

平成18年度大型計算機システム利用による 研究成果報告集

Summaries of Research and Development Activities by Using JAEA Computer System In FY2006 (April 1, 2006 - March 31, 2007)

情報システム管理室

Information Technology Systems' Management and Operating Office

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

P-KCVICV

February 2008

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは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(<u>http://www.jaea.go.jp/index.shtml</u>) より発信されています。このほか財団法人原子力弘済会資料センター*では実費による複写頒布を行っ ております。

〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根2番地4 日本原子力研究開発機構 研究技術情報部 研究技術情報課 電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920

*〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根2番地4 日本原子力研究開発機構内

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to Intellectual Resources Section, Intellectual Resources Department, Japan Atomic Energy Agency 2-4 Shirakata Shirane, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920

© Japan Atomic Energy Agency, 2008

平成 18 年度

大型計算機システム利用による研究成果報告集

日本原子力研究開発機構 システム計算科学センター 情報システム管理室

(2007年12月19日受理)

日本原子力研究開発機構システム計算科学センターでは、スーパーコンピュータをはじめ とする大型計算機システムを導入し、研究活動を支援するとともに、計算機システム及びネ ットワークシステムの運用管理を行っている。

本報告集は、平成18年度における日本原子力研究開発機構の大型計算機システムにおける 利用実績を集計し、ユーザからの利用報告に基づいた研究内容、利用及びその成果について まとめたものである。

原子力科学研究所 (駐在):〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根2-4

Summaries of Research and Development Activities by Using JAEA Computer System in FY2006 (April 1, 2006 – March 31, 2007)

Information Technology Systems' Management and Operating Office

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

(Received December 19, 2007)

Center for Promotion of Computational Science and Engineering (CCSE) of Japan Atomic Energy Agency (JAEA) installed large computer systems including super-computers in order to support research and development activities in JAEA.

CCSE operates and manages the computer system and network system. This report presents usage records of the JAEA computer system and the big users' research and development activities by using the computer system in FY2006 (April 1, 2006 – March 31, 2007).

Keywords: JAEA Computer System, Super Computer, Computational Science and Engineering, User's Research and Development

目	次
目	次

まえが	ゞき	
1. 根	既要	
2. 機	後構のナ	大型計算機システム環境4
3. 뀩	^Z 成 18	年度における大型計算機利用実績7
4. 大	て型計算	章機利用による研究成果12
4.1	1 安全	全研究センター12
2	4.1.1	FLUENT コードによる温度成層化現象の解析12
2	4.1.2	過渡臨界実験装置 TRACY を用いた臨界事故模擬実験における線量測定の解析…14
2	4.1.3	JMTR における燃料照射試験装置の開発に向けた出力評価15
4.2	2 先端	基礎研究センター16
2	4.2.1	フロンティア Co/C60 混合物の量子シミュレーション16
4.3	8 原子	·力基礎工学研究部門19
2	4.3.1	時間・空間依存を考慮した3次元炉心動特性解析コード
2	4.3.2	モンテカルロコードを用いた HTTR 燃料ブロックの燃焼計算
4	4.3.3	選択チャンネル核分裂モデルによる核分裂収率の計算
2	4.3.4	陸域環境における汚染物質の挙動予測のための分布型水流出モデルの開発と検証24
2	4.3.5	海洋中粒子状物質輸送モデルの開発
2	4.3.6	大気・陸域・海洋結合モデルによる水循環シミュレーション
2	4.3.7	FBR 一次系配管内高レイノルズ数乱流挙動予備解析
2	4.3.8	MPS 法による BWR 炉心スペーサ効果の解析的評価
2	4.3.9	BWR 炉心における除熱限界の機構論的予測手法の開発
2	4.3.10	改良界面追跡法による BWR 炉心内流体混合現象の評価
2	4.3.11	PHITS を用いた航空機乗務員・宇宙飛行士の被ばく線量評価41
2	4.3.12	重イオン入射による厚いターゲットからの中性子生成スペクトルの計算44
2	4.3.13	TCA 軽水減速ウラン炉心における Np-237 サンプル反応度価値の解析46
2	4.3.14	軽水減速 MOX 燃料格子を模擬した FCA 炉心における
		²³⁸ U ドップラー反応度効果の実験解析48
2	4.3.15	クラスター損傷 DNA の分子動力学シミュレーション50

	4.3.16	DNA 分子に結合した Ku タンパク質の分子動力学的シミュレーション	52
	4.3.17	PHITS コードにおけるイベントジェネレータの検証と応用	54
	4.3.18	14MeV 中性子直接問いかけ法におけるシミュレーション	56
4.4	4 量子	-ビーム応用研究部門	58
	4.4.1	分子動力学シミュレーションシステム SCUBA を用いた	
		生体超分子リボソームのダイナミクス解析	58
	4.4.2	DNA構造と構造変形能の配列依存性	60
	4.4.3	希土類塩化物の混合挙動シミュレーション	62
	4.4.4	分子の運動エネルギーにより誘起される固体表面反応機構の研究	65
	4.4.5	第一原理分子動力学による化学反応のシミュレーション	68
	4.4.6	J-PARC 3GeV シンクロトロン施設の放射線遮蔽設計	70
	4.4.7	耐放射線性 SiC デバイス用酸化膜の第一原理分子動力学シミュレーション.	72
	4.4.8	レーザープラズマ電子加速における電子入射及び外部磁場効果についての考	察75
	4.4.9	斜め照射レーザーによるプロトン生成シミュレーション	76
	4.4.10	大強度レーザーによる透明素材の誘電破壊過程の	
		第一原理シミュレーション	78
	4.4.11	高強度レーザーの自己組織化	80
	4.4.12	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発	83
	4.4.12	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発	83
4.5	4.4.12 5 核融	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発 ま合研究開発部門	83
4.5	4.4.12 5 核融 4.5.1	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発 ま合研究開発部門 ITER装置の核解析	83 84 84
4.5	4.4.12 5 核融 4.5.1 4.5.2	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発 ま合研究開発部門 ITER装置の核解析 核データライブラリ検証のための核融合ベンチマーク実験解析	83 84 84 86
4.5	4.4.12 5 核融 4.5.1 4.5.2 4.5.3	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発 ま合研究開発部門 ITER装置の核解析 核データライブラリ検証のための核融合ベンチマーク実験解析 トカマクプラズマの自由境界 MHD モードの 3 次元シミュレーション	83 84 84 86 88
4.5	4.4.12 5 核融 4.5.1 4.5.2 4.5.3 4.5.4	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発 ま合研究開発部門 ITER装置の核解析 核データライブラリ検証のための核融合ベンチマーク実験解析 トカマクプラズマの自由境界 MHD モードの3次元シミュレーション ランダウ流体モデルによるイオン乱流輸送の研究	83 84 84 86 86 88 90
4.5	4.4.12 5 核融 4.5.1 4.5.2 4.5.3 4.5.4 4.5.5	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発 ま合研究開発部門 ITER装置の核解析 核データライブラリ検証のための核融合ベンチマーク実験解析 トカマクプラズマの自由境界 MHD モードの3次元シミュレーション ランダウ流体モデルによるイオン乱流輸送の研究 保存型ジャイロ運動論的ブラゾフコードの開発	83 84 86 86 88 90 92
4.8	 4.4.12 核潮 4.5.1 4.5.2 4.5.3 4.5.4 4.5.5 4.5.6 	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発 ま合研究開発部門 ITER装置の核解析 核データライブラリ検証のための核融合ベンチマーク実験解析 トカマクプラズマの自由境界 MHD モードの3次元シミュレーション ランダウ流体モデルによるイオン乱流輸送の研究 保存型ジャイロ運動論的ブラゾフコードの開発 ジャイロ流体モデルによる多スケール乱流シミュレーション	83 84 86 88 90 92 95
4.8	 4.4.12 5 核潮 4.5.1 4.5.2 4.5.3 4.5.4 4.5.5 4.5.6 4.5.7 	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発 ま合研究開発部門 ITER装置の核解析 核データライブラリ検証のための核融合ベンチマーク実験解析 トカマクプラズマの自由境界 MHD モードの3次元シミュレーション ランダウ流体モデルによるイオン乱流輸送の研究 保存型ジャイロ運動論的ブラゾフコードの開発 ジャイロ流体モデルによる多スケール乱流シミュレーション 輸送-MHD 統合 ELM シミュレーション	83 84 84 86 90 92 95 98
4.8	 4.4.12 5 核副 4.5.1 4.5.2 4.5.3 4.5.4 4.5.5 4.5.6 4.5.7 4.5.8 	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発 ま合研究開発部門 I TER装置の核解析	83 84 86 90 90 92 95 98 100
4.8	 4.4.12 5 核融 4.5.1 4.5.2 4.5.3 4.5.4 4.5.5 4.5.6 4.5.7 4.5.8 4.5.9 	 重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発 は合研究開発部門 I T E R装置の核解析	83 84 84 86 90 92 95 95 98
4.5	 4.4.12 5 核潮 4.5.1 4.5.2 4.5.3 4.5.4 4.5.5 4.5.6 4.5.7 4.5.8 4.5.9 	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発 は合研究開発部門	83 84 84 86 90 92 92 95 98 100
4.8	4.4.12 5 核潮 4.5.1 4.5.2 4.5.3 4.5.4 4.5.5 4.5.6 4.5.7 4.5.8 4.5.9	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発 生合研究開発部門 I T E R 装置の核解析	83 84 84 86 90 92 92 95 98 100
4.8	 4.4.12 5 核副 4.5.1 4.5.2 4.5.3 4.5.4 4.5.5 4.5.6 4.5.7 4.5.8 4.5.9 3 次世 	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発	83 84 84 86 90 90 92 95 95 98 100 102
4.8	 4.4.12 5 核副 4.5.1 4.5.2 4.5.3 4.5.4 4.5.5 4.5.6 4.5.7 4.5.8 4.5.9 3 次世 4.6.1 	車粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発	83 84 84 86 90 92 95 95 95 95 95 93 100
4.{ 4.{	 4.4.12 5 核潮 4.5.1 4.5.2 4.5.3 4.5.4 4.5.5 4.5.6 4.5.7 4.5.8 4.5.9 3 次世 4.6.1 4.6.2 	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発	83 84 84 86 90 92 92 95 98 100 102 103 103 104
4.8 4.6	 4.4.12 5 核潮 4.5.1 4.5.2 4.5.3 4.5.4 4.5.5 4.5.6 4.5.7 4.5.8 4.5.9 3 次世 4.6.1 4.6.2 4.6.3 	重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発	83 84 84 86 90 92 95 98 100 102 103 103 104 106

4.6.5	高速炉におけるサーマルストライピング現象を対象とした	
	流体-構造熱連成解析コードの開発	110
4.6.6	連続エネルギー モンテカルロ法による「もんじゅ」炉心核特性解析	112
4.6.7	第一原理計算による FCC 鉄の磁気特性評価	114
4.6.8	高性能三酸化イオウ電気分解セルの開発	116
4.6.9	中性子輸送ベンチマーク問題のための参照解の計算	119
4.7 J —	PARCセンター	120
4.7.1	JSNS における核発熱計算	120
4.7.2	3GeV 陽子ビーム輸送施設(3NBT)における	
	遮蔽およびストリーミング評価計算	123
4.7.3	J-PARC における水素モデレータ配管の熱応力解析	124
4.7.4	J-PARC 中性子散乱装置の BL14 分光器遮蔽体の設計	126
4.7.5	J-PARC 中性子散乱装置の BL19 分光器遮蔽体の設計	128
4.7.6	J-PARC リニアックにおける放射線安全評価	130
4.8 大洗	研究開発センター	131
4.8.1	JMTR を用いた照射試験における照射パラメータの評価	131
4.9 高崎	量子応用研究所	133
4.9.1	イオンビームの運動力学に関する研究	133
		100
4.10 シン	ステム計算科学センター	136
4.10.1	大規模分子動力字法による BCC 鉄結晶のき裂進展	136
4.10.2	* 水の比熱の量子分子動力学計算	137
4.10.3	第一原理計算による金属における粒界脆化の研究	138
4.10.4	- 厳密対角化法によるフェルミ原子ガスの物性の解明	140
4.10.5	大規模分子動力学法による混合転位のピンニング挙動解析	142
4.10.6	タンパク質非極性キャビティーの水和の可能性	144
4.10.7	放射線照射下での超伝導体の非平衡ダイナミクス	146
4.10.8	金属ガラスにおけるせん断帯の理論と分子動力学法シミュレーション	149
4.10.9	ITBL 環境を利用した随伴変数法による形状最適化	150
4.10.1	0 原子力ブラント全体規模の組立構造シミュレーション	152
4.10.1	1 超局強度レーザーによる高エネルギー電子発生	154
4.10.1	2 Bayer-Villiger 反応における水素結合の役割の理論的研究	156
4.10.1	3 分子の運動エネルギーにより誘起される固体表面反応機構の研究	159
4.10.1	4 アルドール反応の経路の追跡	162

 4.10.15 超臨界 CO ₂ 平行平板間乱流の直接数値シミュレーション	
 とがき	あと
 ▶ 平成 18 年度大型計算機システム利用成果一覧	付録

Contents

Foreword	d b	
1. Overv	iew	
2. JAEA	Large	e Computer System4
3. Compu	uter Us	age Records in FY20067
4. Resea	rch and	Development Activity by Using JAEA Computer System
4.1	Nuclea	ar Safety Research Center12
	4.1.1	Analysis of thermal stratification phenomena using FLUENT code12
	4.1.2	Analysis of Dose Measurements in Criticality Accident Situation
		at Transient Experiment Critical Facility, TRACY14
	4.1.3	Evaluation of linear heat rate
		for development of fuel irradiation test facilities in JMTR15
4.2	Advan	ced Science Research Center16
	4.2.1	Quantum simulations of frontier Co/C60-composites16
4.3	Nuclea	ar Science and Engineering Directorate19
	4.3.1	Three-dimensional reactor kinetics code
		taking account of time and space19
	4.3.2	Burnup calculations for HTTR fuel blocks using Monte Carlo code20
	4.3.3	Calculation of fission yield by selective channel scission model22
	4.3.4	Development and verification of distributed rainfall-runoff model for
		estimating contaminant transport in terrestrial environment24
	4.3.5	Development of particulate matter migration model in the Ocean
	4.3.6	Water cycle simulation by coupled atmospheric, terrestrial,
		and oceanic models
	4.3.7	Preliminary analysis of high Reynolds number turbulent flow
		in FBR primary cooling system
	4.3.8	Numerical Evaluation of Spacer Effects in Boiling Water Reactor
		Using MPS method

	4.3.9	Development of numerical method	
		for prediction of heat removal limit in BWR core	. 36
	4.3.10	Numerical Evaluation of Fluid Mixing Phenomena in Boiling	
		Water Reactor Using Advanced Interface-Tracking Method	. 38
	4.3.11	Dose evaluation of aircrews and astronauts using the PHITS code	. 41
	4.3.12	Calculation of Secondary Neutron Spectra	
		from Thick Targets by Heavy-Ion Incidences	. 44
	4.3.13	Analysis of Reactivity Worth of Np-237 Sample	
		in Water-moderated UO2 Fuel Lattices at TCA of JAEA	. 46
	4.3.14	Analysis of ${}^{238}\text{U}$ Doppler Reactivity Effect in FCA Cores Simulating	
		Light-Water-Moderated MOX Fuel Lattices	. 48
	4.3.15	Molecular dynamics simulation study of cluster	
		damaged DNA including AP site and 80xoG	. 50
	4.3.16	Molecular Dynamics simulation of Ku protein	
		binding with DNA molecule	. 52
	4.3.17	Validation of the event generator mode	
		in the PHITS code and its application	. 54
	4.3.18	14MeV Neutron Direct Interrogation Method Simulation	. 56
4.4	Quant	um Beam Science Directorate	. 58
	4.4.1	Analysis of the dynamics of supra-macromolecule ribosome	
		using molecular dynamics simulation system, SCUBA	. 58
	4.4.2	Sequence-Dependent DNA Conformation and Deformability	. 60
	4.4.3	MD simulation of mixing behavior of molten salt systems	. 62
	4.4.4	Study for the gas - sold surface reaction processes induced	
		by the molecular kinetic energy	. 65
	4.4.5	First Principles Molecular Dynamics Simulations	
		of Chemical Reactions	. 68
	4.4.6	Radiation Shielding Designs	
		of 3GeV Synchrotron Facilities in J-PARC	. 70
	4.4.7	First-Principles Molecular Dynamics Simulation	
		of Oxide Layers for Radiation-Tolerant SiC Devices	. 72
	4.4.8	Numerical examination of electron injection	
		and external magnetic field effect in a laser plasma accelerator	. 75
	4.4.9	Simulation of proton acceleration by a oblique incidence laser pulse	. 76
	4.4.10	First-principle calculations for dielectric breakdown	
		of transparent material under the intense laser field	. 78

	4.4.11	Self-organized criticality of high power lasers
	4.4.12	Development of the simulation code
		of tract structure of heavy particles83
4.5	Fusion	Research and Development Directorate
	4.5.1	Nuclear Analysis of ITER
	4.5.2	Analysis of Fusion Benchmark Experiments
		for Validation of Nuclear Data libraries86
	4.5.3	3D simulation of free-boundary MHD modes in tokamak plasmas88 $$
	4.5.4	Study of ion turbulent transport based on a Landau-fluid model90
	4.5.5	Development of conservative gyrokinetic Vlasov code
	4.5.6	Multi-scale turbulence simulation based on gyro-fluid95
	4.5.7	Integrated ELM simulation based on transport and MHD98
	4.5.8	Stability Analysis of Ideal MHD Modes in Tokamak Edge Plasmas100
	4.5.9	Numerical Simulation of Electron Cyclotron Current Drive
		in NTM Magnetic Island102
4.6	Advan	ced Nuclear System Research and Development Directorate
	4.6.1	Study on In-Vessel Thermal Hydraulics in LMFBR
		(Analysis of Basic Thermal Stratification Water Test)
	4.6.2	Development of A Numerical Simulation Program for Detailed
		Thermal Hydraulics in A Fast Reactor Fuel Assembly104
	4.6.3	Numerical Simulation of Sodium-Water Reaction Phenomena106
	4.6.4	Formulation and Verification of Flow Calculation Method
		on Unstructured Mesh108
	4.6.5	Development of Thermal-Hydraulic Code Coupled
		with Heat Conduction in Structure
		for Thermal Striping Phenomena in Fast Breeder Reactor110
	4.6.6	Analyses of nuclear characteristics of "Monju" by Monte-Carlo method 112
	4.6.7	First principle calculation of magnetic property of FCC Fe 114
	4.6.8	Development of the high-performance electrolysis cell
		for sulfur trioxide decomposition116
	4.6.9	Calculation of reference solutions
		for neutron transport benchmark problem119
4.7	J-PAR	C Center
	4.7.1	Nuclear heating calculation for JSNS

	4.7.2	Shielding and streaming evaluation	
		of 3GeV proton beam transport facility	. 123
	4.7.3	THERMAL STRESS ANALYSIS FOR A TRANSFER LINE	
		OF HYDROGEN MODERATOR IN J-PARC	. 124
	4.7.4	Shielding design of neutron scattering instrument BL14 in J-PARC	. 126
	4.7.5	Shielding design of neutron scattering instrument BL19 in J-PARC	. 128
	4.7.6	Radiation Safety Assessment on J-PARC Linac	. 130
4.8	Oarai R	Research and Development Center	. 131
	4.8.1	Evaluation of Irradiation Parameters in Irradiation Tests of JMTR	. 131
4.9	Takasal	ki Advanced Radiation Research Institute	. 133
	4.9.1	Simulation Study on Ion Beam Dynamics	. 133
4.10	Center	r for Computational Science & e-Systems	. 136
	4.10.1	A large-scale molecular dynamics study	
		on the crack extension in BCC iron	. 136
	4.10.2	Quantum molecular dynamics calculation	
		of the heat capacity of water	. 137
	4.10.3	First-principles study	
		on the grain boundary embrittlement of metals	. 138
	4.10.4	Exploration of property of fermi atom gas	
		using exact diagonalization	. 140
	4.10.5	A large scale MD simulation for the pinning behavior	
		of a mixed dislocation	. 142
	4.10.6	Possibility of the hydration of apolar cavity	. 144
	4.10.7	Non-equilibrium dynamics of superconductor under radiation	. 146
	4.10.8	Theory of Shear Banding	
		in Metallic Glasses and Molecular Dynamics	. 149
	4.10.9	Shape Optimization Using an Adjoint Variable Method	
		in ITBL Grid Environment	. 150
	4.10.10	Assembled structure simulation of an entire nuclear plant	. 152
	4.10.11	High energy electron generation	
		by using ultra-intense laser pulses	. 154
	4.10.12	A Theoretical Study on the Role of Hydrogen Bonds	
		in Baeyer-Villiger Reactions	. 156

4.10.13	Study for the gas - sold surface reaction processes induced	
	by the molecular kinetic energy15	9
4.10.14	Search for the Path of the Aldol Reaction162	2
4.10.15	Direct numerical simulation of stably-stratified	
	turbulent channel flows with CO ₂ supercritical pressure168	5
Postscript		3
Appendix		
List of Reports a	and Presentaions by JAEA Computer169	9

This is a blank page.

まえがき

日本原子力研究開発機構(以下「機構」)では、原子力の総合的研究開発機関として原子力 に係わるさまざまな分野の研究開発を行っており、これらの研究開発の多くにおいて大型計 算機システムが利用されている。機構における平成18年度の大型計算機システムの利用者は 約一千名に上っており(複数の計算機システムへの登録が可能であり、延べ人数は二千名超)、 研究開発の推進に大型計算機システムは必要不可欠なものとなっている。

本報告集は、平成18年度における大型計算機システムを利用した研究開発のうち、代表的な75件の研究開発について、その概要及び成果を利用者からの報告に基づきとりまとめたものである。これらの研究開発においては1年間に数千から百万 CPU 時間以上という膨大な計算機資源を利用した大規模計算が実施されており、大型計算機システムが研究開発の推進に重要な役割を担っている。

本報告集を通して、機構の大型計算機システムがどのような研究開発に利用され、どのような成果を生み出しているのかをご理解を頂くとともに、本報告集が機構内、原子力界のみならず他の分野における研究者の方々の参考となれば幸いである。

1. 概 要

IT 革命といわれる時代を迎え、計算科学技術は「理論」及び「実験」と並ぶ第3の研究手法として、21 世紀の先端的研究のフロンティアを切り開くための重要な基盤技術となっている。特に、原子力のような巨大技術においては、安全面や時間・空間の制約等により実験が困難な場合も多く、計算科学技術は従来から重要な研究手段となっている。

機構においては、大型計算機システムを利用した計算科学技術が機構全体の成果(査読付 論文)の20%近くに貢献するまでになっている(図-1.1)。平成18年度における機構が発表 した査読付論文の総数は1039件である。このうち、機構の大型計算機システムを利用した論 文は約190件あり、全体の18%以上を占めている(図-1.1(2)参照)。平成17年度(図-1.1(1) 参照)と比較しても、5%以上伸びており、大型計算機を利用した計算科学研究の成果創出貢 献度が急速に高くなっている。



(1) 平成 17 年度

(2) 平成 18 年度

◆大型計算機システムが原子力機構成果(査読付論文)の20%近くに貢献

図-1.1 大型計算機システムの研究成果創出貢献度

新法人における計算科学推進策として、システム計算科学センターでは

1)計算機の運用部門と計算科学技術の研究部門を車の両輪とする一体的組織運営、

2) 各研究部門に対し組織横断的な連携・融合研究の展開、

を推進し、国内唯一の原子力に関する総合研究機関として抱える幅広い研究分野に対し計 算科学的研究の底上げを実施してきた。その成果の一端は、図-1.2 に見ることができる。平 成 14 年段階では、核融合と光量子の2部門が大型計算機の利用を独占していたが、平成 18 年度には主要研究部門での利用割合が大幅に促進された。



図-1.2 大型計算機システムの部門別利用率(CPU利用率)

大型計算機システムの利用促進は、そのまま研究成果の創出に直結している。図-1.3 に示 す部門別大型計算機システムの研究成果創出貢献度を見ると、大型計算機システムの利用率 が高い5部門(原子力基礎工学研究部門、量子ビーム応用研究部門、核融合研究開発部門、 次世代原子力システム研究開発部門、システム計算科学センター)において、いずれも大型 計算機システムの研究成果創出貢献度が高く、核融合研究開発部門、次世代原子力システム 研究開発部門においては成果の 1/4 が大型計算機システムの利用によるものとなっているこ とがわかる。



図-1.3 部門別大型計算機システムの研究成果創出貢献度(平成18年度)

2. 機構の大型計算機システム環境

機構における平成19年3月末現在の大型計算機システムの設置状況を表-2.1及び図-2.1に 示す。なお、原子力科学研究所のVPP5000システム及び関西光科学研究所のSC/ES40シス テムは平成19年3月末で、ITBL計算機システムは平成19年5月末で運用を終了した。

表-2.1 機構の大型計算機システムの主な仕様

平成	19 年	E 3	月	現在
1 /2/2	10		/ 4	

	機種	タイプ	CPU 数 (ノード数)	システム 性能 (GF)	主記憶、 総主記憶 容量(GB)	ディスク 容量 (TB)	OS	コンパイラ
東海	並列計算機 Altix3700 Bx2	スカラ	2048 (16)	13000	共有型 13TB	120	SGI Linux	Fortran, C/C++
	PC クラスタ A Altix350	スカラ	64 (32)	409.6	分散型 256	2	SGI Linux	Fortran, C/C++
	PC クラスタ B ApproHyperBlade	スカラ	64 (32)	391.6	分散型 128	2	Cent OS (Linux)	Fortran, C/C++
	VPP5000	ベクトル	16	153.6	分散型 128	10	UXP/V	Fortran77/VPP, Fortran90/VPP
大	科学技術計算機 HPC2500	スカラ	384 (3)	2396	共有分散 1536	10	日本語 Solaris8	Fortran, C/C++
洗	汎用機 GS21-400/10J	スカラ	1	_	0.512	0.2	MSP/EX	FORT77EX
那	大規模可視化サーバ Prism	スカラ	128 (2)	768	1TB		SGI Linux	Fortran, C/C++
珂	pSeries690	スカラ	8	46.42	共有型 16	4.5	AIX	XL Fortran C++
関	SSC/MPP HP SC/ES40	スカラ	908 (227)	1513	分散型 2056	28	Tru64 UNIX	Fortran77,90 HPF
西	ITBL 計算機 PRIMEPOWER	スカラ	512 (4)	1128	共有/分散 1152	15	日本語 Solaris8	Fortran C,C++
東	SX-6	ベクトル	12 (3)	96	共有/分散 48	1	Super-UX	Fortran C,C++
京	pSeries690	スカラ	16 (1)	83.2	共有型 96	2	AIX5L	Fortran C,C++



図-2.1 機構の大型計算機システム

3. 平成 18 年度における大型計算機利用実績

3.1 原子力科学研究所

原子力科学研究所のシステムは、機構内最大規模であり、機構全体の研究開発の推進に重要な役割を果たす中核的な共用計算機として位置づけられている。特に平成17年4月から運用を開始したAltix3700Bx2は、導入当初から非常に高い利用率が続いており、CPU占有率は90%を超える状況となっている。

また、利用部門は、原子力基礎工学研究部門、システム計算科学センター、核融合研究開 発部門、量子ビーム応用研究部門及び次世代原子力システム研究開発部門であり、幅広い分 野で利用されている。

(1) 利用者数

登録ユーザ:489人 利用実績ユーザ:384人

(2) 処理件数及び CPU 利用実績(月別)

表·3.1 原子力科学研究所·処理件数(1)

		Altix3700Bx2		PC クラスタ A			
	バッチ 処理件数	会話 処理件数	CPU 時間(H)	バッチ 処理件数	会話 処理件数	CPU 時間(H)	
4月	6, 889	4, 447	1,024,545	2, 171	1,079	15, 893	
5月	6,571	4,601	1, 165, 772	2,250	850	12,004	
6月	7,510	4, 193	1, 107, 577	3, 121	994	11, 795	
7月	8,013	5,017	876, 544	3, 808	1,026	17, 227	
8月	12, 221	5, 759	837, 199	2,908	671	7,760	
9月	7,651	4,915	896, 948	4,305	952	7,702	
10 月	10, 018	5,067	1, 138, 759	2,684	817	4,675	
11 月	8, 338	5,130	1, 177, 065	3, 868	940	9, 361	
12 月	10, 718	6,010	1, 195, 298	2,429	1,006	12, 970	
1月	8,178	5,031	1, 232, 942	2, 389	771	16, 215	
2 月	14, 913	4,862	1,076,447	1,747	770	9,609	
3月	11, 085	5,272	1, 156, 039	2,235	974	5, 903	
合計	112, 105	60, 304	12, 885, 135	33, 915	10, 850	131, 114	

	PC クラスタ B			VPP5000		
	バッチ	会話	CPU	バッチ	会話	CPU
	処理件数	処理件数	時間(H)	処理件数	処理件数	時間(H)
4月	3, 218	740	15, 524	1,062	770	5,143
5月	3,676	548	12, 941	883	388	6,315
6月	3, 141	776	10, 174	694	419	5,641
7月	1,604	536	7,649	791	308	5,945
8月	1,464	583	9,301	1,452	523	6,112
9月	1, 459	667	11, 645	754	518	4,496
10月	1, 137	630	7, 582	1,172	629	5,776
11 月	2,093	1,174	8,451	1,590	557	7,159
12 月	993	861	5,056	687	528	5,016
1月	1, 283	643	6,656	1,033	495	5, 597
2月	1, 545	1,031	12, 525	751	350	3,682
3月	8,966	808	10, 511	72	198	103
合計	30, 579	8,997	118,015	10, 941	5, 683	60, 985

表-3.2 原子力科学研究所·処理件数(2)



図-3.1 原子力科学研究所・部門別 CPU 時間利用実績(4システム合計)

3.2 那珂核融合研究所

那珂核融合研究所のシステムは、主に核融合研究の大規模シミュレーションの計算結果を 可視化処理する Prism、核融合研究の実験解析等を行う pSeries650 で構成されている。主な 利用部門は核融合研究開発部門及びシステム計算科学センターである。

(1) 利用者数

登録ユーザ:212人 利用実績ユーザ:191人

(2) 処理件数及び CPU 利用実績(月別)

表-3.2 那珂核融合研究所·処理件数

	Prism			pSeries650		
	バッチ	会話	CPU	バッチ	会話	CPU
	処理件数	処理件数	時間(H)	処理件数	処理件数	時間(H)
4月	1, 559	1, 511	41,721	289	2,628	394
5月	989	945	46, 114	72	2,456	215
6月	1,759	1,286	34, 682	149	2, 893	401
7月	1,502	1,303	22, 214	527	2,278	829
8月	2, 117	1,057	40, 608	342	2,944	980
9月	713	1, 313	20, 336	172	3, 593	477
10 月	1,154	951	25, 102	179	2,001	863
11 月	1,952	957	30, 427	232	1,966	1,795
12 月	2, 174	1,100	40, 183	108	1,740	1,636
1月	8,889	1,491	65, 555	165	1,726	1,026
2月	9,647	1,113	60, 473	121	1,482	3, 747
3月	5, 504	1, 315	56, 328	223	1,969	2,876
合計	37, 959	14, 342	483, 743	2, 579	27,676	15, 239



図-3.2 那珂核融合研究所・部門別 CPU 時間利用実績(2システム合計)

3.3 大洗研究開発センター

大洗研究開発センターのシステムは、主に FBR サイクルの実用化プラントの設計用として 利用される HPC2500 と核物質・放射線量管理及び安全性研究等に係わる小規模な計算で利用 される GS21 で構成されている。主な利用部門は次世代原子力システム研究開発部門である。

(1) 利用者数

登録ユーザ:1091人 利用実績ユーザ:583人

(2) 処理件数及び CPU 利用実績(月別)

表-3.3 大洗研究開発センター・処理件数

	HPC2500			GS21		
	バッチ	会話	CPU	バッチ	会話	CPU
	処理件数	処理件数	時間(H)	処理件数	処理件数	時間(H)
4月	1,225	2,109	188, 456	5,916	13, 112	155
5月	747	1,186	123, 936	4,941	10, 998	152
6月	1,151	1,337	168,989	4,884	10, 401	94
7月	946	1,333	157,048	4,033	8,694	72
8月	1, 327	1,226	173, 897	3,807	8,453	181
9月	1,984	1,285	163, 265	4,616	9,600	305
10 月	2, 428	1,493	188,695	4,675	13, 425	80
11 月	2, 132	1,313	180, 991	4,661	8,982	103
12 月	1,680	1,431	155, 153	4,835	9,612	233
1月	1,179	1,247	140, 393	3,446	8,450	165
2月	3, 016	1,267	176, 444	3,826	8,470	195
3月	2, 353	1, 439	188,985	3,912	9, 185	90
合計	20, 168	16, 666	2, 006, 252	53, 552	119, 382	1,825



図-3.3 大洗研究開発センター・部門別 CPU 時間利用実績(2システム合計)

3.4 関西光科学研究所

関西光科学研究所のシステムは、主に光量子科学研究の大規模シミュレーション計算を超 並列で長時間連続処理する AlphaServer と ITBL 計画の下で利用する中核的計算機である PRIMEPOWER で構成されている。主な利用部門は量子ビーム応用研究部門である。

(1) 利用者数

登録ユーザ:353人 利用実績ユーザ:264人

(2) 処理件数及び CPU 利用実績(月別)

表-3.4 関西光科学研究所·処理件数

	AlphaServer			PRIMEPOWER		
	バッチ	会話	CPU	バッチ	会話	CPU
	処理件数	処理件数	時間(H)	処理件数	処理件数	時間(H)
4月	850	66, 567	146, 826	1,800	1, 399	187, 936
5月	404	42, 753	230, 974	1,174	1,398	332, 737
6月	444	51, 812	252, 790	1,939	1,437	263, 054
7月	392	73, 203	353, 304	1,791	969	131, 994
8月	479	60, 397	244, 681	2,087	1,048	119, 135
9月	646	86, 817	427, 760	2, 316	997	84,969
10 月	661	68, 450	403, 813	2,042	965	103, 549
11 月	454	31, 909	328, 476	2,712	960	152, 502
12 月	376	74, 623	374, 018	1,222	948	153, 540
1月	238	12, 624	349,071	1,783	1,144	228, 282
2月	556	33, 190	371, 989	2, 738	1,236	198, 791
3月	235	67, 874	459, 500	1,675	894	208, 250
合計	5, 735	670, 219	3, 943, 202	23, 279	13, 395	2, 164, 739



図-3.4 関西光科学研究所・部門別 CPU 時間利用実績(2システム合計)

4. 大型計算機利用による研究成果

4.1 安全研究センター

4.1.1 FLUENT コードによる温度成層化現象の解析

Analysis of thermal stratification phenomena using FLUENT code

渡辺 正

熱水力安全評価研究グループ

1. 利用の概要(要約):

安全研究センター熱水力安全評価研究グループでは、軽水炉の熱水力的安全性に関する 実験データを整備するため OECD/NEA ROSA プロジェクトを実施しており、実験と並行し て CFD コードの安全問題への適用性の検討を行っている。複雑な原子炉の体系において数 値シミュレーションにより流動現象を検討するためには、大規模かつ長時間の解析を多数 実施し実験結果と比較検討する必要があり、大型並列計算機の利用は不可欠である。

2. 利用の内容・結果:

OECD/NEA ROSA プロジェクトで実施する低温側配管への非常用炉心冷却水注入時の温 度成層化実験に対して、実験手順等を確定するための予備実験の解析を代表的 CFD コード である FLUENT により行い、コードの予測性能を調べた。18 年度は、低温側配管から圧力 容器にかけての定常な流れ場に関して、ノーディングや乱流モデル、二相モデルの評価等 を実施した。図1に計算に用いたノーディング、図2に二相状態での配管内の密度及び温 度分布、図3に配管内の高さ方向の温度分布を実験結果と比較した例を示す。図に示すよ うに、二相時の配管内液側の温度分布に関してはおおむね妥当な結果を得た。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

4. 今後の利用予定:

温度成層化現象の解析において、数値解法や解析モデル、境界条件等の影響を引き続き 調べ、実験結果との比較により FLUENT コードの適用性の検討を進める。



図 1. 低温側配管から圧力容器ダウンカマーまでのノーディング例



図2. 二相状態での配管断面内の密度及び温度分布



図3. 二相状態での配管断面内温度分布の実験結果との比較

4.1.2 過渡臨界実験装置 TRACY を用いた臨界事故模擬実験における 線量測定の解析

Analysis of Dose Measurements in Criticality Accident Situation at Transient Experiment Critical Facility, TRACY

村崎 穣

核燃料サイクル施設安全評価研究グループ

1. 利用の概要(要約):

核燃料サイクル施設安全評価研究グループでは、臨界事故時における線量特性の研究の ため、原子力機構原子力科学研究所燃料サイクル安全工学研究施設(NUCEF)の過渡臨界 実験装置 TRACY において、臨界事故模擬実験時における中性子線量及びy線量の測定を 行っている。この測定に対して、連続エネルギーモンテカルロコード MCNP を用いた解析 を行い、線量計設置位置における線量を求め、測定値と比較することにより、MCNP コー ドの計算精度を検証している。この計算で用いている MCNP コードのような連続エネルギ ーモンテカルロコードは、統計精度のよい結果を得るためには多大な計算時間を必要とす る。このため、Altix3700BX2 において、32CPU を用いた MCNP の並列計算を行った。この 並列計算により、従来用いていた PC による計算と比較して、計算速度が 30 倍以上向上し、 解析作業の効率が大幅に改善された。

2. 利用の内容・結果:

TRACY 炉室内に設置された中性子用熱ルミネセンス線量計(TLD)の測定データと比較 するため、TLD の設置位置における中性子線量当量を MCNP コードにより求め、測定値と 比較した。計算結果は、測定値と概ね一致した。また、臨界事故時の線量評価では吸収線 量単位の値が必要になるため、計算結果の比(吸収線量/線量当量)を用いて、測定値を 線量当量から吸収線量に換算した。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

M. Murazaki, K. Tonoike and G. Uchiyama, "Measurement of Neutron Dose under Criticality Accident Conditions at TRACY Using TLDs" (投稿予定)

4. 今後の利用予定:

引き続き、TRACY 実験の解析を行う。

4.1.3 JMTR における燃料照射試験装置の開発に向けた出力評価

Evaluation of linear heat rate for development of fuel irradiation test facilities in JMTR

扇柳 仁、中村 武彦

高度化軽水炉燃材料研究グループ

1. 利用の概要(要約):

高度化軽水炉燃材料研究グループでは、経済産業省原子力安全・保安院からの受託事業 「軽水炉燃材料詳細健全性調査」において、発電用原子炉における通常運転時並びに出力 急昇条件や過渡沸騰遷移条件等の異常過渡時の軽水炉燃料の健全性評価を目的として、材 料試験炉(JMTR)を用いた中性子照射試験を計画している。平成18年度は、これらの試 験の実施に必要となる「燃料高負荷環境照射試験装置」及び「燃料異常過渡試験装置」の 概念設計を行った。これらの試験装置においては、1)通常運転時の燃料線出力条件の模擬、 2)出力急昇条件下においては、高燃焼度燃料においても600W/cm程度の高線出力が得ら れること等が要求されることから、概念設計においてはこれらの要求を満足するべく、適 切な照射孔の選定等を行う必要がある。そのため、PC-Aクラスターに導入されているモン テカルロコード:MCNP-4Bを用いて、種々のJMTR照射孔位置における試験燃料棒の照射 時線出力を評価した。

2. 利用の内容・結果:

JMTR 炉心及び燃料照射試験装置の炉心装荷部位をモデル化し、JMTR の各照射孔において 照射試験を実施した場合の試験燃料棒の到達線出力を MCNP-4B を用いて評価した。なお、 本件に関わる平成 18 年度の計算は約 150 ケース実施した。

今回実施した出力評価によって、適切な照射孔を選択することによって上記の試験(出力) 条件を達成できることが示され、JMTR を用いて燃料の照射試験を実施できる見通しを得る とともに、試験計画策定に必要な出力分布、出力の燃焼度依存性、炉心反応度への影響な どのデータを得た。

- 3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):
 - (1) 平成 18 年度 軽水炉燃材料詳細健全性調查報告書、平成 19 年 3 月
 - (2) T. Nakamura, "Irradiation Test Plan in JMTR", Fuel Safety Research Meeting 2007, May 16-17, 2007/Ibaraki
 - (3) J. Ogiyanagi, "Development of Power Transient Test Facility in JMTR", Fuel Safety Research Meeting 2007, May 16-17, 2007/Ibaraki
- 4. 今後の利用予定:

平成19年度は上記照射試験装置の詳細設計を行う予定であり、設計内容を反映して、引き続き試験燃料の線出力評価及び試験時の反応度変化等を評価する予定である。

4.2 先端基礎研究センター

4.2.1 フロンティア Co/C60 混合物の量子シミュレーション

Quantum simulations of frontier Co/C60-composites

Pavel Avramov 先端基礎研究センター・極限環境場物質探索グループ

1. 利用の概要(要約):

The main features of the local atomic structure of novel Cox/C60 (x \leq 2.8) complex mixtures were studied by ab initio B3LYP/6-31G* method for a set of low and high energy Con(C60)m (n=1, 2, m=2, 3) clusters in low and intermediate spin states. All relative energies were calculated taking into account the basis set superposition error (BSSE). For the n=1 isomers the spin state S=1/2 is energetically preferable whereas the low energy isomers of n=2 have an intermediate spin state of S=1. The η 2 (6-6 edge of C60) type of cobalt ion coordination is preferable for both n=1 and n=2 cases. The η 2' (coordination with 6-5 edge) and even the η 5 (C5 fragment) types can serve as low and high energy intermediates for cobalt ion's migration around the C60 cage. Formation of cobalt dimers can be the final stage of evolution of Cox/C60 atomic structure approaching the equilibrium atomic geometry.

2. 利用の内容・結果:

In the simplest case of the Co(C60)2 complex 70 possible isomers in low and intermediate spin states have to be calculated. In the case of more complex Co2(C60)2 structures the number of possible isomers in different spin states becomes equal to several hundreds. The conditions of the synthesis of Cox/C60 composites using atomic and molecular beams imply that all possible types of local atomic structure could be formed during the experiment. During or shortly after the synthesis the atomic structure of the species can evolve to get relatively stable positions of cobalt ions and C60 cages. A migration of Co ions around and between the fullerene cages is the most probable mechanism to achieve some stable structures. It is necessary to note that the presence of one or more transition metal ions in the systems requires the usage of modern, accurate and, because of this, expensive ab initio DFT methods and basis sets to calculate the atomic and electronic structure of the species. According to the rough estimations for each single calculation of the Con(C60)m cluster it is necessary to spend several hundreds of CPU hours of modern supercomputers.

In the Tables 1 and 2 the lower energy isomers of Co(C60)2 and Co2(C60)2 clusters are presented. For the n=1 the low spin state (S=1/2) is energetically preferable whereas the low energy isomers of n=2 systems have intermediate spin S=1. It was shown that the η 2- (6-6 edge of C60) type of cobalt ion coordination is preferable for both n=1, 2 cases. Based on the theoretical results the existing indirect and limited experimental structural data for the Cox/C60 species was confirmed and the atomic structure of the composites was completely and accurately described.

Table 1. Type of coordination, structure and relative energies (kcal/mol) of Co(C60)2 and Co(C60)3 clusters. Left/lower carbon atoms are in black, cobalt is in red. The right/upper carbon fragments are shown in green/blue.

Type of coordination	General view	Closest cobalt neighborhood	Relative Energy (kcal/mol)
η^2/η^2			15.2
$\eta^2/\eta^2/\eta^2$ with 3 C-C bonds			13.3
$\eta^2/\eta^2/\eta^2$			0.0

Table 2. Type of coordination, structure and relative energies (kcal/mol) of Co2(C60)2 clusters in different spin states.



Based on the B3LYP/6-31G* calculations of the linear Co2(C60)3 clusters of different types of coordination it was shown that the η^2 '- (coordination with 6-5 edge) and even η^5 - (C5 fragment) types can serve as low- and high-energy intermediates of cobalt ion migration around the C60 cage. The migration of the second cobalt ion approaching the first one proceeds through the set of isomers and intermediates. The energy difference between the initial Co2(C60)3 position (35.3 kcal/mol) and the highest energy intermediate (49.2 kcal/mol), located exactly in the middle of the reaction pathway, is equal to 13.9 kcal/mol. The following approach of the second cobalt ion to the first one

leads to consequent decrease of the energy of the system. After formation of the cobalt dimer one C60 can be removed from the Co2(C60)3 system with formation of some Co2(C60)2 isomers. The formation of the lowest two energy Co2(C60)2 isomers (0 kcal/mol and 9.4 kcal/mol) of $\eta 2:\eta 2$ ' and $\eta 2:\eta 2$ types of coordination (see Table 2) can proceed through the same intermediate state (43.5 kcal/mol). The absence of Co2(C60)3 clusters in mass-spectra of Co/C60 composites confirms the instability of the species. Formation of cobalt dimers can be the final stage of evolution of Cox/C60 composite atomic structure approaching the equilibrium atomic geometry.

