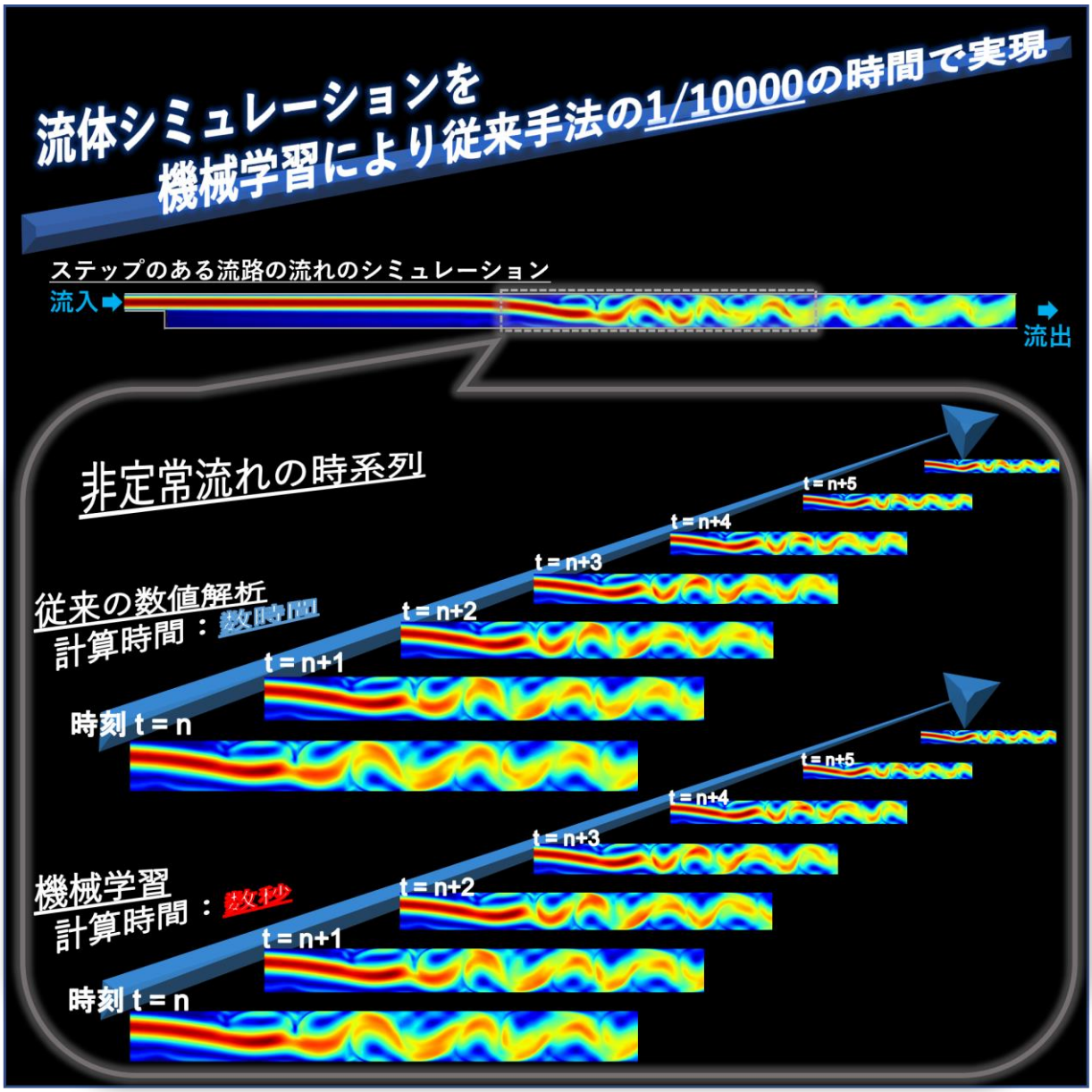
Computational Science & Engineering

計算科学技術部会　ニュースレター　第 40 号
AESJ-CSED　NEWSLETTER (No.40)
September 2023

LSTM による流動挙動の予測



日本原子力学会 計算科学技術部会
ニュースレター 第 40 号

2023 年 9 月

1. 2022 年度 計算科学技術部会 部会賞 贈賞報告 4

2. 2023 年春の年会 計算科学技術部会全体会議 開催報告 6

3. 2023 年度 計算科学技術部会 役員紹介 7

4. 2023 年秋の大会 計算科学技術部会全体会議 開催案内 9

6. 2023 年秋の大会 計算科学技術部会 一般セッション開催案内 10

7. 2023 年秋の大会 計算科学技術部会 企画セッション開催案内 12

8. 一言一語 「計算結果を”見る”、”観る”、”診る”」
(財)エネルギー総合工学研究所 茶木 雅夫様 13

9. 講習会・ワークショップ等の開催報告・連絡事項等 16

10. 年間予定 17

編集後記 18

表紙図提供：鬼頭　理　氏（(株)東芝）

（2022 年度　計算科学技術部会 CG 賞）

数値流体力学(Computational fluid dynamics (CFD))の発展により、流体を利用する様々な産業分野で CFD によるシミュレーションに基づく設計が可能になりつつある。本研究では、原子力関連機器の流体設計・開発支援のために機械学習の流体シミュレーションへの適用性を検討した。図に示したようなステップのある流路内において、層流から乱流に遷移する領域の流れの速度成分を教師データとし、まず CNN-AE（畳み込み型オートエンコーダ） の学習を行い、次に CNN-AE の中間層を用いて LSTM（ Long short-term memory ） の学習を行うことで、流れ場の時系列を予測するネットワークを構築した。このような機械学習により得られた予測データは、CFD による従来のシミュレーション手法の結果と平均二乗誤差 3%以下の精度でよい一致を示す一方で、計算に要した時間は 1/10000 程度であり、機械学習を用いた予測手法の優れた側面が明らかになった。

令和４年度　計算科学技術部会　部会賞　贈賞報告

選考過程

募集期間：2022 年 9 月 7 日～2022 年 12 月 23 日

応募総数：2022 年春の年会および 2023 年秋の大会における講演者、募集期間に応募があった者、および、過去に業績のあった者の中から、表彰小委員会において審議を実施。

