

平成20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 FY2008 (April 1, 2008 - March 31, 2009)

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

September 2009

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは独立行政法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。 本レポートの入手並びに著作権利用に関するお問い合わせは、下記あてにお問い合わせ下さい。 なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ホームページ(<u>http://www.jaea.go.jp</u>) より発信されています。

独立行政法人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
〒319-1195 茨城県那珂郡東海村白方白根 2 番地 4
電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to 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, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2009

平成 20 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

(2009年7月28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 20 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 FY2008 (April 1, 2008 – March 31, 2009)

Information Technology Systems' Management and Operating Office

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

(Received July 28, 2009)

Center for Computational Science & e-Systems (CCSE) of Japan Atomic Energy Agency (JAEA) installed and operated super-computers in order to support nuclear research and development activities in JAEA.

This report presents the status of usage of the JAEA super-computers and research and development activities by using the computer systems in FY2008 (April 1, 2008 – March 31, 2009).

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

目 次

まえ	こがき		1
1.	概要		2
2.	機構の	大型計算機システム環境	5
3.	平成 20	年度における計算機利用実績	6
	3.1 原	〔子力科学研究所	6
	3.2 大	*洗研究開発センター	8
4.	大型計算	算機利用による研究成果	. 10
2	4.1 安	全研究センター	. 10
	4.1.1	FLUENT による OECD ROSA 温度成層化実験の解析	. 10
	4.1.2	ジルコニウム水素固溶体及び水素化物中面欠陥の第一原理計算	12
2	4.2 原	夏子力基礎工学研究部門	. 15
	4.2.1	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	15
	4.2.2	陽子・重陽子入射における生成中性子エネルギースペクトルのベンチマーク計	
		算	. 18
	4.2.3	界面追跡法による原子力機器内沸騰二相流解析	20
	4.2.4	包括的動態予測システムのための地表面モデルの応用:乾燥地域における植生	
		の水資源持続可能性の指標の開発	. 23
	4.2.5	拡張半経験分子軌道法による合金系の結合エネルギー解析	26
	4.2.6	3 次元炉心動特性解析コードによる HTTR の解析	29
	4.2.7	重イオン入射反応における中性子生成二重微分断面積の計算	32
	4.2.8	地震時における二相流挙動評価手法の開発	34
	4.2.9	粒子・重イオン輸送計算コード PHITS の精度評価(核破砕モデルに関するべ	
		ンチマーク解析)	. 37
	4.2.10	カルマンフィルターを用いた海洋大循環モデルの高精度化	40
	4.2.11	原子炉燃料集合体除熱限界の機構論的予測手法の開発	42
	4.2.12	応力腐食割れ機構の解明のための大規模分子動力学および状態遷移解析	45
	4.2.13	クラスターDNA損傷と修復酵素 Fpg の分子動力学シミュレーション	47
	4.2.14	反射体付き小型高速炉を模擬した FCA 炉心における臨界性に対する実験解析.	49
	4.2.15	Am 酸化物の X 線吸収スペクトルの第一原理計算	51

4.2.16	TCA 軽水減速ウフン炉心における Am-241 サンブル 反応度価値の解析 II 54	
4.2.17	統合POMを用いた下北海域の海洋構造の再現	
4.3 量-	子ビーム応用研究部門 59	
4.3.1	固体とレーザーの相互作用の第一原理計算 59	
432	DNA の水和計算方法の定量的な評価 61	
4.3.3	レーザー粒子加速実験に関する数値解析	
434	放射性廃棄物処理処分のための進進色大強度 v 線による放射性同位体検出シ	
1.0.1	ミュレーション 66	
435	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 69	
436	超高速同位体選択的振動励起の多進位効果・量子最適制御によろ研究 72	
437	レーザーを用いたプロトン生成の PIC シミュレーション 74	
4.3.8	この「「「「「「」」」」「「」」」」「「」」」「「」」」「「」」」「「」」」「	
4.0.0	第四次アープーによる間二年のアイー電子先生 第四次アープーによる間二年のアイー電子先生 第四次アープーによる間二年のアイー電子先生 78	
4.3.10	X線電磁波と物質との相互作用 81	
4.0.10	高裕度レーザーとクラスターとの相互作用に関する研究 84	
4.3.19	同点反 v	
4.0.12	この日本の日本の日本の日本の日本の日本の日本の日本の日本の日本の日本の日本の日本の	
1.0.10		
4.4 核菌	融合研究開発部門	
4.4.1	トカマク乱流輸送現象のシミュレーション研究	
4.4.2	DD 中性子入射によるベリリウム積分ベンチマーク実験の解析	
4.4.3	FNSベリリウムベンチマーク実験での低エネルギー中性子に関する実験デー	
	タと計算値との不一致の原因検討	
4.4.4	DT 中性子照射による ITER テストブランケットモックアップ内の反応率分布	
	測定102	
4.4.5	JT-60SA 真空容器の構造解析105	
4.4.6	ITER へのフェライト鋼装着の効果の研究106	
4.4.7	中性リチウムビームを用いたプラズマ周辺部の電子密度計測108	
4.4.8	外部揺動に対する回転プラズマの非線形応答とプラズマ崩壊現象の研究110	
4.4.9	ITER 用マイクロフィッションチェンバーの設計のための中性子輸送解析111	
4.4.10	トカマク周辺 MHD 安定性の理論・シミュレーション研究114	
4.4.11	先進的粒子コード PARASOL による SOL 領域に囲まれたトカマクプラズマの	
	シミュレーション	
4.4.12	ITER における α 粒子の閉じ込めと電流駆動シミュレーション119	
4.4.13	タングステンの高電離多価イオンの発光スペクトル解析122	
4.4.14	輸送-MHD 統合 ELM シミュレーション124	

 4.4.16 多階層プラズマの理論シミュレーションモデルに関する研究 MHD シミュレーション用ジャイロ運動論的 PIC コードの開発 — 4.5 次世代原子力システム研究開発部門 	130 133 133 135
 MHD シミュレーション用ジャイロ運動論的 PIC コードの開発 ― 4.5 次世代原子力システム研究開発部門 	130 133 133 135
4.5 次世代原子力システム研究開発部門	133 133 135
4.5 次世代原士刀シスノム研究開発部門	133 133 135
	133 135
4.5.1 $液体 \land L \lor \lor$	135
4.5.2 連続エネルキーモンテカルロ法による「もんしゆ」性能試験解析	105
4.5.3 局速炉燃料集合体内詳細熱流動解析手法の開発整備	137
4.5.4 URANS アブローチによる高 Re 数条件でのショートエルボ内流れの数値解析	139
4.5.5 ナトリウム-水反応および圧縮性混相流数値解析コード SERAPHIM の高度	
化-水中空気不足膨張噴流の解析-	142
4.5.6 ナトリウム-水反応および圧縮性混相流数値解析コード SERAPHIM の高度	
化-空気中空気不足膨張噴流の解析-	144
4.5.7 高速増殖炉蒸気発生器伝熱管の3次元渦電流探傷シミュレーション	147
4.6 J-PARCセンター	150
4.6.1 MW 級核破砕中性子源における低放射化デカップラー材に関する研究	150
4.6.2 J-PARC 4 次元空間中性子探査装置遮蔽体の評価	153
4.6.3 J-PARC 中性子散乱装置 AMATERAS 遮蔽体の評価	155
4.7 原子力エネルギー基盤連携センター	157
4.7.1 14MeV 甲性子直接問いかけ法を用いた Pu-239 及び U-235 の分離測定法の開	
発	157
4.8大洗研究開発センター	159
4.8.1 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	159
4.8.2 JMTR 照射場評価の高精度化のための検討	160
4.8.3 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	163
4.9 東海研究開発センター	164
4.9.1 大口径 NTD シリコン昭射解析	164
492 MVP-BURN を用いた JRR-3 全炉心燃焼計算	167
4.9.3 中性子フィルタ法を用いた JRR-3 均一照射設備高性能化の設計検討	170

4.10	システム計算科学センター1	73
4.10.1	原子力プラント3次元仮想振動台の高速化1	73
4.10.2	第一原理計算による金属における粒界脆化の研究1	76
4.10.3	光学格子中フェルミ原子系の密度行列繰り込み群による解析1	79
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1	82
4.10.5	原子力プラントのための3次元仮想振動台の構築1	85
4.10.6	超伝導体の磁束ダイナミクスに対するシミュレーション研究1	.88
4.10.7	7 アクチニド酸化物の物性値推算1	.91
4.10.8	超伝導新奇応用のためのマルチスケール・マルチフィジックスシミュレーショ	
	ンの基盤構築1	.94
4.10.9) 分子動力学法による鉄のらせん転位のパイエルス応力の解析1	.97
4.10.1	 分子動力学法による鉄の凝集エネルギー解析1 	.99
4.10.1	1 大規模分子動力学法による鉄のき裂進展挙動解析	201
4.10.1	2 マクロ・メゾスコピック超伝導現象のシミュレーション2	204
4.10.1	3 分子動力学シミュレーションを用いた大規模生体超分子系の機能解析2	205
とがき		207

あとがき		7
著者名別	論文索引	3

Contents

Foreword	l	1
1. Overvi	ew	2
2. JAEA	Large Computer System	5
3. Compu	iter Usage Records in FY2008	6
3.1	Nuclear Science Research Institute	6
3.2	Oarai Research and Development Center	8
4. Resear	rch and Development Activity by Using JAEA Computer System	10
4.1	Nuclear Safety Research Center	10
4.1.	1 Analysis of OECD ROSA temperature stratification experiment using FLUENT	10
4.1.	2 Ab-initio Study on Plane Defects in Zirconium Hydrogen Solid Solution and	
	Zirconium Hydride	12
4.2	Nuclear Science and Engineering Directorate	15
4.2.	1 Water Cycle Simulation by Coupled Atmospheric, Terrestrial, and Oceanic	
	Models	15
4.2.	2 Benchmarking calculation of neutron energy spectra induced by proton or	
	deuteron incidence	18
4.2.	3 Numerical Simulation of Boiling Two-phase Flow in Nuclear Reactor	
	Components by Advanced Interface Tracking Method	20
4.2.	4 An application of a land surface model in a comprehensive system for	
	prediction of material dynamics: evaluation of a new index of water	
	sustainability for vegetation	23
4.2.	5 Bond Energy Analyses of Alloy Systems using Extended Semi-Empilical	
	Molecular Orbital Method	26
4.2.	6 Analytical results by three-dimensional core kinetics code	29
4.2.	7 Neutron-Production Double-Differential Cross Sections by Heavy-Ion	
	Incidences	32
4.2.	8 Development of prediction method of two-phase flow behavior in a time of	
	earthquake	34

4.2.9	Assessing the prediction capabilities of the PHITS code (Benchmark of	
	Spallation Models)	37
4.2.10	Improvement of ocean general circulation model with Kalman filter	40
4.2.11	Development of Predictable Technology for Heat Transfer Limit in Fuel	
	Assembly Based on Two-Phase Flow Numerical Simulation	42
4.2.12	Molecular dynamics and atomistic transition state analysis for stress	
	corrosion cracking	45
4.2.13	Molecular dynamics simulation of clustered DNA damage site with DNA	
	repair enzyme Fpg	47
4.2.14	Analysis of Criticality in FCA Core Simulating Small-Fast Reactor with	
	Reflector	49
4.2.15	First principles calculation of X-ray absorption spectra of Am oxides	51
4.2.16	Analysis of Reactivity Worth of Am-241 Sample in Water-moderated ${ m UO}_2$	
	Fuel Lattices at TCA of JAEA II	54
4.2.17	Reproduction of oceanographic structure off Shimokita Peninsula using	
	Integrated-POM	56
4.3 Qu	aantum Beam Science Directorate	59
4.3.1	First-principle calculations for interaction between laser and condensed	
	matters	59
4.3.2	Evaluation of DNA hydration calculation methods	61
4.3.3	Numerical analysis on experiments of laser particle acceleration	64
4.3.4	Simulation of Radioisotope detection by nuclear resonance fluorescence	
	with a quasi-monoenergetic gamma-ray for radioactive waste management.	66
4.3.5	First-principles molecular dynamics simulation of oxide layer for SiC	
	devices	69
4.3.6	Multilevel effect on ultrafast isotope-selective vibrational excitations:	
	Quantum optimal control study	72
4.3.7	PIC simulation of proton acceleration by a laser pulse	74
4.3.8	High energy electron acceleration by intense laser	76
4.3.9	First Principles Molecular Dynamics Simulations of Chemical Reactions	78
4.3.10	Interactions of x-ray and matter	81
4.3.11	Interaction processes of clusters with intense laser pulses	84
4.3.12	PIC simulation of the Laser Wake Field Accelerator	87
4.3.13	Self organization of high intensity lasers	90

4.4 Fu	ision Research and Development Directorate	93		
4.4.1	Simulation study of turbulent transport phenomena in tokamaks			
4.4.2	Analysis of integral benchmark experiment on beryllium with DD neutr	ons		
		96		
4.4.3	Investigation of Discrepancy between Measurement and Calculation on			
	Experimental Data related to Low Energy Neutrons in Beryllium			
	Benchmark Experiment at FNS	99		
4.4.4	Measurement of reaction rate distribution in partial mockups for the IT	\mathbf{ER}		
	TBM with DT neutrons	102		
4.4.5	Structural Analysis of JT-60SA Vacuum Vessel	105		
4.4.6	Effect of ferritic insertion on ITER	106		
4.4.7	Edge Electron Density Measurement by use of Lithium Beam Probe	108		
4.4.8	Study of nonlinear response and plasma disruption of rotating plasmas	to		
	external perturbations	110		
4.4.9	Neutron Transport Analysis for Design of Micro-fission Chamber for ITI	ER.111		
4.4.10	Theoretical and Simulation Analyses of the MHD Stability in the Tokam	nak		
	Edge Pedestal	114		
4.4.11	Simulation of tokamak plasmas surrounded by the SOL region by using	an		
	advanced particle code PARASOL	117		
4.4.12	Simulation studies on alpha particle confinement and current drive in			
	ITER	119		
4.4.13	Analysis of spectra emitted by highly charged tungsten ions	122		
4.4.14	Integrated ELM simulation based on transport and MHD	124		
4.4.15	Fully nonlinear features of the energetic beam-driven instability	127		
4.4.16	Research on the theory and simulation model of multi physical layer			
	plasmas — Development of gyrokinetic PIC code for MHD simulation -	130		
4.5 Ad	lvanced Nuclear System Research and Development Directorate	133		
4.5.1	Three-dimensional Simulation of Liquid Sloshing Experiment	133		
4.5.2	Analyses of "Monju System Start-up test" by Monte-Carlo method	135		
4.5.3	Development of A Numerical Simulation Program for Detailed Thermal			
	Hydraulics in A Fast Reactor Fuel Assembly	137		
4.5.4	Numerical Simulation of Flow through Pipe Elbow with Short Curvatur	e		
	Radius at High Reynolds Number Condition by using URANS Approach	139		
4.5.5	Advancement of Compressible Multi-Phase Flows and Sodium-Water			
	Reaction Analysis Program SERAPHIM - Analysis of Underexpanded Ai	ir		
	Jets into Water -	142		

4.5.6	Advancement of Compressible Multi-Phase Flows and Sodium-Water				
	Reaction Analysis Program SERAPHIM - Analysis of Underexpanded Air				
	Jets into Air				
4.5.7	Three Dimensional Eddy Current Simulations for the In Service Inspection				
	of Steam Generator Tubes of FBR				
4.6 J-I	PARC Center				
4.6.1	Study on Low Activation Decoupler Material for MW Class Spallation				
	Neutron Sources				
4.6.2	Evaluation of radiation shielding of 4D Space Access Neutron Spectrometer				
	at J-PARC				
4.6.3	Evaluation of radiation shielding of neutron inelastic scattering				
	instrument AMATERAS at J-PARC 155				
4.7 Nu	clear Engineering Research Collaboration Center				
4.7.1	Development for the separation measurement method of Pu-239 and U-235 $$				
	by using 14MeV neutron direct interrogation method				
4.8 Oa	rai Research and Development Center159				
4.8.1	Evaluation of Irradiation Parameters such as Neutron Flux/Spectrum in				
	Irradiation Test of JMTR				
4.8.2	Improvement of Neutronic Evaluation for JMTR 160				
4.8.3	Evaluation of Irradiation Parameters such as Neutron Flux/Spectrum in				
	Irradiation Test of JMTR				
4.9 Tol	xai Research and Development Center				
4.9.1	Analyses of irradiation for a large diameter NTD silicon				
4.9.2	I Full Core Burn-up Calculation at JRR-3 with MVP-BURN 167				
4.9.3	Investigation of Neutron Filter Method Using the Research Reactor JRR-3				
	for Uniformity Irradiation System				
4.10 Ce	nter for Computational Science & e-Systems				
4.10.1	Improvement of Computational Performance of Vibration Simulator for				
	Nuclear Power Plants in Its Entirety				
4.10.2	First-principles calculations of the grain boundary embrittlement of metals				
4.10.3	DMRG studies of fermionic atoms in an optical lattice				

4.10.4	Explication of Fermi Atom Gas using Exact diagonalization 182
4.10.5	Numerical Simulation System "Three-Dimensional Vibration Simulator for
	Nuclear Power Plants" by Using Assembled Structural Analysis 185
4.10.6	Simulation study for the vortex dynamics in the superconductor 188
4.10.7	Calculations of Thermal and Electronic Properties of Actinide Oxide 191
4.10.8	Framework Development for Multiscale and Multiphysics Simulations
	toward Novel Applications of Superconductivity
4.10.9	Molecular dynamics simulation for the Peierls stress of a screw dislocation
	in Fe crystal
4.10.10	Molecular dynamics simulation of the cohesive energy in Fe crystal 199 $$
4.10.11	A large scale MD simulation for the crack propagation of Fe 201
4.10.12	Simulations of macro- and meso-scopic superconducting phenomena 204
4.10.13	Analysis of the dynamics of supra-macromolecules using molecular
	dynamics simulation system
Postscript	
Author index	

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20年度の大型計算機システムの利用登録 者は約一千名に上っており、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 20 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 78 件について、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 年間に数千から数百万 CPU 時間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、本報告集が機構内や原子力産業界のみならず各般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

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が多く、計算科学技 術は従来から重要な研究手段となっている。

このような情勢の中、機構における計算科学技術の推進役を担う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、原子力に関する国内唯一の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、大型計算機システムの部門別 CPU 時間利用率(図-1.1)に見ることができる。平成 14 年段階では、2 つの部門が大型計算機の 利用をほぼ独占していたが、近年では他の部門からの利用が大幅に促進され、幅広い研究分 野において大型計算機システムが利用されるようになった。



図-1.1 大型計算機システムの部門別 CPU 時間利用率

機構の研究開発における計算科学技術の貢献度は、発表論文数において見て取れる(図-1.2)。 平成 20 年度、機構が発表した査読付論文の総数は 1088 件であり、このうち機構の大型計算 機システムを利用した論文は 21.3%(232 件)を占めている。また、平成 17 年度から平成 20 年度までの大型計算機システムを利用した論文件数の推移をみると、ここ数年の増加傾向 は続いており、機構の研究成果に対する大型計算機システムの貢献度の高さとその高まりを 如実に示している。



◆大型計算機システムが原子力機構成果(査読付論文)の21.3%に貢献

図-1.2 大型計算機システムの研究成果創出貢献度 [平成 17~20 年度] (機構が発表した査読付き論文における大型計算機システムを利用した論文の割合)

さらに部門別大型計算機システムの研究論文発表件数(研究成果創出貢献度:図-1.3)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、核融合研究開 発部門、量子ビーム応用研究部門、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を利用した論文の割合が著しく高い。こ れは大型計算機システムを利用した研究が研究の手法として完全に定着し、かつ着実に成果 を創出していることを示している。

このような大型計算機システムを利用した論文数の増加に伴い、計算機資源及び計算需要 はより大幅に増加している。この需要に応えるため、情報システム管理室では大型計算機シ ステムの更新手続きを進めており、平成22年3月に現行の約14倍の性能となる200TFLOPS の計算機システムの稼働開始を予定している。この新システムの導入により、大型計算機シ ステムが今後さらに機構の研究開発の推進に益することが期待できる。



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17年度~20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20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に示す。

表-2.1 機構の大型計算機システム(スーパーコンピュータ)の主な仕様

平成21年3月末現在

	原子力科学研究所 (東海)	大洗研究開発センター (大洗)		
	並列計算機 Altix3700 Bx2	科学技術計算機 HPC2500		
機 種				
タイプ	スカラ	スカラ		
CPU 数 (ノード数)	2048 384 (16) (3)			
システム性能 (TFLOPS)	13.1	2.4		
主記憶タイプ、 総主記憶容量 (TB)	共有型 13	共有型 1.5		
PE 間結合方式、 データ転送速度	NUMA Link 3.2GB/sec	光インターコネクト 4GB/s×4 ポート(ノード間)		
ディスク容量 (TB)	120	10		
OS	SUSE Linux	日本語 Solaris8		
コンパイラ	Fortran C/C++	Fortran C/C++		

3. 平成 20 年度における計算機利用実績

3.1 原子力科学研究所

原子力科学研究所のシステムは、機構全体の研究開発を推進するための共用計算機として 利用されており、大規模並列計算用の Altix3700Bx2、小規模並列計算用の Altix350、 ApproHyperBlade、及びシミュレーション結果の可視化処理用の Prism から構成されている。

これらシステムの利用は、核融合研究開発部門、量子ビーム応用研究部門、原子力基礎工 学研究部門、システム計算科学センターの4部門が大きな割合を占めているが、J-PARCセ ンター、安全研究センター、次世代原子力システム研究開発部門、原子力エネルギー基盤連 携センターなど原子力機構における種々の部門でも広く利用されている(図-3.1)。

機構内最大演算性能を有する Altix3700Bx2 の利用状況は、導入当初から高い CPU 占有率 で推移している。平成 20 年度は、全ノード(16 ノード)の年間 CPU 占有率が約 83%、大 規模計算用ノード(13 ノード)においては年間 CPU 占有率約 86%、月の CPU 占有率では 90%を超える状態が約半年間も継続しており、対応出来る計算需要の限界に達している。こ の慢性的な計算機資源不足を改善するため、現行システムの更新計画を進めており、平成 22 年3月から約 200TFLOPS の演算性能を有する次期システムの稼働開始を予定している。

(1) 利用者数

登録ユーザ:526人

(2) 処理件数及び CPU 利用実績(月別)

	Altix3700Bx2		Prism			
	バッチ 処理件数	会話 処理件数	CPU 時間(H)	バッチ <u> </u>	会話	CPU 時間(H)
4月	7,600	12,762	946, 763	358	968	15, 538
5月	8, 485	15, 207	1, 237, 511	827	750	54, 612
6月	10, 884	15, 413	1, 200, 491	2, 558	848	50, 979
7月	14, 560	14, 019	1, 102, 995	3, 239	1,020	51, 198
8月	10, 405	13, 607	1, 316, 885	2,974	1, 505	59,096
9月	9, 405	13, 647	1, 326, 753	1,724	964	44, 191
10 月	9, 331	13, 206	1, 379, 497	1,715	720	42,085
11 月	8,695	12,657	1, 272, 217	891	668	36, 137
12 月	8,424	12, 110	1, 290, 562	1,208	687	46, 377
1月	12, 107	13, 074	1, 247, 312	1,147	802	44, 843
2月	11, 766	11, 862	888, 439	736	810	22, 670
3月	11, 687	10,079	1, 185, 895	418	954	22, 189
合計	123, 349	157, 643	14, 395, 320	17, 795	10, 696	489, 915