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

a. Publications

- Avramov P.V., Naramoto H., Sakai S., Narumi K., Lavrentiev V., Maeda Y., "Quantum Chemical Study of Atomic Structure Evolution of the Co_x/C₆₀ (x≤2.8) Composites", J. Phys. Chem. A, 111, pp.2299-2306 (2007).
- Sakai S., Yakushiji K., Mitani S., Takanashi K., Naramoto H., Avramov P., Narumi K., Lavrentiev V., "Tunnel magnetoresistance in Co nanoparticle/Co-C₆₀ compound hybrid system", Appl. Phys. Lett. **89**, 113118 (2006).
- Avramov P.V., Sorokin P.B., Fedorov A.S., Fedorov D.G., Maeda Y., "Band gap unification of partially Si-substituted single wall carbon nanotubes", Phys. Rev. B74, 245417 (2006).

b. Presentations

- P. Avramov, H. Naramoto, S. Sakai, K. Narumi, V. Lavrentiev, "Quantum Chemical Study of Atomic Structure Evolution of the Co_x/C₆₀ (x ≤ 2) Composites", XII-th International Congress of Quantum Chemistry, Kyoto Terrsa, May 21-26, 2006, Kyoto, Japan.
- Pavel Avramov, 楢本洋, 境誠司, 鳴海一雅, Vasily Lavrentiev, 前田佳均
 「Co_x/C₆₀ 化合物 (x ≤ 2.8) の局所的な原子・電子構造の密度汎関数法による計算」
 第 54 回応用物理学関係連合学術講演会、相模原市、2007 年 3 月 27 日

4. 今後の利用予定:

Based on the investigation described above a set of cluster models of complex mixtures of nc-Co/C60 composites are under the study using DFT PBE0 potential. The models consist of nanocrystalline cobalt units containing 3-15 cobalt atoms (effective size 1-2nm) and 1-3 C60 cages. For the sake of comparison the electronic structure of pristine cobalt nanoclusters (3-15 cobalt atoms) has been calculated. It was shown that the spin state of the species is determined by the number of cobalt atoms constituting the nc-Co part and number of C60 cages bonded with the nc-Co core. The decreasing of the number of cobalt ions in the nc-Co part leads to increasing of the number of unpaired electrons per atom, whereas the formation of the complex bonds between the nc-Co part and C60 cages decreases this value. The quantum chemical calculations will be used to find the optimum composition of the nc-Co/C60 to achieve the optimal magnetic properties.

4.3. 原子力基礎工学研究部門

4.3.1 時間・空間依存を考慮した3次元炉心動特性解析コード

Three-dimensional reactor kinetics code taking account of time and space

高松 邦吉

高温ガス炉特性・安全性試験グループ

1. 利用の概要(要約):

第4世代原子力システム(GenerationIV)の候補の一つである電力水素併産を目的とした 超高温ガス炉(VHTR)の研究開発に活用するため、炉心動特性解析コードを開発する。炉 心体系は中実炉心と環状炉心を候補としており、原子炉出力制御系が作動していない状態 で、反応度添加および冷却材流量減少が生じたときの炉心動特性を評価する。さらに、解 析コード自体の評価を行うため、高温工学試験研究炉(HTTR)の解析モデルを作成し、 HTTRで実施された安全性実証試験の評価を行う。これらのことから、大型計算機による 長時間かつ大規模な計算が、多数の異なる条件の場合について必要となる。

2. 利用の内容・結果:

計算は、主に、PC クラスタ A タイプ Altix350 によって実施した。計算手法は、核計算部 において中性子束、遅発中性子先行核濃度、ヨウ素濃度、キセノン濃度の微分方程式を時 間積分して解く。熱計算部では核計算部で得られた出力分布に基づき、炉心内の燃料カラ ム毎に単冷却チャンネルモデルによって熱計算を行い、燃料コンパクト、黒鉛スリーブ、 冷却材および黒鉛減速材の温度を求める。得られた各部の温度から、燃料ブロックに対す る燃料平均温度および黒鉛平均温度が求められ、断面積編集部へ送られる。断面積編集部 では燃料ブロックおよび黒鉛ブロックの断面積データや制御棒ブロックへの制御棒挿入状 態を表す吸収断面積、外乱を表現するための吸収断面積を組み込む。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

今後、日本原子力学会等で発表する予定。

4. 今後の利用予定:

炉心動特性解析コードの開発を更に進め、原子炉出力制御系が作動していない状態にお ける反応度添加および冷却材流量減少が生じた際の炉心動特性を評価する。さらに高温工 学試験研究炉(HTTR)の解析モデルを詳細化し、HTTRで実施された安全性実証試験の評 価を行う予定である。

4.3.2 モンテカルロコードを用いた HTTR 燃料ブロックの燃焼計算

Burnup calculations for HTTR fuel blocks using Monte Carlo code

後藤 実

高温ガス炉特性・安全性試験グループ

1. 利用の概要(要約):

核熱ユニットでは超高温ガス炉の設計・研究を進めており、その中で、モンテカルロ計 算コードを参照解用コード、拡散計算コードをメインの設計用コードと位置付け、これら を用いた全炉心体系の核計算手法の高精度化に係わる研究・開発を行っている。これまで に、連続エネルギーモンテカルロコード MVP-BURN と汎用核計算コードシステム SRAC を用いて、単純な体系である燃料ピンセルの燃焼計算をそれぞれ行い、SRAC による無限 増倍率の計算結果は MVP-BURN の参照解と 1%Δk/k 以内の差異で良く一致することを確認 した。本年度は、計算体系を燃料ピンセルから燃料ブロックに大きくした燃焼計算を行い、 計算結果を比較した。 MVP-BURN による燃焼計算は、PC クラスタ A(Altix350)を用いて行 った。

2. 利用の内容・結果:

HTTR の燃料ブロックの構造を図1に示す。燃料ブロックは、六角柱状の黒鉛製ブロックの冷却材流路孔に燃料棒を挿入した構造である。燃料棒は黒鉛スリーブに14個の燃料コンパクトを充填する構造で、燃料コンパクトには約13000個の被覆燃料粒子(直径0.92mm)が充填されている。HTTR の炉心は、燃料ブロックを柱状に積み上げて構成される。

HTTR の燃料ブロックの計算モデルを図2に示す。実際のHTTR の燃料ブロックには2 本の棒状のBP(可燃性毒物)が装荷されているが、本計算では、可燃性毒物のモデル化は 行わず計算体系を単純化した。燃料ブロックの境界は完全反射とし、被覆燃料粒子による 非均質性を考慮した HTTR の燃料ブロック体系の燃焼計算を、MVP-BURN と SRAC を用い てそれぞれ行い、計算結果を比較した。その結果、燃料ピンセル体系の場合と同様に、SRAC による無限増倍率の計算結果は、MVP-BURN の参照解と1%Δk/k 以内の差異で良く一致す ることを確認した。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

現在のところ、なし。

4. 今後の利用予定:

今後、可燃性毒物をモデル化した燃料ブロック体系の燃焼計算を MVP-BURN と SRAC を用いてそれぞれ行い、計算結果の比較により、SRAC によるブロック体系の燃焼計算手 法を検証するとともに、その結果を SRAC による全炉心体系の燃焼計算手法に反映させ、 超高温ガス炉の核設計の高精度化を図る。



図1 HTTR の燃料ブロックの構造



図2 HTTR の燃料ブロックの計算モデル

4.3.3 選択チャンネル核分裂モデルによる核分裂収率の計算

Calculation of fission yield by selective channel scission model

太田 雅之

原子力基礎工学研究部門 核工学・炉工学ユニット

核変換用核データ測定研究グループ

1. 利用の概要(要約):

最近提案された「選択チャンネル核分裂モデル」は、核分裂チャンネルごとに核分裂障 壁の値を求めることで、決定論的に核分裂収率を求めることができる理論である。このチ ャンネル依存の核分裂障壁を求めることで、調整パラメータに依存することなしに、任意 の元素および任意の入射中性子エネルギーに対して核分裂収率の予測が可能となると考え られる。本研究では、巨視的一微視的法を用いてチャンネル依存の核分裂ポテンシャルの 計算を行った。多くの核分裂チャンネルに対して、核分裂ポテンシャルの計算を行う必要 があるため、大規模な計算が必要である。よって、本研究を、大型計算機 HPC2500 を使用 して実施した。

2. 利用の内容・結果:

本研究における核分裂ポテンシャルの計算では、巨視的-微視的法と呼ばれる半現象論 的方法を改良し、核分裂チャンネルに対して適用した。本方法では、核分裂ポテンシャル は、巨視的な液滴モデルの項 *E*_{LDM} に、微視的な殻効果 *E*_{shell} を補正した形で与えられる。

先ず、*E*_{LDM}は、変形液滴の表面エネルギー*E*_sと、変形液滴のクーロンエネルギー*E*_cを計 算することにより求めることができる。変形核の形状を、ルジャンドル多項式で記述し、 その変形核のくぼみ地点(鞍点)で調べたいチャンネルの体積分割が常に実現しているよう に設定した。なお、くぼみがない変形段階の場合は x=0 で分割する等、条件を加えた。*E*_s は変形核の表面積に比例し、解析的に求めることができる。*E*_cは微小体積間のクーロンエ ネルギーを変形核の体積領域にわたって積分して求める必要がある。そこで本研究では、 チャンネルごとに *E*_cを計算することと、核内の電荷密度をも考慮する必要があるために、 モンテカルロ法により核内に乱数的に微小体積の座標のペアを作り、微小体積間のクーロ ンエネルギーを足し合わせることで計算した。乱数発生にはモンテカルロ計算に適してい るメルセンヌ・ツイスター法を用いた。

選択チャンネル核分裂モデルでは、分断へと向かう鞍点附近では2つの分裂片への内部 的な分裂が十分に進んでいることを仮定している。そこで、変形核全体の殻効果を、その チャンネルの独立した2つの核分裂片の殻効果の和で与えられると仮定した。形状的に当 てはめられた分裂片における殻効果の計算に関しては、公開されている計算コードである Barrier Code [1]を用いて行った。変形核でのエネルギーと、基底状態でのエネルギーの差か ら、変形のエネルギーを求め、チャンネル依存の核分裂障壁を導出した。

計算対象としたほとんどのチャンネルに対して、2つの鞍点をもった核分裂ポテンシャルが得られた。実験によって報告されている U-236の核分裂障壁は約5.6 MeV であることと比較して、計算結果された障壁値は妥当であることがわかった。ここで得られた障壁
に対する透過確率から収率を求めた。これらの鞍点附近のポテンシャル形状は、2次関数 を仮定した。求められた核分裂収率の質量分布は、対称分裂よりも、質量数100および140 附近のペアに分裂する非対称分裂が起こりやすいという実験事実を定性的に再現すること ができた。熱中性子誘起による核分裂収率と、1 MeV 中性子誘起による核分裂収率の計算 を行い、入射中性子に対する核分裂収率の変化に対して、定性的(半定量的)な一致を得 ることができた。上記において構築されたチャンネル依存の核分裂障壁の計算法を、Th-232 の1 MeV 中性子誘起核分裂、Pu-239、Pu-241の熱および1 MeV 中性子誘起核分裂、Am-243 の自発核分裂に適用し、収率の計算を行った。これらに関しても、対称分裂よりも非対称 分裂が多いという結果が定性的に得られた。ただし、定量的な一致のためには、殻エネル ギー補正の精密化や、変形核形状の記述などを改良する必要がある。

参考文献:

- F. Garcia, O. Rodriguez, J. Mesa, J.D.T. Arruda-Neto, V.P. Likhachev, E. Garrote, R. Capote and F. Guzmán: Comp. Phys. Comm., 120 (1999) pp.57-70.
- 3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):
 - 1) 太田雅之, "選択チャンネル核分裂モデルによる簡便な核分裂収率評価法",日本原子力 学会「2006 年秋の大会」E24, (2006 年 9 月 27~29 日,北海道大学).
 - M. Ohta, "Calculation of fission product yield with selective channel scission model", 3rd Workshop on Neutron Measurements, Evaluations and Applications (NEMEA-3), Borovets, Bulgaria, 25-28 October 2006.
 - 3) M. Ohta and S. Nakamura, "SND2006-V.06: Calculation of Fission Yield by Macroscopic -Microscopic Method Based on Selective Channel Scission Model", T. Fukahori (Ed.), Proc. of 2006 Symposium on Nuclear Data, Jan. 25-26, 2007, RICOTTI, Tokai-mura, Ibaraki-ken, Japan, ISBN978-4-89047-138-6, Nuclear Data Division, Atomic Energy Society of Japan (2007) [CD-ROM].
- 4. 今後の利用予定:

なし。

4.3.4 陸域環境における汚染物質の挙動予測のための 分布型水流出モデルの開発と検証

Development and verification of distributed rainfall-runoff model for estimating contaminant transport in terrestrial environment

都築 克紀

環境動態研究グループ

1. 利用の概要(要約):

放射性物質などの環境負荷物質の包括的動態予測システム SPEEDI-MP の開発の一部と して、陸域環境における環境負荷物質の移行予測に必要となる水流出モデルの開発を行っ ている。水流出モデルは、計算対象地域を水平方向はグリッド状に,鉛直方向は層で分割 したグリッド型多層分布型モデルである。計算対象地域のモデル化は、グリッドと層で区 切られた部分(コンパートメント)ごとに地理情報に基づき対応する移行式とパラメータ を設定し、標高データから算出した落水線から水平方向のグリッド間の接続を決定するこ とにより行う。コンパートメント間の水の移動に関しては、地中部分は Darcy の法則、表 面および河川部分は Manning の式を基礎式とした。水流出シミュレーションは、コンパー トメントごとの水収支式を前進差分法により計算時間間隔を 5 秒間隔として計算した。ま た、モデルの検証のため計算対象地域において観測された値を再現できるようにパラメー タの同定を行う必要がある。モデルのパラメータは複数あり、パラメータの取り得る値の 範囲も広いため、パラメータの同定計算では多数のパラメータの組み合わせを計算する必 要があり、大型計算機による大規模な計算が必要となる。

2. 利用の内容・結果:

計算は、主に並列計算機 Altix3900 の 16CPU 並列によって実施した。モデルパラメータの組み合わせが多いため、パラメータの同定計算には多くの計算時間を必要とした。以下に計算結果を示す。

計算は、福島県南部の久慈川支流の小田川流域を対象として行った。グリッドサイズは 100 m とし、小田川流域を 3313 個のグリッドを用いモデル化した。計算は、小田川流域で 観測の行われた 2003 年 10 月 21 日から 11 月 26 日を対象とした。また、この計算の前に 2003 年 7 月 1 日から 10 月 20 日において初期値を作るための助走計算を行った。モデルパラメ ータの組み合わせを変化させ、観測した流量を再現できるようにモデルパラメータの同定 を行った。同定されたモデルパラメータを用いた観測地点における計算された流量の時間 変化を図 1 に、観測流量と計算流量との比較を図 2 に示す。計算された流量は、観測流量 を精度良く再現しており開発した水流出モデルの妥当性を示した。



3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

- K. Tsuduki and T. Matsunaga, "Importance of hydrological parameters in contaminant transport modeling in a terrestrial environment", In: Proceedings of International Symposium on Environmental Modeling and Radioecology, Inst. for Environment Sci., Aomori, Oct. 18-20, 2006, pp. 65-72.
- 4. 今後の利用予定:

流域規模の異なる複数の地域を対象とした流量再現計算を行い、水流出モデルの妥当性をさらに検証することを計画している。

4.3.5 海洋中粒子状物質輸送モデルの開発

Development of particulate matter migration model in the Ocean

小林 卓也

環境動態研究グループ

1. 利用の概要(要約):

当研究グループでは、日本の沿岸域及び近海域における海水循環と物質移行挙動を明ら かにするとともに、海洋中の物質移行を予測するために、海水循環予測コード POM、海水 中放射性核種移行予測コード SEA-GEARN から構成される海洋環境評価システムの開発を 進めている。平成 18 年度は海洋中粒子状物質輸送モデルを開発した。モデルの妥当性検証 を実施するため、英国セラフィールドにある British Nuclear Fuelsの使用済核燃料再処理施 設から放出された¹³⁷Cs の長期間シミュレーションを実施し、観測値と比較した。

2. 利用の内容・結果:

計算領域はアイリッシュ海のマン島から東側の海域とし、北緯 53.2 度-55 度、西経 2.8 度-4.5 度とした。水平格子間隔は5km、鉛直分割数はσ座標系で15層である。計算対象 海域であるアイリッシュ海は半閉鎖的な海域であり、潮汐が卓越している。 そこで POM に 国立天文台が開発した海洋潮汐予報モデル(NAOTIDE)を組み込み、マン島の南と北の開 境界において潮位を与え潮流を発生させた。水深には GEBCO を用い、最低水深を7mと した。水温と塩分には WOA98 から月別の気候値を与え、その他の外力として COADS か ら気候値の海上10m風速を月別に与えた。タイムステップは15分、計算期間は1966年1 月1日から2年間とした。粒子状物質移行モデルは一般的な移流拡散方程式の鉛直方向の 移流項に粒子状物質の沈降速度を付加したものである。粒子状物質は均一な粒径を持ち、 Stokes 式から沈降速度を与えるものとした。粒子状物質移行モデルの境界条件として、河 川からの陸起源粒子状物質濃度及び開境界からの粒子状物質濃度を与えた。SEA-GEARN の入力データとして6時間毎の流速・粒子状物質濃度データセットを作成した。 SEA-GEARN の計算では再処理工場から放出された年平均 137Cs 濃度を用いた。溶存態 137Cs と懸濁態 137Cs 間の交換速度は、分配係数と粒子状物質濃度と脱着速度の積から求 めた。計算期間は 1966 年から 24 年間とし、水平拡散係数は 500 m2/s、鉛直拡散係数は 0.003 m2/s、タイムステップは30分とした。

検証のため IAEA-MEL が開発した海洋放射能データベース(Marine Information System: MARIS)から抽出したアイリッシュ海における溶存態 137Cs 表層濃度分布と計算結果のス ナップショットを比較したところ(図1)、計算値が概ね観測値を再現していることを確認 した。しかしながら観測値と異なる分布を示す海域も見られる。例えば、計算値が対象海 域東岸沿いで過大評価となっている。この原因として、放出口周辺で局所的に溶存態 137Cs が粒子状物質に吸着し海底に堆積するという報告があるが、本モデルでは局所的な現象を 考慮していないためである。また、北西部のノース海峡近傍で過小評価の海域があるが、 これは計算された北向きの流速が過大であったために対象海域から 137Cs が流出し、その 結果低濃度の 137Cs が計算されたためである。 なお、POM の計算には Altix3700Bx2(32CPU)を、SEA-GEARN の計算には PC クラス タ B (1CPU) を用いた。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

- T. Kobayashi, S. Otosaka, O. Togawa and K. Hayashi, Development of a Non-conservative Radionuclides Dispersion Model in the Ocean and its Application to Surface Cesium-137 Dispersion in the Irish Sea, J. Nucl. Sci. Technol., 44(2), pp.238-247 (2007)
- 2) 日本原子力研究開発機構,「下北海域における海洋放射能予測コードの高度化」成果報告書 (2007)
- 3)小林卓也,海洋中における放射性核種移行モデルーアイリッシュ海への適用-、放射線 医学総合研究所シンポジウム「放射線環境・生物影響研究におけるモデルと放射線防護」 報文集、千葉、2006年12月7-8日 (2007)
- 4)小林卓也,乙坂重嘉,林圭佐,外川織彦,海洋環境評価システムの検証(II)1. 粒子状物 質輸送モデルを用いたアイリッシュ海における Cs-137の長期拡散シミュレーション, 日本原子力学会 2007 年春の年会,名古屋 (2007)
- 4. 今後の利用予定:

同海域において難溶性核種である Pu の再現シミュレーションを実施する。また、本シス テムを日本海に適用し、核実験起源の人工放射性核種の分布を再現し、海底への蓄積傾向 を見積もれるようなモデルに発展させることを計画している。



図1 表層における溶存態¹³⁷Cs 濃度分布(Bq/m³)の観測値との比較 左図:観測値、黒丸は観測点を示す。右図:計算値

4.3.6 大気・陸域・海洋結合モデルによる水循環シミュレーション

Water cycle simulation by coupled atmospheric, terrestrial, and oceanic models

永井 晴康

環境動態研究グループ

1. 利用の概要(要約):

数値実験による様々な環境研究に資することのできる環境研究ツール「数値環境システム SPEEDI-MP」の構築において、大気、陸域、海洋の物理モデル及び物質循環モデル等の 数値実験ツールの開発を行っている。数値実験ツール開発の一環として開発したモデルカ ップラーは、複数のモデルを同時進行で並行計算させ並列計算通信ライブラリ MPI を用い てモデル間で計算結果を交換することにより、モデルを一体化したのと同等な結合状態を 作り出すことができる。このモデルカップラーを用いて、大気、海洋、波浪、陸水、及び 陸面モデルの5モデルからなる水循環結合モデルシステムを開発した。結合した各モデル は、物理過程を高分解能で厳密に計算する数値モデルであり、それぞれ並列計算が必要な ため、このような複雑な結合計算は大規模並列計算により初めて実現可能である。水循環 結合モデルシステムの適用試験として、サウジアラビアにおける 2005 年 1 月の洪水再現計 算及び 2005 年 8 月のハリケーン・カトリーナによる高潮再現計算を、並列計算機 Altix3700Bx2 を用いて実施した。

2. 利用の内容・結果:

結合モデルシステムは、大気モデル、海洋モデル、波浪モデル、水文モデル、及び陸面 モデルの5モデルを結合したものである(図1)。大気モデルには、ペンシルバニア州立大 学と米国大気研究センター(NCAR)が開発した非静力大気力学モデル(MM5)、海洋モデ ルには、プリンストン大学海洋モデル(POM)、波浪モデルには、米国海洋大気局(NOAA) の第3世代海洋波浪推算モデル(WW3)、陸面及び陸水モデルには、日本原子力研究開発 機構で開発した多層陸面モデル(SOLVEG)及び3次元陸水モデル(RIVERS)をそれぞれ 用いている。モデルカップラーは、これらのモデル計算の制御とデータ交換を行うととも に、モデル毎に異なる物理量、時間ステップや格子間隔を整合化する補間機能によりマル チスケール・マルチフィジックスの大規模並列計算を実現している。

結合モデルシステムの適用試験として、サウジアラビアにおいて 2005 年 1 月 22 日の豪 雨に起因して Madinah 周辺地域で発生した洪水の再現計算を実施した。本試験では、MM5、 SOLVEG、及び RIVERS の 3 モデルからなる陸域のみの結合モデルによる 7 日間の計算に ついて、並列計算機 Altix 3700Bx2 の 61CPU を用いて約 30 時間を要した。MM5 の降水計算 は 1 月 22 日の豪雨をほぼ再現し、RIVERS は地表にたまった雨水が流出し谷間に集中する 様子をシミュレートすることができ、洪水の氾濫域を再現することに成功した(図 2)。

また、大気・海洋間相互作用の妥当性を評価するために、2005 年 8 月のハリケーン・カトリーナによる高潮の再現計算を、MM5、WW3、及び POM の 3 モデルからなる海洋のみの結合モデルで実施した。本試験では、3 日間の計算について、並列計算機 Altix3700Bx2

の19CPUを用いて約2.5時間を要した。大気・海洋・波浪結合モデルは、図3に示すよう に海面水位観測値を良好に再現した。波浪モデルを用いない計算では、ハリケーン通過前 に水位上昇を過大評価し、通過後に過小評価となっている。この結果より、波浪に起因す る大気—海洋間の運動量交換を考慮するために、波浪モデルを結合することの重要性が確 認できた。

- 3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):
 - 1) 永井晴康, 茅野政道, 寺田宏明, 原山卓也, 小林卓也, 都築克紀, 金庚玉, 古野朗子; 数 値環境システム SPEEDI-MP, JAEA-Research 2006-057 (2006)
 - 2) 永井晴康,小林卓也,都築克紀,金庚玉;大気・海洋・陸域モデル結合のためのモデルカ ップラー, JAEA-Data/Code 2007-002 (2007)
 - 3) 永井晴康, 都築克紀; 大気一陸面一水文結合モデルの開発と砂漠地域における水循環予 測の試験計算(2), 日本気象学会 2006 秋季大会, 名古屋 (2006)
- 4. 今後の利用予定:

水循環結合モデルシステムに大気、陸域、海洋それぞれについての物質動態予測モデル を追加導入し、SPEEDI-MPの最終的な目標である包括的物質動態予測モデルの完成を目指 す。



図1:水循環結合モデルシステムの構成と考慮する相互作用

JAEA-Review 2007-055



図2:サウジアラビア洪水再現計算の風速場、雲、降水分布、及び局地の陸面水分布



図3:ハリケーン・カトリーナの経路及び海面水位観測値と結合モデルの計算値の比較

4.3.7 FBR 一次系配管内高レイノルズ数乱流挙動予備解析

Preliminary analysis of high Reynolds number turbulent flow in FBR primary cooling system

高瀬 和之

機構論的熱設計手法開発 Gr

1. 利用の概要(要約):

機構論的熱設計手法開発 Gr では、FBR 一次系配管内における乱流挙動を評価できる解析 手法の開発を行なっている。本課題では、この第一段階として、一次系配管内乱流挙動予 測に対する ACE-3D コードの適用性を調べるとともに、LES や DNS による配管内単相乱流 大規模シミュレーションの実現性に関する予備的検討を実施した。

2. 利用の内容・結果:

現行の FBR 設計においては、経済性の観点から、2 系統の一次系ループ案が検討されて いる。そのため、通常の軽水炉と比べて一次系配管内の流量が増大し、レイノルズ数は4 ×10⁷にまで達する。この結果、一次系配管の曲がり部においては、剥離流の再付着点の変 動に伴って下流方向に渦が放出され、この渦放出に起因する圧力変動によって配管自体が 振動することが懸念されている。このような一次系配管の流力振動に対する健全性を示す 上で、配管内の乱流挙動を定量的に評価することが重要である。

4×10⁷のレイノルズ数における一次系配管内の乱流特性を実験的に評価することは容易 ではないため、当 Gr では、一次系配管曲がり部における渦放出や圧力変動に関する一連の 乱流現象を評価できる解析手法の開発を行なっている。本開発は2つに分けて実施してい る。まず、1-2年程度の短期間での開発完了を目指して、従来から二相流解析用として開 発整備している熱流動解析コード ACE-3D に2方程式(単相)乱流モデルを導入し、レイ ノルズ数10⁷のオーダーの高レイノルズ数乱流解析手法を確立する。同時に、より高度な乱 流モデルによる高精度な予測評価を可能にするために、3年程度の期間での開発完了を目指 して、LES や DNS による乱流直接解析手法の確立を考えている。

本課題では、この第一段階として、一次系配管内流に対する ACE-3D コードの適用性を 調べるとともに、LES や DNS による単相乱流大規模シミュレーションの実現性に関する予 備的検討を実施した。

始めに、一次系配管内乱流解析に対する ACE-3D コードの適用性を調べるために、一連 のパラメータ計算を実施した。図1に計算体系を示す。また、解析結果の一例として図2 と図3に予測した速度分布を示す。計算メッシュの構成上、配管中央は特異点となるが、 解析結果にはその影響は見られなかった。しかしながら、曲がり部後流に顕著な剥離は見 られず、この点に課題があることが分かった。詳細な検討の結果、ACE-3D コードで用い ている対流項の差分精度に起因していることが判明し、現在、高次差分への修正を行なっ ている。

次に、配管曲がり部後流に生じる渦放出挙動をシミュレーションによって予測評価できることを確認するため、ACE-3D コードよりもより詳細な解析評価が可能である TPFIT コ

ードを使って、図4に示す体系で予備的な検討を実施した。流路寸法等の諸元は図1に示 す解析体系と同等である。図5にz方向の中央断面における速度分布を示す。流路曲がり 部後流に形成される剥離域や剥離域から放出される渦の挙動は、別途実施されている実験 の結果と良く一致しており、一次系配管内の高レイノルズ数乱流挙動は数値的に十分予測 可能であることが確認された。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

特になし。

- 4. 今後の利用予定:
 - 1)FBR 一次系配管の形状寸法や流動条件を模擬した大規模シミュレーション
 - 2) ACE-3D コードに導入した乱流モデルの妥当性評価及び乱流モデル改良
 - 3) LES や DNS による乱流解析コードの試計算







図4 一次系配管の形状仕様を簡略化した体系



図5 速度分布の時間変化

4.3.8 MPS 法による BWR 炉心スペーサ効果の解析的評価

Numerical Evaluation of Spacer Effects in Boiling Water Reactor Using MPS method

玉井 秀定

原子力基礎工学研究部門 機構論的熱設計手法開発グループ

1. 利用の概要(要約):

機構論的熱設計手法開発グループでは、革新的な熱流動計測技術と計算科学的手法を組 み合わせることにより、実規模試験を必要としないシミュレーションを主体とした先進的 な炉心熱設計手法の開発を行っている。この中で実施している熱流動シミュレーション技 術開発の一環として、沸騰水型原子炉内においてスペーサが二相流挙動に与える影響を把 握するため、粒子法の一つである MPS 法による詳細二相流解析コード POPCORN の開発を 行っている。MPS 法をはじめとする粒子法による流体解析手法は、ある粒子とその周囲の 複数粒子との相互作用により流体としての性質を表現するため、通常の流体解析手法と比 較して必要とする解像度が高く、解析コードの検証解析などにおいても大型計算機の利用 が不可欠である。

2. 利用の内容・結果:

MPS 法では,流体はラグランジ的に解くため複雑な流路形状に追随できるが,構造体は 計算初期に正方格子状に配置するため,スペーサなどの複雑な構造物に対し,必要な形状 模擬性を与えるためには,より微細な粒子で構造体を表現する必要がある。また,MPS 法 は,ある粒子とその周囲の複数粒子との相互作用により流体としての性質を表現するため, 通常の流体解析手法

と比較して必要とす る解像度が高い。こ のため、OpenMP に よる並列化や高速な 行列解法ソルバの導 入,及び近接粒子検 索手法の改良を行い, 大規模体系でのテス ト計算を実施した。 その結果, 100 万個 程度という従来の限 界を1000万個以上 まで拡張することに 成功した(図1参照)。 この結果から、本コ ードにより燃料集合



図1 MPS 法による障害物後流解析結果の一例

体のような複雑で大規模な体系において環状 噴霧流解析が実施できる見通しを得た。

上述のように、MPS 法では、解析対象を粒 子の集まりとして表現し,支配方程式を等価 な粒子間相互作用に置き換えて計算する。こ のため、原理的に流体と構造体で解析アルゴ リズムが同じであり, 流体とスペーサなどの 構造体の相互作用解析に適応した手法である。 そこで、MPS 法による詳細二相流解析コード に, 流体と構造体の相互作用計算機能を追加 した。追加した機能では、構造体を強制的に 移動させる解析や流体との相互作用で働く応 力により構造体を移動させる解析などが可能 である。図2に剛体壁で構成された水槽にお けるスロッシング解析結果の一例を示す。水 槽に強制振動を加えることによりスロッシン グを起こした。図より,構造体との相互作用 により,流体の界面形状が複雑に変形すると ともに流体内の圧力分布が適切に計算されて いる。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等): 特になし

4. 今後の利用予定:

これまでの研究により明らかとなった,物 体後流での予測精度に関する問題を解決する ため,圧力解法を改良するとともに,より大 規模な計算を可能とするための解析コードの 改良を計画している。



t = 0.125 s



図 2 MPS 法によるスロッシング解析結果の一例

4.3.9 BWR 炉心における除熱限界の機構論的予測手法の開発

Development of numerical method for prediction of heat removal limit in BWR core

三沢 丈治

機構論的熱設計手法開発 Gr

1. 利用の概要(要約):

機構論的熱設計手法開発 Gr では、革新型水冷却炉を含む BWR 型原子炉炉心の除熱限界 を、大規模試験を行うことなく予測することを目的に、燃料集合体内の沸騰遷移を、機構 論的に予測できる手法を開発している。その一環として、燃料集合体の除熱限界を予測す ることを目的として、三次元二流体モデル解析コード ACE-3D の開発が行われている。本 課題では、ACE-3D を用いて、フルサイズの燃料集合体を対象とした沸騰流解析が実施で きることを確認した。

2. 利用の内容・結果:

ACE-3Dが、フルサイズの燃料集合体を対象とした沸騰流解析に適用できることを確認 することを目的として、原子力機構で実施した大型熱特性試験37本バンドル試験体を模擬 した体系における沸騰流解析を実施した。解析体系は、図1に示すように、シュラウドを 含む三角配列 37 本バンドルである。本解析では、計算コストを節約するために、対称性を 考慮して、燃料集合体断面の1/12の体系を解析対象とした。37本の各燃料棒には、図2に 示すように、大型熱特性試験装置を模擬した出力分布を与えた。図3に解析結果の一例と して、入口より流入した水が、燃料棒からの出力により沸騰して蒸気が発生する様子を示 す。集合体外周部においては、シュラウド壁面が発熱していないため、流体に対する発熱 量の割合が相対的に高い中央部のボイド率(気相体積割合)が、高くなる傾向が見られる。 また、下流に向かって沸騰が進むに従い、水平断面内のボイド率分布が変わっていくこと が分かる。z=0.5mでは、燃料棒間の狭隘部において、ボイド率が局所的に高くなっている が、下流に向かうに従い、狭隘部における蒸気が3本の燃料棒に囲まれたサブチャンネル へ広がっていく。z=0.85mでは、燃料集合体中央において、ほぼ一様なボイド率分布を示 し、z=1.1mでは、逆に3本の燃料棒に囲まれたサブチャンネル中心において高いボイド率 を示した。沸騰開始点付近において燃料棒間狭隘部に集中していた蒸気が、流路を上昇す るに従い、3本の燃料棒に囲まれたサブチャンネルに移行する現象は、原子力機構で行われ た中性子ラジオグラフィによる燃料集合体内ボイド率測定結果と定性的に一致している。 これにより、ACE-3Dを用いて、断面方向、主流方向ともにフルサイズの燃料集合体を対 象とした沸騰流解析が行えることを確認した。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

T. Misawa, et al., "Development of Design Technology on Thermal-Hydraulic Performance in Tight-lattice Rod Bundle: V - Large Paralleled Simulation", Proceedings of 15th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE15), April 22-26, 2007, Nagoya, Japan

4. 今後の利用予定:

大型熱特性試験より得られた圧力損失等の実験データとの比較により、ACE-3Dの予測 性能を調べるとともに、ACE-3Dで使用されている相関式の改良を実施する。



図3 ボイド率(蒸気相体積割合)分布

4.3.10 改良界面追跡法による BWR 炉心内流体混合現象の評価

Numerical Evaluation of Fluid Mixing Phenomena in Boiling Water Reactor Using Advanced Interface-Tracking Method

吉田 啓之

原子力基礎工学研究部門 機構論的熱設計手法開発グループ

1. 利用の概要(要約):

機構論的熱設計手法開発グループでは,革新的な熱流動計測技術と計算科学的手法を組 み合わせることにより,実規模試験を必要としないシミュレーションを主体とした先進的 な炉心熱設計手法の開発を行っている。この中で実施している熱流動シミュレーション技 術開発の一環として,改良界面追跡法による詳細二相流解析コード TPFIT の開発を行って いる。当該コードは気液間に存在する気液界面を詳細に追跡することにより,二相流挙動 の高精度予測を可能とするものである。このため,非常に細かい空間格子による長時間の 計算が必要とされ,実際の熱流動設計へ適用するためには大型計算機の利用が不可欠であ る。

2. 利用の内容・結果:

BWR型原子炉の一つである超高燃焼水冷却増殖炉の燃料集合体内の2つのサブチャンネル(仮想的流路)を模擬した体系での流体混合解析を、その運転条件を模擬して実施した。図1に解析体系を示す。解析は燃料棒間ギャップ(以下、ギャップ)1.3 mm と 1.0 mm の 2 つの体系について、



おいて,主にチャンネル1から2への気相の移動が起こっている。

図3に、既存熱設計コードで流体混合現 象を評価するために用いられる流体混合相 関式と呼ばれる簡易モデル(従来クロスフロ ーモデル,変動差圧モデル)と解析結果の比 較を, サブチャンネル2に対するクロスフ ロー流量(流体混合質量速度)として示す。ギ ャップ1.3 mmの体系においてサブチャンネ ル2のクオリティが低い場合には,解析結 果と2つの流体混合相関式との差異は小さ いが、サブチャンネル2のクオリティが高 い場合には、流体混合相関式、特に従来ク ロスフローモデルとの差異は大きい。ギャ ップ1.0mmの場合,従来クロスフローモデ ルと解析結果との差異は、定性的にも定量 的にも大きい。ここで用いた従来クロスフ ローモデルは、一般的な原子炉炉心熱設計 に用いられているものであり、既存の熱設 計手法をモデルの修正無しにギャップ1.0 mm のような新型炉の熱設計に適用するこ とは難しいことが明らかになった。





上記では,燃料集合体内の2つのサブチャンネルを模擬した解析を実施したが,現実に は非常に多数のサブチャンネルが存在し,これらを流れる二相流の相互作用によって全体 の二相流挙動が影響を受ける可能性がある。そこで,複数サブチャンネルによる相互作用 を確認するため,複数サブチャネルを含む比較的大規模な体系に対する解析を実施した。 解析結果による流路間差圧などの標準偏差を図4に示す。流路間差圧に対し差異が見られ るものの,気・液相の混合係数については優位な差は確認できない。したがって,流体混



合現象に関する限り、複数サブチャンネルによる相互作用は考慮しなくても良いことが分かった。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

学会発表など

- ・吉田啓之, "低減速軽水炉の伝熱流動解析研究の現状", 日本原子力学会秋の大会, TD22, (2006)
- ・吉田啓之,他,"改良界面追跡法による稠密炉心内流体混合量の評価",日本原子力学会 秋の大会,N09,(2006)
- ・吉田啓之,他,"改良界面追跡法による高圧2 チャンネル流体混合実験解析",日本原子 力学会春の大会,(2007)
- Hiroyuki Yoshida, Takuji Nagayoshi, Kazuyuki Takase and Hajime Akimoto, "Development of Design Technology on Thermal-Hydraulic Performance in Tight-Lattice Rod Bundles: IV -Numerical Evaluation of Fluid Mixing Phenomena using Advanced Interface-Tracking Method
 Proceedings of ICONE15, ICONE-10532 (2007)
- Hiroyuki Yoshida, Takuji Nagayoshi, Kazuyuki Takase and Hajime Akimoto, "Numerical Evaluation of Fluid Mixing Phenomena in Boiling Water Reactor Using Advanced Interface-Tracking Method", Proceedings of the 5th Joint ASME/JSME Fluids Engineering Conference, FEDSM2007-37302 (2007)
- Hiroyuki Yoshida, Takeharu Misawa, Kazuyuki Takase and Hajime Akimoto, "Analytical Procedure on Fluid Mixing Phenomena in Boiling Water Reactor Core with Advanced Interface Tracking Method", Proceedings of the 5th Joint ASME/JSME Fluids Engineering Conference, FEDSM2007-37675 (2007)

表彰など

・「計算科学的手法による機構論的炉心熱設計手法の開発」, 平成18年度日本原子力研究 開発機構理事長表彰研究開発功績賞

4. 今後の利用予定:

表面張力係数などの物性値の影響や,流路形状などの影響を把握するとともに,より正 確な現象の理解と新しいモデルを構築するための統計解析手法を導入する。さらに,気液 界面における沸騰及び凝縮の影響を把握するため,相変化を評価するためのモデルの開 発・導入を行う予定である。

4.3.11 PHITS を用いた航空機乗務員・宇宙飛行士の被ばく線量評価

Dose evaluation of aircrews and astronauts using the PHITS code

佐藤 達彦

放射線防護研究グループ

1. 利用の概要(要約):

近年,航空機乗務員及び宇宙飛行士の宇宙放射線による被ばくが問題となっている。そ の被ばく線量を評価するためには,航空機及び宇宙船内における放射線エネルギースペク トルを精度良く計算する必要がある。しかし,宇宙放射線は,原子炉等で発生する放射線 と比べてエネルギーが極めて高く,また,重イオンを含むなどその種類も多様なため,既 存の放射線輸送計算コードではその挙動を正確に模擬することができなかった。そこで, 我々は,粒子・重イオン輸送モンテカルロ計算コード PHITS を開発・改良し,それ用いて, 航空機乗務員や宇宙飛行士の被ばく線量評価法の確立を目指した研究を実施している。 PHITS は,多大な計算資源を必要とする量子分子動力学モデルを用いて重イオン核反応を 模擬するため,本研究には,大型並列計算機の利用が不可欠である。

我々は、平成17年度までに、宇宙船及び大気圏内における中性子スペクトルを計算し、 その測定値を再現することに成功した。平成18年度は、大気圏内の陽子・α粒子・μ粒 子・電子・陽電子・光子スペクトルに対する計算を実施し、その測定値に対する再現性を 確認した。また、得られた計算結果の高度、地磁気強度及び太陽活動周期に対する依存性 を解明し、それを再現可能な決定論的数学モデルを構築した。このモデルの完成により、 計算の精度と迅速性を両立した航空機乗務員の宇宙線被ばく線量評価が可能となった。こ の特徴を生かし、構築したモデルは、放射線医学総合研究所の航路線量計算プログラム JISCARDに組み込まれ、平成19年度より、航空機乗務員の宇宙線被ばく管理に利用され る予定である。

2. 利用の内容・結果:

航空機内の放射線エネルギースペクトルを計算するためには、宇宙放射線の大気中にお ける輸送計算を行う必要がある。我々は、開発した放射線輸送計算コード PHITS に最新の 核データライブラリ JENDL High Energy File を組み合わせて大気中の放射線輸送計算を行 い、いくつかの条件(高度・地磁気強度・太陽活動周期)に対する宇宙線スペクトルを計 算した。その際、初期条件として CREME96 コードを用いて計算した大気入射宇宙線スペ クトルを採用した。この大気中放射線輸送計算は、大気が約 1000g/cm² と極めて厚いため多 大な計算資源を必要とし、並列計算機 PC クラスターを用いることにより初めて可能となっ た。図1に、様々な高度における陽子・μ粒子スペクトルに対する計算値と測定値を比較 した結果を示す。図より、計算値と測定値はよく一致することが分かり、同様の一致は、 他の放射線(α粒子・光子など)スペクトルに対する比較でも得られた。

また,得られた計算結果の系統性を考察し,高度 20km 以下の任意の地点における宇宙 線スペクトルを予測可能な決定論的数学モデルを構築した。図2に,PHITS 及び構築した モデルを用いて計算した,東京上空における宇宙線被ばく線量率の高度依存性を示す。図 より,両者は極めてよく一致することが分かる。構築した決定論的数学モデルは,膨大な 計算時間を要するモンテカルロシミュレーションを介さず被ばく線量評価が可能なため, 計算の精度を維持しつつ,迅速に宇宙線被ばく線量を評価することができる。この特徴を 生かし,構築したモデルは,放射線医学総合研究所の航路線量計算プログラム JISCARD に 組み込まれ,平成19年度より,航空機乗務員の宇宙線被ばく管理に利用される予定であ る。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

論文発表:

- 1. Tatsuhiko Sato and Koji Niita, "Analytical Function to Predict Cosmic-Ray Neutron Spectrum in the Atmosphere", Radiation Research, 166, pp.544-555 (2006)
- Tatsuhiko Sato, Koji Niita, Hiroshi Iwase, Hiroshi Nakashima, Yasuhiro Yamaguchi and Lembit Sihver, "Applicability of Particle and Heavy Ion Transport Code PHITS to the Shielding Design of Spacecrafts", Radiation Measurement, 41, pp.1142-1146 (2006)

学会発表:

- 1. 佐藤 達彦, 仁井田 浩二「大気中における宇宙線由来の中性子エネルギースペクトル予 測モデル」第67回応用物理学会学術講演会, 滋賀, 8月29日-9月1日 (2006)
- 佐藤達彦「核データを用いた大気中の宇宙線輸送計算」2006年度核データ研究会,東海,1月25-26日(2007)
- 3. 佐藤達彦, 遠藤章, 仁井田浩二, 保田浩志「大気中における宇宙線スペクトル予測モデルの確立」日本原子力学会 2007 年春の年会,名古屋,3月 27-29 日(2007)

プレス発表:

1.「地球上任意地点における宇宙線由来の中性子の強度を瞬時に予測できるソフトウェア を公開」 (2006 年 9 月 28 日)

新聞記事:

- 1. 平成18年9月29日掲載,日本経済新聞(15面),「中性子強度の予測ソフト公開」
- 2. 平成18年9月29日掲載,日経産業新聞(9面),「宇宙線中性子強度 予測ソフトを 公開」
- 3. 平成18年9月29日掲載,日刊工業新聞(31面),「宇宙線生成の中性子 実測並み 精度で計算」
- 4. 平成18年10月8日掲載,科学新聞(1面),「宇宙線由来の中性子強度予測ソフト開発」

4. 今後の利用予定:

宇宙飛行士の被ばく線量評価の精度を向上させるため、従来採用している簡易宇宙船モ デルではなく、実際の幾何形状に基づいた宇宙船内の放射線輸送計算を行う。この計算は、 従来と同等、もしくはそれ以上の計算資源を必要とするため、引き続き並列計算機 PC クラ スターを利用する予定である。



大気圏内の陽子(左図)及びµ粒子(右図)スペクトル 図1



東京上空における宇宙線被ばく線量率の高度依存性

4.3.12 重イオン入射による厚いターゲットからの 中性子生成スペクトルの計算

Calculation of Secondary Neutron Spectra from Thick Targets by Heavy-lon Incidences

佐藤 大樹

原子力基礎工学研究部門 放射線防護研究グループ

1. 利用の概要(要約):

粒子原子核輸送コードシステム PHITS の精度検証のため,重イオン入射による厚いター ゲットからの中性子生成スペクトルを計算し,実験値と比較した。この計算において,入 射重イオンはエネルギー領域 100 から 800MeV/nucleon に渡る He から Xe イオンであり, ターゲットは C, Al, Cu 及び Pb である。このように入射重イオンとターゲットの組み合 わせが多様であることと,各計算において生成中性子の運動エネルギーで微分されたスペ クトルが十分な統計精度を獲得するために,長時間の計算が要求される。シミュレーショ ン手法は,モンテカルロ法であり,原子核-原子核核反応の計算には量子分子動力学(QMD) 模型を採用している。QMD 模型は,原子核内のすべての核子間における有効相互作用を考 慮しつつ,各核子の運動を時間発展させる。このため,原子核を構成する核子数に依存し て,計算時間も長くなる。多数の異なる条件に対して,QMD 模型に基づく PHITS の計算 を実行するためには,大型計算機による長時間かつ大規模な計算環境が必要となる。

2. 利用の内容・結果:

計算は、PC クラスタ B タイプ Appro HyperBlade の 24CPU 並列によって実施した。PHITS では、粒子輸送計算は Boltzmann 方程式をモンテカルロ法により解き、原子核-原子核反応 計算は QMD 模型を用いる。ターゲット内で生成した中性子は、その放出角度毎に配置さ れた検出領域において計上される。

図1に計算体系を示す。実験で使用したターゲットの材質及び幾何情報を入力し、この ターゲットに向け外部から重イオンを入射した。統計を稼ぐためリング状の検出領域を設 定し、実験体系と対応した放出角度に配置した。図2は、400MeV/nucleonのFeイオン入射 における各種ターゲットからの中性子生成スペクトルである。実線がPHITSの計算値、マ ークが実験値を表す。両者は良い一致を示しており、特に前方角度領域における高エネル ギーテールを再現している。このことは、QMD 模型において原子核内でのFermi 運動量を 考慮した核子の運動が適切に模擬できていることを示す。本研究の成果により、PHITS が 広いエネルギー領域において、重イオン入射反応における中性子生成スペクトルを精度良 く計算できることが分かった。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

Daiki SATOH et al., "Reevaluation of secondary neutron spectra from thick targets by heavy-ion incidences", Nuclear instruments & methods in physics research A (投稿中).

