

原子力研究開発における計算科学

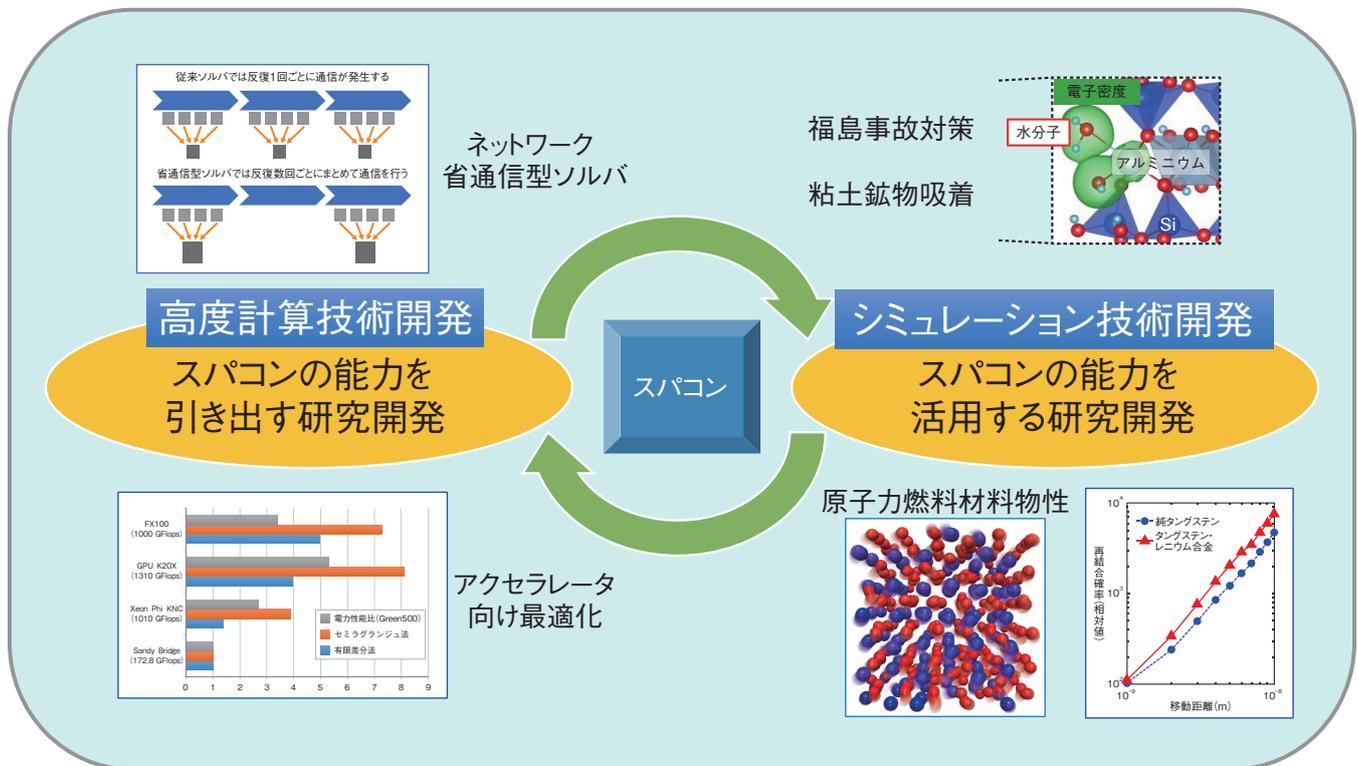


図9-1 システム計算科学センターにおける研究開発

「スパコンの能力を引き出す研究開発」と「スパコンの能力を活用する研究開発」を2本の柱として、原子力分野における計算科学を推進しています。

システム計算科学センターでは、東京電力福島第一原子力発電所事故を契機として発生した課題の解決や将来の原子力システムの研究開発に必要とされる様々な現象を解析するため、スーパーコンピュータ（スパコン）を活用した計算科学技術の研究開発を行っています（図9-1）。本誌ではその中から4件のトピックスを紹介いたします。

当センターでは、スパコンの能力を最大限引き出すための高度計算技術の開発を行っています。最先端のスパコンでは、演算装置間のネットワーク通信が計算全体の処理速度を決めるボトルネックになっていますが、その通信処理を大幅に減らす省通信型ソルバの開発に成功しました（トピックス9-1）。また、計算を高速化するアクセラレータという装置を、原子力分野の数値計算手法においても存分に活用するため、種々の計算方法に関して検討を行い、原子力流体計算コードの主要部分をアクセラレータ向けに最適化することに成功しました（トピックス9-2）。これらの成果は原子力分野だけでなく計算科学分野全体の研究開発力を底上げすることにつながります。

また、スパコンの能力を活用した研究開発を行って

います。原子力分野における燃料・材料や福島事故対策に係る放射性セシウムに関する研究に関して、第一原理計算と呼ばれる電子のレベルからそれらの特性を調べる高精度な計算手法を活用する研究を進めています。次世代の核燃料物質の一つとされる二酸化トリウムについては、第一原理計算に基づく分子動力学シミュレーションにより、高温における特異な振る舞いを明らかにしました（トピックス9-3）。また、核融合炉の内壁材料候補であるタングステン合金においては、第一原理計算に基づく格子欠陥移動シミュレーションを行い、レニウムの添加がなぜタングステンの照射耐性を向上させるかを明らかにしました（トピックス9-4）。さらに、放射性セシウムを吸着する能力の高い粘土鉱物の原因究明に関係する成果も挙げています（第1章トピックス1-19）。

その他、高度計算技術の研究開発成果に対して、2016年6月22日、理化学研究所とともに「ISC 2016 HPC in Asia Poster Award」を受賞したほか、2017年2月14日には「福島事故からの復興に向けた計算科学の取り組み」と題するワークショップを主催する等、計算科学技術を普及させるための活動もを行っています。