表-3.1 原子力科学研究所·処理件数(1)

	Altix350			ApproHyperBlade		
	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	1, 586	804	2, 713	157	415	1, 263
5月	2, 159	987	11, 127	595	395	5, 938
6月	2, 261	1,221	11, 371	640	487	2, 702
7月	2,686	697	9,030	759	588	882
8月	1, 499	700	17, 152	499	415	3, 654
9月	1,443	816	12, 916	563	501	11, 233
10 月	2,002	927	18, 819	505	478	8, 534
11 月	1,834	704	32, 168	395	404	4, 897
12 月	2, 595	902	33, 042	601	433	11, 024
1月	2, 445	936	31, 819	869	450	12, 604
2月	2, 347	857	21, 934	613	575	20, 285
3月	1,696	940	35, 667	916	531	12, 326
合計	24, 553	10, 491	237, 758	7, 112	5,672	95, 342

表-3.1 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

3.2 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、科学技術計算(輸送容器の設計、安全解析、核不拡散・保障措置に係 る解析的評価等)、及びデータベース処理(炉心管理データベース等)に係わる小規模な計算 で利用される GS21 から構成されている。

HPC2500の利用状況は、前年同様に年間の CPU 占有率が約 80%と高く、主に FBR サイクルの計算需要を効率的に処理している。利用部門は、次世代原子力システム研究開発部門、 教賀本部高速増殖炉研究開発センター、システム計算科学センターの 3 部門に加えて、新た に原子力基礎工学研究部門にも利用が拡大している(図-3.2)。

GS21の利用状況は、前年よりもバッチ・会話処理件数、CPU 時間(H)が約 1/2 と減少して おり、現在、汎用機システム最適化計画に沿って、その役割、規模、構成の見直しを進めて いる。

なお、HPC2500は、原子力科学研究所のシステムと整理・統合し、平成22年3月に新シ ステムへ移行(原子力科学研究所へ集約)する予定である。

(1) 利用者数

登録ユーザ : 591 人

(2) 処理件数及び CPU 利用実績(月別)

	HPC2500			GS21		
	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	1,340	1,271	142, 212	3, 283	4,041	62
5月	810	1, 197	107, 820	3, 258	3, 996	33
6月	2, 763	994	159, 811	3, 268	4, 451	36
7月	2, 445	1,366	172, 345	3, 732	4,629	44
8月	716	1,075	158, 051	3,026	3, 702	44
9月	923	968	198, 511	3, 074	4, 141	33
10 月	882	1,046	260, 750	3, 536	4, 499	45
11 月	625	910	160, 985	2, 913	3, 819	32
12 月	388	658	240, 713	3, 182	3, 878	98
1月	525	955	217, 239	3, 081	4, 286	41
2月	1, 594	1,127	188, 136	2, 992	3, 858	81
3月	1,503	1, 319	207, 637	3, 861	4,900	62
合計	14, 514	12, 886	2, 214, 210	39, 206	50, 200	611

表-3.2 大洗研究開発センター・処理件数



図-3.2 大洗研究開発センター・部門別 CPU 時間利用実績

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

Nuclear Safety Research Center

4.1.1 FLUENT による OECD ROSA 温度成層化実験の解析

Analysis of OECD ROSA temperature stratification experiment using FLUENT

渡辺 正

熱水力安全評価研究グループ

1. 利用目的:

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進めている。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が不可欠である。

2. 利用内容・結果:

OECD/NEA ROSA プロジェクトで実施した、原子炉事故時の低温側配管への非常用炉心 冷却水注入時の温度成層化に関する実験に対して、代表的 CFD コードである FLUENT に より数値シミュレーションを実施し、コードの予測性能を調べた。20 年度は、配管と圧力 容器の接合部に詳細なノーディングを用い、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、単相時の温度成層化現象を良好に再現できる乱流モデルの検討を行った。 さらに、相変化の効果を評価するモデルをコードに組み込み、層状二相流における凝縮を 伴う温度成層化現象を調べた。



図1 配管内温度分布(全体:上、詳細:右)、密度分布(下)

図1に二相流状態での配管内の温度(上)及び密度分布(下)例を示す。図では、左側 が低温側配管上流、右側が圧力容器ダウンカマーであり、流れは左から右に向かっている。 密度分布に示されるように、配管内には安定な層状二相流が形成され、温度成層化は、低 温水注入地点(ECCS)よりも上流側を含み、圧力容器まで広がることが確認された。配管内 では、下側を飽和水が圧力容器へ向かって流れ、上側では、凝縮のために、蒸気が圧力容 器から注入水方向に向かって流れ込む様子がわかった。また、右側の詳細図に示すように、 圧力容器では、容器外側の壁面を伝って冷却水が流れ、流下するにつれて、壁面から離れ る様子が明らかになった。

図2には、注入部下流側の配管におけるTC-A地点での鉛直方向(左)と、圧力容器内のTC-C地点における水平方向(右)の温度分布を示す。温度は、実験値の最大最小値、 測定位置は配管径、流路幅により、それぞれ、無次元化している。凝縮熱伝達を考慮した モデル(htc=2.0e4)は、いずれの位置においても温度分布を良好に再現しているのに対し、 熱伝達を考慮しない場合(htc=0)は、温度成層化を過小評価しているのがわかる。シミュレ ーションと実験との比較により、適切な相変化モデルを用いることにより、原子炉の安全 評価上重要となる二相温度成層化現象に対して、CFD コードの適用性が確認できた。



図2 TC-A 垂直方向温度分布(左)、TC-C 水平方向温度分布(右)

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 渡辺正、中村秀夫、"OECD ROSA プロジェクト度成層化実験及び CFD 解析"、日本原子力学会 2008 年秋の大会、高知、9月5日 (2008)

4. 今後の利用予定:

引き続き、原子炉の安全問題への CFD コードの適用性の検討を進める予定である。

4.1.2 ジルコニウム水素固溶体及び水素化物中面欠陥の第一原理計算

Ab-initio Study on Plane Defects in Zirconium Hydrogen Solid Solution and Zirconium Hydride

> 宇田川 豊,山口 正剛,杉山 智之 燃料安全評価研究グループ,シミュレーション技術開発室

1. 利用目的:

高燃焼度軽水炉燃料被覆管(ジルコニウム合金)の破損においては、水側腐食の結果被 覆管金属層中に吸収された水素による脆化が最も重要な因子の一つとなる。水素脆化にお いては析出水素化物が重要な役割を果たすと考えられており、実際にバルク水素化物試料 を用いた実験では、ジルコニウム単体に比べ極めて低い破壊靭性及び破断応力(十数 MPa) が確認されている。一方でジルコニウム合金中に析出した水素化物の破断応力は数百 MPa との報告があり、水素化物析出時に生じる微小クラックが脆化に影響する可能性も指摘さ れている。水素脆化が水素化物自身の脆性に起因して生じているのか、あるいは微小クラ ック等他の機構に起因するものであるかを明らかにするためには、水素化物固有の破壊特 性を分離して調べることが必要となる。本研究では、ジルコニウムー水素系に存在する面 欠陥の性質を第一原理計算により評価し、水素化物固有の破壊特性を調べた。



図1 ジルコニウムー水素系面欠陥の第一原理計算モデル

2.利用内容・結果:

20年度は、ジルコニウム-水素系の完全結晶中に生じた幾つかのタイプの面欠陥の性 質を明らかにするための計算を行った。今回対象としたのは、固体中のき裂進展に支配的 影響を及ぼすと考えられる表面エネルギ及びッ表面(すべり変位に対するエネルギ増分) である。図1に示すように、体系中央に結晶構造を、その上下両側に真空領域を配置した



ム柱面、(c)水素化物(111)面のγ表面

モデル (スーパーセル)を作成した (図1(a))。結晶構造の上半分を下半 分に対して垂直に変位させた時(図 1(b))の全エネルギ変化から表面エ ネルギッSを、また水平に変位させ た時(図1(c))の全エネルギ変化か らッ表面を評価することができる。

図2に、(a)ジルコニウム単体(水 素を含まない α -hcp 格子)の底面、 (b)ジルコニウム単体の柱面(図2)、 及び(c)水素化物(111)面のγ表面計 算結果を示す。それぞれの系でエネ ルギ障壁が比較的小さい方向、即ち $<01\overline{1}0>$ 、 $<11\overline{2}0>$ 、 $<\overline{2}11>$ 方向 にすべりが生じやすいことがわか る。純ジルコニウムの底面と柱面を 比べると、柱面のエネルギ障壁 (γ 表面の鞍点、"γ_{US}"と表記した箇所) がやや低く、水素の無い状態では柱 面ですべりが起こりやすいことを示 している。これはジルコニウム合金 で主として柱面すべりが起こるとい う実験的事実と一致している。 α -hcp 格子に水素が入り込んだ構造で ある固溶体については詳細な計算は 未実施であるが、これまでの結果で は、底面、柱面ともγ表面の分布に 大きな変化は見られていない。一方、 水素化物の γ_{US}は 0.94 J/m²程度であ り、これは純ジルコニウムの底面、 柱面すべりにおける yus (それぞれ 0.26 J/m²、0.20 J/m²)のいずれと比べ ても著しく大きい。更に表面エネル

ギについても、水素化物は純ジルコニウムを 20%以上下回った。表面エネルギの減少は固体内表面の形成を容易にし、またγusの増加は転位の運動による応力緩和を阻害する。これらはいずれもき裂進展に費やされる塑性変形エネルギの減少を通じて固体の脆性的挙動を促す変化であり、水素化物自身の強い脆性を示唆する結果と言える。また水素化物に特有な脆化の要因は、特にγusの著しい増加、即ち転位運動に対する障壁エネルギの増大にあると考えられる。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 宇田川 豊,山口 正剛,他,ジルコニウム水素固溶体及び水素化物中面欠陥の第一 原理計算,日本原子力学会 2008 春の年会,東工大
- 4. 今後の利用予定:

Altix3700Bx2, Altix350, Prism 計算機システムを用い、引き続きジルコニウム-水素系面 欠陥の性質を第一原理計算により評価する。今後はよりマクロな系(分子動力学)での計 算に結合すべく、面欠陥の種類、結晶方位、水素濃度等重要と目されるパラメータの影響 を調べる。

4.2 原子力基礎工学研究部門

Nuclear Science and Engineering Directorate

4.2.1 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. 利用目的:

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、これまでに構築した大気、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に対して、大 気拡散及び海洋拡散モデルを追加結合するとともに、陸水モデルに物質動態計算機能を導 入することで大気・陸域・海洋の物質動態結合モデルを開発した。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。

2. 利用内容·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、及び陸面の物理過程モデルと大気及び海洋の物質動態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、大気及び海洋の物質動態モデルとしては原子力機構開発の大気拡散モデルGEARN及び海洋拡散モデルSEA-GEARNをそれぞれ用いた。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最終形である包括的物質動態予測モデルについて、東海村周辺を 対象としたプロトタイプ開発を進めており、MM5、GEARN、及び RIVERS の3 モデルか らなる物質循環結合モデルの結合計算を実施した(図2)。この結合計算では、MM5 の3 重ネスト計算に対し、内側2つの領域についてそれぞれ粒子拡散モデルの GEARN を結合 し、各領域の GEARN 計算は粒子情報を交換することにより、内側の高分解能計算と外側 の広域計算を整合的に結合している。また、RIVERS については、一番内側の領域を対象 とし MM5 及び GEARN と結合している。試験計算として、これまでに水循環結合計算の 試験を行った 2006 年 12 月 26~27 日の豪雨により那珂川及び久慈川で指定水位を超えた ケースに対して、仮想的な大気放出条件により物質循環計算の試験を実施した。計算期間 は 2006 年 12 月 24 日 00UTC~31 日 00UTC の 7 日間で、仮想放出条件としてトリチウム 水の 6 時間放出で 26 日 15UTC からと 27 日 00UTC からの 2 ケースについて物質循環計算 を行った。並列計算機 Altix3700Bx2 の 21CPU (MM5: 16CPU、GEARN: 2CPU、RIVERS: 1CPU、COUPLER: 2CPU)を用いて約 38 時間を要した。26 日から 27 日にかけての豪雨 による那珂川及び久慈川の指定水位を超える出水時に、大気に放出されたトリチウム水の 乾性・湿性沈着による陸面への蓄積及び雨水の地表流出と浸透による土壌中の移動に加え て、土壌表層からの蒸発による大気への再放出についても、カップラーを介したモデル間 データ交換が正常に行われ、大気と陸域間の物質交換が計算可能であることを確認した。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- H. Nagai, K. Tsuduki, and, T. Kobayashi; Introduction of WRF into Coupled Water Cycle Model, Extended abstract of the 9th WRF Users' Workshop, Boulder, USA (2008)
- 2) 永井晴康,都築克紀,寺田宏明,小林卓也;環境負荷物質の包括的動態予測システム SPEEDI-MPの開発: (5)結合モデルによる大気から陸域への物質移動計算,日本原 子力学会 2008 年秋の大会,高知 (2008)
- 3) 永井晴康,都築克紀,寺田宏明;環境負荷物質の包括的動態予測システム SPEEDI-MP の開発:(9)大気と陸域間の物質交換結合計算,日本原子力学会 2009 年春の年会,東 京 (2009)

4. 今後の利用予定:

大気、陸域、海洋の物質循環結合モデルシステムについて、各モデルの高度化と結合の 改良を進め、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 結合モデルシステムの構成(黄色:物理過程モデル、灰色:物質動態モデル)



図2 包括的物質動態予測モデル東海地区プロトタイプの計算領域とデータ交換

4.2.2 陽子・重陽子入射における生成中性子エネルギースペクトルの ベンチマーク計算

Benchmarking calculation of neutron energy spectra induced by proton or deuteron incidence

岩元 洋介

放射線工学研究グループ

1. 利用目的:

原子力基礎工学研究部門・放射線工学研究グループでは「遮蔽基礎データ取得」の中期 計画のもとに、大阪大学核物理研究センター(RCNP)において、140 MeV の陽子入射に よるターゲットから 180 度方向に放出される中性子のエネルギースペクトル測定を行っ た。また、加速器中性子源開発のため TIARA において、10MeV 陽子・重陽子を厚さ 15 μ mのベリリウムターゲットに照射したときに生ずる中性子のエネルギー・角度二重微分断 面積の測定を行った。本ベンチマーク計算の目的は、測定結果と粒子・重イオン輸送計算 コード PHITS の計算結果との比較により、PHITS コードの精度検証を行うことである。十 分な中性子の統計を得るためには長時間のシミュレーション計算が必要であり、大型並列 計算機の利用は不可欠である。

利用内容・結果:

平成 20 年度は、並列計算機 PC クラスタ B タイプを用いて以下の計算を実施した。

1. 180 度方向の中性子エネルギースペクトル のベンチマーク計算

PHITS コードによる計算では、量子分子動力学 モデル QMD と統計崩壊模型 GEM を用いた。図 1に、140MeV 陽子を鉄ターゲットに入射した場 合の 180 度方向の中性子生成エネルギースペクト ルを示す。実験データは、指数関数の和で近似で きることがわかる。約 10MeV 以上の中性子に対 して QMD/GEM の計算結果は実験データに対し て大きくなっており、QMD における残留核の核 温度が高く生成されることがわかった。一方、10MeV 以下の統計崩壊により生成する中性子に対しては良 く一致した。



図1 140MeV Fe(p,xn)反応による 180 度方向の中性子エネルギ

2. 10MeV 陽子・重陽子入射反応による中性子生成二重微分断面積のベンチマーク計算 陽子入射反応に対して、評価済み核データとして ENDF/B-VII ファイルを、核内カスケ ードとして Bertini モデル或いは QMD モデルを用いた。また、重陽子入射反応に対しては QMD モデルを用いた。60 度方向に放出される中性子生成の二重微分断面積を図 2 及び図 3 に示す。陽子入射に関して、ENDF/B-VII を用いた計算結果では、10B の基底状態、第 1 励起状態に対する中性子のピークを概ね再現したが、実験では現れない約 5MeV 付近にピークが現れた。陽子・重陽子入射反応共に、Bertini モデル、QMD モデルと蒸発模型を用いた低エネルギー入射核反応の計算では、まず融合核を形成し、その統計崩壊により中性子が生成するために原子核のピーク構造は再現できていない。しかし中性子収量の絶対値はファクター2以内で一致することがわかった。



3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- Yosuke Iwamoto et al., "Measurement of thick target neutron yields at 0° bombarded with 140, 250 and 350MeV protons", Nucl. Instr. and Meth. A 593 (2008) pp.298-306.
- Yosuke Iwamoto et al., "Measurement of double-differential neutron-production cross-sections for the ⁹Be(p,xn) and ⁹Be(d,xn) reactions at 10 MeV", Nucl. Instr. and Meth. A 598 (2009) pp.687-695.
- 3) 岩元洋介ら 「中間エネルギー領域における 180 度方向中性子生成断面積の測定」日本原子力学会 2008 年秋の大会、高知、9月4日-6日

4. 今後の利用予定:

引き続き、実験で得た中性子エネルギースペクトルのベンチマーク計算を行い、PHITS コードの検証を行う。

4.2.3 界面追跡法による原子力機器内沸騰二相流解析

Numerical Simulation of Boiling Two-phase Flow in Nuclear Reactor Components by Advanced Interface Tracking Method

> 吉田 啓之、劉 維、張 維忠 機構論的熱設計手法開発グループ

1. 利用目的:

現在の原子炉機器の熱設計は、実際の機器を模擬した大規模試験に基づいて作成された 実験式(相関式)を、設計コードに組み込んで実施される。相関式は、流路形状や寸法など にも依存するため、設計変更のたびに新たな試験が必要となる。しかし、大規模試験には 多大な実施期間と費用が必要なため、大規模試験なしに熱設計を可能とする手法("Design by analysis")の開発が期待されている。そこで機構論的熱設計手法開発グループでは、大規 模数値シミュレーションを用いた計算科学的手法により"Design by analysis"を実現する、 「機構論的熱設計手法」の構築を、中期計画の中核として実施している。

機構論的熱設計手法は、①詳細数値解析手法、②解析結果の統計処理により相関式を導 くデータ解析手法、及び③相関式を組み込む熱設計コードにより構成される。本課題では、 上記①及び②に関連した、①燃料集合体内流体混合現象の解析的評価及び相関式の構築、 ②燃料集合体流路閉塞効果の解析を実施した。

2. 利用内容・結果:

低減速軽水炉燃料集合体の2つのサブチャンネルを模擬した体系で流体混合現象解析を行い、詳細二相流データベースを取得した。解析体系を図1に、解析条件を表1に示す。

流路出口より 30~35 mm の範囲における、ケース B の混合部での、サブチャンネル間気液 移動質量速度の時間変動を、サブチャンネル1から2への移動を正として図3に表す。液相

と気相の移動方向は基 本的に同一であるが、時 間遅れが存在している。 移動質量速度の変動幅 は、液相で200 kg/m²s、 気相で10 kg/m²s 程度で あり、気液密度比(1:約 20)を考慮すると、体積 移動量は同程度である。 しかし、界面により気相 の移動が制限されるた め、気相の移動頻度は液 相に比べて小さい。



Case	Gap width [mm]	Channel number	Inlet gas velocity[m/s]	Inlet liquid velocity [m/s]			
A	1.3	1	1.00				
		2	1.95	0.70			
В	1.0	1	1.00	0.70			
		2	1.95				

表1 解析条件



昨年度に構築した圧力損失モデルをも とに、サブチャンネル間圧力差モデルを作 成し、予測性能を評価した。評価した差圧 変動と、詳細二相流解析による解析結果の 一例を図4に示す。モデルによる評価結果 は、0.22 s と 0.26 s 付近を除き、解析結果 を再現しており、圧力変動の振幅と周期も ほぼ一致している。0.22 s と 0.26 s では、









強い流体混合が発生しており、これによる圧力差の緩和効果を、構築したモデルが含んでい ないため、差異が生じたものと考える。

ACE-3Dコードの流路閉塞効果に対する予測性能を評価するため、平成19年度に実施した、 ボイド率測定実験を模擬した解析を行いデータベースを取得した。図5に試験部の一部を模 擬した解析体系の概要を示す。試験部の流路が閉塞した側をSideA、逆に流路が広がった側 をSideBとした。

解析結果の一例として、t=0.070~0.074 s での界面形状変化を、図6に示す。流路面積が増加する Side B では、流れ方向に大きな変化は見られない。一方、Side A では、流速の増加により、流路閉塞部周辺で環状流の気相部面積が小さくなる (図中 A)。また、流路閉塞部下流では、2つの環状流の形状に大きな差異が生じており、環状流の破断も見られる (図中 B)が、Side B では 2 つの環状流に大きな差異がないことが分かる。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- W. Zhang, H. Yoshida and K. Takase, Modeling of Pressure Fluctuation with Cross Flow in a Tight-Lattice Rod Bundle, Proc. of 16th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-16) (CD-ROM), ICONE16-48589 (2008)
- H. Yoshida and K. Takase, Numerical Evaluation of Fluid Mixing Phenomena in Boiling Water Reactor Using Advanced Interface Tracking Method, Journal of Fluid Science and Technology, 3, 2, pp. 311-322 (2008)
- 吉田啓之、永吉拓至、張維忠、高瀬和之,改良界面追跡法による BWR 炉心内流体混合 現象の数値解析,日本機械学会論文集 B 編,74,[742] (2008), pp. 1278-1286
- 4) W. Zhang, H. Yoshida and K. Takase, Modeling Pressure Fluctuation With Cross Flow in a Tight-Lattice Rod Bundle, J. Eng. Gas Turbines Power Vol. 131, Issue 2, pp. 22901 (2009)
- 5) 張維忠、吉田啓之、高瀬和之、稠密炉心内流体混合に伴う差圧変動の評価,日本混相 流学会年会講演会 2008, (2008)

4. 今後の利用予定:

Altix3700Bx2 システムを用いて、流体混合現象に関する詳細二相流シミュレーションを 継続し、流体混合相関式に必要なボイド率相関式の開発・評価を行う予定である。また、 燃料棒周囲の液膜流に関して TPFIT コードの検証を実施するとともに、検証された解析コ ードを用いて、燃料棒周囲に形成される液膜流挙動の評価を行う予定である。
4.2.4 包括的動態予測システムのための地表面モデルの応用:乾燥地域 における植生の水資源持続可能性の指標の開発

An application of a land surface model in a comprehensive system for prediction of material dynamics: evaluation of a new index of water sustainability for vegetation

> 堅田 元喜 環境動態研究グループ

1. 利用目的:

当グループにおいて開発中の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 において、大気ー陸域間の環境負荷物質の交換過程を予測可能な地表面モ デルの開発を実施している。この地表面モデルは、地表面近傍における大気と地表面(土壌 表層・植生)間の水・熱・CO₂の輸送過程をシミュレーションする鉛直1次元モデルである。 本研究では、このモデルをサウジアラビアの山岳地帯へ適用し、精緻な熱・水交換過程に 基づく植生の水資源持続可能性を表す新しい指標を開発した。この研究には、気象モデル を用いた3次元計算に加え、それぞれの水平格子について地表面モデルを適用する必要が あったために、大規模な計算リソースが必要不可欠であった。

2. 利用内容·結果:

本研究で用いたモデルは、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 と、著者らが開発を進めている鉛直1次元の地表 面モデル SOLVEG である。SOLVEG は、地表面付近の大気・植生および土壌中における 水・熱・CO2 の鉛直輸送過程を差分法によって計算する多層モデルである。このモデルの 特徴として、植生への霧水沈着過程を考慮していることが挙げられる。霧水沈着過程は、 大気から植生への物質移行形態の一つとして重要であることに加え、特に降水量の少ない 乾燥地域に生息する植生にとっては重要な水資源となることが知られている。

本研究の計算手順は次のようである:まず、MM5 を用いて地表面付近の気象場(風速、 気温、湿度など)の時間変化を作成した。次に、MM5 で設定したそれぞれの格子点につい てこれらの気象場を SOLVEG の上部境界条件として用い、仮想的な森林を推定したときの SOLVEG 計算を実施した。この方法によって、気象モデルのみでは背評価することが困難 な霧水沈着量や遮断蒸発量、地表面流出量などを正確に計算することができる。これまで、 水資源の評価には、既存の気象データを利用することができる次の乾燥指標 (Aridity Index: AI)が用いられている:

AI=(降水量)/(ポテンシャル蒸発散量),

ここで、ポテンシャル蒸発散量は「気象データ (気温と降水量)から決定される湿潤な土 壌における植生の蒸散量と土壌からの蒸発量の和」を表す。これに対して、本研究ではよ り詳細な「植生の水資源持続可能性 (Water Sustainability for Vegetation: WSV)」を提案した: JAEA-Review 2009-030

WSV=(降水量+霧水沈着量-地表面流出量)

/(蒸散量+樹冠遮断蒸発量+土壤中蒸発量).

