町田 昌彦、中村 博樹、加藤 正人
二酸化プルトニウムの欠陥構造の第一原理計算,
日本原子力学会 2012 年春の年会, 2012
 - 鈴木 通人
AmO₂の隠れた秩序相の第一原理計算手法による秩序状態研究,
日本物理学会第67回年次大会, 2012
 - 町田 昌彦、奥村 雅彦、中村 博樹
計算物性物理による原子力災害への取り組み; 土壌汚染の理解及びその他,
東京大学物性研究所共同利用スーパーコンピュータ成果報告会「計算科学の課題と展望」,
2012
 - Suzuki Michito,
“First Principle Study of Multipole Ordered States in URu₂Si₂”
2nd International REIMEI Workshop on New Approach to the Exotic Phases of Actinide
Compounds under Unconventional Experimental Conditions (REIMEI 2012), 2012
 - 鈴木 通人
アクチナイド化合物の第一原理計算の基礎,
J-ACTINET 計算科学スクール 2012, 2012
 - Yamaguchi Masatake, Ebihara Kenichi, Nishiyama Yutaka, Onizawa Kunio,
“First-principles Study of the Grain Boundary Embrittlement of Metals by Solute
Segregation”
16th Meeting of the International Group of Radiation Damage Mechanisms in Pressure
Vessel Steels (IGRDM-16), 2011
 - 鈴木 知明、都留 智仁、山口 正剛、蕪木 英雄
経験ポテンシャルによる α 鉄粒界におけるヘリウム空孔クラスターの安定性解析,
日本原子力学会 2012 年春の年会, 2012
 - 鈴木 知明
照射材料モデリングにおけるキネティックモンテカルロの役割,
第23回CCSEワークショップ/RACEコロキウム, 2012
 - 山口 正剛、亀田 純、海老原 健一、板倉 充洋、蕪木 英雄
鉄の粒界水素脆性に対する炭素の影響; 第一原理計算,

日本鉄鋼協会第 163 回春季講演大会, 2012

3. 技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

- ・ システム計算科学センター
“Annual report of R&D activities in Center for Computational Science & e-Systems from April 1, 2009 to March 31, 2010”
JAEA-Review 2011-034, 2011
- ・ 坂本 健作、清水 大志、鶴岡 卓哉、根本 俊行、石川 直太
“原子力機構の新大型計算機システムにおける基本性能の評価”
JAEA-Testing 2011-005, 2011
- ・ 木村 英雄、青柳 哲雄、佐藤 泰一、酒井 学、日笠 直樹、鈴木 仁、辻 実
“財務・契約系情報システム改修に関する技術報告”
JAEA-Technology 2011-027, 2011

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- ・ なし

5. 研究発表会等の開催

- ・ 第 1 回原子力計算科学セミナー(H23 年 7 月 26 日)
「最新顕微鏡技術」
- ・ 第 2 回原子力計算科学セミナー(H23 年 8 月 25 日)
「粒子法による流れのシミュレーション」、「気液二相流の乱流モデルの妥当性検証」
- ・ Mini-Symposium in SC' 11 (The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis) (H23 年 11 月 14 日-17 日)
- ・ Ultra-cold Fermi Gases: Superfluidity and Strong-Correlation 2012 (USS-2012) (H24 年 1 月 11 日-1 月 13 日)
- ・ 第 3 回原子力計算科学セミナー(H23 年 12 月 22 日)
「階層的アセンブリ構造の並列有限要素法」、「量子計算に現れる疎行列ベクトル積の並列化・高速化」
- ・ Pathbreaking Phase Sciences in Superconductivity 2012 (PPSS-2012) (H24 年 1 月 13 日-1 月 15 日)
- ・ 第 23 回 CCSE ワークショップ/RACE コロキウム (H24 年 1 月 20 日)
- ・ “原子力材料計算科学－基礎から工学応用 (高経年化・廃炉等) への展開－”
- ・ 第 4 回原子力計算科学セミナー(H24 年 3 月 29 日)
「脂質膜・リポソームの分子シミュレーション」
- ・ マテリアルチームセミナー (計 6 回開催)
 - 5 月 13 日(金) : 鈴木 知明 (日本原子研究開発機構) 講演
「キネティックモンテカルロ法-Basics & Programming」
 - 5 月 16 日(月) : 中田 真秀 (理化学研究所) 講演
「高精度線形代数演算ライブラリ MPACK の紹介」

- 5月30日(月)：鈴木 知明（日本原子力研究開発機構）講演
「キネティックモンテカルロ法2」
- 6月14日(火)：岩田 潤一（筑波大学大学院数理物質科学研究科）講演
「実空間第一原理計算シミュレーション RSDFT の開発とシミュレーション研究の現状」
- 6月24日(金)：志賀 基之（日本原子力研究開発機構）講演
「水溶液の分子シミュレーション」
- 10月19日(水)：源 聡（伊藤忠テクノソリューションズ株式会社 科学システム事業部）
「第一原理熱力学計算によるプルトニウム酸化物の不定比組成幅の評価」

・ CREST 特定課題推進チームセミナー（計2回開催）

- 10月27日(木)：松枝 宏明（仙台高等専門学校）講演
第一部「可視化における量子情報理論の適用とその応用例」
第二部「エンタングルメント・エントロピーのスケール性と時空の幾何学構造」
- 12月22日(木)：Kaori Tanaka（University of Saskatchewan, Canada）講演
「Charge Density Waves and Superconductivity in the Extended Hubbard Model」

6. 受賞等

- ・ 電気学会 電子・情報・システム部門誌 論文奨励賞受賞
木野 千晶、鈴木 喜雄、武宮 博
「科学概念語彙モデルを用いた物理シミュレーションにおける意味情報処理」
（電気学会電子・情報・システム部門、平成23年9月）
- ・ 日本原子力学会計算科学技術部会 部会奨励賞
宮村 浩子
（日本原子力学会計算科学技術部会、平成23年9月）
- ・ 日本原子力学会計算科学技術部会 部会奨励賞
鶴沢 憲
（日本原子力学会計算科学技術部会、平成23年9月）
- ・ 日本応用数理学会 ベストオーサー賞（論文部門）
山田 進、奥村 雅彦、五十嵐 亮、町田 昌彦
「量子多体系・高精度シミュレーションの研究開発：密度行列繰り込み群法の超並列化と大規模計算」
（日本応用数理学会、平成23年11月）

7. 特許等の状況

- (1)特許の出願及び登録
なし。
- (2)成果の活用（利用許諾）による収入

件名 (成果の内容)	契約先 (販売者)	権利/契約種別	H22 年度収入額
AVS/Express 並列化支援ツール	株式会社ケイ・ジー・ティ	プログラム著作権/利用許諾	58,800 円
並列分子動力学ステンシル 他 2 件	株式会社 JSOL	プログラム著作権/利用許諾	1,087,514 円

8. 外部資金の獲得に関連する事項

室	予算額(千円) (件数)
高度計算機技術開発室	83,100 (9)
シミュレーション技術開発室	55,905 (13)

【高度計算機技術開発室】

- (1) 原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション (科学技術振興機構) 3,803 千円
- (2) 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発 (次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム) 5,500 千円
- (3) 放射性物質の分布状況等に関する調査 (文部科学省) 38,614 千円
- (4) 大規模時系列ボリュームデータ解析・可視化のための高次元データポケットの生成 (文部科学省: 科研費(若手 B)) 650 千円
- (5) 大規模分散環境を用いた P2P ネットワーク流通ファイル制御システムの研究 (日本学術振興会: 科研費(基盤 B)) 650 千円
- (6) 国際熱核融合実験炉 ITER のリアルタイムモニタリングシステムの開発 (文部科学省: 科研費(若手 B)) 650 千円
- (7) 浮遊液滴の回転振動特性と内部・外部流動に関する研究 (日本学術振興会: 科研費(基盤 C)) 1,040 千円
- (8) 福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の分布状況等に関する第 2 次調査 (文部科学省) 30,893 千円
- (9) 浮遊液滴の非線形ダイナミクスを用いた高性能無容器プロセッシングに関する研究 (日本学術振興会: 科研費(基盤 B)) 1,300 千円

【シミュレーション技術開発室】

- (10) ミクロ・メゾ・マクロの各スケールのシミュレーション研究基礎の構築、各スケールに跨るマルチスケール・マルチフィジックス研究 (科学技術振興機構) 32,015 千円
- (11) 水素による原子レベルの粒界き裂発生に関する計算科学的研究開発 (JFE スチール株式会社) 3,780 千円
- (12) 構造用六方晶金属の機械的性質における計算科学的研究 (トヨタ自動車株式会社) 3,150 千円
- (13) 粒子描像による固体の熱伝導機構の解明 (日本学術振興会: 科研費(基盤 C)) 910 千円
- (14) 水素・重水素移動反応の量子統計力学的第一原理計算 (文部科学省: 科研費(若手 B)) 650 千円
- (15) 2 次元モデルに対するメニーコア並列計算機向き並列・高速化手法の研究開発 (科研費(基盤 C)) 1,560 千円
- (16) 散逸系の局在パターン生成における非局所的効果の数理的研究と応用 (日本学術振興会:

- 科研費(基盤 B) 130 千円
- (17) 量子ゆらぎと熱ゆらぎを考慮した高次系生体分子クラスターの分子論的解明 (文部科学省: 科研費(特定領域)) 480 千円
- (18) 量子多成分系分子理論システムの構築およびプロトニクス・ポジトロニクスへの展開 (科研費(若手 B)) 650 千円
- (19) MA-MOX 燃料中のヘリウム挙動の計算科学的手法による解明と体欠陥形成制御 (科研費(基盤 A)) 500 千円
- (20) 先進燃料被覆管材料の水素化および照射効果の解明に関する研究 (東北大学金属材料研究所) 42 千円
- (21) 百万画素サブミクロン分解能中性子ラジオグラフィのための固体超伝導検出器システム (日本学術振興会: 科研費(基盤 S)) 858 千円
- (22) 第一原理に基づく計算科学による LPSO 構造の電子論と構造科学の構築 (日本学術振興会: 科研費(新学術領域)) 11,180 千円

9. 産学官との連携に関連する事項

室	共同研究	委託研究	受託研究	研究協定
高度計算機技術開発室	7	0	3	0
シミュレーション技術開発室	1	0	3	0
両室共通	0	0	0	1
合計	8	0	6	1

●共同研究

【高度計算機技術開発室】

- ・ 統合シミュレーション技術を用いた生体シミュレーションに関する研究 (北陸先端科学技術大学院大学情報科学センター)
- ・ グリッドを活用した先進的大規模計算解析システム開発に関する研究 (山口大学メディア基盤センター)
- ・ グリッド環境における物性解析・材料設計シミュレーション (大阪大学産業科学研究所)
- ・ グリッド環境における Pu 含有燃料の MD 法による大規模材料シミュレーション (九州大学、近畿大学)
- ・ 核融合シミュレーションにおける大容量データ処理技術に関する研究 (大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 核融合科学研究所)
- ・ 大規模有限要素シミュレーションの結果可視化に関する研究 (株式会社竹中工務店)
- ・ 大規模複雑人工物の統合シミュレーション環境構築 (東京大学)

【シミュレーション技術開発室】

- ・ 構造用六方晶金属の機械的性質における計算科学的研究 (トヨタ自動車株式会社)

●受託研究

【高度計算機技術開発室】

- ・ 原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション (科学技術振興機構)
- ・ 次世代計算機プロジェクトにおける戦略分野「ものづくり分野」の研究開発 (東京大学)

- ・ 放射性物質の分布状況等に関する調査（文部科学省）

【シミュレーション技術開発室】

- ・ ミクロ・メゾ・マクロの各スケールのシミュレーション研究基礎の構築、各スケールに跨るマルチスケール・マルチフィジックス研究の実施（科学技術振興機構）
- ・ 水素による原子レベルの粒界き裂発生に関する計算科学的研究開発（JFE スチール株式会社）

●研究協定

- ・ 「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、原子力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 20 件に及ぶ機構内連携を実施した。

(1) 損傷頻度評価

部署：（東海）安全研究センター

概要：3次元モデルを用いる大規模耐震解析システムを提供し、建屋および機器の地震時応答解析を高精度化。

(2) ROSA 計画に関する実験と解析

部署：（東海）安全研究センター

概要：解析プログラムや可視化ソフト等の実行環境を整備し、安全評価コードの検証作業を支援。

(3) 耐震解析技術に関する研究開発

部署：（大洗）高温工学試験研究炉部、（東濃）地層処分研究開発部門

概要：大規模耐震解析システムやモデルデータを提供し、施設の耐震性評価を支援。

(4) 地下構造物の振動解析に関する技術協力

部署：（東濃）地層処分研究開発部門

概要：データの妥当性評価及び有用データの自動抽出を行うシステムを提供し、振動実験データの解析を効率化。

(5) 原子炉内の熱流動解析に関する技術協力

部署：（東海）原子力基礎工学研究部門、（東海）安全研究センター

概要：異なる解析間のデータの授受を実現するシステムを提供し、炉内構造物と炉内核熱・熱流動との解析を連成化。

(6) 炉内核熱連成振動解析の可視化

部署：（東海）安全研究センター

概要：可視化システムを提供し、連成振動解析プログラムの出力結果の解析を効率化。

(7) 原子炉圧力容器鋼の高経年化対策研究(照射脆化予測)

部署：（東海）安全研究センター

概要：脆化予測に必要な基礎パラメータを提供するため、第一原理計算にて定量的な計算を実施。

- (8) 燃料被覆管ジルコニウム合金の水素脆化に関する研究
 部署：(東海) 安全研究センター
 概要：高燃焼度燃料被覆管材 Zr 合金の実機適用性の評価のために、最新の理論計算手法を導入し、材料の腐食、水素化、照射による劣化挙動を解明し、高燃焼度燃料としての実機適用性および安全基準の合理化に対して技術的知見を供する。
- (9) 超伝導ナノ構造物性のシミュレーション研究と実験による検証
 部署：(東海)先端基礎研究開発センター
 概要：実験結果を解釈し、新たな実験を提案するため、メゾシミュレーションを行う。
- (10) 応力腐食割れ、照射材料の数値シミュレーション研究
 部署：(東海)原子力基礎工学研究部門
 概要：応力腐食割れのいくつかの仮説メカニズムを検証、選択（脆化元素＝酸素 or 水素）するためシミュレーションを行う。
- (11) 中性子検出器開発に関わるシミュレーション研究と実験による検証
 部署：(東海)量子ビーム応用研究部門、J-PARC センター
 概要：実験及び開発研究を先導（設計支援を含む）するため、高精度シミュレーションを行い、データを提供する。
- (12) 高温中性子照射、SiC 半導体性能向上、第一原理計算の並列化手法の研究
 部署：(高崎)量子ビーム応用研究部門
 概要：シミュレーションコード開発という目的に対し、並列手法開発に関連した技術支援を行う。
- (13) アクチニド化合物の基礎物性値評価シミュレーション研究
 部署：(大洗)次世代原子力システム研究開発部門、(東海)原子力基礎工学研究部門、(東海)先端基礎研究センター
 概要：物性評価のため、高精度並列シミュレーション手法の構築と実験結果の説明及び予測の実施を行う。
- (14) 分子動力学計算と実験による MA 含有 MOX の熱物性と微視的構造の評価
 部署：(大洗)次世代原子力システム研究開発部門、(東海)原子力基礎工学研究部門、(東海)先端基礎研究センター
 概要：MA 含有 MOX 燃料の物性評価のため、高精度シミュレーション手法を確立し、実験結果の予測やその解釈を行う。
- (15) 構造材料照射に関わる材料強度等の物性評価シミュレーション研究
 部署：(東海)原子力基礎工学研究部門
 概要：材料強度基礎パラメータの導出し提供するためモデリング及びシミュレーションを行う。
- (16) Fe 中における He の拡散と結合状態に関する原子論的モデリング
 部署：(東海)核融合研究開発部門
 概要：核融合環境化での長期の中性子照射による材料組織変化を予測するモデルを確立する。
- (17) 生体分子シミュレーションコード開発
 部署：(関西)量子ビーム応用研究部門

- 概要：シミュレーションコード開発を目標として、機能改良等を共同（分担して）で行う。
- (18) ガラス溶融固化シミュレーション高速化
 部署：（東海）核燃料サイクル工学研究所
 概要：ガラス固化プロセスの温度や流量等の運転パラメータの最適化をするために膨大な計算を効率化する。
- (19) 放射線量等測定データの収集および管理に関する技術協力
 部署：福島技術本部
 概要：福島第一原子力発電所事故に伴い放出された放射性物質の測定結果を収集する技術および、収集データを登録、公開するデータベースの構築技術を確立する。
- (20) 非破壊探傷コードの高速処理
 部署：FBR プラント工学研究センター
 概要：FBR 施設の非破壊探傷用コードの高速化を図り、膨大な計算時間を短縮する。

1 1. 国際協力

国際協力の一覧を以下に示す。

- (1) シュツットガルト大学高度計算機センター（HLRS）：独国
 “計算科学技術の分野における協力に関する日本原子力研究開発機構とシュツットガルト大学との間の取決め”
 1999 年度～)
- (2) トゥールーズ情報研究所（IRIT）、並列情報学研究所（LIP）：仏国
 “ハイパフォーマンス疎行列代数演算のためのツールの研究開発協力に関する日本原子力研究開発機構とトゥールーズ情報処理研究所、並列情報学研究所との間の覚書”
 （2005 年度～）
- (3) 原子力庁（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～）
- (4) カリフォルニア大学バークレー校（UCB）：米国
 “地層処分及び燃料サイクルに関する共同研究契約”（この共同研究の一環として、計算科学の観点から協力している）
 （2008 年度～、システム計算科学センターの協力は 2011 年度～）
- (5) パシフィックノースウェスト国立研究所（PNNL）：米国
 “環境汚染の評価及び浄化に係る共同研究契約”（この共同研究の一環として、計算科学の観点から協力している）
 （2011 年度～）

This is a blank page.

付録3

平成 24 年度計算科学技術研究実績

This is a blank page.

平成 24 年度 計算科学技術研究実績

1. 研究論文、査読付き会議論文等

室	研究論文	査読付き会議論文
高度計算機技術開発室	4	3
シミュレーション技術開発室	20	8
合計	24	11

(平成 25 年 3 月 31 日現在)

【高度計算機技術開発室】

<研究論文>

- Miyamura Hiroko, Kureta Masatoshi, Segawa Mariko, Kubo Jun, Saito Takafumi, Suzuki Yoshio, Takemiya Hiroshi,
“Visualization of blurry images of liquid by multi-scale analysis”
Visualization of Mechanical Processes (Internet), Vol.1, No.4 (2011)
- Uzawa Ken, Watanabe Tadashi,
“Effect of turbulent dissipation on the dynamics of dam break flow”
Journal of Power and Energy Systems (Internet), Vol. 6, No. 2, pp.229-240 (2012)
- Idomura Yasuhiro,
“Accuracy of momentum transport calculations in full-f gyrokinetic simulations”
Computational Science & Discovery, Volo.5, pp.014018_1-014018_12 (2012)
- 木野 千晶、渡辺 正、西田 明美、武宮 博
「Immersed boundary 法を用いた流れ方向強制振動円柱周辺の流動解析」
日本機械学会論文集, B, Vol.78, No.796, pp.2113-2126 (2012)

<査読付き会議論文>

- Suzuki Yoshio, Miyamura Hiroko, Nakajima Norihiro,
“R&D of validity evaluation system for seismic simulation of entire nuclear plant”
Proceedings of 20th International Conference on Nuclear Engineering and the ASME 2012 Power Conference (ICONE-20 & POWER 2012) (DVD-ROM) (2012)
- Suzuki Yoshio, Hoshi Yoshiyuki, Sakamoto Kensaku, Nakajima Norihiro,
“R&D of a zooming analysis to verify a seismic simulation of an entire nuclear plant”
Proceedings of 4th International Conference on Computational Methods (ICCM 2012) (USB Flash Drive) (2012)
- Kushida Noriyuki, Takemiya Hiroshi,
“Implementation of plasma stability code on a Cell cluster system for constant plasma monitoring”
World Academy of Science, Engineering and Technology, Vol.64, pp.319-327 (2012)

【シミュレーション技術開発室】

<研究論文>

- Shiga Motoyuki, Fujisaki Hiroshi,
“A Quantum generalization of intrinsic reaction coordinate using path integral centroid coordinates”
Journal of Chemical Physics, Vol.136, No.18, pp.184103_1-184103_11 (2012)
- Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo, Yamaguchi Masatake,
“First-principles study on the mobility of screw dislocations in bcc iron”
Acta Materialia, Vol.60, No.1, pp.3698-3710 (2012)
- Ikeda Hiroaki, Suzuki Michito, Arita Ryotaro, Takimoto Tetsuya, Shibauchi Takasada, Matsuda Yuji,
“Emergent rank-5 nematic order in URu₂Si₂”
Nature Physics, Vol.8, No.7, pp.528-533 (2012)
- Nagai Yuki, Nakai Noriyuki, Machida Masahiko,
“Direct numerical demonstration of sign-preserving quasiparticle interference via an impurity inside a vortex core in an unconventional superconductor”
Physical Review B, Vol.85, No.9, pp.092505_1-092505_4 (2012)
- Nagai Yuki, Kuroki Kazuhiko,
“Q-scan analysis of the neutron scattering in iron-based superconductors”
Physical Review B, Vol.85, No.13, pp.134521_1-134521_7 (2012)
- 志賀 基之
「電子状態理論の初歩, 1」
アンサンブル、Vol.14、No.2、pp.102-105 (2012)
- Yoshikawa Takehiro, Sugawara Shuichi, Takayanagi Toshiyuki, Shiga Motoyuki, Tachikawa Masanori,
“Quantum tautomerization in porphycene and its isotopomers; Path-integral molecular dynamics simulations”
Chemical Physics, Vol.394, No.1, pp.46-51 (2012)
- Nagai Yuki, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“Rotational isotropy breaking as proof for spin-polarized cooper pair in topological superconductor Cu_xBi₂Se₃”
Physical Review B, Vol.86, No.9, pp.094507_1-094507_5 (2012)
- 池田 浩章、鈴木 通人
「遍歴側から見た URu₂Si₂ の隠れた秩序」
固体物理、Vol.47、No.11、pp.693-706 (2012)
- Nagai Yuki, Tanaka Kaori, Hayashi Nobuhiko,
“Quasiclassical numerical method for mesoscopic superconductors; Bound states in a circular d-wave island with a single vortex”
Physical Review B, Vol.86, No.9, pp.094526_1-094526_9 (2012)
- Fujishima Hironobu, Okumura Masahiko, Mine Makoto, Yajima Tetsu,

- “Interference pattern formation between bound solitons and radiation in momentum space; Possible detection of radiation from bound solitons with Bose-Einstein condensate of neutral atoms”
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 81, No. 10, pp. 104003_1-104003_7 (2012)
- Fujita Takatoshi, Tanaka Shigenori, Fujiwara Takayuki, Kusa Masaaki, Mochizuki Yuji, Shiga Motoyuki,
 “*Ab initio* path integral Monte Carlo simulations for water trimer with electron correlation effects”
 Computational and Theoretical Chemistry, Vol. 997, pp. 7-13 (2012)
 - Yoshikawa Takehiro, Takayanagi Toshiyuki, Kimizuka Hajime, Shiga Motoyuki,
 “Quantum-thermal crossover of hydrogen and tritium diffusion in α -iron”
 Journal of Physical Chemistry C, Vol. 116, No. 43, pp. 23113-23119 (2012)
 - Kobayashi Keita, Okumura Masahiko, Ota Yukihiro, Yamada Susumu, Machida Masahiko,
 “Nontrivial Haldane phase of an atomic two-component Fermi gas trapped in a 1D optical lattice”
 Physical Review Letters, Vol. 109, No. 23, pp. 235302_1-235302_5 (2012)
 - Nakamura Hiroki, Okumura Masahiko, Machida Masahiko,
 “First-principles calculation study of mechanism of cation adsorption selectivity of zeolites; A Guideline for effective removal of radioactive cesium”
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 82, No. 2, pp. 023801_1-023801_4 (2012)
 - 為ヶ井 強、足立 匡、永井 佑紀
 「第 10 回 M2S 国際会議報告」
 固体物理、Vol. 47、No. 12、pp. 779-784 (2012)
 - Kobayashi Hisao, Ikeda Shugo, Sakaguchi Yui, Yoda Yoshitaka, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 “Observation of a pressure-induced As-As hybridization associated with a change in the electronic state of Fe in the tetragonal phase of EuFe_2As_2 ”
 Journal of Physics; Condensed Matter, Vol. 25, No. 2, pp. 022201_1-022201_6 (2013)
 - Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 “Mechanism of strong affinity of clay minerals to radioactive cesium; First-principles calculation study for adsorption of cesium at frayed edge sites in muscovite”
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 82, No. 3, pp. 033802_1-033802_5 (2013)
 - Nakamura Hiroki, Machida Masahiko, Kato Masato,
 “LDA+*U* study on plutonium dioxide with spin-orbit couplings”
 Progress in Nuclear Science and Technology (Internet), Vol. 2, pp. 16-19 (2011)
 - Yamaguchi Masatake, Kameda Jun, Ebihara Kenichi, Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo,
 “Mobile effect of hydrogen on intergranular decohesion of iron; First-principles calculations”
 Philosophical Magazine, Vol. 92, No. 11, pp. 1349-1368 (2012)