4. 今後の利用予定:

中性子入射反応における中性子及びガンマ線の生成量に関するシミュレーション解析を 計画している。





図 1: PHITS による計算体系

図 2: 400MeV/nucleon の Fe イオン入射反応 における C, Al, Cu 及び Pb ターゲットか らの中性子生成スペクトル

4.3.13 TCA 軽水減速ウラン炉心における Np-237 サンプル反応度価値の解析¹

Analysis of Reactivity Worth of Np-237 Sample in Water-moderated UO2 Fuel Lattices at TCA of JAEA

桜井 健、森貴 正

原子力基礎工学研究部門核設計技術開発グループ

1. 利用の概要(要約):

現在高レベル放射性廃棄物(HLW)対象として扱われる Np-237 をウラン燃料に添加して、 「HLW 量低減」、「高燃焼度/長寿命炉心の構築」および「強い核拡散抵抗性を有する Pu 生成」を達成する Protected Plutonium Production(PPP)炉心概念の検討が、東京工業大学を中 心として行われている。その一環として、Np-237 添加燃料装荷炉心における可燃性毒物と しての Np-237 反応度特性の予測精度評価に資するために、原子力機構の軽水臨界実験装置 TCA に構築された中性子スペクトルが系統的に異なる 6 つの炉心における Np-237 サンプ ルの反応度価値測定実験を解析した。この解析には、サンプル近傍の幾何形状を詳細に模 擬可能な連続エネルギーモンテカルロ法を用いた。サンプルの小さな反応度価値をサンプ ルが有る場合と無い場合の実効増倍率の差より計算することから、統計精度の良い計算結 果を得るために、大型計算機による長時間かつ大規模な計算が必要であった。

2. 利用の内容・結果:

実験は、水対燃料体積比(Vm/Vf)を 0.56~3 と幅広く変化させた 6 つの TCA ウラン炉心の 中央に Np-237 酸化物(23g)を挿入し、そのサンプルの反応度価値を誤差 1~3%(2 σ レベル) で測定したものである。この解析を JENDL-3.3 核データを用いて連続エネルギーモンテカ

ルロコード MVP で行った。炉 心を模擬した体系の中心にサン プルを挿入する場合としない場 合の各々で総ヒストリー数 5 億 程度の計算を行って実効増倍率 を求め、それらの差よりサンプ ル反応度価値を統計精度 5~ $17\%(2\sigma \nu \sim \nu)$ で得た。これら の計算は、並列計算機 Altix3900 の 32CPU 並列により実施した。



解析結果(計算値と実験値の比 C/E)を図 1 に示す。C/E の誤差は実験誤差とモンテカルロ 計算の統計誤差を合成したもので、6~17%となった。いずれの炉心においても、実験と計

¹本報告の内容は、文部科学省革新的原子炉システム技術開発公募研究「強い核拡散抵抗性を有する Pu を生成す る革新的原子炉技術開発」(H18 年度)の成果である。

算は誤差範囲内で一致した。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

桜井健、森貴正、須崎武則、齊藤正樹「TCA 軽水減速ウラン炉心における Np-237 サン プル反応度価値の測定と解析」日本原子力学会 2007 年秋の大会、口頭発表

4. 今後の利用予定:

モンテカルロ計算を継続し、サンプル反応度価値計算値の統計精度を実験精度と同レベ ルまで向上させる。

4.3.14 軽水減速 MOX 燃料格子を模擬した FCA 炉心における ²³⁸U ドップラー反応度効果の実験解析

Analysis of ²³⁸U Doppler Reactivity Effect in FCA Cores Simulating Light-Water-Moderated MOX Fuel Lattices

安藤 真樹、岡嶋 成晃

核設計技術開発グループ

1. 利用の概要(要約):

軽水減速 MOX 燃料での²³⁸U ドップラー反応度に対する現行解析コードシステム及び核 データの予測精度を評価することを目的として、FCA において測定した²³⁸U ドップラー反 応度の解析計算を実施した。解析には、現行の高速炉及び熱中性子炉標準解析コードシス テムと最新の核データ JENDL-3.3 を用いた。両解析コードとも計算と実験の比(C/E 値) は、MOX 炉心に対して 0.96 から 1.06 の範囲となり、実験誤差の範囲内でよい一致を得、 解析コードシステムと核データの信頼性を確認した。

本報告は、「3.利用の成果」に示した研究成果から、大型計算機システム利用に関す る内容をまとめたものである。

2. 利用の内容・結果:

計算は、主に、並列計算機 Altix3900 を用いて実施した。図1に FCA 炉心の計算体系 (RZ モデル)の一例を示す。高速炉標準解析コードシステム EXPARAM では、ドップラーサン プル (図1中の Doppler sample)の70 群実効断面積を求める際に、共鳴エネルギー領域で の計算に衝突確率計算コード PEACO-X を用い約 300,000 群のエネルギー構造による詳細な 計算を行った。輸送計算コード DANTSYS により、体系の中性子束を計算し、1 次摂動計 算によりドップラー反応度を求めた。他方、熱中性子炉解析コードシステムでは、エネル ギー107 群に基づく SRAC コードシステムを用いた。ドップラーサンプルの実効断面積の 計算では、SRAC コードシステムに備わる PEACO ルーティン (エネルギー約 16,000 群) を共鳴エネルギー領域での計算に用いた。

実験解析の結果(ドップラー効果に起因する反応度の平均的な中性子エネルギーに対する C/E 値分布)を図2に示す。高速炉準解析コードシステム(図中 FR)と SRAC コードシ ステムを用いた解析結果は、ドップラー反応度の平均エネルギーに依存せず、C/E 値は 0.96 から 1.06 の範囲となり、実験誤差の範囲内でほぼ一致していることが分かる。



図1 FCA 炉心での計算体系(RZ モデル) 図2 ドップラー反応度に対する C/E 値分布

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

- Masaki ANDOH, et al., "Measurement and Analysis of ²³⁸U Doppler Reactivity Effect in FCA Cores Simulating Light-Water-Moderated MOX Fuel Lattices", *J. Nucl. Sci.and Technol.* 44, pp.537 (2007).
- ・安藤真樹、他, "FCA を用いた軟スペクトル場における²³⁸U ドップラー効果の測定(共同研究)", JAERI-Research 2005-026 (2005).
- 4. 今後の利用予定:

高稠密高富化度 MOX 軽水炉を模擬した FCA 実験の解析を行い、解析予測精度の評価を 実施する。

4.3.15 クラスター損傷 DNA の分子動力学シミュレーション

Molecular dynamics simulation study of cluster damaged DNA including AP site and 80x0G

樋口 真理子

放射線影響解析研究グループ

1. 利用の概要(要約):

放射線による DNA 損傷の特徴のひとつは、損傷が空間的に狭い範囲に集中して発生する ことであると考えられている。このように複数の損傷が密集した DNA 損傷をクラスター損 傷と呼んでいる。クラスター損傷に含まれる一つ一つの損傷は修復酵素により修復可能な 損傷であるが、密集することで修復を阻害する効果を持つことが実験によりわかっている。 我々は修復阻害の分子機構の解明を目指している。修復酵素の基質(DNA 損傷)認識への 影響に注目し、今年度は、単独損傷とクラスター損傷の DNA の性質の違いを調べた。AP サイトと8オキソグアニンで構成されたクラスター損傷を持つ DNA と、それぞれの単独損 傷を持つ DNA の分子動力学シミュレーションを行い、DNA 構造を比較した。シミュレー ションを行った系はそれぞれ 40 ベースペアの DNA を水分子で直方体に囲んだもので、原 子数は約7万である。2ナノ秒の計算を行うには、大型計算機の並列計算を利用する必要 がある。

2. 利用の内容・結果:

シミュレーションは分子動力学シミュレーション用ソフトウエア AMBER 8 を用い、PC クラスタ B システムにおいて並列計算を行った。シミュレーションを行った系は以下の6 種類である:損傷のない DNA、8 オキソグアニン単独損傷を持つ DNA、AP サイト単独損 傷を持つ DNA(場所を変えて二種類)、8 オキソグアニンと AP サイトのクラスター損傷を 持つ DNA(AP サイトの場所を変えて二種類)。それぞれの DNA を水分子で囲み、系全体 が中性になる数のイオンをおいて初期構造とした。周期境界条件を課し、系の温度が 300K、 圧力が 1bar になるように平衡化した後、2 ナノ秒の分子動力学シミュレーションを行った。

DNA の平均構造を詳しく解析すると、AP サイト単独損傷では塩基が抜けた部分がつぶ れる方向へ 20~30 度変形していた。8 オキソグアニン単独でも、損傷なしの場合と比較す ると変形が見られた。クラスター損傷では、AP サイトの影響が大きく、8 オキソグアニン の影響は AP サイトと比較すると小さい。AP サイトの部分でおもに変形が起こり、DNA が 曲がる方向も AP サイト単独損傷の場合と同じ方向になることが分かった。つまり、8 オ キソグアニンと AP サイトがクラスター損傷を構成した場合、DNA の平均構造は AP サイ トの影響を強く受けることがわかった。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

 Mariko Higuchi and Miroslav Pinak, "Molecular dynamics simulation of clustered DNA damage site with DNA repair enzyme MutM", Fifth East Asia Biophysics Symposium and Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, November 2006, Okinawa, Japan. Mariko Higuchi, Miroslav Pinak and Kimiaki Saito, "Effects of Abasic Site and 80xoG Lesions on DNA Molecule", Jpn. J. Health Phys., 42 (2007) pp.166-173.

4. 今後の利用予定:

クラスター損傷または単独損傷を持つDNAと修復酵素MutMのシミュレーションを行い、 蛋白質結合状態のDNAにおいて、クラスター損傷の影響を調べる。また、DNA 塩基損傷 の修復過程においてDNA の鎖切断状態が発生するが、鎖切断はAP サイトよりも影響が大 きいと予測できる。DNA 鎖切断を含むクラスター損傷についても分子動力学シミュレーシ ョンを行い、DNA の平均構造等について解析を行う予定である。



図(上): それぞれの損傷 DNA における各ベースペア間の角度(tilt)図(下): AP サイト単独の損傷と、クラスター損傷をもつ DNA のスナップショット

4.3.16 DNA 分子に結合した Ku タンパク質の 分子動力学的シミュレーション

Molecular Dynamics simulation of Ku protein binding with DNA molecule

藤本 浩文

国立感染症研究所・放射能管理室

機構担当者氏名・所属:斎藤 公明・放射線影響解析グループ

利用の概要(要約):

細胞内の DNA 分子は日々放射線や化学物質によって直接的・間接的に損傷を受けている. 我々は、これら損傷を受けた DNA 分子が修復酵素によってどのように認識・結合されるの かを、主に計算化学的な手法を用いて検証している. Ku タンパク質は Ku70 と Ku80 の 2 つのサブユニットからなる二量体で、DNA 二重鎖末端を認識・結合して、二重鎖切断 (DSB) 修復の主要な経路である non-homologous end-joining (NHEJ) 過程を開始する. NHEJ におけ る Ku タンパク質結合後のプロセスは生化学的・分子生物学的実験により詳細な報告がなさ れているが、その最も初期の段階である Ku タンパク質がどのように DNA 末端を認識して いるのかという問題に関しては未だ不明な点が多い. そこで、Ku タンパク質の二重鎖 DNA 末端の認識機構を明らかにするため、既報の結晶構造解析のデータを元に Ku タンパク質 二重鎖 DNA 分子複合体を設計し、それらに対して分子動力学 (MD) シミュレーションを 行った. 系全体に水分子を加えた大規模な MD シミュレーションを、条件ごとに数ナノ秒 のオーダーで行うためには、並列化された大型計算機システムによる長時間の計算が必要 になる. 本研究では、国立感染症研究所 放射能管理室、および日本原子力開発機構 放射 線影響解析研究グループが共同で研究を行い、両組織が所有する計算機を分担して使用す ることで、計算効率の向上を計った.

2. 利用の内容・結果:

Ku タンパク質が DNA 分子上をスライドすることができるかを検証するために、DNA 分子結合に必須と考えられている 14mer に対して、その一端に 3mer を加えた 2 種類の 17mer と両端側に 3mer を加えた 21mer の計 3 種類の分子に Ku タンパク質を作用させ、これらを 初期構造として MD シミュレーションを行った. 計算は、MD シミュレーション用ソフト ウエア AMBER を用い、主に PC クラスタ B システムにおいて 2CPU 並列計算により行った. その結果、いずれの場合においても Ku タンパク質が DNA 分子上を移動する現象は観 察されなかった. 次に 2 ナノ秒後の Ku タンパク質-DNA 分子複合体に外部から力を加え、DNA 分子を引き抜いてみた. その結果、DNA 分子を引き抜くには、その分子構造が壊れ るほど強い力が必要であることがわかった. 以上の結果から、Ku タンパク質は DNA 上を 滑って DNA 末端で停止するのではなく、外部から末端に結合するのではないかと推察された (図 1). また、3mer を加える方向によってタンパク質と DNA 分子の相対位置の経時変 化に差異が観察されたことから、末端への結合には決まった方向がある可能性も示唆された.

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

藤本 浩文・Miroslav Pinak・Juraj Kotulic Bunta・根本 俊行・土田 耕三・前川 秀彰,「Ku タンパク質と二重鎖 DNA 分子の分子動力学的シミュレーション」,日本分子生物学会 2006 フォーラム,2006 年 12 月,名古屋

4. 今後の利用予定:

引き続き、図1のモデルを元に、Ku タンパク質と DNA 分子の結合力の評価法を確立す る.また、Ku の完全な機能解析を行うためには、タンパク質の構造が完全に判明している ことが望ましいが、既報の結晶構造解析では、Ku タンパク質のアミノ酸配列の一部が欠落 している(図2).そこで、欠落部位の構造を予測し、これを補完したモデルを構築するこ とを目指す.更に、Ku タンパク質と DNA 末端間の認識や結合のプロセスに関与していそ うなアミノ酸部位に注目し、その部位を変異させたタンパク質を用いて親和性がどのよう に変化するかを検証する予定である(図3).



この構造のKuヘテロダイマー上をDNA分子が滑る可能性は低い

図1:計算機利用によって得られた結果の概要



図 2:補完する Ku タンパク質のアミノ酸の候補

図 3:置換する Ku タンパク質のアミノ酸の候補

4.3.17 PHITS コードにおけるイベントジェネレータの検証と応用

Validation of the event generator mode in the PHITS code and its application

岩元 洋介

環境・放射線工学ユニット・放射線工学研究グループ

1. 利用の概要(要約):

放射線工学研究グループでは粒子・重イオン輸送計算コード PHITS の開発を行っており、 最近、エネルギーが 20MeV 以下の中性子入射反応に関して、個々の衝突イベント毎にエネ ルギーと運動量が保存される「イベントジェネレータ」が導入された。これにより、半導 体のソフトエラー解析やホウ素中性子捕捉療法への適用など PHITS コードの産業界への利 用拡大が期待される。イベントジェネレータの検証と応用を目的のため大型並列計算機を 利用し、十分な生成粒子の統計を得て様々な検証を行うことができた。

2. 利用の内容・結果:

主に、並列計算機 PC クラスタ B タイプの 24CPU 並列によって計算を実施した。PHITS コードのイベントジェネレータモードの検証項目を中性子断面積、カーマ及びはじき出し 断面積とし、さらに新しい線量計算方法について検討した。中性子の入射エネルギー、タ ーゲット核種などを変えて系統性を検証する必要があるため、多くの計算時間を必要とし た。計算例及び結果を以下に示す。

炭素原子への14MeV 中性子入射による a 粒子生成二重微分断面積の PHITS 計算結果と 実験値を図1に示す。5MeV 以下の低エネルギー領域の連続部分及び 8MeV 付近のピーク を良く再現した。また図2には、炭素原子のカーマ係数における中性子エネルギー依存性 を示す。20MeV 以下のエネルギーでは PHITS 計算結果は実験値を良く再現した。一方で、 20MeV を超えるとイベントジェネレータに用いる吸収断面積の核データがないため、 20MeV の前後でカーマが不連続となる。さらに図3に鉄におけるはじき出し断面積の結果 を示す。吸収反応が扱える PHITS のイベントジェネレータとルジャンドル展開を用いない RADHEAT-IV による結果が全体的に一致し、広いエネルギー領域でのはじき出し断面積計 算に PHITS コードが有効であることがわかった。

最後に PHITS イベントジェネレータ応用例を示す。ホウ素中性子補足療法 BNCT で用いられる $^{10}B(n_{th}, \alpha)^{7}Li$ 反応の荷電粒子生成計算結果を図4に示す。熱中性子で生成される α と ^{7}Li 、及び γ 線のエネルギー分布が理論どおり得られた。また、20MeV の中性子入射による酸素原子からの生成荷電粒子の線エネルギー付与(LET)分布を図5に示す。線質 Q-LET 関係を用いて平均的な線質係数の評価には、主に α 粒子が起因することがわかった。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

Y. Iwamoto, K. Niita, Y. Sakamoto, T. Sato and N. Matsuda, "Validation of the event generator mode in the PHITS code and its application", International Conference on Nuclear Data for Science and Technology (ND2007), Nice, France, April 22-27, 2007

4. 今後の利用予定:

イベントジェネレータモードにおいて熱中性子に対する媒質の熱運動や自由ガスモデル を考慮するとともに、20MeV付近の不連続性を解消することを検討する。







図 2:炭素のカーマ係数



LET[keV/µm]

 $\begin{bmatrix} 10^{-3} \\ 10^{-4} \\ 0.0 \\ 0.5 \\ 1.0 \\ 1.5 \\ 0.0 \\ 0.5 \\ 1.0 \\ 1.5 \\ 2.0 \\ Energy [MeV] \end{bmatrix}$

図4:¹⁰B(*n*_{th}, α)⁷Li 反応による 生成荷電粒子分布

図 5 : Q-L 関係と 20MeV 中性子入射による 酸素からの生成荷電粒子 LET スペクトル

4.3.18 14MeV 中性子直接問いかけ法におけるシミュレーション

14MeV Neutron Direct Interrogation Method Simulation

春山 満夫

高瀬 操

高峰 潤

山口 聡

原子力エネルギー基盤連携センター

超高感度U・Pu非破壊検出法開発特別グループ

1. 利用の概要(要約):

原子力廃棄物に含まれる微量のウランやプルトニウム等の核分裂性物質を非破壊、且つ 高感度で検出する装置の開発のためのモンテカルロシミュレーション計算に利用している。

2. 利用の内容・結果:

実際の測定装置を用いた測定実験結果とシミュレーション計算の比較を行い、実験とシ ミュレーション計算がよく一致していることを確認した。また、シミュレーション計算で は、図1のような時間エネルギー分布を得ることが出来、装置の高感度化に資する検討に 非常に有用なデータを得ることが出来た。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

日本原子力学会 和文論文誌 14MeV中性子直接問かけ法による高感度検出,(II) ウエス系ウラン廃棄物 春山 満夫、飛田 浩、高瀬 操、森 貴正 VOI. 6,No 1,p. 65-72(2007)

日本原子力学会「2007 年春の年会」3月28日(水) B21 14MeV 中性子直接問いかけ法における検出感度の改善

(JAEA)春山満夫,高瀬 操,飛田 浩

4. 今後の利用予定:

今まで進めてきた原子力廃棄物測定の高度化、高感度化を目指したシミュレーション計 算を行う。

また、14MeV中性子直接問い掛け法の非破壊で核分裂性物質を検出する優れた性能を 生かした核テロの防止技術など周辺技術への適用性などのシミュレーション計算を進めて ゆく。



反射材:グラファイト(30cm) FLUX

図1 測定体系反射材のフラックス時間エネルギー分布(例)

4.4. 量子ビーム応用研究部門

4.4.1 分子動力学シミュレーションシステム SCUBA を用いた 生体超分子リボソームのダイナミクス解析

Analysis of the dynamics of supra-macromolecule ribosome using molecular dynamics simulation system, SCUBA

石田 恒

生体分子シミュレーション研究グループ

1. 利用の概要(要約):

近年、電子顕微鏡単粒子構造解析およびX線結晶構造解析により様々な状態のリボソー ム立体構造が明らかにされている。それらのデータから、リボソームはラチェット様の動 きをすることがわかってきているが、その動きがタンパク質生合成機能とどのように関係 しているかは定かではない。そこで我々は、真正細菌のリボソームの電子顕微鏡低分解能 像とX線結晶解析像とを組み合わせて、様々な状態のリボソームの高分解能構造を構築す るとともに、分子動力学シミュレーションを用いて、リボソームトンネルを通る新生ペプ チド鎖が、どのようにして移動するかを明らかにする研究を開始した。

この研究を実施するために、原研(および東大)が開発している分子動力学シミュレー ションシステム SCUBA を用いて、生体超分子であるリボソーム(約200万原子系)の 分子動力学シミュレーション(図1)を Altix3700Bx2 計算機上で実行できるようにした。 この SCUBA を用いることで、既成の分子動力学プログラムコードでは計算が極めて困難 である生体超分子リボソームの分子動力学シミュレーションを数ナノ秒(時間幅1フェム ト秒を数100万ステップ)実行し、リボソームの原子レベルでのダイナミクスを解析し た。

2. 利用の内容・結果:

現在までのところ、翻訳開始から終了までの6つのリボソーム電子顕微鏡像にX線結晶 解析構造をあてはめることができ、6つの状態のリボソーム原子分解能立体構造を構築で きた。これらの立体構造の比較により、リボソーム新生ペプチドトンネルが開閉している 可能性があることがわかってきた(図2)。また、トンネル内の新生ペプチド鎖をモデリン グし、新生ペプチド鎖のあるリボソームとないリボソームについて、水分子も含めた超大 規模分子動力学シミュレーションを実行した結果、水分子が通る細いトンネルが複数存在 していることがわかった。これらの細いトンネルは、新生ペプチド鎖がトンネルを通る際 に必要な溶媒を供給していると考えられる。さらには、リボソームの機能に重要と推測さ れている、リボソームの全体運動を直接観測することができた。(図3)

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

• Hisashi Ishida, Atsushi Matsumoto, Yu Tsutsumi and Kei Yura, Conformational analysis of the structure of ribosome fit into electron microscopy density maps with normal mode analyses and
molecular dynamics simulations, Proceedings of the16th International Microscopy Congress, Proceedings, p.242 (2006)

- ・Hisashi Ishida, Atsushi Matsumoto, Yu Tsutsumi and Kei Yura, Comparative analysis of ribosome atomic structures deduced computationally from EM images and X-ray structures, The 51st Annual Meeting of Biophysical Society、アメリカ、2007年3月
- ・石田恒、堤遊、松本淳、由良敬、リボソーム新生ペプチドトンネルの静的および動的構造の解析、第7回蛋白質科学会年会、2007年5月

4. 今後の利用予定:

平成18年度には、熱平衡状態におけるリボソームの解析が終了した。しかしながら、熱 平衡状態だけでは新生ペプチド鎖の移動過程を議論することが困難である。今後は、新生 ペプチド鎖を引っ張る分子動力学シミュレーションを実行することで、リボソーム翻訳過 程の動的メカニズムの一端を明らかにすることを目指す。



図1. リボソームのPサイトに結 合した tRNA(青)と、ベプチジ ル転移中心から伸びる新生ペプチ ド(CPK モデル)のイメージ図



図2. 左:反応中、右:反応前。反応中には新生ペ プチド鎖の通るトンネル(緑)がtRNA(黄)から 伸びている。



図3. リボソームの熱揺らぎ。赤(青):揺らぎ大(小)。大(小)楕円:50(30)S

4.4.2 DNA構造と構造変形能の配列依存性

Sequence-Dependent DNA Conformation and Deformability

河野 秀俊

生体分子シミュレーション研究グループ

1. 利用の概要(要約):

DNAの構造とその構造変形のしやすさの配列依存性を調べるために、すべてのテトラマー配列バターン、136種類のDNA配列の分子動力学計算を行った。

2. 利用の内容・結果:

【配列パターンと構造変形のしやすさ】

12塩基対のDNA 配列の真中の4塩基対をすべての配列パターン136通りに置き換えて 分子動力学計算を行ない、各々について10nsec間サンプルした構造を解析した。DNA 構造 を簡略的に表現するために、塩基対を剛体として扱い、6自由度で構造を表現した(6つの ステップパラメータ)。まず、X線結晶構造解析などで得られた既知のDNA 構造と本計算 でサンプルされた構造を比較した。既知構造では4塩基対パターンに分けるとデータ数が 足りないため、4塩基対を真中の配列でまとめて2塩基対(10通り)での特徴を比較した。各 パラメータの分布の平均値は、X線結晶構造解析から得られたパラメータの分布の平均値 によく一致した。分布の広がりでは、分子動力学計算で得られた結果は約10倍程度大きな 揺らぎを持つものの、配列間の相対的な大きさは、実験と計算で非常に良い相関を示した (図1、相関係数0.9)。すわなわち、分子動力学計算により、DNAの構造変形のしやすさ と配列の関係を推定できることを示している。そこで、分子動力学計算でサンプルされた 構造を4塩基対間で比較したところ、真中がピリミジン-プリンの配列は前後の塩基種によ り構造変形の程度が大きく異なることがわかった。逆に、プリン-ピリミジンの場合は、前 後の塩基種によらないことがわかった。

【水和の構造と主溝、副溝の幅】

これまで、AATT 配列等の副溝に水のスパイン構造が見られることが知られていた。今回の解析により、副溝に形成される水和(正確には、異なる鎖に属する塩基間の水のブリッジ)の形成率と主溝、副溝の幅の関係を定量的に明らかにした。水がブリッジした状態では、副溝は 5Åの幅に保たれるが、水がなくなると 10Åまで副溝が開き大きな構造変形が起こる。水のブリッジは、AATT 配列では非常に安定(形成率~100%)であるが、TTAA 配列では不安定(形成率~1%)であることがわかった。

【水和の構造と構造変形のしやすさ】

図2に見られように、ブリッジ形成率とDNAの構造変形のしやすさには高い相関が見られた。つまり、副溝における水の配位がDNA構造の変形の大きな要因になっていることが明らかに示されている。真中の2塩基対が同じ配列でも、前後の配列によってブリッジ形成率がDNAの構造変形のしやすさと相関していた(真中の2塩基対ごとに色で区別)。これは、蛋白質のDNA配列認識において水和が重要で、DNAの構造変形しやすさの情報がDNA配列と副溝の水和によって特徴づけられることを意味する。

次年度は、これらの結果を踏まえて DNA に配位した水分子の動的挙動が DNA 配列によってどのように異なるかを調べる。分子動力学計算によって水分子の中性子散乱スペクトルを計算し、それにもとづき実際に実験による水和水の動的挙動の観測を行なっていく予定である。



 図 1. 相対的な DNA の構造変形のしやすさ
(Sxy) と DNA 配列。4 塩基対の配列を真中の 2 塩基対の配列ごとにまとめた。



図 2.9 ns 間における副溝での水の配位確率 と DNA の構造変形能との関係。4 塩基対の 配列を真中の2塩基対の配列ごとに色づけし た。同時に複数の水がブリッジすることがあ るので100%を超える。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

学会:

- Yonetani, Y., Kono, H. & Go, N. (2006). Sequence-dependent DNA conformation and flexibility characterized by hydration pattern. In Fifth East Asian Biophysics Symposium & Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Okinawa.
- Fujii, S., Kono, H., Takenaka, S., Go, N. & Sarai, A. (2006). Analysis of sequence-dependent conformation of DNA backbone torsion angles by molecular dynamics simulations. In Fifth East Asian Biophysics Symposium & Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Okinawa.
- Fujii, S., Kono, H., Takenaka, S., Go, N. & Sarai, A. (2006). Sequence Context Dependent Flexibility of DNA Studied by Molecular Dynamics Simulation. In Fifth East Asian Biophysics Symposium & Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Okinawa.
 論文:
- Yonetani, Y., Kono, H., Fujii, S., Sarai, A. & Go, N. (2007). DNA deformability and hydration studied by molecular dynamics simulation. Molecular Simulation 33, pp.103-107.
- 4. 今後の利用予定:

DNAの構造変形能と水和の関係解析のみならず、DNAと蛋白質の複合体の計算を行 ない、複合体界面での水の分布、配向、揺らぎと蛋白質-DNA相互作用の関係を調べる。

4.4.3 希土類塩化物の混合挙動シミュレーション

MD simulation of mixing behavior of molten salt systems

岡本 芳浩

放射光重元素構造化学研究グループ

1. 利用の概要(要約):

乾式再処理における電解浴の環境に近い、多価金属である希土類塩化物がアルカリ混合 塩融体に溶け込んだ状態(例えば、数%LaCl₃-LiCl-KCl 混合系)のシミュレーションを行っ た。希土類塩化物の混合挙動は、希土類イオンとアルカリイオンの組み合わせによって異 なることが、SPring-8 を利用した放射光 XAFS の研究から明らかになりつつある。本計算 機利用では、「なぜそのような現象が観察されたのか?」を、分子動力学(MD)シミュレ ーション技術を駆使して明らかにする。

2. 利用の内容・結果:

希土類-アルカリ金属塩化物系の混合挙動の違いを調べるために、希土類イオンとアル カリイオンのサイズを変化させた MD シミュレーションを実施した。まず、希土類イオン としてサイズの小さい Y³⁺イオンと大きい La³⁺イオンを対象とした。アルカリ塩化物では、 LiCl-KCl 共晶塩融体が電解浴として有望視されているので、希土類塩化物に対する混合相 手を LiCl-KCl 共晶塩、LiCl と KCl の 3 種類とした。以上、合計 6 種類の混合系融体を対象 とした。 2 つの希土類塩化物 YCl₃ と LaCl₃の単独塩融体の放射光 XAFS 及び MD 計算は実 施済みで、短範囲構造の違いも明らかになっている。

図1に、LaCl₃-ACl 混合系及び YCl₃-ACl 混合系(A=Li, K 及び Li/K) 融体における希 土類イオンの周りの CI イオンの配位数分布をそれぞれ示す。図の最上段が単独塩融体の分 布を示し、下に行くに従い希土類塩化物の濃度は薄くなっていく。2つの図から明らかな ように、LaCl₃と YCl₃では配位数分布の変化に顕著な違いが認められた。LaCl₃では単独塩 状態では配位数は8.3 なのに対して、混合によって配位数が減少しラマン分光などから存在 が示唆されている6配位八面体構造(LaCl₆³⁻)の形成へと向かう。特に31%→17%の間でその 変化が大きいが、これは化学量論的な Cl イオンの不足が解消されるためであろう。一方、 混合相手が LiCl か KCl で明らかな違いが認められた。LaCl₁-KCl 混合系では、配位数分布 のピークは6になり、八面体配位構造が安定化したと思われる。一方のLaCl₃-LiCl 混合系 では、配位数分布のピークは7であり、6配位の割合が低く、八面体配位構造が形成されて いないことを示している。同じ CI イオンドナーである LiCl と KCl の間で異なる挙動を示 し、電解浴として使用されている LiCl-KCl 共晶塩ではこれら2つのことなる混合挙動が競 合状態にあると推定される。他方、YCl₃では単独塩融体における配位数が 6.6 と LaCl₃に比 べて小さいこともあり、混合によって容易に6配位八面体構造が形成される。しかも、混 合相手が LiCl か KCl かでの違いはほとんどなく、濃度 31%以下では八面体配位構造が安定 化している。

LaCl₃系において混合相手が LiCl と KCl であるかによって大きな違いが見られたが、 その原因を探るために Cl イオンの数密度に着目した計算を実施した。混合により希土類イ オン周りの構造が変化する要因は、アルカリ塩化物によってもたらされる CIイオンによる 影響が最も大きいと考えられる。特に希土類塩化物が希薄な状態では、CIイオンの数密度 はアルカリ塩化物とほぼ等しくなる。図2に YCl₃と LaCl₃、及びアルカリ塩化物融体の CI イオン数密度を示す。希土類塩化物の CIイオン数密度は化学量論的にも大きく、例えば KCI 融体の2倍程度の値を示す。しかし、アルカリイオンが小さくなるに従い数密度は大 きくなり、LiCl では希土類塩化物とそん色ないレベルにまで上昇する。そこで、6 配位八 面体構造が安定化しなかった LaCl₃-LiCl 混合系の体積を人為的に大きくして、数密度を LaCl₃-KCl 系の値とほぼ同じ条件 (CIイオンの数密度を本来の 0.020Å⁻³から 0.012Å⁻³に減 少させた) にして計算を実施した。その配位数分布の結果を図3に示す。分布全体が左側 (減少) ヘシフトしたことから分かるように、LaCl₃-LiCl 系本来の数密度では配位数分布の ピークは7 であったが、数密度を LaCl₃-KCl 系の数値と同じにしただけで6 配位が支配的 な構造へと変わった。この計算結果から、混合による希土類イオン周りの6 配位八面体構 造(MCl₆⁻³)の形成は、混合相手のアルカリ塩化物からの CI-イオンの供給と同時に、CI-イオ ンの数密度の大小が大きく関係していることが分かった。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

- (1)Y.Okamoto, T.Yaita, H.Shiwaku, S.Suzuki, Paul A.Madden, 「Recent Status of XAFS work on molten salt systems in the SPring-8」Actinide-XAS-2006 国際会議、平成 18 年 9 月、(カー ルスルーエ、ドイツ)
- (2)岡本芳浩、矢板毅、塩飽秀啓、松浦治明、Paul A. Madden「放射光 XAFS と MD 計算に よる希土類-アルカリ塩化物の混合挙動研究」第38回溶融塩化学討論会、平成18年 11月、東京理科大学(野田)
- (3)岡本芳浩、鶴岡卓哉、矢板毅、Paul A. Madden「分子動力学法による乾式再処理電解浴 中の金属イオン環境シミュレーション」JAEA-Research 2007-005

4. 今後の利用予定:

平成 18 年度の計算において、小さな Y³⁺イオンと大きな La³⁺イオンでは異なる混合挙動 を示すことを MD シミュレーションで解析したが、次のステップでは、

- (1)混合によって構造や物性は変化するが、希薄状態ではどの程度の濃度まで変化するのか?
- (2)Y³⁺とLa³⁺の中間程度の大きさの希土類イオンではどのような挙動になるか?
- の2つを解明するべく、放射光 XAFS 測定を SPring-8 で展開中である。それに並行して、 並列計算機でこれらに対応したシミュレーションを行う予定である。

使用した計算機: Altix3700Bx2、PC クラスターA



 図1 混合系融体における希土類イオン周りの Cl・イオンの配位数分布 (左) LaCl₃混合系
(右) YCl₃混合系



図2 各塩化物融体の Cl-イオン数密度





4.4.4 分子の運動エネルギーにより誘起される固体表面反応機構の研究

Study for the gas - sold surface reaction processes induced by the molecular kinetic energy

リフキ ムヒダ、岸 智弥 ウィルソン アジェリコ、尾澤 伸樹 松本 茂野、中西 寛 津田 宗幸、宮本 敬太 大阪大学 機構担当者氏名:寺岡 有殿

利用の概要(要約):

本研究グループでは半導体および金属材料表面に機能性薄膜を創製することを目的とし、 実験的研究および理論的研究を遂行している。本研究での大阪大学が行なう薄膜創製過程 の理論的な研究は、実験的な研究と相補的な位置を占める。実験結果に対して、理論物性 物理学の立場から解析を行なうことで、薄膜創製過程を改善・改良する実験的および理論 的指針を得ることをねらいとする。

具体的には、金属の単結晶表面での極薄酸化膜形成過程に対する理論物理学的な反応解 析を目的とする。

利用の内容・結果:

計算の主要部分は、ITBL 計算機(PRIMEPOWER)によって実施した。計算には、密度 汎関数理論に基づいた第一原理計算コードを用いた。本計算手法ではコーン・シャム方程 式を解くが、この計算がセルフ・コンシステント・フィールド(SCF)の逐次計算である ために、収束に長時間を要する。なおかつ酸素分子に係るポテンシャルエネルギー表面

(PES) を評価するため、2つの酸素原子配置に対してこの SCF 逐次計算が多数回必要であった。今回 ITBL 計算機を利用することにより達成できた。

極薄酸化膜形成過程の初期反応として、金属表面における酸素吸着反応過程を調べている。

今回は、表面モデルとして、Cu 10原子からなるクラスターを用いた。酸素分子軸を表 面に並行にして、表面に接近する場合の計算結果を図1に、垂直にして接近する場合を図 2に示す。ポテンシャルエネルギーは、酸素分子の重心と表面との距離のZと、酸素原子 間距離のr(図1,2(a)参照)にマッピングした(図1,2(b)参照)。図では、(r、z)空間で の等エネルギー線を描いてある。図1では、酸素分子が解離して2つの酸素原子と表面に 吸着する反応経路が、図2では、酸素分子が解離し一つの酸素原子が吸着し、もうひとつ が表面から再び去っていく反応経路が見出され、それぞれの反応における活性化障壁を評 価できた。計算の結果、分子軸配向によりこの異なる反応経路があり、それぞれ異なる活 性化障壁をもつことから、入射する酸素分子の運動エネルギーに応じて、反応チャンネル が切り替わる可能性があることがわかった。これは実験結果と整合する。

さらに、AI 表面における極薄酸化膜形成過程を評価するために、AI(111)面および

同(001)面の計算を行い、表面電子状態を評価した。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

Kousuke Moritani, Muneyuki Tsuda, Yuden Teraoka, Michio Okada, Akitaka Yoshigoe, Tetsuya Fukuyama, Toshio Kasai and Hideaki Kasai, "Effects of Vibrational and Rotational Excitations on the Dissociative Adsorption of O2 on Cu Surfaces", The Journal of Physical Chemistry C, Vol. 111, No. 27, pp. 9961-9967 (2007).

4. 今後の利用予定:

Al 表面の極薄酸化膜形成過程の初期過程としての酸素吸着におけるポテンシャルエネル ギー表面を計算し、その反応機構を解析し共同研究をさらに進める。



図1. 酸素分子が分子軸を表面に並行にして金属表面に接近する場合の計算結果。(a)分子 配置、Z:酸素分子の重心と表面との距離、r:酸素原子間距離。(b)(r,z)空間にマッピング されたポテンシャルエネルギー表面(等エネルギー線表示、線間隔は0.1eV,酸素・クラスタ ー系の電子状態が三重項状態(左)と五重項状態(右)の場合を記した。)。(c)反応経路座標 Sに沿ったポテンシャルエネルギー変化、活性化障壁は、三重項状態(実線)と五重項状態(破 線)のエネルギーが交差する点で見出された。



図2. 図1に同じ。 ただし酸素分子が分子軸を表面に垂直にして金属表面に接近する場合の計算結果。

4.4.5 第一原理分子動力学による化学反応のシミュレーション

First Principles Molecular Dynamics Simulations of Chemical Reactions

池田 隆司

放射光量子シミュレーショングループ

1. 利用の概要(要約):

本研究では、第一原理分子動力学に基づいた手法を用いて溶液内化学反応のシミュレー ションを実施している。本年度は、軽金属イオンの水和挙動および高密度化された高温水 の構造と動的性質の詳細を、大型計算機を用いた長時間のシミュレーションにより明らか にした。

2. 利用の内容・結果:

今年度はアルカリ土類金属イオンの水和挙動に関する研究と高温高密度水の構造と動的 性質に関する研究を実施した。このうち前者についてその内容と結果を記す。アルカリ土 類金属イオン Mg²⁺と Ca²⁺の水和は、生体化学において極めて重要な役割を果たしており、 その詳細を知ることは重要な課題となっている。本研究では、Mg²⁺と Ca²⁺の水和構造の詳 細を束縛条件付き第一原理分子動力学シミュレーションにより系統的に調べた。シミュレ ーションにより得られた Mg²⁺と Ca²⁺の配位数変化に対する自由エネルギー差を図1に示す。 Mg²⁺では5配位と6配位でのみ極小を示すのに対して、Ca²⁺ではより多くの極小を示すこ とが分かった。これは、Mg²⁺イオンでは安定な水和構造が、6配位では八面体型構造(図2(a))、 5配位では三方両錐型構造(図2(b))と確定的であるのに対して、Ca²⁺イオンでは水和が弱く、 より柔軟な構造をとることに因っている。また、シミュレーションから得られた自由エネ ルギー曲線から、Mg²⁺での水和水交換反応は dissociative プロセスにより反応が進行するの に対し、Ca²⁺では associative プロセスが主要な機構として示唆される。これらの両イオンが 示す水和挙動の違いが生体化学において異なる役割を両イオンに与える一因になっている と推測される。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

(1) M. Boero, T. Ikeda, E. Ito, and K. Terakura,

"Hsc70 ATPase: An Insight into water dissociation and joint catalytic role of K^+ and Mg^{2+} metal cations in the hydrolysis reaction", J. Am. Chem. Soc. **128**, 16798 (2006).

(2) T. Ikeda, M. Boero, and K. Terakura,

"Hydration of alkali ions from first principles molecular dynamics revisited", J. Chem. Phys. **126**, 034501 (2007).

(3) T. Ikeda, M. Boero, and K. Terakura,

"Hydration properties of magnesium and calcium ions from constrained first principles molecular dynamics", J. Chem. Phys. (in press)

(4) Ikeda, M. Boero, and K. Terakura,

"Hydration of Alkali Ions from First Principles Molecular Dynamics Revisited",

Symposium on Progress and Future Prospects in Molecular Dynamics Simulation, -In Memory of Professor Shuichi Nosé-, Yokohama, June 6-8 (2006).

- (5) 池田隆司、"超高圧下の水の第一原理分子動力学シミュレーション I I"、日本物理学会 2006 年秋季大会、千葉、9月 23-26 日 (2006).
- (6) 池田隆司、"超高圧下の水の第一原理分子動力学シミュレーションIII"、日本物理 学会 2006 年春季大会、鹿児島、3 月 18-21 日 (2007).
- 4. 今後の利用予定:

高密度化された水における水素結合状態とプロトンの拡散機構の解明を目指す。



図 1. 束縛条件付き第一原理分子動力学シミュレーションにより得られた(a) Mg^{2+} イオンと (b) Ca^{2+} イオンの配位数 N_{coord} の関数として求めた自由エネルギー差 ΔF_{\circ} Mg^{2+} と Ca^{2+} の自由 エネルギー差 ΔF はそれぞれ N_{coord} =6.0 と 6.1 を基準として図示した。



図 2. Mg²⁺イオンの(a) 6 配位八面体型と(b) 5 配位三方両錐型水和構造

4.4.6 J-PARC 3GeV シンクロトロン施設の放射線遮蔽設計

Radiation Shielding Designs of 3GeV Synchrotron Facilities in J-PARC

中根 佳弘 施設安全グループ

1. 利用の概要(要約):

施設安全グループでは,原子力機構が高エネルギー加速器研究機構と共同で建設を進め ている大強度陽子加速器施設(J-PARC)における加速器施設の放射線遮蔽設計,放射線安 全評価を実施している.放射線による影響評価には主として簡易式が用いられるが,機器 や建屋などの構造が複雑なため簡易評価法で評価することが困難な場合も少なくない.こ のような評価を行うには,実際の施設や機器を詳細にモデル化した計算体系を作成し,こ の体系内での粒子の挙動を詳細に計算する方法(詳細計算法)を用いる必要がある.加速 器施設の評価には,主に高エネルギー粒子輸送モンテカルロコードが用いられるが,実際 の施設をモデル化するため計算体系が大きく,また厚い遮蔽体を透過する粒子の輸送計算 を取り扱うことから,十分な統計精度を得るには膨大な計算時間が必要であり,大型計算 機システムの利用は必要不可欠である.