審査組織：計算科学技術部会　表彰小委員会

授賞者決定：2023 年 1 月 10 日開催の表彰小委員会において受賞候補者を決定し、2023 年 1 月 30 日に最終確定。

表彰日：2023 年 3 月 13 日

副賞：楯、賞状

授賞者数：9 件

賞の名称：功績賞

氏名 茶木　雅夫

所属（財）エネルギー総合工学研究所

受賞内容 「核-熱カップリング解析手法の多分野での開発と適用」

賞の名称：業績賞

氏名 千葉　敏

所属 東京工業大学

受賞内容 「原子力計算技術の統一的運用に関する先駆的貢献」

賞の名称：奨励賞

氏名 鬼頭　理

所属（株）東芝

受賞内容「機械学習による流体シミュレーション手法の開発」

賞の名称：奨励賞

氏名 鈴木　求

所属 (財)電力中央研究所

受賞内容「マルチフィジックス燃焼計算システムの開発」

賞の名称：CG 賞

氏名 鬼頭　理

所属 (株)東芝

受賞内容「機械学習による流体シミュレーション手法の開発」

賞の名称：CG 賞

氏名 Guangtao Duan

所属 東京大学

受賞内容「混相流粒子法による積層造形時の気泡挙動の数値シミュレーション」

賞の名称：学生優秀講演賞

氏名 松田 那由多

所属 東京大学

受賞内容「照射誘起欠陥に対する非線形超音波混合応答の分子動力学法による定量化」

賞の名称：学生優秀講演賞

氏名 山本 耀二郎

所属 東京大学

受賞内容「逐次活性化探索を用いた kinetic Monte Carlo 法による Cu 中の自己格子間原子クラスタ形態変化の解明」

賞の名称：学生優秀講演賞

氏名 Rui Li

所属 東京大学

受賞内容「固気液三相流における FELMI コードの妥当性確認」

以上

第33回全体会議　開催報告

次期役員として、以下の3名が選出された。

部会長	鈴木　正昭	（中京大学）
副部会長	板倉　充洋	（日本原子力研究開発機構）
副部会長	酒井　幹夫	（東京大学）

また、各委員会の委員長等が選出された。

総務小委員会	奥村　雅彦	（日本原子力研究開発機構）
企画小委員会	和田　怜志	（東芝）
広報小委員会	岩田　順敬	（大阪経済法科大学）
出版・編集小委員会	田村　明紀	（日立製作所）
経理小委員会	稲垣　健太	（電力中央研究所）
表彰小委員会	鈴木　正昭	（中京大学）
部会等運営委員会	板倉　充洋	（日本原子力研究開発機構）

以上

2023 年度　計算技術部会　役員紹介

執行部

部会長	鈴木 正昭	中京大学
副部会長	酒井 幹夫	東京大学
副部会長	板倉 充洋	(国研)日本原子力研究開発機構

総務小委員会

委員長	奥村 雅彦	(国研)日本原子力研究開発機構
	小野寺 直幸	(国研)日本原子力研究開発機構
	山口 瑛子	(国研)日本原子力研究開発機構

経理小委員会

委員長	稲垣 健太	(財)電力中央研究所
	鈴木 求	(財)電力中央研究所

広報小委員会

委員長	岩田 順敬	大阪経済法科大学
	Guangtao Duan	東京大学
	宮村 浩子	(国研)日本原子力研究開発機構

企画小委員会

委員長	和田 怜志	(株)東芝
	出町 和之	東京大学
	中川 篤	三菱重工業(株)
	巽 雅洋	(株)原子力エンジニアリング
	伊藤 啓	京都大学
	酒井 幹夫	東京大学
	奥村 雅彦	(国研)日本原子力研究開発機構

出版・編集小委員会

委員長	田村 明紀	(株)日立製作所
	堂田 哲広	(国研)日本原子力研究開発機構

表彰小委員会

委員長	鈴木 正昭	中京大学

部会等運営委員会

	板倉 充洋	(国研)日本原子力研究開発機構

プログラム編成委員会

	岩田 順敬	大阪経済法科大学
	酒井 幹夫	東京大学

ポジション・ステートメントワーキンググループ

	岩田 順敬	大阪経済法科大学

以上

2023 年秋の大会　計算科学技術部会全体会議　開催案内

１．日時：　令和5年9月8日（金）　12:05～12:55

２．場所：　G会場（ES総合館2F ES021）

３．議事次第（案）

（１）部会長挨拶

（２）小委員会上期活動報告

a. 総務小委員会

b. 企画小委員会

c. 広報小委員会

d. 出版・編集小委員会

e. 経理小委員会

f. 国際会議準備小委員会

（３）告知等、その他

以上

2023 年秋の大会　計算科学技術部会

一般セッション開催案内

2023 年 9 月 8 日(金) 09:30 ～ 10:50　[3G01-05]　応用シミュレーション

[3G01] 系統的な第一原理計算による粘土鉱物吸着構造決定要因の推定

*山口 瑛子 1,2、高橋 嘉夫 2、奥村 雅彦 1 (1. JAEA、2. 東大)

[3G02] 機械学習分子動力学法による高圧水和カオリナイトの解析

*小林 恵太 1、山口 瑛子 1、奥村 雅彦 1 (1. JAEA)