<査読付き会議論文>

- Ota Yukihiro, Machida Masahiko, Koyama Tomio,
 “Theory of phase dynamics in intrinsic Josephson junctions with multigap superconducting layers”
 Physica C, Vol.471, No.21-22, pp.760-762 (2011)
- Machida Masahiko, Nakamura Hiroki,
 “Low-magnetic moment and strong anisotropy in non-doped iron-based superconductors”
 Physica C, Vol.471, No.21-22, pp.659-661 (2011)
- Machida Masahiko, Nakamura Hiroki,
 “Orbital ordering in low-moment ground-state of parent compounds in iron-based superconductors”
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 80, Suppl. B, pp. SB022_1-SB022_4 (2011)
- Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Machida Masahiko,
 “Spectral-density polynomial expansion for two-particle Green’s function in BdG framework”
 Physics Procedia, Vol.27, pp.72-75, (2012)
- Nagai Yuki, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 “Andreev bound-states of vortices and surfaces in topological superconductors”
 Journal of Physics; Conference Series, Vol.393, pp.012017_1-012017_8 (2012)
- Machida Masahiko, Ota Yukihiro, Koyama Tomio, Matsumoto Hideki,
 “Electromagnetic wave emission from intrinsic Josephson junction stacks; A Review of theory and simulation”
 Journal of Physics; Conference Series, Vol.393, pp.012013_1-012013_8 (2012)
- Koyama Takehide, Ozaki Yuzuru, Ueda Koichi, Mito Takeshi, Kohara Takao, Waki Takeshi, Tabata Yoshikazu, Michioka Chishiro, Yoshimura Kazuyoshi, Suzuki Michito, Nakamura Hiroyuki,
 “Observation of the partial Fermi surface quenching in the noncentrosymmetric superconductor $\text{Mo}_3\text{Al}_2\text{C}$ ”
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol.81, Suppl. B, pp. SB008_1-SB008_5 (2012)
- Higashi Yoichi, Nagai Yuki, Machida Masahiko, Hayashi Nobuhiko,
 “Phase-sensitive flux-flow resistivity in unconventional superconductors”
 Journal of Physics; Conference Series, Vol.400, No.2, pp.022025_1-022025_4 (2012)

2. 国際会議、国内会議での発表等

【システム計算科学センター】

<口頭発表>

- Nakajima Norihiro,
 “Industrial innovation (monozukuri) with “K computer””

- International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC 2012), (November 10–16, 2012, Salt Lake City, U.S.A.)
- Kaburaki Hideo, Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake,
“A Molecular dynamics study on the fracture process of metals” ,
Conference on Computational Physics 2012 (CCP 2012), (October 14–18, 2012, Kobe, Japan)
 - Kaburaki Hideo,
“A Molecular dynamics study of thermal conductivity for the Lennard–Jones system in the harmonic and anharmonic approximation” ,
3rd workshop on computational and statistical physics (CSP-3), (October 19–20, 2012, Kyoto, Japan)
 - Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo, Yamaguchi Masatake,
“An Atomistic study on the interaction of hydrogen atoms and a screw dislocation in BCC iron” ,
International Union of Materials Research Societies; International Conference on Electronic Materials 2012 (IUMRS–ICEM 2012), (September 23–28, 2012, Yokohama, Japan)
 - Kaburaki Hideo, Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito,
“Dislocation motion on the prismatic plane in magnesium; Molecular dynamics simulations”
Materials Research Society 2012 Fall Meeting, (November 25–30, 2012, Boston, U. S. A.)

【高度計算機技術開発室】

<査読無し論文>

- 鵜沢 憲
「三次元矩形貯水槽の非線形スロッシング解析」
ながれ、Vol. 31、No. 3、pp.271–276 (2012)
- 鈴木 喜雄、西田 明美、鵜沢 憲、中島 憲宏
「原子力施設の耐震シミュレーションのV&Vの研究開発」
計算工学講演会論文集(CD-ROM)、Vol.17、p. 4 (2012)
- Uzawa Ken,
“Effect of turbulence on nonlinear sloshing in a rectangular pool”
Proceedings of 9th International Conference on Flow Dynamics (ICFD 2012) (USB Flash Drive)、 pp.392–393 (2012)
- Quinay P. E., Ichimura Tsuyoshi, Hori Muneo, Nishida Akemi, Yoshimura Shinobu,
“An Integrated geologic- and engineering-length scale forward modeling for response estimation of nuclear power plant due to the rupture of a nearby fault”
Proceedings of 15th World Conference on Earthquake Engineering (WCEE-15) (USB Flash Drive), p.8 (2012)

<口頭発表>

- Suzuki Yoshio, Uzawa Ken, Nishida Akemi, Nakajima Norihiro,
 “R&D of three-dimensional vibration simulator for an entire nuclear plant”
 ASME 2012 Verification & Validation Symposium (Las Vegas, NV, USA, May 2-4, 2012)
- Seki Akiyuki, Takemiya Hiroshi, Takahashi Fumiaki, Saito Kimiaki, Tanaka Kei,
 Takahashi Yutaka, Takemura Kazuhiro, Tsuzawa Masaharu,
 “Development of Radioactive Databases and Contamination Map System”
 13th International Congress of the International Radiation Protection Association
 (IRPA13) (Glasgow, Scotland, May 13-18, 2012)
- 関 暁之、武宮 博、斎藤 税、斎藤 公明、田中 圭、高橋 悠、竹村 和広、津澤 正晴
 「福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の第 2 次分布状況等に関する調査研究, 4;
 マップデータ公開システムの拡張」
 日本原子力学会 2012 年秋の大会 (広島、日本、2012 年 9 月 19 日～21 日)
- 宮村 (中村) 浩子、河村 拓馬、鈴木 喜雄、武宮 博
 「時空間特徴解析に基づく部分モデル選択抽出アプローチ」
 日本原子力学会 2012 年秋の大会 (広島、日本、2012 年 9 月 19 日～21 日)
- 鈴木 喜雄、星 芳幸、坂本 健作、鶴沢 憲、西田 明美、中島 憲宏
 「巨大地震下における原子力施設全体の挙動解析とその Verification&Validation に向けた
 シミュレーションフレームワークの研究開発」
 日本原子力学会 2012 年秋の大会 (広島、日本、2012 年 9 月 19 日～21 日)
- Nishida Akemi,
 “Wave Propagation Analysis of a Cooling Piping Structure of a Model Plant”
 ASME 2012 Pressure Vessel and Piping Conference (Toronto, Ontario, Canada July 18,
 2012)
- 鶴沢 憲
 「矩形貯水槽内スロッシングに対する乱流モデルの適用性評価」
 第 21 回 LES 研究会 (東大生研、2012 年 7 月 13 日)
- Idomura Yasuhiro, Nakata Motoki, Yamada Susumu, Machida Masahiko, Imamura Toshiyuki,
 Watanabe Tomohiko, Nunami Masanori, Inoue Hikaru, Tsutsumi Shigenobu, Miyoshi Ikuo,
 Shida Naoyuki,
 “Communication Overlap Techniques for Improved Strong Scaling of Gyrokinetic
 Eulerian Code Beyond 100k Cores on K-Computer”
 SC12 (Salt Lake City, Utah, USA, November 10-16, 2012)
- Idomura Yasuhiro,
 “Computational challenges in Peta-scale fusion plasma turbulence simulations”
 Conference on Computational Physics (CCP2012) (Kobe, Japan, Oct.15-18, 2012)
- 宮村 (中村) 浩子
 「日本原子力研究開発機構における可視化紹介」
 慶應大学 (2012 年 12 月 20 日)

- 井戸村 泰宏、仲田 資季、山田 進、町田 昌彦、今村 俊幸
「ペタスケールジャイロ運動論シミュレーションのための通信マスク手法開発」
プラズマ・核融合学会第 29 回年会(福岡、日本、2012 年 11 月)
- Idomura Yasuhiro,
“Convergence of momentum transport in 3rd order gyrokinetics”
US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on Neoclassical and Turbulent
Flow Generation and Associated Transport(Kyoto, Japan, November, 2012)
- Kawamura Takuma, Idomura Yasuhiro, Miyamura Hiroko, Takemiya Hiroshi,
“Remote Visualization for Large-scale Simulation using Particle-based Volume
Rendering”
SC12 (Salt Lake City, Utah, USA, November 10-16, 2012)
- Kawamura Takuma, Idomura Yasuhiro,
“Particle-based volume rendering for large-scale simulation results on parallel
computer”
Vis Workshop (Kobe, Japan, October, 2012)
- 井戸村 泰宏、仲田 資季、山田 進、町田 昌彦、今村 俊幸、渡邊 智彦、沼波 政
倫、井上 晃、堤 重信、三吉 郁夫、志田 直之
「プラズマ乱流シミュレーションにおける通信マスク手法開発」
ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS 2013) (東京、日
本、2013 年 1 月 15 日～16 日)
- 西田 明美、小尾 博俊、大橋 泰裕、竹内 義高
「設計事例」
2012 年度日本建築学会大会(東海)構造部門(応用力学)パネルディスカッション「建
築物の耐衝撃設計を考える」(名古屋、日本、2012 年 9 月 14 日)
- 西田 明美、木野 千晶、鈴木 喜雄、武宮 博、中島 憲宏
「システム統合化の成果と今後の展望」
第 24 回 CCSE ワークショップ(千葉、日本、2012 年 6 月 19 日)
- 西田 明美
「統合シミュレーションシステムの研究開発」
災害シミュレーション研究会(大阪、日本、2012 年 9 月 1 日)
- 藤田 典久、奴賀 秀男、朴 泰祐、井戸村 泰宏
「核融合シミュレーションコードの GPU クラスタ向け最適化」
ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS 2013) (東京、日
本、2013 年 1 月 15 日～16 日)
- 関 暁之、武宮 博、斎藤 税、名古 玄天、斉藤 公明
「放射性核種の分布データとツールの拡充」
日本原子力学会 2013 年春の年会(大阪、日本、2013 年 3 月 26 日～28 日)
- Seki Akiyuki, Takemiya Hiroshi, Takahashi Fumiaki, Saito Kimiaki, Tanaka Kei,
Takahashi Yutaka, Takemura Kazuhiro, Tsuzawa Masaharu,
“Construction of the database and map systems on the distribution of radioactive

material”

Mini-Symposium in International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC 2012) (Salt Lake City, Utah, USA, November 10-16, 2012)

- 木野 千晶
「Immersed Boundary 法を用いた円柱周辺の 3 次元流動解析」
日本機械学会 第 25 回計算力学講演会 (神戸、日本、2012 年 10 月 6 日～9 日)
- 木野 千晶、西田 明美、武宮 博
「Immersed Boundary 法における有限要素メッシュを用いた境界面設定手法の開発」
日本原子力学会 2012 年秋の大会 (広島、日本、2012 年 9 月 19 日～21 日)
- 木野 千晶、渡辺 正、西田 明美、武宮 博
「原子力施設のための Immersed Boundary 法を用いた流体構造連成解析手法の開発」
第 17 回計算工学講演会 (京都、日本、2012 年 5 月 30 日)
- 井戸村 泰宏、仲田 資季
「Helios における GT5D コードを用いたトカマク乱流輸送シミュレーションの進展」
第 2 回 IFERC-CSC 研究会 (2013 年 2 月)
- 河村 拓馬、井戸村 泰宏、宮村 浩子、武宮 博
「粒子ベースボリュームレンダリングを用いたクライアント-サーバ可視化システム」
ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム (HPCS 2013) (東京、日本、2013 年 1 月 15 日～16 日)
- 井戸村 泰宏
「核融合プラズマの乱流シミュレーション」
HPCI 中間報告会 (2013 年 3 月)
- Kawamura Takuma, Idomura Yasuhiro, Miyamura Hiroko, Takemiya Hiroshi,
“Acceleration of Particle Generation of Particle-based Volume Rendering for Client-Server Visualization System”
The 3rd AICS International Symposium, (Kobe, Japan, February 28- March 1, 2013)

【シミュレーション技術開発室】

<査読無し論文>

- 町田 昌彦、奥村 雅彦、山田 進
「並列密度行列繰りこみ群法の開発と量子物理学への応用」
シミュレーション、Vol. 31, No. 1, pp. 35-44 (2012)
- 海老原 健一、蕪木 英雄
「水素熱脱離曲線における試料サイズと初期状態の影響；数値シミュレーションによる考察」
水素脆化研究の基盤構築中間報告会予稿集、pp. 27-34 (2012)

<口頭発表>

- Nagai Yuki,
“Spectral-density polynomial expansion in BdG framework with large-scale parallel

- computations” ,
物性研理論セミナー（柏、日本、2012年4月20日）
- 町田 昌彦
「超伝導物理における研究の現状と展望」
第43回京都駅前セミナー（京都、日本、2012年5月）
 - Itakura Mitsuhiro, Miyashiro Satoshi, Okita Taira, Yamaguchi Masatake, Okuda Hiroshi,
“Development of an EAM Potential for Fe-Cr-Ni Alloys”
10th World Congress on Computational Mechanics (São Paulo, Brazil, July 8 -13, 2012)
 - Yamada Susumu, Idomura Yasuhiro, Imamura Toshiyuki, Machida Masahiko,
“High performance Krylov subspace method for asymmetric linear system on fusion plasma simulation code GT5D”
7th International Workshop on Parallel Matrix Algorithms and Applications (PMAA 2012) (London, UK , June 28-30, 2012)
 - Nagai Yuki, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“Andreev Bound-states in topological superconductors”
M2S 2012 Materials and Mechanisms of Superconductivity, (Washington D. C., USA, July 29 - August 3, 2012)
 - Yamada Susumu, Idomura Yasuhiro, Imamura Toshiyuki, Machida Masahiko,
“Convergence property of Krylov subspace methods for asymmetric linear system on fusion plasma simulation code GT5D”
31st JSST Annual Conference; International Conference on Simulation Technology (JSST 2012) (Kobe, Japan, September 27-28)
 - 山田 進、井戸村 泰宏、今村 俊幸、町田 昌彦
「核融合プラズマシミュレーションコード GT5D に現れる線形方程式に対するクリロフ部分空間法の収束性」
日本応用数理学会 2012 年度年会（稚内、日本、2012年8月28日～9月2日）
 - 中村 博樹、奥村 雅彦、町田 昌彦
「多孔質材料における Cs 吸着機構の第一原理計算による解析」
日本原子力学会 2012 年秋の大会（広島、日本、2012年9月19日～21日）
 - 中村 博、町田 昌彦
「第一原理計算による Ca-Fe-Pt-As 型超伝導体の電子状態の評価」
日本物理学会 2012 年秋季大会（横浜、日本、2012年9月18日～21日）
 - 永井 佑紀、中村 博樹、町田 昌彦
「トポロジカル超伝導体のペアリング状態の判別方法：回転対称性の破れと massive Dirac 方程式」
日本物理学会 2012 年秋季大会（横浜、日本、2012年9月18日～21日）
 - 鈴木 通人、目時 直人、酒井 宏典、芳賀 芳範
「ナローギャップ半導体 β -US₂ の強相関効果によるエネルギーギャップ形成機構」
日本物理学会秋季大会（横浜、日本、2012年9月18日～21日）
 - 山田 進、小林 恵太、奥村 雅彦、今村 俊幸、町田 昌彦

- 「多軌道強相関クラスターハバードモデルに対する厳密対角化法の並列化」
日本物理学会 2012 年秋季大会（横浜、日本、2012 年 9 月 18 日～21 日）
- 町田 昌彦、中村 博樹、奥村 雅彦
「窒化アクチナイドの特異な表面状態と熱物性」
日本原子力学会 2012 年秋の大会（広島、日本、2012 年 9 月 19 日～21 日）
 - 志賀 基之
「プロトン移動反応の量子的経路について」
第 6 回分子科学討論会（東京、日本、2012 年 9 月）
 - 奥村 雅彦、中村 博樹、町田 昌彦
「第一原理計算による土壌粘土鉱物の構造とセシウム吸着」
日本原子力学会 2012 年秋の大会（広島、日本、2012 年 9 月 19 日～21 日）
 - Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“A First-Principles Study on Heat Capacity of Plutonium Dioxides”
Nuclear Materials Conference 2012 (NuMat 2012) (Osaka, Japan, October 22-25, 2012)
 - 佐々 成正
「非線形波動系に対するシンプレクティック数値解法と運動量保存則」
平成 24 年度九大応力研共同利用研究集会 非線形波動研究の最前線 ―構造と現象の多様性―（福岡、日本、2012 年 11 月 1 日～3 日）
 - Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki, Machida Masahiko,
“Parallelization Scheme of Exact Diagonalization for Multi-band Hubbard Cluster Models”
Mini-Symposium in International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC 2012) (Salt Lake City, USA, November 10-16, 2012)
 - Nakamura Hiroki,
“Large-scale Computations for Materials Science - Nuclear Fuels and Environmental Radionuclides”
Mini-Symposium in International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC 2012) (Salt Lake City, USA, November 10-16, 2012)
 - 鈴木 通人
「強相関 f 電子系物質の f 状態とフェルミ面」
新学術領域「重い電子系の形成と秩序化」ワークショップ ～純良単結晶育成と重い電子系のフェルミ面～（沖縄、日本、2012 年 11 月 23 日～24 日）
 - Okumura Masahiko, Akasaka Koichiro, Takase Hiroyasu, Miyahara Kaname, Nakayama Shinichi,
“Prior estimation of dose reduction as a result of decontamination in Fukushima pilot projects” ,
International Experts Meeting on Decommissioning and Remediation after a Nuclear Accident, (January 28 - February 1, 2013, Vienna, Austria)

- Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo, Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito,
 “First-Principles Study of the Prismatic Dislocation Motion in Mg”
 Materials Research Society 2012 Fall Meeting (Boston, USA, November 25-30, 2012)
- 永井 佑紀、中村 博樹、町田 昌彦
 「トポロジカル超伝導体の渦糸状態」
 第 20 回渦糸物理国内会議 (岡山、日本、2012 年 12 月 8 日～10 日)
- 鈴木 通人
 「強相関電子系の多軌道秩序形成における磁気空間対称性と電子状態」
 「強相関電子系理論の最前線」研究会 (和歌山、日本、2012 年 12 月 13 日～15 日)
- 山田 進、佐々 成正、今村 俊幸、町田 昌彦
 「4 倍精度基本線形代数ルーチン群 QPBLAS の紹介とアプリケーションへの応用」
 第 194 回計算機アーキテクチャ・第 137 回ハイパフォーマンスコンピューティング合同研究発表会 (HOKKE-20) (札幌、日本、2012 年 12 月 13 日～14 日)
- 中村 博樹、町田 昌彦
 「ハイブリッド密度汎関数法による二酸化プルトニウムの物性値の第一原理計算」
 日本原子力学会 2013 年春の年会 (大阪、日本、2013 年 3 月 26 日～28 日)
- 山田 進、小林 恵太、奥村 雅彦、町田 昌彦
 「SU(n) ハバードモデルに対する並列 DMRG 法の開発」
 日本物理学会 第 68 回年次大会 (広島、日本、2013 年 3 月 26 日～29 日)
- 板倉 充洋、山口 正剛、蕪木 英雄、都留 智仁
 「第一原理計算および分子動力学法によるマグネシウム<a>らせん転位の交差滑りの計算」
 日本金属学会 2013 年春期講演大会 (東京、日本、2013 年 3 月 27 日～29 日)
- 小林 恵太、奥村 雅彦、山田 進、町田 昌彦
 「多軌道フェルミ原子気体における強磁性の解析」
 日本物理学会 第 68 回年次大会 (広島、日本、2013 年 3 月 26 日～29 日)
- 永井 佑紀、中村 博樹、町田 昌彦
 「三次元強束縛模型上でのトポロジカル超伝導の渦糸状態」
 日本物理学会 第 68 回年次大会 (広島、日本、2013 年 3 月 26 日～29 日)
- 佐々 成正
 「非線形波動方程式に対するシンプレクティック数値解法と保存則」
 平成 24 年度応用数理学会連合発表会 (東京、日本、2013 年 3 月 14 日～15 日)
- 町田 昌彦、中村 博樹、加藤 正人
 「二酸化プルトニウムにおける第一原理計算を用いた酸素挙動解析」
 日本原子力学会 2013 年春の年会 (大阪、日本、2013 年 3 月 26 日～28 日)
- 奥村 雅彦、中村 博樹、町田 昌彦
 「雲母鉱物のほつれたエッジサイトにおけるセシウム吸着の第一原理計算」
 日本原子力学会 2013 年春の年会 (大阪、日本、2013 年 3 月 26 日～28 日)
- 志賀 基之
 「QM/MM 法の境界条件について」

- 日本物理学会 第 68 回年次大会 (広島、日本、2013 年 3 月 26 日～29 日)
- 鈴木 通人
「アクチノイド化合物の第一原理計算の基礎」
J-ACTINET 計算科学スクール 2013(講師) (茨城、日本、2013 年 3 月 13 日)
 - 小林 恵太、太田 幸宏、奥村 雅彦、山田 進、町田 昌彦
「マルチバンドを持つ光学格子中の引力フェルミ原子気体の解析」
日本物理学会 2012 年秋季大会 (横浜、日本、2012 年 9 月 18 日～21 日)
 - 町田 昌彦
「原発事故以後の環境修復に向けた数値シミュレーション研究の取り組み」
非線形現象の数値シミュレーションと解析 2013 (札幌、日本、2013 年 3 月 8 日～9 日)
 - 山口 正剛、板倉 充洋、志賀 基之、蕪木 英雄
「LPSO 構造の一般化積層欠陥エネルギー: 第一原理計算」
日本金属学会 2013 年春期講演大会 (東京、日本、2013 年 3 月 27 日～29 日)
 - Yamaguchi Masatake, Kameda Jun,
“First-principles study on the Grain Boundary Decohesion of Iron by Solute segregation: Temper and Hydrogen-Induced Embrittlement”
NIMS Conference 2012 (Tsukuba, Japan, June 4-6, 2012)
 - 山口 正剛、亀田 純
「第一原理計算による粒界脆化の研究: 焼戻し脆性と水素脆性」
H24 年度第 1 回計算材料科学研究拠点 (CMRI) シンポジウム (仙台、日本、2012 年 6 月 18 日～19 日)
 - 鈴木 知明、都留 智仁、山口 正剛
「 α 鉄粒界におけるヘリウム空孔クラスターの解析」
金属学会 2012 秋の講演会 (愛媛、日本、2012 年 9 月 17 日～9 月 19 日)
 - 山口 正剛、亀田 純
「鉄の焼戻し脆性と粒界水素脆性: 第一原理計算」
日本鉄鋼協会第 164 回秋季講演大会 (「水素脆化研究の基盤構築」シンポジウム) (愛媛、日本、2012 年 9 月 17 日～19 日)
 - Ebihara Kenichi, Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake, Nishiyama Yutaka,
“Simulation of Irradiation-induced Grain-boundary Phosphorus Segregation by First-principles-based Rate Theory Model including Vacancy Drag Effect”
NuMat2012: the Nuclear Materials Conference (Osaka, Japan, October 22-25, 2012)
 - Yamaguchi Masatake, Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo,
“First-principles calculations on the LPSO structure: gamma-surface etc.”
International Symposium on Long-Period Stacking Ordered Structure and Its Related Materials 2012 (Sapporo, Japan, October 1-3, 2012)
 - 鈴木 知明、都留 智仁、山口 正剛
「粒界 He 脆化に関する計算科学研究」
東北大学金属材料研究所ワークショップ (仙台、日本、2012 年 11 月 8 日～11 月 9 日)
 - 山口 正剛、亀田 純