2. 利用の内容・結果:

18 年度は、3GeV 陽子シンクロトロン加速器施設の放射線遮蔽設計及び安全評価を実施 した.高エネルギー粒子輸送計算コードとして PHITS 及び MCNPX を用い、加速器運転中 における遮蔽体透過後の線量、通路や連絡口など迷路構造からのストリーミング線量につ いて、PC クラスタを利用して計算を行った.3GeV シンクロトロン施設では、上段の加速 器であるリニアックからのビーム入射部及びその近傍の機器や、下流側の 50GeV シンクロ トロンや実験施設へのビーム出射部の機器などで比較的多くのビーム損失が局所的に起こ ることが想定されている.しかし、これらに用いられる機器の構造は非常に複雑で、簡易 評価式の適用条件を満たさないことから、信頼できる評価を行うには詳細計算法を用いる 必要がある.また、加速器が収納されたトンネルから機械室などのある建屋へ延びる迷路 構造の連絡通路等のストリーミング評価においても、建屋、通路、ダクト開口部等の構造

(形状)の複雑さから,簡易評価式による評価は困難であり,詳細計算法を用いる必要が ある.また,これらの計算では,機器や遮蔽構造の最適化,多様な線源や経路の評価に対 応するため,多くのケースの計算を行う必要があるが,大型計算機システムを利用するこ とで,多様な線源,体系に対する多くの計算を実施することができた.

評価結果の一例として,主トンネル搬入通路での迷路ストリーミング評価体系及びその 結果を,図1及び図2に示す.詳細計算法を用いた評価により,簡易計算法では困難な, 複雑な迷路構造を有するストリーミング放射線を精度良く評価することができた. 3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

18年度までに作業した3GeVシンクロトロン放射線遮蔽設計及び安全評価の結果は, 平成18年度下期に文科省に申請したJ-PARC 3GeVシンクロトロン施設の許認可申請書 における線量評価結果に用いられた.

4. 今後の利用予定:

J-PARC 施設の建設スケジュールに対応して, 今後の許認可申請及び施設の運用に必要な 放射線安全評価を継続して実施する予定.



図1 計算体系

図2 迷路ストリーミング放射線評価結果

4.4.7 耐放射線性 SiC デバイス用酸化膜の 第一原理分子動力学シミュレーション

First-Principles Molecular Dynamics Simulation of Oxide Layers for Radiation-Tolerant SiC Devices

宮下 敦巳

物質選択性セラミック材料研究グループ

1. 利用の概要(要約):

SiC半導体デバイスは、耐放射線にすぐれ高電圧・高温での動作が可能なことから、従来の半導体デバイスでは動作が困難な極限環境下で用いられる素子として期待されている所であるが、現状においては酸化膜界面に存在する界面欠陥によって、理論的に予測されるより低いデバイス特性しか実現できていない。デバイス特性を向上させるためには欠陥構造の同定が不可欠であるが、物理的測定手法から推定される界面欠陥の原子構造から電気特性を推定することは困難であるため、第一原理分子動力学法を用いて実デバイス界面を模擬するアモルファス SiO₂/SiC 界面欠陥構造を生成し、その電子構造を算出することで、界面欠陥の物理構造と電気特性との関連性を明らかにする。今回、1000 原子規模の界面原子構造モデルを用いて界面構造の生成を進めた結果、急峻な界面を持つアモルファス SiO₂/SiC 界面原子構造が生成出来た。動径分布関数や局所密度等の解析の結果、SiO₂層が良好なアモルファスとなっている事が確認できた。

2. 利用の内容・結果:

(1) 中規模界面モデルを用いた加熱・急冷計算におけるパラメータ導出

実界面を模擬する 1000 原子規模の界面モデルでの原子構造生成に先立ち、比較的計算時 間の短い 300 原子規模の界面モデルを用いて加熱・急冷計算時の加熱温度・時間に関する パラメータを導出した。先年度のパラメータ探査の結果では、終端固定条件を用いること で、4000K という高温融解条件の元でも加熱・急冷計算が収束する事を導出した。しかし SiO2 層の構造を解析した結果、たとえ急冷時に終端開放を行っても、表面に残っていた結 晶構造から再結晶化が進み、SiO2 層の半分程度しかアモルファス化が起きていない事が分 かった。そこで、原子構造の破壊を招かない温度まで冷却した後に、終端解放後に継続ア ニーリングを行う事でさらにアモルファス化を促進させる事を試みた。パラメータ探査の 結果、終端固定条件の元で 4000K、2ps の加熱の後、3500K まで冷却し、終端開放条件で再 度 3500K、2ps の継続アニーリングを行った後、室温まで冷却する事で、SiO2 層が十分にア モルファス化する事が分かった。また、継続アニーリングの終了までは界面可動 SiC 層を 2 層、それ以降の急冷時には 4 層とする事で、界面での原子混交が無い急峻界面の生成が可 能であることも分かった。

(2) 大規模界面モデルを用いた実デバイス界面模擬計算

中規模界面モデルによって求められた加熱条件の元で 1017 原子界面構造モデル(加熱・ 急冷時 693 原子)を用いて界面構造生成を進めた。加熱・急冷温度条件及び全エネルギーの 変化の状態を図1に示す。急冷条件は-1000K/psと-2000K/ps通りで行った。図2に-2000K/ps の条件で生成した界面構造の密度分布を示す。①の初期状態においては結晶構造を反映し た周期的な密度分布になっているが、②の融解終了時までに SiO2 層の周期的密度分布が崩 れランダムになっているのが分かる。③の終端開放時までは表面原子が固定されていたた め表面にピークが現れているが、④の継続アニーリング終了/冷却開始時には全層がラン ダムになっており、⑤の室温冷却後においても再結晶化による周期的密度構造は認められ ない。生成した SiO2 層の動径分布関数(RDF)を図3に示す。全原子による RDF では長周期 構造を反映した微細構造は認められず、全層が良好なアモルファス状態となっていること が分かる。部分 RDF を評価した所、Si-O 結合距離は 0.165nm であった。Si と Si の近接距 離は約 0.23nm に小さなピーク、0.305nm に大きなピークが認められる。0.23nm は Si-Si 結 合によるもので、SiO2 中に Si-Si 欠陥構造が存在する事が分かる。0.305nm は Si-O-Si 結合 でのSi間距離に相当し、Si-O結合距離の0.165nmを用いるとSi-O-Si結合角は135°である。 また、OとOの近接距離は0.268nm にピークを持ち、これを同様にO-Si-O 結合角に換算す ると109°となった。これらの値はアモルファス SiO2 の条件に適合し、このことからも、 加熱・急冷計算によって良好なアモルファス SiO2/SiC 界面構造が生成されていることが確 かめられた。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

- A.Miyashita, T.Ohnuma, M.Iwasawa, H.Tsuchida, M.Yoshikawa, "Generation of amorphous SiO₂/SiC interface structure by the first-principles molecular dynamics simulation", 6th European Conference on silicon Carbide and Related Materials (4-6 Sep 2006, Newcastle).
- T.Ohnuma, A.Miyashita, M.Iwasawa, M.Yoshikawa, H.Tsuchida, "Dynamical simulation of SiO₂/4H-SiC(0001) interface oxidation process: from first-principles", 6th European Conference on silicon Carbide and Related Materials (4-6 Sep 2006, Newcastle).
- ・宮下敦巳、大沼敏治、岩沢美佐子、土田秀一、吉川正人、「シミュレーションによるア モルファス SiO₂/SiC 界面の生成 ~第一原理分子動力学計算~」、シリコンカーバイド 及び関連ワイドギャップ半導体研究会第15回講演会、(2006 年11 月 9~10 日、高崎).
- ・大沼敏治、宮下敦巳、岩沢美佐子、吉川正人、土田秀一、「SiO₂/4H-SiC(0001)界面における熱酸化過程の第一原理分子動力学シミュレーション –炭素クラスターの形成–」、シリコンカーバイド及び関連ワイドギャップ半導体研究会第15回講演会、(2006年11月9~10日、高崎).
- ・宮下敦巳、大沼敏治、岩沢美佐子、土田秀一、吉川正人、「耐放射線性 SiC デバイス用 酸化膜の第一原理分子動力学シミュレーション」、日本原子力学会 2007 年春の年会(2007 年 3 月 27 日、名古屋).
- ・宮下敦巳、大沼敏治、岩沢美佐子、土田秀一、吉川正人、「アモルファス SiO₂/SiC 界面 構造の第一原理計算による生成 II 」、2007 年春季第 54 回応用物理学関係連合講演会 (2007 年 3 月 27 日、東京).
- ・大沼敏治、宮下敦巳、岩沢美佐子、吉川正人、土田秀一、「SiO2/4H-SiC(0001)界面におけ

る酸素解離反応の活性化エネルギー」、2007 年春季第 54 回応用物理学関係連合講演会 (2007 年 3 月 27 日、東京).

4. 今後の利用予定:

次年度以降は、得られた界面欠陥構造の電子構造を計算するとともに、今回得られた界 面構造には含まれていない、C-C 結合や C-C-C クラスター等の大きな界面欠陥構造を導入 する事で、多種多様な欠陥原子構造と欠陥準位との関係を明らかにして行く予定である。



図1 加熱・急冷温度条件と界面原子構造の全エネルギー



4.4.8 レーザープラズマ電子加速における 電子入射及び外部磁場効果についての考察

Numerical examination of electron injection and external magnetic field effect in a laser plasma accelerator

前川 陽

レーザー電子加速研究グループ

1. 利用の概要(要約):

レーザープラズマ電子加速において、電子入射及び電子加速のメカニズム解明のために 数値解析を行った。特に、外部磁場をプラズマ中に印加した場合に高指向性・安定な電子 ビームが生成されることが実験で確認されており(外部発表の項の論文参照)、その外部磁 場の効果の検証及び電子ビームの更なる高品質化のための数値解析を行った。

2. 利用の内容・結果:

外部磁場印加による電子ビームの高品質化が、外部磁場によるプラズマ初期密度分布の 変調によるものであることを数値解析の観点から確認した。外部磁場を印加した際にプラ ズマ初期密度分布が変調されることは実験でも確認されている。数値解析の結果はこの実 験結果と一致するものであり、外部磁場効果のメカニズム解明の裏付けとなるものである。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

- T. Hosokai, K. Kinoshita, A. Zhidkov, A. Maekawa, A. Yamazaki and M. Uesaka, Phys. Rev. Lett. 97, 075004 (2006)
- 4. 今後の利用予定:

今年度の利用予定なし

4.4.9 斜め照射レーザーによるプロトン生成シミュレーション

Simulation of proton acceleration by a oblique incidence laser pulse

守田 利昌

光量子シミュレーション研究グループ

1. 利用の概要(要約):

レーザーを用いたプロトン生成において、ターゲットの材質・形状、レーザー強度等の 違いにより得られるプロトンのエネルギーと品質は異なってくる。最適な条件を用いるこ とで、より高エネルギーで高品質のプロトンを生成することは、生成プロトンの利用・応 用の上で重要なことである。本検討では、MeV 級陽子の発生とその最適化に向け、高エネ ルギープロトンを得る方法の検討をシミュレーションにより実施した。ターゲットには、 重い原子の表面に水素を配置したダブルレイヤーターゲットを用いた。ダブルレイヤータ ーゲットでは比較的に高品質のプロトンを得ることが可能であることが報告されており、 このダブルレイヤーターゲットを用いて高エネルギーのプロトンを得る条件の検討を行な った。シミュレーションは、PIC 手法による3次元粒子シミュレーションコードである EM3D を用いて行ない、解析は3次元解析を実施した。本検討で対象とした問題において、 妥当なシミュレーション結果を得るには、多数の粒子を使用しかつ3次元解析とする必要 があるため、大型計算機による長時間かつ大規模な計算を実施した。

2. 利用の内容・結果:

計算は主に、並列計算機 ES40 システムの 720CPU 並列を使用して実施した。検討項目と したのはレーザーのターゲットへの入射角度と生成プロトンのエネルギーとの関係であり、 ダブルレイヤーターゲットへのレーザーの入射角度を変えた複数ケースのシミュレーショ ンを行なった(図1)。その結果、ダブルレイヤーターゲットに対してターゲットへのレー ザーの入射角度を変えることにより生成プロトンのエネルギーが変化し、ある入射角度に おいて最大のプロトンエネルギーが得られることが分かった(図2)。また、この時の生成 プロトンのエネルギースペクトルのレーザー入射角度に伴う変化についても示した(図2)。 レーザーをターゲットに対し垂直に入射したケースでは、プロトンはターゲットに垂直方 向(=レーザーの進行方向)に飛ぶこととなる。傾斜ケースにおいても生成プロトンは、 ターゲットに対してほぼ垂直方向に飛ぶが、傾斜ケースではターゲットの垂直方向に対し 少しの角度を有することがシミュレーション結果として得られた(図1)。そして、その角 度の理論式を導き理論値と計算値とが良く一致することを示した(図3)。

本結果により、レーザー加速によるプロトン生成において、ターゲットに対しある角度 でレーザーを照射することにより高いエネルギーのプロトンが得られること、そして、レ ーザーのターゲットへの入射角度を変えるだけで生成プロトンのエネルギーを変化させる ことが可能であることを示した。また、それは生成されるプロトンのエネルギーを調整す る有効な方法でもあることを示した。さらに、生成プロトンの飛ぶ方向も細かな精度で計 算が可能であることを示した。 3. 今後の利用予定:

シミュレーションを用い、高エネルギーかつ高品質のプロトンを生成する条件の調査を さらに実施する。検討項目としては、ターゲットの形状、材質、レーザー強度、レーザー 照射方法等がある。また、より高い精度のシミュレーション結果が得られるように、解析 コードの改良を合わせて実施し、計算コードとしての高精度化、高機能化を行なう。また 今後、計算結果の精度をさらに向上させるために、3次元のより大きな領域のデータで、 かつより細かいデータを使用してシミュレーションを行なって行く予定である。



図2:プロトンエネルギーとレーザー 入射角度、エネルギースペクトル図



40

4.4.10 大強度レーザーによる透明素材の誘電破壊過程の 第一原理シミュレーション

First-principle calculations for dielectric breakdown of transparent material under the intense laser field

乙部 智仁

光量子ビーム利用研究ユニット

光量子シミュレーション研究グループ

1. 利用の概要(要約):

レーザーによる固体電子励起過程はレーザー加速、表面の非熱加工、物質制御等の様々 な応用分野において最も基礎的過程である。本計算では時間依存密度汎関数法を用いた多 電子ダイナミクスの第一原理計算により固体電子の強レーザー場中でのダイナミクスと励 起過程の記述を行った。固体電子を第一原理的に解くためには非常に多くの空間メッシュ 点とブロッホの位相のサンプリングが必要である。そのため基底状態だけでなくダイナミ クスを記述するには大型計算機による大規模な計算が必要となる。

2. 利用の内容・結果:

計算は並列計算機 Altix3900 の 288 並列によって実施した。計算手法はダイアモンドのユ ニットセルを等間隔の 3 次元メッシュにより離散化し、メッシュ点上のハミルトニアン及 び波動関数を高次差分法を用いて計算する。電子応答はユニットセル中の電子流密度から 表面電荷による遮蔽効果を取り入れている。並列化はブロッホの位相について波動関数が 直行していることからブロッホ位相の違う波動関数について並列化を行った。これにより 非常に高い並列化効率が得られた。

シミュレーションはダイアモンドに対して幅 16fs のレーザーによる励起過程の計算を 行いそのレーザー強度及び振動数依存性を調べた。この計算から 7x10¹⁴ W/cm² 付近で電子 によるエネルギー吸収が急激に増加し(図1)、最終的にレーザーの反射が起こるという絶 縁破壊の特徴的応答が見られた。このとき、ダイアモンド内部の光はレーザーに対し青方 遷移を示し最終的に逆位相となることが明らかになった。またあるレーザーパラメータで はレーザー振動数と励起電子のプラズマ振動数が近くなることでプラズマ振動が誘起され ることを発見した。(図 2)

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

- ・物理学会夏季大会「強レーザー場による透明素材の絶縁破壊過程の第一原理計算」 乙 部智仁、山極満、岩田潤一、矢花一浩、中務孝、G.F.Bertsch
- ・物理学会春季大会「強レーザー場によるダイアモンドの誘電破壊の第一原理計算」乙部智 仁、山極満、岩田潤一、矢花一浩、中務孝、G.F.Bertsch

4. 今後の利用予定:

強レーザー場による電子の非線形応答である高次高調波発生についても解析を行い、固体電子非線形応答の特徴をより明らかにし、新たなX線発生の可能性についても研究を進めたい。





図1、レーザー通過後の1原子当たり のエネルギー吸収量 図 2、レーザー場(破線)と ダイアモンド中の光(実線)

4.4.11 高強度レーザーの自己組織化

Self-organized criticality of high power lasers

James Koga 光量子シミュレーション研究グループ

1. 利用の概要(要約):

Since the advent of high power short pulse lasers, there has been a renewed interest in the propagation dynamics of high power pulses in neutral gases. In our laboratory both supercontinuum generation and a total blueshift of the laser pulse, which is fixed and independent of the gas was observed. The combination of both these effects was observed for the first time experimentally. However, the propagation dynamics and light shift mechanism are not clearly understood. For the first time by directly solving Maxwell's equations and automatically including higher order gas polarization we studied the generation of plasma formation by high irradiance laser pulses propagating in neutral gases and determine the effect of initial focusing angle on the blueshift of the laser pulse. By varying the initial focusing angle we found that below a specific angle the blueshift was fixed and above the specific angle the shift changed with the initial angle.

2. 利用の内容・結果:

In an experiment involving the injection of a high irradiance laser pulse into a gas chamber carried out at the Advanced Photon Research Center (APRC) a fixed blueshift of the laser pulse was observed.

Figure 1 shows the experimental results of the spectrum, which was measured. There is a shift to shorter wavelengths when the gas pressure is above 10 Torr. This blueshift was found to occur above a threshold power dependent on the gas. Independent of the pressure and type of gas, the shift was found to be the



Fig. 1. Spectra of laser pulse in an experiment with a ultra-short laser pulse propagating in a gas chamber where the wavelength is in nm and the gas is Helium with pressure in Torr.

same. This phenomenon had not been observed previously in other experiments. The broad spectral region extending to short wavelengths, supercontinuum radiation, has been observed in experiments involving weakly focused high power lasers propagating in neutral gases and in our previous high resolution simulation results. However in these experiments in addition to the supercontinuum radiation a fixed overall blueshift of the laser pulse was observed. In these experiments there was a more strongly focused laser pulse. In other experiments where the laser pulse is very strongly focused the blueshift of the laser pulse was not fixed and depended on the propagation distance in the gas.

JAEA-Review 2007-055

We developed the code, nonlinear polarization ionization code (NOPIC), including both the finite response time, nonlinear polarization, and optical field ionization of a gas directly solving Maxwell' s equations with initial focusing of the laser pulse. The advantage of this method is that few approximations are made. The disadvantage is that much higher resolution in space and time is necessary. By using this model we can investigated for the first time in detail the dependence of the total shift of the laser pulse on initial focusing angle without envelope or other approximations. This helped to determine whether there is a critical angle below which the blueshift is fixed.

Figure 2 shows a plot of a laser pulse before and after focusing. The laser pulse length is 266fs and wavelength is 1 micron. The pulse is propagating from the left to the right with the simulation box moving with the laser pulse. There is a background neutral gas. The laser power is above that necessary for self-focusing of the laser pulse. A total of six different incident focusing angles, $\theta=\sigma/R_0$, where σ is the initial pulse spot size and R_0 is the initial radius of curvature were done. The case of weak focusing, $\theta=0.01$, is shown where (a) is



Fig. 2. Laser pulse: weak focus (a) initial and (b) final and more strongly focused (c) initial and (d) final.

the initial laser pulse and (b) is the case after the pulse has traveled past the focus point and the case of stronger focusing, θ =0.025, where (c) is the initial and (d) is after the focus point. The parameters are the same except for the initial focusing. One can see that in the case of stronger focusing the laser pulse has diverged transversely farther than in the case with weaker focusing. Above 0.01 the laser spectrum is not fixed. This indicates that there is a threshold focusing angle for blueshifting of ultra-short laser pulses propagating in neutral gases.

Figure 3 shows the spectra obtained for different incident focusing angles, $\theta = \sigma/R_0$, where σ is the initial pulse spot size and R_0 is the initial radius of curvature. The red dotted line indicates the initial laser pulse wavelength. It can be clearly seen that for $\theta < 0.01$ the blueshift is fixed and that for $\theta > 0.01$ the spectrum changes. In the stronger focusing cases plasmas



Fig. 3. Spectra of the laser pulse for different initial focusing angles: (a) small and (b) large where λ_0 is the initial wavelength of the laser.

at the focus with various densities are created, but for weaker focusing the plasma density is nearly

JAEA-Review 2007-055

the same. This indicates that there is a critical focusing angle for the blueshifing of ultra-short laser pulses in neutral gases. The existence of such a critical focusing angle has to best of our knowledge not been known or investigated up to this time. Such knowledge is invaluable for the tuning of laser pulses for various applications. The supercontinuum emission has been used in variety of applications where such ultra-broadband light is necessary, such as for material science, atmospheric science (LIDAR) or biological applications. However, the overall spectral blueshifting of such supercontinuum was not observed before our APRC experiments so it has not been applied. By verifying this fixed shifting in very large scale simulations we are able to study in detail the mechanism for this leading to the possibility that we can control not only the bandwidth, but also the central wavelength of the light. This would invaluable in many applications requiring tunable ultra-broadband light source including material science for studying surface properties, LIDAR for determining atmospheric compositions, biological science for the excitation of various transitions, laser science for the generation of atto-second pulses and laser plasma acceleration experiments requiring tunable beams for particles acceleration.

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等): なし

4. 今後の利用予定:

For the combined fixed blueshift and super-continuum generation both high resolution and a series of simulation runs will be performed. Grid sizes will range from 4800x3200 to 18000x4000 depending on whether super-continuum generation is necessary.

4.4.12 重粒子線の飛跡構造シミュレーションコードの開発

Development of the simulation code of tract structure of heavy particles

森林 健悟

光量子シミュレーション研究グループ

1. 利用の概要(要約):

量子ビーム応用研究部門では、高強度レーザーや加速器を用いて粒子線の開発、利用研 究が行われている。これらの研究をさらに発展させるにはミクロな領域での反応過程の理 解が必要と考えられる。生体に付与されるエネルギーが最も大きい Bragg peak 付近での重粒 子線のエネルギー付与の空間分布(飛跡構造)及び重粒子・生体間の相互作用から生じる二 次電子、ラジカル分子の生成量、エネルギー分布の計算を行うことを目的とする。

2. 利用の内容・結果:

(i)リチウム、及び炭素の水素分子中での阻止能計算をレート方程式、モンテカルロ法、2 通りの方法で計算し、一致することを示した。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

論文発表

(1)K. Moribayashi,

'Role of excited states of Li ions in the stopping power of molecular hydrogen',

- J. Plasma Fusion Res. Series vol.7, pp.150-153 (2006)
- (2) K. Moribayashi,

'Comparison of the stopping powers calculated by using rate equation with those by Monte Carlo method', J. Phys: Conference series, 58, pp.192-194 (2007)..

4. 今後の利用予定:

生体中で重要な水分子を標的とした炭素、酸素の飛跡構造計算を行う。

⁽ii)重粒子線の阻止能、及び、軌道を計算する並列コードの開発に成功した。

4.5 核融合研究開発部門

4.5.1 ITER装置の核解析

Nuclear Analysis of ITER

飯田 浩正

核融合中性子工学研究G r

1. 利用の概要(要約):

ITERは核融合出力500MW、総熱出力約700MWを発生するエネルギー機関で ある。このエネルギーの80%以上が中性子により運ばれ、諸機器の熱負荷となる。炉心 プラズマ周りの機器にとって主要な機器設計条件の一つとなることは勿論、炉心から離れ た超伝導コイルにおいても極めて重要な設計条件を構成し、詳細な中性子挙動解析が必須 である。また、炉停止後に作業員の近接可能性を確保するための装置内外遮蔽は、限られ た空間の中で行われる為、核分裂炉では決して要求されることが無かった極めて高い計算 精度が必要である。

上記解析は装置形状の複雑さ、ボイド開口部の多さ等から、現在ではモンテカルロ法が 唯一の解析手法であり、意義の有る結果を得る為には使用する計算機の速度が決定的に重 要となっている。また、入力作成に必要であった多大のマンパワーを無くすため、CAD 図面から自動的に形状入力を作成するプログラムが開発されつつある。その様なプログラ ムで作成された入力が十分信頼できるかどうかのテスト計算を続行中である。

2. 利用の内容・結果:

モンテカルロ法放射線輸送計算コードMCNPを用いITER装置の以下の諸量を計算 し、機器設計の熱負荷条件等の確立を目指した。将来の安全審査などを考えると統計誤差 1%以内の結果が望ましいが、計算機速度の制約から、現状では10%以下となることを 目安とした。

* 炉心廻り機器(ブランケット、ダイバータ、真空容器等)の詳細な発熱分布 * 極低温(4K)機器(超伝導コイル等)の熱負荷分布、絶縁材等の吸収線量

- *トカマク装置廻りの停止後放射線線量の分布
- *トカマク建家内外放射線分布

*トカマク装置内外機器の放射線損傷

*現場溶接部のヘリウム生成量

停止後放射線線量率の計算を精度良く計算するた、装置運転中の中性子輸送解析と停止 後の崩壊ガンマ線の解析を一遍に行う「1-step Monte Carlo 法」考案し、ITER遮蔽計算 に適用した。また、日本が開発中のCAD/MCNP自動変換プログラム"GEOMIT" を使ってITERCAD/MCNPベンチマーク問題の解析を行い、先行して開発を進め ている他極(EU、米国、中国)と同等の結果が得られ、開発が順調に進んでいることを 確認した。

- 3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):
 - 1. Hiromasa Iida, V. Ivanov, "Dose rate assessment outside the Neutron Test Area Neutron source intensity vs. Wall thickness ", NAG-264-NTA, Sep. 2006
 - 2. Hiromasa Iida, L. Lu, Y. Wu "Nuclear Analysis of the Port Limiter and Neutron Flux Monitor in the Equatorial Port -An example of MCAM application to ITER design calculation-", NAG-265-port limiter, Jan. 2007
 - Hiromasa Iida, "Application of MCAM in generation of MCNP model for the ITER port limiter ", Progress review Meeting on Neutronics Analyses for ITER, 26 – 27 March 2007, L'Amphithéâtre, Le Château de Cadarache
 - 4. Hiromasa Iida, "Calculation results for ITER benchmark problem using input data converted with the "GEOMIT" code", Progress review Meeting on Neutronics Analyses for ITER, 26 – 27 March 2007, L'Amphithéâtre, Le Château de Cadarache

4. 今後の利用予定:

ITERの将来の機器設計の変更に伴う解析、あるいは安全審査対応の解析は、フランス CEA の計算機等を主体として行うことになると予想されるが、カダラシュ研究所ITE R国際チームにおける核解析計算システムは整備中であり、場合によっては JAEA の計算 機群が引き続き必要とされる場合もあると予想される。

4.5.2 核データライブラリ検証のための核融合ベンチマーク実験解析

Analysis of Fusion Benchmark Experiments for Validation of Nuclear Data libraries

今野 力

核融合中性子工学研究グループ

1. 利用の概要(要約):

一般に、原子力施設の核設計結果の品質保証は、使用される計算コード(含むモデル化)、 核データライブラリの精度で決まり、これまでも計算コード、核データライブラリの妥当 性検証が行われてきた。近年、国際熱核融合実験炉ITERにおいても、核設計結果の品質保 証についての議論が進められており、コード、核データライブラリの選定が行われ、その 妥当性検証がITER参加各極で行われている。本研究では、日本のITER活動の一つとして、 選定された核データライブラリの妥当性検証及びその改訂のために、これまでに原子力機 構核融合中性子源FNSで実施した様々なベンチマーク実験の解析を行った。

2. 利用の内容・結果:

ITER の核設計では標準核データライブラリとして 2004 年に IAEA から公開された FENDL-2.1 が選定されているが、これまで十分な妥当性検証は行われていなかった。そこ で、FNS で実施した鉄、銅、タングステン、炭素、ベリリウム、酸化リチウム、シリコン カーバイド、SUS316 等の体系内実験(中性子・y線スペクトル、反応率、y発熱率等を測 定)、漏洩中性子スペクトル測定実験の解析を FENDL-2.1 で実施した。また、FENDL の旧 バージョン FENDL-1.0、FENDL-2.0 を用いた解析も行い、FENDL-2.1 が、旧バージョンと 比べ良くなっているかどうかも調べた。更に、近年、日本、アメリカ、ヨーロッパで新し い核データライブラリ JENDL-3.3、ENDF/B-VII.0、JEFF-3.1 が公開されており、これらを 用いた解析も行い、FENDL-2.1 の改訂に向けた研究も行った。

解析コードは ITER の核設計の標準コードとして選定されたモンテカルロコード MCNP4C を用いた。MCNP4C で使用する ACE ファイルは、FENDL は IAEA が提供したも の、JENDL-3.3 は原子力機構が提供したものを用いた。また、ENDF/B-VII.0、JEFF-3.1 の ACE ファイルは NJOY99.161 コードを用いて独自に作成したものを用いた。

本研究の結果、多くの核種で、FENDL-1.0 や FENDL-2.0 と比べ、FENDL-2.1 を用いた解 析が実験を良く再現できることがわかった。また、核種によっては(バナジウム、シリコ ン、鉄等)、ENDF/B-VII.0、JEFF-3.1 を用いた解析の方が FENDL2.1 を用いた解析より実験 との一致が良くなっていることもわかり、今後、FENDL の改訂に向けて有益な情報を得る ことができた。

- 3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):
 - (1)Kentaro Ochiai, Satoshi Sato, Masayuki Wada, Chikara Konno, "Analyses of Benchmark Experiments at FNS with Recent Nuclear Data Libraries", 核データ研究会, January 2007
 - (2)Chikara Konno, "Analyses of fusion integral benchmark experiments at JAEA/FNS with FENDL-2.1", Progress review Meeting on Neutronics Analyses for ITER, 26 – 27 March 2007, L'Amphithéâtre, Le Château de Cadarache
 - (3) 2007 年 10 月に開催される国際会議 ISFNT-8 で口頭発表予定。
 - (4)本研究の成果を 2007 年度の JAEA-Data/Code にまとめる予定。

4. 今後の利用予定:

実験と解析の一致が悪い核種について、その原因を調べる研究を行うとともに、MCNP 以外の ITER で選定された計算コード(例えば TRIPOLI)を用いた解析を行うことを計画 している。

4.5.3 トカマクプラズマの自由境界 MHD モードの 3 次元シミュレーション

3D simulation of free-boundary MHD modes in tokamak plasmas

影井 康弘

プラズマ理論シミュレーショングループ

1. 利用の概要(要約):

核融合開発の磁気流体(MHD)安定性の研究では、自由境界条件下に現れる不安定モード、即ち、プラズマとその外側を取り囲む真空との相互作用に基づく不安定モードのダイ ナミクスが重要視されている。本研究課題では、数値トカマク実験(NEXT)研究の一環と して、トカマクプラズマの自由境界 MHD モードの挙動を初期値問題として解析するため の3次元シミュレーションコードを新たに開発し、不安定モードの一つである外部キンク モードの時間発展のシミュレーションを実現した。初期値問題を解く本コードは、固有値 問題を解く旧来の MHD 安定性解析コードでは困難な回転プラズマの解析に対しても適用 可能であり、プラズマ理論シミュレーショングループが推進している"流れ"を含むプラ ズマの安定性解析を目指すためのものである。計算手法については、ポロイダル断面に対 して非構造格子の有限体積法を、トロイダル方向に対してスペクトル法を利用した流体コ ードである。開発コードによる解析結果の妥当性を検証するために、大規模計算を複数の パラメータケースについて実行する必要があり、大型計算機の処理能力が必須であった。

2. 利用の内容・結果:

開発コードによる解析結果の妥当性を検証するために、旧来の線型安定性解析コード ERATOと同一配位による外部キンクモードの時間発展の3次元シミュレーションを実行し た。図1は、アスペクト比A=3.3、ベータ値 β_N =0.001、安全係数q(0)=1.1、q(a)=1.8、壁位置 r_w/a=1.5、プラズマ電気抵抗 η (0)=9×10⁻⁶、真空電気抵抗 η_v =1の配位でのシミュレーション結 果であり、時間 t/τ_A =250におけるトロイダルモード数n=1の磁場揺動の構造を表している。 m/n=2/1 (mはポロイダルモード数、nはトロイダルモード数)の外部キンクモードの成長 が現れていることが確認できる。また、このときの不安定モードの線型成長率を、ERATO コードと比較したものを図2に示す。今回開発したInitial-value MHD コードの結果は、導 体壁による外部キンクモードの安定化効果を示しており、安定化に必要な壁位置は、ERATO コードによく一致している。一方、成長率の絶対値は両コードで一致せず、真空部の密度 とプラズマ密度が同じ場合 (ρ_v/ρ_0 =1)の解析では、2/3程度である。これは、真空部を低温 プラズマで表現する本コードでは、真空部に有限の運動エネルギーが含まれることによる。 しかしながら、真空部が低密度 (ρ_v/ρ_0 =0.1)の計算では、その寄与は小さくなることが確 かめられ、充分低密度の計算では、両者は一致することが期待される。

- 3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):
 - Y. Kagei, Y. Kishimoto, and T. Miyoshi, "Free boundary simulations of MHD instabilities with a finite volume based full-MHD code", The 48th Annual meeting of the APS Division of Plasma Physics, Philadelphia, USA, Oct. 30-Nov. 3 2006.
 - Y. Kagei, Y. Kishimoto, and T. Miyoshi, "Development of a finite-volume-based full-MHD code for internal and external MHD instabilities", The 11th Workshop on Active Control of MHD Stability, Princeton, USA, Nov. 6-8 2006.
 - ・影井康弘、岸本泰明、三好隆博、"有限体積法 full-MHD コードによる自由境界 MHD シ ミュレーション"、第 23 回プラズマ・核融合学会年会、つくば市、平成 18 年 11 月 28 日-12 月 1 日.
 - Y. Kagei, S. Tokuda, and T. Miyoshi, "Simulation of external MHD modes in a tokamak plasma by a finite volume method code", US-Japan JIFT Workshop on Progress of Extended MHD Models, Toki, Japan, March 26-27, 2007.

4. 今後の利用予定:

低温プラズマで擬似的に表している真空部の密度を低密度にし、より現実に近いモデル での解析を実行する計画である。



図1. 磁場のモード構造図2. 外部キンクモードの成長
率の壁位置依存性

4.5.4 ランダウ流体モデルによるイオン乱流輸送の研究

Study of ion turbulent transport based on a Landau-fluid model

宮戸 直亮

プラズマ理論シミュレーショングループ

1. 利用の概要(要約):

核融合プラズマにおけるイオン系内部輸送障壁の形成機構の解明のため、およびイオン 乱流輸送の制御を目指して、ランダウ流体モデルによるイオン温度勾配駆動乱流のグロー バルシミュレーションを行った。このようなグローバルシミュレーションでは、イオンの 回転半径程度の微視的スケールから、装置サイズの巨視的スケールまでの広い時間・空間 スケールでの非線形計算が必要で、原子力機構のJT-60U装置などの大型トカマクを想定し たパラメータでのシミュレーションには大型並列計算機の利用が不可欠となる。

2. 利用の内容・結果:

原子力機構のJT-60Uなどのトカマクプラズマでは、安全係数がプラズマ中心以外で最小 値をとる反転磁気シアトカマクの安全係数が最小となる半径付近で、プラズマの熱・粒子 輸送の局所的な減少、いわゆる内部輸送障壁の形成が観測されている。昨年度、小さなサ イズの反転磁気シアトカマクでのシミュレーションを行った結果、安全係数が低い場合に 安全係数最小面付近で乱流輸送の減少が見られた。しかし、プラズマサイズが小さいため 非局所効果が強く、乱流輸送が減少する位置については曖昧さが残った。そこで本年度は JT-60U 装置などの大型トカマクに相当するサイズでの反転磁気シアトカマクプラズマのシ ミュレーションを行い、安全係数最小面ではなく、その近傍にある、モード数が(m, n)=(1, 0) (m はポロイダルモード数、n はトロイダルモード数)の磁力線に平行な音波の周波数が 最大となる場所で乱流輸送が減少することを明らかにした(図1、2)。また、天下り的に 与えた圧力分布で駆動される乱流ではなく、加熱によって作られたイオン温度勾配によっ て駆動される乱流のシミュレーションも行った。計算は主に Altix3700Bx2 システム 128CPU を用いて行った。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

- 1) N. Miyato, Y. Kishimoto and J. Q. Li, "Zonal flow and GAM dynamics and associated transport characteristics in reversed shear tokamaks," J. Plasma Phys. **72**, pp.821-824 (2006).
- N. Miyato, Y. Kishimoto and J. Q. Li, "Nonlocal behaviour of zonal flows in tokamak plasmas," Plasma Phys. Control. Fusion 48, A335-A340 (2006).
- N. Miyato, Y. Kishimoto and J. Q. Li, "Interplay between zonal flows/GAMs and ITG turbulence in tokamak plasmas," 21st IAEA Fusion Energy Conference, Chengdu, China (October 16-21, 2006).
- 4) Y. Kishimoto, K. Miki, N. Miyato, J. Q. Li and J. Anderson, "Turbulent transport associated with GAM dynamics near critical gradient regime," 21st IAEA Fusion Energy Conference, Chengdu, China (October 16-21, 2006).

5) 宮戸直亮、岸本泰明、李継全、"加熱駆動の ITG 乱流シミュレーションによるトカマク プラズマ中の乱流輸送の研究"、第6回核融合エネルギー連合講演会、富山国際会議場 (2006年6月13日-6月14日)

4. 今後の利用予定:

これまでは磁場揺動を無視した静電近似でのシミュレーションだったが、経済性に優れ る高プラズマ圧力/磁気圧力比のプラズマでは磁場揺動の効果を無視できないので、磁場揺 動を含めた微視的イオン乱流のグローバルシミュレーションを行う予定である。







図2:各安全係数分布におけるイオンの熱輸送係数の分布 (赤:大きなプラズマサイズ、黄緑:小さなプラズマサイズ)。 矢印は(m, n)=(1, 0)の磁力線方向のイオン音波の周波数が最大となるところ。

4.5.5 保存型ジャイロ運動論的ブラゾフコードの開発

Development of conservative gyrokinetic Vlasov code

井戸村 泰宏

プラズマ理論シミュレーショングループ

1. 利用の概要(要約):

トカマク乱流における輸送障壁形成や乱流遷移現象といった過渡的乱流現象を研究する ために、乱流の時間スケールに比べて長い時間スケールの乱流輸送と分布形成の相互作用 を取り扱える長時間乱流シミュレーションが必要とされている。このような長時間の第一 原理乱流シミュレーションを実現する上で、誤差の蓄積が少ない保存型数値スキームによ って粒子・エネルギー保存といった第一原理を維持することが極めて重要になる。今回、 新しい保存型数値スキームを開発し、それをトカマク乱流の第一原理モデルである5次元 ジャイロ運動論モデルに適用することにより、従来のトカマク乱流シミュレーションに比 べて極めて高精度に第一原理を維持するプラズマ乱流シミュレーションの開発に成功した。 これによって、長時間トカマク乱流シミュレーションの見通しが得られた。

2. 利用の内容・結果:

ジャイロ運動論モデルに基づくトカマク乱流の第一原理シミュレーションには、5次元位 相空間(空間3次元+速度2次元)における粒子分布関数fを粒子で表現する粒子コード および格子で表現するブラゾフコードという2つの計算手法が存在する。このうち、ブラ ゾフコードは計算コストが大きいというデメリットがあるが、熱・粒子源や粒子衝突効果 といった実験の状況に近い開放系の物理効果の拡張性に優れており、特に、先進トカマク 実験で観測される輸送障壁のような分布形成あるいは乱流遷移現象の長時間乱流シミュレ ーションの実現には必要不可欠であり、その重要性が高まっている。こういった背景から ブラゾフコードの開発を進めてきたが、これまでに用いていた数値スキーム(CIP法)では粒 子数やエネルギーの保存が数値誤差の蓄積によって破れてしまうために長時間シミュレー ションが困難であった。このような問題を回避するには、有限体積法に代表される保存型 の数値スキームが有効であるが、従来の保存型数値スキームでは、高温核融合プラズマの ような散逸効果の小さい流体現象を取り扱う際に、数値的振動によってスキームが不安定 になるという問題があった。本研究では、f と f²を同時に保存することにより数値的振動 の振幅を制限し、fの保存と数値的な安定性を両立する新しい保存型数値スキームをジャイ ロ運動論方程式に対して開発し、保存型ブラゾフコードを開発した。スラブ配位イオン温 度勾配駆動(ITG)乱流シミュレーションにおける従来の粒子コードとの詳細なベンチマー クから、1. 乱流の非線形発展の初期段階までは粒子コードと保存型ブラゾフコードの結 果は完全に一致すること、2. 保存型ブラゾフコードでは長時間の非線形発展においても 粒子数を厳密に保存し、かつ、エネルギー保存の蓄積誤差も極めて小さいことを確認した (図1)。この保存型ブラゾフコードにより、ロバーストかつ高精度な長時間乱流シミュレ ーションを行う見通しが得られた。



図1:(a)従来の粒子コードと(b)新しい保存型ブラゾフコードを用いて行ったスラブ配位イ オン温度勾配駆動(ITG)乱流におけるエネルギー変化の時間発展の比較。乱流場のエネル ギーとプラズマの運動エネルギーの変化が釣り合って全エネルギーが保存しなくてはな らないが、(a)では時刻40以降にエネルギーの誤差の蓄積が増大している。(b)ではエネル ギーの保存が長時間保たれている。また、粒子数も厳密に保存している。(CIP法による ブラゾフコードの計算結果も(a)と同様の誤差の蓄積を示す。)

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

- [1] "Self-organization in electron temperature gradient driven turbulence", Y. Idomura, Phys. Plasmas. 13, 080701 (2006).
- [2] "Kinetic simulations of turbulent fusion plasmas", Y. Idomura, T.-H. Watanabe, and H. Sugama, Comptes Rendus Physique 7, pp.650-669 (2006).
- [3] "Conservative gyrokinetic Vlasov simulation", Y. Idomura, M. Ida, and S. Tokuda, Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul., in press (2007).
- [4] "Kinetic simulations of electrostatic plasma waves using Cubic-Interpolated-Propagation scheme", M. Lesur, Y. Idomura, and S. Tokuda, JAEA-Research, 2006-089 (2007).
- [5] "Conservative gyrokinetic Vlasov simulation using Morinishi scheme", Y. Idomura, M. Ida, S. Tokuda, and L. Villard, 33rd EPS Plasma Physics Conference, Rome, Italy, 2006, O3.004 (oral).
- [6] "Large scale simulations of turbulent fusion plasmas", Y. Idomura, International Supercomputer Conference 2006, Dresden, Germany, 2006 (invited).
- [7] "New conservative gyrokinetic Vlasov code and its comparison to gyrokinetic δf particle-in-cell code", Y. Idomura, M. Ida, S. Tokuda, and L. Villard, Vlasovia2006, Florence, Italy, 2006 (oral).
- [8] "Conservative gyrokinetic full-f Vlasov simulation", Y. Idomura, M. Ida, S. Tokuda, and L. Villard, JIFT Workshop on "Gyrokinetic Simulation of Ion and Electron Temperature Gradient-Driven Transport", San Diego, USA, 2007 (oral).
- [9] "保存系ジャイロ運動論的ブラゾフコードの開発"、井戸村泰宏、井田真人、徳田伸二、 Laurent Villard、プラズマ・核融合学会第23回年会、2006年11月28日、つくば

4. 今後の利用予定:

今回の成果によりブラゾフコードによる長時間トカマク乱流シミュレーションの可能性 が見えてきた。今後はコードのトーラス配位への拡張を進めると共に、熱・粒子源や粒子 衝突効果といった開放系の物理効果の実装を進める。また、トーラス配位においてもブラ ゾフコードと従来の粒子コードのベンチマークを行い、コードの妥当性検証を進める。
4.5.6 ジャイロ流体モデルによる多スケール乱流シミュレーション

Multi-scale turbulence simulation based on gyro-fluid

岸本 泰明

プラズマ理論シミュレーショングループ

(京都大学)

1. 利用の概要(要約):

本研究課題は、時空間スケールを限定した従来の単一階層的な輸送解析を多階層に拡張 することによりトカマク輸送の複雑現象を解明することを目的としている。具体的には、 ジャイロ流体モデルをベースに、セミマクロスケールのイオン系とミクロスケールの電子 系の双方を包含する幅広いダイナミックレンジのシミュレーションを実現し、乱流間の直 接相互作用や帯状流や対流渦などを介した間接相互作用、また、臨界勾配近傍での間欠的 な輸送過程や遷移現象など素過程を明らかにする。これらは、高性能プラズマ実現に不可 欠な輸送制御の理論基盤を与えるものである。本研究は、原子力研究機構と京都大学との 共同研究で実施された。

2. 利用の内容・結果:

平成18年度は、トカマクプラズマの多階層シミュレーションとして、原研の宮戸等によって開発されたトロイダル配位のグローバルなジャイロ流体コード[1]を用いて、"Dimits Shift"と呼ばれるイオン温度勾配モードの臨界勾配の領域における乱流過程の詳細に関してシミュレーションを実施した。臨界勾配領域はモードの線形成長率が低く、また、様々な状態(輸送レベルの高い乱流状態や輸送が抑制される帯状流状態など)が混在することから、長時間かつ高精度のシミュレーションを行う必要がある。この結果、これまでの静的な帯状流プラズマに加えて、GAM (Geodesic Acoustic Mode)の励起と伝播を伴った新しい間欠現象を発見し、これを GAM 間欠性と命名した。Fig.1 は温度勾配に対する輸送係数を示し、■ は準線形理論から評価した熱輸送係数、

●は非線形シミュレーション結果に対応する。非 線形シミュレーションでは線形の臨界勾配が上方 に変位している様子(Dimits shift)が分かる。Fig.2 は、Fig.1 における(a)-(d)の温度勾配に対応する乱 流、帯状流、m/n=1/0の圧力揺動を示している。 Fig.2(b)(c)及び Fig.3 (Fig.2(c)の拡大)から分かる ように、温度勾配の上昇に伴って輸送は間欠的と なり、またその過程で静的な帯状流が緩やかに発 達し、最終的に乱流を抑制することが明らかになった。シミュレーションの詳細な解析から、この 間欠性は、GAMの無衝突減衰に起因することが示 された。また、乱流から励起される GAMは、Fig.4 で示されているように、径方向に伝播・減衰し、



Fig.1 Ion heat diffusivity as a function of $R/L_{\rm P}$. Square and circle symbols represents those estimated by the mixing length and by nonlinear simulation. (a) $R/L_T=3.75$ and (b) R/LT=4.3 correspond to just above linear and nonlinear critical gradient.