[3G03] Possible fission from high energy excitation of 129Sn

*岩田 順敬 1、Usang M. D.2、Ivanyuk F. A.3、石塚 千香子 4、千葉 敏 5,6

(1. 大阪経済法科大学、2. Reactor Technology Center, Technical Support Division, Malaysia Nuclear Agency, Malaysia、3. Institute for Nuclear Research , Ukraine、4. 東京工業大学ゼロカーボンエネルギー研究所、5. 東京工業大学、6. 株式会社 NAT NAT リサーチセンター)

[3G04] ナトリウム冷却高速炉の設計最適化におけるガス巻込み評価システムの開発

*松下 健太郎 1、江連 俊樹 1、今井 康友 2、田中 正暁 1 (1. JAEA、2. NDD)

[3G05] 群知能を用いた原子力機器保全スケジュールの策定と分析

*鈴木 正昭 1、伊藤 真理 2 (1. 中京大、2. 神戸大)

2023 年 9 月 8 日(金) 10:50 ～ 11:55　[3G06-09] 先端シミュレーション

[3G06] An enhanced moving particle semi-implicit method for simulation of incompressible fluid flow and fluid-structure interaction

*Qinghang CAI1,2, Seiichi KOSHIZUKA1, Ronghua CHEN2, Wenxi Tian2, Suizheng QIU2, Guanghui SU2 (1. UTokyo, 2. XJTU)

[3G07] Towards porosity-free additive manufacturing by optimizing laser rescanning technology based on MPS-DEM simulations

*Guangtao Duan1, Mikio Sakai1 (1. UTokyo)

[3G08] 高精度かつ高効率なコンパクト粒子法の開発

*汪 子迪 1、松本 俊慶 1 (1. 国立研究機関法人日本原子力研究開発機構)

[3G09] 統計的安全評価における機械学習モデルの適用

(1) 量子回路学習による燃料被覆管最高温度の不確かさ評価

*木下 郁男 1 (1. 原子力安全システム研究所)

以上

2023 年秋の大会　計算科学技術部会

企画セッション開催案内

［3G_PL］量子コンピュータの最新動向と原子力工学分野での応用利用の可能性

日時：2023 年 9 月 8 日（金）13:00 ～ 14:30　G 会場（ES 総合館 2F ES021）

座長：鈴木 正昭（中京大）

[3G_PL01] 量子コンピュータの基礎と最新動向

後藤 隼人（株式会社　東芝）

[3G_PL02] 原子力と量子コンピューティング　イオントラップ型を例として

長谷川 秀一（東京大学）

[3G_PL03] 材料科学のための量子・古典ハイブリッドシミュレーション

佐藤 健（東京大学）

以上

一言一語

計算結果を「見る」、「観る」、「診る」

（財）エネルギー総合工学研究所　茶木　雅夫

近年、計算科学技術の進歩は著しく、特に機械学習、生成 AI 等が世界を変えつつあるのはご存知の通りである。機械学習要素を取り込んだ研究は計算科学技術部会でも発表されている。これらの技術を取り入れた研究は今後も盛んになるであろうし、そうあるべきと考える。

私自身、プラントメーカーで長く研究してきたこともあり、このような研究はまず大学や国研で始まり、ある程度成熟してからメーカー等でも使われるようになると推定する。実際に原子力の実プラント向け安全審査等にこのような手法が使われるようになるのは何年先か、何十年経っても使われないかは全く分からないが、以下、解析、主に自分の専門の熱流動関係を中心にここ 10 年程思っていること、改めて思ったことをこの機会に述べさせてもらおうと思う。