- 「鉄鋼材料の焼戻し脆性：第一原理計算」
東北大学金属材料研究所ワークショップ（仙台、日本、2012年11月8日～11月9日）
- Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito,
“Atomistic Modeling of He Embrittlement at Various Grain Boundaries of α -Fe”
TMS Annual Meeting (San Antonio, USA, March 3-7, 2013)
 - Suzudo Tomoaki, Golubov S., Barashev A.,
“A Kinetic Monte-Carlo Study of Self-Interstitial Atom Behavior near Edge Dislocation in a Metallic Crystal”
TMS Annual Meeting 2013 (San Antonio, USA, March 3-7, 2013)
 - 山口 正剛、都留 智仁、板倉 充洋、蕪木 英雄
「六方晶マグネシウムのすべり面に対する添加元素の影響：第一原理計算」
日本金属学会 2013 年春期講演大会（東京、日本、2013 年 3 月 27 日～29 日）
 - Yamaguchi Masatake, Kameda Jun,
“First-principles study on the intergranular decohesion in iron by solute segregation: temper and hydrogen-induced embrittlement”
TMS Annual Meeting 2013, (San Antonio, USA, March 3-7, 2013)

【情報システム管理室】

<査読無し論文>

- 北村 竜明、坂本 健作、高瀬 和之
「超臨界フロンによる非加熱並行流路内流体混合特性に関する数値解析的研究」
可視化情報、Vol. 32, Suppl. 2, pp. 239-240 (2012)

<口頭発表>

- 坂本 健作、高瀬 和之、北村 竜明
超臨界フロンによる非加熱並行流路内流体混合特性に関する数値解析的研究,
可視化情報学会全国講演会, 2012

3. 技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

- 平山 孝、神成 政明、佐藤 智彦
“原子力機構ネットワークにおける WAN 高速化装置の導入”
JAEA-Testing 2012-002, 2012
- 情報システム管理室
“平成 23 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 2012-042, 2012

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- 2012 年 6 月 4 日（京都大学よりプレス発表）
“固体物理学における四半世紀の謎「隠れた秩序」の発現現象を解明”
- 2012 年 10 月 4 日（神戸新聞 1 面）
“スパコン「京」活用 世界一の仮想震動台構築へ”

- ・ 2013年1月16日（公益財団法人高輝度光科学研究センターよりプレス発表）
“鉄系高温超伝導体の圧力による鉄電子状態と格子振動の変化の観測に成功”

5. 研究発表会等の開催

- ・ 第5回原子力計算科学セミナー(H24年5月18日)
「FEMアプリケーション開発支援ミドルウェアの開発」、「OpenCL acceleration of a Krylov solver library for finite element applications: Performance observations」
- ・ 第24回CCSEワークショップ(H24年6月19日)
「先端的計算機の発展とモデリング&シミュレーション技術への期待と展望」
- ・ 第6回原子力計算科学セミナー(H24年8月23日)
「京における実アプリの実効効率について」、「並列FEMプログラムの実効性能についての現状と課題」
- ・ 第7回原子力計算科学セミナー(H24年11月20日)
「最先端の流体計算科学技術と格子法」、「最先端の流体計算科学技術と粒子法」、
「3次元仮想振動台における流体解析機能の現状と課題」
- ・ 第8回原子力計算科学セミナー(H24年12月3日)
「Energy Efficient Multicore Computing - Examples of HW/SW Interplay -」
- ・ 第9回原子力計算科学セミナー(H25年2月20日)
「Scalable Parallel Random Number Generation」

6. 受賞等

- ・ 日本応用数理学会 業績賞
山田 進、町田 昌彦、今村 俊幸
「超並列計算機利用技術の開発と量子固有値問題への応用」
(日本応用数理学会、平成24年4月)
- ・ 日本原子力学会計算科学技術部会 部会CG賞
宮村 浩子
「大規模データの特徴領域抽出アプローチ」
(日本原子力学会計算科学技術部会、平成25年3月)
- ・ 日本原子力学会計算科学技術部会 部会奨励賞
櫛田 慶幸
「原子力分野アプリケーションにおける数値計算アクセラレータの効率的利用法」
(日本原子力学会計算科学技術部会、平成25年3月)

7. 特許等の状況

- (1)特許の出願及び登録
なし。

(2) 成果の活用（利用許諾）による収入

件名（成果の内容）	契約先（販売者）	権利／契約種別	今年度収入額
AVS/Express 並列化支援ツール	株式会社 ケイ・ジ ー・ティ	プログラム著作権／利用許諾	33,600 円
並列分子動力学ステンスル 他 2 件	株式会社 JSOL	プログラム著作権／利用許諾	1,439,610 円

8. 外部資金の獲得に関連する事項

室	予算額(千円) (件数)
高度計算機技術開発室	125,708 (8)
シミュレーション技術開発室	17,241 (12)

【高度計算機技術開発室】

- (1) 原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション（科学技術振興機構） 1,950 千円
- (2) 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発（次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム） 37,950 千円
- (3) 福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の長期的影響把握手法の確立（文部科学省） 68,416 千円
- (4) リスクマネジメント基盤技術としての地震リスク評価の信頼度向上に関する研究（分担課題：モデルプラント建屋・地盤応答解析による情報提供）（科学技術振興機構） 10,302 千円
- (5) ポイントベース統合モデリング・レンダリング（日本学術振興会：科研費（若手 B）） 2,210 千円
- (6) 地震動下における配管内乱流機構および配管振動機構の解明（日本学術振興会：科研費（若手 B）） 2,800 千円
- (7) 浮遊液滴の回転振動特性と内部・外部流動に関する研究（日本学術振興会：科研費（基盤 C）） 1,040 千円
- (8) 浮遊液滴の非線形ダイナミクスを用いた高性能無容器プロセッシングに関する研究（日本学術振興会：科研費（基盤 B）） 1,040 千円

【シミュレーション技術開発室】

- (9) 京都大学構造材料元素戦略研究拠点（金属材料中の水素の状態と挙動に関するシミュレーション）（京都大学） 1,300 千円
- (10) 構造用六方晶金属の機械的性質における計算科学的研究（トヨタ自動車株式会社） 3,150 千円
- (11) 転位バイアス因子の理論的解明（日本学術振興会：科研費（基盤 C）） 910 千円
- (12) 水素・重水素移動反応の量子統計力学的第一原理計算（文部科学省：科研費（若手 B）） 650 千円
- (13) 2次元モデルに対するメニーコア並列計算機向き並列・高速化手法の研究開発（日本学術振興会：科研費（基盤 C）） 2,080 千円
- (14) 散逸系の局在パターン生成における非局所的効果の数理的研究と応用（日本学術振興会：

- 科研費(基盤 B) 100 千円
- (15) 量子多成分系分子理論システムの構築およびプロトニクス・ポジトロニクスへの展開 (科研費(若手 B) 200 千円
- (16) MA-MOX 燃料中のヘリウム挙動の計算科学的手法による解明と体欠陥形成制御 (科研費(基盤 A) 700 千円
- (17) 百万画素サブミクロン分解能中性子ラジオグラフィのための固体超伝導検出器システム (日本学術振興会: 科研費(基盤 S) 1,001 千円
- (18) フェルミ面トポロジーが生み出す非従来型超伝導の最適化に関する理論研究 (日本学術振興会: 科研費(基盤 B) 2,210 千円
- (19) 第一原理計算によるスピン軌道相互作用と電子相関の織りなす物性予測 (日本学術振興会: 科研費(基盤 C) 390 千円
- (20) 第一原理に基づく計算科学による LPSO 構造の電子論と構造科学の構築 (日本学術振興会: 科研費(新学術領域) 4,550 千円

9. 産学官との連携に関連する事項

室	共同研究	委託研究	受託研究	研究協定
高度計算機技術開発室	3	0	5	0
シミュレーション技術開発室	2	0	1	0
両室共通	0	0	0	1
合計	5	0	6	1

●共同研究

【高度計算機技術開発室】

- ・ Pu 含有燃料の MD 法による大規模材料シミュレーション (九州大学、近畿大学)
- ・ 核融合シミュレーションにおける大容量データ処理技術に関する研究 (大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 核融合科学研究所)
- ・ 大規模複雑人工物の統合シミュレーション環境構築 (東京大学)

【シミュレーション技術開発室】

- ・ 構造用六方晶金属の機械的性質における計算科学的研究 (トヨタ自動車株式会社)
- ・ 次世代スーパーコンピュータ用大規模並列高精度ライブラリーの研究開発 (一般財団法人 高度情報科学技術研究機構)

●受託研究

【高度計算機技術開発室】

- ・ 原子力発電プラントの地震耐力予測シミュレーション (科学技術振興機構)
- ・ 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発 (次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム) (東京大学)
- ・ 福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の分布状況等に関する第2次調査 (文部科学省)
- ・ 福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の長期的影響把握手法の確立 (文部科学省)
- ・ リスクマネジメント基盤技術としての地震リスク評価の信頼度向上に関する研究 (分担課)

題：モデルプラント建屋・地盤応答解析による情報提供（科学技術振興機構）

【シミュレーション技術開発室】

- ・ 京都大学構造材料元素戦略研究拠点（金属材料中の水素の状態と挙動に関するシミュレーション）（京都大学）

●研究協定

- ・ 「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、原子力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 16 件に及ぶ機構内連携を実施した。

(1) 損傷頻度評価

部署：（東海）安全研究センター

概要：3次元モデルを用いる大規模耐震解析システムを提供し、建屋および機器の地震時応答解析を高精度化。

(2) 耐震解析技術に関する研究開発

部署：（大洗）高温工学試験研究炉部、（東濃）地層処分研究開発部門

概要：大規模耐震解析システムやモデルデータを提供し、施設の耐震性評価を支援。

(3) 地下構造物の振動解析に関する技術協力

部署：（東濃）地層処分研究開発部門

概要：データの妥当性評価及び有用データの自動抽出を行うシステムを提供し、振動実験データの解析を効率化。

(4) 原子炉内の熱流動解析に関する技術協力

部署：（東海）原子力基礎工学研究部門、（東海）安全研究センター

概要：異なる解析間のデータの授受を実現するシステムを提供し、炉内構造物と炉内核熱・熱流動との解析を連成化。

(5) 原子炉圧力容器鋼の高経年化対策研究（照射脆化予測）

部署：（東海）安全研究センター

概要：脆化予測に必要な基礎パラメータを提供するため、第一原理計算にて定量的な計算を実施。

(6) 超伝導ナノ構造物性のシミュレーション研究と実験による検証

部署：（東海）先端基礎研究開発センター

概要：実験結果を解釈し、新たな実験を提案するため、メゾシミュレーションを行う。

(7) 応力腐食割れ、照射材料の数値シミュレーション研究

部署：（東海）原子力基礎工学研究部門

概要：応力腐食割れのいくつかの仮説メカニズムを検証、選択（脆化元素＝酸素 or 水素）するためシミュレーションを行う。

(8) 中性子検出器開発に関わるシミュレーション研究と実験による検証

部署：（東海）量子ビーム応用研究部門、J-PARC センター

概要：実験及び開発研究を先導（設計支援を含む）するため、高精度シミュレーションを行い、データを提供する。

(9) 分子動力学計算と実験による MA 含有 MOX の熱物性と微視的構造の評価

部署：(大洗)次世代原子力システム研究開発部門、(東海)原子力基礎工学研究部門、(東海)先端基礎研究センター

概要：MA 含有 MOX 燃料の物性評価のため、高精度シミュレーション手法を確立し、実験結果の予測やその解釈を行う。

(10) 構造材料照射に関わる材料強度等の物性評価シミュレーション研究

部署：(東海)原子力基礎工学研究部門

概要：材料強度基礎パラメータの導出し提供するためモデリング及びシミュレーションを行う。

(11) Fe 中における He の拡散と結合状態に関する原子論的モデリング

部署：(青森)核融合研究開発部門

概要：核融合環境化での長期の中性子照射による材料組織変化を予測するモデルを確立する。

(12) 生体分子シミュレーションコード開発

部署：(関西)量子ビーム応用研究部門

概要：シミュレーションコード開発を目標として、機能改良等を共同（分担して）で行う。

(13) ガラス溶融固化シミュレーション高速化

部署：(東海)核燃料サイクル工学研究所

概要：ガラス固化プロセスの温度や流量等の運転パラメータの最適化をするために膨大な計算を効率化する。

(14) 放射線量等測定データの収集および管理に関する技術協力

部署：福島技術本部

概要：福島第一原子力発電所事故に伴い放出された放射性物質の測定結果を収集する技術および、収集データを登録、公開するデータベースの構築技術を確立する。

(15) 原子力施設建家の耐震評価に関する技術協力

部署：建設部

概要：3次元モデルによる耐震解析の実施および耐震評価への協力により建設部の実施する機構内施設建家の耐震バックチェックを支援。

(16) 福島原発事故後の環境修復に資する研究

部署：福島技術本部

概要：土壌粘土鉱物へ放射性セシウム吸着、ゼオライトの放射性セシウム吸着、生体内での放射性セシウムの輸送のメカニズム解明を計算科学で支援。

1.1. 国際協力

国際協力の一覧を以下に示す。

(1) シュツットガルト大学高度計算機センター (HLRS)：独国

“計算科学技術の分野における協力に関する日本原子力研究開発機構とシュツットガル

ト大学との間の取決め”

1999 年度～)

- (2) ツールーズ情報研究所 (IRIT)、並列情報学研究所 (LIP) : 仏国
“ハイパフォーマンス疎行列代数演算のためのツールの研究開発協力に関する日本原子力研究開発機構とツールーズ情報処理研究所、並列情報学研究所との間の覚書”
(2005 年度～)
- (3) 原子力庁 (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～)
- (4) カリフォルニア大学バークレー校 (UCB) : 米国
“地層処分及び燃料サイクルに関する共同研究契約”(この共同研究の一環として、計算科学の観点から協力している)
(2008 年度～、システム計算科学センターの協力は 2011 年度～)
- (5) パシフィックノースウェスト国立研究所 (PNNL) : 米国
“環境汚染の評価及び浄化に係る共同研究契約”(この共同研究の一環として、計算科学の観点から協力している)
(2011 年度～)

This is a blank page.

付録4
平成 25 年度計算科学技術研究実績

This is a blank page.

平成 25 年度 計算科学技術研究実績

1. 研究論文、査読付き会議論文等

室	研究論文	査読付き会議論文
システム計算科学センター	1	5
高度計算機技術開発室	3	1
シミュレーション技術開発室	20	13
合計	24	19

(平成 26 年 3 月 31 日現在)

【システム計算科学センター】

<研究論文>

- Machida Masahiko, Kano Takuma, Koyama Tomio, Kato Masaru, Ishida Takekazu,
“Direct Numerical Simulations for Non-equilibrium Superconducting Dynamics at the
Transition Edge:Simulation for MgB2 Neutron Detectors”,
Journal of Low Temperature Physics, Vol. 151, pp.58-63 (2008)

<査読付き会議論文>

- Nakajima Norihiro, Nishida Akemi, Matsubara Hitoshi, Hazama Osamu, Suzuki Yoshio,
Sawa Kazuhiro, Iigaki Kazuhiko,
“Assembly struture analysis system”,
Transactions of 22nd International Conference on Structural Mechanics in Reactor
Technology (SMiRT-22) (CD-ROM) (2013)
- Nakajima Susumu, Kato Masaru, Koyama Tomio, Machida Masahiko, Ishida Takekazu, Nori
F.,
“Simulation of logic gate using d-dot’ s”,
Physica C, Vol. 468, pp.769-772 (2008)
- Matsumoto Hideki, Koyama Tomio, Machida Masahiko,
“Electromagnetic waves in single- and multi-Josephson junctions”,
Physica C, Vol. 468, pp.654-659 (2008)
- Ishida Takekazu, Matsushima Yoshiaki, Shimizu Makoto, Hayashi Masahiko, Ebisawa
Hiromichi, Sato Osamu, Kato Masaru, Koyama Tomio, Machida Masahiko, Sato Kazuo,
Yotsuya Tsutomu,
“Periodic flux jump in superconducting Pb networks as consequence of the extended
Little-Parks effect”,
Physica C, Vol. 468, pp.576-580 (2008)
- Kato Masaru, Koyama Tomio, Machida Masahiko, Hayashi Masahiko, Ebisawa Hiromichi,
Ishida Takekazu,,
“Novel anisotropic superconductivity in nano-structured superconductors”,
Physica B, Vol.403, pp.996-998 (2008)

【高度計算機技術開発室】

<研究論文>

- Idomura Yasuhiro,
“Full-f gyrokinetic simulation over a confinement time” ,
Physics of Plasmas, Vol. 21, No. 2, pp.022517_1-022517_10 (2014)
- Idomura Yasuhiro, Nakata Motoki,
“Plasma size and power scaling of ion temperature gradient driven turbulence” ,
Physics of Plasmas, Vol. 21, No. 2, pp.020706_1-020706_4 (2014)
- Quinay P. E. B., Ichimura Tsuyoshi, Hori Muneo, Nishida Akemi, Yoshimura Shinobu,
“Seismic Structural Response Estimates of a High-Fidelity Fault-Structure System
Model Using Multiscale Analysis with Parallel Simulation of Seismic Wave
Propagation” ,
Bulletin of Seismological Society of America, Vol.103, No.3, pp.2094-2110 (2013)

<査読付き会議論文>

- Fujita Norihisa, Nuga Hideo, Boku Taisuke, Idomura Yasuhiro,
“Nuclear fusion simulation code optimization on GPU clusters” ,
19th IEEE International Conference on Parallel and Distributed Systems (ICPDCS 2013)

【シミュレーション技術開発室】

<研究論文>

- Suzuki Kimichi, Tachikawa Masanori, Shiga Motoyuki,
“Temperature dependence on the structure of Zundel cation and its isotopomers” ,
Journal of Chemical Physics, Vol. 138, No. 18, pp.184307_1-184307_7 (2013)
- Koizumi Akihito, Tachikawa Masanori, Shiga Motoyuki,
“Quantum fluctuation and vibrational dynamics of aqueous Cu⁺ and Ag⁺ clusters” ,
Chemical Physics, Vol. 419, pp.44-49 (2013)
- Shiga Motoyuki, Masia M.,
“Boundary based on exchange symmetry theory for multilevel simulations, 1; Basic
theory” ,
Journal of Chemical Physics, Vol. 139, No. 4, pp.044120_1-044120_8 (2013)
- Fujisaki Hiroshi, Shiga Motoyuki, Moritsugu Kei, Kidera Akinori,
“Multiscale enhanced path sampling based on the Onsager-Machlup action; Application
to a model polymer” ,
Journal of Chemical Physics, Vol. 139, No. 5, pp.054117_1-054117_9 (2013)
- Shiga Motoyuki, Masia M.,
“Boundary based on exchange symmetry theory for multilevel simulations, 2; Multiple
time scale approach” ,
Journal of Chemical Physics, Vol. 139, No. 14, pp.144103_1-144103_14 (2013)

- Kobayashi Keita, Machida Masahiko, Ota Yukihiro, Nori F.,
 “Massless collective excitations in frustrated multiband superconductors” ,
 Physical Review B, Vol. 88, No. 22, pp.224516_1-224516_5 (2013)
- Ebihara Kenichi, Iwamoto Takashi, Matsubara Yukio, Yamada Hiroki, Okamura Tsukasa,
 Urushihara Wataru, Omura Tomohiko,
 “Numerical analysis of influence of hydrogen charging method on thermal desorption
 spectra for pre-strained high-strength steel” ,
 ISIJ International, Vol. 54, No. 1, pp.153-159 (2014)
- Hu J.-H., Wang J.-J., Xianlong G., Okumura Masahiko, Igarashi Ryo, Yamada Susumu,
 Machida Masahiko,
 “Ground-state properties of the one-dimensional attractive Hubbard model with
 confinement; A Comparative study” ,
 Physical Review B, Vol. 82, No. 1, pp.014202_1-014202_12 (2010)
- Higashi Yoichi, Nagai Yuki, Machida Masahiko, Hayashi Nobuhiko,
 “Field-angle resolved flux-flow resistivity as a phase-sensitive probe of
 unconventional Cooper pairing” ,
 Physical Review B, Vol. 88, No. 22, pp.224511_1-224511_6 (2013)
- Suzuki Michito, Magnani N., Oppeneer P.,
 “Microscopic theory of the insulating electronic ground states of the actinide
 dioxides AnO_2 ($An=U, Np, Pu, Am,$ and Cm)” ,
 Physical Review B, Vol. 88, No. 19, pp.195146_1-195146_14 (2013)
- Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito,
 “Atomistic modeling of He embrittlement at grain boundaries of alpha-Fe: a common
 feature over different grain boundaries” ,
 Modeling&Simulation Materials Science Engineering, Vol. 21, No. 8,
 pp.085013_1085013_8 (2013)
- Nagai Yuki, Shinohara Yasushi, Futamura Yasunori, Ota Yukihiro, Sakurai Tetsuya,
 “Numerical construction of a low-energy effective Hamiltonian in a self-consistent
 Bogoliubov-de Gennes approach of superconductivity” ,
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 82, No. 9, pp.094701_1-094701_10
 (2013)
- Ebihara Kenichi, Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake, Nishiyama Yutaka,
 “Introduction of vacancy drag effect to first-principles-based rate theory model
 for irradiation-induced grain-boundary phosphorus segregation” ,
 Journal of Nuclear Materials, Vol. 440, No. 1-3, pp.627-632 (2013)
- Koyama Tomio, Matsumoto Hideki, Ota Yukihiro, Machida Masahiko,
 “Numerical study for electromagnetic wave emission from intrinsic Josephson
 junction stacks with a dielectric cover” ,
 Physica C, Vol. 491, pp.20-23 (2013)
- Matsumoto Hideki, Koyama Tomio, Machida Masahiko, Ota Yukihiro, Yamada Susumu,

- “Revisit to terahertz wave emission with motions of Josephson vortices” ,
 Physica C, Vol. 491, pp.40-43 (2013)
- Koyama Tomio, Machida Masahiko,
 “Nonlocal Ginzburg-Landau theory for superconductors” ,
 Physica C, Vol. 484, pp.100-103 (2013)
 - Sasa Narimasa,
 “Momentum conservation law in explicit symplectic integrators for a nonlinear Schrödinger-type equation” ,
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 82, No. 5, pp.053001_1-053001_4
 - Sadowski J. W., Tanaka Kaori, Nagai Yuki,
 “Effects of band structure and electron-phonon coupling on charge density waves” ,
 Canadian Journal of Physics, Vol. 6, pp.487-489 (2013)
 - 奥村 雅彦, 中村 博樹, 町田 昌彦,
 「粘土鉱物とゼオライトにおけるセシウムの吸着挙動; 第一原理計算から見るその微視的機構」
 表面科学, Vol. 34, No. 3, pp.135-142 (2013)
 - Suzuki Kimichi, Ishibashi Hiroaki, Yagi Kiyoshi, Shiga Motoyuki, Tachikawa Masanori,,
 “Ab initio path integral molecular dynamics simulations of F_2H^- and $F_2H_3^+$ ” ,
 Progress in Theoretical Chemistry and Physics, Vol. 26, pp. 207-216 (2012)