WSVは、従来の乾燥指標に比べて、物理素過程(霧水沈着量、遮断蒸発量、地表面流出量)や詳細な土地利用状態(植生種、土壌組成)を考慮している。このことによって、より 詳細に植生の利用可能な水資源を評価することが可能となる。AIやWSVを用いた水資源 の指標に基づいて決定した水資源的な植生の地理的分布を「潜在植生分布」と呼ぶ。本研究 では、それぞれの指標に基づいて再現された潜在植生分布と、現地調査に基づく実際の植 生分布を比較した。

上記の方法を、サウジアラビア南部の山岳地域において、人為的攪乱が少ない自然保護 区域に指定されている森林地域に適用し、年間の森林の利用可能な水資源の量を評価し た。MM5 と SOLVEG を用いた計算には、Altix3700Bx2 の 32CPU を用いてそれぞれ約 60 時間および 12 時間を要した。昨年の結果から、MM5 による気象場の計算結果は地上気象 観測や衛星による降水量分布の観測結果とよく一致することが確認されている。地表面モ デルを用いた計算では、高所における植生への霧水沈着量は降水量の 40%に達したこと、 乾燥地域に典型的な短時間における強い降水量の大部分が地表面から流出していたこと から、植生の水資源を正確に評価するためには、霧水沈着量と地表面流出量を考慮する必 要があることが示唆された。得られた結果をもとに AI と WSV を計算し、現実の砂漠地域 におけるこれらの値よりも大きい地域では、潜在的に植生が生育可能であると考えて、潜 在植生分布を調べた (図 1)。AI に基づく潜在植生分布に比べて、WSV による森林・低木 の潜在的分布は現実の植生分布とよく一致していることがわかる。この理由は、WSV に おいて上述した物理素過程を詳細に指標に考慮したためと考えられる。WSV を用いた水 資源の予測は、砂漠化や地球温暖化等に伴う植生の炭素吸収量の将来予測にも貢献できる 可能性がある。



図 1 (a) 従来の乾燥指標 (AI)と (b) 本研究の指標 (WSV)によって予測された潜在植生分 布、および (c) 現地調査に基づく植生分布 (コンター:標高 [m])。

- 3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
 - Katata, G., Nagai, H., Wrzesinsky, T., Klemm, O., Eugster, W., Burkard, R., Development of a land surface model including cloud water deposition to vegetation, Journal of Applied Meteorology, 47, pp.2129–2146 (2008).
 - 2) Katata, G., Improvement of a land surface model for accurate prediction of surface energy and water balances, JAEA-Data/Code 2008-033 (2009).
 - Katata, G., Nagai. H., Preliminary calculations for high-resolution mapping of cloud water deposition and water sustainability for vegetation, 2008 AGU Fall Meeting, San Francisco, USA (2008).
 - Katata, G., Held, A., Klemm, O., Nagai. H., Development of multi-layer atmosphere-soil-vegetation model (SOLVEG) for particle, gas, and cloud water deposition estimations, Workshop on Atmospheric Deposition in East Asia, Tokyo, Japan (2009).
 - 5) 堅田元喜,森林環境における霧の役割:数値計算で明らかにする森林への霧水沈着,第 30回酸性雨問題研究会シンポジウム講演報告集,pp.19-25 (2009).
 - 6) 堅田元喜,永井晴康,植生への霧水沈着過程を考慮した陸面モデルを用いた数値的研究:乾燥地域における潜在植生分布の再現,2008 年度水文・水資源学会研究発表会,東京 (2008).
 - 7) 堅田元喜,永井晴康,精緻な陸面モデルに基づく簡易沈着速度式を用いた森林への霧水沈着量の評価,第49回大気環境学会年会,金沢 (2007)

4. 今後の利用予定:

今後、開発した指標をより広域・長時間のスケールに適用し、詳細な植生の地理的分布 のデータとの比較を試みる。また、植生への霧水沈着過程を応用した研究として、霧水に 取り込まれる(放射性物質を含む)環境負荷物質の沈着量を評価するための精緻な物質沈着 モデルを開発する計画である。

4.2.5 拡張半経験分子軌道法による合金系の結合エネルギー解析

Bond Energy Analyses of Alloy Systems using Extended Semi-Empilical Molecular Orbital Method

五十嵐 誉廣

原子力材料設計評価研究グループ

1. 利用目的:

原子炉構造材料であるステンレス鋼の腐食挙動を理解することは、現行軽水炉で問題と なっている応力腐食割れの機構解明に対して大きな助力となる。金属系の腐食解析を行う 方法の一つとして、計算機を用いた量子論的シミュレーションがあげられる。しかし、第 一原理計算で扱える原子数は最大100個程度であることから、ランダム粒界のような対称 性が悪く多数の原子数を必要とする系を扱うことは困難である。大規模金属系に対し量子 論的解析を行うためには、第一原理計算に代わる新しい手法が必要である。本研究では、 大規模金属系解析のための新しい解析手法の開発と、開発手法を用いた大規模系のエネル ギー安定性解析を行うことを目的とする。

2. 利用内容·結果:

大規模金属系のエネルギー解析を行うため、拡張半経験分子軌道法の開発を行った。拡 張半経験分子軌道法は、エネルギー解析部分にさまざまな元素に対応した半経験分子軌道 法の採用、そして領域分割による解析可能原子数の拡大と簡便な並列化特性という特徴を 持つ。エネルギー解析部に PM6 ハミルトニアンモデルを用いた半経験分子軌道法を適用し た。PM6 ハミルトニアンモデルは、全ての典型元素と遷移金属元素を取り扱うことが可能 である。それ故に、本研究のターゲットとなる、不純物を含んだステンレス鋼の解析に適 したモデルである。領域分割には並べ替え問題や構造化プログラミングなどに採用されて いる分割統治法を用いた。具体的な手順は次のようになる。

- 一つの原子を選択し、その原 子を中心に半径 r_cのサブクラ スターを切り出す。r_cは解析す る系によって適宜設定する。
- (2) サブクラスターに対し半経験 分子軌道法解析を行う。解析 で得られる結果のうち、上記 (1)で選択した中心原子1 個の値のみを採用する。
- (3) サブクラスターの中心原子以外を拘束して構造緩和を行う。



図1 分割統治法の概要

(4) 上記(1)~(3)を、全ての原子について行う。

(5) 上記(3) で得られた構造緩和後の配置を採用し、再び解析を行う。

分割統治法は、エネルギー解析部 が各サブクラスターで独立している ため、並列計算機を用いた計算の並 列化が容易に行えるという特徴があ る。本研究では、MPICH1.2.7を用い て解析コードの並列化を行いさらな る高速化を実現した。解析コードの 並列化の結果、ほぼ線形の並列化効 率であることを確認した。

開発した拡張半経験分子軌道法を 用いて、酸素原子を含む bcc 鉄系に 対し拡張半経験分子軌道法を適用 し、原子間結合エネルギー解析を行 った。原子数 686 からなる bcc 鉄系 に 20 個の酸素原子を挿入した系を 準備する。bcc ユニットセルの格子



図2 酸素原子を含む bcc 鉄の原子間結合エネ ルギーのコンター図。赤丸は鉄原子、青丸 は酸素原子を表す。

定数は bcc 鉄の 2.8665 Åとし、自由境界条件で解析を行う。図 2 は、酸素原子を含む(100) 面の、原子間結合エネルギーのコンター図である。コンター面において非常に低いエネル ギー(~-7.0eV)となっている領域は青丸で示された酸素原子近傍で、酸素原子-鉄原子 間の結合が周囲と比較して非常に強いことがわかる。また、低いエネルギー領域の周囲に 高いエネルギー領域(~-2.1eV)が確認できる。このエネルギーは、酸素原子を含まない bcc 鉄の原子間結合エネルギー(~-2.7eV)より大きい。この結果は、酸素原子が bcc 鉄中 に侵入することで、酸素原子周辺の鉄原子の結合力が低下することを示している。

- 3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
 - 五十嵐誉廣、他、"拡張された半経験的計算手法によるステンレス鋼のエネルギー安定 性解析"、日本物理学会 2008 年秋季大会、(2008)
 - 五十嵐誉廣、他、"大規模金属系解析のための拡張半経験的分子軌道法の開発"、日本 機械学会第21回計算力学講演会、(2008)
 - 3) 五十嵐誉廣、他、"大規模金属系解析のための拡張半経験的分子軌道法の開発"、日本 機械学会第 21 回計算力学講演会 CD-ROM 論文集、No.08-33、p424、(2008)
 - 4) 五十嵐誉廣、他、"Geometrical and Electoronic Structure for Random Grain Boundary of Stainless Steel Systems"、Material Research Society 2008 Fall Meeting、(2008)
 - 5) 五十嵐、他、"拡張半経験分子軌道法による鉄+M二元合金のエネルギー安定性解析"、 日本物理学会第64回年次大会、(2008)

4. 今後の利用予定:

まずは Altix3700Bx2 システムを用いて、拡張半経験分子軌道法を用いた応力場下にある 合金系の結合エネルギー解析を行う予定である。一方で、二元合金に対し拡張半経験分子 軌道法解析を行った結果、元素の組み合わせによっては半経験分子軌道法のパラメータフ ィッティングが正確ではなく、適切な物性値が得られない場合があることがわかった。そ こで先述の解析と並行して、オーダーN第一原理計算手法を用いた合金系の結合エネルギ 一解析を行う予定である。

4.2.6 3次元炉心動特性解析コードによる HTTR の解析

Analytical results by three-dimensional core kinetics code

高松 邦吉

高温ガス炉特性・安全性試験グループ

1. 利用目的:

日本原子力研究開発機構(以下、原子力機構)では、環状炉心を採用した将来型高温ガ ス炉に関して、炉心特性の評価技術の高精度・高信頼度化を実施している。本作業では、 第4世代原子カシステム(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)の研究開発に資するため、将来型高温ガス炉用の3次元炉心動特 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、反応度が添加された場合、および冷却材流量が減少した 場合の炉心動特性を評価可能とする。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。現在、燃料体1体を1メッシュとした解析モデルを用いているが、目標とする 数時間の炉心動特性の解析結果を得るためには数日の計算時間が必要であるため、大型計 算機を用いることは必要不可欠である。

本作業で開発した解析コードは、環状炉心の安全性技術及び評価手法の高度化に役立て るとともに、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)の研究開発に活用できる。

2. 利用内容・結果:

HTTR では炉心の中心制御棒を引抜く制御棒引抜き試験、及び循環機3台中の1台、2 台を停止させる冷却材流量部分喪失試験を行ってきた。これらの炉心動特性試験は炉心に 対して対称的な反応度添加を行うため、炉心動特性解析には1点炉近似を用いた。しかし ながら、将来の非対称的な反応度添加による3次元的な炉心動特性試験を行うために、近 似を用いず直接的に時間・空間依存の中性子拡散方程式及び伝熱方程式を解く、核・熱結 合を考慮した3次元炉心動特性解析コードを開発した。平成20年度は、HTTR 炉心の空間 及び時間依存の炉心動特性を解析するために、図1に示すように炉心の60度回転対称性 を仮定し、全炉心の6分の1の解析モデルを作成した。六角柱状の燃料体は水平方向に16 個、垂直方向に9段である。各々の燃料体が核計算用のメッシュ点と対応する。各々の燃 料体を燃料または黒鉛とするかは、入力データで任意に指定できる。全ての燃料体の平均 直径および高さは、同一のものと設定する。HTTRにおいて環状炉心を構成した際、中性 子エネルギーが2群の場合の3次元中性子束分布を図2および図3に示す。





図2 環状炉心における高速中性子束分布

JAEA-Review 2009-030



図1より制御棒案内ブロックの径方向ブロック番号は1、3、8、10であり、図3を見る と制御棒が挿入されている軸方向ブロック名まで、熱中性子束がゼロであることがわかっ た。図2より環状炉心における高速中性子束の分布は、中心領域が凹んだ形となることが わかったが、図3より熱中性子束分布は、中心領域が凹まない形となることがわかった。 この結果は、他の静特性解析コードで得られた2群の中性子束分布と一致する。今後、環 状炉心の3次元的な炉心動特性の詳細な解析に、本解析コードが使用できる見通しが得ら れた。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- The 13th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-13), Kanazawa City, Ishikawa Prefecture, Japan, September 27-October 2, 2009.
- 4. 今後の利用予定:

HTTR で実施された制御棒反応度価値測定の解析を行い、実測値との比較を行う。特に、 3 つの中性子検出器で得られた実測値の相対変化を評価する。これにより3次元炉心動特 性解析コードの問題点を洗い出しプログラムを改良する。また、環状炉心を採用した将来 型高温ガス炉の解析モデルを作成し、現状の設計データで外乱を加えた場合の炉心動特性 の評価を行う。これにより環状炉心における3次元炉心動特性解析コードの問題点を洗い 出しプログラムを改良する。

4.2.7 重イオン入射反応における中性子生成二重微分断面積の計算

Neutron-Production Double-Differential Cross Sections by Heavy-Ion Incidences

佐藤 大樹

放射線防護研究グループ

1. 利用目的:

重イオン治療における二次的発ガンリスクを評価するために、患者の体内に入射した重 イオンにより生成される二次中性子の線量を知ることは極めて重要である。しかし、様々 な放射線の混合場である患者体内において、高エネルギー中性子の線量を実験的に求める ことは難しく、線量評価はシミュレーションコードに頼らざるを得ない。本研究では、既 存のシミュレーションコードに対して、原子核-原子核反応の精度検証を行った。シミュレ ーションコードにおいて、原子核は核子の多体系として記述されるため、原子核を構成す る核子数に依存してシミュレーションに掛かる計算時間も長くなる。多数の異なる条件に 対して、原子核反応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 環境が不可欠である。

2. 利用内容・結果:

計算は、PC クラスタ B タイプの 24CPU 並列によって実施した。シミュレーションコー ドとして、PHTIS (バージョン 2.14; 原子力機構)、FLUKA (バージョン 2008.3; 欧州原 子核研究機構) および MCNPX (バージョン 2.6; ロスアラモス国立研究所)を用いた。原 子核反応の計算には、PHITS および FLUKA では QMD (Quantum Molecular Dynamics) 模 型を、MCNPX では LAQGSM (Los Alamos version of Quark-Gluon String Model) 模型を採 用している。QMD では、原子核内に存在する全ての核子間の有効相互作用を考慮し、各 核子の運動を時間発展させる。LAQGSM では、原子核内を核子密度等に依存した平均場 ポテンシャルで記述し、このポテンシャル下での核子の運動を計算する。

図1および図2は、400MeV/nucleonのCイオンおよび560MeV/nucleonのArイオン入 射における炭素原子核からの中性子生成二重微分断面積の計算結果である。図1において、 PHITS およびFLUKAは前方角度領域のピーク構造を過大評価していることが分かる。一 方、MCNPXは100MeV近傍において実験データと良く一致しているが、ピークの高エネ ルギー端を再現できていない。図2においても、PHITSおよびFLUKAは前方角度領域で 実験値よりも僅かに大きな値を与えている。MCNPXは、ピークの高エネルギー端におい ても実験値を再現しており、全エネルギー領域で実験値と良く一致している。

本研究により、QMD 模型に基づく PHITS と FLUKA は断面積を過大評価すること、 MCNPX は軽イオン入射反応においてピーク構造の再現性に問題があることが分かった。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

4. 今後の利用予定:

重イオン入射反応におけるガンマ線生成二重微分断面積について計算する。



Outgoing neutron energy [MeV]

図1 400MeV/nucleon 炭素イオン入射反応による炭素原子核からの

中性子生成二重微分断面積



図 2 560MeV/nucleon 炭素イオン入射反応による炭素原子核からの 中性子生成二重微分断面積

4.2.8 地震時における二相流挙動評価手法の開発

Development of prediction method of two-phase flow behavior in a time of earthquake

三沢 丈治、高瀬 和之、吉田 啓之、玉井 秀定 機構論的熱設計手法開発 Gr

1. 利用目的:

原子力発電プラントが巨大地震にさらされる際の性能限界の確認は,可能であれば実規 模試験で実証されるべきであるが,コストや規模の制限により,そのような震動実験は不 可能である。そこで,近年発展が著しい計算科学を活用して,実験代替としてのシミュレ ーションシステム構築と,さまざまな動的事象を考慮できるシミュレーションモデルの開 発が期待されている。

本課題では、地震時における原子力発電プラントの挙動を正確に予測するために、地震 加速度に起因する熱流体 - 構造連成による炉内構造物の変形時等における熱的現象のシ ミュレーションを可能とする機構論的熱設計手法を開発することを目的とする。

2. 利用内容·結果:

平成 20 年度は、①BFC 解析機能の拡張及び整備、②燃料集合体内沸騰二相流解析、 ③二相流に対する地震加速度の影響評価を実施した。以下に各解析の結果について示す。

①BFC 解析機能の拡張及び整備

ACE-3D コードは燃料集合体内の流動解析を主な対象として解析されてきたが,燃料棒 などの変形などについては対象としていなかった。燃料棒の変形を考慮する場合,流れ方 向に流路面積が変化するため,BFC 解析機能の拡張を行いこれに対応した。拡張した ACE-3D コードの妥当性を確認するため,燃料棒変形を簡略模擬した条件で解析を行い, 物理的に妥当な結果が得られることを確認した。解析結果の一例として,単相流の場合の (液相)速度分布と,二相流の場合のボイド率及び液相速度分布を図1に示す。図1(a)に示 す単相流の場合,流路中の,突起の後方の狭い領域に渦が生成されている。それに対し, 二相流の場合(図1(b)),突起の後方に渦ができるのは同様であるが,後方部の広い領域に

渦が生じている。図1(c) に示すように,ボイド率 はこの渦の中心部で遠 心力の効果により高く なっていることが分か る。これにより,流れ方 向の流路形状の効果を 解析コードが表現でき ていることが確認でき る。



(a)液相速度分布(単相流) (b)液相速度分布 (c)ボイド率分布 図 1 燃料棒変形を簡略模擬した解析の一例

②燃料集合体内沸騰二相流解析

現在,本技術開発においては,Peach Bottom 2 号炉を模擬し た条件で,各種機器の地震加速度などへの応答を評価する解 析が実施されており,21 年度以降に,これらの評価により得 られた燃料集合体の加速度や流動条件の変化を加味した解析 を,ACE-3D コードで実施する予定となっている。そこで, Peach Bottom 2 号炉の7x7燃料集合体の一部を模擬した解析を 行い,来年度に実施予定の解析の可否を検討した。解析では, Peach Bottom 2 号炉7x7燃料集合体の中心部分の4つのサブチ ャンネルを模擬した。図2に解析結果の一例として,断面内 ボイド率分布を示す。燃料棒周囲で沸騰が起こっており,燃 料棒間の狭隘部にボイドが集まる傾向が見られる。なお,解





析ではブロック間の接合部において計算が不安定になる傾向が見られており,21年度の解 析はこの部分の改良を実施した上で行う予定である。

③二相流に対する地震加速度の影響評価

二相流に対する地震加速度の影響を,詳細二相流 解析コード TPFIT の解析結果をもとに検討すること とし,そのための解析を行った。これまでの ACE-3D コードによる燃料集合体内沸騰二相流解析の結果か ら,気泡に働く揚力の評価が燃料集合体内のボイド 率分布の形成に重要であることが明らかとなってい るため,ここでは,気泡に揚力が働く状況を模擬し, せん断流中を上昇する気泡についての解析を行っ た。解析体系は,図3に示す矩形流路であり,流路 の下部に直径2mmの気泡を配置し,一定の速度勾 配を与えた条件で解析を行った。解析条件を表1に 示す。解析では,速度勾配を固定し,平均速度と振 動の有無をパラメータとした。作動流体はBWR の 運転条件を模擬し,7.2 MPa,飽和温度の水(蒸気)と した。解析では,振幅を重力加速度とし

0.1 秒の周期で振動する y 方向加速度を 与えて、地震による震動を模擬した。

解析結果の一例として,ケース1及び 1Fにおける,界面挙動の時間変化を図 4に示す。振動がない場合(図4(a)),気 泡の上昇に伴い *y*=0の方向に移動して いる。また,気泡形状は複雑に変化して



図3 解析体系

表1 解析条件

ケース	振動	速度勾配	平均速度		
		[1/s]	[m/s]		
1	なし		1.0		
1F	あり	20	1.0		
2	なし	20	0.1		
2F	あり		0.1		

JAEA-Review 2009-030



いることが分かる。振動がある場合(図 4(b))も、基本的な運動の様子は、振動がない場合 と大きな変化はないが、y=0の方向の移動は小さくなった。また、気泡形状については、 その変化は小さく、基本的に球形が維持されている。図5に、平均速度が小さい場合の界 面挙動の時間変化を示す。平均速度が大きい場合と同様に、振動がない場合(図5(a))に気 泡の変形が大きく、ある場合(図5(b))はより球形に近い形が保たれている。また、y=0の 方向に移動している点についても、平均速度が大きい場合と同様である。しかし、移動距 離については、振動がある場合の方が大きく、平均速度が小さい場合と逆の傾向を示して いる。一連の結果から、気泡の形状や運動に地震加速度の影響があることが確認できた。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 吉田啓之, 炉内熱流動解析モデリングの計画と現状, 第19回 CCSE ワークショップ

4. 今後の利用予定:

20 年度の解析で明らかになった課題を踏まえて,引き続き燃料集合体の一部を模擬した 沸騰二相流解析を実施し,地震加速度付加時における燃料集合体内沸騰二相流を評価でき る見通しを得る。また,単純化した体系に対し TPFIT による地震加速度の有無をパラメー タとした解析を実施し,ACE-3D で用いられる二相流相関式の適用性について検討する。

4.2.9 粒子・重イオン輸送計算コード PHITS の精度評価(核破砕モデ ルに関するベンチマーク解析)

Assessing the prediction capabilities of the PHITS code (Benchmark of Spallation Models)

松田 規宏,伊藤 麻美 放射線工学研究グループ

1. 利用目的:

輸送計算コードにおける核破砕モデルの予測精度は、中性子源開発、核変換技術開発、 天体物理学に関係する希少同位体生成、原子核実験等での検出器シミュレーション、加速 器施設や宇宙空間における放射線防護といった幅広い分野において、その実現性に大きく 影響する。原子力機構が中心となって開発中の粒子・重イオン輸送計算コード PHITS は、 これらの分野における利用が可能である。世界には同種の計算コードがいくつか存在し、 それぞれの計算コードには核反応断面積を算出するための独自の核破砕モデルが組み込 まれている。それらのモデルの特徴を把握するため、国際原子力機関(IAEA)主導の下、 実験データをもとにした精度評価が実施されることとなった。PHITS コード開発者の一員

として本ベンチマーク解析 に参加するため、大型計算 機システムを利用して計算 を行った。ベンチマーク問 題は、中性子生成、軽荷電 粒子(p,d,t,³He,α)生成、 鉄及び鉛ターゲットの同位 体生成断面積、逆運動学に よる同位体分布断面積、パ イオン生成の5項目、計50 問題であり、11月からの約 3ヶ月間で計算を行った。



☑ 1 「Benchmark of Spallation Models」web page (http://nds121.iaea.org/alberto/mediawiki-1.6.10/index.php

2. 利用内容·結果:

PHITS コードには、以下の核破砕モデル(計算コード)が組み込まれている。Bertini コ ードは、古くからある核内カスケードモデルで、短い計算時間で解を得ることができる。 JAM コードは共鳴モデル及びストリングモデルを基にした全てのハドロン-ハドロン断面 積をパラメータ化したカスケードモデルであり、JQMD コードは量子分子動力学モデルを 基にした計算コードで、実用的な計算時間で解を得ることができる。今回の PHITS コード によるベンチマーク解析では、これら3種の核破砕モデルを用いた。以下にベンチマーク 解析の一例として、JAM コードによる結果を述べる。

1) 中性子生成問題



図 2 1600MeV 陽子が鉄ターゲットに入射したときの中性子生成二重微分断面積 (上から放出角が 0 度、10 度(×10⁻¹)、25 度(×10⁻²)、40 度(×10⁻³)、55 度(×10⁻⁴)、70 度(×10⁻⁵)、85 度(× 10⁻⁶)、100 度(×10⁻⁷)、115 度(×10⁻⁸)、130 度(×10⁻⁹)、145 度(×10⁻¹⁰)、160 度(×10⁻¹¹)の結果 で、実線は計算結果、白抜き丸は実験値^{*1}) *1: S. Leray et al., PRC 65 (2002) 044621

中性子は施設の遮へい設計や放射線防護において重要な粒子で、その生成二重微分断面 積は汎用計算コードにとって最も基本的で高い精度が要求される。本ベンチマーク解析で は入射エネルギー及びターゲットを変えた13の問題が用意され、PHITSコードによる計 算結果はその全てについて実験値を精度よく再現した。



2) 逆運動学による同位体分布断面積問題

図3 1000MeV 鉄イオンが水素ターゲットに入射したときの同位体生成断面積 (ナトリウムから鉄までの結果で、実線は計算結果、黒丸は実験値*2)

*2: C. Villagrasa-Canton et al., PRC 75 (2007) 044603, P. Napolitani et al., PRC 70 (2004) 054607

同位体分布断面積の精度は、残留放射能による放射線防護や低放射化材料の開発などに おいて重要である。本ベンチマーク解析では入射エネルギー及びターゲットを変えた5つ の問題が用意され、鉄ターゲットに対して計算結果は実験値を精度よく再現したものの、 鉛やウランといった重い核に対してはLu~Hgまでの特定の核種について1桁を超す不一 致が見られるものもあった。

3) 軽荷電粒子生成問題



 図 4 2500MeV 陽子が金ターゲットに入射したときの軽荷電粒子生成二重微分断面積
 (上から放出角が 30 度、75 度(×10⁻¹)、105 度(×10⁻²)、150 度(×10⁻³)の結果で、実線は計算結果、 白抜き丸は実験値^{*3})
 *3: A. Letourneau et al., Nucl. Phys. A 712 (2002) 133

本ベンチマーク解析では入射エネルギー及びターゲットの組み合わせを変えた 14 の問題が用意され、陽子(p)放出については精度の良い結果が得られた。一方、現在のモデル計算では、d,t,³He,α□といった中性子と陽子の組み合わせであるクラスターとしての出力に課題があり、精度の良い結果は得られなかった。これは PHITS コードだけでなく、同種の汎用計算コードにおける共通の問題である。図4左は陽子(p)放出、右は重陽子(d)放出の結果で、低エネルギー側に見えるピークは、蒸発過程によるものである。軽荷電粒子生成の精度は、粒子線治療の線量評価などにおいて重要である。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

4. 今後の利用予定:

Altix3700Bx2 システムを用いて、引き続き PHITS コードの精度評価のために利用する。

4.2.10 カルマンフィルターを用いた海洋大循環モデルの高精度化

Improvement of ocean general circulation model with Kalman filter

川村 英之

環境動態研究グループ

1. 利用目的:

原子力基礎工学研究部門・環境動態研究グループでは、原子力施設等から海洋へ放出さ れる放射性核種の移行を再現・予測するために、海洋環境評価システムを開発している。 本システムの一部である海洋大循環モデルは、海流・海面高度・水温・塩分等の海況場を 計算する数値モデルで、海況場を正確に再現・予測することは放射性核種の移行計算にと って非常に重要なことであり、海洋大循環モデルは本システムの基礎となるものである。 しかしながら、海洋大循環モデルの研究は大気大循環モデルと比較して、まだ発展途上の 段階であり、その精度は十分なものとは言えないというのが現状である。近年、このよう な問題を解決するために、観測データを数値モデルに統計的・力学的に同化するデータ同 化手法の研究が活発に行われている。本研究では、データ同化手法の一つであるカルマン フィルターを適用することで、海洋大循環モデルを高精度化することを目的としている。

2.利用内容・結果:

数値実験は日本海を対象とし、データ同化の効果を明らかにするため、3 通り行った。 最初にデータ同化を適用しない実験(以下、実験1)を実施し、次に人工衛星海面高度計で 観測された海面高度変動を数値モデルに同化した実験(以下、実験2)を行った。最後に人 工衛星海面高度計に加えて、日本沿岸に設置された潮位計で観測された海面高度変動を数 値モデルに同化した実験(以下、実験3)を行った。人工衛星海面高度計データについては、 約 10 日という早い周期で地球を一周する TOPEX/POSEIDON と、周期は約 35 日と遅いが 空間分解能が高い ERS2 の 2 つの人工衛星データを使用した。潮位計データについては、 日本海側に位置する厳原・博多・門司・浜田・境・西郷・舞鶴・能登・富山・佐渡・粟島・ 深浦・松前港・江差港・岩内港・小樽港・留萌港・沓形港・稚内の 19 地点で得られた潮 汐データを使用した。潮汐データは一時間毎に得られているが、大気圧等の影響を取り除 くためのデータ処理を行い、一日間隔のデータセットを作成した。

実験1において、上記の19地点の潮位計で観測された海面高度変動と数値実験の計算 結果を比較すると、日本海南部では相関が高かったが、日本海北部では再現性があまり良 くないことが確認された。この日本海北部の再現性の低さは、2000年9月から10月にか けて行われた海洋調査で観測された沿岸域における流れ場(Watanabe et al., 2006)¹ との比 較でも確認された。特に日本海北部の津軽海峡近辺では、この時期に北向きの強い流れが 観測されたのに対し、実験1ではほとんど逆向きの強い南向きの流れが計算されていた。 実験2では津軽海峡付近の流れ場は改善され、観測結果に近づいているものの、その再現 性は十分なものとは言えなかった。この原因としては、人工衛星海面高度計データは水深 約200m以浅の海域では精度が悪くなるため、使用することができず、沿岸域における海 況場を改善するには不十分であることが考えられる。一方、実験3においては津軽海峡近 辺の流れ場を含めて、全体的に観測された流れ場を非常に良く再現できていることが確認 された。このことは、人工衛星海面高度計で得られた海面高度変動データに加えて、一日 毎という時間分解能が高い沿岸潮位計で観測された海面高度変動データを数値モデルに 同化することで、沿岸域の海況場が改善できることを示している。また、観測線で得られ た通過流量や水温・塩分・ポテンシャル密度の鉛直分布等においても、観測結果との定量 的な比較を行った結果、人工衛星海面高度計と沿岸潮位計で得られた海面高度変動データ を数値モデルに同化した数値実験は、沿岸域を含めた日本海の海況場を全体的に良く再現 していることが確認された。上記の観測結果との比較の詳細は、Kawamura et al. (2009)² を 参照して頂きたい。

本研究結果から、カルマンフィルターを使用したデータ同化手法により、環境動態研究 グループで開発している海洋環境評価システムを高精度化することが期待できる。

¹Watanabe, T., O. Katoh and H. Yamada (2006): Structure of the Tsushima Warm Current in the northeastern Japan Sea. J. Oceanogr., 62, pp.527-538.

²Kawamura, H., T. Ito, N. Hirose, T. Takikawa and J.-H. Yoon (2009): Modeling of the branches of the Tsushima Warm Current in the eastern Japan Sea. J. Oceanogr., accepted.

- 3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
 - 1) Kawamura et al., "Modeling of the branches of the Tsushima Warm Current in the eastern Japan Sea", Journal of Oceanography, accepted, (2009)
 - 2) 川村英之,他,日本海における人工放射性核種の分布に関する数値実験,2008 年度日 本海洋学会秋季大会,(2008)

4. 今後の利用予定:

今後は、本研究で行ったデータ同化手法を適用した海洋大循環モデルと海洋中物質移行 モデルを使用して、過去に起こったタンカー事故による流出重油の再現実験を行う予定で ある。また、環境動態研究グループが過去に実施した日本海海洋調査で得られた人工放射 性核種の分布を数値モデルにより再現し、人工放射性核種の日本海での移行過程や存在量 等を解明する予定である。

4.2.11 原子炉燃料集合体除熱限界の機構論的予測手法の開発

Development of Predictable Technology for Heat Transfer Limit in Fuel Assembly Based on Two-Phase Flow Numerical Simulation

> 中塚 亨、三沢 丈治、吉田 啓之、呉田 昌俊^{*} 機構論的熱設計手法開発グループ

> > (*:現 原子力センシング研究グループ)

V

図1 試験体断面図

1. 利用目的:

燃料集合体等の原子炉機器の現在の熱設計は、実機を模擬した大規模試験の結果に基づ き作成した実験式(相関式)を、設計コードに組み込んで実施されている。相関式は、速 度・圧力等の他に実験体系の形状や寸法等にも依存するため、機器の設計変更の度に新た な試験が必要となる。しかし、大規模試験には多大な実施期間と費用が必要なため、大規 模試験を必要とせずに熱設計を可能とする手法の開発が期待されている。本研究は、計算 科学的手法により、大規模試験を必要としない機構論的熱設計手法の構築を目的とする。

13ml

05mI

->¦← 1.3mm

2. 利用内容・結果:

本課題では、原子炉燃料集合体の熱設計コードの開発・検証に必要な解析を実施する。平成20年度は、①BWR 燃料集合体内沸騰二相流解析、及び②軽水冷却スーパー高速炉燃料集合体内熱流動解析を実施した。結果を以下に示す。

①BWR 燃料集合体内沸騰二相流解析

ACE-3D コードの燃料集合体内沸騰流における圧力損失の予測性能を調べるため、原子力機

構で実施した大型熱特性試験を模擬した流動解析を実施した。 図1に試験体断面図を示す。対称性を考慮し試験体断面の1/12 を解析対象とした。軸方向発熱分布を図2に示す。実験では DP1~DP6の各区間で差圧を測定している。冷却材を沸騰させ たケースにつき、DP1~DP4の差圧の実験値との比較を図3に 示す。スペーサを含む差圧測定区間であるDP1及びDP3は最 大15%程度の過小評価を示した一方、スペーサを含まないDP2 及びDP4は10%程度の誤差で実験結果と一致した。DP1及び DP3における過小評価の原因の一つとして、本解析においては スペーサを解析対象に含めておらず、スペーサによる流路縮小 が特に二相流に対して与える効果が反映されていないことが



Simulated fuel rod

Channel box.

Computational domain



考えられる。スペーサを含まない単相流条件の解析でも過小評価が見られており、各種相 関式の燃料集合体体系への適用性の検討が必要と考える。 JAEA-Review 2009-030



図 5 燃料棒表面温度分布

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- T. Misawa, et al., "Numerical Analysis of Heat Transfer Test of Supercritical Water in a Tube Using The Three-Dimensional Two-Fluid Model Code", *Proc. the 16th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE16)*, ICONE16-48690 (2008)
- H. Yoshida, et al., "Numerical Simulation of Boiling Two-Phase Flow in Tight-Lattice Rod Bundle by 3-dimensional Two-Fluid Model Code ACE-3D", *Proc. the 16th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE16)*, ICONE16-48715 (2008)
- T. Misawa, et al., "Numerical Analysis of Heat Transfer Experiment of Supercritical Pressure Water and Freon in a Rod bundle", *Proc. 16th Pacific Basin Nuclear Conference (16PBNC)*, P16P1065 (2008)

- H. Yoshida, et al., "Numerical Simulation of Heat Transfer Test of Forced Convection Supercritical Water Flowing in a Circular Pipe", Proc. Sixth Japan-Korea Symposium on Nuclear Thermal Hydraulic and Safety (NTHAS6), N6P1082 (2008)
- 5) T. Nakatsuka, et al., "Numerical Analysis of Supercritical Water Flowing in an Annular Channel Using the Two-Fluid Model Code ACE-3D", *Proc. Sixth Japan-Korea Symposium on Nuclear Thermal Hydraulic and Safety (NTHAS6)*, N6P1047 (2008)
- H. Yoshida, et al., "Development of Analytical Procedures of Two-Phase Flow in Tight-Lattice Fuel Bundles for Innovative Water Reactor for Flexible Fuel Cycle", *Nuclear Technology*, 164, [1], pp.45-54 (2008)
- T. Misawa, et al., "Numerical Analysis of Heat Transfer Test of Supercritical Water in a Tube using the Three-dimensional Two-fluid Model Code", *J. Power and Energy Systems*, 3, [1], pp.194-203 (2009)
- T. Nakatsuka, et al., "Numerical Simulation of Heat Transfer Experiment of Supercritical Water by Two-Fluid-Model Code ACE-3D", *Proc. 4th International Symposium on Supercritical Water-Cooled Reactors*, Paper No. 31 (2009)
- 9) 三沢丈治,他,"三次元二流体モデル解析コードによる超臨界水を用いた模擬燃料集合 体内熱伝達特性試験解析",日本原子力学会 2009 年春の年会, J51 (2009)
- 10) 三沢丈治,他,"三次元二流体モデル解析コード ACE-3D による稠密炉心内沸騰流解 析",日本原子力学会 2008 年秋の大会,E35 (2008)
- 11) 吉田啓之,他,"三次元二流体モデル解析コード ACE-3D による超臨界圧水強制対流熱 伝達試験解析",日本原子力学会 2008 年秋の大会,E34 (2008)
- 12) 中塚亨,他,"軽水冷却スーパー高速炉の研究開発-3 次元2 流体モデル解析コード ACE-3Dによる超臨界水熱伝達特性試験解析-",日本原子力学会2008 年秋の大会,E36 (2008)
- 13) 三沢丈治,他,"三次元二流体モデル解析コードによる稠密燃料集合体内沸騰流解 析",日本混相流学会第27回混相流シンポジウム,B143,pp.122-123 (2008)
- 14) 鈴木貴行,他,"三次元二流体モデル解析コード ACE-3D による稠密燃料集合体内圧 力損失の評価",日本機械学会関東支部第15 期総会講演会,10505, pp.103-104 (2009)
- 4. 今後の利用予定:

BWR 燃料集合体内沸騰二相流解析については、燃料集合体内サブチャンネルにおける 流量配分、及び流路閉塞に関する予測性能評価とともに、機構論的熱設計手法の総合的な 評価を行う予定である。軽水冷却スーパー高速炉燃料集合体内熱流動解析については、燃 料集合体を簡略模擬した 19 本バンドル体系の解析を実施し、熱設計に資する熱流動解析 データを提供する予定である。また、燃料集合体内乱流の直接数値解析を行い、各種相関 式の妥当性を評価するためのデータベースを取得する予定である。

4.2.12 応力腐食割れ機構の解明のための大規模分子動力学 および状態遷移解析

Molecular dynamics and atomistic transition state analysis for stress corrosion cracking

都留 智仁

腐食損傷機構研究グループ

1. 利用目的:

申請者は、原子論的解析や離散転位力学解析などのマルチスケール解析に従事し、原子 スケールより大きくマクロな現象の素過程となるメゾスケールの力学挙動に従事してお り、一連の解析のためシステム計算科学センターの協力の下 MPI による並列化分子動力学 (MD) コードおよび並列化状態遷移解析 (NEB) コードの開発を行った。そして、粒界 構造と転位・格子間原子クラスター (SIA) などの他の照射欠陥挙動に着目し、それらの 生成過程や運動のメカニズムに関する原子論的シミュレーションを実行した。また、それ ぞれの格子欠陥の相互作用の活性化エネルギーに関して状態遷移解析によって検討を行 った。SCC は粒界破壊が主として生じることがわかっている一方、SCC の発生メカニズム は依然として議論の余地が残されており、原子論的手法による組織変化の理解がメカニズ ム解明に重要な役割を果たすと考えられる。

2. 利用内容・結果:

転位と粒界の相互作用のNEB解析では、SCC機構解明に必要な、個々の欠陥挙動やマクロな破壊の基礎メカニズムの知見を得ることができる。ここでNEB法では、解析対象となるスケールと反応経路の分解能に対応するレプリカイメージの増加は計算機の性能に強く依存する。そのため、現在は表面反応などの非常に小さい系での応用が主流となっているが、力学挙動を対象とした大規模計算による解析は材料力学計算における先駆的な役割を果たすと考えられる。これらの解析の結果、刃状転位が安定なΣ3(111)[110]粒界と相互作用する際に、完全結晶中を運動する場合のエネルギー障壁(Peierls ポテンシャル)に対して非常に大きくなることから、塑性変形の大きな障害となることがわかった。また、一度相互作用すると、粒界で粒界面に沿った DSC 格子転位と粒界に垂直なステップ転位に分解し、比較的低いエネルギー障壁で粒界すべりを引き起こすことを示した。この結果は、"Physical Review B, 79 (2009), 012104"(成果リスト①)に報告された。

また、総原子数 1000 万個の大規模分子動力学解析により、ナノインデンテーションの 解析を行った結果、無欠陥の材料内部から複数の転位が急激に生成されることがわかり、 ナノスケールにおける初期の塑性現象として知られるナノ塑性の要因になっていること を明らかにした。この結果は、"Journal of Computational Science and Technology, 2 (2008), 459-467." (成果リスト③) に報告された。

原子力圧力容器などに使用されるフェライト系ステンレスにおいて、照射化で生成され る不純物原子クラスターの析出傾向を固溶の自由エネルギーを用いて評価したものが成 果リスト②と⑥となっているが、現在計算を継続中である。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) T. Tsuru, Y. Shibutani and Y. Kaji, *Physical Review B*, **79** (2009), 012104.
- 2) T. Tsuru, C. Suzuki, M. Yamaguchi and Y. Kaji, *Proceedings of 4th Multiscale Materials Modeling*, 2008.
- T. Tsuru and Y. Shibutani, *Journal of Computational Science and Technology*, 2 (2008), 459-467.
- T. Tsuru and Y. Shibutani, *Journal of Computational Science and Technology*, 2 (2008), 559-567.
- 5) 都留智仁·渋谷陽二,日本機械学会論文集(A編),74 (2008),933-938.
- 6) T. Tsuru, C. Suzuki, M. Yamaguchi and Y. Kaji, *Journal of Applied Physics*, submitted.