まず、私が今まで長年に渡って指導を受けた中で、今も心に残っている話を 2 つ記す。

１．自然界の熱流動現象のうち計算で解けるのは数%以下しかない。何でも解けるという人もいるがこれは解けるもの(だけ)を選んで計算しているから。

２．計算コードは、使う人が物理的に結果を事前に予測し、その予測が正しいか確認するために使うもの。結果が予測と異なる場合は入力ミスかバグをまず疑え。

１は私が大学院生時代に聞いた話で、数%以下のところは少し増えていると思うが大きくは変わっていないと考える。代表的な例は台風の進路予測だろうか。精度は上がってきているし、上空や地上の実測値も参照しながら予測しているが、今でも予報円はかなり広く不確定性は高い。特に台風が南海上で発生した当初の世界中の機関の進路予測は西側へ進み中国大陸へ上陸するものから北東に進んで日本の東海上に進むものまでバラバラなことが多い。

２は私が社会人になってからの話である。ある意味もっともな話で、事前に結果を物理的、現象論的に概ねこうなるだろうと予測できない人が計算コードを使って結果を得ても、それが正しいかどうか、入力ミスが無いか、計算で使ったモデルが正しいか等の判断は出来ないであろう。

25 年程前から汎用 CFD コードがどんどん使われるようになり、その実績が蓄積してきている。ユーザーインターフェースも進歩し、メッシュ作成、初期条件、境界条件設定といった入力、計算結果出力

の自動化、推奨モデル・収束条件等もコード側で準備され、また、収束性も向上している。これは検証が十分にされた分野で様々な計算をするには極めて便利で有用である。一方で、計算する人が具体的に計算コードの中身を直接把握する機会は減っている。

ここで上記１と２について改めて考えてみる。１に関しては「解ける」の意味を精度はともかく何らかの解を得られるとすれば、「何でも解ける」も正しいともいえる。また、２の観点では、計算コードが収束したと判断した計算結果を全て正とすれば「何でも解ける」的発想も出てくる。実際、5 年程前、とある委員会で 1F 事故後、1F の炉内状況評価やシビアアクシデント評価で CFD 解析を始めた人が多く、それらの方の中には１，２の観点が薄く、計算結果が全て正しい的な人が多いという旨、懸念を示す意見があった。１F の炉内状況やシビアアクシデント関係は実態が分からない部分が多く、２の結果の事前予測が困難で、やむを得ないところもある。ただ、結果が物理的、現象論的に正しいかどうかは計算コードを使う人が最終的に判断するものであり、この点はある意味、直近の生成 AI 活用に関する議論と似ている。

個人的に近年の論文の査読、学会発表等から思うのは CFD の進歩で計算コードへの依存度が強くなってきており、これは計算機性能の向上と解析技術の進歩を踏まえればこれは正しい動きであろう。ただ、計算結果を受動的に「見る」ところで止まっている研究の比率が増えているように感じる。研究者の研究者たるところは、真摯に１の実態を踏まえ、計算結果を「見る」のではなく、２の観点で幅広く物理的、現象論的に「観る」ことでないだろうか。

上記２の結果の事前予測については個人的には一定の知見が揃っている事象についてはざっくりとした事前把握は、所謂手計算ベースで出来るものだと思う。以下、個人的に思う参考事例を 2 例紹介する。

第一は新型コロナウィルスの飛散について富岳で膨大な計算がなされ、感染予防対策に活用された。様々な状況で詳細な新型コロナウィルスを含む飛沫、エアロゾルの空気中への飛散等の可視化を短時間で実施した素晴らしい成果である。一方で、単一飛沫がどの程度空気中を飛ぶかは飛沫の大きさ、密度、初速と抗力係数の概略値から、一定の事前予測は可能であろう。飛沫は 2m 程度飛散するという話は、私が小学生時代（1970 年台）に習った風邪のウイルス（を含む飛沫）は 2m 程度飛散するという話と似ていると思った方も本部会員では多いのではないだろうか。

第二は 1969 年のアポロ 11 号による月面着陸である。50 年以上前に人が月に行き、月面を歩行し、地球に無事帰還した。当時のコンピュータはおおよそ、デスクトップ PC の 100 万分の 1 の計算スピード（当部会 NL33 号巻頭言より引用）であったが、やり遂げた。ちなみに、この頃日本で 1966 年に東海発電所（ガス炉）、1970 年に美浜一号機（PWR）、1971 年に福島第一 1 号機（BWR）が営業運転を開始している。