< 査読付き会議論文 >

- Yamaguchi Masatake, Kameda Jun,
 “Intergranular decohesion induced by mobile hydrogen in iron with and without segregated carbon; First-principles calculations” ,
 Proceedings of 2012 International Hydrogen Conference; Hydrogen-Materials Interactions, pp.747-755 (2014)
- Nakai Noriyuki, Nagai Yuki, Machida Masahiko,
 “Low-lying excitations induced by non-magnetic impurities in *d*-wave superconductors” ,
 Physica C, Vol. 471, No. 21-22, pp.743-746 (2011)
- Yamamoto Atsushi, Yamada Susumu, Machida Masahiko,
 “Emergence of non-equilibrium superconductivity originated from repulsive interaction; Demonstration using optical lattices and implication to solid-state matter system” ,
 Physica C, Vol. 471, No. 21-22, pp.751-753 (2011)
- Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 “First-principles study of Ca-Fe-Pt-As-type iron-based superconductors” ,
 Physica C, Vol. 484, pp.39-42 (2013)
- Machida Masahiko, Nakamura Hiroki,

- “Orbital ordering and charge profile deformation in iron-based superconductors” ,
 Physica C, Vol. 484, pp.43-45 (2013)
- Yamane Takashi, Nagai Yuki, Tanaka Kaori, Hayashi Nobuhiko,
 “Impurity scattering effect on the zero-energy peak of the local density of states
 in a multi-quantum vortex core” ,
 Physica C , Vol. 494, pp.128-130 (2013)
 - Nagai Yuki, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 “Surface and vortex bound states in topological superconductors”
 Physica C, Vol. 494, pp.17-19 (2013)
 - Suzudo Tomoaki, Tsuru Tomohito, Yamaguchi Masatake, Kaburaki Hideo,
 “An atomistic modeling of He bubble stability at grain boundaries in alpha-Fe” ,
 Journal of Nuclear Materials, Vol. 442, No. 1-3, pp.S655-659 (2013)
 - Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 “Effects of van der Waals interaction for first-principles calculations on
 iron-based superconductors”
 Physica C, Vol. 494, No. 9-12, pp.9-12 (2013)
 - Kobayashi Keita, Ota Yukihiro, Machida Masahiko,
 “Analysis of collective excitation for multi band superconductor; Frustrated spin
 model approach” ,
 Physica C, Vol. 494, pp.13-16
 - Iwasawa Yuzuru, Abe Yutaka, Kaneko Akiko, Kuroda Taihei, Matsuo Eiji, Ebihara Kenichi,
 Sakaba Hiroshi, Koyama Kazuya, Ito Kazuhiro, Nariai Hideki,
 “Influence of Fragmentation on Jet Breakup Behaviour” ,
 The 15th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermalhydraulics,
 NURETH-15, pp.12 (2013)
 - Machida Masahiko, Kobayashi Keita, Koyama Tomio,
 “Quantum phases in intrinsic Josephson junctions; Quantum magnetism analogy” ,
 Physica C, Vo. 491, pp.44-46 (2013)
 - Ota Yukihiro, Kobayashi Keita, Machida Masahiko, Koyama Tomio, Nori F.,
 “Direct numerical simulation for non-equilibrium transport phenomena in
 superconducting detectors” ,
 Physics Procedia, Vol. 27, pp.352-355 (2012)

2. 国際会議、国内会議での発表等

【システム計算科学センター】

<口頭発表>

- 中島 憲宏, 西田 明美, 岡田 達夫, 川上 義明, 鶴田 理,
 「組立構造解析を用いた固有値解析」
 日本原子力学会 2014年春の年会 (東京、2014年3月26日~28日)
- 町田 昌彦, 中村 博樹, Sriram G. Srinivasan, Adri C. T. van Duin

- 「分子動力学法による高温高圧下でのジルコニウム酸化過程の解析」
日本原子力学会 2014 年春の年会（東京、2014 年 3 月 26 日～28 日）
- ・ 中島 憲宏, 西田 明美, 川上 義明, 岡田 達夫, 鶴田 理, 鈴木 喜雄,
「組立構造解析手法による部品集積解析」
日本原子力学会 2013 年秋の年会（八戸、日本、2013 年 9 月 3 日～5 日）
- ・ 町田 昌彦, 奥村 雅彦, 中村 博樹,
「粘土鉱物から Cs 吸脱着機構の解明と減容化のための脱離法の開発, 5; 第一原理計算が示す粘土鉱物における Cs の微視的吸着機構」
日本原子力学会 2013 年秋の年会（八戸、日本、2013 年 9 月 3 日～5 日）
- ・ 町田 昌彦, 小林 恵太, 小山 富男, 石田 武和,
「超伝導非平衡ダイナミクスにおける準粒子による非断熱効果」
日本物理学会 2013 年秋季大会（徳島、日本、2013 年 9 月 25 日～28 日）
- ・ Kaburaki Hideo, Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito,
“Molecular dynamics study on cross-slip mechanisms of a screw dislocation in magnesium” ,
Materials Research Society 2013 Fall Meeting (Boston, USA, December 1-6, 2013)

【高度計算機技術開発室】

<査読無し論文>

- ・ 武宮 博, 斎藤 公明,
「放射性物質の分布状況に関する調査研究」,
産業と環境, Vol. 42, No. 4, pp.39-43 (2013)
- ・ 井戸村 泰宏,
「京コンピュータにおけるペタスケール核融合プラズマ乱流シミュレーションの開発」,
京算百景, Vol. 2, pp.3-4, (2013)
- ・ Idomura Yasuhiro,
“Lighthouse project: Plasma size scaling of full-f gyrokinetic simulations” ,
IFERC Newsletter Vol. 2013, No. 2, pp.2 (2013)
- ・ 渡邊 智彦, 井戸村 泰宏,
「Vlasov シミュレーションのコーディング技法」,
プラズマ・核融合学会誌 (解説) Vol. 89, No. 3, pp.171-179 (2013)
- ・ 宮村 浩子, Hu, H.-Y., 吉田 雅裕, 大坐島 智, 中尾 彰宏, 高橋 成雄,
「AS 間接続関係を用いたオーバーレイネットワークの可視化」
信学技報, Vol. 112, No. 463, pp.577-582 (2013)

<口頭発表>

- ・ 井戸村 泰宏
「イオン温度勾配駆動乱流のプラズマサイズおよび加熱パワー依存性」
日本物理学会第 69 回年次大会（神奈川、2014 年 3 月 27 日～30 日）
- ・ 三木 一弘, 井戸村 泰宏

- 「full-f 静電ジャイロ運動論を用いた高速粒子駆動測地音波モード(EGAM)のシミュレーション研究」
日本物理学会第 69 回年次大会（神奈川、2014 年 3 月 27 日～30 日）
- 三木 一弘、
「少数自由度モデルが切り開くプラズマ乱流と遷移の物理」
日本物理学会第 69 回年次大会（神奈川、2014 年 3 月 27 日～30 日）
 - 西田 明美, 川上 義明, 中島 憲宏, 飯垣 和彦, 沢 和弘、
「東北地方太平洋沖地震における HTTR 建屋の地震観測シミュレーション」
日本原子力学会 2014 年春の年会（東京、2014 年 3 月 26 日～28 日）
 - 五十嵐 さやか, 坂本 成弘, 西田 明美, 村松 健, 高田 毅士、
「ハザード適合地震波による建造物の応答解析」
日本原子力学会 2014 年春の年会（東京、2014 年 3 月 26 日～28 日）
 - 関 暁之, 斎藤 税, 名古 玄天, 鈴木 健太, 富島 一也, 斎藤 公明, 武宮 博
「福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の長期的影響把握手法の確立(3)環境モニタリング等データベースの構築」
日本原子力学会 2014 年春の年会（東京、2014 年 3 月 26 日～28 日）
 - 西田 明美、
「フラジリティ評価における認識論的不確実さの評価に関する検討—その 2: 建屋・地盤等に関する検討」、
地震リスク評価に関するワークショップ 2014（東京、2014 年 3 月 7 日）
 - 西田 明美、
「東北地方太平洋沖地震における HTTR 建屋の 3 次元地震観測シミュレーション事例」、
文部科学省「HPCI 戦略プログラム」分野 4 次世代ものづくり第 1 回 統合ワークショップ
「材料・構造・信頼性」部門（東京、2014 年 3 月 6 日）
 - 宮村 (中村) 浩子, 河村 拓馬, 鈴木 喜雄, 井戸村 泰宏, 武宮 博、
「4 次元数値シミュレーションデータ探索のための対話的情報可視化」
情報処理学会第 154 回グラフィクスと CAD 研究発表会（和光、日本、2014 年 2 月 20 日～21 日）
 - 井戸村 泰宏、
「GT5DOCT プロジェクトの研究成果」
第 3 回 IFERC-CSC 研究会（東京、日本、2014 年 2 月 20 日）
 - 三木 一弘, Diamond Patrick H., Schmitz Lothar, McDonald Darren, Gurcan Ozgur, Tynan George,
「1 次元モデルにおける L-H, H-L 遷移の時空間発展」、
核融合エネルギーフォーラムシミュレーション・クラスター、計算科学サブクラスター会合（土岐、2014 年 1 月 13 日～14 日）
 - 井戸村 泰宏、
「国内のエクサスケール計算機開発の動向について」、
核融合エネルギーフォーラム、シミュレーションクラスター、計算科学サブクラスター会合（土岐、2014 年 1 月 10 日）

- ・ 井戸村 泰宏、
「閉じ込め時間スケールの full-f ジャイロ運動論シミュレーション」
プラズマ・核融合学会第 30 回年会（東京、日本、2013 年 12 月 3 日～6 日）
- ・ 井戸村 泰宏、
「ペタスケール流体計算を支える基盤技術開発」
第 4 回「分野 4 次世代ものづくりシンポジウム」（神戸、日本、2013 年 12 月 6 日）
- ・ 西田 明美、
「原子力施設のための 3 次元仮想振動台の構築」、
平成 25 年度高経年化技術評価高度化事業委員会コンクリート建屋・システム安全検討会
（東京、日本、2013 年 10 月 31 日）
- ・ Miki Kazuhiro, Diamond, P. H., Hahn, S.-H., Xiao, W., Gürçan, Ö., Tynan, G. R.,
“Physics of Stimulated and Spontaneous L-H Transitions”,
14th International Workshop on H-mode Physics and Transport Barriers (Fukuoka, Japan,
October 2-4, 2013)
- ・ 西田 明美、
「原子力施設のための 3 次元仮想振動台の構築」
平成 25 年度高経年化技術評価高度化事業委員会コンクリート建屋・システム安全検討会
（東京、日本、2013 年 10 月 31 日）
- ・ 三木 一弘、
「L-H 遷移の時空間構造研究の新展開」、
日本物理学会 2013 年秋季大会（徳島、日本、2013 年 9 月 25 日～28 日）
- ・ 武宮 博、
「東京電力福島第一原子力発電所事故に関する環境モニタリングデータの公開」、
放射線防護課題検討委員会（東京、日本、2013 年 9 月 18 日）
- ・ 宮村 浩子、
「大規模科学技術データ解析のための情報可視化技術」、
第 4 回情報可視化セミナー（東京、日本、2013 年 9 月 17 日～18 日）
- ・ Idomura Yasuhiro, Nakata Motoki,
“Plasma size scan of ITG turbulence simulations on the K-computer”,
The 23rd International Conference on Numerical Simulation of Plasmas (Beijing, China,
September 14-16, 2013)
- ・ 井戸村 泰宏、
「ペタスケール計算機における核融合プラズマ乱流コードの最適化」、
プラズマシミュレータシンポジウム 2013（岐阜、日本、2013 年 9 月 11 日～12 日）
- ・ 村松 健、西田 明美、
「リスクマネジメント基盤技術としての地震リスク評価の信頼度向上に関する研究（1）
全体計画とねらい」、
日本原子力学会 2013 年秋の大会（八戸、日本、2013 年 9 月 3 日）
- ・ 鈴木 喜雄, 坂本 健作, 中島 憲宏,
「巨大地震下における原子力施設全体の挙動解析」

- 日本原子力学会 2013 年秋の大会（青森、日本、2013 年 9 月 3 日～5 日）

 - ・ 関 暁之, 斎藤 税, 名古 玄天, 斎藤 公明, 武宮 博,
「東京電力（株）福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の長期的影響把握手法の確立（9）環境モニタリング等データベースの構築」、
日本原子力学会 2013 年秋の大会（青森、日本、2013 年 9 月 3 日～5 日）
 - ・ 武宮 博, 斎藤 公明, 水野 哲, 谷垣 実,
「東京電力（株）福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の長期的影響把握手法の確立（10）環境モニタリング等データベースの構築」、
日本原子力学会 2013 年秋の大会（青森、日本、2013 年 9 月 3 日～5 日）
 - ・ 河村 拓馬,
「粒子ベースボリュームレンダリングを利用した原子力分野における大規模有限要素シミュレーション結果向けのクライアント／サーバ可視化システム」、
日本原子力学会 2013 年秋の大会（青森、日本、2013 年 9 月 3 日～5 日）
 - ・ 西田 明美,
「リスクマネジメント基盤技術としての地震リスク評価の信頼度向上に関する研究（その 4）フラジリティ評価における認識論的不確実さの評価（建屋・地盤等）」、
日本原子力学会 2013 年秋の大会（青森、日本、2013 年 9 月 3 日～5 日）
 - ・ 西田 明美, 五十嵐 さやか, 坂本 成弘, 村松 健, 高田 毅士,
「地震ハザードに適合する地震波の作成（その 1）地震波作成方法の概要」、
2013 年度日本建築学会大会（北海道）学術講演会（北海道、日本、2013 年 8 月 30 日～9 月 1 日）
 - ・ 五十嵐 さやか, 西田 明美, 坂本 成弘, 村松 健, 高田 毅士,
「地震ハザードに適合する地震波の作成（その 2）作成した地震波の特性」、
2013 年度日本建築学会大会（北海道）学術講演会（北海道、日本、2013 年 8 月 30 日～9 月 1 日）
 - ・ Miki Kazuhiro,
“Physics of stimulated L-H transition”,
第 19 回 NEXT 研究会、（京都、日本、2013 年 8 月 29 日～30 日）
 - ・ 藤田 典久, 奴賀 秀男, 朴 泰祐, 井戸村 泰宏,
「GPU クラスタ HA-PACS における核融合シミュレーションコードの性能評価」、
並列/分散/協調処理に関するサマー・ワークショップ (SWoPP2013)、（北九州、日本、2013 年 7 月 31 日～8 月 2 日）
 - ・ 河村 拓馬, 宮村 浩子, 井戸村 泰宏, 武宮 博,
「粒子ベースボリュームレンダリングにおける粒子生成処理の GPGPU による並列高速化」、
第 41 回可視化情報シンポジウム（東京、日本、2013 年 7 月 16 日～7 月 17 日）
 - ・ Idomura Yasuhiro,
“Full-f gyrokinetic simulation over a confinement time”,
40th EPS Conference on Plasma Physics (Espoo, Finland, July 1-5, 2013)
 - ・ 木野 千晶, 西田 明美, 武宮 博,
「Immersed boundary 法を用いた FVM-FEM 流体構造連成手法の開発」、

2013 年度計算工学講演会（東京、日本、2013 年 6 月 19 日～21 日）

- ・ 関 暁之, 斎藤 税, 名古 玄天, 斎藤 公明, 武宮 博,
「全国の環境モニタリングデータの集約と公開」、
環境放射能除染学会第 2 回研究発表会（東京、日本、2013 年 6 月 5 日～7 日）

【シミュレーション技術開発室】

<査読無し論文>

- ・ 山口 正剛, 亀田 純,
「鉄鋼の焼戻し脆性と粒界水素脆性におけるマルチスケール解析; 第一原理計算と破壊力学試験」
第 57 回日本学会材料工学連合講演会講演論文集, pp. 35-36 (2013)
- ・ 岩澤 譲, 阿部 豊, 松尾 英治, 海老原 健一, 金子 暁子, 坂場 弘, 小山 和也,
「格子ボルツマン法 HCZ モデルによるジェットブレイクアップ挙動評価(2) ブレイクアップに及ぼす周囲流動場の影響」
第 18 回動力・エネルギー技術シンポジウム講演論文集, pp. 77-78 (2013)
- ・ 松尾 英治, 阿部 豊, 岩澤 譲, 海老原 健一, 金子 暁子, ;坂場 弘, 小山 和也,
「格子ボルツマン法 HCZ モデルによるジェットブレイクアップ挙動評価(1) ブレイクアップ長さの評価」
第 18 回動力・エネルギー技術シンポジウム講演論文集 pp. 75-76 (2013)
- ・ 奥村 雅彦, 山田 進, 町田 昌彦, 青木 秀夫,
「光格子系における長岡強磁性」
素粒子論研究, Vol. 119, No. 4C, pp. F99-F101 (2012)
- ・ 海老原 健一,
「TDA シミュレーションの方法と計算例」、
「水素脆化研究の基盤構築」研究会報告書 pp. 103-108
- ・ 海老原 健一,
「水素脆化を適正に評価できる水素添加法とは（低合金鋼の TDS 解析）」、
「水素脆化研究の基盤構築」研究会報告書 pp. 21-26

<口頭発表>

- ・ 永井 佑紀
「トポロジカル超伝導体における不純物効果」
日本物理学会第 69 回年次大会（平塚、2014 年 3 月 27 日～30 日）
- ・ 太田 幸宏, 町田 昌彦, 羽多野 毅, 小山 富男, 松本 秀樹
「テラヘルツ発振の 3 次元シミュレーション: 接合長・接合数と発振モードの相関」
日本物理学会第 69 回年次大会（平塚、2014 年 3 月 27 日～30 日）
- ・ 小林 恵太, 奥村 雅彦, 山田 進, 町田 昌彦, 青木 秀夫
「ダイヤモンド鎖ハバード模型における超伝導の DMRG 解析」
日本物理学会第 69 回年次大会（平塚、2014 年 3 月 27 日～30 日）

- ・ 鈴木 通人
「非クラマース二重項結晶場基底を持つPr系化合物の四極子秩序と電子状態の理論研究」
日本物理学会第69回年次大会（平塚、2014年3月27日～30日）
- ・ 志賀 基之, Masia, M.
「QM/MM法における交換対称な境界条件の利用」
日本物理学会第69回年次大会（平塚、2014年3月27日～30日）
- ・ 中村 博樹, 町田 昌彦
「第一原理計算に基づく二酸化アクチニドの比熱の評価」
日本原子力学会 2014年春の年会（東京、2014年3月26日～28日）
- ・ 小林 恵太, 中村 博樹, 町田 昌彦
「チタン酸塩における放射性核種の数値シミュレーションによる解析」
日本原子力学会 2014年春の年会（東京、2014年3月26日～28日）
- ・ 奥村 雅彦, 中村 博樹, 町田 昌彦
「粘土鉱物による高濃度Cs吸着挙動の第一原理計算による解析」
日本原子力学会 2014年春の年会（東京、2014年3月26日～28日）
- ・ 岩澤 譲, 阿部 豊, 金子 暁子, 齋藤 慎平, 松尾 英治, 海老原 健一, 坂場 弘, 小山 和也, 成合 英樹
「高速増殖炉の炉心熔融事故後冷却挙動の研究(23)格子ボルツマン法を用いた液体ジェットブレイクアップ挙動解析」
日本原子力学会 2014年春の年会（東京、2014年3月26日～28日）
- ・ 鈴木 知明
「Fe-Cr系におけるスピノーダル分解による硬化のモデリング」
日本金属学会 2014年春期(第154回)講演大会（東京、2014年3月21日～23日）
- ・ 山口 正剛, 板倉 充洋, 蕪木 英雄, 都留 智仁
「マグネシウムの成形性改善のための元素探索:第一原理計算」
日本金属学会 2014年春期(第154回)講演大会（東京、2014年3月21日～23日）
- ・ 山口 正剛, 亀田 純, 海老原 健一, 板倉 充洋, 蕪木 英雄
「高強度鋼の粒界水素脆性における原子間凝集エネルギー低下理論からの理解」
日本金属学会 2014年春期(第154回)講演大会（東京、2014年3月21日～23日）
- ・ 山口 正剛, 板倉 充洋, 志賀 基之, 蕪木 英雄, 阿部 英司
「一軸圧縮下のLPSO構造における転位のパイエルス応力低下」
日本金属学会 2014年春期(第154回)講演大会（東京、2014年3月21日～23日）
- ・ 佐々 成正、
「C1級初期値問題に対する運動量保存則について」
日本応用数理学会研究部会（京都、日本、2014年3月19～20日）
- ・ 佐々 成正、
「4倍精度基本線形代数ルーチン群QPBLASの紹介」
「多倍長精度計算フォーラム」第4回研究会（東京、日本、2014年3月7日）
- ・ 太田 幸宏, 永井 佑紀, 町田 昌彦,
「トポロジー不変量から眺めた超伝導不純物効果」、

- 非線形現象の数値シミュレーションと解析 2014 (札幌、日本、2014年3月7日～8日)
- Shiga Motoyuki,
“Quantum Statistical Analysis of Hydrogen Bonded Systems”,
Rare Event Sampling and Related Topics I (東京、日本、2014年3月5～6日)
 - 海老原 健一、
「鉄鋼材料における局所応力及び局所水素量の連続体モデルによる数値的評価」、
第24回 RACE コロキウム/第25回 CCSE ワークショップ (柏、日本、2014年1月16日)
 - 鈴木 通人、
「非クラマース二重項結晶場基底を持つ Pr 系化合物の四極子秩序と電子状態」
第3回 強相関電子系理論の最前線 -若手によるオープン・イノベーション- (和歌山、日本、2013年12月16日～18日)
 - 永井 佑紀、
「マルチバンド超伝導体に対する準古典理論とその応用について」
第21回渦糸物理国内会議 (仙台、日本、2013年12月12日～14日)
 - 太田 幸宏、
「多バンド超伝導におけるバンド間フラストレーション」
第21回渦糸物理国内会議 (仙台、日本、2013年12月12日～14日)
 - 山田 進、
「ネットワーク構造を考慮したマルチバンドハバードクラスタモデルの厳密対角化の並列化」
今後の HPC(基盤技術と応用) に関するワークショップ (長崎、日本、2013年12月8日～9日)
 - Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo, Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito,
“First-Principles Study of the Pyramidal Dislocation Motion in Mg”,
Materials Research Society 2013 Fall Meeting (Boston, USA, December 1-6, 2013)
 - Shiga Motoyuki,
“Challenges toward ab initio molecular simulations of rare events”,
第2回レア・イベントの理論科学ワークショップ、(大阪、日本、2013年11月21日)
 - Machida Masahiko, Sakuramoto Kazuhiro, Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Sato Yuya, Akutsu Keiko, Shiga Motoyuki,
“Comparative ab initio calculation studies of hydration structures on Cs and other alkaline metals”,
Third International Conference on Molecular Simulation, (November 18-20, Kobe, Japan)
 - Shiga Motoyuki, Masia M.,
“A Boundary condition for multilevel simulation for diffusive systems”,
3rd International Conference on Molecular Simulation, (Kobe, Japan, November, 18-20, 2013)
 - 鈴木 知明, 山口 正剛, 長谷川 晃,
「第一原理計算手法による W-Re, W-Os, Mo-Re 合金における照射欠陥解析」