4. 今後の利用予定:

原子論的解析や離散転位力学解析などのマルチスケール解析により、原子からマクロな 現象の素過程となるメゾスケールの力学挙動に従事しており、計算センターの協力の下 MPIによる並列化分子動力学(MD)コードおよび並列化状態遷移解析(NEB)コードの 開発を行っている。これらのコードを用いて以下の解析を行うことを計画している。

まず、粒界と転位の相互作用に関する研究に関して、粒界エネルギーが個々の粒界を特 徴づける基本特性であることから、原子モデルによりそれらを定量的に評価する。最も安 定なΣ3(111)[110]粒界の場合の解析が昨年度の成果として発表されているが、これに関連 して不安定な粒界の場合と比較し相互作用の包括的な知見を得る。

次に、原子力圧力容器鋼において照射によって不純物原子クラスターが生成され材料の 脆化を引き起こすことから、これらの生成過程の定量的な評価が求められている。生成に は、固溶とクラスタリングの自由エネルギーを評価する必要があるが、厳密な議論のため に非経験的な手法を適用する。大きな不純物クラスターは相変態を引き起こすため、NEB 法により相変態の活性化エネルギー見積もるとともに、塑性変形に対する影響を大規模分 子動力学法を用いて評価する。ここで、NEB 法では、解析対象となるスケールと反応経路 の分解能に対応するレプリカイメージの増加は計算機の性能に強く依存する。そのため、 現在は表面反応などの非常に小さい系での応用が主流となっているが、粒界を含む系の力 学挙動を対象とした大規模計算による解析は、計算材料科学において先駆的な研究である とともに、実用的な現象の理解に重要であると考えられる。

4.2.13 クラスターDNA損傷と修復酵素 Fpg の分子動力学 シミュレーション

Molecular dynamics simulation of clustered DNA damage site with DNA repair enzyme Fpg

樋口 真理子

放射線影響解析研究グループ

1. 利用目的:

複数の DNA 損傷が密集したものをクラスターDNA 損傷と呼ぶ。これは放射線による DNA 損傷の特徴のひとつであると考えられている。DNA 損傷がクラスター状になると修 復が阻害される場合があることが実験で分かっている。損傷がクラスター状になると修復 酵素の働きにどのような影響を与えるのだろうか。分子動力学シミュレーションの手法を 用いてクラスターDNA 損傷が修復を阻害する分子機構の解明を目指している。クラスター DNA 損傷の修復が阻害される例として、DNA 上の 8 オキソグアニンの近くに AP サイト (塩基脱離) や一本鎖切断があるクラスターDNA 損傷があげられる。修復酵素の損傷認識 に与える影響を明らかにするため、クラスター損傷 DNA と修復酵素が接触した場合の構 造揺らぎの大きさを調べた。

2. 利用内容·結果:

シミュレーションは分子動力学(MD)シミュレーション用ソフトウエア AMBER8 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。クラスター損傷(8 オキソグアニ ンと一本鎖切断)を持つ40ベースペアの損傷 DNA と DNA 修復酵素 Fpg のシミュレーシ ョンを行った。損傷 DNA の構造をモデリング後、水中で3ナノ秒の MD シミュレーショ ンを行ったものを初期構造に用いた。修復酵素 Fpg は、8 オキソグアニンのみの損傷 DNA と結合状態にあるX結晶構造から損傷 DNA を取り除き、水中で1ナノ秒の MD シミュレ ーションを行ったものを初期構造に用いた。二つの分子を水分子で囲み、系全体が中性に なる数のイオンを配置しこれを初期構造とした。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、1.2 ナノ秒の MD シミュレーションを行った。

1.2 ナノ秒の MD シミュレーションでは、二つの分子の接触が見られたが、安定な複合体は形成されなかった。分子の内部運動の大きさを見るために原子の平均二乗変異を計算した。修復酵素 Fpg の平均二乗変異を見ると2 オングストローム近傍で安定している。損傷 DNA の平均二乗変異は2~6 オングストロームの範囲で大きく揺らいでいる。これはDNA 構造が揺らいでいることを示している。二つの分子を合わせた系で平均二乗変異を計算すると、6 オングストローム付近を大きく揺らいでいる。また、8 オキソグアニンのみを持つ損傷 DNA と修復酵素 Fpg、および、8 オキソグアニンと AP サイトのクラスター損傷をもつ損傷 DNA と修復酵素 Fpg を用いて同じ手順で MD シミュレーションと解析を行った。クラスターでない損傷 DNA と修復酵素 Fpg の場合は、二つの分子を合わせて見ても 3~4 オングストロームの範囲で落ち着き、揺らぎの大きさもクラスター損傷の場合と比較して小さく安定している。8 オキソグアニンと AP サイトのクラスター損傷 DNA と修復

酵素 Fpg の平均二乗変異の振る舞いは、8 オキソグアニンと一本鎖切断のクラスター損傷 DNA の場合と同じく大きく揺らいでいる。実験では、一本鎖切断の影響は AP サイトの影 響よりも大きいことが多く、修復酵素との単純な接触を阻害するだけでなく他の要因があ ることが示唆される。



- 3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
 - 1) M. Higuchi and M. Pinak, "Molecular dynamics simulation of clustered DNA damage site including single strand break", 日本生物物理学会第 46 回年会, 2008 年 12 月, 福岡
- 4. 今後の利用予定:

クラスター損傷を含む DNA と修復酵素の複合体をモデリングして分子動力学シミュレ ーションを行い、複合体状態での両者の相互作用等を詳細に調べる。単独の損傷の場合と 比較し、損傷のクラスター化が修復酵素の基質認識を妨げる要因を調べる。

4.2.14 反射体付き小型高速炉を模擬した FCA 炉心における 臨界性に対する実験解析¹

Analysis of Criticality in FCA Core Simulating Small-Fast Reactor with Reflector

福島 昌宏、岡嶋 成晃 核設計技術開発グループ

1. 利用目的:

近年、燃料無交換長寿命原子炉として検討されている反射体付き高速炉の核設計において、炉心と反射体の境界領域の予測精度の向上が重要視されている。そこで、原子力機構の高速炉臨界実験装置 FCA に構築された金属燃料を用いた反射体付き小型高速炉の模擬体系での臨界性(実効増倍率 k_{eff})に対する実験解析を行った。

2. 利用内容・結果:

本実験解析では、並列計算機 Altix3900 を用いて、実験体系の幾何形状の詳細モデル化 が可能な連続エネルギーモンテカルロ法コード MVP により、実験体系(FCA23 炉心及び FCA24 炉心)をモデル化した。両体系は従来の径方向ブランケットを設けた高速炉模擬体 系に比べて径方向の中性子漏洩量が多いことから、本解析においては、径方向反射体外側 に存在する FCA 集合体の全格子管及びその外周の構造材を考慮した。このうち、FCA23 炉心及び FCA24 炉心の炉心付近の XY 断面図を図1及び図2に示す。また、各領域の原子 数密度を表1に示す。



図1 FCA23 炉心(XY 断面図)

図 2 FCA24 炉心(XY 断面図)

¹ 本報告で用いた実験データの一部は、文部科学省革新的原子炉システム技術開発公募事業「燃料無交換炉心のための新型制御方式に関する技術開発」(H16 年度及びH17 年度)の成果である。

表1 各領域の原子数密度

単位(×1024atoms/cm3)

Region	T-Pu	T-U	Na	REF	DUB	MTX*
²³⁵ U	7.1E-05	2.1E-03	_	_	8.4E-05	_
²³⁸ U	9.7E-03	1.0E-02	_	_	4.0E-02	_
²³⁹ Pu	2.1E-03	1.0E-03	_	_	_	_
²⁴⁰ Pu	1.8E-04	9.2E-05	_	_	_	_
Н	1.4E-04	1.6E-04	_	_	5.1E-05	_
С	1.4E-04	1.5E-04	_	9.5E-05	4.3E-05	_
Na	7.9E-03	7.9E-03	1.5E-02	3.8E-03	_	_
Al	3.0E-04	1.5E-04	_	_	_	_
Si	9.8E-05	8.3E-05	_	3.0E-04	_	_
Cr	3.6E-03	4.2E-03	4.4E-03	1.3E-02	1.8E-03	1.2E-03
Mn	2.2E-04	2.5E-04	3.4E-04	7.4E-04	1.2E-04	$8.2 \text{E} \cdot 05$
Fe	1.3E-02	1.5E-02	1.6E-02	4.6E-02	6.5E-03	4.4E-03
Ni	1.6E-03	1.8E-03	2.0E-03	5.4E-03	7.9E-04	5.4E-04
Zr	4.2E-03	2.1E-03	_	_	_	_

*FCA 格子管領域

ここで、核データライブラリーは JENDL3.3 を用いた。両炉心解析において、実効増倍 率の統計誤差(1 σ)は 0.003% Δ k/k 程度(有効ヒストリ数:5 億程度)である。表 2 にお いて C/E 値が示すように、MVP 及び JENDL3.3 は、金属燃料を用いた反射体付き小型高速 炉の模擬体系での実効増倍率 keff に対して良好な結果を与えることを確認した。

 表 2
 実効増倍率 keff における C/E 値

 炉心
 C/E 値

 FCA23 炉心
 0.9986

0.9989

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

FCA24 炉心

 M. Fukushima, S. Okajima, T. Mori, T. Takeda and I. Kinoshita; "Experiment and Analysis for Criticality in Small Fast Reactor with Reflector at FCA,"Proc. of Int. Conf. on the Physics of Reactors "Nuclear Power: A Sustainable Resource" (Interlaken, Switzerland), September 14-19, 2008

4. 今後の利用予定:

反射体付き小型高速炉の模擬体系に対して、その他の主要核特性としてナトリウムボイ ド反応度価値、核分裂率分布等に関する実験解析を継続して行い、炉心と反射体の境界領 域の解析予測精度の評価を実施する。

4.2.15 Am 酸化物の X 線吸収スペクトルの第一原理計算

First principles calculation of X-ray absorption spectra of Am oxides

鈴木 知史

原子力材料設計評価研究グループ

1. 利用目的:

使用済み燃料中に含まれるマイナーアクチノイド(MA)であるアメリシウム(Am)を添加 した混合酸化物(MOX)燃料の開発が進められている。この Am 添加 MOX 燃料の有力な評 価手法として、X 線吸収スペクトル(XANES)がある。この解析のため相対論 DV-X α 分子 軌道法を用いた。これらの計算は、相対論効果を考慮するとともに基底関数を拡張して実 施する。したがって、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. 利用内容·結果:

原子力エネルギーの利用に伴い使用済み燃料の中に MA が蓄積される。この MA の中で Am は強い放射性毒性があり、しかも長寿命である。核燃料サイクルの中において Am を含 んだ混合酸化物(MOX)燃料による燃焼や Am の核変換が提案されている。このためには、Am を含んだ酸化物燃料の開発が進められており、有効な評価手法として X 線吸収スペクトル (XANES)がある。しかしながら、これまで Am 化合物の XANES の解析は十分進められてい なかった。そこで、Am 酸化物である AmO₂について、XANES を測定するとともに、DV-X α分子軌道法を用いて、測定した XANES の解析を行った。

計算に用いたクラスターモデルは Am を中心として、その周囲に O 原子を 8 配位で Oh 対称となる[AmO₈]¹²⁻であり、基底関数は Am 1s-11p と O 1s-7p を使用した。

 AmO_2 の $Am L_{III}$ XANES の測定結果を図 1 (a)に示す。このスペクトルにはホワイトライン と呼ばれる吸収端のピーク A とそれより 40 eV 高エネルギー側にピーク B が存在する。



図1 AmO2 Am LIII XANES, (a) 実験, (b)計算

さらに、テール構造 A'が存在する。計 算により得られた Am L_{III} XANES と遷移 確率を図 1 (b)に示す。なお、最低非占有 軌道(LUMO)のエネルギーを 0 としてい る。図 1 (b)より、ピーク A, B とテール 構造 A'をはじめ、計算結果は実験スペク トルを再現している。また、ホワイトラ インのピーク A には 9 γ_{7g} と 14-17 γ_{8g} の分子軌道が、ピーク B には 28 γ_{8g}, 33-34 γ_{8g} と 18-19 γ_{7g}の分子軌道が、テ ール構造 A'には 23 γ_{8g}の分子軌道が寄 与している。

さらに、テール構造 A'が存在する。計 算により得られた Am L_{III} XANES と遷移 確率を図 1 (b)に示す。なお、最低非占有 軌道(LUMO)のエネルギーを 0 としてい る。図 1 (b)より、ピーク A, B とテール 構造 A'をはじめ、計算結果は実験スペク トルを再現している。また、ホワイトラ インのピーク A には 9 γ_{7g} と 14-17 γ_{8g} の分子軌道が、ピーク B には 28 γ_{8g}, 33-34 γ_{8g} と 18-19 γ_{7g}の分子軌道が、テ ール構造 A'には 23 γ_{8g}の分子軌道が寄 与している。



図2 Am酸化物のAmd·Os-f成分の状態密度

Am L_{III} XANES と電子構造の関係を明らかにするために、Am d と O s-f 成分の非占有領域 の状態密度(DOS)を図 3 に示す。なお、エネルギーは LUMO を 0 としている。図 2 より、Am d 成分の中でも、0-18 eV では Am 6d 成分が主成分であり、18 eV 以上では他の Am d 成分が 主成分となっている。図 1 (b)との比較より、Am L_{III} XANES は非占有領域の Am d 成分の電 子構造を反映している。

Os成分については、O3s成分の DOS は 2 eV にピークがあるが、Amd 成分とは混成して いない。また、O3s 成分の DOS は 42 eV 付近にもう一つのピークがあり、他の Os 成分は 49 eV 付近にピークがある。いずれも Amd 成分と混成して、ピーク B の形成に寄与してい る。Op 成分については、O 2p 成分は 6-7 eV で Amd 成分と混成してピーク A(ホワイトライ ン)の形成に寄与しているが、O 3p 成分や他の Op 成分は、Amd 成分とあまり混成せず、ピ ーク構造の形成にはあまり寄与していない。Od 成分については、O 3d 成分の DOS は 14 eV と 47 eV にピークがあり、Amd 成分と混成してピーク A とピーク B の形成に寄与し、さら に、19 eV 付近でも Amd 成分と混成してテール構造 A'の形成に寄与している。また、他の Od 成分の DOS は 58 eV 付近にピークがあり、Amd 成分と混成してピーク B の形成に寄与 している。これらのことから、Od 成分はいずれのピーク構造の形成にも寄与している。Of 成分の DOS は 30 eV と 37 eV の 2 箇所のピークが存在する。37 eV 付近では Am d 成分と混 成してピーク B の形成に寄与している。

以上より、AmO₂では、ホワイトライン(ピーク A)は、Am 6d と O 2p, 3s, 3d との混成に 起因し、テール構造(A')は、Am d と O 3d との混成に起因している。さらに、ピーク B は 50 eV 付近の Am d 成分と O s, d, f 成分との混成に起因する領域と、30-40 eV の Am d 成分と O f 成分と混成に起因する領域に区別できる。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- C. Suzuki, T. Nishi, M. Nakada, M. Akabori, M. Hirata, and Y. Kaji: "Calculation of the electronic structure of AmO₂ and Pr₆O₁₁ for XANES analysis with redox property", International Journal of Quantum Chemistry 掲載予定.
- 2) 鈴木知史, 西剛史, 中田正美, 赤堀光雄, 平田勝, 加治芳行: "Am 酸化物の X 線吸収スペクトルの第一原理計算", DV-Xα研究協会会報 21, p.162 (2007).
- C. Suzuki, T. Nishi, M. Nakada, M. Akabori, M. Hirata, and Y. Kaji : "First Principles Calculation of X-Ray Absorption Spectra of Am Oxides", The 5th International Workshop on DV-Xα, Himeji (2008).
- 4) 鈴木知史,西剛史,中田正美,赤堀光雄,平田勝,加治芳行: "Am 酸化物の X 線吸収スペクトルー第一原理計算による解析ー",日本原子力学会 2008 年秋の年会,高知 (2008).
- C. Suzuki, T. Nishi, M. Nakada, M. Hirata, M. Akabori, and Y. Kaji : XANES and the electronic structure of Actinide oxide", Material Models and Simulations for Nuclear Fuels (MMSNF-7), Karlsruhe (2008).
- 6) 鈴木知史, 西剛史, 中田正美, 赤堀光雄,平田勝, 加治芳行:" Am 酸化物の XANES と電子構造", 日本原子力学会 2009 年春の年会, 東京 (2009).
- 4. 今後の利用予定:

VASP や Wien2k や PHASE を用いて、MA-MOX 燃料の物性や原子力材料の粒界構造を 評価する。

4.2.16 TCA 軽水減速ウラン炉心におけるAm-241 サンプル 反応度価値の解析 II

nalysis of Reactivity Worth of Am-241 Sample in Water-moderated $\rm UO_2$ Fuel Lattices at TCA of JAEA $~\rm II$

櫻井 健

核設計技術開発グループ

1. 利用目的:

MOX 燃料中の Pu-241 は半減期約 14 年で Am-241 に壊変することから、燃料製造時から 時間が経つにつれて燃料中には強い中性子吸収物質である Am-241 が蓄積されてくる。従 って、このような燃料を用いた炉心の核特性を精度良く予測するには、Am-241 の中性子 核反応データの精度が重要となる。そこで、熱から共鳴エネルギー領域の Am-241 の核デ ータを検証することを目的として、軽水臨界実験装置 TCA に構築した中性子スペクトル が系統的に変化する 6 種類の炉心で実施した Am-241 サンプルの反応度価値測定実験を昨 年度解析した。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。昨年度は、核データに JENDL-3.3 を用いて解析を行ったが、本年度は、Am-241 核データの積分的な評価を目的として、 JENDL-3.3 に加えて米国の ENDF/B-VII、欧州の JEFF-3.1 や平成 19 年度末に公開された我 国の JENDL/AC-2008 の Am-241 核データを用いても解析を行った。

2.利用内容・結果:

実験は、水対燃料体積比(Vm/Vf)を 0.56、 1.00、1.42、1.50、1.83、3.00と幅広く変化 させた 6 種類のウラン炉心の中心に、ステ ンレス管に密封した Am-241 酸化物(22.8g) のサンプルを挿入し、そのサンプルの反応 度価値を測定したものである。サンプル反 応度価値は-11~-35 セントであり、その測 定誤差は±0.4~2.0%であった。Am-241の 核分裂はしきい核反応であることから、こ のサンプル反応度価値に主として寄与する のは同核種の捕獲反応である。炉心中心に 挿入したサンプル中の捕獲反応のエネルギ 一成分は、図.1 に示すように系統的に変化 する。



エネルギー成分の比較(代表炉心)

この解析を、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、実効的な総ヒストリー数 50~170 億と いう膨大な計算を行い、実効増倍率 keff を求めて、それらの差よりサンプル反応度価値を測 定誤差と同レベルである統計誤差±0.6~1.1%で得た。これらの計算は、並列計算機 Altix3700Bx2 の 32CPU 並列計算により実施した。

解析結果として計算値と実験値の比 C/E を図 2 に示す。昨年度実施した解析では、 JENDL-3.3 を用いた場合、計算は実験を 4~9%過小評価していた。JENDL-3.3 の代わりに JENDL/AC-2008 の Am-241 核データを用いると、多くの炉心でこの過小評価が改善される傾 向が出た。逆に、ENDF/B-VII を用いると、多くの炉心で過小評価の程度が大きくなった。し かしながら、各炉心において、Am-241 核データを代えることによる反応度価値の変化は小さ く、モンテカルロ計算の統計誤差のレベルでしかなかった。これより、熱から共鳴エネルギ 一領域において、いずれの核データファイル中の Am-241 捕獲反応断面積も過小評価となっ ていることが示唆できる。このように、10 セント程度の小さなサンプル反応度価値に対して も、連続エネルギーモンテカルロ法を適用し、大規模計算によりサンプル核種の核反応デー タの積分的な評価ができることがわかった。



3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 T. Sakurai, T. Mori, T Suzaki, *et. al.*, "Measurement and Analysis of Reactivity Worth of Am-241 Sample in Water-moderated Low-enriched UO₂ Fuel Lattices at TCA," to be submitted to J. Nucl. Sci. Technol.

4. 今後の利用予定:

他の重要核種についても、サンプル反応度価値の測定と解析からその核反応データの積 分的な評価ができるような新たな臨界実験を計画するための予備解析を実施して行く。

4.2.17 統合POMを用いた下北海域の海洋構造の再現

Reproduction of oceanographic structure off Shimokita Peninsula using Integrated-POM

> 伊藤 集通,川村 英之,小林 卓也 環境動態研究グループ

1. 利用目的:

現在、海洋環境中に放出される放射性核種の移行・拡散を予測する計算コードシステム を開発している。本システムは、核種の移行を予測する海水中放射性核種移行予測コード と海水の移流・拡散を予測する海水循環予測コードで構成され、システム中で使用する海 水循環予測コードは、プリンストン大学が開発した Princeton Ocean Model (POM) に原子 力機構で機能追加等の高度化を行った「統合 POM」である。本研究では、この統合 POM を用いて水温、塩分、海流場等の海洋環境を再現することを目的とする。

2. 利用内容・結果:

平成 20 年度は、下北沖合海域の海洋環境の再現を目指した。本研究では境界及び内部 データに気候(統計)値を使用するとともにネスティング計算をおこなった。計算は、南 緯 12 度以北の太平洋を外郭領域として 10 年間の積分を行い、ネスティング計算では、そ



の10年目の結果を初期値、境界値として、 上記太平洋の西経150度以西の領域(図1) に対して、1年間の積分を行った。外郭領域 とネスティング領域における空間解像度比 は1:3である。また、本研究では、オリジ ナルの POM が採用している鉛直座標系であ る単一のシグマ座標系に起因する数値拡散 の影響を可能な限り回避する目的で原子力 機構が統合 POM に実装した多重シグマ座標 系を用いた計算を行っている。以下にその結 果の概要を示す。

ネスティング計算結果のうち、下北沖合海 域周辺における表層(10m深)における水 温及び塩分の計算結果を、夏季(7月)を例 として、図2、3にそれぞれ示す。北部で低 温、低塩分になっているのに対し、南部では 高温、高塩分となっており、陸岸境界付近に 若干ノイジーな領域が見られるものの、これ らの分布は観測から得られている一般的な 分布と比べ、概ね妥当なものとなった。また、 水温、塩分の季節変動についても、ここには 紙面の都合で他の月についてそれぞれ個別 の結果は示さないが、これらも妥当なものと なっていた。

図4は、夏季の海面高度分布である。北部 で低水位、南部で高水位という大規模な分 布、関東、三陸、北海道の東岸で等値線が込 んだ領域、根室半島の東沖合いを中心とした 冷水渦(周囲より水位の低い領域)の形成な ど、これまでの観測から得られている海面高 度分布の特徴を概ね再現する結果となって いる。

図5は、海流の流速ベクトルの分布を示し ている。黒潮の一部と見られる北緯35°付近 の北上流が見られ、外郭領域では確認できな かった親潮に対応する北緯45°以北から南 下する比較的強い流れが本州及び北海道東 岸の沖合に分布する様子が明瞭に見られる。



図4 下北沖合海域における夏季(7月) の海面高度分布

また、北緯35°~39°に見ら れる時計回りと反時計回りの 渦対や北海道東岸の北東-南 西方向に引き伸ばされた循環 流などいくつかの特徴的な渦 構造も解像されている。特に、 北海道東岸の循環流は、外郭 計算時には時計回りとなって いたが、小領域の計算では他 の海洋大循環モデルによる計 算結果とおなじ反時計回りに 修正されている。これらのこ とから、津軽海峡での逆流や 親潮等における流速の過大な 見積もりなど今後も調整が必 要な部分はあるが、当初目標 である、下北沖合海域の海洋 構造の再現は、表層近傍にお いては概ね実現できたと考えられる。



- 3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
 - 1) 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(Ⅲ),平成20年度(財)海洋科学振興財団受託研究成果報告書,69 p. (2009).
- 4. 今後の利用予定:

今後は、局所的に発生するノイズの抑制、局地海域へ適用するためのさらなる解像度の 向上、個別観測値を入力とする計算の実施・検証などに対応するために、各種データセッ トの整備、計算コードやパラメータの調整と試計算などを行う予定である。
4.3 量子ビーム応用研究部門

Quantum Beam Science Directorate

4.3.1 固体とレーザーの相互作用の第一原理計算

First-principle calculations for interaction between laser and condensed matters

乙部 智仁

光量子シミュレーション研究グループ

- 1. 利用目的:
 - **目的**:レーザーと固体の相互作用による電子ダイナミクスと電子励起を第一原理計算から 明らかにする。

中期計画の中の位置付け:

- 1. '短パルスレーザーを用いた、応力腐食割れ(SCC)防止等に有効な非熱蒸発加工による 残留応力除去技術を開発するとともに、高効率の同位体分離技術、同位体材料創製技 術を開発する。'
 - レーザー場中の電子ダイナミクスの第一原理シミュレーションによる記述手法の開発とそれによる解析を行うことでレーザーによる量子制御手法開発の為の基礎的知見を得る。
 - ・ ODS 鋼などの材料解析装置レーザー補助アトムプローブの開発の為の基礎研究
- 2. '光量子・放射光の利用技術開発では、ペタワット・レーザーの主パルスとプレパル スの強度比 108 倍への向上、X線レーザーで 0.1Hz の繰返し発振を実現する。また、 アト秒パルス高輝度 X 線の発生を可能とする短パルス小型高強度レーザー技術、エネ ルギー回収型次世代放射光源実現のための低エミッタンス大電流電子銃を開発する。'
 - レーザー開発における光学系-特に多層膜ミラー等-のレーザー光による損傷過程の 解明の為の基礎研究

2. 利用内容·結果:

得られた結果とその意義:

1. 光絶縁破壊過程のシミュレーション

多層膜ミラー等に用いられている SiO2 の光による絶縁破壊過程のシミュレーションを 行い、金属化の様子と伝導帯に励起した電子のエネルギー分布を明らかにした。またダイ アモンドで見られたプラズマ振動が見られなかったことから、結晶内に極性がある時や結 合などにより応答が大きく変化する可能性がある事が分かった。(論文1、3、4) 2. 固体内部での高次高調波発生