今はアポロ 11 号の時代と比べてパソコンでも 100 万倍以上の計算スピードがあり、それを使わない

手はない。また、様々な解析コードもどんどん進歩しており、生成 AI の進歩・普及も急加速しており、生成 AI について色々な規制が必要ではないかと世界的に議論が始まっている。生成 AI も万能でなく、誤情報に基づいてしまうこともあり、使用者である人間の判断が必要な面も残る。この点は、「バグのないプログラムはない」との名言（？）もあり、我々が扱う数値計算も同様かと思う。

人間は便利になり、簡単に物事が出来ることを経験するとそれに慣れ、思考停止状態に陥る傾向がある。計算コードやユーザーインターフェースも進歩しており、それを積極的に使うこと自体は正しい。ただ、それに慣れて計算結果を受動的に「見る」だけになり、「観る」の視点が無くなると解析研究が単なる解析作業に近くなっていく。繰り返しになるが、研究者の研究者たるところは、真摯に 1 の実態を踏まえ、計算結果を「見る」のではなく、２の観点で幅広く計算結果を「観る」ことでないだろうか。

計算結果を「見る」だけの傾向が強まっていくと、SF 映画のようにコンピュータ/AI が人間の計算結果を「診る」、すなわちコンピュータ/AI に人間の計算結果が診断され生成 AI がもっともらしく結果を表示する日が来るのでは、と懸念するのは心配しすぎであろうか。

１によれば 90%以上の自然現象はまだ解けておらず、研究者が知恵を絞り、計算結果を実験結果等と比較しつつ「観る」余地は膨大に残っており、まだまだ研究者がやることは沢山ある。自分自身、今は計算コードを使うことは少ないが、様々な事象に対して「見る」でなく「観る」を実践すべく心掛けている。個人的な思い・考えでどの程度正しいかは分からないが皆様の今後の研究の一助になれば幸いである。

講習会・ワークショップ等の開催報告・連絡事項等

● ICFD2023（Twentieth International Conference on Flow Dynamics）
Nov. 6-8, 2023, Sendai International Center

年　間　予　定

2024 年

１月　　第 3 回運営小委員会

３月　　第 4 回運営小委員会

３月　　春の年会（全体会議）

会期：　2024 年 3 月 26 日（火）～28 日（木）

会場：　近畿大学東大阪キャンパス

＜編集後記＞

日本原子力学会　計算科学技術部会　ニュースレター　第 40 号
2023 年 8 月

編集・発行責任：　計算科学技術部会　出版・編集小委員会
田村　明紀　（委員長）
（日立製作所、akinori.tamura.mt@hitachi.com）
堂田　哲弘
（原子力機構、doda.norihiro@jaea.go.jp）

ニュースレター40 号をお届け致します。今年度より、前委員長の日本原子力研究開発機構・山下様から出版・編集小委員会の委員長を引き継ぎました日立製作所・田村です。原子力計算科学技術の更なる発展のため、尽力させて頂きますので宜しくお願い致します。今年度の計算科学技術部会の役員・委員を本レターでもご紹介させて頂いております。多くの方が留任もしくは少しお立場を変えてのご就任となっておりますが、新たに部会運営に参加される方々、これまで役員・委員としてご尽力頂いた方々の本部会への多大な御貢献に対して、一部会員として感謝と敬意を表させて頂きます。計算科学技術部会の新体制の下、皆様の役立てる情報を発信できるよう頑張っていきたいと思いますので、部会員の皆様におきましても引き続き御支援・御協力の程お願い致します。

（田村　明紀）

※出版・編集小委員会からのお知らせ

過去のニュースレターは以下の計算科学技術部会ホームページからダウンロードできます。

http://csed.sakura.ne.jp/archives/category/2_newsletter