- 東北大学金属材料研究所ワークショップ、(仙台、日本、2013年11月7～8日)
- 海老原 健一、
「 α 鉄中の不純物拡散偏析における空孔ドラッグ効果の数値的考察」、
東北大学金属材料研究所ワークショップ、(仙台、日本、2013年11月7～8日)
 - Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“First-Principles Calculation Studies for Radioactive Cesium Adsorption to Clay Minerals”, 2013 American Nuclear Society Winter Meeting, (Washington D.C., USA, November 10-14, 2013)
 - Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito,
“Modeling of He embrittlement of grain boundaries in α -Fe”,
3rd International Workshop on Structural Materials for Innovative Nuclear Systems (SMINS-3), (Idaho Falls, USA, October 7-10, 2013)
 - 佐々 成正
「非線形波動系に対するシンプレクティック法と運動量保存則」、
RIMS 研究集会「応用数理と計算科学における理論と応用の融合」、(京都、日本、2013年10月15～17日)
 - 板倉 充洋、
「第一原理計算による純 Mg<a+c> 転位の構造計算」、
シンクロ型 LPSO 構造の材料科学 中間報告会 (滋賀、日本、2013年9月29日～10月1日)
 - 小林 恵太, 山田 進, 奥村 雅彦, 町田 昌彦,
「多成分フェルミ原子気体に対する数値解析」、
日本物理学会 2013 年秋季大会 (徳島、日本、2013年9月25日～28日)
 - 永井 佑紀, 中村 博樹, 町田 昌彦,
「マルチバンド準古典理論-任意ハミルトニアンに対する準古典近似-」、
日本物理学会 2013 年秋季大会 (徳島、日本、2013年9月25日～28日)
 - 永井 佑紀, 中村 博樹, 町田 昌彦,
「バルクトポロジカル超伝導体に対する準古典近似」、
日本物理学会 2013 年秋季大会 (徳島、日本、2013年9月25日～28日)
 - Suzuki Michito, Oppeneer P., Magnani N.,
“Microscopic theory of the insulating electronic ground states of actinides dioxides AnO_2 ($An = U, Np, Pu, Am$ and Cm)”,
日本物理学会 2013 年秋季大会 (徳島、日本、2013年9月25日～28日)
 - 山田 進, 小林 恵太, 奥村 雅彦, 町田 昌彦,
「並列 DMRG 法による 2 次元周期系ハイゼンベルグモデルの大規模シミュレーション」、
日本物理学会 2013 年秋季大会 (徳島、日本、2013年9月25日～28日)
 - 志賀 基之, Masia, M.,
「交換対称性を利用した QM/MM 法の境界条件」、
第 7 回分子科学討論会 2013 京都 (京都、日本、2013年9月24日～27日)
 - 海老原 健一, 蕪木 英雄, 高井 健一,

- 「デトラップ活性化エネルギー算出のための Choo-Lee の手法の適用性に関する数値解析評価 — 焼戻しマルテンサイト鋼の場合の考察—」、
日本鉄鋼協会第 166 回秋の講演大会（金沢、日本、2013 年 9 月 17 日～19 日）
- ・ 山口 正剛, 亀田 純,
「微視亀裂進展に伴う塑性仕事の粒界凝集エネルギーへの依存性」、
日本金属学会 2013 年秋期講演大会（金沢、日本、2013 年 9 月 17 日～19 日）
 - ・ 鈴木 知明, 山口 正剛, 都留 智仁,
「alpha 鉄の He 粒界脆化に関する原子論的モデリング」、
日本金属学会 2013 年秋期講演大会（金沢、日本、2013 年 9 月 17 日～19 日）
 - ・ 佐々 成正,
「シンプレクティック数値積分法と運動量保存について」、
日本応用数理学会 2013 年度年会（福岡、日本、2013 年 9 月 9 日～11 日）
 - ・ 奥村 雅彦, 中村 博樹, 町田 昌彦,
「第一原理計算による粘土鉱物に吸着したセシウムの電子状態の解析」、
日本原子力学会 2013 年秋の年会（八戸、日本、2013 年 9 月 3 日～5 日）
 - ・ 板倉 充洋, 山田 進, 奥村 雅彦, 町田 昌彦,
「福島長期動態研究：河口域の堆積土砂移動モデリング」、
日本原子力学会 2013 年秋の年会（八戸、日本、2013 年 9 月 3 日～5 日）
 - ・ 山田 進, 板倉 充洋, 奥村 雅彦, 町田 昌彦,
「福島長期環境動態研究：（6）二次元河川コードを用いた河川内放射性物質の堆積分布予測」、
日本原子力学会 2013 年秋の年会（八戸、日本、2013 年 9 月 3 日～5 日）
 - ・ 中村 博樹, 奥村 雅彦, 町田 昌彦,
「モンテカルロシミュレーションによるゼオライトの Cs 吸着性能の評価」、
日本原子力学会 2013 年秋の年会（八戸、日本、2013 年 9 月 3 日～5 日）
 - ・ 小林 恵太, 中村 博樹, 町田 昌彦,
「チタン酸塩における Sr 吸着の第一原理計算による解析」、
日本原子力学会 2013 年秋の年会（八戸、日本、2013 年 9 月 3 日～5 日）
 - ・ 奥村 雅彦, 中村 博樹, 町田 昌彦,
「第一原理計算による土壌における放射性セシウム吸着様態の解析」、
日本原子力学会バックエンド部会第 29 回バックエンド夏期セミナー（福島、日本、2013 年 8 月 7～8 日）
 - ・ Yamaguchi Masatake, Kameda Jun,
“Temper and hydrogen-induced intergranular embrittlement of alloy steel; First-principles calculations and fracture mechanics experiments”,
8th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM-8), (Waikoloa, U. S. A., August 4-9, 2013)
 - ・ 佐々 成正, 山田 進, 町田 昌彦, 今村 俊幸, 奥田 洋司,
「QPBLAS-GPU の開発と性能評価」
第 18 回日本計算工学講演会（東京、日本、2013 年 6 月 20 日）

- ・ 奥村 雅彦, 中村 博樹, 町田 昌彦,
「放射性セシウムの土壌吸着様態の第一原理計算による解析」、
環境放射能除染学会第2回研究発表会（東京、日本、2013年6月5日～7日）
- ・ 中村 博樹, 奥村 雅彦, 町田 昌彦,
「計算科学によるゼオライトのCs吸着機構の解析」、
環境放射能除染学会第2回研究発表会（東京、日本、2013年6月5日～7日）
- ・ 町田 昌彦, 奥村 雅彦, 中村 博樹,
「土壌粘土鉱物中セシウムの化学結合形態; 計算科学によるアプローチ」、
環境放射能除染学会第2回研究発表会（東京、日本、2013年6月5日～7日）
- ・ Nagai Yuki, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“Effective theory in Bulk topological superconductors”
14th International Workshop on Vortex Matter in Superconductors (Nanjing, China,
May 21, 2013)
- ・ 志賀 基之,
「分子交換対称性を考慮したQMMM法」、
理論化学討論会（福岡、日本、2013年5月15日～17日）
- ・ 山口 正剛, 亀田 純,
「鉄鋼材料の焼戻し脆性と粒界水素脆性のマルチスケール解析: 第一原理計算と破壊靱性
試験」(依頼講演)、
第151回超塑性研究会（神戸、日本、2013年5月10日）

【情報システム管理室】

<査読無し論文>

- ・ 北村 竜明, 坂本 健作, 高瀬 和之,
「超臨界圧条件における原子炉サブチャンネル模擬流路内熱流動シミュレーション」
日本機械学会第26回計算力学講演会論文集(CD-ROM) pp. 703_1-703_2 (2013)

3. 技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

- ・ システム計算科学センター
“平成24年度大規模施設の構造を計算科学手法により評価するための基盤技術に関する
共同研究開発(共同研究)”
JAEA-Review 2014-001, 2014
- ・ 矢城 重雄他
“情報セキュリティ教育教材集”
JAEA-Review 2013-038, 2014
- ・ システム計算科学センター
“平成24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 2013-036, 2014
- ・ システム計算科学センター
“大規模施設の構造を計算科学手法により評価するための基盤技術に関する共同研究開発

(共同研究)”

JAEA-Review 2013-030, 2013

- 平山 孝、神成 政明
“主要 IT インフラのデータ及びサーバ機能バックアップシステムの構築”
JAEA-Technology 2013-003, 2013
- 平山 孝、森島 宗一
“JT-60 実験データ解析システム運用管理マニュアル”
JAEA-Testing 2013-005, 2014
- 坂本 健作、星 芳幸
“原子力機構スーパーコンピュータシステムにおける大規模データの可視化”
JAEA-Testing 2013-002, 2013

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- 2013 年 8 月 29 日
“空間線量率モニタリングデータのリアルタイム情報発信を開始”
(NHK 全国版・地方版、福島中央テレビ、テレビユー福島、福島テレビで放映、読売新聞、福島民友、福島民報に掲載)
- 2013 年 11 月 29 日 (テレビ東京「ワールドビジネスサテライト」)
“放射線見極め除染せよ”

5. 研究発表会等の開催

- 第 10 回原子力計算科学セミナー(H25 年 7 月 17 日)
「流体計算科学に問われていること」
- 第 11 回原子力計算科学セミナー(H25 年 8 月 7 日)
「設計と計算科学」
- 第 12 回原子力計算科学セミナー(H25 年 8 月 30 日)
「複雑問題解析技術の最前線」
- 第 13 回原子力計算科学セミナー(H25 年 12 月 9 日)
「数値解法の最前線」
- 第 14 回原子力計算科学セミナー(H26 年 2 月 25 日)
「有限要素解析における行列計算技術の最前線」
- 第 25 回 CCSE ワークショップ(H26 年 1 月 16 日)
「構造物ライフサイクルにおける検査技術、評価技術」
- シミュレーション技術開発室セミナー (計 2 回開催)
H25 年 6 月 26 日 : 明石遼介 (東京大学大学院工学系研究科)
「プラズモン-フォノン協力機構のための超伝導密度汎関数理論」
H25 年 7 月 24 日 : 石井良樹 (新潟大学大学院自然科学研究科)
「分子動力学法を用いた融体の熱伝導率評価」

6. 受賞等

- ・ JPSJ 2012 Highly Cited Article (2011 年に刊行した英論文で 2012 年の被引用数が Top10)
 Y. Imai, H. Takahashi, K. Kitagawa, K. Matsubayashi, N. Nakai, Y. Nagai, Y. Uwatoko,
 M. Machida, and A. Maeda
 「Microwave Surface Impedance Measurements of LiFeAs Single Crystals」
 (日本物理学会、平成 25 年 5 月)
- ・ SC13 Best Poster Award
 S. Maeyama, T.-H. Watanabe, Y. Idomura, M. Nakata, M. Nunami, and A. Ishizawa
 「Optimizations of a spectral/finite difference gyrokinetic code for improved strong
 scaling toward million cores」
 (SC13、平成 25 年 11 月)
- ・ 第 8 回(2014 年)日本物理学会若手奨励賞
 三木 一弘
 (日本物理学会、平成 26 年 3 月)
- ・ 第 11 回日本原子力学会計算科学技術部会 部会 CG 賞
 河村 拓馬
 (日本原子力学会計算科学技術部会、平成 26 年 3 月)

7. 特許等の状況

(1)特許の出願及び登録

なし。

(2)成果の活用（利用許諾）による収入

件名（成果の内容）	契約先（販売者）	権利／契約種別	今年度収入額
AVS/Express 並列化支援 ツール	株式会社ケイ・ジ ー・ティ	プログラム著作 権／利用許諾	0 円
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	2,263,008 円

8. 外部資金の獲得に関連する事項

室	予算額(千円) (件数)
高度計算機技術開発室	293,740 (6)
シミュレーション技術開発室	13,710 (12)

【高度計算機技術開発室】

- (1) 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発（次世代ス
ーパーコンピュータ戦略プログラム） 41,750 千円
- (2) 平成 25 年度東京電力福島第一原子力発電所事故による環境モニタリングデータベースの
構築（原子力規制庁） 230,000 千円（JAEA 受託額 350,000 千円の内数）
- (3) リスクマネジメント基盤技術としての地震リスク評価の信頼度向上に関する研究（分担課
題：モデルプラント建屋・地盤応答解析による情報提供）（科学技術振興機構） 10,230

- 千円
- (4) ポイントベース統合モデリング・レンダリング（日本学術振興会：科研費（若手 B）） 2, 210 千円
- (5) 地震動下における配管内乱流機構および配管振動機構の解明（日本学術振興会：科研費（若手 B）） 1, 100 千円
- (6) 核燃焼プラズマ輸送数値実験の開発（日本学術振興会：科研費（若手 A）） 8, 450 千円
- 【シミュレーション技術開発室】
- (7) 京都大学構造材料元素戦略研究拠点（金属材料中の水素の状態と挙動に関するシミュレーション）（京都大学） 1, 300 千円
- (8) 構造用六方晶金属の機械的性質における計算科学的研究（自動車メーカー） 3, 150 千円
- (9) 転位バイアス因子の理論的解明（日本学術振興会：科研費（基盤 C）） 910 千円
- (10) 水素・重水素移動反応の量子統計力学的第一原理計算（文部科学省：科研費（若手 B）） 650 千円
- (11) 2 次元モデルに対するメニーコア並列計算機向き並列・高速化手法の研究開発（日本学術振興会：科研費（基盤 C）） 1, 430 千円
- (12) 散逸系の局在パターン生成における非局所的効果の数値的研究と応用（日本学術振興会：科研費（基盤 B）） 100 千円
- (13) 量子多成分系分子理論システムの構築およびプロトニクス・ポジトロニクスへの展開（科研費（若手 B）） 200 千円
- (14) MA-MOX 燃料中のヘリウム挙動の計算科学的手法による解明と体欠陥形成制御（科研費（基盤 A）） 600 千円
- (15) 百万画素サブミクロン分解能中性子ラジオグラフィのための固体超伝導検出器システム（日本学術振興会：科研費（基盤 S）） 500 千円
- (16) フェルミ面トポロジーが生み出す非従来型超伝導の最適化に関する理論研究（日本学術振興会：科研費（基盤 B）） 930 千円
- (17) 第一原理計算によるスピン軌道相互作用と電子相関の織りなす物性予測（日本学術振興会：科研費（基盤 C）） 300 千円
- (18) 第一原理に基づく計算科学による LPSO 構造の電子論と構造科学の構築（日本学術振興会：科研費（新学術領域）） 3, 640 千円

9. 産学官との連携に関する事項

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	6	0	4	0
シミュレーション技術開発室	2	0	1	0
両室共通	0	0	0	1
合計	8	0	5	1

●共同研究

【高度計算機技術開発室】

- 核融合シミュレーションにおける大容量データ処理技術に関する研究（大学共同利用機関

法人 自然科学研究機構 核融合科学研究所)

- ・ 大規模複雑人工物の統合シミュレーション環境構築 (東京大学)
- ・ 環境モニタリングデータのマッピング技術の高度化 (東京大学)
- ・ 原子力施設の地震リスク評価手法の高度化に関する研究 (東京都市大学、東京大学、シー・エス・エー・ジャパン)
- ・ 次世代スーパーコンピュータ用プラズマ解析アルゴリズムの研究開発 (一般財団法人高度情報科学技術研究機構)
- ・ 運動論的プラズマシミュレーションアルゴリズムの研究開発 (東京大学)

【シミュレーション技術開発室】

- ・ 構造用六方晶金属の機械的性質における計算科学的研究 (自動車メーカー)
- ・ 計算科学の援用による選択的 Sr 吸着材の合成に関する研究 (大塚科学株式会社)

●受託研究

【高度計算機技術開発室】

- ・ 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発 (次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム) (東京大学)
- ・ 平成 25 年度東京電力福島第一原子力発電所事故による環境モニタリングデータベースの構築 (原子力規制庁) (福島技術本部受託に参加)
- ・ 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) (福島技術本部受託に参加)
- ・ リスクマネジメント基盤技術としての地震リスク評価の信頼度向上に関する研究 (分担課題: モデルプラント建屋・地盤応答解析による情報提供) (科学技術振興機構)

【シミュレーション技術開発室】

- ・ 京都大学構造材料元素戦略研究拠点 (金属材料中の水素の状態と挙動に関するシミュレーション) (京都大学)

●研究協定

- ・ 「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、原子力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 26 件に及ぶ機構内連携を実施した。

(1) 放射線量等測定データの収集および管理に関する技術協力

部署：福島技術本部

概要：福島第一原子力発電所事故に伴い放出された放射性物質の測定結果を収集する技術および、収集データを登録、公開するデータベースの構築技術を確立する。

(2) 福島県空間線量率測定データの情報発信

部署：福島技術本部

概要：福島県下を走行する路線バスを活用することで得られる、地域住民に密着した空間線量率分布データを可視化し、迅速に公開する。

- (3) 土壌粘土鉱物への放射性セシウム吸着の解析
部署：福島技術本部、量子ビーム応用研究部門
概要：粘土鉱物に対する吸着化学形態を量子ビームと計算科学の両面から解明する。
- (4) ゼオライトへの放射性セシウム吸着の解析
部署：先端基礎研究センター、原子力基礎工学研究部門
概要：ゼオライトのセシウム吸着性状について計算科学の観点から評価する。
- (5) 河口及び沿岸でのセシウム長期輸送解析
部署：福島技術本部、原子力基礎工学研究部門、地層処分研究開発部門
概要：福島長期環境予測に資するため、河口及び沿岸での 2/3 次元のセシウム長期輸送解析システムを開発する。
- (6) 土壌有機物におけるセシウム吸着特性の評価
部署：福島技術本部、量子ビーム応用研究部門
概要：有機物におけるセシウムの吸着形態や輸送特性を原子・分子レベルから評価する。
- (7) 福島第一原子力発電所港湾内放射性核種動態シミュレーション
部署：福島技術本部
概要：福島第一原子力発電所の港湾内の放射性核種の動態をシミュレーションにより評価する。
- (8) 損傷頻度評価
部署：安全研究センター
概要：3次元モデルを用いる大規模耐震解析システムを活用し、建屋および機器の地震時応答解析を高精度化。
- (9) 高温工学試験炉の耐震解析に関する研究
部署：大洗研究開発センター（高温工学試験研究炉部）
概要：大規模耐震解析システムやモデルデータを提供し、施設の耐震性評価を支援。
- (10) 地下構造物の振動解析に関する技術協力
部署：地層処分研究開発部門
概要：大規模振動解析システムの提供や技術協力により、地下構造物の健全性評価を支援。
- (11) 施設の耐震バックチェック支援
部署：建設部
概要：耐震強度解析および評価への協力により機構内施設建家の耐震バックチェックを支援。
- (12) 原子炉圧力容器鋼の高経年化対策研究(照射脆化予測)
部署：安全研究センター
概要：脆化予測に必要な基礎的知見を提供するため、第一原理計算や、それに基づくレート方程式シミュレーションを実施。
- (13) 応力腐食割れ、照射材料の数値シミュレーション研究
部署：原子力基礎工学研究部門
概要：応力腐食割れのいくつかの仮説メカニズムを検証、選択（脆化元素＝酸素 or 水素）するためシミュレーションを行う。

- (14) 中性子検出器開発に関わるシミュレーション研究と実験による検証
 部署：量子ビーム応用研究部門、J-PARC センター
 概要：実験及び開発研究を先導（設計支援を含む）するため、高精度シミュレーションを行い、データを提供する。
- (15) 構造材料照射に関わる材料強度等の物性評価シミュレーション研究
 部署：原子力基礎工学研究部門
 概要：材料強度基礎パラメータの導出し提供するためモデリング及びシミュレーションを行う。
- (16) Fe 中における He の拡散と結合状態に関する原子論的モデリング
 部署：核融合研究開発部門
 概要：核融合環境化での長期の中性子照射による材料組織変化を予測するモデルを確立。
- (17) 六方晶金属の機械的性質の計算科学研究
 部署：原子力基礎工学研究部門
 概要：計算モデリングが進んでおらず、基礎的な機械的性質についてもよくわかっていない六方晶金属（燃料被覆管 Zr 合金、自動車用軽量金属）について、第一原理計算にもとづいたモデリング手法を開発する。
- (18) シンクロ型 LPSO 構造の材料科学
 部署：J-PARC センター
 概要：熊本大学で開発された LPSO（長周期積層構造）をもつマグネシウム合金の基本的な物性を解明する。
- (19) 分子動力学計算と実験による MA 含有 MOX 燃料の熱物性と微視的構造の評価
 部署：先端基礎研究センター、原子力基礎工学研究部門、次世代原子力システム研究開発部門
 概要：マイナーアクチニドを含有する MOX 燃料の物性評価のため、高精度シミュレーション手法を確立し、実験結果の予測やその解釈を行う。
- (20) 転位バイアス因子の理論的解明
 部署：原子力基礎工学研究部門
 概要：照射スウェリングの原因である転位バイアス因子の理論の構築。
- (21) セシウムの生体内移行の検討
 部署：量子ビーム応用研究部門
 概要：生体内での放射性セシウムの化学形態変化と動的輸送過程の解析。
- (22) ストロンチウム吸着材チタン酸化合物の開発
 部署：東海研究開発センター核燃料サイクル工学研究所
 概要：ストロンチウム吸着材チタン酸化合物の開発に対し、計算科学的手法を援用し、開発を加速させる。
- (23) ガラス溶融固化シミュレーション高速化
 部署：東海研究開発センター核燃料サイクル工学研究所
 概要：ガラス固化プロセスの温度や流量等の運転パラメータの最適化をするために膨大な計算を効率化する。
- (24) J-PARC における中性子散乱実験の結果の解析

部署：量子ビーム応用研究部門

概要：鉄系高温超伝導体の超伝導発現機構の解明のために量子ビーム応用研究部門により実施された J-PARC における中性子散乱実験結果の理論解析を行う。

(25) ペタスケール核融合シミュレーションコード開発

部署：核融合研究開発部門

概要：京コンピュータ、Helios 等におけるペタスケール核融合シミュレーションを目的として超並列処理技術等の開発を実施。

(26) 燃料溶融複雑系の解析に関する技術協力

部署：原子力基礎工学研究部門

概要：燃料溶融複雑系の大規模シミュレーションデータの解析作業を効率化するために高速可視化処理ツールを開発する。

1 1. 国際協力

国際協力の一覧を以下に示す。

(1) ツールズ情報研究所 (IRIT)、並列情報学研究所 (LIP)：仏国

“ハイパフォーマンス疎行列代数演算のためのツールの研究開発協力に関する日本原子力研究開発機構とツールズ情報処理研究所、並列情報学研究所との間の覚書”
(2005 年度～)

(2) 原子力庁 (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～)

(3) カリフォルニア大学バークレー校 (UCB)：米国

“地層処分及び燃料サイクルに関する共同研究契約”(この共同研究の一環として、計算科学の観点から協力している)
(2008 年度～、システム計算科学センターの協力は 2011 年度～)

(4) パシフィックノースウェスト国立研究所 (PNNL)：米国

“環境汚染の評価及び浄化に係る共同研究契約”(この共同研究の一環として、計算科学の観点から協力している)
(2011 年度～)

(5) 国際原子力機関 (IAEA)

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

付録5

平成 26 年度計算科学技術研究実績

This is a blank page.