ダイアモンドにレーザーを照射した時の電子振動がレーザーの振動数の整数倍の成分 が主になり高次高調波が発生していることが分かった。また高次高調波の強度を計算する 為には電子間相互作用と表面電荷からの遮蔽効果が重要であることが分かった。(論文2)

3. 電子衝突励起の影響の見積もり

レーザーによる電子励起でパルス幅が長くなる程重要になると考えられている電子衝 突励起を第一原理シミュレーションを基に見積もる手法及びプログラムを開発した。これ により固体電子の励起における電子衝突の影響を調べることが可能となる。

4. 電子励起による誘電関数の変化

レーザー励起による電子状態の変化が物質の特性に与える影響を調べる手法及びプロ グラムを開発した。これによりレーザー照射中の固体の誘電関数が定量的に評価すること が可能となった。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文発表 (査読あり)

- 'First-principle electron dynamics simulation for optical breakdown of dielectrics under intense laser field' Otobe et al., Phys. Rev. B 77,165104 (2008)
- 'First-principle calculation for high harmonic generation in diamond' Otobe et al., Comput. Theor. Nanosci. 掲載決定
- First-principle calculation of the electron dynamics in crystalline SiO2' Otobe et al., J.
 Phys. Condens. Matter 21, 064224 (2009)
- 4) 'Influence of laser irradiation condition on a femtosecond laser tomographic atom probe' Nishimura et al., Ultramicroscopy 掲載決定

国際会議での口頭発表

- 5) International Conference on Quantum Simulation and Design 2008 (QSD2008)
- 6) 6th International Conference on Photo-Excited Processes and Applications (ICPEPA 2008)
- 7) International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science (ISUILS7)

4. 今後の利用予定:

- 1. レーザーにより励起された透明素材の誘電関数の変化の計算を行い、緩和過程より早 い時間スケールでの電子状態観測の可能性を明らかにする。
- 2. 核の運動による電子励起確率の変化を明らかにする
- 表面、界面でのレーザー電子励起過程シミュレーションを可能にするプログラムを開発し、レーザーによる表面加工、制御の物理過程を明らかにする。

4.3.2 DNA の水和計算方法の定量的な評価

Evaluation of DNA hydration calculation methods

河野 秀俊

量子ビーム 生体分子シミュレーション

1. 利用目的:

タンパク質、DNA など生体高分子の水和は、その構造の安定化と機能発現において重要 な役割を果たしている。この具体的な水和構造はシミュレーション計算以外で可視化する ことは困難である。しかし、計算された水和構造は用いた計算方法によって定量的に大き く結果が異なっていた。本研究では、代表的な2つの計算方法の長所、短所を検討し、定 量的に正確に水和構造を計算する方法を提唱し、水和がどのように生体分子の構造安定化 と機能発現に関わっているか議論できる基盤を提供することを目的とした。

2. 利用内容·結果:

我々は、分子科学研究所の平田教授のグループとともに、分子動力学計算によって原子、 分子の運動の時間発展に対する軌跡の統計平均を求める方法と分子性液体系に対する積分 方程式理論(RISM 理論)計算にもとづいて求める方法の短所、長所をDNAをモデルに調 べた。結果、一見すると2つの方法で計算された水和構造は全く異なって見える(図1)が、 それぞれの計算方法の短所を補って計算を行うことで、本質的に同等の結果を与えること を示した(図2)。



図1 分子動力学計算により求めた水和(左)。RISM計算に求めた水和(右)。

分子動力学計算は、短時間では水分子の配置のサンプリングが十分行えず、シミュレー ション時間は長ければ長いほどよい。一方、分子の密度揺らぎを解析的に扱うRISM計 算では水分子の配置に対するサンプリング不足は原理的に起こらないが、溶質(ここでは

JAEA-Review 2009-030



図2 分子動力学計算で十分な時間計算した後、求めた水和(左)。溶質の取り扱い方を改善 した後、RISM計算により求めた水和(右)。

水和を過大評価する。本研究では、溶質の取り扱い方を変えて計算を行った結果を比較す ることによって、分子動力学計算では5から6ns時間のシミュレーションを行えば水分子 の配置をサンプリングできること、一方、RISM計算では100程度から成るDNAの構 造アンサンブルから水和構造を求めることで過大評価が抑えられることがわかり、両者は 本質的に同等な結果を出すことを示した。結果は、Journal of Chemical Physics に発表し、 Virtural Journal of Biological Physics Research にも選出された。



図3 DNA配列による水和パターンと 構造揺らぎの多様性。縦軸がワ トソン鎖とクリック鎖を水1分子で つなぐ水和構造形成率、横軸が 2 分子でつなぐ水和構造形成 率。丸は配列の異なるDNAを 表し、青色は揺らぎの小さい硬 い構造、赤は揺らぎの大きい柔 らかい構造を表す。このような性 質から、DNAの配列を4つのグ ループに分類できる。 さらに、DNAの水和と構造揺らぎについて研究を進め、DNAの配列と構造揺らぎに 強い相関があること、さらにその構造揺らぎとマイナーグルーブの水和パターンに強い相 関があることを見出した。マイナーグルーブの水和パターンは、おもに水分子ひとつでワ トソン鎖とクリック鎖を安定につないだ形と水分子2つで安定化した形があり、配列ごと の構造揺らぎの多様性は、これらのパターンによって統一的に記述できることがわかった (図 3)。タンパク質とDNAの特異的な相互作用は、このような水和構造を壊すことによ り、熱力学的に安定化される、言い換えれば、エントロピー的に安定化されることを示唆 している。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- Yonetani, Y., Maruyama, Y., Hirata, F. & Kono, H. (2008). Comparison of DNA hydration patterns obtained using two distinct computational methods, molecular dynamics (MD) simulation and three-dimensional reference interaction site model (3D-RISM) theory. *J. Chem. Phys.* 128, pp.185102-109.
- 米谷佳晃,藤井聡,皿井明倫,河野秀俊,郷信広. (2008). DNA の構造ゆらぎと水和パタ ーンの関係.日本物理学会 2008 年秋季大会,盛岡.
- 4. 今後の利用予定:

今後は、真核生物の核内での DNA の高次構造形成機構を明らかにするために、染色体 の最も基礎的な構造ユニットであるヌクレオソーム構造について Alteix3700Bx2 システム を用いてシミュレーションを行い、構造形成の自由エネルギー地形を調べていく予定であ る。

4.3.3 レーザー粒子加速実験に関する数値解析

Numerical analysis on experiments of laser particle acceleration

亀島 敬、川瀬 啓悟、神門 正城、小瀧 秀行、中村 龍史、 林 由紀雄、福田 祐二、ブラノフ セルゲイ レーザー電子加速研究グループ

1. 利用目的:

原子力機構関西研で進められているクラスターガスターゲットを用いたレーザー粒子 加速実験に関する数値解析を行う。クラスターガスターゲットは、直径1ミクロン程度の 二酸化炭素クラスターと背景のヘリウムガスから構成されており、レーザーを照射するこ とで比較的密度の高い(~10²⁰/cc 程度)プラズマを生成することができる。プラズマ中でのレ ーザー伝播過程は、プラズマ密度が臨界密度に近づくにつれレーザー及びプラズマのパラ メターに強く依存するようになる。そのため我々のグループでは、レーザー粒子加速にお いて最適な条件を明らかにすることを目的とした、レーザー伝播のパラメターサーベイを 行う。特に本年度は、ガスターゲット裏面における磁気渦の形成に着目し研究を行う。

2. 利用内容·結果:

2次元粒子シミュレーションコードを用い、高密度ガスプラズマ(臨界密度の1~20パ ーセント)におけるレーザー伝播解析を行った。プラズマ中の伝播によりレーザーのエネ ルギーはプラズマあるいは散乱波へ変換されるため、レーザーエネルギーの透過率はプラ ズマの密度とそこでの伝播距離に依存する。また、プラズマ中に適切に急峻な密度勾配が ある場合、その近傍において磁気渦が形成されうることが示されている[1]。我々のグルー プの実験においても磁気渦が形成されている可能性があり、それの粒子加速との関係も含 め粒子コードによる数値解析を行った。

上記のことから、磁気渦の形成過程はレーザーの透過率及びプラズマの密度勾配に強く 依存する。我々の実験パラメターは、プラズマ密度が10¹⁹~10²⁰/cc程度、レーザー伝播方 向のプラズマのサイズは2mm程度となっている。照射レーザーは強度が7×10¹⁷W/cm²、 パルス長は40fsである。パラメターサーチの結果、安定な磁気渦は非常に狭いパラメター 空間においてのみ実現されることが分かった。プラズマ密度が10¹⁹/cc程度の場合、裏面 における渦の磁場強度は非常に小さく、100fs程度で消滅してしまう。また、その際発生 するイオンのエネルギーも低かった。プラズマ密度を1020/cc程度まで大きくすると、レ ーザー伝播距離は数100ミクロン程度と短くなりターゲット裏面にレーザーが到達しない ため効率的に磁場を形成できない。しかし、集光点をターゲット裏面から数100ミクロン 程度内側にした場合、裏面の密度勾配のある領域に強い磁場強度を持った渦構造が見られ た(図1右)。磁場の最大強度は35MGにも及び、かつ渦構造は数ピコ秒にわたり保持され ることが分かった。この磁気圧により電子が排斥される結果、磁気渦表面に強い静電界が 誘起されている(図1左)。この電界により8MeV/u程度の高エネルギーイオンが観測さ れている。パラメターサーチにより、安定な磁気渦を形成しうるパラメターがある程度明 らかとなった。

[1] S.V.Bulanov, et al., Plasma Phys. Rep. 31, 409 (2005).





図1 磁気渦近傍の電場強度分布(左)と磁場強度分布(右)。電場及び磁場はそれぞれ 照射レーザーの電場(4.4TV/m)及び磁場(146MB)強度で規格化している。空間ス ケールは1目盛が 50 ミクロンに相当。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 Y.Fukuda, et al., "Ion acceleration in the interaction of short pulse laser radiation with the cluster target ", The second International Symposium on Laser-Driven Relativistic Plasmas Applied to Science, Industry and Medicine, Kyoto, February 2009.

4. 今後の利用予定:

今年度も引き続きレーザー粒子加速に関する数値解析を進める予定である。

4.3.4 放射性廃棄物処理処分のための準単色大強度γ線による放射性 同位体検出シミュレーション

Simulation of Radioisotope detection by nuclear resonance fluorescence with a quasi-monoenergetic gamma-ray for radioactive waste management

菊澤 信宏

ERL 光量子源開発研究グループ

1. 利用目的:

量子ビーム技術の原子力エネルギー分野への応用として、γ線と原子核による光核共鳴 散乱(Nuclear Resonance Fluorescence; NRF)を利用して放射性同位体の新しい非破壊検出 法の研究開発を進めている。この NRF 検出法では ERL 型準単色大強度γ線を用いて、放 射性廃棄物容器中に含まれる放射性同位体を非破壊で検出可能である。このため、NRF 検 出法の実用性を示し、検出システムの概念設計を進めるために、NRF を扱えるモンテカル ロシミュレーションコードを開発し、システムの実現可能性を証明することを目的とす る。

2.利用内容・結果:

NRFによる核種検出の可能性の評価を行うために、GEANT4をベースにして光核共鳴散 乱反応を計算できるモンテカルロシミュレーションコードを開発した。GEANT4とはC++ 言語により開発されたシミュレーションコード開発のためのツールキットであり、オブジ ェクト指向プログラミングによって高い拡張性が確保されている。本研究では、GEANT4 の核反応モデルのクラスである Discrete Process クラスを継承した NRFInteraction クラスを 派生させて開発した。反応断面積や励起準位に関してはデータファイルを作成することに より核種ごとに指定することが可能である。NRFInteraction クラスはC++のクラス継承の 機能を用いており、GEANT4のソースコードには一切修正を加えることなく NRF の計算 が行える。

NRF は反応断面積が小さいため、非常 に多くの入射γ線について計算を行わな ければならず、計算には多くの時間が必 要となっていた。例えば、後に述べる放 射性廃棄物容器中の U-238 の検出シミュ レーションでは、入射粒子数が 1×10⁹個 の場合で PentiumM、1.7GHz の PC で 56 時間を要していた。さらに計算モデルが 複雑になり、より多くの入射粒子数につ いて計算しようとした場合、計算時間が 膨大になってしまうという問題があっ



た。計算時間の短縮化のため、GEANT4の example に含まれている並列化の例を参考 にして MPI による並列化を行ない、PC クラ スタ A システムに移植した。ベンチマーク 計算を行った結果では、64CPU で 46 倍の高 速化を実現した。結果を図1に示す。

この並列化した計算コードを使い、放射 性廃棄物容器中に存在する U-238 検出シミ ュレーションを行った。計算モデルは、コ ンクリート固化された直径 56.4cm、高さ 80cm、かさ密度 2g/cm³の円筒状の放射性廃 棄物容器中に、1000Bq/g に相当する量の U-238 が均一に含まれているものとした。 この被測定対象に、外部から容器の中心に γ線を照射した場合のシミュレーション計 算を行った。容器の周囲には、容器の中心 から 50cm の距離に 6 台の Ge 検出器を配置 している。そのモデルを図2に示す。ここ で、U-238のNRFの断面積は2.176MeVの 励起準位において 1keV 幅で 100mb を仮定 した。また、入射 γ線のスペクトルは ERL 型大強度準単色 γ 線源から得られるスペ クトルを仮定し、NRF の励起準位である 2.176MeV で最大となるようにした。入射 粒子数については 1.2×10⁹ 個で計算を行っ た。これは、我々の提案しているγ線源で は約10msecに相当する照射時間である。 Ge 検出器のモデリングは原子力機構保有 の相対効率140%の検出器の仕様を参考に





図3 シミュレーション結果

行い、Ge 検出器内部の反応もシミュレーションしている。このとき、6 台の Ge 検出器で 検出される γ 線のエネルギースペクトルを図3に示す。

このシミュレーションを行ったモデルでは、光核共鳴散乱によるピークが十分検出可能 であることがわかる。今後、このシミュレーションコードを使い、検出器の配置や低エネ ルギー側のバックグラウンドを低減するための遮蔽体の最適化などが可能となる。これに より NRF による放射性同位体検出システムについて検出器系まで含めた概念設計・評価 が可能となる。

- 3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
 - 1) 菊澤信宏,他,「光核共鳴散乱による同位体イメージング法の原理検証」,第5回日本 加速器学会年会・第33回リニアック技術研究会,(2008)
 - 2) 菊澤信宏,他,「Geant4 による NRF のシミュレーションコード開発」, 2008 年原子力 学会 秋の大会,(2008)
 - 菊澤信宏,他,「放射性廃棄物処理処分のための準単色大強度γ線による放射性同位体 検出」,2009年原子力学会春の年会,(2009)
- 4. 今後の利用予定:

PC クラスタ A システムにおいて計算モデルの詳細化を進めながら、今後より大規模計 算を行うために Altix3700Bx2 システムへの移植を進める予定である。また鉛などの模擬 試料を使った実験結果との比較検証を進め、検証されたシミュレーションコードを用いて NRF 検出システムの最適化、検出限界などの性能評価などを行う予定である。

4.3.5 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 layer for 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. 利用目的:

ワイドギャップ半導体である SiC を用いた半導体デバイスは、耐放射線性にすぐれ、高 電圧、高温での動作が可能なことから、従来の Si や GaAs 半導体デバイスでは動作が困難 な、原子炉や宇宙環境等の極限環境下で用いられる素子として期待されている。しかし SiC デバイスの SiC/SiO₂界面には Si デバイスの Si/SiO₂界面に比べて数多くの界面欠陥が存在 しており、界面反転層内の電子移動度は理論的に期待される値よりも低い値しか実現でき ていない。熱酸化によって形成される界面に発生する欠陥をバンドギャップ全域にわたっ てその原子構造から実験的に電気特性を解析することは困難であるため、第一原理分子動 力学法を用いて界面欠陥構造を生成し、エネルギー準位や荷電状態等を算出することで、 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。これにより、SiC 結晶表面の 酸化膜成長による界面欠陥の形成メカニズムを明確にし、SiC デバイスの電気特性を最大 限に引き出す物理的界面形成法の開発指針を得ることが期待される。

2. 利用内容・結果:

(1) 界面モデル生成時の冷却速度条件検証

大規模 SiO₂/SiC 界面モデル(1017 原子、加熱・冷却時は 693 原子)を用いて実デバイス界 面を模擬するアモルファス SiO₂/SiC 界面構造モデルを生成した。初期構造は結晶 SiO₂/結 晶 SiC とし、これに加熱・急冷のパラメータとして、固定終端条件で 4000K・3ps の加熱、 3500K まで冷却後に固定端を解放、さらに 3500K・2ps の継続加熱、最後に界面での可動 層拡大の後、室温まで急速冷却を条件としてシミュレーションを行った。冷却過程におけ る降下速度に付いては、降下速度を-2000K/ps、-1000K/ps、-500/ps と変え、生成した界面

構造や欠陥の種類・生成頻度等を解析した。酸化膜 構造について、SiO₂層の動径分布関数を評価した所、 Si-O 結合距離は 0.165nm、O-Si-O 結合角は 109°とな り、冷却温度による変化は無かったが、Si-O-Si 結合 角に付いては違いがあったため、生成した大規模モ デルの構造安定性を検証するため、室温に冷却後の 界面構造に対して、温度を室温に保持したまま構造 変化を観察した。-2000K/ps で冷却した界面構造は全 エネルギー(図1)、Si-Si 間原子距離(Si-O-Si 結合角)、 平均密度のすべてで室温放置後も大きな変化があ



り、冷却速度が速すぎるために構造が安定状態に達していない事が確認された。-1000K/ps、 -500K/ps で冷却した界面構造は、エネルギー的にはすでに安定状態になっており、Si-Si 間原子距離、平均密度においてもほぼ収束しており、シリカでの測定値におおよそ適合し ていた。よって、第一原理シミュレーションでの界面構造生成において、冷却速度を -1000K/ps 以下にする必要がある事が確かめられた。

(2) 生成された界面構造モデルでの界面接続構造解析

室温にまで冷却された界面構造モデルについて、界面における欠陥に注目して詳細検討した。界面には数種類の接続構造が確認された。無欠陥構造としては、3 つの界面 Si をまとめる type- α 、2 つの界面 Si をまとめる type- β 、1 つの Si のみに付く type- γ が出来ていた。欠陥を含む構造としては、Si-Si 結合を持つ2種の界面構造体の他、Si ダングリングボ

ンドが観察された。従来から SiO₂/SiC 界面構造モデ ルにおいて、いくつかの界面接続構造が提唱されて きたが、そこでは主に無欠陥構造のみを用いで界面 を接続する事が試みられてきた。しかし、実際にど のような構造で界面が構成されているのか実験的手 法で検証することが難しいため、限られた種類の接 続構造を考えてそれらの組み合わせで界面構造を作 ってきた。我々は、第一原理法を用いてなるべく人 為的要素が入らない手法で界面構造を生成する事に 成功しており、此処で得られた接続構造の方が従来 法に比べより確からしいものになる事を期待した。 我々の構造では、従来想定されていたような無欠陥

構造だけでつながっておらず、Si-Si 結 合、Si ダングリングボンド等の欠陥が入 っており、無欠陥構造においても従来モ デルで想定されていた type-α、type-βの 他に、従来モデルでは想定されていなか った type-γが出来ると言う違いがあっ た。(図3) 特に、界面に Si-Si 構造が入る ことで界面でのO濃度の異常な上昇を抑 え、SiO₂層中での酸素密度からかけ離れ たOの偏析状態になることを防いでいる と考えられる事から、我々の界面構造モ



図2 室温冷却後のアモルファス SiO₂/SiC 界面構造モデルと内在する欠陥。



図 3 SiC 層直上の SiO₂界面構造、α、β、γ、σ、σ5 は、それぞれ界面構造の型名を表す。d は Si のダ ングリングボンド。

デルの方が、より実界面を模擬するのにふさわしいと考えている。

(3) 中規模サンドウィッチモデルを用いた界面構造生成

欠陥荷電状態の解析に必要となるサンドウィッチモデルを用いた加熱・急冷計算におい

て、468 原子を含む中規模界面モデルの構築を行った。中規模モデルを用いて、4 通りの 加熱・急冷温度パターンを用いてシミュレーションを行ったところ、全パターンにて計算 の発散無しに室温までの冷却を完了した。全般的な傾向として Si 面より C 面の方が荒れ ているのが観察され、一部では界面での原子の混交が見られた。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- T.Ohnuma, <u>A.Miyashita</u>, M.Iwasawa, M.Yoshikawa, H.Tsuchida, "Dynamical simulation of SiO₂/4H-SiC C-face interface oxidation process at 1500K ", E-MRS 2008 (2008.9.15)(Warsaw).
- <u>A.Miyashita</u>, M.Yoshikawa, T.Kano, T.Ohnuma, T.Sakai, N.Soneda, M.Iwasawa, "First-Principles Molecular Dynamics Simulation of SiC Devices: Generation of Amorphous SiO₂/SiC Interface", Annual Report of the Earth Simulator Center Apr.2007-Mar.2008, pp.239-243 (2008).
- <u>宮下敦巳</u>、大沼敏治、岩沢美佐子、土田秀一、吉川正人、「第一原理分子動力学法による SiO₂/SiC 界面の大規模数値解析」、第3回高崎量子応用研究シンポジウム (2008.10.9)(高崎).
- <u>A.Miyashita</u>, T.Ohnuma, M.Iwasawa, H.Tsuchida, M.Yoshikawa, "Amorphous SiO₂/SiC interface defect structure generated with first-principle molecular dynamics simulation", 2008 MRS fall meeting (2008.12.2)(Boston).
- 5) <u>宮下敦巳</u>、大沼敏治、岩沢美佐子、土田秀一、吉川正人、「第一原理分子動力学法にて 生成された大規模アモルファス SiO₂/SiC モデルにおける界面構造」,シリコンカーバ イドおよび関連ワイドギャップ半導体研究会 第17回講演会 (2008.12.8)(東京).
- 6) 大沼敏治、<u>宮下敦巳</u>、岩沢美佐子、吉川正人、土田秀一、「SiO₂/4H-SiC C 面における 酸化過程の動的シミュレーション:温度の効果」、シリコンカーバイドおよび関連ワイ ドギャップ半導体研究会 第17回講演会 (2008.12.8)(東京).
- 7) <u>宮下敦巳</u>、大沼敏治、岩沢美佐子、土田秀一、吉川正人、「第一原理分子動力学シミュレーションで生成されたアモルファス SiO₂/SiC 界面原子構造における界面接続モデル」, 2009 年春季第 56 回応用物理学関係連合講演会 (2009.3.30)(筑波). (予定)
- 大沼敏治、<u>宮下敦巳</u>、岩沢美佐子、吉川正人、土田秀一、「第一分子動力学法による SiO₂/4H-SiC C 面酸化過程シミュレーション:温度の効果」、2009 年春季第 56 回応用物 理学関係連合講演会 (2009.3.30)(筑波).