乱流のエネルギーを幅広いプラズマ領域に静的な帯状流のエネルギーとして伝達している ことを見出した。





Fig.2 Temporal evolution of E_{turb} , E_{ZF} , and E_{GAM} for different case of R/LT, i.e. (a) 3.75, (b) 3.83, (c) 4.05, (d) 4.3, respectively, which correspond to those in Fig.1.

Fig.3 Zoomed version of Temporal evolution of E_{uubr} , E_{ZF} , and E_{GAM} in the case of Fig.2 (c) for the time interval (c)-I (2300<t<3400) and (c)-II (2800<t<3200)



Fig.4 Temporal evolution of (a) turbulence energy E_{turb} (b) zonal flow energy E_{ZF} and (c) p_{10} pressure perturbation energy E_{GAM} as a function radius in the case of $R/L_P = 3.83$ corresponding to Fig.2(b). The time interval 4100<t<4700 corresponds to single burst. The time interval marked by (*) corresponds to that of abrupt growth of GAM.

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

Y. Kishimoto, K. Miki, N. Miyato, J.Q. Li, J. Anderson (on Oct.21, 2006)
"Turbulent transport associated with GAM dynamics near critical gradient regime" (on October 21, 2006) (PD2: oral presentation), 21st IAEA Fusion Energy Conference, October 16 (Mon.)-21(Sat.), 2006

- K. Miki, Y. Kishimoto, J.Q. Li, N. Miyato, Intermittent transport associated with geodesic acoustic mode near critical gradient regime, accepted for publication in Physcal Review Letters, September, 2007.
- ・岸本泰明:「臨界勾配近傍の輸送ダイナミックス」(H18 年 11 月 8 日)、平成 18 年度核融 合科学研究所共同研究会「核燃焼プラズマ閉じ込め特性の理解に向けたトロイダルプラ ズマ閉じ込め・輸送の包括的研究」、平成 18 年 11 月 8 日(水)-26 日(木)、核融合科学研 究所
- Y. Kishimoto, K. Miki, J.Q. Li, J. Anderson, "Turbulent dynamics associated with GAM and zonal flow near critical gradient - Gyro-fluid simulation and GAM intermittency - "JIFT workshop on "Gyrokinetic Simulation of Ion and Electron Temperature Gradient-Driven Transport: Physics Mechanisms Behind the Transport Coefficient, January 10(Wed.)-12(Fri.), 2007, University of California, San Diego, SERF Building, CASS Room 329
- ・岸本泰明:「乱流輸送における多階層ダイナミックスと理論・シミュレーションの役割」
 「プラズマ・核融合研究における High Performance Computing ワークショップ」および
 「大型シミュレーション 研究会」合同研究会、平成 19 年 1 月 23 日(火)-1 月 24 日(木),
 核融合科学研究所(土岐市)、管理棟 4 回第 1 会議室
- Y. Kishimoto, K. Miki, N. Miyato, J.Q. Li, J. Anderson, "Turbulent transport with zonal flow and GAM near critical gradient" (on March 26, 2006) (Invited presentation), 3th IAEA Technical Meeting on "theory and plasma instabilities", March 26 (Mon.)-28(Wed.), 2007, University of York, United Kingdom

4. 今後の利用予定:

臨界勾配近傍ではモードの成長率が極めて小さいことから、本シミュレーション研究は、 選択する乱流を単一のトロイダルモードで限定して行った。今後、トロイダルモードを十 分に選択したシミュレーションを実施し、GAMの空間伝播機構やGAM間欠現象の剛健性、 または加熱過程を考慮した臨界勾配交差など、本研究で発見したGAM間欠現象の詳細な 研究を実施する。

4.5.7 輸送-MHD 統合 ELM シミュレーション

Integrated ELM simulation based on transport and MHD

林 伸彦、小関 隆久 トカマク解析グループ

1. 利用の概要(要約):

燃焼プラズマは、様々な時空間スケールの物理現象が複雑に絡み合っており、燃焼プラ ズマの予測及び制御のためには、この複雑物理現象を含んだシミュレーションコードの開 発が必要である。本研究は、燃焼プラズマ統合コード開発の一環として、プラズマの境界 領域で起こる不安定性(Edge Localized Mode)のモデルを開発し、ELM がプラズマ性能に 与える影響を調べ、ELM の制御手法を明らかにすることを目的とする。昨年度は、燃焼プ ラズマ統合コードの中核となるトカマクプラズマ輸送コード TOPICS と磁気流体(MHD) 安定性解析コード MARG2D の統合計算機能を開発した。本年度は、TOPICS と周辺プラズ マ簡易モデルを統合し、ELM に対する周辺プラズマの影響の解析を可能とした。統合計算 では、TOPICS はシングル CPU の計算機で実行し、MARG2D は Altix 及び Prism システム で並列計算させる。統合シミュレーションにより、実験で観測され発生機構が未解明だっ た ELM によるエネルギー損失の衝突周波数依存性が、自発電流と周辺プラズマの磁力線方 向輸送に起因することを解明した。

2. 利用の内容・結果:

ELM モデルでは、TOPICS+周辺プラズマ簡易モデルにより計算したプラズマの時間発展 分布の各時刻の安定性を MARG2D により計算し、不安定性が起きた場合には輸送を増加さ せて ELM による崩壊現象を模擬する。TOPICS+周辺プラズマ簡易モデルは、シングル CPU で実行し計算機負荷は少なく、トカマク解析グループ所有の計算機で実行する。しかし、 MARG2D は、並列計算が必要になり、TOPICS の時間発展シミュレーションの各時刻に実 行する必要があり計算機負荷が大きく、大型計算機(Altix 及び Prism システム)を利用し た。以上の統合コード TOPICS+周辺プラズマ簡易モデル+MARG2D の解析結果を得る為に は、長期間に渡り、大量の Job 投入を行う必要が有る。この統合シミュレーションにより、 ELM によるプラズマの崩壊過程において周辺プラズマの温度上昇が ELM エネルギー損失 を抑制する(図1)ことを明らかにした。さらに、実験で観測され発生機構が未解明だっ た ELM エネルギー損失の衝突周波数依存性を再現(図2)し、衝突周波数依存性が自発電 流と周辺プラズマの磁力線方向輸送に起因することを解明した。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

- T. Ozeki, et al., "Integrated Simulation Code for Burning Plasma Analysis", Fusion Sci. Tech.
 50 (2006) pp.68-75.
- (2) N. Hayashi, et al., "Integrated simulation of ELM energy loss determined by pedestal MHD and SOL transport", 21st IAEA Fusion Energy Conference, Chengdu China, 16-21 Oct. 2006, Nucl. Fusion 47 (2007) pp.682-688.

- (3) 林 伸彦、他、「SOL-ダイバータプラズマの動的応答を考慮した ELM 崩壊シミュレー ション」、プラズマ・核融合学会年会、11月28-12月1日、筑波大
- (4) T. Ozeki and JT-60 Team, "High-beta steady-state research with integrated modeling in the JT-60 Upgrade", 48th Annual Meeting of the Division of Plasma Physics, Philadelphia USA, 30 Oct.-3 Nov., Phys. Plasmas 14 (2007) 056114.
- (5) N. Hayashi, et al., "Integrated Simulation of ELM Crash with Dynamic Response of SOL-Divertor Plasmas", 3rd IAEA Technical Meeting on the Theory of Plasma Instabilities, 26-28 March 2007, York U.K.
- 4. 今後の利用予定:

現状の TOPICS+周辺プラズマ簡易モデル+MARG2D 統合シミュレーションでは、密度の ダイナミクスを考慮していない。ELM 崩壊において密度ダイナミクスは中性粒子のリサイ クリングと強く結びついているので、密度ダイナミクスを自己矛盾なく考慮するためには、 TOPICS と周辺プラズマモデルの中性粒子モデルを統合化する必要がある。今後、統合シミ ュレーションモデルを改良して、より現実的な ELM シミュレーションを行う予定である。



図1:ELM崩壊時の電子温度分布変化。 p<1 にあるペデスタルプラズマが崩 壊し、エネルギーがp>1に掃出され、 周辺プラズマの温度が急激に上昇す る。その結果、エネルギー損失が抑制 されている。



図2:ELM によるエネルギー損失の衝突周波数依存性

4.5.8 トカマク周辺理想 MHD モードの安定性解析

Stability Analysis of Ideal MHD Modes in Tokamak Edge Plasmas

相羽 信行 トカマク解析グループ

1. 利用の概要(要約):

JT-60UやITERなどに代表されるトカマク型磁場閉じこめ装置におけるプラズマの閉じ 込め性能に大きな影響を与える周辺局在理想 MHD モードの安定性に関する数値解析を行 った。この数値解析で用いた数値コードはトカマクプラズマの軸対称性(トロイダル方向 にフーリエ展開した各モードは直交している)を利用して解くべき方程式の簡略化を行っ ているため、単一のトロイダルモード数を持つ MHD モードの安定性解析は高速に行える が、トカマク周辺領域において不安定化する MHD モードのトロイダルモード数は 1~50 程度の範囲に存在すること以上の特定が困難であるため、数値計算によってこの範囲の MHD モードの安定性をすべて調べる必要がある。さらに、トロイダルモード数の大きい MHD モードの解析にはより高精度の計算が求められるため計算で用いるメッシュ数など が増加し、それに伴い計算に必要なメモリも増加していく(例:トロイダルモード数が 30 の場合、メモリ使用量は約 30GB)。これらのことから、大型計算機を用いた並列計算によ って数値解析を行うことが必要となる。

2. 利用の内容・結果:

計算は主に、大型計算機 Altix3700Bx2 および大規模可視化サーバーVSL3000 を利用した 32CPU 並列によって実施した。計算は、トロイダル方向にフーリエ展開をした線形理想 MHD 方程式から得られる 2 次元 Newcomb 方程式の随伴固有値問題を、有限要素法および 逆べキ法を用いて解いている。

本計算は線形解析であるため、一つの MHD 平衡に対してトロイダルモード数の異なる 複数 MHD モードの安定性解析を行う必要があると同時に、複数の MHD 平衡について同様 に安定性解析を行うことで、研究対象である周辺局在理想 MHD モードの安定性の定性的・ 定量的な評価を行い、同 MHD モードを安定化する上で有効な物理パラメータの同定を行 っている。

平成18年度の計算結果を用いた成果としては、トカマク周辺 MHD モードを安定化さ せる方法として MHD 平衡の上部形状の尖鋭化が有効であることを明らかにした。またこ の安定化の原因が、形状の尖鋭化によりプラズマ上部の局所磁気シアが増大することによ りプラズマ圧力による不安定化効果が軽減されることであることを示した。

- 3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):
 - 1) N.Aiba et al., "Effects of 'sharpness' of the plasma cross-section on the MHD stability of tokamak edge plasmas", Nucl. Fusion 47, pp.297-304 (2007).
 - 2) N.Aiba et al., "Numerical Method for the Stability Analysis of Ideal MHD Modes with a Wide Range of Toroidal Mode Number in Tokamaks", Plasma and Fusion Res. 2, 010 (2007).
 - 3) 併⊪2印 に 倪 ゃ ≪ 「 い Xo ヽ ト K ↑ い X 1 K @ @ ≥ 儉 二 @ 俎% ス ~ い iv ↔ kt 歴 ☆ 2日@
 * m e/ % ス 乜 偌 Ē 仁 ¹ ゃ 俵・ Ê ¦ 嗄ま Ⅱ ↓ ト VШK 困まね☆ D @ 鄂(土)@v 2006 削 6 13 k 14 到
 - N.Aiba et al., "Effects of 'sharpness' of the plasma cross-section on the MHD stability of tokamak edge plasmas", 21st IAEA Fusion Energy Conference (Chengdu, China) 2006/10/16k 21.
 - 5) 併 2 細に 梲 ※ 俳 ⊋ 儴 o ⁺, 吃 C ボ 番 佛 MHD 1 K @ @ 市 ☆ ≥ 儉二 ⑧ 仁 ^{*} □ 召 ® … 噔 b ELM ⑧ 仁 Z ® ⑨ 嗩 ¹ ※ 俵 23 ⑨ ~ ¼ iv ↔ ┆ 嗄ま┓ ⑨ 削 ⑨ ㎡ 俒 ね ≉ @ 健 剰 @ ŵ 2006 削 11 • 28 到 k 12 • 1 到

4.今後の利用予定:

● £快£ D V ↔ IX⁺,吃 MHD ± K ⊕ ℚ ≥ 儉(18)[®] 喧] No.双璠↗ ♀ ↓ K ix Q 句ぬ嚚 Q 冶儉
 % に=兆 SQ 乜偌 色仁% に= Ҍ Ҍ ℮ ® ゃ JT-60U ® ¢ + £ + 侘% 7 £ + ↓ ELM F 劼些℃£
 + ↓ ⑦ ⑤ ┃ 13.ℚ 色仁%に = 光 S ® 嘽嗩% ↓ № Ҍ % ✿(u)℃£ + ↓ Ŋ

4.5.9 新古典ティアリングモード磁気島内での 電子サイクロトロン電流駆動の数値シミュレーション

Numerical Simulation of Electron Cyclotron Current Drive in NTM Magnetic Island

濱松 清隆

トカマク解析グループ

1. 利用の概要(要約):

トカマク・プラズマ内部に発生する電磁流体不安定性の1つである新古典ティアリング モード(NTM)は入れ子状の磁気面を破壊し,島状の磁気面(磁気島)を作ることにより,プラ ズマの密度と温度を低下させる.NTMの安定化には電子サイクロトロン周波数帯の電磁波 (EC 波)による,磁気島内部での電流駆動(ECCD)が有効であることが実験で確かめられてい る.ITERにおいても,ECCDによるNTMの安定化が検討されている.ここでの重要検討 課題の1つは,必要とされるEC 波の入射パワー,即ち,電流駆動効率(=駆動電流量/入射 パワー)の評価である.磁気島がない場合の電流駆動効率は、磁気面平均した

Fokker-Planck(BAFP)方程式の数値解析による評価が容易であるが、磁気島がある場合には このような数値解法は確立されていない.そこで、磁気島がある磁場配位中での電子の運 動を数値シミュレーションした.具体的には、電子の運動方程式を数値積分し、背景プラ ズマとの Coulomb 衝突と EC 波による加熱を Monte-Carlo 法で模擬した.

2. 利用の内容・結果:

本研究の数値シミュレーションはテスト粒子問題である.即ち,テスト電子間の相互作 用を無視しているので,PC クラスタ A システムを利用した.

最初に、磁気島がない場合のシミュレーションを行った。駆動電流は入れ子状の磁気面 の全体に広がり、BAFP 方程式による評価と矛盾のないことを確認した.磁気島がある場合 には、駆動電流は磁気島内部に閉じ込められるように流れること、即ち、磁気島はトロイ ダル方向へヘリカル対称であるので、駆動電流もヘリカル配位を形成することが分かった. そして、EC パワーの増加とともに電流の局在性が改善され、駆動効率も上昇することが分 かった.

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

濱松清隆, 滝塚知典, 林伸彦, 小関隆久,

「NTM 磁気島における EC 波電流駆動の数値シミュレーション」, 第 23 回プラズマ・核融合学会年会,筑波大学大学会館,2006 年 12 月 1 日

4. 今後の利用予定:

現状のシミュレーションでは, プラズマ平衡磁場および NTM 擾乱磁場をモデル的に設定 している. 今後は, ITER および JT-60 等のより現実的な配位でのシミュレーションを行う 予定である.

4.6 次世代原子カシステム研究開発部門

4.6.1 原子炉内冷却材の温度成層化の解析的評価(基礎水試験解析)

Study on In-Vessel Thermal Hydraulics in LMFBR (Analysis of Basic Thermal Stratification Water Test).

大木 裕FBR シミュレーション Gr機構担当者:大野 修司

1. 利用の概要(要約):

高速炉のスクラム過渡時に発生する上部プレナム内部における温度成層化現象は、構造 材に熱応力を与えるため、機器の構造健全性および安全性の観点からその評価が重要にな っている。温度成層化現象の解析的な評価手法確立の一環として、単相多次元コード AQUA^[1]を用い、水流媒による基礎的な温度成層化試験の検証解析を実施した。

2. 利用の内容・結果:

図1に基礎水試験体系の計算格子を示す。解析では、対流項差分法として運動量がQUICK、 エネルギーがQUICK-FRAM、乱流量が一次風上を使用した。乱流モデルには標準 k-ε を使 用した。数ヶ月の長時間にわたる解析の結果、温度成層界面の揺動(図2)、界面高さの上 昇速度(図3)などの温度成層化の主要な現象を再現することができた。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

特になし。

4. 今後の利用予定:

ナトリウム流媒における検証、および 実機体系の評価を予定している。







図3温度成層化界面高さの時刻歴

 [1]Isamu Maekawa, "Numerical Diffusion In Single-Phase Multi-Dimensional Thermal-Hydraulic Analysis", Nuclear Engineering and Degsign, 120, 323-339 (1990).

4.6.2 高速炉燃料集合体内詳細熱流動解析手法の開発

Development of A Numerical Simulation Program for Detailed Thermal Hydraulics in A Fast Reactor Fuel Assembly

大島 宏之、今井 康友

FBR シミュレーショングループ

1. 利用の概要(要約):

SPIRALは、高速炉燃料集合体における熱流動挙動を詳細に評価する事を目的として開発 された流体解析コードである。その特徴としては、燃料ピンやワイヤースペーサ等の存在 により複雑となる流路形状を正確に取り扱うため、形状模擬性に優れる有限要素法を採用 した事と、高Re数流れとなる燃料集合体内の流動特性を高精度で評価するため、各種乱流 モデルを利用できる事が挙げられる。以下では、燃料ピン健全時/変形時における熱流動 特性の把握に向けて、予備的に実施した7本ピンバンドル体系の解析結果について述べる。

2. 利用の内容・結果:

図1に解析体系を示す。解析対象は7本ピンバンドル体系とし、中心の燃料ピンに対し て軸方向中央付近にスエリングを模擬した仮想的な膨れや湾曲を与えた。要素体系の計算 メッシュは燃料ピンの周方向/径方向/軸方向に対してそれぞれ48×5×144分割とし、体 系全体では約40万メッシュとなる。乱流モデルとしては標準型k-εモデルを用い、数値安 定化法としてはSUPG法を使用した。また、境界条件としては入口境界に対して十分に発 達した流入条件(Re=94,000)を与え、壁境界に対しては壁関数を適用した。解析において はMPIによる32CPU×約20日間の並列計算を実施した。

図2に水平断面における流速分布の一例を示す。バンドル非変形時と比較すると、燃料 ピン膨張時には流路面積の縮小によって軸方向流速が全体的に増加するが、図2に示す様 に、燃料ピン湾曲時には流路形状の変化によって断面方向流速が局所的に増加する傾向が 現れた。図3には集合体圧力損失係数の軸方向分布を示す。燃料ピン膨張時には流路面積 の拡大/縮小効果によって変形部位の上流・下流側で圧力損失係数に顕著な増減が現れる が、燃料ピン湾曲時にはそれほど大きな変化はみられない。図4に中心の燃料ピン表面に おける温度分布を示す。バンドル非変形時と比較すると、燃料ピン膨張に伴う表面温度の 違いはわずかであるが、燃料ピン湾曲時には局所的に流況が大きく変化するため、表面温 度もその影響を受けてピークを示す位置に違いが生じている。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

- ・ 大島 宏之、今井 康友、「高速炉燃料集合体内詳細熱流動解析評価手法の開発(6)-ワイ ヤースペーサ型燃料集合体解析への適用-」、日本原子力学会 2006 年秋の大会
- ・ 大島 宏之、今井 康友、「高速炉燃料集合体内詳細熱流動解析評価手法の開発(7)-変形 バンドル内流動の予備的解析-」、日本原子力学会 2007 年春の年会
- H. Ohshima, et.al, "Numerical simulation of flow field in wire-wrapped fuel pin bundle of

sodium cooled fast reactor using SPIRAL", F011, Proc. NTHAS-5, Jeju, Korea, November 26-29, 2006

4. 今後の利用予定:

以上で得られた知見等をサブチャンネル解析手法の工学モデルに反映するとともに、別 途実施している変形バンドル内流動実験結果との比較により、さらに検証を進める予定で ある。



図1 解析体系



図 2 水平断面内流速分布 (燃料ピン湾曲時)



図3 集合体圧力損失係数



図4 燃料ピン表面温度 (冷却材バルク温度からの差)

4.6.3 ナトリウムー水反応現象の数値シミュレーション

Numerical Simulation of Sodium-Water Reaction Phenomena

内堀 昭寛、渡部 晃

FBR シミュレーション Gr

1. 利用の概要(要約):

ナトリウム冷却高速炉の蒸気発生器で伝熱管が破損した場合、管内を流れる水または水 蒸気が管外のナトリウム中へ漏洩し、隣接する伝熱管に損傷を及ぼす可能性のあるナトリ ウムー水反応現象が発生する。蒸気発生器に対する安全評価の観点から、ナトリウムー水 反応現象に対する解析評価手法を確立することが現在重要な課題となっている。このため、 機構論的モデルを導入した数値解析コード SERAPHIM の開発を進めており、その一環とし て検証解析を実施した。

2. 利用の内容・結果:

検証解析は円筒容器内に模擬伝熱管群を有する体系を対象とした。この円筒容器は最初 液体ナトリウムで満たされた状態にある。図1は、体系の下部から水蒸気がナトリウム中 へ噴出し、水蒸気や反応生成物の水素ガスが管群を通り抜けて上昇する様子をボイド率分 布で示したものである。一方、噴出した水蒸気とナトリウムが反応することによって局所 的に流体の温度が上昇する。図2は、体系内垂直断面の気相温度分布を実験結果と比較し たものである。これより、温度分布を定性的に再現できることと、体系内の最高温度を定 量的に再現できることを確認した。なお、本解析は HPC2500 の数+ CPU 並列計算により 実施した。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

- K. Suda, A. Watanabe, H. Ohshima, "Numerical Simulation of Sodium-Water Reaction Phenomena under Small Leakage Condition in a Steam Generator", Proc. of 14th International Conference on Nuclear Engineering, 2006.
- ・ 高田孝,山口彰,須田一則,大島宏之, "高速炉蒸気発生器におけるナトリウムー水反 応シミュレーション",日本機械学会 2006 年度年次大会,2006.
- T. Takata, A. Yamaguchi, A. Uchibori, H. Ohshima, "Numerical Investigation of Sodium-Water Reaction Phenomena in a Tube Bundle Configuration", Proc. of 2007 International Congress on Advances in Nuclear Power Plants, 2007.
- ・ 内堀昭寛, 大島宏之, 高田孝, 山口彰, "高速炉におけるナトリウム-水反応現象の数 値解析", 日本機械学会第12回動力・エネルギー技術シンポジウム, 2007.
- ・ 内堀昭寛, 大島宏之, 高田孝, 山口彰, "高速炉におけるナトリウム-水反応現象の数 値解析(SERAPHIM コードの検証とパラメータ感度解析)", 日本機械学会 2007 年度年次 大会, 2007.
- ・ 内堀昭寛, 渡部晃, 大島宏之, 高田孝, 山口彰, "高速炉蒸気発生器内ナトリウム-水反

応現象に対する数値解析手法の開発-SERAPHIM コードの検証とパラメータ影響解析 -",日本原子力学会秋の大会,2007.

4. 今後の利用予定:

検証解析を継続して実施するとともに、数値解析手法高度化の一環として、モデルパラ メータの変化が解析結果に与える影響を調査する予定である。



図 1. ボイド率分布



図2. 垂直断面気相温度分布の実験との比較

4.6.4 非構造格子系における流動解析手法の構築と検証

Formulation and Verification of Flow Calculation Method on Unstructured Mesh

河村 拓己

FBR シミュレーショングループ

機構担当者:伊藤 啓(FBR シミュレーショングループ)

利用の概要(要約):

原子炉容器内の複雑体系下におけるガス巻込み現象を高精度に評価することを目的とし て、原子炉各構成要素を直接模擬できる格子体系の検討を実施している。本件では、原子 炉各構成要素形状を忠実に再現可能な非構造格子において、コロケート型変数配置に基づ いた有限体積法による流動解析コードを構築し、解析精度及び渦流れへの適用性を検証す るためのシミュレーションを実施した。

2. 利用の内容・結果:

ガス巻込みの対象となる渦流れでは、渦中心近傍の速度勾配が急峻で、数値拡散の影響 が大きいことから、運動量保存式の移流項の差分スキームに高次精度差分スキームを用い る必要があり、本解析コードでは2次精度風上差分スキームを導入した。本件では、移流 項差分スキームの検証として2次元正方2重周期境界非粘性流れと、渦流れへの適用性の 評価として円筒容器内準定常渦流れを対象としたシミュレーションを実施した。2次元正 方2重周期境界非粘性流れでは矩形領域内の上下左右をそれぞれ周期境界とし、流れ場の 発達に伴う力学的エネルギーの保存性を評価・検証した。その結果、渦度分布(図1)から 見て取れるように、数値拡散が少なく移流項差分スキームが妥当であることがわかった。 また力学的エネルギー総量の時間変化(図2)から、力学的エネルギーが適切に保存され ることを確認した。円筒容器内準定常渦流れのシミュレーションでは、入口スリットから 流入した流れが容器中心付近に渦中心を持つ渦流れを形成し、容器底面の出口ノズルから 流出する様子が示された(図3)。円筒容器内の流線が複雑に絡まっていることから、容器 内の流れが複雑であることがわかる。また流線の色は流速の大きさを示しており、円筒容 器中央の渦中心近傍に比較的流速の速い領域が形成されているほか、出口ノズル内が最も 大きな流速を示している。高さ0.15mにおける周方向流速分布及び下降流速分布の試験結 果との比較(図4)では、渦中心の極近傍を除き試験結果と良く一致している。周方向流 速分布について、渦中心近傍の周方向流速の急峻な立ち上がりが良く再現されており、渦 流れに特徴的な流速分布の傾向が基本的に再現された。これらの結果から本解析コードは、 ガス巻込み評価に関連する渦流れを再現可能であると考えられる。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

伊藤 啓,山本 義暢,功刀 資彰,"ガス巻込み現象の直接数値解析に向けた手法の開発: (1)非構造格子系における流動解析手法の構築と検証",日本原子力学会 2007 年春の年会要 旨集 J39 (2007)

4. 今後の利用予定:

今後、本解析手法の高度化として気液界面・体積追跡法を導入し、非構造格子体系下に おける気液二相流解析手法を構築する予定であり、原子炉上部プレナム液面におけるガス 巻込みを直接数値解析可能な解析コードへと発展させることを計画している。



図3 円筒容器内の流線



4.6.5 高速炉におけるサーマルストライピング現象を対象とした 流体-構造熱連成解析コードの開発

Development of Thermal-Hydraulic Code Coupled with Heat Conduction in Structure for Thermal Striping Phenomena in Fast Breeder Reactor

田中 正暁

FBR シミュレーショングループ

1. 利用の概要(要約):

高速炉におけるサーマルストライピング現象を対象として、熱流動場と構造材内温度場 を一貫して解析評価する数値解析コード(MUGTHES)の開発を実施している。

サーマルストライピング現象とは、異温度流体の混合により流体中に発生する温度変動 が構造材表面に伝達し、構造材中の熱応力変動に起因して構造健全性が損なわれるという 一連の現象をいう。本現象が問題となる代表例としては、炉心頂部において燃料集合体か ら流出する高温ナトリウムとそれに隣接する制御棒要素あるいはブランケット集合体から 流出する低温のナトリウムとの混合によって発生する温度変動がUIS下部構造物に影響を 及ぼす可能性、T字状に2つの配管が接合されている合流配管部において流体混合によっ て生じる温度変動が配管内面に伝達して熱疲労によって構造健全性が損なわれる可能性が あげられる。本現象の解析評価では、流体ー構造間の非定常熱伝達が重要な役割を担うた め、速度および温度の時刻歴(周波数特性)および空間分布を高精度で予測すること、す なわち、同時刻での流体ー構造間熱連成問題を扱える解析評価手法の構築が、構造健全性 評価の合理化、高精度化という観点で重要となる。

MUGTHES では、同時刻(同タイムステップ)での熱流動場解析と構造材内温度場解析とを 非定常熱伝達モデルで連結することで流体-構造間熱連成解析を実現している。また、流 体混合によって生じる混合渦構造を捉えるためLES(ラージ・エディ・シミュレーション) アプローチを採用すると共に、例えば配管内面に沿った2次流れを正確に再現できるよう 境界適合座標系(境界面に沿って格子を配置するモデル)を採用している。

現在、熱流動場解析機能および構造材内温度場解析機能について、個別に検証解析を行ってコーディングのチェック(座標変換に伴うもの)を実施し、計算スキーム(時間積分法および離散化手法)、LES 乱流モデル(渦粘性モデル)および壁モデルの妥当性確認と各モデル・スキームの組込を実施している。数値解法には SMAC 法(基本スキーム)と Projection 法を採用して計算安定性を考慮しながら使い分けている。時間積分法としては

アダムス・バッシュフォース法(対流項)およびクランクニコルソン法(拡散項)を基本 スキームとして採用している他、オイラー陰解法および陽解法も使用できる。圧力解法に は SSOR (Symmetric SOR)法を改良したものと BiCG 法および BiCGSTAB 法を採用し、収束性 を勘案して問題に応じ使い分けている。尚、MUGHTES コードは、大型炉解析評価を目的とし て開発しており、将来的に大規模体系を扱う必要性からコードの並列化を検討している。 現在、OpenMP による並列化(将来的には MPI に移行)が行われており、機構にて所有する 大型計算機等での並列化効率の向上および大規模解析に向けた改良等を実施している。 2. 利用の内容・結果:

これまでに基本体系として(1)バックステップ流れ、(2)正方キャビティ流れ(Re=1000)、 (3)90度曲がり管内流れ(Re=60,000)、(4)T字配管合流部などを対象とした熱流動解 析機能の基本検証を実施している。この他、平行平板間流れ、サーマルキャビティ流れ、 有限円柱内一次元非定常熱伝導問題、既存差分法解析コードによる流体温度情報を境界条 件として用いたT字配管構造内温度変動特性解析評価[1,2]なども実施している。解析結果 の一例として、図1にバックステップ流れにおける瞬時の軸方向速度分布を示す。現在、 これら基本体系を対象として、計算スキーム、乱流モデル、出入口および壁の取り扱いを 含む境界条件設定の妥当性確認を実施し、既往実験結果との定量比較により解析精度を確 認している。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

- [1] 田中正暁、大島宏之、「サーマルストライピング現象を対象とする流体-構造間熱連成 を考慮した数値解析コードの開発-」、日本原子力学会 2006 年秋の大会、K41.
- [2] M. Tanaka, and H.Ohshima, "DEVELOPMENT OF THERMAL-HYDRAULIC CODE COUPLED WITH HEAT CONDUCTION IN STRUCTURE FOR THERMAL STRIPING PHENOMENA", AJTE2007, HT2007-32720, Vancouver, CANADA, July 8-12, 2007.

4. 今後の利用予定:

基本検証を継続しながら流体―構造熱連成解析手法を構築し、既往実験結果との定量比 較を通じて解析精度の向上、および並列化効率向上の検討を行う。また、部分モデル実験 や工学規模での実験解析を実施し、大型炉実機評価に向け開発をすすめていく予定である。



(現在LES乱流モデルを用いた解析を実施中)

図1 バックステップ流れ

4.6.6 連続エネルギー モンテカルロ法による 「もんじゅ」炉心核特性解析

Analyses of nuclear characteristics of "Monju" by Monte-Carlo method

植松 眞理 マリアンヌ炉心・燃料技術グループ

1. 利用の概要(要約):

高速増殖原型炉「もんじゅ」の再起動に向けた核特性解析,「もんじゅ」性能試験予備解 析等の炉心解析については,一般には拡散法コード等を用いて実施している。モンテカル ロ法による核特性解析は,炉心体系を詳細にモデル化することにより,形状効果の臨界性 への影響を高い計算精度で評価することが可能であり,拡散法(等方散乱近似及び離散化 近似)による核特性解析結果の確認・比較に活用している。一方,モンテカルロ法による 核特性解析においては,有意な解析結果を導き出す統計精度が必要である。「もんじゅ」の 全炉心を模擬した大型体系や燃料ピン形状まで模擬した詳細モデルでは,充分な統計精度 を得るためには総粒子数は数億~数十億程度必要であり,ワークステーション(シングル, デュアルCPU)の処理能力では計算に数ヶ月以上を要する。ここでは,モンテカルロ法コー ドを用いて「もんじゅ」炉心の核特性解析を実施するにあたり,大型並列計算機を利用し 並列計算を行うことで,充分な粒子数での計算を数時間から数日までの計算時間で実施す ることが可能となった。

2. 利用の内容・結果:

核特性解析には連続エネルギー モンテカルロ法コードMVPを, 燃焼計算にはMVP-BURNを使用した。また,「もんじゅ」炉心体系は, 燃料ピンレベルまで詳細に模擬した 非均質モデル及び燃料集合体内を均質化した均質モデルを使用した。

平成18年度の核特性解析では、有意な解析結果を得られる総粒子数として、均質モデルでは数千万程度、非均質モデルでは数億~数十億が必要であることを確認した。なお、安全審査へのモンテカルロ法解析結果の適応を視野に入れると、実効増倍率にして統計誤差10⁻⁵%以下の統計精度が望ましいが、現状では拡散法コードによる解析結果のクロスチェックを目的としていること、計算機速度・使用可能メモリ等に使用上の制約があること等の理由から、一解析ケースにつき統計誤差が~10⁻³%の範囲まで収束することを目安とした。その結果、拡散法コードおよびモンテカルロ法コードによる固有値計算の解析値については、比較的大きい反応度(10⁻¹% / k/kk '程度)であれば、概ね良い一致を示すことが確認できた。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

(1)「モンテカルロ法を用いた「もんじゅ」性能試験における燃焼係数解析」,原子力学会2006 年秋の年会

4. 今後の利用予定:

今後,1993年から1995年にかけて実施された「もんじゅ」性能試験解析を継続実施し, 従来の拡散法コード解析結果の確認・比較を実施する。「もんじゅ」性能試験解析において 有意な統計精度を得るためには,総粒子数を現状より更に増加する必要があるため,並列 計算を複数回実施し統計を取る計画である。

なお,将来の安全審査に耐える解析を必要期間内に実行可能とするためには,計算速度 の更なる向上と,体系モデルの最適化が必要であり,今後の課題として検討を進める。

4.6.7 第一原理計算による FCC 鉄の磁気特性評価

First principle calculation of magnetic property of FCC Fe

高屋 茂

炉心・構造材料グループ

1. 利用の概要(要約):

照射材における磁気特性に着目した材料劣化検出方法の原理について検討するため、オ ーステナイト系ステンレス鋼の主要元素である Fe について、格子定数を系統的に変化させ た場合、および照射欠陥として空孔が導入された場合の絶対零度における磁気特性変化を 第一原理計算により評価した。特に、空孔導入後の構造緩和を考慮した計算は、大型計算 機による大規模・長時間の計算が必要とされた。

2. 利用の内容・結果:

計算は、主にHPC2500システムを利用し、主に17CPU並列にて実施した。計算は、擬 ポテンシャルと密度汎関数法を用いた平面波展開により第一原理計算を実施する市販のソ フトウェア「Advance/PHASE」を利用した。

磁気モーメントの原因は、電子のスピン角運動量とその軌道角運動量であるが、Fe 等の 3d 系列の磁性遷移金属およびその化合物系では、軌道角運動量の発生の元となるスピン軌 道相互作用が比較的小さく、また結晶場の影響が強いため、通常、スピン磁気モーメント は軌道磁気モーメントに比べて一桁程大きい。したがって、軌道角運動量を無視すると、 磁気モーメント(M)と、UP スピンをもつ電子の数 (n_{\uparrow})、DOWN スピンをもつ電子の数 (n_{\downarrow})の間には、次の関係が成り立つ。

$M = \mu_B (n_{\uparrow} - n_{\downarrow})$

ここで、µ_Bはボーア磁子である。代表的なオーステナイト系ステンレス鋼である SUS304 鋼は、常温での結晶構造が面心立方(Face-Centered Cubic: FCC)構造で格子定数が約 0.359 nm である。本研究では、まず格子定数の変化が磁気特性に与える影響を評価するために、 SUS304 鋼の主要元素である Fe を対象に、原子 1 個について FCC 構造となる周期境界条件 を課し、格子定数を系統的に変化させて、絶対零度におけるスピン分極を求めた。次に、 照射欠陥による磁気特性変化を調べるために、空孔が導入された場合のスピン分極を求め た。基本格子の構成原子数は 8 原子とし、上下左右方向に周期境界条件を課した。計算の 際には、基本格子構成原子のうち 1 つを取り除いて空孔とみなし、絶対零度における 1 原 子あたりのスピン分極を求めた。また、構造緩和を考慮しない場合、考慮する場合の 2 ケ ースの計算を実施した。

Fe 原子 1 個について、FCC 構造の格子定数を変化させた場合の絶対零度におけるスピン 分極を計算した結果、格子定数の拡大に伴い、磁性が常磁性から強磁性に変化することが 示された。次に、空孔を導入した場合のスピン分極計算結果からは、空孔が無い場合はス ピン分極は零であった格子定数でも、空孔を導入した場合には、スピン分極を示すように なることが示された。また、構造緩和を考慮することにより、各原子位置は移動したが、 今回の計算では、構造緩和によるスピン分極の変化はほとんど確認できなかった。また同 様に、電子密度分布に関しても大きな相違は確認できなかった。以上の結果から、照射材 における材料劣化検出原理の一つとして、照射による空孔導入による磁化特性変化に着目 して研究を進めていく必要があることが示された。

本報告の内容は、旧電源開発促進対策特別会計法に基づく文部科学省からの受託事業として、独立行政法人原子力研究開発機構が実施した平成18年度「超臨界圧水冷却高速炉の 炉内構造材劣化予兆診断技術の開発」の成果です。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

なし

4. 今後の利用予定:

多元合金の FCC 構造に空孔を導入したモデルを作成し、構造緩和を行った後、空孔の周 囲の電子状態を計算し、磁気モーメントを評価することを計画している。

4.6.8 高性能三酸化イオウ電気分解セルの開発

Development of the high-performance electrolysis cell for sulfur trioxide decomposition

鈴木 知史

炉心・構造材料グループ

1. 利用の概要(要約):

ハイブリッド熱化学法による水素製造サイクルの三酸化イオウ電解機構解明のため、第 一原理計算を用いた。計算方法として、相対論を考慮した全エネルギーの計算が可能な第 一原理計算である PHASE を用いた。また、吸着した SO₃分子と Pt 表面原子の間の電子の 授受や化学結合性等の相互作用を評価するため、DV-Xa 分子軌道法を用いた。これらの計 算は系が大きく、大規模で長時間の計算が必要となることから、大型計算機を用いて実施 した。

2. 利用の内容・結果:

高速炉への適用を目的に開発が進められているハイブリッド熱化学法による水素製造サ イクルのうち、三酸化イオウ電解プロセスは、水素製造効率を決定する重要なプロセスで ある。このプロセスで使用される電解セルは、固体酸化物型燃料電池(SOFC)と同様なセ ル構造である。このセルは、SOFCと同様な電解質材料や電極材料より構成される。三酸化 イオウの電気分解機構は、十分明らかにされていない。したがって、第一原理計算を用い て原子レベルの視点から、三酸化イオウの律速過程や支配反応の解明を行う。

単位格子として、1 層で Pt が9 原子で3 層からなる計27 原子からなる Pt 表面に SO₃を 配置させて、吸着計算をした。エネルギー的に比較的安定な構造が、2 種類は存在すること が分かった(図 1)。吸着エネルギーは、いずれも2 eV 前後であり、一般的な化学吸着エネ ルギーと同程度である。さらに、SO₂分子と吸着酸素原子に関する計算を行い、SO₂分子の Pt(111)面からの脱離エネルギーと吸着酸素原子の表面移動のエネルギー障壁を計算した。



図1SO3のPt表面上の吸着配置

PHASE によって得られた 2 種類の安定な吸着配置について、相対論効果を加味した DV-Xa 法を用いて吸着した SO₃ 分子と Pt 表面原子の間の電子の授受や化学結合性等の相互 作用を評価した。表1に、DV-Xa 法により計算した SO₃ 分子、A 配置の SO₃、B 配置の SO₃ についての、結合次数を示す。表 2 より、SO₃ 分子において S-O の結合次数は 0.55 である。 一方、A 配置において、S-O(1)の結合次数は 0.33 であり、S-O(2)の結合次数は 0.52 である。 また、B 配置において、S-O の結合は 0.35 である。したがって、O 原子が Pt 表面原子に結 合すると S-O 間の結合が弱まる。また、SO₃ 分子において S-O の結合次数は -0.18 であり、 Pt 表面の吸着状態では -0.15- -0.14 であり、変化は小さい。したがって、SO₃ の吸着によ る O-O 間の相互作用への影響は小さい。

	SO ₃ 分子	A 酉	A配置						
S-O	0.55	S-O(1): 0.33	S-O(2) : 0.52	0.35					
0-0	-0.18	O(1)-O(1) : -0.14	O(1)-O(2): -0.15	-0.15					
O-SO ₂	0.19	O(1)-SO ₂ : 0.05	O(2)-SO ₂ : 0.22	0.05					

表1SとO間の結合次数

- 3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):
 - 1. 論文発表
 - Suzuki, T. Nakagiri, and K. Aoto, "The refinement of the rate determining process in sulfur trioxide electrolysis using the electrolysis cell", International Journal of Hydrogen Energy (印刷 中).
 - [2] Suzuki and T. Nakagiri, "Sulfur trioxide adsorption on Pt surface", Advances in Quantum Chemistry (印刷中).
 - [3] Suzuki and T. Nakagiri, "Evaluation for the configurational and electronic state of SO₃ adsorbed on Pt surface", Chemical Physics (投稿中).
 - [4] Suzuki *et al.*, "Calculation of X-ray absorption near edge structure of CeO₂ using a model cluster", Chemical Physics (投稿中).
 - [5] Suzuki and T. Nakagiri, "Clarification of the mechanism of sulfur trioxide electrolysis-Evaluation of SO₃ and O Atom Adsorbed on Pt Surface-", Journal of Nuclear Science and Technology (投稿中).
 - 2. 口頭発表
 - [1] Suzuki and T. Nakagiri, "Sulfur trioxide adsorption on Pt surface", The 4th International Conference on DV-X α Method, Jeju, Korea (2006).
 - [2] 鈴木知史,中桐俊男"高速増殖炉に適用可能な熱電併用水素製造システムの開発(6)-第一原理計算による SO₃分子の Pt 電極表面への吸着挙動の評価-",日本原子力学会 2006 年秋の年会,札幌(2006).
 - [3] Suzuki and T. Nakagiri : "Clarification of the mechanism of sulfur trioxide electrolysis", The 10th ISSP International Symposium on Nanoscience at Surfaces, Kashiwa (2006).

[4] 鈴木知史: "SO₃分子の Pt 電極表面への吸着挙動の評価",日本化学会関東支部茨城地区 研究交流会",日立 (2006).

4. 今後の利用予定:

SO₃の解離過程を計算することにより SO₃の電気分解機構を明らかにするとともに、材料 についても同様の計算を行い、電極材料の選択をおこなう。

4.6.9 中性子輸送ベンチマーク問題のための参照解の計算

Calculation of reference solutions for neutron transport benchmark problem

千葉 豪、沼田 一幸

炉心解析グループ

1. 利用の概要(要約):

高速増殖炉における冷却材ボイド係数は、安全設計の上で重要な核特性パラメータであ る。機構では、その予測精度の向上を目指し、より近似の少ない決定論的核計算手法の開 発を進めている。開発した手法の妥当性を確認するために、計算体系を簡略化した中性子 輸送ベンチマーク問題を作成し、その参照解を連続エネルギーモンテカルロ法により計算 した。ベンチマーク問題の参照解には高い精度が要求されるため、大型計算機を利用して 膨大なヒストリー数による計算を行った。

2. 利用の内容・結果:

作成したベンチマーク問題は、冷却材をボイド化しない問題、局所的にボイド化させた 問題からなる。また、利用者の利便性を考慮して、二次元問題と三次元問題が準備されて いる。これら全ての問題に対して、大型計算機(HPC2500、10CPUによる並列計算)を用 いて 50 億ヒストリーの連続エネルギーモンテカルロ計算を実施し、精度の高い参照解を効 率的に得ることができた。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

G. Chiba, K. Numata, 'Neutron transport benchmark problem proposal for fast critical assembly without homogenization,' Ann. Nucl. Energy, 34, pp.443-448 (2007).