平成 26 年度 計算科学技術研究実績

1. 研究論文、査読付き会議論文等

室	研究論文	査読付き会議論文
システム計算科学センター	1	2
高度計算機技術開発室	7	5
シミュレーション技術開発室	22	8
合計	30	15

(平成 27 年 3 月 31 日現在)

【システム計算科学センター】

<研究論文>

- ・ 中島 憲宏, 西田 明美, 川上 義明, 岡田 達夫, 鶴田 理, 沢 和弘, 飯垣 和彦,
「大型プラントの次世代耐震シミュレーション」
ターボ機械, Vol. 42, No. 5, pp.332-338 (2014)

<査読付き会議論文>

- ・ Nakajima Norihiro, Nishida Akemi, Kawakami Yoshiaki, Okada Tatsuo, Tsuruta Osamu,
Sawa Kazuhiro, Iigaki Kazuhiko,
“Structural analysis for assembly by integrating parts” ,
Proceedings of 22nd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-22)
(DVD-ROM) p.9 (2014)
Ishida Takekazu, Nishikawa Masatoshi, Fujita Yoshifumi, Okayasu Satoru, Katagiri
Masaki, Sato Kazuo, Yotsuya Tsutomu, Shimakage Hisashi, Miki Shigehito, Wang Z.,
Machida Masahiko, Kano Takuma, Kato Masaru,
“Superconducting MgB₂ thin film detector for neutrons” ,
Journal of Low Temperature Physics, Vol. 151, No.3-4, pp.1074-1079 (2008)

【高度計算機技術開発室】

<研究論文>

- ・ 宮村 浩子, 河村 拓馬, 鈴木 喜雄, 井戸村 泰宏, 武宮 博,
「4次元データにおける特徴領域探索のための2次元可視化」、
情報処理学会論文誌、Vol. 55, No. 9, pp. 2216-2224 (2014)
- ・ 河村 拓馬, 井戸村 泰宏, 宮村 浩子, 武宮 博,
「粒子ベースボリュームレンダリングを利用した遠隔可視化システム」、
日本シミュレーション学会論文誌、Vol. 6, No.2, pp.15-26 (2014)
- ・ Ishizawa Akihiro, Watanabe Tomohiko, Sugama Hideo, Maeyama Shinya, Nakajima
Noriyoshi,
“Electromagnetic gyrokinetic turbulence in finite-beta helical plasmas” ,
Physics of Plasmas, Vol. 21, p.055905 (2014)

- Miki Kazuhiro, Diamond Patrick H., Hahn San-hee, Xiao Wei-wen, Gurcan Ozgur, Tynan George,
“Dynamics of stimulated L→H transitions” ,
Physics of Plasmas, Vol. 20, p.082304 (2013)
- Miki Kazuhiro, Diamond Patrick H., Schmitz Lothar, McDonald Darren C., Estrada Teresa,
Gurcan Ozgur, Tynan George,
“Spatio-temporal evolution of the H→L back transition” ,
Physics of Plasmas, Vol. 20, p.062304 (2013)
- Miki Kazuhiro, Diamond Patrick H., Fedorczak Nicolas, Gurcan Ozgur, Malkov Mikhail,
Lee Christopher, Kosuga Yusuke, Tynan George, Xu Guosheng, Estrada Teresa, McDonald
Darren C., Schmitz Lothar, Zhao Kaijun,
“Spatio-temporal evolution of the L→H and H→L transitions” ,
Nuclear Fusion, Vol. 53, p.073044 (2013)
- Idomura Yasuhiro, Nakata Motoki, Yamada Susumu, Machida Masahiko, Imamura Toshiyuki,
Watanabe Tomohiko, Nunami Masanori, Inoue Hikaru, Tsutsumi Shigenobu, Miyoshi Ikuo,
Shida Naoyuki,
“Communication overlap techniques for improved strong scaling of gyrokinetic
Eulerian code beyond 100k cores on the K-computer” ,
International Journal of High Performance Computing Applications, Vol. 28, No. 1,
pp.73-86 (2014)

< 査読付き会議論文 >

- Fujita Norihisa, Nuga Hideo, Boku Taisuke, Idomura Yasuhiro,
“Nuclear Fusion Simulation Code Optimization and Performance Evaluation on GPU
Cluster” ,
Proceedings of PDSEC14, pp.1266-1274 (2014)
- Seki Akiyuki, Takemiya Hiroshi, Takahashi Fumiaki, Saito Kimiaki, Tanaka Kei,
Takahashi Yutaka, Takemura Kazuhiro, Tsuzawa Masaharu,
“Development of radionuclide distribution database and map system on Fukushima
nuclear accident” ,
Progress in Nuclear Science and Technology, Vol. 4, pp.47-50 (2014)
- Watanabe Tomohiko, Idomura Yasuhiro, Maeyama Shinya, Nakata Motoki, Sugama Hideo,
Nunami Masanori, Ishizawa Akihiro,
“Exploring phase space turbulence in magnetic fusion plasmas” ,
CCP2013 Proceedings in Journal of Physics: Conference Series, Vol. 51,
p.0012045_1-11 (2014)
- Idomura Yasuhiro, Nakata Motoki, Jolliet S.,
“Progress of full-f gyrokinetic simulation toward reactor relevant numerical
experiments” , Plasma and Fusion Research, Vol. 9, 3503028_1-3503028_7 (2014)
- Nishida Akemi, Igarashi Sayaka, Sakamoto Shigehiro, Uchiyama Yasuo, Yamamoto Yu,

Muramatsu Ken, Takada Tsuyoshi,

“Characteristics of simulated ground motions consistent with seismic hazard” ,
Transactions of 22nd International Conference on Structural Mechanics in Reactor
Technology (SMiRT-22) (CD-ROM), p.10 (2014)

【シミュレーション技術開発室】

<研究論文>

- Vela S., Mota F., Deumal M., Suizu Rie, Shuku Yoshiaki, Mizuno Asato, Awaga Kunio, Shiga Motoyuki, Novoa J., Ribas-Arino J.,
“The key role of vibrational entropy in the phase transitions of dithiazolyl-based bistable magnetic materials” ,
Nature Communications, Vol. 5, pp.4411_1-4411_9 (2014)
- Dopieralski, P., Anjukandi, P., Rücker, M., Shiga Motoyuki, Ribas-Arino, J., Marx, D.,
“On the role of polymer chains in transducing external mechanical forces to benzocyclobutene mechanophores” ,
Journal of Materials Chemistry, Vol. 21, pp.8309-8316 (2011)
- Fujita Takatoshi, Tanaka Shigenori, Fujiwara Takayuki, Kusa Masaaki, Mochizuki Yuji, Shiga Motoyuki,
“*Ab initio* path integral Monte Carlo simulation of water trimer with electron correlation effects” ,
Computational and Theoretical Chemistry, Vol. 997, pp.7-13 (2012)
- Vela, S., Deumal, M., Shiga Motoyuki, Novoa, J., Ribas-Arino, J.,
“Dynamical effects on the magnetic properties of dithiazolyl bistable materials” ,
Chemical Science, Vol. 6, pp.2371-2381 (2015)
- 松尾 英治, 阿部 豊, 岩澤 譲, 海老原 健一, 小山 和也,
「格子ボルツマン法によるジェットブレイクアップ挙動解析」
日本機械学会論文集、Vol. 81, No. 822, pp.14-00409_1-20 (2015)
- Yamaguchi Masatake, Kameda Jun,
“Multiscale thermodynamic analysis on fracture toughness loss induced by solute segregation in steel” ,
Philosophical Magazine, Vol. 94, No. 19, pp.2131-2149 (2014)
- Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“Energetics of atomic level serial ion exchange for cesium in micaceous clay minerals” ,
Clay Science, Vol. 18, No. 3, pp.53-61 (2014)
- Yamada Susumu, Kitamura Akihiro, Kurikami Hiroshi, Yamaguchi Masaaki, Malins A., Machida Masahiko,
“Sediment and ¹³⁷Cs transport and accumulation in the Ogaki Dam of eastern Fukushima” ,

- Environmental Research Letters, Vol. 10, pp.014013_1-014013_9 (2015)
- Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake, Hasegawa Akira,
 “Stability and mobility of rhenium and osmium in tungsten; First principles study” ,
 Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, Vol. 22,
 pp.075006_1-075006-13 (2014)
 - Nagai Yuki,
 “Robust superconductivity with nodes in the superconducting topological insulator
 $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$; Zeeman orbital field and non-magnetic impurities”,
 Physical Review B, Vol. 91, pp.060502_1-060502_5 (2015)
 - Nagai Yuki, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 “Surface states around a vortex in topological superconductors; Intersection of
 a surface and a vortex” ,
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 84, pp.033703_1-033703_4 (2015)
 - Yoshizawa Shunsuke, Kim H., Kawakami Takuto, Nagai Yuki, Nakayama Tomonobu, Hu X.,
 Hasegawa Yukio, Uchihashi Takashi,
 “Imaging Josephson vortices on the surface superconductor $\text{Si}(111)-(\sqrt{7}\times\sqrt{3})$ -In
 using a scanning tunneling microscope”
 Physical Review Letters, Vol. 113, pp.247004_1-247004_5 (2014)
 - Sasa Narimasa,
 “Momentum Conservation Law in Symplectic Integrators for Partial Differential
 Equations” ,
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 83, No. 12, pp.123003_1-123003_4
 (2014)
 - Nakamura Hiroki, Okumura Masahiko, Machida Masahiko,
 “Monte Carlo simulation studies of cation selectivity in ion exchange of zeolites” ,
 RSC Advances (Internet), Vol. 4, pp.52757-52761 (2014)
 - Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Machida Masahiko,
 “Impurity effects in a two-dimensional topological superconductor: A link of
 T_c -robustness with a topological number” ,
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 83, pp.094722_1-094722_5 (2014)
 - Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Machida Masahiko,
 “Nonmagnetic impurity effects in a three-dimensional topological superconductor:
 From p - to s -wave behaviors” ,
 Physical Review B, Vol. 89, pp.214506_1-214506_6 (2014)
 - Asai Hidehiro, Ota Yukihiro, Kawabata Shiro, Machida Masahiko, Nori F.,
 “Theory of macroscopic quantum tunneling with Josephson-Leggett collective
 excitations in multiband superconducting Josephson junctions” ,
 Physical Review B, Vol. 89, pp.224507_1-224507_7 (2014)
 - Nagai Yuki,
 “ Field-angle-dependent Low-energy Excitations around a Vortex in the

- Superconducting Topological Insulator $\text{Cu}_x\text{Bi}_2\text{Se}_3$ ”
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 83, pp.063705_1-054004_4 (2014)
- Nagai Yuki, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 “Spin-polarized Majorana Bound States inside a Vortex Core in Topological Superconductors” ,
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 83, pp.064703_1-064703_7 (2014)
 - Sasa Narimasa,
 “Momentum Conservation Law in Explicit Symplectic Integrators for Nonlinear Wave Equations” ,
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 83, pp.054004_1-054004_4 (2014)
 - Kobayashi Keita, Ota Yukihiro, Okumura Masahiko, Yamada Susumu, Machida Masahiko,
 “Quantum phases in degenerate- p -orbital attractive one-dimensional fermionic optical lattices” ,
 Physical Review A, Vol. 89, pp.023625_1-023625_5 (2014)
 - Nagai Yuki, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 “Quasiclassical Treatment and Odd-Parity/Triplet Correspondence in Topological Superconductors”
 Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 83, pp.053705_1-053705_4 (2014)

<査読付き会議論文>

- Kobayashi Keita, Okumura Masahiko, Ota Yukihiro, Yamada Susumu, Machida Masahiko,
 “Ferromagnetism in multi-orbital Fermi gas loaded on a one-dimensional optical lattice” , JPS Conference Proceedings, Vol. 3, No. 016006, pp.016006_1-016006_6 (2014)
- Higashi Yoichi, Nagai Yuki, Yoshida Tomohiro, Yanase Yoichi,
 “Vortex core structure in multilayered Rashba superconductors” ,
 Journal of Physics: Conference Series, Vol. 568, pp.022018_1-022018_5 (2014)
- Kawakami Takuto, Nagai Yuki, Yoshizawa Shunsuke, Kim H., Hasegawa Yukio, Nakayama Tomonobu, Uchihashi Takashi, Hu X.,
 “Excitation spectrum of Josephson vortices on surface superconductor” ,
 Journal of Physics: Conference Series, Vol. 568, pp.022022_1-022022_5 (2014)
- Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Machida Masahiko,
 “Robustness against non-magnetic impurities in topological superconductors” ,
 Journal of Physics: Conference Series, Vol. 568, pp.022030_1-022030_5 (2014)
- Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 “Hybrid Density Functional Study on Plutonium Dioxide” ,
 JPS Conference Proceedings, Vol. 3, pp.017034_1-017034_4 (2014)
- Nagai Yuki, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
 “Inhomogeneity Effects in Topological Superconductors” ,
 JPS Conference Proceedings, Vol. 3, pp.015013_1-015013_6 (2014)

- Yamada Susumu, Imamura Toshiyuki, Machida Masahiko,
 “Parallel Computing Design for Exact Diagonalization Scheme on Multi-band Hubbard Cluster Models” ,
 Parallel Computing: Accelerating Computational Science and Engineering (CSE), Vol. 25, pp.427-436 (2014)
- Ebihara Kenichi, Kaburaki Hideo, Takai Kenichi,
 “Numerical evaluation of the Choo and Lee’s method for calculating hydrogen detrapping activation energies” ,
 Proceedings of 2012 International Hydrogen Conference; Hydrogen-Materials Interactions pp. 553-561 (2014)

2. 国際会議、国内会議での発表等

【システム計算科学センター】

<査読無し論文>

- 中島 憲宏, 西田 明美, 川上 義明, 鈴木 喜雄,
 「設計計算モデリングの動的支援技法」
 日本機械学会第24回設計工学・システム部門講演会講演論文集(USB Flash Drive) 9 p.
 (2014)
- 北村 竜明, 坂本 健作, 高瀬 和之,
 「超臨界流体中に存在するスぺーサまわりの伝熱流動に関する数値解析」
 日本機械学会第27回計算力学講演会論文集(CD-ROM)、pp.2 (2014)

<口頭発表>

- 中島 憲宏, 西田 明美, 川上 義明, 鈴木 喜雄,
 「構造解析解の確かさ推定」
 日本原子力学会 2015 年春の年会、(日立、日本、2014 年 3 月 20 日～23 日)
- Machida Masahiko, Ota Yukihiro,
 “Theory of phase-slip-center effects on superconducting kinetic inductance” ,
 APS March Meeting 2015, (San Antonio, USA, March 2-6, 2015)
- 中島 憲宏,
 「原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発」
 文部科学省 HPCI 戦略プログラム第5回「分野4次世代ものづくり」シンポジウム、(神戸、
 日本、2014 年 12 月 5 日)
- 中島 憲宏,
 「可視化における HPC 活用」
 第20回ビジュアライゼーションカンファレンス、(東京、日本、2014 年 11 月 7 日)
- Machida Masahiko, Nakamura Hiroki, Srinivasan S. G., Van Duin A. C. T.,
 “Molecular dynamics studies for oxidation reaction of Zr metals in high-temperature and high-pressure steam condition” ,
 Nuclear Materials Conference 2014 (NuMat 2014), (Clearwater, U. S. A., October 27-30,

- 2014)
- 中島 憲宏, 西田 明美, 川上 義明, 鶴田 理, 鈴木 喜雄,
「組立構造解析を用いた時刻歴応答解析」
日本原子力学会 2014 年秋の大会、(京都、日本、2014 年 9 月 8 日～10 日)
 - Machida Masahiko, Yamada Susumu, Itakura Mitsuhiro, Okumura Masahiko, Kitamura Akihiro,
“Numerical Demonstration of Massive Sediment Transport and Cs Recontamination by River Flooding in Fukushima Coastal Area” ,
European Geosciences Union General Assembly 2014, (Vienna, Austria, April 27-May 02, 2014)
 - 蕪木 英雄, 鈴木 知明;福元 謙一, 板倉 充洋,
「V 中ボイド-転位相互作用による硬化メカニズム; 分子動力学シミュレーション」
東北大学金属材料研究所 2014 年ワークショップ「照射材料研究、原子力材料研究のこれから」(仙台、日本、2014 年 7 月 31 日～8 月 1 日)
 - Kaburaki Hideo, Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake,
“A Molecular dynamics study on the structure and formation mechanisms of non-basal dislocations in magnesium” ,
2nd International Symposium on Long-Period Stacking Ordered Structure and its Related Materials (LPSO 2014), (Kumamoto, Japan, October 5-8, 2014)
 - Kaburaki Hideo, Itakura Mitsuhiro, Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito,
“A Molecular dynamics study on the structure and formation mechanisms of a <c+a> dislocation in magnesium” ,
Materials Research Society 2014 Fall Meeting, (Boston, USA, November 30-December 5, 2014)

【高度計算機技術開発室】

< 査読無し論文 >

- Nishida Akemi, Takada Tsuyoshi, Itoi Tatsuya, Furuya Osamu, Muramatsu Ken,
“Study on next generation seismic PRA methodology, 2; Quantifying effects of epistemic uncertainty on fragility assessment” ,
Proceedings of 12th Probabilistic Safety Assessment and Management conference (PSAM-12) (USB Flash Drive), pp.12 (2014)
- 西田 明美, 大橋 泰裕, 小尾 博俊, 竹内 義高, 濱本 卓司,
「建築物の耐衝撃設計法の提案, 4; 設計事例」
第 63 回理論応用力学講演会講演論文集(USB Flash Drive), pp. 2 (2014)
- 西田 明美, 鈴木 喜雄, 山田 知典, 木野 千晶, 鶴沢 憲, 宮村 浩子, 河村 拓馬, 武宮 博, 中島 憲宏,
「原子力施設のための 3 次元仮想振動台システムの研究開発への取り組み」
RIST News, No. 54, pp.33 - 37 (2013)
- 宮地 英夫, 荒木 文明, 鈴木 喜雄,

「可視化入門」

可視化入門、pp. 1-207 (2013)

- 鈴木 喜雄、
「ITBLにおける可視化システム」
JAERI-Conf, Vol. 2004-03, pp. 52-55, (2004)
- 前山 伸也、
「ハイパフォーマンスコンピューティングの進展によるプラズマ乱流研究のブレークスルー」
RIST NEWS, Vol. 57, pp. 15-23 (2014)
- 井戸村 泰宏、
「会議報告; プラズマ数値シミュレーションに関する国際会議(ICNSP 2013)」
プラズマ・核融合学会誌、Vol. 90, No. 2, pp. 167 (2014)

<口頭発表>

- 西田 明美、
「フラジリティ評価における認識論的不確実さの評価に関する検討, 2; 建屋・地盤等に関する検討」
地震リスク評価に関するワークショップ 2015、(東京、日本、2015年3月12日)
- 西田 明美、
「建築物荷重指針・同解説(2015), 11章 衝撃荷重」
「建築物荷重指針」改定講習会、(金沢、日本、2015年3月4日)
- 松岡 清吉, 井戸村 泰宏, 佐竹 真介,
「摂動磁場印加トカマクにおける新古典トロイダル粘性の full-f ジャイロ運動論シミュレーション」
日本物理学会第70回年次大会、(東京、日本、2015年3月21日~24日)
- 鈴木 喜雄, 川上 義明, 中島 憲宏、
「原子力施設の耐震シミュレーションのV&Vに向けた観測データの取り扱い」
日本原子力学会2015年春の年会、(日立、日本、2015年3月20日~22日)
- 関 暁之, 斎藤 税, 鈴木 健太, 富島 一也, 宗像 利彦, 安嶋 拓己, 斎藤 公明, 武宮 博,
「環境モニタリング情報発信のための国際標準に基づくソフトウェア基盤の構築」日本原子力学会2015年春の年会、(日立、日本、2015年3月20日~22日)
- 西田 明美, 糸井 達哉, 高田 毅士, 古屋 治, 村松 健,
「フラジリティ評価における不確実さの定量化のための感度解析」
日本原子力学会2015年春の年会、(日立、日本、2015年3月20日~22日)
- 河村 拓馬, 井戸村 泰宏, 宮村 浩子, 武宮 博,
「粒子ベースボリュームレンダリングを利用したマルチフィジックスデータ向け可視化のための高速な粒子生成手法」
日本原子力学会2015年春の年会、(日立、日本、2015年3月20日~22日)
- 鈴木 喜雄、

- 「原子力施設の耐震シミュレーションのV&Vに向けた観測データの取り扱い；観測された加速度データの計測誤差の検討」
HPCI 戦略プログラム分野4 次世代ものづくり；第2回統合ワークショップ、(東京、日本、2015年3月11日)
- 河合 智賀，前山 伸也，井戸村 泰宏，小川 雄一，
「電子乱流スペクトルのジャイロ運動論シミュレーション」
第18回若手科学者によるプラズマ研究会、(那珂、日本、2015年3月4日～6日)
 - Miki Kazuhiro, Idomura Yasuhiro,
“Gyrokinetic simulation on the energetic-particle-induced geodesic acoustic mode”,
第4回IFERC-CSC研究会、(東京、日本、2015年2月19日～20日)
 - 前山 伸也
「「京」を用いたマルチスケール核融合プラズマ乱流シミュレーション」
第26回CCSEワークショップ、(柏、日本、2015年2月26日)
 - 井戸村 泰宏
「GT5DISOプロジェクトの研究成果」
第4回IFERC-CSC研究会、(東京、日本、2015年2月19日～20日)
 - 前山 伸也，渡邊 智彦，井戸村 泰宏，仲田 資季，矢木 雅敏，宮戸 直亮，沼波 政倫，石澤 明宏，
「有限ベータ値プラズマにおける電子/イオン系乱流」
第4回IFERC-CSC研究会、(東京、日本、2015年2月19日～20日)
 - 西田 明美，
「建築物の耐衝撃設計を考える，8章 設計事例」
講習会「建築物の耐衝撃設計を考える」、(東京、日本、2015年1月19日)
 - 河村 拓馬，宮村 浩子，井戸村 泰宏，武宮 博，
「粒子ベースボリュームレンダリングを利用した遠隔可視化システムにおける多変量データ向け粒子生成処理の高速化」、
第27回計算力学講演会、(岩手、日本、2014年11月22日～24日)
 - 宮村 浩子，河村 拓馬，鈴木 喜雄，井戸村 泰宏，武宮 博，
「大規模科学的データ解析のための情報可視化」、
第27回計算力学講演会、(岩手、日本、2014年11月22日～24日)
 - Idomura Yasuhiro,
“Isotope effects in ion temperature gradient driven turbulence”,
Plasma Conference 2014 (PLASMA 2014), (Niigata, Japan, November 18-21, 2014)
 - Kawai Chika, Maeyama Shinya, Idomura Yasuhiro, Ogawa Yuichi,
“Gyrokinetic simulation of electron turbulence spectrum”,
Plasma Conference 2014 (PLASMA 2014), (Niigata, Japan, November 18-21, 2014)
 - Maeyama Shinya,
“Multi-scale simulations of electron- and ion-scale turbulence in magnetic fusion plasma”,

- Plasma Conference 2014 (PLASMA 2014), (Niigata, Japan, November 18-21, 2014)
- Maeyama Shinya, Watanabe Tomohiko, Idomura Yasuhiro, Nakata Motoki, Yagi Masatoshi, Miyato Naoaki, Nunami Masanori, Ishizawa Akihiro,
 “Multi-scale interactions between electron- and ion-scale turbulence and their effects on turbulent transport” ,
 Plasma Conference 2014 (PLASMA 2014), (Niigata, Japan, November 18-21, 2014)
 - 三木 一弘, 井戸村 泰宏,
 「ジャイロ運動論シミュレーションによる高速粒子駆動測地線音響モードの研究」、
 Plasma Conference 2014 (PLASMA 2014), (Niigata, Japan, November 18-21, 2014)
 - Miki Kazuhiro, Idomura Yasuhiro,
 “Gyrokinetic simulation study on the energetic-particle-induced geodesic acoustic mode” , 24th International Toki Conference, (Toki, Japan, November 4-7, 2014)
 - 西田 明美,
 「組立構造解析手法にもとづく原子力プラントの耐震シミュレーション」
 日本建築学会近畿支部第 58 回構造力学コロキウム、(大阪、日本、2014 年 10 月 3 日)
 - Matsuoka Seikichi, Idomura Yasuhiro, Satake Shinsuke,
 “Full-f gyrokinetic simulations for neoclassical toroidal viscosity in a perturbed tokamak configuration” ,
 56th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, (New Orleans, USA, October 27-31, 2014)
 - Miki Kazuhiro, Idomura Yasuhiro,
 “Gyrokinetic simulation studies on the energetic-particle-induced geodesic acoustic mode” ,
 56th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, (New Orleans, USA, October 27-31, 2014)
 - 五十嵐 さやか, 坂本 成弘, 西田 明美, 村松 健, 高田 毅士,
 「震源特性の不確定性を考慮した地震波群による構造物の応答」
 第 21 回信頼性設計技術ワークショップ&第 34 回最適設計研究会、(東京、日本、2014 年 9 月 18 日～20 日)
 - 高田 毅士, 西田 明美, 五十嵐 さやか, 坂本 成弘, 村松 健,
 「ハザード適合地震波の作成方法の違いによる地震波特性の比較」
 日本建築学 2014 年度会大会(近畿)、(神戸、日本、2014 年 9 月 12 日～14 日)
 - 坂本 成弘, 五十嵐 さやか, 西田 明美, 村松 健, 高田 毅士,
 「ハザード適合地震波による建物応答解析その 1:地震波強さ指標と建物フラジリティ評価」
 日本建築学 2014 年度会大会(近畿)、(神戸、日本、2014 年 9 月 12 日～14 日)
 - 五十嵐 さやか, 坂本 成弘, 高田 毅士, 西田 明美, 村松 健,
 「ハザード適合地震波による一般構造物の応答解析 その 2:地震波および構造特性による建物応答のばらつき性状」
 日本建築学 2014 年度会大会(近畿)、(神戸、日本、2014 年 9 月 12 日～14 日)

