

原子力研究開発を支える計算科学技術

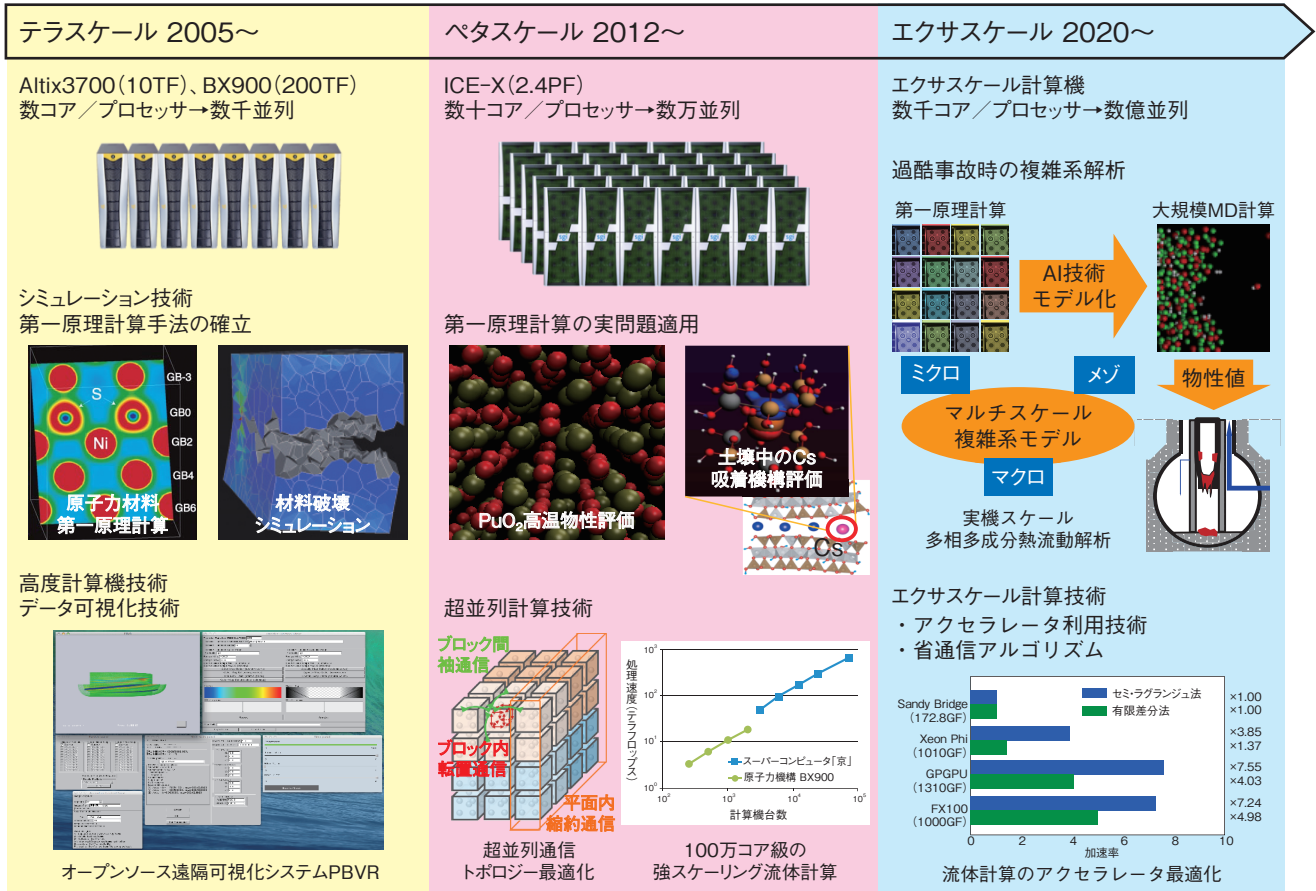


図 9-1 システム計算科学センターにおける計算科学研究

これまでに開発・蓄積してきたテラ・ペタスケール計算技術を発展させ、原子力分野における複雑系解析のためのエクサスケール計算技術開発を推進しています。

放射性物質の環境動態、汚染土壌の減容、過酷事故の解析等、東京電力福島第一原子力発電所事故を契機に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は、様々な要因が絡み合う複雑な現象の解析技術が不可欠です。例えば、過酷事故の解析では核燃料や構造材の溶融・移行過程を評価するマクロスケールの熱流動解析だけでなく、溶融物の混合による複雑な界面形成や亀裂進展等の破壊現象を評価するメゾスケールの解析、高温高压の極限環境下における元素拡散、化学反応、相変化による物性変化を評価するミクロスケールの量子計算を機械学習によって統合する新たな多スケール・多物理の解析技術が必要です。このようなシミュレーション技術に加え、将来のエクサスケール計算機の高度利用を可能とする計算機技術も必要となります。

システム計算科学センターでは、これまで複雑現象解析の基礎となる量子計算、流体計算等のシミュレーション技術及び数値計算アルゴリズム、可視化等の計算機技術を開発してきました。現在、これらの技術を発展させ、エクサスケールの複雑現象解析を可能とする新たなシミュレーション技術及び計算機技術の開発に取り組んでいます(図9-1)。このような複雑現象の解析技術は原子力研究開発全般における共通基盤技術となります。

2017年度は、福島再生・復興への計算科学技術の活用として、土壌中の粘土鉱物における様々な表面への放射性セシウム吸着機構を第一原理計算で解明しました(第1章トピックス1-18)。一方、複雑現象解析に必要な様々なミクロ・メゾスケール解析の高度化に関する成果として、(1)機械学習を用いたモンテカルロ法によって、重元素化合物等の強相関電子系の量子多体問題の高速計算を可能とした成果(トピックス9-1)、(2)原子力材料の劣化に関連して、鉄鋼材料中の粒界に不純物原子が集まる機構をキネティックモンテカルロ計算によって解明した成果(トピックス9-2)、(3)原子力材料の照射損傷に関連して、分子動力学計算に基づいて、照射損傷の修復過程を考慮した新たな材料損傷評価式を構築した成果(トピックス9-3)を紹介します。

また、将来のエクサスケール計算を支える計算機技術として、大規模シミュレーションを計算しながらその場で対話的に可視化解析することを可能とする、新たなIn-Situ可視化システムの開発に関する成果を紹介し(トピックス9-4)ます。

システム計算科学センターでは、原子力研究開発の共通基盤となる計算科学技術の研究を、今後も着実に進展させ、その成果を積極的に展開していきます。