4. 今後の利用予定:

現在開発中の決定論的核計算手法の妥当性を今回作成した中性子輸送ベンチマーク問題 により確認したのち、その手法を実際の臨界集合体解析に適用する。その際には計算容量 が莫大になると予想されることから、大型計算機を使用する予定である。また、計算コー ドの並列化を行い計算時間の短縮を図る予定である。

4.7 J-PARCセンター

4.7.1 JSNS における核発熱計算

Nuclear heating calculation for JSNS

原田 正英

中性子源セクション

1. 利用の概要(要約):

本研究室では、J-PARC プロジェクトの主要施設である核破砕中性子源(JSNS)の設計、 開発、建設を任務としている。JSNS は、水銀ターゲットに、1MW、3GeV、25Hz の陽子ビ ームを照射し、ターゲットの上下に設置されている3台の液体水素モデレータから、冷、 熱中性子ビームを引き出し、ユーザーに供給するものである。JSNS のような MW クラス の核破砕中性子源では、非常に核発熱密度が高い。そのため、工学設計のために、核発熱 密度分布データ、核発熱による主要機器への熱負荷量などの核発熱データが不可欠である。 また、核発熱データ評価の精度は、工学設計における設計尤度に大きな影響を与えるため、 コスト削減の観点から、精度の高いデータが要求される。そこで、詳細な JSNS の計算モデ ルを構築し、通常あまり考慮されない以下の3点に注意しながら、核発熱を行った。

- (1) 電子のエネルギー損失による光子のエネルギー付与
- (2) エネルギー保存のカーマファクタ
- (3) 運転中の崩壊熱

なお、本研究では、詳細な計算モデルを用いており、また電子輸送まで含む輸送計算を 行っているため、十分な統計精度を得るため必要な1ケース当たりの計算時間が長くなる。 また、パラメータ数が多いため、必然的に計算ケース数も多い。一方、一般的に用いられ ている分散低減法による計算の加速化は、体系の特殊性から大きくは望めない。しかしな がら、本研究で用いている粒子輸送計算コード PHITS、MCNP は、モンテカルロ法を用い ており、並列化可能である。そのため、スカラー並列型計算機を用いることは、計算速度 が大幅な向上につながっている。

2. 利用の内容・結果:

表1には、陽子ビーム出力が1MWのときの各コンポーネントにおける核発熱量を示す。 液体水素とその容器の核発熱量については、計算モデルとCADモデルと体積差を導出し、 補正している。表から、体系の核発熱の総量は、874kWであることがわかる。水銀ターゲ ットでの核発熱量は4.70kWで、これは入射陽子ビーム出力の半分に相当する。反射体と 水冷遮蔽体での核発熱はそれぞれ194kW、134kWであり、これらとターゲットの3つコン ポーネントの核発熱の総量は、全体の80%に相当する。また、低温水素循環系への熱負荷 (3台のモデレータの核発熱量)は、3.5kWである。

図1は、陽子ビーム軸に沿って水平及び垂直に切断した核発熱密度分布を示す。図から、 特に陽子ビーム孔付近の核発熱密度が高いことがわかる。この理由は、陽子ビームのハロ ー成分や、ターゲットや陽子ビーム窓で散乱した成分が、発熱に寄与しているからである。 前述した3つ1章で示した電子のエネルギー損失による光子のエネルギー付与を考慮した場合、考慮しなかった場合と比べ、コンポーネントによっては、最大50%も発熱量に違いが出ることがわかった。これは、アルミニウムや水素などの軽核で構成されているコン ポーネントでは、電子輸送を考慮すると発熱量が小さくなり、ターゲットなどの重核で構成されているコンポーネントでは、逆に大きくなることがわかった。これは、電子の単位長さ辺りのエネルギー損失量の違いであると考えられる。また、エネルギー保存カーマを用いた場合、用いなかった場合に比べ、5%発熱量違いが出ることもわかった。一方、運転中の崩壊熱は、モデレータに関しては、即発性の核発熱が3.5kWであることに対し、0.2kWであることがわかり、崩壊熱による低温水素循環系に対する熱負荷の増加は、それほど大きくないということがわかった。

Component 1	Component 2	Nuclear Heating	
		(kW@1MW)	
Target	Mercury & Vessel	4.73.0	
	Trolley, and so on	4.0	
Reflector	Reflector & Vessel	193.9	
Shielding	Water-cooled shield	133.8	
	Air-cooled shielding	6.9	
Proton beam	Window assembly	1.4	
window			
Poisoned	H ₂ & Vessel	1.1	
moderator	Outer Vessel cooled by water	4.4	
Decoupled	H ₂ & Vessel	1.0	
modearator	Outer Vessel cooled by water	4.7	
Coupled	H ₂ & Vessel	1.4	
modearator	Outer Vessel cooled by water	5.2	
Total		874.7	

表1、各コンポーネントにおける核発熱量



図1、陽子ビーム軸に沿って水平(左図)及び垂直(右図)に切断した核発熱密度分布

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

2007年4月に中国東莞(Dongguan)で開催された核破砕中性子源に関する国際会議18th International Collaboration of Advances Neutron Source (ICANS-XVIII)にて、本研究を発表した。 会議報告論文も提出しており、近いうちに、会議報告論文集として、発刊される予定であ る。

4. 今後の利用予定:

今後の利用として、現在実施放射線許認可申請に向けた中性子ターゲットステーション や中性子特性試験装置の遮蔽計算、中性子特性試験設備における試験事前検討(バックグ ランド低減化や検出器遮蔽体の最適化に関する研究)を行う予定である。これらの計算に も、本計算機を使用して、並列計算を行うことを考えている。

4.7.2 3GeV 陽子ビーム輸送施設(3NBT)における 遮蔽およびストリーミング評価計算

Shielding and streaming evaluation of 3GeV proton beam transport facility

大井 元貴

物質生命科学ディビジョン

1. 利用の概要(要約):

J-PARC の 3GeV シンクロトロンから、物質生命科学実験施設までを結ぶ 3GeV 陽子ビー ム輸送施設で発生する放射線を評価するため、MCNP を用いて遮蔽評価、および、ストリ ーミングによる常時立ち入り区域および管理区域境界における線量の評価を行った。 結 果として、施工されたビームライン遮蔽および迷路構造によって、常時立ち入り区域と一 般管理区域境界の線量は基準値以下になる事が分かった。

2. 利用の内容・結果:

MCNP と PHITS を用いたモンテカルロシミュレーションを行い、3GeV シンクロトロン 出射部から、物質生命科学実験施設までを結ぶ 3GeV 陽子ビーム輸送施設(3NBT)からの 線量評価を行った。3NBT ではラインロスとして 1W/m を仮定し、ビームが最も広がる四極 電磁石にロスが集中するものとして評価を行い、ビームラインを構成するチタンに 1W/m 相当の陽子ビームを入射して計算をおこなった。また、3GeV 出射ダンプに 4kw のビーム を入射したときの線量評価を行った。

結果として、3NBT 棟地下の搬入路入り口において 5.1 µ Sv/h、3NBT 下流連絡通路入り ロで 7.2 µ Sv/h であり、3NBT 棟の一般管理区域境界での線量が 0.18 µ Sv/h、下流ユーティ リティ連絡通路末端の線量が 0.185 µ Sv/h であった。また、3GeV 出射ダンプから地上への 影響は、0.018 µ Sv/h と十分に小さい事を示した。以上の事から、3NBT からの線量は基準 値を下回る事を示した。

これらの結果は、J-PARC の放射線申請に反映されている。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

4. 今後の利用予定:

放射線申請の進捗状況に合わせて、新たに計算を必要とする場合があるので、随時計算 をおこなう予定。

4.7.3 J-PARC における水素モデレータ配管の熱応力解析

THERMAL STRESS ANALYSIS FOR A TRANSFER LINE OF HYDROGEN MODERATOR IN J-PARC

達本 衡輝

物質生命科学デビジョン・中性子源セクション

1. 利用の概要(要約):

高い放射線場にさらされる水素モデレータ用輸送多重配管を20Kまで冷却した際の熱収 縮による熱応力、および、低温と常温配管の接触を解析的に評価した結果、および、侵入 熱を低減するための真空断熱層に設置するスペーサーの形状を検討した結果について報告 した。水素輸送配管は貫通する中性子遮蔽体の欠損を小さくするため、曲がり部を設け、 かつ、できるだけ配管サイズを小さくする必要があり、非常に複雑で、全長約6mの真空 断熱層をもつ6重配管構造となっている。そのため、各々の配管間のクリアランスは非常 に小さく、スペーサーを設けることにより低温配管と常温配管間のクリアランスを十分に 保つ構造にした。それ故、水素輸送配管の熱応力解析を行い、液体水素温度まで冷却した 場合の熱収縮による応力集中、変形、低温と室温の配管間の接触を評価し、許容応力値以 下に保つことのできるスペーサーの最適位置を決めた。

2. 利用の内容・結果:

水素輸送配管は貫通する中性子遮蔽体の欠損を小さくするため、曲がり部を設け、かつ、 できるだけ配管サイズを小さくしている。さらに、熱侵入軽減という観点から真空断熱層 をもつ6重配管構造を採用している。低温配管と常温配管間のクリアランスを十分に保つ ために、スペーサーを設けられているが、その最適位置の検討が必要である。非結合型モ デレータの水素輸送配管が低温水素温度 20K まで冷却した際の熱収縮による変形、および、 応力集中を評価するために、解析コード ABAQUS を用いて評価した。並列計算機 Altix3900 環境下で行った。

図1に示すような位置にスペーサーを挿入することにより、変位量はクリアランス以下 に抑えることができた。しかし、表1に示すように、スペーサー2の位置での接触応力は 許容応力(66MPa)以上となっている。そこで、変位量を増加させることにより、応力集中を 軽減することを考えた。図2に示すようにスペーサー2の位置を左側にずらして解析を行 った。その結果を図3に示す。変形量は多少大きくなるが、曲がり部に発生する熱応力や スペーサーでの接触応力は許容値以下に抑えることができた。ABAQUSを用いた解析によ り、妥当なスペーサー位置を決定することができた。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

H. Tatsumoto, M. Teshigawara, T. Aso, K. Ohtsu, F. Maekawa, and T. Kato, "THERMAL STRESS ANALYSIS FOR A TRANSFER LINE OF HYDROGEN MODERATOR IN J-PARC",2007 CEC-ICMC.

4. 今後の利用予定:

このような解析ツールを用いて、セカンドターゲットの設計検討を進める予定である。



図1:非結合型モデレータ用水素輸送配管の熱収縮および熱応力分布

表1:スペーサーでの接触応力

Туре	Spacer-1	Spacer-2	Spacer-3	Spacer-4	Spacer-5	
Spacers (図1) (MPa)	6.6	87.7	35.8	39.3	65.7	
Spacers (図3) (MPa)	7.8	61.5	25.8	32.0	62.4	



図2;スペーサー位置の変更

図3:変更後の熱収縮と熱応力分布

4.7.4 J-PARC 中性子散乱装置の BL14 分光器遮蔽体の設計

Shielding design of neutron scattering instrument BL14 in J-PARC

鈴谷 賢太郎

物質・生命科学ディビジョン

1. 利用の概要(要約):

日本原子力研究開発機構(原子力機構)と高エネルギー加速器研究機構(KEK)は共同 で、大強度陽子加速器計画(J-PARC)を進めている。原子力機構では、物質・生命科学実 験施設内の核破砕中性子源ステーション(出力1MW)から放射状にパルス中性子実験装 置(6台)の設計および建設を進めており、その設計の一環として、実験者を放射線被曝 から防護する実験装置周囲の遮蔽体(以後、中性子実験装置遮蔽または単に遮蔽体という) の評価・設計を実施した。モンテカルロ粒子輸送計算コード PHITS によって遮蔽体の遮蔽 能力、漏洩線量の評価を行った。J-PARC の中性子源では meV~3GeV までの広いエネルギ 一範囲の中性子・ガンマ線の評価が必要であり、多数の異なる遮蔽形状や遮蔽材料の組合 せの評価が必要であるので、大型計算機による長時間かつ大規模な計算が必要になる。

2. 利用の内容・結果:

計算は、主に並列計算機 Altix3700Bx2 システムによって遮蔽計算を実施した。計算コー ドは PHITS、核データは JENDL3.2 を用いた。また、J-PARC 中性子源のモデレーターから 放出される中性子、光子の強度、スペクトルは、モデレーター表面での計算値が J-PARC の中性子源グループから公開されており、本検討ではそれを遮蔽計算の線源として用いた。 下に、原子力機構が設計・建設を進めている中性子散乱装置(BL14 低エネルギーチョッパ 一型分光器: AMATERAS)の遮蔽計算結果を示す。



図1は、設計図面に基づいた遮蔽計算における遮蔽体の構造モデル(平面図)で、茶色の部分がコンクリート、ピンク色の部分が鉄である。中性子は左から右へ進行し、図面中心部の点(研究試料)を通過して、右側の凸部(ビームストップ)で止められる。研究試料のモデルとして、3cm×8cm×3cm(縦、横、厚さ)角の鉄を用いた。図2がこのモデルによる遮蔽計算の結果で、中性子の線量がプロットされている。左から進行してくる中性

子(オレンジ色の線)は、本設計のビームストップで十分止められており、また鉄試料に より散乱し、遮蔽内に充満している中性子(黄緑色の部分)も遮蔽体内にとどまっており、 遮蔽体周囲には漏洩していないことがわかる。この遮蔽モデルでは、コンクリート遮蔽体 の内側に熱中性子の吸収剤としてホウ酸+ポリエチレンによるホウ酸レジンという材料が 10cm 程貼ってあり、この材料の効果が大きい。こうした遮蔽材料の工夫と PHITS による遮 蔽計算により、近年価格が高騰している鉄をほとんど使わず、安価なコンクリートだけで も十分な性能の遮蔽体が設計可能であることが明らかになった。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

なし。

4. 今後の利用予定:

引き続いて、平成 20 年度より大強度型小角散乱装置(BL15)および生物用非弾性散乱 装置(BL02)の建設を開始する予定である。そのため、平成 19 年度は、遮蔽体の詳細設 計(遮蔽計算)を完了させる。また、ホウ酸レジン以外の、ホウ素含有コンクリートなど の新しい安価な遮蔽材料の検討も行い、より高性能で安価な遮蔽体の検討を進める計画で ある。

4.7.5 J-PARC 中性子散乱装置の BL19 分光器遮蔽体の設計

Shielding design of neutron scattering instrument BL19 in J-PARC

相澤 一也

物質・生命科学ディビジョン

1. 利用の概要(要約):

日本原子力研究開発機構(原子力機構)と高エネルギー加速器研究機構(KEK)は共同 で、大強度陽子加速器計画(J-PARC)を進めている。原子力機構では、物質・生命科学実 験施設内の核破砕中性子源ステーション(出力1MW)から放射状にパルス中性子実験装 置(6台)の設計および建設を進めており、その設計の一環として、実験者を放射線被曝 から防護する実験装置周囲の遮蔽体(以後、中性子実験装置遮蔽または単に遮蔽体という) の評価・設計を実施した。モンテカルロ粒子輸送計算コード PHITS によって遮蔽体の遮蔽 能力、漏洩線量の評価を行った。J-PARC の中性子源では meV~3GeV までの広いエネルギ 一範囲の中性子・ガンマ線の評価が必要であり、多数の異なる遮蔽形状や遮蔽材料の組合 せの評価が必要であるので、大型計算機による長時間かつ大規模な計算が必要になる。

2. 利用の内容・結果:

計算は、主に並列計算機 Altix3700Bx2 システムによって遮蔽計算を実施した。計算コー ドは PHITS、核データは JENDL3.2 を用いた。また、J-PARC 中性子源のモデレーターから 放出される中性子、光子の強度、スペクトルは、モデレーター表面での計算値が J-PARC の中性子源グループから公開されており、本検討ではそれを遮蔽計算の線源として用いた。 下に、原子力機構が設計・建設を進めている中性子散乱装置(BL19 新材料解析装置)の遮 蔽計算結果を示す。



図1は、設計図面に基づいた遮蔽計算における分光器室遮蔽体の構造モデル(平面図) で、茶色の部分がコンクリート、ピンク色の部分が鉄である。中性子は左から右へ進行し、 図面中心部の点(研究試料)を通過して、右側の凸部(ビームストップ)で止められる。 研究試料のモデルとして、2cm×2cm×3cm(縦、横、厚さ)角の鉄を用いた。図2がこの モデルによる遮蔽計算の結果で、中性子の線量がプロットされている。左から進行してく る中性子(オレンジ色の線)は、本設計のビームストップで十分止められており、また鉄 試料により散乱し、遮蔽内に充満している中性子(黄緑色の部分)も遮蔽体内にとどまっ ており、遮蔽体周囲には漏洩していないことがわかる。この遮蔽モデルでは、コンクリー ト遮蔽体の内側に熱中性子の吸収剤としてホウ酸+ポリエチレンによるホウ酸レジンとい う材料が10cm 程貼ってあり、この材料の効果が大きい。こうした遮蔽材料の工夫とPHITS による遮蔽計算により、近年価格が高騰している鉄をほとんど使わず、安価なコンクリー トだけでも十分な性能の遮蔽体が設計可能であることが明らかになった。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

なし。

4. 今後の利用予定:

引き続いて、平成 20 年度より大強度型小角散乱装置(BL15)および生物用非弾性散乱 装置(BL02)の建設を開始する予定である。そのため、平成 19 年度は、遮蔽体の詳細設 計(遮蔽計算)を完了させる。また、ホウ酸レジン以外の、ホウ素含有コンクリートなど の新しい安価な遮蔽材料の検討も行い、より高性能で安価な遮蔽体の検討を進める計画で ある。

4.7.6 J-PARC リニアックにおける放射線安全評価

Radiation Safety Assessment on J-PARC Linac

増川 史洋

放射線安全セクション

1. 利用の概要(要約):

J-PARC のような高エネルギー粒子加速器においては、加速粒子と原子核の相互作用によって核内・核外のハドロンカスケードにより発生する 2 次粒子(特に中性子)の遮蔽、生成放射能の評価が重要になる。核内・核外ハドロンカスケードをシミュレーションするコードとしては PHITS、MCNPX 等のモンテカルロコードがあるが、これらのコードを実施設体系の解析に適用するためには、一般的に非常に膨大な数の粒子シミュレーションを必要とするので、並列計算機によるシミュレーションの高速化は不可欠である。J-PARC 施設の放射線安全評価にもこれらのコードが用いる必要があり、大型並列計算機を利用している。

2. 利用の内容・結果:

計算は、主に、PCクラスタBタイプを24~64CPU並列で実施した。主な計算内容としては、変更申請(3GeVシンクロトロン新設)に伴うリニアック-3GeVシンクロトロン遮蔽隔壁間の貫通孔ストリーミング評価の再計算と、リニアックダンプ前のビーム窓のメンテナンスに備えて、ビーム窓の残留放射線評価及び局所遮蔽を併設した場合の残留放射線評価を行った。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

なし

4. 今後の利用予定:

リニアックにおけるビームロスの定量化が進むにつれ、明確化されたビームロスによる 漏洩放射線の再評価を行ってゆくとともに、メンテナンスにかかる残留放射線の評価を継 続する。
4.8 大洗研究開発センター

4.8.1 JMTR を用いた照射試験における照射パラメータの評価

Evaluation of Irradiation Parameters in Irradiation Tests of JMTR

長尾 美春、竹本 紀之、雨澤 博男 材料試験炉部 JMTR 技術課

1. 利用の概要(要約):

JMTR を用いた照射試験における中性子束、スペクトル等照射パラメータの評価を行い、 JMTR 利用者に報告することを目的として原子力機構大型計算機システムを利用している。 JMTR 技術課では、「JMTR の計画管理」のテーマのもとに、JMTR を利用した照射試験に 関し、照射場の設定、照射パラメータの予測、評価等のため、3次元モンテカルロコード MCNP による解析を実施している。利用者に報告した解析評価データは、軽水炉材料、核 融合炉材料等の開発研究、大学研究等に生かされている。照射パラメータの評価データを 利用者へ報告するにあたっては、詳細で正確なデータを迅速に提供することが求められて おり、そのための技術開発及び正確な評価データを迅速に提供していくためには、原子力 機構が保有する大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

2. 利用の内容・結果:

JMTR 炉心を 3 次元でモデル化(図1参照)し、3 次元モンテカルロコード MCNP(核デ ータライブラリについては、中性子について FSXLIBJ3R2、 y線について MCPLIB を使用) により PC クラスタA(24 並列)を利用した並列計算により、JMTR を利用して行われた中 性子照射試験に関して、照射試料位置における照射パラメータを解析評価している。その 結果は、利用者に報告している。なお、定常業務として解析評価している照射パラメータ は、高速/熱中性子束及び照射量であるが、特に利用者からの希望により、中性子スペク トル、 y線量、 y線スペクトル、照射損傷量(dpa、He 生成量等)の評価も実施している。

MCNP により解析した中性子束の評価精度については、照射試料と共に照射キャプセル に封入され照射されたフルエンスモニタによる測定データとの比較による検証が行われて いる。MCNP による中性子束の計算値は、フルエンスモニタによる測定値と比較して、定 常的に、高速中性子束(1MeV 以上)について±10%程度、熱中性子束(0.683eV 以下)に ついて±30%程度となっている。

平成18年度においては、17本の照射キャプセルについて、584点の照射試料位置に対し て照射パラメータの評価結果を利用者に報告した。なお、利用者へ報告した結果について は、照射利用の契約に基づき実施されている、という性格上、所内、所外を問わずJMTR 技術課からその内容について紹介することは、原則として不可能である。



図 1 JMTR 炉心の MCNP 計算モデル

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

平成18年度は、なし。

4. 今後の利用予定:

平成18年度までに完了したJMTRを用いた照射試験における照射パラメータの解析評価、 照射キャプセル設計のための核加熱率評価を継続すると共に、JMTR 改修後(H23予定) を見据えた照射場の評価を実施する予定。

4.9 高崎量子応用研究所

4.9.1 イオンビームの運動力学に関する研究

Simulation Study on Ion Beam Dynamics

百合 庸介

ビーム技術開発課

1. 利用の概要(要約):

ALTIX3700 システムおよび PC クラスタシステムを利用し、加速器中を高速で運動する 多数個のイオンから成るビームの振る舞いについて調べるため、粒子シミュレーションを 実施した。主な内容は以下の二つである:

- (i) TIARA の AVF サイクロトロンにおける多重極電磁石を用いた均一照射システムの開発 のために、単粒子トラッキングによりビーム輸送系の基本設計を実施した。
- (ii) 蓄積リングにおける冷却されたイオンビームの基礎物性を分子動力学シミュレーショ ンにより解析した。
- 2. 利用の内容・結果:
 - (i) 八極電磁石等が作る非線形磁場により、荷電粒子ビームの横方向強度分布をガウス分 布から均一分布へと変換することが可能である。我々は、この多重極磁場によるビーム 均一化を利用して、TIARA の AVF サイクロトロンにおいてイオンビーム均一照射シス テムの開発を行っている。この目的のため、ビーム輸送系において 12 極までの多重極 電磁石が作る非線形磁場を考慮できる単粒子トラッキングコードを開発し、ビーム輸送 系の光学系の基本設計を行った。その結果、TIARA の LB コースにおいて多重極電磁石 を用い、図1に示すように、10cm 四方の大面積2次元均一ビームが形成できることを 確認した。エミッタンスやエネルギー幅など様々なビーム条件を想定した系統的なシミ ュレーションにより、ビーム均一化に必要となる多重極磁場強度を見積り、多重極電磁 石を設計した。



図1:八極磁場により均一化されたイオンビームの横方向強度分布。

(ii) 荷電粒子ビームを極限まで冷却すると、最終的にはクーロン結晶化することが知られている。このような冷却ビームの振る舞いを調べるために、粒子間クーロン相互作用を厳密に計算する分子動力学シミュレーションを実施した。これまで、ビーム結晶化は比較的低いエネルギー領域を想定して研究が進められてきたが、ビーム冷却により低エミッタンス化された高エネルギービームは、ルミノシティの向上に有効であることから、高エネルギークリスタルビームの物性を分子動力学シミュレーションを駆使し解析した。トランジションエネルギーが高い特殊なラティス構造のリングで、高エネルギーのクリスタルビームの生成が可能であった。このとき、図2に示すように、ビームエネルギーが高くなるほど、ビームサイズは小さくなると共に、水平方向の実効的な集束力が弱まるためビーム形状は水平方向により扁平になることを確認した。また、3次元クリスタルビームの安定性は、高エネルギーほど低下することが判明した。





- 3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):
 - J. Wei, H. Okamoto, S. Ochi, Y. Yuri, A.M. Sessler, and S. Machida, "Crystalline Beams at High Energies", Proceedings of 2006 European Particle Accelerator Conference, pp.2841-2843.
 - (2) Y. Yuri, N. Miyawaki, T. Kamiya, W. Yokota, K. Arakawa, T. Agematsu, I. Ishibori, H. Kashiwagi, S. Kurashima, T. Nara, S. Okumura, K. Yoshida, and M. Fukuda, "Study on Large-area Uniform Ion Beam Formation Using Multipole Magnets", Proceedings of the 3rd Annual Meeting of Particle Accelerator Society of Japan and the 31st Linear Accelerator Meeting in Japan, pp.913-915.
 - (3) 百合庸介、宮脇信正、神谷富裕、横田渉、荒川和夫、福田光宏、"多重極磁場を用いた イオンビーム大面積均一照射法の検討"、第1回高崎量子応用研究シンポジウム要旨集、 p.196.

- 4. 今後の利用予定:
 - (i) サイクロトロンから引き出されたビームの振る舞いを解析し、実験結果の定量的な比 較や評価を行う予定である。
 - (ii) 安定性やエネルギー依存性等、クリスタルビームやレーザー冷却に関するさまざまな シミュレーションを行う予定である。

4.10 システム計算科学センター

4.10.1 大規模分子動力学法による BCC 鉄結晶のき裂進展

A large-scale molecular dynamics study on the crack extension in BCC iron

蕪木 英雄

システム計算科学センター

1. 利用の概要(要約):

原子炉材料のき裂進展についてミクロな機構を探るため、分子動力学法を用いた BCC 鉄結晶のき裂進展シミュレーションを実施した。分子動力学法では個々の原子を扱うため、 き裂先端から射出される転位の運動範囲を確保し、現実の規模に出来るだけ近づけるため には、多大な粒子数を確保する必要があり、大規模並列計算機の利用が不可欠である。

2. 利用の内容・結果:

約40万原子のBCC鉄結晶について、Altix3700Bx2システム及びPrismシステムの32プロセッサを利用したき裂進展の並列計算を行った。計算領域として、き裂進展方向をできるだけ広くとるために、奥行きを短くし、一辺の長さが約14Å×600Å× 600Åの直方体を用いた。この系において、系の周囲の壁にモードIのき裂応力場の弾性理論解による変位を与えて、き裂進展を調べた。初期き裂としては(001)面でき裂先端は[100]方向に設定し、絶対零度の条件でシミュレーションを行った。その結果、より低い表面エネルギーを持つ(110)面へのき裂の分岐が観測された。経験ポテンシャルは最新のものを用いたが、問題点としてき裂先端の応力集中部にFCC構造が見られた。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

なし

4. 今後の利用予定:

Altix3700Bx2 システム及び Prism システムを用い、より大きな体系で計算を行うと共に、 き裂と転位の相互作用によるき裂進展への影響について調べる予定である。



4.10.2 水の比熱の量子分子動力学計算

Quantum molecular dynamics calculation of the heat capacity of water

志賀基之

シミュレーション技術開発室

1. 利用の概要(要約):

第一原理計算と分子動力学計算を結合させたマルチスケールシミュレーション法の開 発は、金属材料の応力腐食割れ現象の微視的理解など、原子力分野における基礎研究 として重要である。本研究では、分子の熱力学的な性質を調べることのできる新しい マルチスケールシミュレーション法を開発し、水溶液系のテスト計算を行った。

2. 利用の内容・結果:

第一原理計算と分子動力学計算を結合したマルチスケールQM/MM分子動力学法の 提案とプログラム開発を行い、水溶液系のテスト計算を行った。その結果、分子の溶 解熱や動径分布関数といった基礎的な熱力学量を精度良く求めることができるように なった。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

Shiga, M. and Tachikawa, M.,

"ab initio quantum mechanical/molecular mechanical using multiple time scale approach", Molecular Simulation, vol 33, pages 171-184, 2007.

4. 今後の利用予定:

上記で開発した手法を利用し、水分子クラスターや水溶液の性質を詳しく調べるため、 量子効果を取り入れた大規模な第一原理分子動力学計算を行う予定である。

4.10.3 第一原理計算による金属における粒界脆化の研究

First-principles study on the grain boundary embrittlement of metals

山口 正剛

シミュレーション技術開発室

1. 利用の概要(要約):

「粒界脆化」あるいは「粒界割れ」は、様々な原子力材料に共通した重要な研究対象で ある。例えば原子炉圧力容器鋼においては、高経年化による照射量の増大により、リン(P) 偏析による粒界脆化が懸念されている。炉心シュラウド等の炉内構造物においては、粒界 に沿ってき裂が進展する粒界型応力腐食割れ(IGSCC)等の発生が問題となっている。次世代 炉構造材料において問題となるヘリウム脆化も、基本的には粒界が脆化する現象である。

我々はここ数年来、溶質元素の偏析による粒界凝集エネルギーの変化を第一原理計算から計算する手法を構築してきた。そして、大型計算機を活用しつつ、様々な溶質元素による鉄やニッケルの粒界脆化メカニズムを次第に明らかにしつつある。

このように原子炉材料の劣化メカニズムを明らかにすることで、原子炉の高経年化対策 に理論的根拠を提供することや、次世代炉候補材料の損傷評価指標の作成に資することな どを目的としている。

なお、以下の外部資金研究に参加している。

JNES 受託研究:「高経年化対応技術高度化調査研究」(安全研究センター他) 文科省受託研究:「長寿命プラント照射損傷管理技術に関する研究開発」(次世代部門他)

2. 利用の内容・結果:

BccFe Σ3(111)対称傾角粒界を用い、リン (P)と硫黄(S)の偏析による粒界凝集エネル ギーの低下メカニズムを明らかにした。 Fig.1 は計算した電子密度図である。S は粒 界に多数偏析すると粒界において破壊面に 近い状態を形成するが、リンは形成しない 様子が示されている。この違いが、S と P の脆化能力の違いの原因となっている。

また、ヘリウム(He)の偏析による粒界凝 集エネルギーの低下を計算し、それが非常 に大きいことを明らかにした。

さらに、酸素(O)の脆化能力が非常に大き いことを計算から示し、応力腐食割れのメ カニズムの一つの候補となっている酸素脆 化メカニズムに対して理論的根拠を提供し た。



Fig. 1: 偏析原子数8個の場合の電子密度図 (electron/A³)。(a) Sの場合、粒界中に偏析 して隣接した S-S間距離は大きく伸び、そ の間の電子密度がほとんどゼロになり、部分 的に破面に近い状態ができている。(b) Pの 場合、P-P間距離は伸びるものの、破面に近 い状態は形成されない。 3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

【発表】

- (1) 山口正剛、「(基調講演 30 分)第一原理計算による粒界脆化の研究」、日本金属学会秋季大会「シンポジウム:原子炉圧力容器鋼の照射脆化機構研究の最前線」2006年9月新潟大学
- (2) 山口正剛、志賀基之、蕪木英雄、「第一原理計算による金属の粒界脆化の研究」、日本 原子力学会秋季大会、2006年9月、北海道大学
- (3) M. Yamaguchi, Y. Nishiyama, <u>H. Kaburaki</u>, H. Matsuzawa "Impurity-induced decohesion in iron grain boundary – A first-principles study – ", Multiscale Materials Modelling Conference 2006, September 18-22, 2006, Freiburg, GERMANY
- (4) M. Yamaguchi, Y. Nishiyama, <u>H. Kaburaki</u>, "Iron grain boundary decohesion by phosphorous segregation" The 13th Meeting of the International Group on Radiation Damage Mechanisms in Pressure Vessel Steels (IGRDM-13), 2006.10.15-20, TSUKUBA, JAPAN
- (5) M. Yamaguchi, Y. Nishiyama, <u>H. Kaburaki</u>, H. Matsuzawa "The effect of various segregated solutes on the embrittlement of bcc Fe grain boundaries by first-principles calculations", Materials Research Society (MRS) 2006 Fall Meeting, November 27-December 1, 2006, Boston, USA
- (6) 山口正剛、「BCC 鉄粒界のリン偏析による凝集エネルギー低下」、軽水炉材料研究会、 2007 年1月、東北大学金属材料研究所(仙台)
- (7) 山口正剛、「第一原理計算による金属における粒界脆化の研究」、日本原子力学会 2007 年春の年会、2007 年 3 月、名古屋大学

【論文】

- (1) M. Yamaguchi, M. Shiga, H. Kaburaki, "Grain boundary decohesion by sulfur segregation in ferromagnetic Iron and Nickel A first-principles study "Materials Transactions JIM 47(2006)2682. (日本金属学会欧文誌、計算科学特集号)
- (2) M. Yamaguchi, Y. Nishiyama, H. Kaburaki, H. Matsuzawa, "Impurity-induced decohesion in iron grain boundary - A first-principles study - ", Proceedings of Multiscale Materials Modelling Conference 2006.

4. 今後の利用予定:

これまでの研究内容をより深めるとともに、H19 年度より、水素脆化メカニズム解明の ための計算を NEDO プロジェクトの一環として始める。水素脆化は応力腐食割れの候補メ カニズムの一つでもあり、その解明が必要とされている。また、溶質元素の偏析過程の解 明や、レート方程式による偏析のシミュレーションに寄与するための計算を行う予定であ る。そのため、Nudged Elastic Band (NEB)法による原子移動エネルギーの計算などにも取り 組む。

4.10.4 厳密対角化法によるフェルミ原子ガスの物性の解明

Exploration of property of fermi atom gas using exact diagonalization

山田 進

シミュレーション技術開発室

利用の概要(要約):

原子物理学だけでなく物理学全体において最も注目されている話題の1つであるフェル ミ原子からなる極低温ガス(フェルミ原子ガスと呼ぶ)のシミュレーションを実施した。 このフェルミ原子ガスでは、フェシュバッハ共鳴を利用することで原子間相互作用を任意 に引力から斥力までコントロール可能であり、原子物理学の根本問題(原子間相互作用を 制御すると何が起こりうるか?)から基礎物理学の最大の課題(粒子間相互作用がどのよ うに物質の様態を変化させるのか?)にまで解答を与えられる可能性を有している。この 興味深くかつ有用なフェルミ原子ガスに対し、最も高精度で量子状態を計算できる方法と して知られている厳密対角化法および、多少精度は落ちるが大規模なモデルを扱うことの できる密度行列繰り込み群を用いて、高温超伝導体と極めて類似した状況を人工的に作り 出して、その物性探索を実施した。

2. 利用の内容・結果:

光学格子中のトラップされたフェルミ原子ガスの振る舞いを調べるために、これまでに 開発した厳密対角化法と、平成18年度に開発した密度行列繰り込み群を用いてハバードモ デルのハミルトニアン

$$H = -t \sum_{i,j,\sigma} \left(a_{j\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} + H.C. \right) + U \sum_{i} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \left(\frac{2}{N} \right)^2 V \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} \left(i - \frac{N}{2} \right)^2$$

の基底状態を計算した。上式中、UとVは、各々、1つのサイトに2つの粒子が占有する 場合の斥力およびトラップポテンシャルの強さを特徴付ける量である。担当者らは、1次 元及び2次元系の格子上で強く引力を及ぼし合う量子多体系に対する系統的なシミュレー ションを行うことで、強い引力とわずかな並進対称性の破れから超伝導(超流動)を引き 起こすクーパーペア間に強い相関が働くことで非一様性が生じ、超伝導(超流動)と共存 することを初めて見出した(図1,2参照)。これは、格子上の強い引力を及ぼしあうフェ ルミ粒子系に普遍的な振る舞いであり、今後、様々な系で発見されるか再確認される可能 性の高いと考えられる。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

【論文】

 ●山田進、今村俊幸、町田昌彦、 量子大規模固有値問題における共役勾配法の収束性: 適応的シフト前処理の収束性の評価、 日本計算工学会論文集 Vol.2006、論文番号 20060027、(2006).(平成18年度日本計算工学会論文賞) Machida, M., Yamada, S., Ohashi, Y., Matsumoto, H., Novel pairing in the Hubbard model with confinement potential, Physica C, Vol. 445-448, 2006, p. 90-93.

 M. Machida, S. Yamada, Y. Ohashi, and H. Matsumoto On-site pairing and microscopic inhomogeneneity in confined lattice fermion systems, Phys. Rev. A 74, 053621 (2006)

【招待講演】

● 山田進、今村俊幸、町田昌彦、量子多体問題における自由度の壁とそれを越える並列 対角化アルゴリズムの開発:地球シミュレータ上での超並列量子計算の現状、RIMS研 究集会「数値シミュレーションを支える応用数理」、2006 年 11 月、京都大学

4. 今後の利用予定:

2次元モデルに対する密度行列繰り込み群を開発し、より大規模なハバードモデルをシミ ュレーションすることを目指す。



図1:(a) 120 サイト 60 スピン (↑30,↓30)、(b) 240 サイト 120 スピン (↑60,↓60)の 粒子の分布密度。粒子間の反発力、トラップの強さは(a),(b)とも U/t=-5、V/t=1。



図2:2次元25サイト 10スピン(↑5,↓5) U/t=-15, V/t=1における粒子分布。 粒子が市松模様(非一様)に分布していることが確認できる。

4.10.5 大規模分子動力学法による混合転位のピンニング挙動解析

A large scale MD simulation for the pinning behavior of a mixed dislocation

門吉 朋子

シミュレーション技術開発室

1. 利用の概要(要約):

原子炉材料の照射硬化現象のミクロな機構を探るため、分子動力学法を用いた転位と硬 い粒子の相互作用を調べる数値シミュレーションを実施している。具体的には、照射欠陥 を模擬した硬い粒子による混合転位のピン止めの限界応力について、転位線の角度依存性 求め、よりマクロな転位動力学シミュレーションのモデル化に使用することを目指す。分 子動力学法では、個々の原子を扱うため、転位の運動範囲を確保し、現実の規模に出来る だけ近づけるためには、多大な粒子数を確保する必要があり、大規模並列計算機の利用が 不可欠である。

2. 利用の内容・結果:

約70から240万原子の銅結晶について、Altix3700Bx2システム及びPrismシステムの64 プロセッサを利用した並列計算を行った。240万原子というのは、約一辺400Å前後の直方 体である。この系において混合転位及びピンニングサイトの粒子を導入し、外部からせん 断応力を加えて転位と相互作用させ、ピンニングがはずれるメカニズム、応力について詳 細に調べた。その結果18年度は以下のような結果を得ることができた。

- ・約70から240万原子を用いた分子動力学シミュレーションを行い、銅結晶おける混合転位のピンニングメカニズムを明らかにした。(図1)
- ・混合転位のピンニングの角度依存性について、分子動力学法による結果と転位動力学法
 による結果が異なることが分かった。
- ・混合転位のピンニングメカニズムにらせん転位による部分的な交差すべりが影響していることが分かった。(図2)

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等)

M.Itakura, T.Kadoyoshi, H.Kaburaki, Molecular dynamics and quasi-two dimensional dislocation dynamics simulations on the Orowan pinning mechanism of a mixed dislocation in fcc metals, Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computations and Supercomputing in Nuclear Applications, Monterey, California, U.S.A., April 15-19 (2007).

4. 今後の利用予定:

Altix3700Bx2 システム及び Prism システムを用い、より大きな体系で混合転位と粒子の ピンニング特性について分子動力学シミュレーションを継続し、ピンニングの角度依存性 のマクロな特性への影響について調べる予定である。



図1 銅結晶中の混合転位のピンニング



図2 混合転位の部分的な交差すべり

4.10.6 タンパク質非極性キャビティーの水和の可能性

Possibility of the hydration of apolar cavity

及川 雅隆

シミュレーション技術開発室

1. 利用の概要(要約):

タンパク質の内部は原子で隙間なく充填されているのではなく、いくつかの空洞が存在 することが知られている。ここで、水分子1個以上が入る大きさのタンパク質内部の空洞 をキャビティーとよぶことにする。極性アミノ酸残基で囲まれたキャビティーでは、水和 (キャビティーが水分子で満たされること)により、タンパク質は熱力学的に安定化され ることがある。この場合、キャビティーの水分子はキャビティー壁の極性部分と水素結合 を形成することで、配座が固定されやすい。それゆえ、このような水分子の位置は、タン パク質を構成する原子同様、X線結晶構造解析により位置を決定することができる。一方、 非極性アミノ酸残基に囲まれたキャビティー(以下、非極性キャビティーとよぶ)は、熱 力学的観点から水和がおこりにくいと考えられてきた。非極性キャビティーの場合、キャ ビティーに水分子が存在したとしても、キャビティー壁に水素結合の受容基や供与基がな いため、水分子の配座が固定されにくいため、X線結晶構造解析ではその配座を決定する ことが困難である。そのため、非極性キャビティーの水和については明らかになっていな い。

近年 Vaitheeswaran らは、非極性キャビティーにおける水和の可能性を、コンピュータシ ミュレーションによって調べた [1]。彼らは、非極性キャビティーであっても、その体積が 十分に大きいとき、複数の水分子がクラスターを形成することにより、非極性キャビティ ーが水和され、熱力学的に安定になる可能性を示した。しかし、実際のタンパク質では非 極性キャビティーの水和形態は確認されていない。

そこで、タンパク質インターロイキン1β(IL-1β)を対象に分子動力学シミュレーショ ンを行い、タンパク質の非極性キャビティーが水和するのかを、キャビティーの水和によ って生じる自由エネルギー変化を計算することで検証した。このタンパク質の中央に位置 するキャビティーは、全立体構造既知タンパク質に見られる非極性キャビティーの中で最 大の体積をもつ。このキャビティーは、バルク領域の水の密度で考えると、水分子4個が 立体障害なく入ることができる大きさをもつ。この最大級の非極性キャビティーで水和が 実現しなければ、既知タンパク質非極性キャビティーにおいても水和が実現することは困 難であると考えられる。実験によって非極性キャビティーの水和を解析することは困難で あり、IL-1βの非極性キャビティーが水和されるかどうかは、現在でも議論が続いている。 本研究によって、非極性キャビティーの水和に対する理解が進むことが期待できる。

[1]Vaitheeswaran et al. PNAS. 2004, 101, 17002-17005

利用の内容・結果:

キャビティーの水和自由エネルギーは、バルクの水分子1個の消滅に伴う自由エネルギ 一変化ΔG₁と、キャビティーでの水分子1個の生成に伴う自由エネルギー変化ΔG₂の和と して得られる。 ΔG_1 は、周期境界条件下の水 512 分子からなる系を用いて計算した。一方、 ΔG_2 はタンパク質表面と周期境界面との距離が 8Åになるように水 6564 分子を加えた系で 計算した。水分子とタンパク質には、それぞれ TIP3P と OPLS-AA の力場を用いた[2]。各 系について分子動力学シミュレーションを実行し、熱力学的積分法により自由エネルギー 変化 ΔG_1 、 ΔG_2 を見積もった。

水分子の消滅と生成の過程は仮想的なものであり、熱力学的積分法ではこれを扱うため に分子の存在パラメターを導入する。ここで、水分子の生成あるいは消滅に伴う自由エネ ルギー変化を精度よく求めるためには、存在パラメターで定義される生成あるいは消滅過 程の中間状態をいくつか用意し、その各状態についてアンサンブルを生成する必要がある。 必要な中間状態の数について調査し、本研究では21個の中間状態を用いた。各中間状態 に対するアンサンブルの生成に多くの計算時間が必要になり、ITBL システム PrimePower を利用した。計算条件及び結果を以下に示す。

図1に、計算で得られた IL-1βの水和に伴う自由エネルギー変化の結果を示す。計算誤 差を標準偏差のエラーバーで示している。





自由エネルギー変化は、いずれの水分子

の数についても正の値をとっているため、IL-1βの非極性キャビティーでは熱力学的に安定した水和が起きないことを示している。IL-1βの非極性キャビティーは既知キャビティーの中で最大の大きさであり、このサイズで水和しないことから、現時点では非極性キャビティーの水和は起こらないことがわかった。

[2] W. L. Jorgensen In *Encyclopedia of Computational Chemistry* P. v.R. Schleyer (Ed.), Wiley: New York 1998, Vol. *3*, pp. 1986-1989

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

及川雅隆、米谷佳晃 "疎水性残基からなる空洞における水分子の自由エネルギー解析"、 第7回日本蛋白質科学会年会、仙台、2007年5月25日

4. 今後の利用予定:

同様の計算手順を、他のタンパク質の様々なキャビティーに適用し、水和に対するキャ ビティーの大きさと極性の影響について系統的に調査する。

4107 放射線照射下での超伝導体の非平衡ダイナミクス

Non-equilibrium dynamics of superconductor under radiation

佐々 成正

シミュレーション技術開発室・マテリアルシミュレータ開発チーム

利用の概要(要約):

本研究では、超伝導体の非平衡緩和過程を利用するデバイス研究への新たな道を切り拓 くため、超伝導非平衡数値シミュレーションを実施することを目的とした。最近、発見さ れた超伝導体 MgB2は、中性子を良く吸収し核反応を起こすホウ素を含むため、超伝導臨 界状態の鋭敏な熱応答特性を利用した中性子時系列検出デバイスへの応用が期待されてい る。しかしながら、この画期的アイデアも、未だ超伝導の非平衡緩和に関する理論的枠組 みが整備されていないため、デバイス開発は手探りの状態で行われている。この状況を打 開し、系統的に研究開発を行うため、核反応を含む、熱応答の非平衡ダイナミクスを解析 するシミュレーションプラットフォーム構築が本研究の目標であり、既に基本シミュレー ション部分は完成し、一部、地球シミュレータ等でシミュレーションを実施していたが、 超伝導揺らぎを取り扱う部分が完成していないため、温度効果等が十分に議論できなかっ た。そこで、本プロジェクトでは、これを完成させることを具体的目標とした。



J-PARCでの高速検出器としての期待

利用の内容・結果:

上記問題にアプローチするため、時間依存ギンツブルクランダウ方程式とマックスウエ ル方程式を連立させた数値シミュレーションプログラムを既に開発し、磁場中超伝導体の 非平衡ダイナミクスを解析するプラットフォームとして利用してきた。一方、核反応を含 む、熱応答型の非平衡ダイナミクスを理解するためには、熱拡散方程式をシミュレーショ ンに含ませ、且つ、超伝導揺らぎを含むランジュバン型ノイズをインプットするプログラ ムを組み込む必要があった。このような背景下、申請者らは、低温で量子ノイズへと移行 していく揺らぎを取り入れる汎用プラグラムを開発し、全温度領域で高精度なシミュレー ションを行えるプラットフォームの開発に成功した。それらの最新の成果は、国際会議

シミュレーションによる開発先導

NVLS2006 にてロ頭発表を行った他、量子ビーム部門と協力して科研費「特定領域」への 研究応募へと繋げることができた。また、上記のように、今年度後半、大阪府立大と機構 側実験グループによって、実際に中性子検出に成功したため、その実験結果を再現するた めのシミュレーションを行った。その結果、ほぼ、半定量的に実験結果を再現することに 成功している。

- 3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):【学会発表】
 - 国際会議 NVLS2006 にて口頭発表 2) 国際会議「2nd CREST Nano-Virtual-Labs Joint Workshop on Superconductivity」にて発表
 【論文多数】
 - "Quasi-particle spectrum of the nano-scaled anisotropic superconducting plate", Masaru Kato, Hisataka Suematsu, <u>Masahiko Machida</u>, Tomio Koyama and Takekazu Ishida, Physica C: 437-438, pp.132-135(2006).
 - 2) "A d-dot As an Element of Superconducting Devices", M.Kato, H.Suematsu, M.Hirayama, T.Koyama, M.Machida, and T.Ishida, J.Korean Phys. Soc. 48, pp.1074-1079(2006).
 - "Superconduction MgB2 Films as Radiation Detectors", T. Ishida, D.Fujiwara, M.Nishikawa, S.Miki, H.Shimakage, Z.Wang, K.Sato, T.Yotsuya, M.Machida, M.Kato, J.Korean Phys. Soc. 48, pp.1026-1031 (2006).
 - "Direct numerical simulation on non-equilibrium superconducting dynamics after neutron capture in MgB₂ superconductor ",M.Machida, T.Koyama, M.Kato, and T.Ishida, Nucl. Inst. and Methods in Phys. Res. Sec. A: 559, pp.594-596(2006).
 - Thermal transient response of membrane-structured-superconducting MgB₂ detector by using 20-ps pulse laser", T. Ishida, D. Fujiwara, S. Miki, H. Shimakage, Z. Wang, K. Satoh, T. Yotsuya, M. Machida and M. Kato, Nucl. Inst. and Methods in Phys. Res. Sec. A: 559, pp.582-584(2006).
 - "Direct numerical simulations for non-equilibrium superconduting dynamics and related neutron detection in MgB2" <u>M.Machida</u>, T.Koyama, M.Kato and T.Ishida, Physica C 426-431, pp.169-173(2005).
 - "Quasi-particle spectrum of nano-scale conventional and unconventional superconductors under magnetic field" Masaru Kato, Hisataka Suematsu, <u>M. Machida</u>, Tomio Koyama and Takekazu Ishida, Physica C 426-431, pp.41-45(2005).
 - Vortex dynamics in nano-scaled superconducting complex structures (d-dot)" Masayuki Ako, <u>M. Machida</u>, Tomio Koyama, Takekazu Ishida and Masaru Kato, Physica C426-431, pp.122-126(2005).
 - "The interaction between d-dot's" Masaki Hirayama, <u>M. Machida</u>, Tomio Koyama, Takekazu Ishida and Masaru Kato, Physica C426-431, pp.127-131(2005).
 - 10)"Quantum theory for the Josephson phase dynamics in a d-dot" T, Koyama, <u>M. Machida</u>, M. Kato and T. Ishida, Physica C426-431, pp.1561-1565(2005).