- ・ 村松 健, 内山 智曜, 牟田 仁, 西田 明美,
「リスクマネジメント基盤技術としての地震リスク評価の信頼度向上に関する研究, 6; コード開発と試解析」
原子力学会 2014 年秋の大会 (京都、日本、2014 年 9 月 8-10 日)
- ・ 西田 明美, 高田 毅士, 村松 健,
「リスクマネジメント基盤技術としての地震リスク評価の信頼度向上に関する研究、(その 8) 建屋・地盤の感度検討」
原子力学会 2014 年秋の大会 (京都、日本、2014 年 9 月 8-10 日)
- ・ 河村 拓馬, 宮村 (中村) 浩子, 井戸村 泰宏, 今村 俊幸, 武宮 博,
「粒子ベースボリュームレンダリングによる京における大規模計算データの遠隔可視化」
原子力学会 2014 年秋の大会 (京都、日本、2014 年 9 月 8-10 日)
- ・ 西田 明美, 村松 健, 高田 毅士,
「ハザード適合地震波による原子力施設建屋・機器の 3 次元地震応答解析」,
日本建築学会 2014 年度大会 (神戸、日本、2014 年 9 月 12-14 日)
- ・ Idomura Yasuhiro,
“Interactions between neoclassical effects and turbulence in toroidal momentum transport, and comparison between flux driven and gradient driven simulations”,
The 19th Joint EU-US Transport Task Force Meeting, (Culham, UK, September 8-11, 2014)
- ・ Maeyama Shinya,
“Multi-scale plasma turbulence simulations based on electromagnetic gyrokinetics”,
2014 Smoky Mountains Computational Sciences and Engineering Conference and U.S./Japan Exascale Applications Workshop, (Gatlinburg, USA, September 5-6, 2014)
- ・ Idomura Yasuhiro,
“Extreme scale fusion plasma simulations for ITER”,
Japan/United States Exascale Applications Workshop, (Gatlinburg, USA, September 5-6, 2014)
- ・ 河合 智賀, 前山 伸也, 井戸村 泰宏, 小川 雄一,
「電子乱流スペクトルのジャイロ運動論的シミュレーション」
2014 年度第 53 回プラズマ若手夏の学校、(下呂、日本、2014 年 9 月 2 日~5 日)
- ・ 前山 伸也, 渡邊 智彦, 井戸村 泰宏, 仲田 資季, 矢木 雅敏, 宮戸 直亮, 沼波 政倫, 石澤 明宏,
「ITG 乱流と ETG 乱流のマルチスケール相互作用」
平成 26 年度 閉じ込め・輸送研究会「高自律燃焼プラズマ中の輸送の理解に向けたトロイダルプラズマにおける閉じ込め・輸送の体系的研究」核融合エネルギーフォーラム「閉じ込め・輸送」サブクラスター会合 (土岐、日本、2014 年 7 月 17 日~18 日)
- ・ 井戸村 泰宏,
「イオン温度勾配駆動乱流の装置サイズ・加熱パワー・同位体依存性」
平成 26 年度 閉じ込め・輸送研究会「高自律燃焼プラズマ中の輸送の理解に向けたトロイダルプラズマにおける閉じ込め・輸送の体系的研究」核融合エネルギーフォーラム「閉じ込め・輸送」サブクラスター会合 (土岐、日本、2014 年 7 月 17 日~18 日)

- 三木 一弘, 井戸村 泰宏,
「EGAM のジャイロ運動論シミュレーション」
平成 26 年度 閉じ込め・輸送研究会「高自律燃焼プラズマ中の輸送の理解に向けたトロイダルプラズマにおける閉じ込め・輸送の体系的研究」核融合エネルギーフォーラム「閉じ込め・輸送」サブクラスター会合（土岐、日本、2014 年 7 月 17 日～18 日）
- 河村 拓馬、宮村（中村）浩子、井戸村 泰宏、武宮 博、
「粒子ベースボリュームレンダリングを利用したスーパーコンピュータ上の大規模可視化技術」、
第 46 回流体力学講演会/第 32 回航空宇宙数値シミュレーション 技術シンポジウム(弘前、日本、2014 年 7 月 3 日～4 日)
- Muramatsu Ken, Takada Tsuyoshi, Nishida Akemi, Uchiyama Tomoaki, Muta Hitoshi, Furuya Osamu, Fujimoto Shigeru, Itoi Tatsuya,
“Study on Next Generation Seismic PRA Methodology, 1; Program Plan and Proposal of New Mathematical Framework” ,
The 12th Probabilistic Safety Assessment and Management Conference, (Hawaii, USA, June 22-27, 2014)
- Seki Akiyuki, Saito Osamu, Nago Harutaka, Suzuki Kenta, Tomishima Katsuya, Saito Kimiaki, Takemiya Hiroshi,
“Development of Radionuclide Distribution Database System on Fukushima Nuclear Accident” ,
Fourth European IRPA Congress (Geneva, Switzerland, June 23-27, 2014)
- 前山 伸也, 渡邊 智彦, 井戸村 泰宏, 仲田 資季, 矢木 雅敏, 宮戸 直亮, 沼波 政倫, 石澤 明宏,
「電子/イオン系マルチスケール乱流シミュレーションによる電子熱輸送解析」
第 10 回核融合エネルギー連合講演会、(つくば、日本、2014 年 6 月 19 日～20 日)
- 前山 伸也,
「プラズマ乱流のマルチスケールシミュレーション研究」
第 10 回核融合エネルギー連合講演会、(つくば、日本、2014 年 6 月 19 日～20 日)
- 河村 拓馬、宮村（中村）浩子、井戸村 泰宏、武宮 博、
「大規模並列計算機に対する粒子ベースボリュームレンダリングを利用したクライアント・サーバ型遠隔可視化システムの構築」、
第 19 回計算工学講演会（広島、日本、2014 年 6 月 11～13 日）
- 河村 拓馬、宮村（中村）浩子、井戸村 泰宏、武宮 博、
「粒子ベースボリュームレンダリングによる大規模データの可視化技術」、
第 58 回システム制御情報学会研究発表講演会 (SCI' 14) (京都、日本、2014 年 5 月 21～23 日)
- Idomura Yasuhiro,
“Extreme scale fusion plasma simulations for ITER” ,
Extreme Performance Computational Science French-Japanese Conference, (Tokyo, Japan, April 14-15, 2014)

【シミュレーション技術開発室】

<査読無し論文>

- 中村 博樹, 奥村 雅彦, 町田 昌彦,
「セシウム高選択性吸着材ゼオライトに対する数値シミュレーション研究の進展:第一原理計算及びモンテカルロ法による吸着性能評価」
RIST News、Vol. 58, pp.33-46 (2015)
- 奥村 雅彦, 中村 博樹, 町田 昌彦,
「粘土鉱物へのセシウム吸着機構解明(2)第一原理計算による原子・分子レベルの吸着挙動解析」
日本原子力学会誌、Vol. 56, No. 6, pp.372-377 (2014)
- 海老原 健一, 蕪木 英雄, 板倉 充洋,
「水素脆化モデル構築のための原子及び連続体手法による粒界面上微小き裂近傍の応力分布の考察」
CAMP-ISIJ 「水素脆化の解析と評価」フォーラム「鋼の機械的特性に及ぼす水素の効果とその評価」シンポジウム予稿集、pp.1-6
- 山田 進, 清水 大志, 今井 隆太, 君塚 肇, 加治 芳之, 蕪木 英雄,
「並列数値計算ライブラリ「PARCEL」; 構造解析計算による性能評価」
計算工学講演会論文集, Vol. 6, pp.233-236 (2001)
- 海老原 健一, 蕪木 英雄, 高井 健一,
「水素熱脱離解析におけるデトラップ速度定数の算出に対する試料サイズの影響; 数値シミュレーションによる考察」
材料とプロセス(CD-ROM), Vol. 27, No.1, pp. 418 (2014)

<口頭発表>

- Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko, Kerisit S.,
“Adsorption Properties of Cesium Ions to Micaceous Clay Minerals”,
249th American Chemical Society National Meeting & Exposition, (Denver, USA, March 22-26, 2015)
- 太田 幸宏, 町田 昌彦,
「1次元超伝導ワイヤーにおける運動インダクタンスと位相すべり」,
日本物理学会第70回年次大会、(東京、日本、2015年3月21日～24日)
- 小林 恵太, 太田 幸宏, 山田 進, 町田 昌彦,
「準周期ポテンシャル中の2軌道SU(N)冷却フェルミ原子気体に対するDMRG解析」,
日本物理学会第70回年次大会、(東京、日本、2015年3月21日～24日)
- 永井 佑紀,
「準古典Eilenberger理論による非従来型超伝導体の理論的研究」,
日本物理学会第70回年次大会、(東京、日本、2015年3月21日～24日)
- 永井 佑紀,
「ポイントノードを持つトポロジカル超伝導体の不純物効果とゼーマン軌道磁場」,

- 日本物理学会第70回年次大会、(東京、日本、2015年3月21日～24日)
- 山口 正剛, 板倉 充洋, 志賀 基之, 蕪木 英雄, 阿部 英司,
「LPSO 構造における一般化積層欠陥エネルギー」,
日本金属学会 2015 年春期(第 156 回)講演大会、(東京、日本、2015 年 3 月 18 日～20 日)
 - 板倉 充洋, 蕪木 英雄, 山口 正剛,
「鉄のらせん転位芯の第一原理計算」,
日本金属学会 2015 年春期(第 156 回)講演大会、(東京、日本、2015 年 3 月 18 日～20 日)
 - 山口 正剛,
「粒界破壊における破壊力学試験と第一原理計算の接点」,
日本原子力学会 2015 年春の年会、(日立、日本、2015 年 3 月 20 日～22 日)
 - 中村 博樹, 奥村 雅彦, 小林 恵太, 町田 昌彦,
「モンテカルロシミュレーションによる吸着剤の Sr 選択性の評価」,
日本原子力学会 2015 年春の年会、(日立、日本、2015 年 3 月 20 日～22 日)
 - 岩澤 譲, 阿部 豊, 金子 暁子, 金川 哲也, 齋藤 慎平, 松尾 英治, 海老原 健一, 坂場 弘, 小山 和也, 成合 英樹,
「高速増殖炉の炉心熔融事故後冷却挙動の研究(27)液中ジェットブレイクアップ挙動に及ぼす粘性の影響の格子ボルツマン法による数値的考察」,
日本原子力学会 2015 年春の年会、(日立、日本、2015 年 3 月 20 日～22 日)
 - 太田 幸宏, 町田 昌彦,
「固有ジョセフソン接合系におけるテラヘルツ発振の接合数依存マルチスケールシミュレーション」,
非線形現象の数値シミュレーションと解析 2015、(札幌、日本、2015 年 3 月 10 日～11 日)
 - 佐々 成正,
「ポアンカレ不変量と運動量保存則」,
日本応用数理学会、(東京、日本、2015 年 3 月 6 日～7 日)
 - Ota Yukihiro, Nagai Yuki, Machida Masahiko,
“Sensitivity of a 3D fully-gapped topological superconductor to non-magnetic impurities” ,
APS March Meeting 2015, (San Antonio, USA, March 2-6, 2015)
 - Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Machida Masahiko,
“Nonmagnetic impurity effects in a superconducting topological insulator” ,
APS March Meeting 2015, (San Antonio, USA, March 2-6, 2015)
 - 海老原 健一、
「水素昇温脱離解析に関する数値シミュレーション」,
JFE テクノリサーチ株式会社における講演、(川崎、日本、2015 年 2 月 9 日)
 - 小林 恵太, 太田 幸宏, 山田 進, 町田 昌彦,
「準周期ポテンシャル中の 2 軌道 SU(N) 冷却中性原子気体における秩序状態」,
量子多体系研究の新しい潮流、(京都、日本、2014 年 12 月 15 日～17 日)
 - 志賀 基之,
「第一原理シミュレーションの階層的並列化」,

- 第五回 CMSI 研究会、(仙台、日本、2014年12月8日～10日)
- Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Machida Masahiko,
“From p - to s -wave behaviors in topological superconductors” ,
Yukawa International Seminar 2014 (YKIS 2014); Nonequilibrium Phenomena in Novel Quantum States, (Kyoto, Japan, December 3-5, 2014)
 - Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo, Yamaguchi Masatake, Tsuru Tomohito,
“Morphology of Pyramidal Screw Dislocations in Mg” ,
Materials Research Society 2014 Fall Meeting, (Boston, U. S. A., November 30-December 5, 2014)
 - Ota Yukihiro, Machida Masahiko, Koyama Tomio, Matsumoto Hideki,,
“Numerical simulations of terahertz emission from intrinsic Josephson junctions with variation of the number of junctions” ,
THz-plasma2014, (Kyoto, Japan, November 30-December 3, 2014)
 - Nagai Yuki, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“Spin-polarized Majorana Quasiparticle Bound States in Topological Superconductors” ,
27th International Symposium on Superconductivity (ISS 2014), (Tokyo, Japan, November 25-27, 2014)
 - Ota Yukihiro, Nagai Yuki, Machida Masahiko,
“Theory of low-energy behaviors in topological s -wave pairing superconductors” ,
27th International Symposium on Superconductivity (ISS 2014), (Tokyo, Japan, November 25-27, 2014)
 - 志賀 基之、
「交換対称性理論に基づく QM/MM 分子動力学法と水溶液への適用」
第 28 回分子シミュレーション討論会、(仙台、日本、2014年11月12日～14日)
 - Shiga Motoyuki,
“Boundary based on exchange symmetry theory: A QM/MM method with open systems” ,
Nose 30 Symposium, (Tokyo, Japan, November 10-11, 2014)
 - Suzudo Tomoaki, Hasegawa Akira,
“Migration of rhenium and osmium in tungsten” ,
ICTP-IAEA Conference on Models and Data for Plasma-Material Interaction in Fusion Devices, (Trieste, Italy, November 3-7, 2014)
 - Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake,
“Grain boundary segregation of helium in bcc transition metals” ,
ICTP-IAEA Conference on Models and Data for Plasma-Material Interaction in Fusion Devices, (Trieste, Italy, November 3-7, 2014)
 - Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo, Yamaguchi Masatake,
“First-principles calculation of screw dislocation core in bcc iron” ,
The 4th International Symposium on Steel Science, (Kyoto, Japan, November 3-6, 2014)
 - 佐々 成正,

- 「陽的および陰的シンプレクティック数値積分法における運動量保存則」、
九州大学応用力学研究所平成 26 年度共同利用研究集会「非線形波動研究の現状；課題と展望を探る」、(春日、日本、2014 年 10 月 30 日～11 月 1 日)
- Nagai Yuki, Ota Yukihiro, Machida Masahiko,
“From p - to s -wave behaviors in topological superconductors with non-magnetic impurities”,
Workshop on Probing and Understanding Exotic Superconductors (EXS 2014), (Trieste, Italy, October 27-31, 2014)
 - Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“A First-principles study on heat capacity of actinide dioxides”,
Nuclear Materials Conference 2014 (NuMat 2014), (Clearwater, U. S. A., October 27-30, 2014)
 - Ebihara Kenichi, Suzudo Tomoaki, Yamaguchi Masatake, Nishiyama Yutaka,
“Simulation for temperature dependence of irradiation-induced grain-boundary phosphorus segregation using first-principles-based rate theory model”,
Nuclear Materials Conference 2014 (NuMat 2014), (Clearwater, U. S. A., October 27-30, 2014)
 - 海老原 健一、
「鉄鋼材料の水素熱脱離解析に関する数値シミュレーション」
軽金属学会「アルミニウム中の水素研究部会」第二回力学特性 WG 研究会、(東京、日本、2014 年 10 月 14 日)
 - Yamaguchi Masatake, Itakura Mitsuhiro, Kaburaki Hideo, Shiga Motoyuki,
“Reduction of Peierls Stress of LPSO Structure under Uniaxial Compression: First-principles Calculations”,
LPSO2014, (Kumamoto, Japan, October 5-8, 2014)
 - 鈴木 知明, 山口 正剛, 長谷川 晃,
「W 中の Re および Os の拡散；第一原理計算による検討」
日本金属学会 2014 年秋期講演大会、(名古屋、日本、2014 年 9 月 24 日～26 日)
 - 山口 正剛, 亀田 純, 海老原 健一, 板倉 充洋,
「モバイル水素による低速微視亀裂進展：第一原理計算」
日本鉄鋼協会第 168 回秋季講演大会、(名古屋、日本、2014 年 9 月 24 日～26 日)
 - 板倉 充洋, 蕪木 英雄, 山口 正剛, 都留 智仁,
「マグネシウム<c+a>らせん転位の第一原理計算」
日本金属学会 2014 年秋期講演大会、(名古屋、日本、2014 年 9 月 24 日～26 日)
 - 板倉 充洋, 蕪木 英雄, 山口 正剛,
「BCC 鉄らせん転位の第一原理計算」
「鉄鋼材料の組織と延性破壊」研究会報告会、(名古屋、日本、2014 年 9 月 24 日)
 - 志賀 基之,
「最尤経路に基づくレア・イベント解析」
第 8 回分子科学討論会、(東広島、日本、2014 年 9 月 21 日～24 日)

- ・ 奥村 雅彦, 中村 博樹, 町田 昌彦,
「風化した雲母類粘土鉱物におけるセシウム吸着の第一原理計算による解析」
2014 年度日本地球化学学会年会、(富山、日本、2014 年 9 月 16 日～18 日)
- ・ Malins A., Okumura Masahiko, Machida Masahiko, Saito Kimiaki,
“Quantifying the effect of land topography on air radiation dose rates using Monte Carlo radiation transport modeling”,
2014 年度日本地球化学学会年会、(富山、日本、2014 年 9 月 16 日～18 日)
- ・ 中村 博樹, 奥村 雅彦, 町田 昌彦,
「3D-RISM 法を用いたゼオライトの Cs 吸着性能の評価」
日本原子力学会 2014 年秋の大会、(京都、日本、2014 年 9 月 8 日～10 日)
- ・ 山田 進, 北村 哲浩, 操上 広志, 板倉 充洋, 奥村 雅彦, 町田 昌彦,
「2 次元河川シミュレーションによる大柿ダム内の放射性物質が付着した土砂の移動予測」
日本原子力学会 2014 年秋の大会、(京都、日本、2014 年 9 月 8 日～10 日)
- ・ 小林 恵太, 中村 博樹, 町田 昌彦,
「溶媒効果を取り入れた第一原理計算によるチタン酸塩におけるストロンチウム吸着」
日本原子力学会 2014 年秋の大会、(京都、日本、2014 年 9 月 8 日～10 日)
- ・ 奥村 雅彦, 中村 博樹, 町田 昌彦,
「数値シミュレーション手法による粘土鉱物の固液分配係数の評価」
日本原子力学会 2014 年秋の大会、(京都、日本、2014 年 9 月 8 日～10 日)
- ・ 太田 幸宏, 町田 昌彦, 小山 富男, 松本 秀樹,
「3 次元マルチスケールシミュレーションによるテラヘルツ発振特性の解析」
日本物理学会 2014 年秋季大会(物性)、(春日井、日本、2014 年 9 月 7 日～10 日)
- ・ 永井 佑紀, 篠原 康, 二村 保徳, 太田 幸宏, 櫻井 鉄也,
「Sakurai-Sugiura 法による実空間 Bogoliubov-de Gennes 方程式の高速数値解法」
日本物理学会 2014 年秋季大会(物性)、(春日井、日本、2014 年 9 月 7 日～10 日)
- ・ 永井 佑紀, 太田 幸宏, 町田 昌彦,
「三次元トポロジカル超伝導体における不純物効果:相対論的効果とアンダーソンの定理解」
日本物理学会 2014 年秋季大会(物性)、(春日井、日本、2014 年 9 月 7 日～10 日)
- ・ 佐々 成正,
「陰的シンプレクティック法における運動量保存則」
日本応用数理学会 2014 年度年会、(東京、日本、2014 年 9 月 3 日～5 日)
- ・ Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“First-principles studies of cesium adsorption to frayed edge sites of micaceous clay minerals”,
248th ACS National Meeting & Exposition, (San Francisco, US, August 10-14, 2014)
- ・ 鈴木 知明, 永井 康介,
「スピノーダル分解による Fe-Cr 系の硬化-分子動力学法による解析」
東北大学金属材料研究所 2014 年ワークショップ「照射材料研究、原子力材料研究のこれ

- から」、(仙台、日本、2014年7月31日～8月1日)
- 志賀 基之,
「QM/MM 分子動力学法における境界問題」
第 353 回 CBI 学会研究講演会、(東京、日本、2014 年 7 月 29 日)
 - Shiga Motoyuki,
“Ab initio path integral simulations of floppy molecular systems” ,
Telluride Science Research Center Workshop: Spectroscopy and Dynamics of Coupled Anharmonic Vibrations of Floppy Molecular Systems, (July 14-18, 2014, Telluride, U. S. A.)
 - 永井 佑紀, 太田 幸宏, 町田 昌彦,
「三次元トポロジカル超伝導体における準粒子励起」
第 22 回渦糸物理国内会議、(富良野、日本、2014 年 7 月 10 日～12 日)
 - Yamaguchi Masatake, Kameda Jun, ,
“Multiscale Analysis of Hydrogen-Induced Intergranular Cracking in Medium Strength Alloys Steel with Segregated Solute” ,
International Workshop on Environmental Damage under Static and Cyclic Loads in Structural Metallic Materials at Ambient Temperatures III, (Bergamo, Italy, June 15-20, 2014)
 - Shiga Motoyuki,
“Ab initio path integral simulations of hydrogen bonded systems” ,
East Asian Conference on Chemical Dynamics, (Busan, Korea, May 19-21, 2014)
 - Okumura Masahiko, Nakamura Hiroki, Machida Masahiko,
“First-principles study of cesium adsorption to weathered micaceous clay minerals” ,
European Geosciences Union General Assembly 2014, (Vienna, Austria, April 27-May 02, 2014)
 - Yamada Susumu, Itakura Mitsuhiro, Okumura Masahiko, Machida Masahiko, Kitamura Akihiro,
“Numerical Studies of Radioactive Sediment Deposition on Reservoirs in Fukushima Coastal Area” ,
European Geosciences Union General Assembly 2014, (Vienna, Austria, April 27-May 02, 2014)
 - 永井 佑紀, 太田 幸宏, 町田 昌彦,
「トポロジカル超伝導体における準粒子励起」
物性研短期研究会「スーパーマターが拓く新量子現象」(柏、日本、2014 年 4 月 17 日～19 日)

3. 技術雑誌・研究報告書・技術報告書等での発表

- システム計算科学センター
「平成 25 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 2014-043 (2015)

4. メディアへの情報発信及び新聞報道等

- ・ 2014年6月20日
“トポロジカル超伝導体の渦糸に出現 スピン偏極マヨナラ粒子解明”
(科学新聞に掲載)
- ・ 2014年8月5日(8月7日にプレス向け説明会を開催)
“福島県内の路線バスによるモニタリングの増強について～「KURAMA-II」搭載車両を県全域へ拡大、リアルタイムで表示～”
(福島テレビで放映、福島民友、福島民報に掲載)

5. 研究発表会等の開催

- ・ 第15回原子力計算科学セミナー(H26年6月30日)
「計測技術と計算科学」
- ・ 第16回原子力計算科学セミナー(H26年8月7日)
「大規模解析技術とV&V」
- ・ 第17回原子力計算科学セミナー(H26年11月11日)
「耐震解析技術と計算科学、そして新社会モデル」
- ・ 第26回CCSEワークショップ(H26年2月26日)
「複雑現象シミュレーション技術の最前線」
- ・ シミュレーション技術開発室セミナー
H26年10月22日: Sergi Ruiz Barragan (自然科学研究機構 理論・計算分子科学領域)
「Modelling of potential energy surfaces for photochemistry:
Conical intersections and application to optical control」
H27年2月27日: 掛谷 一弘 (京都大学 工学部 電気電子工学科)
「固有ジョセフソンテラヘルツ光源の高強度化と高機能化に向けて」
柏木 隆成 (筑波大学 数理物質系 物質工学域)
「高温超伝導体 Bi2212THz 発振素子の高周波・高出力化に向けた取り組み」
小山 富男 (東北大学 金属材料研究所)
「固有ジョセフソン接合の第2スイッチにおけるMQT理論」