4. 今後の利用予定:

平成19年度も引き続きシミュレーション研究を継続し、「核反応を含む、熱応答の非平 衡ダイナミクスを解析するシミュレーションプラットフォーム構築」を進めていく予定で ある。

4.10.8 金属ガラスにおけるせん断帯の理論と 分子動力学法シミュレーション

Theory of Shear Banding in Metallic Glasses and Molecular Dynamics

清水 大志

システム計算科学センター

1. 利用の概要(要約):

金属材料の機械的性質におけるミクロな機構を探るため、分子動力学法シミュレーショ ンを実施している。本研究では、耐照射性、耐腐食性に優れた性質を持つ金属ガラスを対 象として、その変形挙動を解明することを目指している。平成18年度は、ほとんどの金属 ガラスにおいて約2%の単軸歪によりせん断帯が形成されるが、この現象の臨界条件が萌芽 的せん断帯の進展に依存するという理論を提案し、そのシミュレーションによる検証を実 施した。個々の原子を扱う分子動力学法において、せん断帯の進展範囲を確保するために は、多大な粒子数からなるモデル系の計算を行う必要があり、大規模並列計算機の利用が 不可欠である。

2. 利用の内容・結果:

Altix3700Bx2 システム、Prism システム及び PC クラスタシステムを用いて数千~2 千万 原子からなるモデル系の分子動力学シミュレーションを実施し、金属ガラスにおけるせん 断帯の進展にかかる挙動を明らかにした。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

【論文】

• F.Shimizu, S.Ogata and J.Li, "Yield Point of Metallic Glass," Acta Materialia, 54, pp.4293-4298 (2006).

【学会、国際会議等】

- F.Shimizu, S.Ogata, and J.Li, "Theory of Yield Point in Metallic Glass and Molecular Dynamics Calculations," The fifth International Bulk Metallic Glasses Conference (淡路市, 2006 年 10 月 2 日).
- ・清水大志,尾方成信,LiJu,「金属ガラスにおけるせん断帯進展の大規模分子動力学シミ ュレーション」,第50回日本学術会議材料工学連合講演会(京都市,2006年12月14日).
- F.Shimizu, J.Li, and S.Ogata, "Large-Scale Molecular Dynamics Simulation of Shear Band Propagation in Metallic Glass," 2007 TMS Annual Meeting & Exhibition (Orlando FL, USA, 2007 年 2 月 28 日). 等
- 4. 今後の利用予定:

Altix3700Bx2 システム及び Prism システムを用い、より大きな体系の分子動力学シミュレーションを継続して、詳細な解析を進める予定。

4.10.9 ITBL 環境を利用した随伴変数法による形状最適化

Shape Optimization Using an Adjoint Variable Method in ITBL Grid Environment

篠原 主勲

東京大学 インテリジェント・モデリング・ラボラトリー 機構担当者:井田 真人(高度計算機技術開発室)

1. 利用の概要(要約):

流れ場に置かれた物体の形状を最適化するために、非定常な流れ場でも安定して最適解 に収束可能とする随伴変数法を提案し、有限要素法を用いた離散化によるシミュレーショ ン技術を開発した。本技術を円柱形状に適用したところ、評価関数の抗力を約40%低減さ せることができ、最適解の探索で生じる膨大な計算量を、複数のスーパーコンピュータを 用いて並列分散処理することで、実時間の計算処理が可能となった。

2. 利用の内容・結果:

主に Altix3700Bx2(東海)の16ノードを用いて、流れ場に置かれた物体の形状を最適化 するための計算を、ライブラリ HEC-ME を利用して実施した。

ラグランジュ関数の停留条件から流れ場の時間幅を用いて最適化計算開始時間と終了時間を定式化し、非定常流れ場でもロバストに最適解に収束可能とする随伴変数法を示した。 さらに有限要素法により、ラグランジュ関数の方程式を離散化し、メッシュ大変形を許容する重調和方程式、流体の安定化手法からなるシミュレーション技術を並列化ライブラリ HEC-MWにより随伴変数法によるアルゴリズムを開発した。この手法を円柱形状に適用したところ、レイノルズ数100での非定常状態で、teardrop形状になることで最適解に収束し、評価関数の抗力を約40%低減させた。

以上より構造の特性、信頼性、コスト性が複雑に絡み合う評価関数、制約条件からなる 高負荷の計算が要求されるラグランジュ関数の最適解の探索方法を構築した。最適解の探 索で生じる膨大な計算量を、複数のスーパーコンピュータを用いて、並列分散処理するこ とで、実時間の計算処理を可能とした。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

- Shinohara, K., Okuda, H., Ito, S., Nakajima, N. and Ida, M., Shape Optimization Using an Adjoint Variable Method in ITBL Grid Environment, 14th International Conference On Nuclear Engineering, 14-89568 (2006).
- Kazunori SHINOHARA, Hiroshi OKUDA, Satoshi ITO, Norihiro NAKAJIMA and Masato IDA, "Shape Optimization Using Adjoint Variable Method for Reducing Drag", Journal of Power and Energy Systems, Vol. 1, No. 2 (2007), pp.166-177.
- 3. 篠原主勲, 奥田洋司, 伊東聰, 中島憲宏, 井田真人, 揚力を最大化するための随伴変数 法による形状最適化, 第 20 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, (2006), pp.276.

- 4. 篠原主勲,奥田洋司,伊東聰,中島憲宏,井田真人,非定常流れ場に配置された物体の 形状最適化,第56回理論応用力学講演会講演論文集,pp. 285-286, 2007.
- 4. 今後の利用予定:

なし

4.10.10 原子カプラント全体規模の組立構造シミュレーション

Assembled structure simulation of an entire nuclear plant

松原 仁

高度計算機技術開発室

1. 利用の概要(要約):

高度計算機技術開発室では、「耐震性評価用仮想震動台の構築」を中期計画のひとつに掲 げ、原子力プラント全体の振動・変形応答解析を可能とするシステムとシミュレーション 技術の開発を進めている。原子力プラントは多数の部品が集積している巨大構造物であり、 各部品の材料や接合状態、接合タイプは、部材ごとに異なっている。したがって、実環境 における施設全体の詳細な振動・変形挙動を正確に把握するためには、各部品間に働いて いる相互作用力が施設全体に及ぼす影響を定量的に評価する必要がある。原子力プラント 全体の部品は建屋を含めると数千万点以上に上るため、部品間相互作用までを考慮したシ ミュレーションを対象とすると、必然的に超大規模な計算が必要となり、大型並列計算機 の利用が必要不可欠である。

利用の内容・結果:

超並列およびグリッド計算環境にて原子力プラント全体規模の振動解析を実現する、有限要素法による組立構造解析コード FIESTA(FInite Element based STructural Analysis for Assembly)を試作するとともに、大洗研究開発センターにある高温工学試験研究炉(HTTR)の主要機器の外殻構造を対象として、実地震データ(El Centro 地震)を用いた振動解析を実施した。解析では主に、Altix3700Bx2、ApporoHyperBlade、pSeries690を用いた。

本解析では、約1.8 億元の連立方程式を解く必要がある。そこで、原子力プラントの機器 と配管の質量差が大きいことを利用して、プラントを機器系と配管系に階層化し(図1)、 それらを独立に計算するアプローチを採用した。その結果、H18 年度は以下の結果を得る ことができ、原子力施設全体の振動挙動を定量的に評価できる可能性を見出した。

- (1) El Centro 地震波データを用いた実用問題に組立構造解析法を適用し、大規模振動解析 の並列化効率や実行性能の検証を行った。
- (2) 図1の第1層に、格納容器内構造物、空気冷却器、補助冷却器を置き、それぞれを Altix3700Bx2の512CPU、256CPU、128CPUにて計算し、その結果を第2層の配管系へ 境界条件として渡すことで、約1.8億の変形自由度を有するHTTR全体の振動解析を実 現し、本技術の動作と演算精度を確認した。
- (3) 大規模可視化技術を Altix3700Bx2 に実装し、HTTR 全体の弾性変形や弾性波が伝播す る様子等、従来不可能であった大規模データの可視化に成功した。図2は HTTR 全体の 弾性変形の様子を可視化したものであり、変形の大小により青色から赤色に変化してい る。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

(1) 鈴木喜雄他、原子力プラントのための耐震情報管制システム構想:その1 原子力グリ

ッド基盤(AEGIS)の構築、日本原子力学会「2006年秋の大会」, p.651, CD-ROM(2006)

- (2) 西田明美他、原子力プラントのための耐震情報管制システム構想:その2 組立構造解 析による3次元仮想振動台の構築、日本原子力学会「2006 年秋の大会」, p.652, CD-ROM(2006)
- (3) 西田明美、松原仁、田栄、羽間収、鈴木喜雄、新谷文將、中島憲宏、谷正之、近藤誠、 原子カプラントのための3次元仮想振動台の構築-組立構造解析法による巨大施設解 析システムの提案-、日本原子力学会和文論文誌、Vol.6, No.3, 2007.(印刷中)
- (4) 西田明美、鈴木喜雄、松原仁、分散並列計算機環境における原子力プラントのための 3次元仮想振動台システムの構築、第4回日本原子力学会計算科学技術部会業績賞、 2007.3.

4. 今後の利用予定:

HTTRの機器と内部構造物、建屋を含んだ施設全体の振動解析を計画している。将来的 には、部品間の接合状態を高精度に計算できる技術を研究開発することで、実環境下にお ける原子力プラント全体の振動挙動を解明する技術を確立し、原子力施設の耐震性評価手 法のひとつとして寄与する。



図1:階層化された組立構造解析



図2: El Centro 地震波による HTTR 主要機器全体の弾性変形

4.10.11 超高強度レーザーによる高エネルギー電子発生

High energy electron generation by using ultra-intense laser pulses

中村 龍史

大阪大学レーザーエネルギー学研究センター

機構担当者:松田 俊明(情報システム管理室)

1. 利用の概要(要約):

超高強度レーザーを固体に照射することで MeV から GeV にも及ぶ高エネルギー電子を 発生させることが可能である。そこでは、レーザーのポンデロモーティブ力による直接的 な加速から、誘起したプラズマ波を使う航跡場加速までさまざまな加速機構が提案、解明 されている。本研究では、コーンターゲット及びキャピラリーターゲットを利用すること で実現される表面加速について研究を行った。レーザー加速では、運動論的効果が支配的 であるため、粒子コードによる解析が不可欠である。またレーザー波長を分解しつつ、か つ加速長は数百ミクロンオーダーとなるため、非常に大規模な粒子シミュレーションが必 要となる。

2. 利用の内容・結果:

計算は主に、原子力開発機構の ITBL 計算機16~32 CPU を使い行った。計算手法は、 2次元粒子シミュレーションを用いた。計算結果のいくつかを下記に示す。図1は長さ2 00ミクロン、内径10ミクロンのキャピラリーターゲットに、集光強度が10²⁰W/cm²の レーザーパルスを照射した場合のシミュレーション結果である。レーザー伝播と共に、レ ーザー照射領域に数百ギガガウスの超高磁場が誘起されている。同時に、TV/mにも及ぶシ ース場が表面には誘起されている。これらの表面場は電子を閉じ込める方向に作用するた め、電子の運動は、ポテンシャル中に閉じ込められたレーザー電界による強制振動となる

(図2参照)。このポテンシャル振動とレーザー電界による振動が共鳴した場合、電子はレ ーザー電場からエネルギーを得ることになる。この過程は自由電子レーザーの逆過程に相 当する。表面加速ではレーザー電界により直接加速されるため、およそレーザー電界の2 0分の一程度の非常に高い加速勾配が得られる。この結果、200ミクロンのキャピラリ ーターゲットで300MeVまで加速された電子を観測した。この表面加速を実現するため には、いくつか条件があり、粒子シミュレーションにより明らかにされてた(論文1)。

またコーンターゲットを利用することで、コーン先端部においてレーザーが集光されそ の強度が上昇するため、照射レーザーのポンデロモーティブエネルギーを大きく上回る温 度成分をもつ電子を発生することができる。またコーン内壁では表面加速が起こりうるた め、コーンの角度やレーザー集光パターンを制御することで、発生する電子のエネルギー 特性の制御につながる可能性がある。これらのレーザーとコーンターゲットとの相互作用 でおこる電子加速機構について明らかにした(論文2)。

- 3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):
 - 1. T.Nakamura, et al., "Electron surface acceleration on a solid capillary target inner wall irradiated with ultra-intense laser pulses" Phys. Plasmas **14**, 053112 (2006).
 - T.Nakamura, et al., "High energy electron generation by laser-cone interaction", Plasma Fusion Res. 2, 018 (2007)
- 4. 今後の利用予定:

特になし。



図1 (a)キャピラリーターゲットの初期分布

(b)パルス長 150fs、集光強度 10²⁰W/cm² のレーザー光の t=600fs における空間分布 (c)同時刻の準静的磁場分布。



図2 (左図)表面加速の概念図。 (右図)(a)加速電子の運動の様子。(b)電子エネルギーを表面方向の座標関数としてプロットしたもの。

4.10.12 Bayer-Villiger 反応における水素結合の役割の理論的研究

A Theoretical Study on the Role of Hydrogen Bonds in Baeyer-Villiger Reactions

山邊 信一

奈良教育大学・教育実践総合センター

機構担当者:松田 俊明(情報システム管理室)

1. 利用の概要(要約):

ケトンと過酸が反応し付加体を与える。これの転位でエステルまたはラクトンが生じる 反応は、Baeyer-Villiger 酸化反応と呼ばれている。

$$\begin{array}{c} O \\ R^{1-}C^{-}R^{2} + R^{3-}CO_{3}H \longrightarrow R^{1-}C^{-}OR^{2} + R^{3-}CO_{2}H \end{array} (1)$$

これは1899年に発見され、代表的な酸化反応である。しかし、反応機構は長い間、 いくつかの論争があったが、はっきりしないままであった。今回、計算化学を用いて、こ の反応経路をシミュレーション追跡し、過酸3量体が関与する新規な反応機構を見出した。 (1)の反応式にはあらわれない水素結合の共有結合交替への関わりを詳しく吟味した。

2. 利用の内容・結果:

ITBL 計算機に搭載された計算化学のソフトウエア GAUSSIAN03 version D.2 を利用した。 この version での演算は、C.2 より高速化され、反応経路が効率的に追跡できた。反応式(1) でのケトンとしてアセトンとアセとフェノンを用いた。また、過酸として、HCO₃H, H₃CCO₃H, MCPBA を用い、それぞれの経路でのエネルギー的に有利なモデルを選定した。 付加及び転位双方の素過程で、過酸3量体がケトン相手に合理的な結合交替を起こすこと が判明した(図1)。(1)式に示されるように反応進行により、カルボン酸 R³-COOH が生じ る。これと過酸の水素結合が、過酸3量体の代わりに反応に関与したとき、活性化エネル ギーの低下が見られ、autocatalytic effect が示された。置換基が付いた場合も、反応パター ンに変化が無かった。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

The Role of Hydrogen Bonds in Baeyer-Villiger Reactions. Yamabe, S.; Yamazaki, S. J. Org. Chem. 2007, 72, pp.3031-3041.

4. 今後の利用予定:

より現実に近い反応モデルを用いて、今回求められた反応パターンの妥当性を吟味する 計算を計画している。



図1 つづく。



図1. アセトンと過ギ酸3量体による Bayer-Villiger 酸化の反応経路。 ΔG° , ΔG^{\ddagger} は、 RB3LYP/6-31G* SCRF=dipole によって計算した。カッコ内の ΔG° は、G° (acetone)と G° ((H-CO-OOH)₃)の合計に対する値である。カッコ内の ΔS° は S° (acetone) = 73.11 e.u. と S° ((H-CO-OOH)₃) = 141.64 e.u. の合計に対する値である。TS1 (Fig. 1-2)と TS (Fig. 1-6)の下線の値は RB3LYP/6-311+G(d,p) SCRF=dipole による最適化で得られた距離で ある. 鍵カッコ[]は RB3LYP/6-31++G** SCRF=dipole によるものである.

4.10.13 分子の運動エネルギーにより誘起される 固体表面反応機構の研究

Study for the gas – sold surface reaction processes induced by the molecular kinetic energy

笠井 秀明

大阪大学大学院工学研究科精密科学・応用物理学専攻

機構担当者:松田 俊明(情報システム管理室)

1. 利用の概要(要約):

本研究グループでは半導体および金属材料表面に機能性薄膜を創製することを目的とし、 実験的研究および理論的研究を遂行している。本研究での大阪大学が行なう薄膜創製過程 の理論的な研究は、実験的な研究と相補的な位置を占める。実験結果に対して、理論物性 物理学の立場から解析を行なうことで、薄膜創製過程を改善・改良する実験的および理論 的指針を得ることをねらいとする。

具体的には、金属の単結晶表面での極薄酸化膜形成過程に対する理論物理学的な反応解 析を目的とする。

2. 利用の内容・結果:

計算の主要部分は、ITBL 計算機(PRIMEPOWER)によって実施した。計算には、密度 汎関数理論に基づいた第一原理計算コードを用いた。本計算手法ではコーン・シャム方程 式を解くが、この計算がセルフ・コンシステント・フィールド(SCF)の逐次計算である ために、収束に長時間を要する。なおかつ酸素分子に係るポテンシャルエネルギー表面

(PES) を評価するため、2つの酸素原子配置に対してこの SCF 逐次計算が多数回必要で あった。今回 ITBL 計算機を利用することにより達成できた。

極薄酸化膜形成過程の初期反応として、金属表面における酸素吸着反応過程を調べている。

今回は、表面モデルとして、Cu 10原子からなるクラスターを用いた。 酸素分子軸を 表面に並行にして、表面に接近する場合の計算結果を図1に、垂直にして接近する場合を 図2に示す。ポテンシャルエネルギーは、酸素分子の重心と表面との距離のZと、酸素原 子間距離のr(図1,2(a)参照)にマッピングした(図1,2(b)参照)。図では、(r、z)空間 での等エネルギー線を描いてある。図1では、酸素分子が解離して2つの酸素原子と表面 に吸着する反応経路が、図2では、酸素分子が解離し一つの酸素原子が吸着し、もうひと つが表面から再び去っていく反応経路が見出され、それぞれの反応における活性化障壁を 評価できた。 計算の結果、分子軸配向によりこの異なる反応経路があり、それぞれ異な る活性化障壁をもつことから、入射する酸素分子の運動エネルギーに応じて、反応チャン ネルが切り替わる可能性があることがわかった。これは実験結果と整合する。

さらに、Al 表面における極薄酸化膜形成過程を評価するために、Al(111)面および 同(001)面の計算を行い、表面電子状態を評価した。

3.利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

Kousuke Moritani, Muneyuki Tsuda, Yuden Teraoka, Michio Okada, Akitaka Yoshigoe, Tetsuya Fukuyama, Toshio Kasai and Hideaki Kasai, "Effects of Vibrational and Rotational Excitations on the Dissociative Adsorption of O2 on Cu Surfaces", The Journal of Physical Chemistry C, Vol. 111, No. 27, pp. 9961-9967 (2007).

4. 今後の利用予定:

Al 表面の極薄酸化膜形成過程の初期過程としての酸素吸着におけるポテンシャルエネル ギー表面を計算し、その反応機構を解析し共同研究をさらに進める。



図1. 酸素分子が分子軸を表面に並行にして金属表面に接近する場合の計算結果。 (a) 分子配置、Z:酸素分子の重心と表面との距離、r:酸素原子間距離。

(b) (r,z)空間にマッピングされたポテンシャルエネルギー表面(等エネルギー線表示、線間隔 は 0.1eV,酸素-クラスター系の電子状態が三重項状態(左)と五重項状態(右)の場合を記し た。)。

(c) 反応経路座標 S に沿ったポテンシャルエネルギー変化、活性化障壁は、三重項状態(実線) と五重項状態(破線)のエネルギーが交差する点で見出された。



図2. 図1に同じ。 ただし酸素分子が分子軸を表面に垂直にして金属表面に接近する場合の計算結果。

4.10.14 アルドール反応の経路の追跡

Search for the Path of the Aldol Reaction

平原 広治

奈良教育大学・教育学部

機構担当者:松田 俊明(情報システム管理室)

1. 利用の概要(要約):

2分子のアセトアルデヒドを水酸化ナトリウム水溶液の存在下で反応させると、3-ヒド ロキシブタナールが生成する。この反応はアルドール縮合(aldol condensation)と呼ばれる。

反応開始は塩基である OH の作用により、カルボアニオン CH₂CHO 生成と考えられる。 しかし、従来具体的な経路が追跡されたことが無かった。今回、反応式(1)の経路追跡のた め、(CH₃-CHO)₂ + OH + (H₂O)₈のモデルについて、計算化学の手法を用いた。8個の水分 子は、アセトアルデヒドと OH が有する非共有電子対への水素結合での配位で用いられた。 同時に、(アセトン)₂ + OH + (H₂O)₈での経路も求められ、アセトアルデヒドとアセトンの反 応でのエネルギー変化が比較された。

2. 利用の内容・結果:

ITBL 計算機に搭載された計算化学のソフトウエア GAUSSIAN03 を使用した。それぞれ の素過程での遷移状態(TS)構造をエネルギー最適化で求めた。次に、TSより固有反応座 標(IRC)沿いに経路が追跡された。IRC の先で、反応体、中間体、及び生成物の構造が求め られた。それぞれの構造で、溶媒効果を含めて精度を高めたエネルギーの1点計算を行っ た。そして、ギブスの自由エネルギー変化で、各素過程間の推移を表現した。図1で、TS1 は C-H 結合開裂でカルボアニオンを与える経路を示す。TS2 は C---C 共有結合生成の段階 である。TS3 は、3-ヒドロキシブタナール完成の段階である。律速段階は TS1 であった。 同様の経路が、アセトンの場合も求められた。しかし、律速段階は TS2 であった。この律 速段階の相違は実験事実と正しく対応している。

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

"How Many Elementary Processes Are Involved in Base- and Acid-promoted Aldol Condensations?" Shinichi Yamabe*, Kohji Hirahara, and Shoko Yamazaki, 投稿予定

4. 今後の利用予定:

今回の塩基触媒下のアルドール縮合に引き続き、酸性条件下での反応のシミュレーション計算を行う予定である。そして、塩基性と酸性条件の反応での素過程の違いを検討する 予定である。







図1. 塩基触媒下のアルドール縮合の遷移状態の最適化構造

4.10.15 超臨界 CO2 平行平板間乱流の直接数値シミュレーション

Direct numerical simulation of stably-stratified turbulent channel flows with CO₂ supercritical pressure

山本 義暢, 功刀 資彰

名大院・工・エネルギー理工,京大院・工・原子核 機構担当者:松田 俊明(情報システム管理室)

1. 利用の概要(要約):

原子炉等のエネルギープラントの効率向上や核融合炉の実用化のためには、高温・高熱 流束、強温度勾配、あるいは超臨界状態といった極限状態における熱流動特性の把握が不 可欠である.超臨界状態における二酸化炭素は大きな熱容量を有する反面,プラントル数が 高い.しかし超臨界状態特有の伝熱促進効果(ピストン効果)が得られるため伝熱媒体として 有用と考えられている.そこで本研究では直接数値計算(Direct Numerical Simulation, DNS) を用いて、二酸化炭素の臨界点近傍条件における乱流熱伝達特性及び物性値変化の影響に ついて考察を行った.

2. 利用の内容・結果:

対象とした流れ場は2次元の十分に発達した温度差一定,上面加熱の安定成層平行平板間 乱流場とした.流体は熱力学的圧(Pbase)7.58MPa 下における CO2 とし,平板上壁温度を 32.7℃,下壁温度を 31.7℃に固定した(図1).計算条件を表1に示す.この条件下において は,図2に示すように CO2 の物性値は臨界温度(32.2℃)付近で鋭い極値を有し,僅かな温度 差で物性値が大きく変動する.計算においては,1ステップあたり約6分×14(CASE3, ITBL 並列計算機・14PE の場合)の CPU タイムを要した.従って本研究に割り当てられた CPU タ イムでは十分に長い時間平均演算を行うことが困難であったため,他機関の大型計算機シス テムを併用し DNS データベースの構築を行った.得られた DNS データベースの解析結果に より以下の知見を得た.

- 強い物性値変化が存在する超臨界状態においても,壁面近傍の領域では温度分布の直線 分布が成立する領域(粘性底層)が存在する(図 3).
- 2) 超臨界状態においては、高プラントル効果により、安定成層乱流場における層流化傾向 は低減するものの、チャンネル中央付近で温度乱れの増加傾向が存在する.(図4)また これは高プラントル数流体に作用する浮力の効果に起因していると考えられる(図6).
- 3) しかしこの温度乱れの増加は一種の逆勾配拡散現象であるため熱輸送には寄与せず超 臨界状態における伝熱促進効果を説明できない(図 5).
- 4) エネルギー方程式の収支式においては、物性値変化の影響が無視できず、物性値変化と 対流運動に基づく相関項の影響が支配的である.一方分子拡散項における物性値変化の 影響は極めて小さいことがわかった(図省略).従って乱流モデル等における乱流熱輸送 の予測においては、物性値変動の影響を適切に評価することが不可欠である.

3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

山本義暢,功刀資彰,佐竹信一,超臨界 CO₂ 平行平板間乱流の直接数値シミュレーション,第 44 回日本伝熱シンポジウム,B244,2007.

4. 今後の利用予定:

3次元非定常熱流動シミュレーションは、実験等では得難い極限環境・特殊状態の詳細情報を得ることができる反面、計算負荷は極めて高い.計算機性能の向上・CPU時間の割り当て等の配慮を希望します.



Fig.1 Computational domain and coordinates system

Table 1 Numerical conditions						
					Grid number	Resolution
		Re ,	Pr	Ri	$N_x \times N_y \times N_z$	Δx^+ , Δy^+ , Δz^+
CASE1	Passive	150	8.8-33	-	216×182×216	5.6, 0.3-2.0, 2.8
CASE2	Passive	150	8.8-33	-	512×182×256	2.8, 0.3-2.0, 2.8
CASE3	Stable	150	8.8-33	14.2	576×182×288	2.1, 0.3-2.0, 2.1
CASE4	Constant	150	15	-	216×182×216	5.6, 0.3-2.0, 2.8
	property					
CASE5	Constant	150	5	-	80×182×80	15.0, 0.3-2.0, 7.5
	property					

 Re_{τ} :Reynolds number= $u_{tin}h/v_0$, Pr:Prandtl number, Ri:Richardson number= $\beta g h \Delta \theta / u_{tin}^2$, $\Delta \theta = \theta_{top} - \theta_{bottom}$, u_{tin} : friction velocity of initial flow field, N_x , N_y , N_z :Grid number for x-, y-, and z-directions, $\Delta x^+, \Delta y^+, \Delta z^+$:=Grid spacing for x-, y-, and z-directions(= $\Delta x u_{tin}/v_0, \Delta y u_{tin}/v_0, \Delta z u_{tin}/v_0, 0 = \mu_0/\rho_0$)







Fig.3 Mean temperature profiles, passive scalar case (Near bottom wall)


Fig. 6 Flow visualization, end view

あとがき

本報告集をまとめるにあたり、情報システム管理室に編集委員会を設置した。本委員会で は平成18年度における大型計算機システムの利用実績を調査し、使用実績時間の多かったユ ーザに報告書作成を依頼した。これら提出された報告書を編集・校正し、本報告集が完成し た。多忙にもかかわらず報告書を作成して頂いたユーザの皆様並びに本報告集作成にご協力 を頂いた関係者各位にこの場を借りて感謝申し上げる。

本報告集には多部門にわたる大型計算機システムを利用した優れた研究実績がまとめられ ている。これらの研究実績は、研究者の探究心と努力によることは勿論ではあるが、機構の 大型計算機システムが研究開発の現場において必要不可欠であることを改めて示している。 これら大型計算機システムへの計算需要は今後も増大していく傾向にある一方、大型計算機 システムの計算機資源は大幅に不足している状況が続いている。研究推進のため、機構とし てこの需要に応えるべく、コストパフォーマンスに優れたより大規模なシステムへの更新を 進めていかなければならない。

本報告集が、機構のニーズに対応した大型計算機システムの導入に向けての契機となり、 また分野を越えた情報共有による更なる研究開発の発展に役立つことを期待している。

平成 19 年 10 月

編集委員会

委員長:谷 正之 委員 :関 暁之、坂本 健作、庄司 誠、菅谷 寿男 事務局:久米 悦雄、桧山 一夫、伊巻 頼子

付録 平成 18 年度大型計算機システム利用成果一覧

以下は平成18年度大型計算機利用に係わる研究成果実績調査により各ユーザから報告さ れた外部発表等のタイトルをまとめたものである

【安全性研究センター】

- M. Murazaki, K. Tonoike and G. Uchiyama, "Measurement of Neutron Dose under Criticality Accident Conditions at TRACY Using TLDs" (投稿予定)
- (2) 平成 18 年度 軽水炉燃材料詳細健全性調查報告書、平成 19 年 3 月
- (3) T. Nakamura, "Irradiation Test Plan in JMTR", Fuel Safety Research Meeting 2007, May 16-17, 2007/Ibaraki
- J. Ogiyanagi, "Development of Power Transient Test Facility in JMTR", Fuel Safety Research Meeting 2007, May 16-17, 2007/Ibaraki

【先端基礎研究センター】

- Avramov P.V., Naramoto H., Sakai S., Narumi K., Lavrentiev V., Maeda Y.,
 "Quantum Chemical Study of Atomic Structure Evolution of the Co_x/C₆₀ (x≤2.8)
 Composites", J. Phys. Chem. A, 111, pp.2299-2306 (2007).
- (2) Sakai S., Yakushiji K., Mitani S., Takanashi K., Naramoto H., Avramov P., Narumi K., Lavrentiev V.,
 "Tunnel magnetoresistance in Co nanoparticle/Co-C₆₀ compound hybrid system", Appl. Phys. Lett. **89**, 113118 (2006).
- (3) Avramov P.V., Sorokin P.B., Fedorov A.S., Fedorov D.G., Maeda Y.,
 "Band gap unification of partially Si-substituted single wall carbon nanotubes", Phys. Rev. B74, 245417 (2006).
- (4) P. Avramov, H. Naramoto, S. Sakai, K. Narumi, V. Lavrentiev, "Quantum Chemical Study of Atomic Structure Evolution of the Co_x/C_{60} (x \leq 2) Composites", XII-th International Congress of Quantum Chemistry, Kyoto Terrsa, May 21-26, 2006, Kyoto, Japan.
- (5) Pavel Avramov, 楢本洋, 境誠司, 鳴海一雅, Vasily Lavrentiev, 前田佳均
 「Co_x/C₆₀ 化合物 (x ≤ 2.8) の局所的な原子・電子構造の密度汎関数法による計算」
 第 54 回応用物理学関係連合学術講演会、相模原市、2007 年 3 月 27 日

【原子力基礎工学研究部門】.

- (1) 今後、日本原子力学会等で発表する予定。
- (2) 太田雅之, "選択チャンネル核分裂モデルによる簡便な核分裂収率評価法", 日本原子力学会「2006 年秋の大会」E24,
 (2006 年 9 月 27~29 日,北海道大学).
- M. Ohta, "Calculation of fission product yield with selective channel scission model", 3rd Workshop on Neutron Measurements, Evaluations and Applications (NEMEA-3), Borovets, Bulgaria, 25-28 October 2006.
- M. Ohta and S. Nakamura, "SND2006-V.06: Calculation of Fission Yield by Macroscopic - Microscopic Method Based on Selective Channel Scission Model", T. Fukahori (Ed.), Proc. of 2006 Symposium on Nuclear Data, Jan. 25-26, 2007, RICOTTI, Tokai-mura, Ibaraki-ken, Japan, ISBN978-4-89047-138-6, Nuclear Data Division, Atomic Energy Society of Japan (2007) [CD-ROM].
- K. Tsuduki and T. Matsunaga, "Importance of hydrological parameters in contaminant transport modeling in a terrestrial environment",
 In: Proceedings of International Symposium on Environmental Modeling and Radioecology, Inst. for Environment Sci., Aomori, Oct. 18-20, 2006, pp. 65-72.
- (6) T. Kobayashi, S. Otosaka, O. Togawa and K. Hayashi, Development of a Non-conservative Radionuclides Dispersion Model in the Ocean and its Application to Surface Cesium-137 Dispersion in the Irish Sea, J. Nucl. Sci. Technol., 44(2), pp.238-247 (2007)
- (7) 日本原子力研究開発機構, 「下北海域における海洋放射能予測コードの高度化」成果報告書 (2007)
- (8) 小林卓也,海洋中における放射性核種移行モデルーアイリッシュ海への適用ー、 放射線医学総合研究所シンポジウム「放射線環境・生物影響研究におけるモデル と放射線防護」報文集、千葉、2006 年 12 月 7-8 日 (2007)
- (9) 小林卓也,乙坂重嘉,林圭佐,外川織彦, 海洋環境評価システムの検証(II)1. 粒子状物質輸送モデルを用いたアイリッシュ海における Cs-137の長期拡散シミュレーション, 日本原子力学会 2007 年春の年会,名古屋 (2007)
- (10) 永井晴康, 茅野政道, 寺田宏明, 原山卓也, 小林卓也, 都築克紀, 金庚玉, 古野朗子; 数値環境システム SPEEDI-MP, JAEA-Research 2006-057 (2006)

- (11) 永井晴康,小林卓也,都築克紀,金庚玉;
 大気・海洋・陸域モデル結合のためのモデルカップラー, JAEA-Data/Code 2007-002 (2007)
- (12) 永井晴康,都築克紀;
 大気一陸面一水文結合モデルの開発と砂漠地域における水循環予測の試験計算
 (2),日本気象学会 2006 秋季大会,名古屋 (2006)
- T. Misawa, et al., "Development of Design Technology on Thermal-Hydraulic Performance in Tight-lattice Rod Bundle: V - Large Paralleled Simulation", Proceedings of 15th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE15), April 22-26, 2007, Nagoya, Japan
- (14) 吉田啓之, "低減速軽水炉の伝熱流動解析研究の現状", 日本原子力学会秋の大会, TD22, (2006)
- (15) 吉田啓之,他,"改良界面追跡法による稠密炉心内流体混合量の評価", 日本原子力学会秋の大会,N09,(2006)
- (16) 吉田啓之,他,"改良界面追跡法による高圧2 チャンネル流体混合実験解析", 日本原子力学会春の大会,(2007)
- (17) Hiroyuki Yoshida, Takuji Nagayoshi, Kazuyuki Takase and Hajime Akimoto,
 "Development of Design Technology on Thermal-Hydraulic Performance in Tight-Lattice Rod Bundles: IV - Numerical Evaluation of Fluid Mixing Phenomena using Advanced Interface-Tracking Method -, Proceedings of ICONE15, ICONE-10532 (2007)
- (18) Hiroyuki Yoshida, Takuji Nagayoshi, Kazuyuki Takase and Hajime Akimoto,
 "Numerical Evaluation of Fluid Mixing Phenomena in Boiling Water Reactor Using Advanced Interface-Tracking Method", Proceedings of the 5th Joint ASME/JSME Fluids Engineering Conference, FEDSM2007-37302 (2007)
- (19) Hiroyuki Yoshida, Takeharu Misawa, Kazuyuki Takase and Hajime Akimoto,
 "Analytical Procedure on Fluid Mixing Phenomena in Boiling Water Reactor Core with Advanced Interface Tracking Method", Proceedings of the 5th Joint ASME/JSME Fluids Engineering Conference, FEDSM2007-37675 (2007)
- (20) 「計算科学的手法による機構論的炉心熱設計手法の開発」,平成18年度日本原子力研究開発機構理事長表彰研究開発功績賞
- (21) Tatsuhiko Sato and Koji Niita, "Analytical Function to Predict Cosmic-Ray Neutron Spectrum in the Atmosphere", Radiation Research, 166, pp.544-555 (2006)

- (22) Tatsuhiko Sato, Koji Niita, Hiroshi Iwase, Hiroshi Nakashima, Yasuhiro Yamaguchi and Lembit Sihver, "Applicability of Particle and Heavy Ion Transport Code PHITS to the Shielding Design of Spacecrafts", Radiation Measurement, 41, pp.1142-1146 (2006)
- (23) 佐藤 達彦, 仁井田 浩二
 「大気中における宇宙線由来の中性子エネルギースペクトル予測モデル」
 第 67 回応用物理学会学術講演会, 滋賀, 8 月 29 日-9 月 1 日 (2006)
- (24) 佐藤達彦「核データを用いた大気中の宇宙線輸送計算」
 2006 年度核データ研究会,東海,1月 25-26 日(2007)
- (25) 佐藤達彦,遠藤章,仁井田浩二,保田浩志
 「大気中における宇宙線スペクトル予測モデルの確立」
 日本原子力学会 2007 年春の年会,名古屋,3月 27-29 日(2007)
- (26) 「地球上任意地点における宇宙線由来の中性子の強度を瞬時に予測できるソフト ウェアを公開」 (2006 年 9 月 28 日)
- (27) 平成18年9月29日掲載,日本経済新聞(15面),「中性子強度の予測ソフト公開」
- (28) 平成18年9月29日掲載,日経産業新聞(9面),「宇宙線中性子強度 予測ソフトを公開」
- (29) 平成18年9月29日掲載,日刊工業新聞(31面),「宇宙線生成の中性子 実測並み精度で計算」
- (30) 平成18年10月8日掲載,科学新聞(1面), 「宇宙線由来の中性子強度予測ソフト開発」
- (31) Daiki SATOH et al., "Reevaluation of secondary neutron spectra from thick targets by heavy-ion incidences", Nuclear instruments & methods in physics research A (投稿中)
- (32) 桜井健、森貴正、須崎武則、齊藤正樹
 「TCA 軽水減速ウラン炉心における Np-237 サンプル反応度価値の測定と解析」
 日本原子力学会 2007 年秋の大会、口頭発表
- Masaki ANDOH, et al., "Measurement and Analysis of ²³⁸U Doppler Reactivity Effect in FCA Cores Simulating Light-Water-Moderated MOX Fuel Lattices", J. Nucl. Sci.and Technol. 44, pp.537-547 (2007).
- (34) 安藤真樹、他,
 "FCA を用いた軟スペクトル場における²³⁸U ドップラー効果の測定(共同研究)",
 JAERI-Research 2005-026 (2005).

- (35) Mariko Higuchi and Miroslav Pinak, "Molecular dynamics simulation of clustered DNA damage site with DNA repair enzyme MutM", Fifth East Asia Biophysics Symposium and Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, November 2006, Okinawa, Japan.
- (36) Mariko Higuchi, Miroslav Pinak and Kimiaki Saito,"Effects of Abasic Site and 80x0G Lesions on DNA Molecule",Jpn. J. Health Phys., 42 (2007) pp.166-173.
- (37) 藤本 浩文・Miroslav Pinak・Juraj Kotulic Bunta・根本 俊行・土田 耕三・前川 秀
 彰,「Ku タンパク質と二重鎖 DNA 分子の分子動力学的シミュレーション」、
 日本分子生物学会 2006 フォーラム,2006 年 12 月,名古屋
- (38) Y. Iwamoto, K. Niita, Y. Sakamoto, T. Sato and N. Matsuda,
 "Validation of the event generator mode in the PHITS code and its application", International Conference on Nuclear Data for Science and Technology (ND2007), Nice, France, April 22-27, 2007
- (39) 日本原子力学会 和文論文誌、
 1 4 M e V 中性子直接問かけ法による高感度検出,(II)ウエス系ウラン廃棄物、
 春山 満夫、飛田 浩、高瀬 操、森 貴正、VOI. 6,No 1,p. 65-72(2007)
- (40) 日本原子力学会「2007 年春の年会」3月28日(水)
 B21 14MeV 中性子直接問いかけ法における検出感度の改善 (JAEA) 春山満夫,高瀬 操,飛田 浩

【量子ビーム応用研究部門】

- Hisashi Ishida, Atsushi Matsumoto, Yu Tsutsumi and Kei Yura, Conformational analysis of the structure of ribosome fit into electron microscopy density maps with normal mode analyses and molecular dynamics simulations, Proceedings of the16th International Microscopy Congress, Proceedings, p.242 (2006)
- Hisashi Ishida, Atsushi Matsumoto, Yu Tsutsumi and Kei Yura, Comparative analysis of ribosome atomic structures deduced computationally from EM images and X-ray structures, The 51st Annual Meeting of Biophysical Society、アメリカ、2007年3月
- (3) 石田恒、堤遊、松本淳、由良敬、
 リボソーム新生ペプチドトンネルの静的および動的構造の解析、
 第7回蛋白質科学会年会、2007年5月

- Yonetani, Y., Kono, H. & Go, N. (2006).
 Sequence-dependent DNA conformation and flexibility characterized by hydration pattern.
 In Fifth East Asian Biophysics Symposium & Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Okinawa.
- (5) Fujii, S., Kono, H., Takenaka, S., Go, N. & Sarai, A. (2006).
 Analysis of sequence-dependent conformation of DNA backbone torsion angles by molecular dynamics simulations.
 In Fifth East Asian Biophysics Symposium & Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Okinawa.
- (6) Fujii, S., Kono, H., Takenaka, S., Go, N. & Sarai, A. (2006).
 Sequence Context Dependent Flexibility of DNA Studied by Molecular Dynamics Simulation.
 In Fifth East Asian Biophysics Symposium & Forty-Fourth Annual Meeting of the Biophysical Society of Japan, Okinawa.
- Yonetani, Y., Kono, H., Fujii, S., Sarai, A. & Go, N. (2007).
 DNA deformability and hydration studied by molecular dynamics simulation. Molecular Simulation 33, pp.103-107.
- (8) Y.Okamoto, T.Yaita, H.Shiwaku, S.Suzuki, Paul A.Madden,
 「Recent Status of XAFS work on molten salt systems in the SPring-8」
 Actinide-XAS-2006 国際会議、平成 18 年 9 月、(カールスルーエ、ドイツ)
- (9) 岡本芳浩、矢板毅、塩飽秀啓、松浦治明、Paul A. Madden
 「放射光 XAFS と MD 計算による希土類-アルカリ塩化物の混合挙動研究」
 第 38 回溶融塩化学討論会、平成 18 年 11 月、東京理科大学(野田)
- (10) 岡本芳浩、鶴岡卓哉、矢板毅、Paul A. Madden
 「分子動力学法による乾式再処理電解浴中の金属イオン環境シミュレーション」
 JAEA-Research 2007-005
- (11) Kousuke Moritani, Muneyuki Tsuda, Yuden Teraoka, Michio Okada, Akitaka Yoshigoe, Tetsuya Fukuyama, Toshio Kasai and Hideaki Kasai, "Effects of Vibrational and Rotational Excitations on the Dissociative Adsorption of O2 on Cu Surfaces", The Journal of Physical Chemistry C, Vol. 111, No. 27, pp. 9961-9967 (2007).
- (12) M. Boero, T. Ikeda, E. Ito, and K. Terakura, "Hsc70 ATPase: An Insight into water dissociation and joint catalytic role of K⁺ and Mg²⁺ metal cations in the hydrolysis reaction", J. Am. Chem. Soc. **128**, 16798 (2006).

- (13) T. Ikeda, M. Boero, and K. Terakura, "Hydration of alkali ions from first principles molecular dynamics revisited", J. Chem. Phys. **126**, 034501 (2007).
- (14) T. Ikeda, M. Boero, and K. Terakura, "Hydration properties of magnesium and calcium ions from constrained first principles molecular dynamics", J. Chem. Phys. (in press)
- (15) Ikeda, M. Boero, and K. Terakura,
 "Hydration of Alkali Ions from First Principles Molecular Dynamics Revisited",
 Symposium on Progress and Future Prospects in Molecular Dynamics Simulation,
 -In Memory of Professor Shuichi Nosé-, Yokohama, June 6-8 (2006).
- (16) 池田隆司、"超高圧下の水の第一原理分子動力学シミュレーションII"、 日本物理学会 2006 年秋季大会、千葉、9月 23-26 日 (2006).
- (17) 池田隆司、"超高圧下の水の第一原理分子動力学シミュレーションIII"、
 日本物理学会 2006 年春季大会、鹿児島、3月 18-21 日 (2007).
- (18) 18年度までに作業した3GeVシンクロトロン放射線遮蔽設計及び安全評価の結果は、平成18年度下期に文科省に申請したJ-PARC 3GeVシンクロトロン施設の許認可申請書における線量評価結果に用いられた.
- (19) A.Miyashita, T.Ohnuma, M.Iwasawa, H.Tsuchida, M.Yoshikawa,
 "Generation of amorphous SiO₂/SiC interface structure by the first-principles molecular dynamics simulation", 6th European Conference on silicon Carbide and Related Materials (4-6 Sep 2006, Newcastle).
- T.Ohnuma, A.Miyashita, M.Iwasawa, M.Yoshikawa, H.Tsuchida,
 "Dynamical simulation of SiO₂/4H-SiC(0001) interface oxidation process: from first-principles", 6th European Conference on silicon Carbide and Related Materials (4-6 Sep 2006, Newcastle).
- (21) 宮下敦巳、大沼敏治、岩沢美佐子、土田秀一、吉川正人、
 「シミュレーションによるアモルファス SiO₂/SiC 界面の生成
 ~第一原理分子動力学計算~」、
 シリコンカーバイド及び関連ワイドギャップ半導体研究会第 15 回講演会、
 (2006 年 11 月 9~10 日、高崎).
- (22) 大沼敏治、宮下敦巳、岩沢美佐子、吉川正人、土田秀一、
 「SiO₂/4H-SiC(0001)界面における熱酸化過程の第一原理分子動力学シミュレーション -炭素クラスターの形成-」、
 シリコンカーバイド及び関連ワイドギャップ半導体研究会第15回講演会、
 (2006 年 11 月 9~10 日、高崎).

- (23) 宮下敦巳、大沼敏治、岩沢美佐子、土田秀一、吉川正人、
 「耐放射線性 SiC デバイス用酸化膜の第一原理分子動力学シミュレーション」、
 日本原子力学会 2007 年春の年会(2007 年 3 月 27 日、名古屋).
- (24) 宮下敦巳、大沼敏治、岩沢美佐子、土田秀一、吉川正人、
 「アモルファス SiO₂/SiC 界面構造の第一原理計算による生成 II」、
 2007 年春季第 54 回応用物理学関係連合講演会(2007 年 3 月 27 日、東京).
- (25) 大沼敏治、宮下敦巳、岩沢美佐子、吉川正人、土田秀一、
 「SiO₂/4H-SiC(0001)界面における酸素解離反応の活性化エネルギー」、
 2007 年春季第 54 回応用物理学関係連合講演会(2007 年 3 月 27 日、東京).
- (26) T. Hosokai, K. Kinoshita, A. Zhidkov, A. Maekawa, A. Yamazaki and M. Uesaka, Phys. Rev. Lett. 97, 075004 (2006)
- (27) 物理学会夏季大会「強レーザー場による透明素材の絶縁破壊過程の第一原理計算」 乙部智仁、山極満、岩田潤一、矢花一浩、中務孝、G.F.Bertsch
- (28) 物理学会春季大会「**強レーザー場によるダイアモンドの誘電破壊の第一原理計算**」 乙部智仁、山極満、岩田潤一、矢花一浩、中務孝、G.F.Bertsch
- (29) K. Moribayashi, 'Role of excited states of Li ions in the stopping power of molecular hydrogen', J. Plasma Fusion Res. Series vol.7, pp.150-153 (2006)
- (30) K. Moribayashi, 'Comparison of the stopping powers calculated by using rate equation with those by Monte Carlo method', J. Phys: Conference series, 58, pp.192-194 (2007)..

【核融合研究開発部門】

- Hiromasa Iida, V. Ivanov, "Dose rate assessment outside the Neutron Test Area Neutron source intensity vs. Wall thickness - ", NAG-264-NTA, Sep. 2006
- (2) Hiromasa Iida, L. Lu, Y. Wu "Nuclear Analysis of the Port Limiter and Neutron Flux Monitor in the Equatorial Port -An example of MCAM application to ITER design calculation-", NAG-265-port limiter, Jan. 2007
- (3) Hiromasa Iida, "Application of MCAM in generation of MCNP model for the ITER port limiter ", Progress review Meeting on Neutronics Analyses for ITER, 26 – 27 March 2007, L'Amphithéâtre, Le Château de Cadarache

- Hiromasa Iida, "Calculation results for ITER benchmark problem using input data converted with the "GEOMIT" code",
 Progress review Meeting on Neutronics Analyses for ITER, 26 27 March 2007, L'Amphithéâtre, Le Château de Cadarache
- (5) Kentaro Ochiai, Satoshi Sato, Masayuki Wada, Chikara Konno,
 "Analyses of Benchmark Experiments at FNS with Recent Nuclear Data Libraries",
 核データ研究会, January 2007
- (6) Chikara Konno, "Analyses of fusion integral benchmark experiments at JAEA/FNS with FENDL-2.1", Progress review Meeting on Neutronics Analyses for ITER, 26 – 27 March 2007, L'Amphithéâtre, Le Château de Cadarache
- (7) 2007 年 10 月に開催される国際会議 ISFNT-8 で口頭発表予定。
- (8) 本研究の成果を 2007 年度の JAEA-Data/Code にまとめる予定。
- (9) Y. Kagei, Y. Kishimoto, and T. Miyoshi, "Free boundary simulations of MHD instabilities with a finite volume based full-MHD code", The 48th Annual meeting of the APS Division of Plasma Physics, Philadelphia, USA, Oct. 30-Nov. 3 2006.
- (10) Y. Kagei, Y. Kishimoto, and T. Miyoshi, "Development of a finite-volume-based full-MHD code for internal and external MHD instabilities", The 11th Workshop on Active Control of MHD Stability, Princeton, USA, Nov. 6-8 2006.
- (11) 影井康弘、岸本泰明、三好隆博、
 "有限体積法 full-MHD コードによる自由境界 MHD シミュレーション"、
 第 23 回プラズマ・核融合学会年会、つくば市、平成 18 年 11 月 28 日-12 月 1 日.
- Y. Kagei, S. Tokuda, and T. Miyoshi,
 "Simulation of external MHD modes in a tokamak plasma by a finite volume method code", US-Japan JIFT Workshop on Progress of Extended MHD Models, Toki, Japan, March 26-27, 2007.
- (13) N. Miyato, Y. Kishimoto and J. Q. Li,
 "Zonal flow and GAM dynamics and associated transport characteristics in reversed shear tokamaks," J. Plasma Phys. 72, pp.821-824 (2006).
- N. Miyato, Y. Kishimoto and J. Q. Li,
 "Nonlocal behaviour of zonal flows in tokamak plasmas,"
 Plasma Phys. Control. Fusion 48, A335-A340 (2006).

- (15) N. Miyato, Y. Kishimoto and J. Q. Li,
 "Interplay between zonal flows/GAMs and ITG turbulence in tokamak plasmas,"
 21st IAEA Fusion Energy Conference, Chengdu, China (October 16-21, 2006).
- (16) Y. Kishimoto, K. Miki, N. Miyato, J. Q. Li and J. Anderson,
 "Turbulent transport associated with GAM dynamics near critical gradient regime," 21st IAEA Fusion Energy Conference, Chengdu, China (October 16-21, 2006).
- (17) 宮戸直亮、岸本泰明、李継全、"加熱駆動の ITG 乱流シミュレーションによるトカマクプラズマ中の乱流輸送の研究"、第6回核融合エネルギー連合講演会、 富山国際会議場(2006年6月13日-6月14日)
- (18) "Self-organization in electron temperature gradient driven turbulence", Y. Idomura, Phys. Plasmas. 13, 080701 (2006).
- (19) "Kinetic simulations of turbulent fusion plasmas",Y. Idomura, T.-H. Watanabe, and H. Sugama,Comptes Rendus Physique 7, pp.650-669 (2006).
- (20) "Conservative gyrokinetic Vlasov simulation", Y. Idomura, M. Ida, and S. Tokuda, Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul., in press (2007).
- (21) "Kinetic simulations of electrostatic plasma waves using Cubic-Interpolated-Propagation scheme", M. Lesur, Y. Idomura, and S. Tokuda, JAEA-Research, 2006-089 (2007).
- (22) "Conservative gyrokinetic Vlasov simulation using Morinishi scheme",
 Y. Idomura, M. Ida, S. Tokuda, and L. Villard, 33rd EPS Plasma Physics Conference, Rome, Italy, 2006, O3.004 (oral).
- (23) "Large scale simulations of turbulent fusion plasmas", Y. Idomura, International Supercomputer Conference 2006, Dresden, Germany, 2006 (invited).
- (24) "New conservative gyrokinetic Vlasov code and its comparison to gyrokinetic δf particle-in-cell code", Y. Idomura, M. Ida, S. Tokuda, and L. Villard, Vlasovia2006, Florence, Italy, 2006 (oral).
- (25) "Conservative gyrokinetic full-f Vlasov simulation", Y. Idomura, M. Ida, S. Tokuda, and L. Villard, JIFT Workshop on "Gyrokinetic Simulation of Ion and Electron Temperature Gradient-Driven Transport", San Diego, USA, 2007 (oral).
- (26) "保存系ジャイロ運動論的ブラゾフコードの開発"、
 井戸村泰宏、井田真人、徳田伸二、Laurent Villard、
 プラズマ・核融合学会第 23 回年会、2006 年 11 月 28 日、つくば

- (27) Y. Kishimoto, K. Miki, N. Miyato, J.Q. Li, J. Anderson (on Oct.21, 2006)
 "Turbulent transport associated with GAM dynamics near critical gradient regime"
 (on October 21, 2006) (PD2: oral presentation),
 21st IAEA Fusion Energy Conference, October 16 (Mon.)-21(Sat.), 2006
- (28) K. Miki , Y. Kishimoto, J.Q. Li, N. Miyato, Intermittent transport associated with geodesic acoustic mode near critical gradient regime, accepted for publication in Physcal Review Letters, September, 2007.
- (29) 岸本泰明:
 「臨界勾配近傍の輸送ダイナミックス」(H18年11月8日)、
 平成18年度核融合科学研究所共同研究会
 「核燃焼プラズマ閉じ込め特性の理解に向けたトロイダルプラズマ閉じ込め・輸送の包括的研究」、平成18年11月8日(水)-26日(木)、核融合科学研究所
- (30) Y. Kishimoto, K. Miki, J.Q. Li, J. Anderson,
 "Turbulent dynamics associated with GAM and zonal flow near critical gradient -Gyro-fluid simulation and GAM intermittency - "
 JIFT workshop on "Gyrokinetic Simulation of Ion and Electron Temperature Gradient-Driven Transport: Physics Mechanisms Behind the Transport Coefficient, January 10(Wed.)-12(Fri.), 2007,
 University of California, San Diego, SERF Building, CASS Room 329
- (31) 岸本泰明:

「乱流輸送における多階層ダイナミックスと理論・シミュレーションの役割」
「プラズマ・核融合研究における High Performance Computing ワークショップ」
および「大型シミュレーション 研究会」合同研究会、
平成 19 年 1 月 23 日(火)-1 月 24 日(木),
核融合科学研究所(土岐市)、管理棟 4 回第 1 会議室

- Y. Kishimoto, K. Miki, N. Miyato, J.Q. Li, J. Anderson, "Turbulent transport with zonal flow and GAM near critical gradient" (on March 26, 2006) (Invited presentation), 3th IAEA Technical Meeting on "theory and plasma instabilities", March 26 (Mon.)-28(Wed.), 2007, University of York, United Kingdom
- (33) T. Ozeki, et al., "Integrated Simulation Code for Burning Plasma Analysis", Fusion Sci. Tech. 50 (2006) pp.68-75.
- N. Hayashi, et al., "Integrated simulation of ELM energy loss determined by pedestal MHD and SOL transport", 21st IAEA Fusion Energy Conference, Chengdu China, 16-21 Oct. 2006, Nucl. Fusion 47 (2007) pp.682-688.

- (35) 林 伸彦、他、「SOL-ダイバータプラズマの動的応答を考慮した ELM 崩壊シミュ レーション」、プラズマ・核融合学会年会、11月28-12月1日、筑波大
- T. Ozeki and JT-60 Team, "High-beta steady-state research with integrated modeling in the JT-60 Upgrade", 48th Annual Meeting of the Division of Plasma Physics, Philadelphia USA, 30 Oct.-3 Nov., Phys. Plasmas 14 (2007) 056114.
- (37) N. Hayashi, et al., "Integrated Simulation of ELM Crash with Dynamic Response of SOL-Divertor Plasmas", 3rd IAEA Technical Meeting on the Theory of Plasma Instabilities, 26-28 March 2007, York U.K.
- (38) N.Aiba et al., "Effects of 'sharpness' of the plasma cross-section on the MHD stability of tokamak edge plasmas", Nucl. Fusion 47, 297 (2007).
- (39) N.Aiba et al., "Numerical Method for the Stability Analysis of Ideal MHD Modes with a Wide Range of Toroidal Mode Number in Tokamaks", Plasma and Fusion Res. 2, 010 (2007).
- (40) 相羽信行他、"ピーリング・バルーニングモードの安定性に対するプラズマ上部形状の影響に関する数値解析"、第6回核融合エネルギー連合講演会(富山)、2006年6月13~14日
- (41) N.Aiba et al., "Effects of 'sharpness' of the plasma cross-section on the MHD stability of tokamak edge plasmas", 21st IAEA Fusion Energy Conference (Chengdu, China) 2006/10/16~21.
- (42) 相羽信行他、"大域的・周辺局在理想 MHD モードの線形安定性解析手法の確立と
 ELM 解析への応用"、第 23 回プラズマ核融合学会年会招待講演(筑波)、
 2006 年 11 月 28 日~12 月 1 日
- (43) 濱松清隆,滝塚知典,林伸彦,小関隆久,
 「NTM 磁気島における EC 波電流駆動の数値シミュレーション」,
 第 23 回プラズマ・核融合学会年会,
 筑波大学大学会館,2006 年 12 月 1 日

【次世代原子カシステム研究開発部門】

(1) 大島 宏之、今井 康友、
 「高速炉燃料集合体内詳細熱流動解析評価手法の開発(6)
 ーワイヤースペーサ型燃料集合体解析への適用ー」、
 日本原子力学会 2006 年秋の大会

- (2) 大島 宏之、今井 康友、
 「高速炉燃料集合体内詳細熱流動解析評価手法の開発(7)
 -変形バンドル内流動の予備的解析-」、
 日本原子力学会 2007 年春の年会
- (3) K. Suda, A. Watanabe, H. Ohshima, "Numerical Simulation of Sodium-Water Reaction Phenomena under Small Leakage Condition in a Steam Generator", Proc. of 14th International Conference on Nuclear Engineering, 2006.
- (4) 高田孝,山口彰,須田一則,大島宏之,
 "高速炉蒸気発生器におけるナトリウム-水反応シミュレーション",
 日本機械学会 2006 年度年次大会,2006.
- T. Takata, A. Yamaguchi, A. Uchibori, H. Ohshima, "Numerical Investigation of Sodium-Water Reaction Phenomena in a Tube Bundle Configuration", Proc. of 2007 International Congress on Advances in Nuclear Power Plants, 2007.
- (6) 内堀昭寛,大島宏之,高田孝,山口彰,
 "高速炉におけるナトリウム-水反応現象の数値解析",
 日本機械学会第12回動力・エネルギー技術シンポジウム,2007.
- (7) 内堀昭寛,大島宏之,高田孝,山口彰,
 "高速炉におけるナトリウムー水反応現象の数値解析 (SERAPHIM コードの検証とパラメータ感度解析)",
 日本機械学会 2007 年度年次大会, 2007.
- (8) 内堀昭寛,渡部晃,大島宏之,高田孝,山口彰,
 "高速炉蒸気発生器内ナトリウムー水反応現象に対する数値解析手法の開発– SERAPHIM コードの検証とパラメータ影響解析-",
 日本原子力学会秋の大会,2007.
- (9) 伊藤 啓,山本 義暢,功刀 資彰,
 "ガス巻込み現象の直接数値解析に向けた手法の開発:
 (1)非構造格子系における流動解析手法の構築と検証",
 日本原子力学会 2007 年春の年会要旨集 J39 (2007)
- (10) 田中正暁、大島宏之、
 「サーマルストライピング現象を対象とする流体
 一構造間熱連成を考慮した数値解析コードの開発-」、
 日本原子力学会 2006 年秋の大会、K41.

JAEA-Review 2007-055

- (11) M. Tanaka, and H.Ohshima, "DEVELOPMENT OF THERMAL-HYDRAULIC CODE COUPLED WITH HEAT CONDUCTION IN STRUCTURE FOR THERMAL STRIPING PHENOMENA", AJTE2007, HT2007-32720, Vancouver, CANADA, July 8-12, 2007.
- (12) 「モンテカルロ法を用いた「もんじゅ」性能試験における燃焼係数解析」, 原子力学会 2006 年秋の年会
- (13) Suzuki, T. Nakagiri, and K. Aoto, "The refinement of the rate determining process in sulfur trioxide electrolysis using the electrolysis cell", International Journal of Hydrogen Energy (印刷中).
- (14) Suzuki and T. Nakagiri, "Sulfur trioxide adsorption on Pt surface", Advances in Quantum Chemistry (印刷中).
- (15) Suzuki and T. Nakagiri, "Evaluation for the configurational and electronic state of SO₃ adsorbed on Pt surface", Chemical Physics (投稿中).
- (16) Suzuki et al., "Calculation of X-ray absorption near edge structure of CeO₂ using a model cluster", Chemical Physics (投稿中).
- (17) Suzuki and T. Nakagiri, "Clarification of the mechanism of sulfur trioxide electrolysis-Evaluation of SO₃ and O Atom Adsorbed on Pt Surface-", Journal of Nuclear Science and Technology (投稿中).
- (18) Suzuki and T. Nakagiri, "Sulfur trioxide adsorption on Pt surface", The 4th International Conference on DV-X α Method, Jeju, Korea (2006).
- (19) 鈴木知史,中桐俊男"高速増殖炉に適用可能な熱電併用水素製造システムの開発
 (6)-第一原理計算による SO₃分子の Pt 電極表面への吸着挙動の評価-",
 日本原子力学会 2006 年秋の年会,札幌(2006).
- (20) Suzuki and T. Nakagiri : "Clarification of the mechanism of sulfur trioxide electrolysis", The 10th ISSP International Symposium on Nanoscience at Surfaces, Kashiwa (2006).
- (21) 鈴木知史: "SO₃分子のPt 電極表面への吸着挙動の評価",
 日本化学会関東支部茨城地区研究交流会",日立 (2006).
- (22) G. Chiba, K. Numata, 'Neutron transport benchmark problem proposal for fast critical assembly without homogenization,' Ann. Nucl. Energy, 34, pp.443-448 (2007).

【J-PARCセンター】

- 2007年4月に中国東莞(Dongguan)で開催された核破砕中性子源に関する国際会 議18th International Collaboration of Advances Neutron Source (ICANS-XVIII)にて、本 研究を発表した。会議報告論文も提出しており、近いうちに、会議報告論文集と して、発刊される予定である。
- H. Tatsumoto, M. Teshigawara, T. Aso, K. Ohtsu, F. Maekawa, and T. Kato,
 "THERMAL STRESS ANALYSIS FOR A TRANSFER LINE OF HYDROGEN MODERATOR IN J-PARC",2007 CEC-ICMC.

【高崎量子応用研究所】

- J. Wei, H. Okamoto, S. Ochi, Y. Yuri, A.M. Sessler, and S. Machida, "Crystalline Beams at High Energies", Proceedings of 2006 European Particle Accelerator Conference, pp.2841-2843.
- Y. Yuri, N. Miyawaki, T. Kamiya, W. Yokota, K. Arakawa, T. Agematsu, I. Ishibori, H. Kashiwagi, S. Kurashima, T. Nara, S. Okumura, K. Yoshida, and M. Fukuda, "Study on Large-area Uniform Ion Beam Formation Using Multipole Magnets", Proceedings of the 3rd Annual Meeting of Particle Accelerator Society of Japan and the 31st Linear Accelerator Meeting in Japan, pp.913-915.
- (3) 百合庸介、宮脇信正、神谷富裕、横田渉、荒川和夫、福田光宏、
 "多重極磁場を用いたイオンビーム大面積均一照射法の検討"、
 第1回高崎量子応用研究シンポジウム要旨集、p.196.

【計算科学技術推進センター】

- (1) Shiga, M. and Tachikawa, M., "ab initio quantum mechanical/molecular mechanical using multiple time scale approach", Molecular Simulation, vol 33, pages 171-184, 2007.
- (2) 山口正剛、

 「(基調講演 30 分)第一原理計算による粒界脆化の研究」、日本金属学会秋季大会
 「シンポジウム:原子炉圧力容器鋼の照射脆化機構研究の最前線」

 2006 年 9 月新潟大学
- (3) 山口正剛、志賀基之、蕪木英雄、
 「第一原理計算による金属の粒界脆化の研究」、
 日本原子力学会秋季大会、2006年9月、北海道大学

- (4) M. Yamaguchi, Y. Nishiyama, H. Kaburaki, H. Matsuzawa "Impurity-induced decohesion in iron grain boundary – A first-principles study –", Multiscale Materials Modelling Conference 2006, September 18-22, 2006, Freiburg, GERMANY
- (5) M. Yamaguchi, Y. Nishiyama, H. Kaburaki, "Iron grain boundary decohesion by phosphorous segregation" The 13th Meeting of the International Group on Radiation Damage Mechanisms in Pressure Vessel Steels (IGRDM-13), 2006.10.15-20, TSUKUBA, JAPAN
- (6) M. Yamaguchi, Y. Nishiyama, H. Kaburaki, H. Matsuzawa "The effect of various segregated solutes on the embrittlement of bcc Fe grain boundaries by first-principlescalculations", Materials Research Society (MRS) 2006 Fall Meeting, November 27-December 1, 2006, Boston, USA
- (7) 山口正剛、
 「BCC 鉄粒界のリン偏析による凝集エネルギー低下」、
 軽水炉材料研究会、2007 年1月、東北大学金属材料研究所(仙台)
- (8) 山口正剛、
 「第一原理計算による金属における粒界脆化の研究」、
 日本原子力学会 2007 年春の年会、2007 年 3 月、名古屋大学
- M. Yamaguchi, M. Shiga, H. Kaburaki, "Grain boundary decohesion by sulfur segregation in ferromagnetic Iron and Nickel – A first-principles study –" Materials Transactions JIM 47(2006)2682. (日本金属学会欧文誌、計算科学特集号)
- (10) M. Yamaguchi, Y. Nishiyama, H. Kaburaki, H. Matsuzawa, "Impurity-induced decohesion in iron grain boundary – A first-principles study –", Proceedings of Multiscale Materials Modelling Conference 2006.
- (11) 山田進、今村俊幸、町田昌彦、
 量子大規模固有値問題における共役勾配法の収束性:
 適応的シフト前処理の収束性の評価、
 日本計算工学会論文集 Vol.2006、
 論文番号 20060027、(2006).(平成 18 年度日本計算工学会論文賞)
- (12) Machida, M., Yamada, S., Ohashi, Y., Matsumoto, H., Novel pairing in the Hubbard model with confinement potential, Physica C, Vol. 445-448, 2006, p. 90-93.
- (13) M. Machida, S. Yamada, Y. Ohashi, and H. Matsumoto On-site pairing and microscopic inhomogeneneity in confined lattice fermion systems, Phys. Rev. A 74, 053621 (2006)

- (14) 山田進、今村俊幸、町田昌彦、
 量子多体問題における自由度の壁とそれを越える並列対角化アルゴリズムの開発:地球シミュレータ上での超並列量子計算の現状、
 RIMS 研究集会「数値シミュレーションを支える応用数理」、
 2006 年 11 月、京都大学
- (15) M.Itakura, T.Kadoyoshi, H.Kaburaki, Molecular dynamics and quasi-two dimensional dislocation dynamics simulations on the Orowan pinning mechanism of a mixed dislocation in fcc metals, Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computations and Supercomputing in Nuclear Applications, Monterey, California, U.S.A., April 15-19 (2007).
- (16) 及川雅隆、米谷佳晃
 "疎水性残基からなる空洞における水分子の自由エネルギー解析"、
 第7回日本蛋白質科学会年会、仙台、2007年5月25日
- (17) 国際会議 NVLS2006 にて口頭発表
- (18) 国際会議「2nd CREST Nano-Virtual-Labs Joint Workshop on Superconductivity」にて 発表
- (19) "Quasi-particle spectrum of the nano-scaled anisotropic superconducting plate", Masaru Kato, Hisataka Suematsu, <u>Masahiko Machida</u>, Tomio Koyama and Takekazu Ishida, Physica C: 437-438, pp.132-135(2006).
- (20) "A d-dot As an Element of Superconducting Devices", M.Kato, H.Suematsu, M.Hirayama, T.Koyama, M.Machida, and T.Ishida, J.Korean Phys. Soc. 48, pp.1074-1079(2006).
- (21) "Superconduction MgB2 Films as Radiation Detectors", T. Ishida, D.Fujiwara,
 M.Nishikawa, S.Miki, H.Shimakage, Z.Wang, K.Sato, T.Yotsuya, M.Machida, M.Kato,
 J.Korean Phys. Soc. 48, pp.1026-1031 (2006).
- (22) "Direct numerical simulation on non-equilibrium superconducting dynamics after neutron capture in MgB₂ superconductor ",M.Machida, T.Koyama, M.Kato, and T.Ishida, Nucl. Inst. and Methods in Phys. Res. Sec. A: 559, pp.594-596(2006).
- (23) "Thermal transient response of membrane-structured-superconducting MgB₂ detector by using 20-ps pulse laser", T. Ishida, D. Fujiwara, S. Miki, H. Shimakage, Z. Wang, K. Satoh, T. Yotsuya, M. Machida and M. Kato, Nucl. Inst. and Methods in Phys. Res. Sec. A: 559, pp.582-584(2006).

- (24) "Direct numerical simulations for non-equilibrium superconduting dynamics and related neutron detection in MgB2" <u>M.Machida</u>, T.Koyama, M.Kato and T.Ishida, Physica C 426-431, pp.169-173(2005).
- (25) "Quasi-particle spectrum of nano-scale conventional and unconventionalsuperconductors under magnetic field" Masaru Kato, Hisataka Suematsu, <u>M. Machida</u>, Tomio Koyama and Takekazu Ishida, Physica C 426-431, pp.41-45(2005).
- (26) "Vortex dynamics in nano-scaled superconducting complex structures (d-dot)" Masayuki Ako, <u>M. Machida</u>, Tomio Koyama, Takekazu Ishida and Masaru Kato, Physica C426-431, pp.122-126(2005).
- (27) "The interaction between d-dot's" Masaki Hirayama, <u>M. Machida</u>, Tomio Koyama, Takekazu Ishida and Masaru Kato, Physica C426-431, pp.127-131(2005).
- (28) "Quantum theory for the Josephson phase dynamics in a d-dot" T, Koyama, <u>M. Machida</u>, M. Kato and T. Ishida, Physica C426-431, pp.1561-1565(2005).
- (29) F.Shimizu, S.Ogata and J.Li, "Yield Point of Metallic Glass," Acta Materialia, 54, pp.4293-4298 (2006).
- (30) F.Shimizu, S.Ogata, and J.Li, "Theory of Yield Point in Metallic Glass and Molecular Dynamics Calculations," The fifth International Bulk Metallic Glasses Conference (淡路 市, 2006 年 10 月 2 日).
- (31) 清水大志,尾方成信,LiJu,
 「金属ガラスにおけるせん断帯進展の大規模分子動力学シミュレーション」,
 第 50 回日本学術会議材料工学連合講演会 (京都市,2006 年 12 月 14 日).
- (32) F.Shimizu, J.Li, and S.Ogata, "Large-Scale Molecular Dynamics Simulation of Shear Band Propagation in Metallic Glass," 2007 TMS Annual Meeting & Exhibition (Orlando FL, USA, 2007 年 2 月 28 日). 等
- (33) Shinohara, K., Okuda, H., Ito, S., Nakajima, N. and Ida, M., Shape Optimization Using an Adjoint Variable Method in ITBL Grid Environment, 14th International Conference On Nuclear Engineering, 14-89568 (2006).
- (34) Kazunori SHINOHARA, Hiroshi OKUDA, Satoshi ITO, Norihiro NAKAJIMA and Masato IDA, "Shape Optimization Using Adjoint Variable Method for Reducing Drag", Journal of Power and Energy Systems, Vol. 1, No. 2 (2007), pp.166-177.

- (35) 篠原主勲,奥田洋司,伊東聰,中島憲宏,井田真人, 揚力を最大化するための随伴変数法による形状最適化, 第 20 回数値流体力学シンポジウム講演論文集, (2006), pp.276.
- (36) 篠原主勲,奥田洋司,伊東聰,中島憲宏,井田真人, 非定常流れ場に配置された物体の形状最適化,
 第56回理論応用力学講演会講演論文集,pp. 285-286, 2007.
- (37) 鈴木喜雄他、
 原子力プラントのための耐震情報管制システム構想:
 その1 原子力グリッド基盤(AEGIS)の構築、
 日本原子力学会「2006 年秋の大会」, p.651, CD-ROM(2006)
- (38) 西田明美他、
 原子力プラントのための耐震情報管制システム構想:
 その2 組立構造解析による3次元仮想振動台の構築、
 日本原子力学会「2006 年秋の大会」, p.652, CD-ROM(2006)
- (39) 西田明美、松原仁、田栄、羽間収、鈴木喜雄、
 新谷文將、中島憲宏、谷正之、近藤誠、
 原子力プラントのための3次元仮想振動台の構築-組立構造解析法による巨大施
 設解析システムの提案-、日本原子力学会和文論文誌、Vol.6, No.3, 2007.(印刷中)
- (40) 西田明美、鈴木喜雄、松原仁、 分散並列計算機環境における原子力プラントのための3次元仮想振動台システムの構築、第4回日本原子力学会計算科学技術部会業績賞、2007.3.
- (41) T.Nakamura, et al., "Electron surface acceleration on a solid capillary target inner wall irradiated with ultra-intense laser pulses" Phys. Plasmas 14, 053112 (2006).
- (42) T.Nakamura, et al., "High energy electron generation by laser-cone interaction", Plasma Fusion Res. 2, 018 (2007)
- (43) The Role of Hydrogen Bonds in Baeyer-Villiger Reactions. Yamabe, S.; Yamazaki, S. J. Org. Chem. 2007, 72, pp.3031-3041.
- (44) Kousuke Moritani, Muneyuki Tsuda, Yuden Teraoka, Michio Okada, Akitaka Yoshigoe, Tetsuya Fukuyama, Toshio Kasai and Hideaki Kasai, "Effects of Vibrational and Rotational Excitations on the Dissociative Adsorption of O2 on Cu Surfaces", The Journal of Physical Chemistry C, Vol. 111, No. 27, pp. 9961-9967 (2007).

JAEA-Review 2007-055

- (45) "How Many Elementary Processes Are Involved in Base- and Acid-promoted Aldol Condensations?" Shinichi Yamabe*, Kohji Hirahara, and Shoko Yamazaki, 投稿予定
- (46) 山本義暢,功刀資彰,佐竹信一,
 超臨界 CO₂ 平行平板間乱流の直接数値シミュレーション,
 第 44 回日本伝熱シンポジウム,B244,2007

表1. SI 基本単位 SI 基本単位 基本量 名称 記号 長 さ × ____ トル m 質 量 キログラム kg 時 間 秒 \mathbf{S} アンペア 電 流 А 熱力学温度 ケ ル ビ ン Κ 量モ 物質 ル mol光 度カ デ ラ $^{\rm cd}$

衣2. 産卒単位を用いて衣される51組立単位の例					
如去里	SI 基本単位				
和1.12.里	名称	記号			
面積	平方メートル	m ²			
体積	立法メートル	m ³			
速 さ , 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)	キログラム毎立法メートル	kg/m^3			
質量体積(比体積)	立法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			
(物質量の)濃度	モル毎立方メートル	$mo1/m^3$			
輝 度	カンデラ毎平方メートル	cd/m^2			
屈 折 率	(数の) 1	1			

表2. 基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

± -	CT	土立古石之石
- 衣り、	21	按與諳

致 D. 51 1安與阳									
乗数	接頭語	記号	乗数	接頭語	記号				
10^{24}	э タ	Y	10 ⁻¹	デシ	d				
10^{21}	ゼタ	Z	10 ⁻²	センチ	с				
10^{18}	エクサ	E	10 ⁻³	ミリ	m				
10^{15}	ペタ	Р	10 ⁻⁶	マイクロ	μ				
10^{12}	テラ	Т	10 ⁻⁹	ナノ	n				
10^{9}	ギカ	G	10 ⁻¹²	ピコ	р				
10^{6}	メカ	M	10 ⁻¹⁵	フェムト	f				
10^{3}	キロ	k	10 ⁻¹⁸	アト	а				
10^{2}	ヘクト	h	10 ⁻²¹	ゼプト	Z				
10^{1}	デカ	da	10 ⁻²⁴	ヨクト	у				

表3. 固有の名称とその独自の記号で表されるSI組立単位

			51 烟元击顶	
組立量	名称	記문	他のSI単位による	SI基本単位による
	»Ц (41)		表し方	表し方
平 面 角	ラジアン ^(a)	rad		$m \cdot m^{-1} = 1^{(b)}$
立 体 角	ステラジアン ^(a)	$\mathrm{sr}^{(c)}$		$m^2 \cdot m^{-2} = 1^{(b)}$
周 波 数	ヘルツ	Hz		s ⁻¹
力	ニュートン	Ν		$m \cdot kg \cdot s^{-2}$
圧力,応力	パスカル	Pa	N/m^2	$m^{-1} \cdot kg \cdot s^{-2}$
エネルギー,仕事,熱量	ジュール	J	N•m	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2}$
工率,放射束	ワット	W	J/s	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-3}$
電荷,電気量	クーロン	С		s•A
電位差(電圧),起電力	ボルト	V	W/A	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-3} \cdot A^{-1}$
静電容量	ファラド	F	C/V	$m^{-2} \cdot kg^{-1} \cdot s^4 \cdot A^2$
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-3} \cdot A^{-2}$
コンダクタンス	ジーメンス	S	A/V	$m^{-2} \cdot kg^{-1} \cdot s^3 \cdot A^2$
磁東	ウェーバ	Wb	V•s	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot A^{-1}$
磁束密度	テスラ	Т	Wb/m^2	$kg \cdot s^{-2} \cdot A^{-1}$
インダクタンス	ヘンリー	Н	Wb/A	$m^2 \cdot kg \cdot s^2 \cdot A^2$
セルシウス温度	セルシウス度 ^(d)	°C		K
光東	ルーメン	1m	$cd \cdot sr^{(c)}$	$m^2 \cdot m^{-2} \cdot cd = cd$
照度	ルクス	1 x	1m/m^2	$m^2 \cdot m^{-4} \cdot cd = m^{-2} \cdot cd$
(放射性核種の)放射能	ベクレル	Bq		s ⁻¹
吸収線量, 質量エネル	J L J	C-w	T/ka	22
ギー分与, カーマ		Gy	J/ Kg	m•s
線量当量,周辺線量当			- 6	
量,方向性線量当量,個	シーベルト	Sv	J/kg	m ² • s ⁻²
人線重当重,組織線重当				

(a) ラジアン及びステラジアンの使用は、同じ次元であっても異なった性質をもった量を区別するときの組立単位の表し方として利点がある。組立単位を形作るときのいくつかの用例は表4に示されている。
 (b) 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"1"は明示されない。
 (c) 測光学では、ステラジアンの名称と記号srを単位の表し方の中にそのまま維持している。
 (d) この単位は、例としてミリセルシウス度m℃のようにSI接頭語を伴って用いても良い。

表4.単位の中に固有の名称とその独自の記号を含むSI組立単位の例

	SI 組立単位			
粗立里	名称	記号	SI 基本単位による表し方	
粘度	パスカル秒	Pa•s	$m^{-1} \cdot kg \cdot s^{-1}$	
力のモーメント	ニュートンメートル	N•m	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2}$	
表 面 張 力	ニュートン毎メートル	N/m	kg • s ⁻²	
角 速 度	ラジアン毎秒	rad/s	$m \cdot m^{-1} \cdot s^{-1} = s^{-1}$	
角 加 速 度	ラ ジ ア ン 毎 平 方 秒	rad/s ²	$m \cdot m^{-1} \cdot s^{-2} = s^{-2}$	
熱流密度,放射照度	ワット毎平方メートル	W/m^2	kg • s ⁻³	
熱容量、エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot K^{-1}$	
質量熱容量(比熱容量), 質量エントロピー	ジュール毎キログラム 毎ケルビン	$J/(kg \cdot K)$	$m^2 \cdot s^{-2} \cdot K^{-1}$	
質量エネルギー (比エネルギー)	ジュール毎キログラム	J/kg	$m^2 \cdot s^{-2} \cdot K^{-1}$	
熱 伝 導 率	ワット毎メートル毎ケ ルビン	₩/(m•K)	$\mathbf{m} \cdot \mathbf{kg} \cdot \mathbf{s}^{-3} \cdot \mathbf{K}^{-1}$	
体積エネルギー	ジュール毎立方メート ル	J/m^3	m ⁻¹ · kg · s ⁻²	
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	$\mathbf{m} \cdot \mathbf{kg} \cdot \mathbf{s}^{-3} \cdot \mathbf{A}^{-1}$	
体 積 電 荷	クーロン毎立方メート ル	C/m^3	m ⁻³ •s•A	
電 気 変 位	クーロン毎平方メート ル	C/m^2	$m^{-2} \cdot s \cdot A$	
誘 電 率	ファラド毎メートル	F/m	$m^{-3} \cdot kg^{-1} \cdot s^4 \cdot A^2$	
透 磁 率	ヘンリー毎メートル	H/m	$\mathbf{m} \cdot \mathbf{kg} \cdot \mathbf{s}^{-2} \cdot \mathbf{A}^{-2}$	
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mo1	$m^2 \cdot kg \cdot s^{-2} \cdot mol^{-1}$	
モルエントロピー,	ジュール毎モル毎ケル	T/(m=1 . K)	2 1 -2 1 1-1	
モル熱容量	ビン	J/ (mo1 • K)	m • kg • s • K • mol	
照射線量 (X線及びγ線)	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ • s • A	
吸収線量率	グレイ毎秒	Gy/s	$m^{2} \cdot s^{-3}$	
放 射 強 度	ワット毎ステラジアン	W/sr	$m^4 \cdot m^{-2} \cdot kg \cdot s^{-3} = m^2 \cdot kg \cdot s^{-3}$	
放 射 輝 度	ワット毎平方メートル 毎ステラジアン	$W/(m^2 \cdot sr)$	$m^2 \cdot m^{-2} \cdot kg \cdot s^{-3} = kg \cdot s^{-3}$	

表6. 国際単位系と併用されるが国際単位系に属さない単位

.

名称	記号	SI 単位による値
分	min	1 min=60s
時	h	1h =60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86400 s
度	0	$1^{\circ} = (\pi / 180)$ rad
分	,	1' = $(1/60)^{\circ}$ = $(\pi/10800)$ rad
秒	"	1" = $(1/60)$ ' = $(\pi/648000)$ rad
リットル	1, L	$11=1 \text{ dm}^3=10^{-3}\text{m}^3$
トン	t	1t=10 ³ kg
ネーパ	Np	1Np=1
ベル	В	1B=(1/2)1n10(Np)

表7.国際単位系と併用されこれに属さない単位 SI単位で表される数値が実験的に得られる					
名称	記号	SI 単位であらわされる数値			
電子ボルト	eV	$1 \text{eV}=1.60217733(49) \times 10^{-19} \text{J}$			
統一原子質量単位	u	1u=1.6605402(10)×10 ⁻²⁷ kg			
天 文 単 位	ua	$1_{112}=1.49597870691(30) \times 10^{11}$ m			

表8.国際単位系に属さないが国際単位系と

	併用されるその他の単位						
	名称		記号	SI 単位であらわされる数値			
海		田		1 海里=1852m			
1	ッ	\vdash		1ノット=1海里毎時=(1852/3600)m/s			
T		N	а	$1 a=1 dam^2 = 10^2 m^2$			
\sim	クタ	- N	ha	1 ha=1 hm ² =10 ⁴ m ²			
バ		N	bar	1 bar=0. 1MPa=100kPa=1000hPa=10 ⁵ Pa			
オン	グストロ	ローム	Å	1 Å=0.1nm=10 ⁻¹⁰ m			
バー	-	ン	b	$1 \text{ b}=100 \text{ fm}^2=10^{-28} \text{m}^2$			

表9.固有の名称を含むCGS組立単位							
名利	Б.	記号	SI 単位であらわされる数値				
エル	グ	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J				
ダイ	ン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N				
ポア	ズ	Р	1 P=1 dyn∙s/cm²=0.1Pa∙s				
ストー	クス	St	1 St =1cm ² /s=10 ⁻⁴ m ² /s				
ガ ウ	ス	G	1 G 10 ⁻⁴ T				
エルス	テッド	0e	1 Oe (1000/4π)A/m				
マクス	ウェル	Mx	1 Mx ^10 ⁻⁸ Wb				
スチ	ルブ	sb	$1 \text{ sb} = 1 \text{ cd/cm}^2 = 10^4 \text{ cd/m}^2$				
朩	F	ph	1 ph=10 ⁴ 1x				
ガ	ル	Gal	$1 \text{ Gal} = 1 \text{ cm/s}^2 = 10^{-2} \text{m/s}^2$				

	表10. 国際単位に属さないその他の単位の例						
	2	名利	5		記号	SI 単位であらわされる数値	
丰	ユ		IJ	-	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq	
$\boldsymbol{\nu}$	ン	F	ゲ	\sim	R	$1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{C/kg}$	
ラ				F	rad	1 rad=1cGy=10 ⁻² Gy	
\mathcal{V}				Д	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv	
Х	線		単	位		1X unit=1.002×10 ⁻⁴ nm	
ガ		\sim		7	γ	$1 \gamma = 1 \text{ nT} = 10^{-9} \text{T}$	
ジ	ヤン	/)	ス キ	-	Jу	$1 \text{ Jy}=10^{-26} \text{W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{Hz}^{-1}$	
フ	J.		IV	Ξ		1 fermi=1 fm=10 ⁻¹⁵ m	
メー	ートル	(系)	カラッ	/ ŀ		1 metric carat = 200 mg = 2×10^{-4} kg	
ŀ				\mathcal{N}	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa	
標	準	大	気	圧	atm	1 atm = 101 325 Pa	
力			リ	-	cal		
3	ク		D	\sim	u	$1 = 1 = 10^{-6} \text{m}$	