6. 受賞等

- ・ 第10回核融合エネルギー連合講演会 若手優秀発表賞
前山 伸也、渡邊 智彦、井戸村 泰宏、仲田 資季、矢木 雅敏、宮戸 直亮、沼波 政倫、石澤 明宏
「電子/イオン系マルチスケール乱流シミュレーションによる電子熱輸送解析」
(プラズマ核融合学会第10回核融合エネルギー連合講演会、平成26年6月)
- ・ 可視化情報学会 学会賞(技術賞)
坂本 尚久、前田 直哉、河村 拓馬、小山田 耕二

「High-quality particle-based volume rendering for large-scale unstructured volume datasets」

(可視化情報学会、平成 26 年 7 月)

- ・ プラズマ若手夏の学校 学生ポスター賞<特別研究生の受賞>

河合 智賀、前山 伸也、井戸村 泰宏、小川 雄一

「電子乱流スペクトルのジャイロ運動論的シミュレーション」

(プラズマ・核融合学会プラズマ若手夏の学校、平成 26 年 9 月)

- ・ HPCI 利用優秀課題賞

井戸村 泰宏、渡邊 智彦、町田 昌彦、山田 進、河村 拓馬、今村 俊幸、仲田 資季、前山 伸也、石澤 明宏、沼波 政倫

「核融合プラズマの乱流シミュレーション」

(第 1 回 HPCI 成果報告会、平成 26 年 10 月)

- ・ PLASMA2014 若手優秀発表賞

S. Maeyama, T.-H. Watanabe, Y. Idomura, M. Nakata, M. Yagi, N. Miyato, M. Nunami, A. Ishizawa

「Multi-scale interactions between electron- and ion-scale turbulence and their effects on turbulent transport」

(Plasma Conference 2014、平成 26 年 11 月)

- ・ 平成 26 年度日本原子力学会計算科学技術部会 部会奨励賞

河村 拓馬

(日本原子力学会計算科学技術部会、平成 27 年 3 月)

- ・ 第 9 回(2015 年)日本物理学会若手奨励賞

永井 佑紀

(日本物理学会、平成 27 年 3 月)

7. 特許等の状況

- (1)特許の出願及び登録

なし。

- (2)成果の活用(利用許諾)による収入

件名(成果の内容)	契約先(販売者)	権利/契約種別	今年度収入額
並列分子動力学ステンシル 他 2 件	株式会社 JSOL	プログラム著作権 /利用許諾	2,431,027 円

8. 外部資金の獲得に関連する事項

室	予算額(千円)(件数)
高度計算機技術開発室	49,268 (6)
シミュレーション技術開発室	16,898 (11)

【高度計算機技術開発室】

- (1) 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発(次世代ス

- ーパソコンコンピュータ戦略プログラム) 30,850 千円
- (2) リスクマネジメント基盤技術としての地震リスク評価の信頼度向上に関する研究(分担課題:モデルプラント建屋・地盤応答解析による情報提供)(科学技術振興機構) 10,277 千円
- (3) 広域線量分布測定用装置(KURAMA-II)データ解析・補正委託業務(福島県) 5,931 千円
- (4) ポイントベース統合モデリング・レンダリング(日本学術振興会:科研費(若手B)) 780 千円
- (5) ペタスケール乱流シミュレーションによる異常輸送の同位体効果に関する研究(日本学術振興会:科研費(基盤C)) 780 千円
- (6) マルチスケールプラズマ乱流におけるマイクロメゾスケール渦の形成・消失過程の解明(日本学術振興会:科研費(若手B)) 650 千円
- 【シミュレーション技術開発室】**
- (7) 京都大学構造材料元素戦略研究拠点(金属材料中の水素の状態と挙動に関するシミュレーション)(京都大学) 1,040 千円
- (8) 「界面」を通じた材料研究の統合～基礎・学理からの挑戦～(科学技術振興機構) 5,175 千円
- (9) 構造用六方晶金属の機械的性質における計算科学的研究(自動車メーカー) 3,240 千円
- (10) 転位バイアス因子の理論的解明(日本学術振興会:科研費(基盤C)) 780 千円
- (11) 百万画素サブミクロン分解能中性子ラジオグラフィのための固体超伝導検出器システム(日本学術振興会:科研費(基盤S)) 780 千円
- (12) フェルミ面トポロジーが生み出す非従来型超伝導の最適化に関する理論研究(日本学術振興会:科研費(基盤B)) 1,430 千円
- (13) 第一原理に基づく計算科学によるLPSO構造の電子論と構造科学の構築(日本学術振興会:科研費(新学術領域)) 1,950 千円
- (14) マルチバンド超伝導体に対する擬ポテンシャルを用いた次元縮約有効理論の構築と応用(日本学術振興会:科研費(若手B)) 1,560 千円
- (15) 水素結合型強誘電体における同位元素効果の分子論的起源(日本学術振興会:科研費(挑戦的萌芽研究)) 195 千円
- (16) 異常な電子-格子相互作用のモデルフリー観測の試み(日本学術振興会:科研費(基盤C)) 98 千円
- (17) 水素分配制御によるアルミニウム合金の力学特性最適化(科学技術振興機構) 650 千円

9. 産学官との連携に関連する事項

室	共同研究	委託研究	受託研究	研究協定
高度計算機技術開発室	8	0	3	0
シミュレーション技術開発室	4	0	2	0
両室共通	0	0	0	1
合計	12	0	5	1

●共同研究

【高度計算機技術開発室】

- ・ 核融合シミュレーションにおける大容量データ処理技術に関する研究（大学共同利用機関法人 自然科学研究機構 核融合科学研究所）
- ・ 原子力施設の地震リスク評価手法の高度化に関する研究（東京都市大学、東京大学、シー・エス・エー・ジャパン）
- ・ 次世代スーパーコンピュータ用プラズマ解析アルゴリズムの研究開発（一般財団法人高度情報科学技術研究機構）
- ・ 運動論的プラズマシミュレーションアルゴリズムの研究開発（東京大学）
- ・ 複雑環境システムシミュレーションのための大規模連立方程式解法の高度化に関する研究（東京大学）
- ・ 環境モニタリングデータのマッピング技術の高度化（東京大学）
- ・ 次世代スーパーコンピュータ用プラズマ流体解析技術の研究（名古屋大学、自然科学研究機構核融合研究開発機構）
- ・ 原子力施設の地震リスク評価手法の高度化に関する研究（東京都市大学、東京大学、シー・エス・エー・ジャパン、大成建設）＜期中にゼネコンを加え進展＞

【シミュレーション技術開発室】

- ・ 構造用六方晶金属の機械的性質における計算科学的研究（自動車メーカー）
- ・ 計算科学の援用による選択的S r吸着材の合成に関する研究（大塚科学株式会社）
- ・ 大規模複雑人工物構造材料の劣化予測技術構築に関する研究（東京大学）
- ・ 超並列計算機シミュレーションによるトリチウム水の生体機能への影響に関する研究（自然科学研究機構分子科学研究所）

●受託研究

【高度計算機技術開発室】

- ・ 原子力施設等の大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発（次世代スーパーコンピュータ戦略プログラム）（東京大学）
- ・ リスクマネジメント基盤技術としての地震リスク評価の信頼度向上に関する研究（分担課題：モデルプラント建屋・地盤応答解析による情報提供）（科学技術振興機構）
- ・ 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）（福島技術本部受託に参加）

【シミュレーション技術開発室】

- ・ 京都大学構造材料元素戦略研究拠点（金属材料中の水素の状態と挙動に関するシミュレーション）（京都大学）
- ・ 「界面」を通じた材料研究の統合～基礎・学理からの挑戦～（科学技術振興機構）

●研究協定

- ・ 「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する事項

研究の実施にあたっては、原子力機構としての統合効果を発揮し、研究開発を効率的・効果的に推進する観点から、以下のとおり 27 件に及ぶ機構内連携を実施した。

- (1) 放射線量等測定データの収集および管理に関する技術協力
 部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）
 概要：福島第一原子力発電所事故に伴い放出された放射性物質の測定結果を収集する技術および、収集データを登録、公開するデータベースの構築技術を確立する。
- (2) 福島県空間線量率測定データの情報発信
 部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）
 概要：福島県下を走行する路線バスを活用することで得られる、地域住民に密着した空間線量率分布データを可視化し、迅速に公開する。
- (3) 土壌粘土鉱物への放射性セシウム吸着の解析
 部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）、原子力科学研究部門（量子ビーム応用研究センター）
 概要：粘土鉱物に対する吸着化学形態を量子ビームと計算科学の両面から解明する。
- (4) ゼオライトへの放射性セシウム吸着の解析
 部署：原子力科学研究部門（先端基礎研究センター、原子力基礎工学研究センター）
 概要：ゼオライトのセシウム吸着性状について計算科学の観点から評価する。
- (5) 河口及び沿岸でのセシウム長期輸送解析
 部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）、原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）、バックエンド研究開発部門（東濃地科学センター）
 概要：福島長期環境予測に資するため、河口及び沿岸での 2/3 次元のセシウム長期輸送解析システムを開発する。
- (6) 土壌有機物におけるセシウム吸着特性の評価
 部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）、原子力科学研究部門（量子ビーム応用研究センター）
 概要：有機物におけるセシウムの吸着形態や輸送特性を原子・分子レベルから評価する。
- (7) 福島第一原子力発電所港湾内放射性核種動態シミュレーション
 部署：福島研究開発部門（福島環境安全センター）
 概要：福島第一原子力発電所の港湾内の放射性核種の動態をシミュレーションにより評価する。
- (8) 損傷頻度評価
 部署：安全研究・防災支援部門安全研究センター
 概要：3次元モデルを用いる大規模耐震解析システムを活用し、建屋および機器の地震時応答解析を高精度化。
- (9) 高温工学試験炉の耐震解析に関する研究
 部署：原子力科学研究部門（大洗研究開発センター高温工学試験研究炉部）
 概要：大規模耐震解析システムやモデルデータを提供し、施設の耐震性評価を支援。
- (10) 地下構造物の振動解析に関する技術協力
 部署：バックエンド研究開発部門（東濃地科学センター）

概要：大規模振動解析システムの提供や技術協力により、地下構造物の健全性評価を支援。

(11) 施設の耐震バックチェック支援

部署：建設部

概要：耐震強度解析および評価への協力により機構内施設建家の耐震バックチェックを支援。

(12) 原子炉圧力容器鋼の高経年化対策研究(照射脆化予測)

部署：安全研究・防災支援部門安全研究センター

概要：脆化予測に必要な基礎的知見を提供するため、第一原理計算や、それに基づくレート方程式シミュレーションを実施。

(13) 応力腐食割れ、照射材料の数値シミュレーション研究

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

概要：応力腐食割れのいくつかの仮説メカニズムを検証、選択（脆化元素＝酸素 or 水素）するためシミュレーションを行う。

(14) 中性子検出器開発に関わるシミュレーション研究と実験による検証

部署：原子力科学研究部門（量子ビーム応用研究センター、J-PARC センター）

概要：実験及び開発研究を先導（設計支援を含む）するため、高精度シミュレーションを行い、データを提供する。

(15) 構造材料照射に関わる材料強度等の物性評価シミュレーション研究

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

概要：材料強度基礎パラメータの導出し提供するためモデリング及びシミュレーションを行う。

(16) Fe 中における He の拡散と結合状態に関する原子論的モデリング

部署：核融合研究開発部門

概要：核融合環境化での長期の中性子照射による材料組織変化を予測するモデルを確立。

(17) 六方晶金属の機械的性質の計算科学研究

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

概要：計算モデリングが進んでおらず、基礎的な機械的性質についてもよくわかっていない六方晶金属（燃料被覆管 Zr 合金、自動車用軽量金属）について、第一原理計算にもとづいたモデリング手法を開発する。

(18) シンクロ型 LPSO 構造の材料科学

部署：原子力科学研究部門（J-PARC センター）

概要：熊本大学で開発された LPSO（長周期積層構造）をもつマグネシウム合金の基本的な物性を解明する。

(19) 分子動力学計算と実験による MA 含有 MOX 燃料の熱物性と微視的構造の評価

部署：原子力科学研究部門（先端基礎研究センター、原子力基礎工学研究センター）、高速炉研究開発部門（次世代高速炉サイクル研究開発センター）

概要：マイナーアクチニドを含有する MOX 燃料の物性評価のため、高精度シミュレーション手法を確立し、実験結果の予測やその解釈を行う。

(20) 転位バイアス因子の理論的解明

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

概要：照射スウェリングの原因である転位バイアス因子の理論の構築。

(21) セシウムの生体内移行の検討

部署：原子力科学研究部門（量子ビーム応用研究センター）

概要：生体内での放射性セシウムの化学形態変化と動的輸送過程の解析。

(22) ストロンチウム吸着材チタン酸化合物の開発

部署：福島研究開発部門（核燃料サイクル工学研究所環境技術開発センター）

概要：ストロンチウム吸着材チタン酸化合物の開発に対し、計算科学的手法を援用し、開発を加速させる。

(23) ガラス溶融固化シミュレーション高速化

部署：バックエンド研究開発部門（核燃料サイクル工学研究所）

概要：ガラス固化プロセスの温度や流量等の運転パラメータの最適化をするために膨大な計算を効率化する。

(24) J-PARC における中性子散乱実験の結果の解析

部署：原子力科学研究部門（量子ビーム応用研究センター）

概要：鉄系高温超伝導体の超伝導発現機構の解明のために量子ビーム応用研究部門により実施された J-PARC における中性子散乱実験結果の理論解析を行う。

(25) ペタスケール核融合シミュレーションコード開発

部署：核融合研究開発部門

概要：京コンピュータ、Helios 等におけるペタスケール核融合シミュレーションを目的として超並列処理技術等の開発を実施。

(26) 燃料溶融複雑系の解析に関する技術協力

部署：原子力科学研究部門（原子力基礎工学研究センター）

概要：燃料溶融複雑系の大規模シミュレーションデータの解析作業を効率化するために高速可視化処理ツールを開発する。

(27) 地質環境解析に関する技術協力

部署：バックエンド研究開発部門（東濃地科学センター）

概要：ポリウムレンダリング可視化処理ツールを適用し、地質環境シミュレーションデータの解析作業を効率化する。

1.1. 国際協力

国際協力の一覧を以下に示す。

(1) 原子力庁（CEA）：仏国

“フランス原子力庁と日本原子力研究開発機構との原子力研究開発分野における協力に関するフレームワーク協定”（この協定中の一つのテーマとして計算科学が位置づけられている）

（2006 年度～）

(2) カリフォルニア大学バークレー校（UCB）：米国

“地層処分及び燃料サイクルに関する共同研究契約”（この共同研究の一環として、計算科学の観点から協力している）

(2008 年度～、システム計算科学センターの協力は 2011 年度～)

(3) パシフィックノースウェスト国立研究所 (PNNL) : 米国

“環境汚染の評価及び浄化に係る共同研究契約”(この共同研究の一環として、計算科学の観点から協力している)

(2011 年度～)

(4) 国際原子力機関 (IAEA)

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

(2013 年度～)

国際単位系 (SI)

表1. SI基本単位

基本量	SI基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質량	モル	mol
光度	カンデラ	cd

表2. 基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

組立量	SI組立単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m ²
体積	立方メートル	m ³
速度	メートル毎秒	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s ²
波数	毎メートル	m ⁻¹
密度, 質量密度	キログラム毎立方メートル	kg/m ³
面積密度	キログラム毎平方メートル	kg/m ²
比体積	立方メートル毎キログラム	m ³ /kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m ²
磁界の強さ	アンペア毎メートル	A/m
量濃度 ^(a) , 濃度	モル毎立方メートル	mol/m ³
質量濃度	キログラム毎立方メートル	kg/m ³
輝度	カンデラ毎平方メートル	cd/m ²
屈折率 ^(b)	(数字の)	1
比透磁率 ^(b)	(数字の)	1

(a) 量濃度 (amount concentration) は臨床化学の分野では物質濃度 (substance concentration) ともよばれる。
 (b) これらは無次元量あるいは次元1をもつ量であるが、そのことを表す単位記号である数字の1は通常は表記しない。

表3. 固有の名称と記号で表されるSI組立単位

組立量	SI組立単位			
	名称	記号	他のSI単位による表し方	SI基本単位による表し方
平面角	ラジアン ^(b)	rad	1 ^(b)	m/m
立体角	ステラジアン ^(b)	sr ^(e)	1 ^(b)	m ² /m ²
周波数	ヘルツ ^(d)	Hz		s ⁻¹
力	ニュートン	N		m kg s ⁻²
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m ²	m ⁻¹ kg s ⁻²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N m	m ² kg s ⁻²
仕事率, 工率, 放射束	ワット	W	J/s	m ² kg s ⁻³
電荷, 電気量	クーロン	C		s A
電位差 (電圧), 起電力	ボルト	V	W/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻¹
静電容量	ファラド	F	C/V	m ² kg ⁻¹ s ⁴ A ²
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻²
コンダクタンス	ジーメン	S	A/V	m ² kg ⁻¹ s ³ A ²
磁束	ウエーバ	Wb	Vs	m ² kg s ⁻² A ⁻¹
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²	kg s ⁻² A ⁻¹
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	m ² kg s ⁻² A ⁻²
セルシウス温度	セルシウス度 ^(e)	°C		K
光照射量	ルーメン	lm	cd sr ^(e)	cd
放射線量	ルクス	lx	lm/m ²	m ⁻² cd
放射性核種の放射能 ^(f)	ベクレル ^(d)	Bq		s ⁻¹
吸収線量, 比エネルギー分与, カーマ	グレイ	Gy	J/kg	m ² s ⁻²
線量当量, 周辺線量当量, 方向性線量当量, 個人線量当量	シーベルト ^(g)	Sv	J/kg	m ² s ⁻²
酸素活性化	カタール	kat		s ⁻¹ mol

(a) SI接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはやコヒーレントではない。
 (b) ラジアンとステラジアンは数字の1に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号である数字の1は明示されない。
 (c) 測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。
 (d) ヘルツは周期現象についてのみ、ベクレルは放射性核種の統計的過程についてのみ使用される。
 (e) セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。セルシウス度とケルビンの単位の大きさは同一である。したがって、温度差や温度間隔を表す数値はどちらの単位で表しても同じである。
 (f) 放射性核種の放射能 (activity referred to a radionuclide) は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。
 (g) 単位シーベルト (PV, 2002, 70, 205) についてはCIPM勧告2 (CI-2002) を参照。

表4. 単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI組立単位		
	名称	記号	SI基本単位による表し方
粘力のモーメント	パスカル秒	Pa s	m ⁻¹ kg s ⁻¹
表面張力	ニュートンメートル	N m	m ² kg s ⁻²
角速度	ニュートン毎メートル	N/m	kg s ⁻²
角加速度	ラジアン毎秒	rad/s	m m ⁻¹ s ⁻¹ = s ⁻¹
熱流密度, 放射照度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s ²	m m ⁻¹ s ⁻² = s ⁻²
熱容量, エントロピー	ワット毎平方メートル	W/m ²	kg s ⁻³
比熱容量, 比エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	m ² kg s ⁻² K ⁻¹
比エネルギー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	m ² s ⁻² K ⁻¹
熱伝導率	ジュール毎キログラム	J/kg	m ² s ⁻²
体積エネルギー	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s ⁻³ K ⁻¹
電界の強さ	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ⁻¹ kg s ⁻²
電荷密度	ジュール毎立方メートル	V/m	m kg s ⁻³ A ⁻¹
電表面電荷	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ⁻³ s A
電束密度, 電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² s A
誘電率	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ² s A
透磁率	ファラド毎メートル	F/m	m ³ kg ⁻¹ s ⁴ A ²
モルエネルギー	ヘンリー毎メートル	H/m	m kg s ⁻² A ⁻²
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル	J/mol	m ² kg s ⁻² mol ⁻¹
照射線量 (X線及びγ線)	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	m ² kg s ⁻² K ⁻¹ mol ⁻¹
吸収線量率	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ s A
放射線強度	グレイ毎秒	Gy/s	m ² s ⁻³
放射輝度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m ⁴ m ⁻² kg s ⁻³ = m ² kg s ⁻³
酵素活性濃度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	W/(m ² sr)	m ² m ⁻² kg s ⁻³ = kg s ⁻³
	カタール毎立方メートル	kat/m ³	m ³ s ⁻¹ mol

表5. SI接頭語

乗数	名称	記号	乗数	名称	記号
10 ²⁴	ヨタ	Y	10 ¹	デシ	d
10 ²¹	ゼタ	Z	10 ²	センチ	c
10 ¹⁸	エクサ	E	10 ³	ミリ	m
10 ¹⁵	ペタ	P	10 ⁶	マイクロ	μ
10 ¹²	テラ	T	10 ⁹	ナノ	n
10 ⁹	ギガ	G	10 ¹²	ピコ	p
10 ⁶	メガ	M	10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ³	キロ	k	10 ⁻¹⁸	アト	a
10 ²	ヘクト	h	10 ⁻²¹	ゼプト	z
10 ¹	デカ	da	10 ⁻²⁴	ヨクト	y

表6. SIに属さないが、SIと併用される単位

名称	記号	SI単位による値
分	min	1 min=60 s
時	h	1 h=60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86 400 s
度	°	1°=(π/180) rad
分	'	1'=(1/60)°=(π/10 800) rad
秒	"	1"=(1/60)'=(π/648 000) rad
ヘクタール	ha	1 ha=1 hm ² =10 ⁴ m ²
リットル	L, l	1 L=1 l=1 dm ³ =10 ³ cm ³ =10 ⁻³ m ³
トン	t	1 t=10 ³ kg

表7. SIに属さないが、SIと併用される単位で、SI単位で表される数値が実験的に得られるもの

名称	記号	SI単位で表される数値
電子ボルト	eV	1 eV=1.602 176 53(14)×10 ⁻¹⁹ J
ダルトン	Da	1 Da=1.660 538 86(28)×10 ⁻²⁷ kg
統一原子質量単位	u	1 u=1 Da
天文単位	ua	1 ua=1.495 978 706 91(6)×10 ¹¹ m

表8. SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

名称	記号	SI単位で表される数値
バール	bar	1 bar=0.1MPa=100 kPa=10 ⁵ Pa
水銀柱ミリメートル	mmHg	1 mmHg=133.322Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1nm=100pm=10 ⁻¹⁰ m
海里	M	1 M=1852m
バイン	b	1 b=100fm ² =(10 ¹² cm ²) ² =10 ⁻²⁸ m ²
ノット	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネーパ	Np	SI単位との数値的関係は、 対数量の定義に依存。
ベレル	B	
デシベル	dB	

表9. 固有の名称をもつCGS組立単位

名称	記号	SI単位で表される数値
エル	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J
ダイン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N
ポアズ	P	1 P=1 dyn s cm ⁻² =0.1Pa s
ストークス	St	1 St=1cm ² s ⁻¹ =10 ⁻⁴ m ² s ⁻¹
スチルブ	sb	1 sb=1cd cm ⁻² =10 ⁴ cd m ⁻²
フオト	ph	1 ph=1cd sr cm ⁻² =10 ⁴ lx
ガリ	Gal	1 Gal=1cm s ⁻² =10 ⁻² ms ⁻²
マクスウェル	Mx	1 Mx=1 G cm ² =10 ⁻⁸ Wb
ガウス	G	1 G=1Mx cm ⁻² =10 ⁻⁴ T
エルステッド ^(a)	Oe	1 Oe _e =(10 ³ /4π)A m ⁻¹

(a) 3元系のCGS単位系とSIでは直接比較できないため、等号「△」は対応関係を示すものである。

表10. SIに属さないその他の単位の例

名称	記号	SI単位で表される数値
キュリー	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq
レントゲン	R	1 R=2.58×10 ⁻⁴ C/kg
ラド	rad	1 rad=1cGy=10 ⁻² Gy
レム	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv
ガンマ	γ	1 γ=1 nT=10 ⁻⁹ T
フェルミ	f	1 フェルミ=1 fm=10 ⁻¹⁵ m
メートル系カラット		1 メートル系カラット=0.2 g=2×10 ⁻⁴ kg
トル	Torr	1 Torr=(101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm=101 325 Pa
カロリ	cal	1 cal=4.1858J (「15°C」カロリ), 4.1868J (「IT」カロリ), 4.184J (「熱化学」カロリ)
マイクロン	μ	1 μ=1μm=10 ⁻⁶ m