4. 今後の利用予定:

平成21年度においては、大規模モデルによるサンドウィッチ界面構造の生成を継続し、 Si面、C面の両方を同時に持つモデル構築を進めると共に、界面荷電状態からデバイスの 電気特性を導き出し、界面欠陥構造と電気特性との関連を解明する。これらの解析計算に は多大な計算時間が必要となるため、平成21年度においても大型計算機システムの継続 利用を行いたい。

4.3.6 超高速同位体選択的振動励起の多準位効果:量子最適制御

による研究

Multilevel effect on ultrafast isotope-selective vibrational excitations: Quantum optimal control study

黒崎 譲

レーザー物質制御研究グループ

1. 利用目的:

レーザー物質制御研究グループでは、量子制御に基づく同位体分離研究を主要プロジェ クトの一つと位置付けている。本研究では、高効率で同位体分離を可能とする電場を理論 的に予測することによって実験研究をサポートすることを目的とする。計算では、最適電 場が得られるまで核波束の時間発展を多数回繰り返す必要があり、大規模並列計算機の利 用が不可欠である。

2. 利用内容·結果:

本研究では、同位体分子の混合気体を考え、最適制御理論を用いて異なる同位体分子を 異なる振動状態へ高効率で励起する電場を理論的に求める。具体的には、次のような密度 行列法に基づく汎関数 J

$$J = \sum_{A} p_{A} \langle \langle W_{A} | \rho_{A}(T) \rangle \rangle - \alpha^{-1} \int_{0}^{T} \varepsilon(t)^{2} dt + i \sum_{A} p_{A} \int_{0}^{T} dt \langle \langle \Theta_{A}(t) | (i \frac{\partial}{\partial t} - L_{A}^{t}) | \rho_{A}(t) \rangle \rangle$$

を考え、これを最大にする電場 $\epsilon(t)$ を求めることが目的となる。ここで、添字Aは同位体 Aを意味する。また、 $p_A = 1/N$ でNは同位体の種類の数である。Jは三つの項から成る:(1) 時刻 t = Tにおける密度演算子 $|p_A(t)>>$ のターゲット密度演算子 $|W_A>>$ への遷移確率の同位 体についての和;(2) 電場のフルエンスに対するペナルティー項。ただし、 α は正の数であ る;(3)動的拘束項。この項は $|p_A(t)>>$ がLiouville 方程式を満たすことを保証する。ここで、 $|\Theta_A>>$ は Lagrange の未定乗数で、Liouvillian L_A' は $L_A' = L_A - M\epsilon(t)$ で定義される。ただし、 L_A は電場がないときの Liouvillian で M は双極子モーメント μ に対する交換子である。

ここでは、ヨウ化セシウム分子の混合気体(¹³³CsI と ¹³⁵CsI)を考え、初期状態を両分子が ともに振動基底状態(v=0)にある状態、ターゲット状態を ¹³³CsI が v=0 にあり ¹³⁵CsI が第一 振動励起状態(v=1)にある状態とした。パルスの時間 *T*を 460000 au (~11.1 ps)、基底関数の 数(N_{basis})を 12 とした場合の計算結果を図 1 に示す: (a) 最適電場; (b) 最適電場のスペクト ル; (c) ¹³³CsI の v=0-11 状態のポピュレーション; (d) ¹³⁵CsI の v=0-11 状態のポピュ レーション。図 1c と 1d からわかるように、最終的に ¹³³CsI v=0 状態と ¹³⁵CsI v=1 状態の ポピュレーションがともに 1 となっており、完全な同位体選択的振動励起が達成されてい る。一方、二準位系($N_{\text{basis}} = 2$)に対して同様の計算を試みたところ、Tが $N_{\text{basis}} = 12$ のときの倍であっても完全な励起は達成されなかった。このことから、 $v = 1 \leftarrow 0$ 遷移であってもより高い振動準位を利用することで、より高速な同位体選択的振動励起が可能となることが示唆される(多準位効果)。



3. 成果リスト (学会、プレス発表、論文等):

- Y. Kurosaki, K. Yokoyama, and A. Yokoyama, "Multilevel effect on ultrafast isotope-selective vibrational excitations: Quantum optimal control study", J. Mol. Struct. THEOCHEM (2009), doi: 10.1016/j.theochem.2009.07.020.
- 4. 今後の利用予定:

今後も、量子制御による同位体分離の理論研究のために大型計算機システムを利用する 予定である。

4.3.7 レーザーを用いたプロトン生成の PIC シミュレーション

PIC simulation of proton acceleration by a laser pulse

守田 利昌 光量子シミュレーション研究グループ

1. 利用目的:

レーザー入射角度 θ の変化に伴い生成プロトンのエネルギーは連続的に変化し、 θ =30 度付近において最大値となることを昨年度示した(図 1,2)。また、レーザーを傾斜入射し たケースの生成プロトンのエネルギー広がりは、垂直入射に比べて大きくなることも同時 に示した(図 2)。しかし、陽子ビームの品質(単色性)の観点において、このエネルギー 幅の広がりは好ましくない点である。そこで、傾斜入射における生成陽子ビームのエネル ギー幅の広がりを低減させる方法の調査・研究を PIC シミュレーションにより実施した。



2. 利用内容·結果:

レーザーを斜め入射した場合にエネルギー幅が広がる理由は、高エネルギープロトンが 生成プロトンバンチの中心からずれた位置に生じているのが原因であることを示した(図 3)。よって、レーザー照射位置とプロトン層の位置を適切に配置することで、エネルギー 幅が低減されることを示した(図 4)。より小さなプロトン層をレーザー照射位置からずれた 位置に配置することで、エネルギー幅がさらに低減されることを示した(図 5)。生成プロト ンのエネルギー幅は、Case-B では Case-A の半分に、Case-C では Case-A の 1/3 以下に低減 されることを示した(図 6)。



-74 -



図6 Case-A,B,Cのエネルギースペクトル図

- 3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
 - T. Morita, T. Esirkepov, S.V. Bulanov, J. Koga, M. Yamagiwa "Tunable high-energy ion source via oblique laser pulse incidence on a double-layer target", Phys. Rev. Lett. 100, 145001 (2008),
 - 2) T. Morita, T. Esirkepov, J. Koga, M. Yamagiwa, S.V. Bulanov
 "The effect of laser pulse incidence angle on the proton acceleration from a double-layer target", Plasma Phys. Controlled Fusion 51, 024002 (2009)
 - T. Morita, S.V. Bulanov, T. Esirkepov, J. Koga, M. Yamagiwa "Control of energy distribution of the proton beam with an oblique incidence of the laser pulse", Phys. Plasmas 16, 03311 (2009)
 - T. Morita, T. Esirkepov, S.V. Bulanov, J. Koga, M. Yamagiwa
 "Proton acceleration by oblique laser pulse incidence on a double-layer target", Laser-Driven Relativistic Plasmas Applied for Science, Industry and Medicine, AIP Conference Proceedings 1024, (2008)
 - 5) T. Morita, S.V. Bulanov, T. Esirkepov, J. Koga, M. Yamagiwa "Effects of the laser pulse irradiation point on a double layer target on the accelerated ion beam parameters", The Second International Symposium on Laser-Driven Relativistic Plasmas Applied for Science, Industry and Medicine, January 19-23, 2009, Kyoto, Japan
- 4. 今後の利用予定:

今までの成果を生かし、今後より高いエネルギー(200MeV 程度)でかつ高品質(エネルギ ー広がり 2% 以下)な陽子ビーム生成実現のための条件の調査・研究を実施する予定であ る。高エネルギーかつ高品質のプロトンを効率的に生成するための条件サーベイは、大規 模3次元計算で実施するため高性能な計算機が必要となる。よって、今後も大型計算機を 用いて大規模計算を実施して行く予定である。

4.3.8 高強度レーザーによる高エネルギー電子発生

High energy electron acceleration by intense laser

¹西内 満美子 ²反保 元伸 ³中村 龍史

1高強度場利用研究グループ

²光医療産業研究特別グループ

3レーザー電子加速研究グループ

1. 利用目的:

超高強度レーザーを固体に照射することで、電子やイオン等の高エネルギー粒子を発生 させることができる。これらレーザー生成量子線はそれらの持つ低いエミッタンスや加速 距離の短さから、新しい光源としての研究開発が進められており、特に高エネルギーイオ ンは医療応用や探査ビームとしての実用化が期待されている。本研究では、レーザーから 発生した、イオン及び電子による同時プローブの可能性を調べるために、粒子シミュレー ションによりそれらのダイナミクスを明かにする。

2. 利用内容・結果:

レーザーを平板の固体ターゲットに照射することで発生する高エネルギーイオンはそ のビーム広がりが 0.004mm mrad 程度と非常に小さいことが利点の一つである[1]。この値 は加速器のそれに比べても2桁程度小さいことから、高品質のビーム源として期待されて いる。これらのイオンはレーザーにより加速された電子が固体裏面から飛び出てゆくこと で誘起された静電場により加速される。このため、イオンと同時に高エネルギー電子も発 生しており、これら電子による同時プローブの可能性を検討している。

本シミュレーションでは、厚さ10ミクロンアルミニウムターゲットに強度が1.5× 10¹⁹W/cm²、集光径10ミクロン、パルス長40fsのレーザーを照射した際の、高エネルギー 電子のダイナミクスに着目した。下図は、レーザー照射後800fs後の電子の位相図(x-px) である(xはレーザー照射軸方向)。ターゲットは10<x[µm]<20に置かれている。ターゲッ ト周囲に存在するグループとターゲットから飛び出した電子群との二つが観測される。タ ーゲット周辺の電子は静電界を誘起しイオンを加速する。この時点でイオンはまだ殆ど動 いていない。これに対し、非常に少数の電子が先行しており、これら電子エネルギーはレ ーザーエネルギーの僅か0.005%である。これら電子はその数の少なさから殆どシース場形 成に影響をしていない。これらの電子はそのエミッタンスが0.47mm mrad 程度となってお り、シース形成に働く高エネルギー電子群に比べ遥かに小さなエミッタンスであることが わかる。これらのビームによるプローブの可能性もあると言うことが示された。

[1] T.Cowan et al., Phys. Rev. Lett. 2004.

JAEA-Review 2009-030



- 図1 電子の位相図(x-px)。横軸単位はミクロン、縦軸は規格化された運動量 p/mc。 図中赤丸で囲んだ領域に電子バンチが観測される。
- 3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
 なし
- 4. 今後の利用予定:

論文準備中であり、完成により本研究も完了となる。

4.3.9 第一原理分子動力学法に基づいた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. 利用目的:

溶液中の化学反応のシミュレーション技術は、材料開発や環境問題等へ計算科学からア プローチするために必要不可欠な基盤技術である。当課題では、溶液化学の具体的な課題 を遂行するとともに、第一原理分子動力学法に基づいた次世代の化学反応シミュレーショ ン技術の開発を行う。平成 20 年度は、以下の 3 つのサブテーマについて研究を行った。

- 1) 高温高圧水の研究
- 2) カーボンアロイ型 PEFC カソード触媒の触媒機構の研究
- 3) インテリジェント触媒の触媒機構の研究

2. 利用内容·結果:

1) 高温高圧水の研究

今年度は、高温高圧水の動的挙動を詳細に検討した。シミュレーションから得られた水分子の回転相 関時間 *τ*_{2R}の温度 *T* および密度依存性を右図に示 す。水分子の拡散係数も同様に検討することによ り、高温高圧下でも水分子の拡散は温度圧力に敏感 に依存し、高温下でも加圧により拡散運動は容易に 凍結されるが、回転運動は高温下では図1から明ら かなように密度にほとんど依存しないことが分か った。この結果は、高温高圧水では通常の水とは異 なり、水分子の拡散運動と回転運動が分離すること を意味している。

カーボンアロイ型 PEFC カソード触媒の触媒 機構の研究

平成20年度は、酸素分子がカーボンアロイに吸着するときの自由エネルギーの変化をカーボンア ロイの種々のモデルを用いて詳細に検討した。得られた自由エネルギー曲線の一部を図2に示す。端の ない無限に広がったグラファイトシートに酸素分 子を近づけていくと自由エネルギーは単調に増加す るが、ジグザグ端が表面に露出しているbあるいは



図1 水分子の回転相関時間 _{て 2R}



e-1 では酸素分子は解離せず分子状でジグザグ端に安定に吸着することが分かった。また、 窒素を特定の位置にドープすると酸素の吸着状態が更に安定化されることが明らかにな った。今回得られた成果は、a)酸素吸着および酸素還元過程が炭素骨格のモルフォロジ ーに依存すること、b)金属がなくてもカーボンアロイが触媒機能を有すことを明確に示 すものとなっている。

3) インテリジェント触媒の触媒機構の研究

ごく最近、貴金属がペロブスカイトに固溶した インテリジェント触媒が有機合成反応における触 媒としても高活性であることが見出された。しか しまだ活性種は特定されていない。そこで今年度 はPdを固溶したインテリジェント触媒から溶解す る高活性種の特定に必要なPdの水和錯体に関する 詳細な情報を得た。シミュレーションから得られ た Pd(II)での動径分布関数を図3に示す。Pd(II)の



図3. Pd(II)での動径分布関数

水和構造は4配位正方形型となるが、Pd(0)では2配位直線型に変化することが示唆された。 この結果は EXAFS 実験により活性種が特定できる可能性があることを示している。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- <u>池田隆司</u>, Mauro Boero, 寺倉清之, 尾嶋正治, 尾崎純一
 「第一原理分子動力学によるカーボンアロイ触媒の反応サイト探索」
 日本物理学会 2008 年秋季大会, 9 月 20-23 日/盛岡市
- 2) 池田隆司

「第一原理分子動力学によるパラジウムイオンの水和構造の研究」 日本物理学会第64回年次大会,3月27-30日/東京都

3) <u>池田隆司</u>

「高温高圧水の第一原理分子動力学シミュレーション」 平成 20 年度 低温科学研究所共同利用研究集会 「H₂O を科学する」,9月11-12日/ 札幌市

4) 矢板毅, <u>池田隆司</u>, D. K. Shuh

「部分状態密度関数から見た Pu(IV) および Cm(III) による有機配位子への 5f 電子逆 共与特性」

2008年放射化学会第52回放射化学討論会,9月25-27日/広島市

5) 矢板毅, <u>池田隆司</u>, 小林徹, 鈴木伸一, 塩飽秀啓, 岡本芳浩, 池田篤史, 阿久津和宏, 沼倉正彦

「新規アクチノイドイオン認識化合物 PTA の分子設計研究」

日本原子力学会「2008年秋の大会」,9月4-6日/香美市

- 6) 片山芳則,服部高典,齋藤寛之,蓬田美樹,<u>池田隆司</u>,青木勝敏,舟越賢一,丹下慶範 「高圧高温下の水の構造 III」
 第 49 回高圧討論会,11 月 12-14 日/姫路市
- <u>Takashi Ikeda</u>
 "Exploration of Active Sites of Carbon Alloy Catalysts via First Principles Molecular Dynamics"

Computational Science Workshop 2008, December 8-10/Tsukuba

8) <u>Takashi Ikeda</u>, Mauro Boero, Shen-Feng Huang, Kiyoyuki Terakura, Masaharu Oshima, and Jun-ichi Ozaki

"Carbon Alloy Catalysts: Active Sites for Oxygen Reduction Reaction"

J. Phys. Chem. C 112, 14706 (2008).

 Hideharu Niwa, Koji Horiba, Yoshihisa Harada, Masaharu Oshima, <u>Takashi Ikeda</u>, Kiyoyuki Terakura, Jun-ichi Ozaki, Seizo Miyata

"X-ray absorption analysis of nitrogen contribution to oxygen reduction reaction in carbon alloy cathode catalysts for polymer electrode fuel cells"

J. Power Sources 187, 93 (2009).

- 10) Yoshinori Katayama, Takanori Hattori, Hiroyuki Saitoh, <u>Takashi Ikeda</u>, Katsutoshi Aoki, Hiroshi Fukui, and Kenichi Funakoshi
 "Structure of liquid water under pressure up to 17 GPa"
 (in preparation for publication)
- 11) <u>Takashi Ikeda</u>, Yoshinori Katayama, Hiroyuki Saitoh, and Katsutoshi Aoki "High-Temperature Water under Pressure" (in preparation for publication)
- 12) <u>池田隆司</u>

「第一原理分子動力学法による金属イオンの水和と化学反応」 分子シミュレーション研究会会誌"アンサンブル"10,3(2008).

<u>池田隆司</u>, ボエロ マウロ, 森川良忠
 「化学反応シミュレーションの現状と課題」
 日本物理学会誌 "BUTSURI" 64, 256 (2009).

4. 今後の利用予定:

第一原理分子動力学法に基づいた反応のシミュレーションを3つのサブテーマについ て当面継続する。

4.3.10 X線電磁波と物質との相互作用

Interactions of x-ray and matter

中村 龍史

レーザー電子加速グループ

1. 利用目的:

本申請研究の目的は、X線領域の電磁波と物質との相互作用をシミュレートすることの できる新しいシミュレーションコードの開発である。

利用内容・結果:

日本原子力機構関西光科学研究所おいて、X線自由電子レーザー利用推進研究課題"生体 分子の立体構造決定手法の開発に向けた理論基盤の構築"の研究が進められている。申請者 は高輝度X線の照射による生体分子の損傷過程の解明を目的とした新しいシミュレーシ ョンコードの開発を進めてきた。

X線と物質との相互作用の研究では、以下の三つの過程を考慮する必要がある。それら は、1)物質によるX線のエネルギー吸収過程、2)脱励起過程やクーロン衝突等の原子 過程を介した緩和過程、そして3)高エネルギー電子を介したプラズマダイナミクス、の 三点である。これまでのシミュレーション研究では、分子動力学法(MD)及びレート方程式 を用いた解析が中心であった。それぞれにメリット・デメリットがあるが、いずれの場合 に共通している点は、これらの研究においてX線吸収により発生した高エネルギー電子 (12keV 程度)のダイナミクスを適切に考慮していない点である。すなわち、発生した12 keV 電子と原子との衝突効果は疑似的に考慮しているが、これら高エネルギー電子の運動 を解いていない。このため、高エネルギー電子の運動によるシース場の形成やイオンの膨 張等が考慮されていない。この近似は、XFEL強度が低い場合には妥当であるといえる。 それは、発生する高エネルギー電子の密度が低いため、主たるイオン化過程は脱励起過程 であるオージェー過程や衝突イオン化となるためである。しかし、日本に現在建設中のX FEL装置はX線強度の設計目標値が10²²/photon/pulse/mm²と非常に高く、発生する高エ ネルギー電子の密度も固体密度程度となる。この場合、高エネルギー電子の運動によりタ ーゲット表面に強いシース場が誘起され、その強度はTV/m程度にもなると見積もられる。 その結果、シース場によるターゲットのイオン化が無視できなくなる。このような状況を 考慮するため、高エネルギー電子の振る舞いを適切に取り扱うことのできる粒子コードを ベースに、そこに原子過程及び電子状態を考慮にいれた新しい粒子コードの開発を行っ た。具体的には、既存の粒子コード EPIC3D に対し、電子状態の情報(電子軌道)を各原子 に与えることにより、内殻励起過程や脱励起過程等を考慮することが可能となった。X線 と物質との相互作用における上記3つの過程をコンシステントに取り扱うことのできるコ ードは現状では本コードのみと考えられる。このコードを用いて、生体分子を模擬した炭 素クラスターターゲットとXFELとの相互作用の解析を行った。この結果、強度が

10²²/photon/pulse/mm² では全束縛電子の約 76 パーセントがシース場により電離すること が分かった(下図参照)。このときの電界強度は最大で 2TV/m にも達し、L 殻の電子はす べてトンネル過程を経ずに直接電界によりイオン化される。物質のイメージングを行うた めのXFEL強度の上限を見積もるために、物質の損傷(1原子当たりの束縛電子数)を定 量的に評価した。強度が 0²²/photon/pulse/mm² を超えると平均束縛電子数は一個以下とな り、完全電離した原子も存在しうる程度までイオン化が進行していることとなる。このた め、散乱光が原子の位置情報をほとんど持っていない。XFELの強度を二ケタ低い 10²⁰/photon/pulse/mm²程度に抑えた場合、平均電子数は 4.5 個まで上昇し比較的十分な散乱 光強度が得られると考えられる。このように新しいコードを用いた物質損傷の定量的評価 によりイメージングに可能なXFEL強度パラメターを明らかにした。



図1 XFEL強度が 0²²/photon/pulse/mm² の場合の炭素イオンの価数ごとの比率の時間変化 を図示したもの。時間軸は、t=15fs でレーザービークがターゲットに到達する。レーザービ ークの 5fs 前には既にほとんどの炭素原子は完全電離していることが分かる。

上記テーマとともに、レーザー電子加速グループで進められているクラスターターゲットへのレーザー照射による高エネルギーイオン発生実験に対するシミュレーション解析を行った。クラスターによるレーザーイオン加速研究は、関西研の中期計画にある"多様な量子ビーム施設・設備の戦略的整備とビーム技術開発"におけるレーザー駆動小型陽子加速器の実現に関する主要研究テーマの一つである。特に、クラスターターゲットから発生した高エネルギーイオンの発生メカニズムの解明を目指し研究を進めているところである。クラスターターゲットとレーザーとの相互作用では、その密度がガス密度と固体密度の中間に位置し、ちょうどレーザーの臨界密度近傍になるというユニークな特徴を持つ。臨界密度とは、レーザーの群速度がゼロになる密度のことで、臨界密度以上の媒質中を光は伝播することができない。このような臨界密度近傍(臨界密度の10~80パーセント程度)のターゲットとレーザーとの相互作用では、固体ターゲットやガスターゲットとの相互作用では、

クラスターと高強度レーザーとの相互作用により、これまでの理論では説明され得ない非 常にエネルギーの高いイオンの発生に成功した(福田祐二研究員らの結果)。現在、その 加速機構の解明を目指したシミュレーション研究を進めている。また、同実験にてMeV 程度の負イオンも同時に観測された。レーザーによる負イオン加速の実験報告は幾つかな されているが、いまだその加速機構の解明には至っていない。そこで申請者らは、負イオ ン加速機構としてのクーロン爆縮モデルを提案した。このモデルを粒子シミュレーション により検証し、実験結果の理解につながった。今後のより高エネルギーの負イオン発生に つながると考えている(現在論文投稿中)。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等): 投稿論文

- 1) T.Nakamura, Y.Fukuda, A.Yogo, et. al., "Coulomb implosion mechanism of negative ion acceleration in laser -plasmas ", submitted.
- T.Nakamura, Y.Fukuda, Y.Kishimoto, "Ionization dynamics of cluster targets irradiated by XFEL light", to be submitted.
- T.Nakamura and K.Mima, "Magnetic dipole vortex generation by propagation of ultraintense and ultra-short laser pulses in moderate density plasmas", Phys. Rev. Lett. 100, 205006 (2008).
 学会講演
- 4) 中村龍史、福田祐二、岸本泰明、"XFEL光とクラスターターゲットとの相互作用に よる光電離プラズマのダイナミクス"、日本物理学会、岩手大学、2008年9月22日.
- T.Nakamura, Y.Fukuda, Y.Kishimoto, "Ionization dynamics of cluster targets irradiated by XFEL light", 7th International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science, Kyoto, November 2008.
- T.Nakamura, Y.Fukuda, A.Yogo, et. al., "Coulomb implosion mechanism of negative ion acceleration in laser -plasmas ",7th International Symposium on Ultrafast Intense Laser Science, Kyoto, November 2008.
- 4. 今後の利用予定:

Altix3700Bx2 システムを用いて、二次元粒子コードによるレーザー量子線発生に関する 研究を継続する予定である。イオン化過程を考慮したレーザー伝播解析により、より詳細 な解析を進める。 JAEA-Review 2009-030

4.3.11 高強度レーザーとクラスターとの相互作用に関する研究

Interaction processes of clusters with intense laser pulses

福田 祐仁

レーザー電子加速研究グループ

1. 利用目的:

"内殻電離、オージェ過程、衝突電離過程といった X 線領域特有の原子過程・緩和過程 を考慮した、シミュレーションモデルの開発を行い、XFEL 光(波長:0.1 nm)と疑似生 体分子(クラスター)との相互作用プロセス解明のためのシミュレーショを行う。"

2. 利用内容・結果:

X線自由電子レーザー(XFEL)による生体分子の損傷過程を調べるため、プラズマ手 法を用いた既存のシミュレーションコード EPIC3Dに内殻光イオン化、オージェ過程、衝 突イオン化、電場イオン化を記述するコードを組みこんだ。そして、波長 0.1 nm(12 keV) の XFEL パルス(10 fs)と疑似生体分子(炭素クラスター)との相互作用ダイナミクスに ついて系統的に調べた。その結果、XFELのフォトン数が10²¹ photons/pulse/mm²を超える と炭素クラスター周囲に生成する強い誘起電場によるイオン化が促進され、分子崩壊のス ピードが早まることを初めて明らかにした(図(a)、及び、(b)参照。)。一方で、XFELによ る単一生体分子のイメージングには、10²¹ photons/pulse/mm²以上のフォトン数が必要と見 積もられており、XFELによる単一生体分子のイメージング実験の難しさを、改めて浮き 彫りにする結果となった。

このように予定どおり研究は進展し、クラスター周囲に生成する電場によるイオン化の 影響を評価することが出来た。このことは、これまでの研究では、考慮されていなかった 部分であり、生体分子の崩壊時間を評価する上で欠かせない現象である。我々は、プラズ マ手法を導入することにより、この現象を初めて見いだした。

なお、本研究は、受託研究である文科省科 学技術振興調整費 X 線自由電子レーザー (XFEL)利用推進課題「生体分子の立体構造決定手法の開発に向けた理論基盤の構築(研 究代表者:郷信広、原子力機構 特別研究員)」の一環として行われた。本研究を行う上で、 中期計画「多様な量子ビーム施設・設備の戦略的整備とビーム技術開発」と関連した、「相 対論レーザープラズマ中における量子ビーム発生の解明」を実施することで得られた知見 を利用した。また、本研究により得られた結果は、中期計画に関わる研究計画の立案や研 究結果の解釈等を行うにあたって参考となった。



図 (a) XFEL パルス(波線)照射にともなう、炭素原子のイオン化状態の変化。パルスピーク到 達以前に炭素原子の電子は全て剥ぎ取られ、完全にイオン化されてしまうことが分かる。 (b)t=5 fs における、電子密度分布。クラスター表面に生成する電場は、TV/m にも達するこ とが明らかとなった。 この電場により、炭素原子の電子は、全て剥ぎ取られてしまう。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等): 論文投稿:

- 1) <u>Y. Fukuda</u>, A.Ya. Faenov, M. Tampo, T.A. Pikuz, T. Nakamura, M. Kando, Y. Hayashi, A. Yogo, H. Sakaki, T. Kameshima, A.S. Pirozhkov, K. Ogura, M. Mori, T. Esirkepov, A.S. Boldarev, V.A. Gasilov, R. Kodama, P.R. Bolton, Y. Kato, T. Tajima, H. Daido, and S.V. Bulanov, "Enhancement of accelerated ion energies via interaction of intense laser with cluster-gas target", Science 誌へ 2009 年 2 月中に投稿予定。
- T. Nakamura., <u>Y. Fukuda</u>, A. Yogo, M. Tampo, M. Kando, Y. Hayashi, T. Kameshima, A. S. Pirozhkov, T. Zh. Esirkepov, T. A. Pikuz, A. Ya. Faenov, H. Daido, and S. V. Bulanov, "Coulomb implosion mechanism of negative ion acceleration in laser plasmas", Phys, Rev. Lett. 誌へ投稿済み。
- 3) T. Nakamura., <u>Y. Fukuda</u>, and Y. Kishimoto, "Ionization dynamics of cluster targets irradiated by XFEL light", Phys, Rev. E 誌へ 2009 年 2 月中に投稿予定。

学会発表:

<国際学会>

 Y. Fukuda, T. Nakamura, K. Moribayashi, and Y. Kishimoto, "Interactions of clusters with X-ray free electron laser", 50th Annual Meeting of the Division of Plasma Physics, Dallas, Texas, November 2008.

JAEA-Review 2009-030

- 5) T. Nakamura, <u>Y. Fukuda</u>, A. Yogo, et.al., "Coulomb implosion mechanism of negative ion acceleration in laser plasmas", ISUILS7, Kyoto, November 2008.
- 6) T. Nakamura, <u>Y. Fukuda</u>, Y. Kishimoto, "Ionization dynamics of cluster target irradiated by XFEL light", ISUILS7, Kyoto, November 2008.

<国内学会>

- 7) 中村龍史、<u>福田祐仁</u>、岸本泰明、"XFEL光とクラスターターゲットとの相互作用 による光電離プラズマのダイナミクス"、日本物理学会、岩手、2008 年 9 月。
- 8) 中村彰浩,廣池承一郎,森林健悟,中村龍史,<u>福田祐仁</u>,岸本泰明,「光電離過程を 取り入れた短波長レーザーとクラスターとの相互作用」、日本物理学会、岩手、2008 年9月。
- 9) 中村龍史, <u>福田祐仁</u>, 岸本泰明, 「XFEL 光とクラスターターゲットとの相互作用に よる光電離プラズマのダイナミクス」日本物理学会、岩手、2008 年 9 月。
- 10) <u>福田祐仁</u>、中村龍史、森林健悟、岸本泰明、「X線 FEL とクラスター(擬似生体分子) との相互作用に関する研究」、日本物理学会第、大阪、2008 年 3 月。
- 加藤道明、岸本泰明、廣池承一郎、中村彰浩、森林健悟、中村龍史、<u>福田祐仁</u>、「X 線 FEL による光電離プラズマの生成ダイナミックスと特性」日本物理学会、大阪、 2008 年 3 月。
- 12) 廣池承一郎、岸本泰明、加藤道明、中村彰浩、森林健悟、中村龍史、<u>福田祐仁</u>、「ク ラスターの崩壊過程におけるレーザー波長依存性」、日本物理学会、大阪、2008 年 3 月。

4. 今後の利用予定:

生体分子の構造決定においては、XFEL と生体分子との相互作用による生体分子損傷の 影響を最小限に抑える必要がある。上記の通り、平成 20 年度までに、誘起電場によるイ オン化に伴って分子崩壊が起こることを明らかにした。平成 21 年度は、XFEL の波長、フ ォトン数、パルス幅、及び、生体分子の大きさなどのパラメータと崩壊スピードの関係を 明らかにする。

4.3.12 レーザー航跡場加速の PIC シミュレーション

PIC simulation of the Laser Wake Field Accelerator

Timur Esirkepov 光量子シミュレーション研究グループ

1. 利用目的:

With the help of 3D and 2D multi-parametric PIC simulations, the wake wave generation and electron acceleration by a tightly focused intense laser pulse in underdense plasma is investigated. A new effect of the bow wave formation is identified. The experiments on the intense short laser pulse guiding and electron acceleration in the 4 cm capillary are explained. These results are obtained in the framework of the mid-term plan of the Quantum Beam Directorate, for the topic

「光量子・放射光の利用技術開発では、ペタワット・レーザーの主パルスとプレパルスの強度比 10⁸倍への向上、X線レーザーで 0.1Hz の繰返し発振を実現する。また、アト秒パルス高輝度 X線の発生を可能とする短パルス小型高強度レーザー技術、エネルギー回収型次世代放射光源実現のための低エミッタンス大電流電子銃を開発する。」

2.利用内容・結果:

1. The laser-driven wake waves in plasmas are used in the laser wake field accelerator (LWFA) [1] and the flying mirror (FM) [2] concepts. As well known, a tightly focused and sufficiently intense laser pulse excites a wake field in the so-called bubble regime, where, in addition to a longitudinal push, the laser pulse expels electrons also in transverse direction, forming a cavity void of electrons in the first period of the wake wave. Our 3D PIC simulations show that when the waist of a sufficiently intense laser pulse is less than the wake wave length, the expelled electrons can not be confined near the cavity and their transverse outflow forms a bow wave, Fig. 1. Here the laser pulse with the initial intensity I=6×10¹⁹W/cm²×(1µm/ λ)², corresponding to the dimensionless amplitude *a*=eE₀/m_e ω c = 6.62, propagates along the x-axis; it is linearly polarized in the direction

of the y-axis and has the size of 10λ in every direction. The pulse is incident on a fully ionized plasma slab with the electron density $n_e = 1.14 \times 10^{18} \text{cm}^{-3} \times (1\mu\text{m}/\lambda)^2$. Here λ and ω are the laser wavelength and frequency, e and m_e are the charge and mass of electron, E_0 is the magnitude of the laser pulse electric field, and c is the speed of light in vacuum. In the simulation, the ion response is neglected. The simulation grid dimensions are $4000 \times 992 \times 992$ along x, y and z axes; the grid mesh sizes are $dx = \lambda/32$, $dy=dz=\lambda/8$; total number of quasi-particles is 2.3×10^{10} .

Simulations show that the bow wave can significantly



Fig. 1. Electron density (coded into color, C, and opacity, O, with ray-tracing) in the wake of the laser pulse, which is represented by the electromagnetic energy density isosurface $(E^2+B^2)(m_e\omega c/e)^2=4$ (red), at $t = 100 \times 2\pi/\omega$.

increase the electric potential of the wake wave and that it facilitates the transverse wave-breaking which causes the self-injection of electrons into the accelerating phase of the wake field. Simulations reveal that the multi-dimensional effects modify the scaling laws of LWFA acceleration based on a 1D approximation or on the assumption that the cavity size is determined by the laser pulse amplitude. The bow wave excitation in underdense plasma by an intense short laser pulse is a new effect reported for the first time.

[1] T. Tajima and J. M. Dawson, Phys. Rev. Lett. 43, 267 (1979).

[2] S. V. Bulanov, T. Zh. Esirkepov, and T. Tajima, Phys. Rev. Lett. 91, 085001 (2003).

2. At the Kansai Photon Science Institute, experiments were performed where the high intense short laser pulse is guided over the 4 cm in the plasma channel formed by the discharge inside an ablative capillary. Fast electron generation was detected. Depending on the laser pulse energy, the fast electrons show a quasi-monoenergetic spectrum with average energy of 20 MeV or a quasi-maxwellian energy spectrum with energies up to 300 MeV. My multi-parametric 2D PIC simulations helped to explain these spectra. In the simulations, the p-polarized laser pulse with the wavelength λ and the dimensionless amplitude a_0 corresponding to the intensity I = $a_0^2 \times 1.37 \times 10^{18}$ W/cm² × (1µm/ λ)² interacts with a channel filled with plasma of the density n_e. The laser pulse amplitude varies from $a_0=0.5$ to 2 and the electron density - from $n_e=0.9 \times 10^{-3} n_{cr}$ to $10^{-2}n_{cr}$. The initial size of the laser pulse is $10.5\lambda \times 36\lambda$. The plasma is homogeneous in the longitudinal direction. In the transverse direction, the density profile is parabolic, with the density minimum on the axis and the transverse size of 100λ ; the minimum-to-maximum density ratio (between the density on the axis and at the periphery) is 80%, corresponding to experimental observations. The mesh step is dx= $\lambda/16$ in the longitudinal and dy= $\lambda/8$ in the transverse direction. The time step is dt $\approx 0.0531\lambda/c$. The number of quasiparticles is 3.2×10^7 .

In the case of a low density, $n_e=0.9\times10^{-3}n_{cr}$, and relatively small laser pulse amplitude, $a_0 \le 0.5$, the interaction is weakly nonlinear; the laser pulse initial waist is well below the matched waist while the pulse power is well below the relativistic self-focusing threshold, therefore the pulse undergoes a diffraction and its waist slowly increases approaching the matched waist value.

For amplitudes $a_0 \ge 1.5$ and the above-mentioned range of the electron density, the laser pulse is self-focused due to relativistic effects.

The wake-field excited by the laser pulse undergoes the transverse wave breaking and the electrons are injected into the accelerating phase of the wake-field. The maximum energy gained by accelerating electrons saturates after the laser pulses passes $1000-4000\lambda$ in the plasma channel. The



Fig. 2. The electron energy spectrum (curve; left vertical axis) and the energy-vs-angle distribution (grayscale; right vertical axis) at $t=3900\times 2\pi/\omega$ for two cases: (a) $a_0=1.5$, $n_e=2.5\times 10^{-3}n_{cr}$ and (b) $a_0=2$, $n_e=10^{-2}n_{cr}$.

electron energy spectrum is rather sensitive to the initial values of the electron density and the laser pulse amplitude. For the parameters close to the experimental conditions, the experimental results are well reproduced. Fig. 2 shows the electron energy spectrum and the distribution of the electrons over energy, ε , and angle between the electron motion direction and the channel axis, θ . In the case of relatively low electron density, $n_e=2.5\times10^{-3}n_{cr}$, and the laser pulse amplitude of $a_0=1.5$ (Fig. 2a), the quasi-monoenergetic energy spectrum is formed approximately at the time t=3900×2 π/ω . The energy corresponding to the spectral peak is significantly less than the maximum energy of the electron beam. The wakefield still has a regular structure when the quasi-monoenergetic spectrum is formed; later it deteriorates as the laser pulse depletes and gets strongly modulated. For the case of a more dense plasma, $n_e=10^{-2}n_{cr}$, and $a_0=2$ (Fig. 2b), the spectrum saturates earlier, becoming quasi-thermal. The laser pulse undergoes strong modulation at t=1500×2 π/ω . A relatively weak and irregular wake-field is produced, which facilitates broadening of the electron energy spectrum. The simulations lead to the conclusion that the fast electron generation occurs due to the self-injection owing to the transverse wave breaking of the wake wave which is caused by the relativistic self-focusing of the laser pulse.

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- T. Zh. Esirkepov, Y. Kato, and S.V. Bulanov. "Bow Wave from Ultra-intense Electromagnetic Pulses in Plasmas", Phys. Rev. Lett. 101, 265001 (2008).
- T. Kameshima, H. Kotaki, M. Kando, I. Daito, K. Kawase, Y. Fukuda, L. M. Chen, T. Homma, S. Kondo, T. Zh. Esirkepov, N. A. Bobrova, P. V. Sasorov, S. V. Bulanov. "Laser Pulse Guiding and Electron Acceleration in the Ablative Capillary Discharge Plasma". Submitted to Physics of Plasmas, 2008.

4. 今後の利用予定:

With the help of 3D PIC and multi-parametric 2D PIC simulations, the investigation of the intense laser pulse evolution, wake field generation and electron acceleration will be continued, the new scheme of the ultra-bright X-ray source will be studied as suggested in our recent publication http://arxiv.org/abs/0812.0401, as well as the dependence of the ion acceleration in the RPDA regime on the parameters of the laser and target will be investigated. In addition, a support for the laser-plasma experiments in the Kansai Photon Science Institute will be provided.

4.3.13 高強度レーザーの自己組織化

Self organization of high intensity lasers

James Koga 光量子シミュレーション研究グループ

1. 利用目的:

One part of the mid-term research plan (2005-2009) is to generate atto-second X-ray pulses. One way to achieve atto-second X-rays is via relativistic mirrors. Two laser pulses are necessary. One to generate a relativistic mirror from breaking plasma wakefields and another to reflect off the mirror being converted to ultra-short high frequency coherent light pulses. One possible way to tune the X-rays is by controlling the blueshifting and spectral bandwidth of the source pulse. In experiments performed at the Advanced Photon Research Center (APRC) ultra-short high power laser pulses interacting with neutral gases showed both fixed blueshift of the laser pulse and ultra-broadband radiation, super-continuum, generation. The goal of this calculation is to reproduce both these effects simultaneously and determine the controllability of such a blueshift via the initial focusing strength of the laser pulse.

2.利用内容・結果:



One way to achieve the mid-term plan of achieving atto-second X-ray pulses is via compression of laser pulses using relativistic mirrors. This compression using relativistic mirrors has been demonstrated [1]. By using appropriate parameters ultra-short X-rays could be obtained. Since tuning the wavelength and spectral bandwidth of the light is necessary,

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.

controlling the laser wavelength and spectral bandwidth are needed. One method includes controlling the wavelength and spectral bandwidth of the reflected source laser pulse. In an experiment involving the injection of a high irradiance laser pulse into a gas chamber carried out at APRC a fixed blueshift of the laser pulse was observed [2]. Figure 1 shows the experimental results of the spectrum. An overall blueshift occurred when the laser power, P, was above the critical power for self-focusing of the laser pulse, Pcr. When P>Pcr, the blueshift was independent of the pressure and type of gas, which had not been observed previously in other experiments. At higher gas pressures a broad spectral region extending to short wavelengths,

super-continuum radiation, was observed. This super-continuum has been previously observed in experiments involving weakly focused high power lasers propagating in neutral gases and in previous large simulations [3]. However in these experiments with a moderately focused laser pulse both the super-continuum radiation and a fixed overall blueshift of the laser pulse was observed for the first time.

We use the nonlinear polarization ionization code (NOPIC), which includes 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 [4]. Using NOPIC we investigated for the first time the dependence of the total shift of the laser pulse on initial focusing angle without envelope or other approximations.

We used a laser pulse length of 266fs with a wavelength of 1 micron. There is a background neutral gas and the laser power is above that necessary for self-focusing of the laser pulse. Figure 2 shows that (a) for R0 /zf >0.46 the blueshift is nearly constant and (b) for R0/zf < 0.46 the spectrum changes where R0 is the initial focusing distance and zf is the theoretical self-focusing distance. This indicates that there is a critical focusing length for the nearly fixed blueshifting of ultra-short laser pulses in neutral gases.

- M. Kando, M., et al., Demonstration of laser-frequency upshift by electron-density modulations in a plasma wakefield, Phys. Rev. Lett., 99,135001-1-135001-4 (2007)
- [2] J. K. Koga, et. al., Fixed blueshift of high intensity short pulse laser propagating in gas chambers, Physics of Plasmas, 7, 5223-5231 (2000)
- [3] J. K. Koga, Observation of supercontinuum generation in where λ₀ the direct simulation of an intense laser pulse propagating in a neutral gas, Physical Review E, 70, 056404-1-056404-5 (2004)
- [4] J. Koga, Simulation model for the effects of nonlinear polarization on the propagation of intense pulse lasers, Optics Letters, 24, 408-410 (1999)





- 3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
 - 1) J. Koga, Simulation model for the effects of nonlinear polarization on the propagation of intense pulse lasers, Optics Letters, 24, 408-410 (1999)
 - 2) J. K. Koga, N. Naumova, M. Kando, L.N. Tsintsadze, K. Nakajima, 他 4 名, Fixed blueshift of high intensity short pulse laser propagating in gas chambers, Physics of Plasmas, 7, 5223-5231 (2000)
 - ジェームズ・コーガ、高強度レーザーパルスのガス中における自己集束及び伝播についての自己組織的臨界モデル、情報処理学会シンポジウムシリーズ IPSJ Syposium Series, 2000, 109-112 (2000)
 - 4) J. K. Koga, Observation of supercontinuum generation in the direct simulation of an intense laser pulse propagating in a neutral gas, Physical Review E, 70, 056404-1-056404-5 (2004)

4. 今後の利用予定:

We plan to study the effects of initial focusing on the supercontinuum generation by the laser pulse.

4.4 核融合研究開発部門

Fusion Research and Development Directorate

4.4.1 トカマク乱流輸送現象のシミュレーション研究

Simulation study of turbulent transport phenomena in tokamaks

井戸村 泰宏

プラズマ理論シミュレーショングループ

1. 利用目的:

これまでの核融合プラズマ乱流シミュレーションの主な課題は定常熱輸送の評価であったが、ITER に向けた今後の核融合プラズマ乱流研究の課題として以下のようなトピックが注目されている。

- ① 分布硬直性→ITER の標準運転モードである H モードプラズマの閉じ込め性能を左右 する分布形成現象。
- ② 内部輸送障壁→ITER や原型炉における定常運転シナリオで利用が想定されている分 布形成現象。
- ③ 過渡的乱流輸送特性→外部入力による乱流状態の質的変化の理解とその炉心制御への 応用。
- ④ 運動量輸送→外部運動量入力が限られている ITER のプラズマ回転と運転限界を左右 する輸送現象。
- ⑤ 粒子輸送→燃料粒子、He 灰、および、不純物の輸送と燃焼制御性を左右する輸送現象。 これらの課題の多くは乱流輸送とプラズマ分布形成の相互作用が極めて重要な現象で あるため、従来の核融合プラズマ乱流シミュレーションで主流となってきた背景プラズマ 分布を固定してそれに比べて約1%以下の乱流成分のみを計算する δf モデルでは取り扱い が難しい。そこで、近年、背景プラズマ分布と乱流成分を同時に計算する full-f モデルに 基づく核融合プラズマ乱流シミュレーションが注目されている。このような full-f モデルに 基づく核融合プラズマ乱流シミュレーションが注目されている。このような full-f シミュ レーションには数値計算手法と物理モデルの取り扱いの難しさがあるが、本研究で開発を 進めている第一原理トカマク乱流シミュレーションコード GT5D では先進的な無散逸保存 型差分スキームの独自開発によって数値的な問題を克服し、full-f モデルによる長時間乱流 シミュレーションの可能性を実証した。今年度は GT5D において更に物理モデルの高度化 を進めることにより、世界初となる熱源駆動イオン乱流の長時間シミュレーションに成功 した。このシミュレーションにおいて実験的に観測されているイオン乱流の乱流輸送特性 を定性的に再現することに成功した。
- 2. 利用内容・結果:

コード開発・拡張に関しては、今年度は以下の点において進展があった。

- ① JT60U 実験データベースのインターフェースを開発(図 1)
- ② 熱源モデルを拡張し、実験条件に近い外部加熱および境界プラズマ条件を実装

- ③ 粒子衝突効果に関して新たにフォッカー・プランク衝突項を実装し、衝突性輸送現象 を再現
- ④ 衝突項を含めて並列化アルゴリズムを見直し、並列化率 99.996%を達成

以上により、GT5Dにおいて開放系トカマクプラズマの長時間乱流シミュレーションを 行う上で必要な物理モデルおよび数値計算法の開発が完了し、炉心プラズマの乱流構造の 解明という中期計画の目標に向かって大きく前進した。さらに、本研究ではGT5Dを用い て世界初となる熱源駆動イオン乱流の長時間シミュレーションを実施することにより、

- ① イオン乱流の臨界安定温度勾配付近に拘束されるイオン温度の分布硬直性(図2)
- ② 1/f スペクトルで特徴づけられる熱流束の間欠的な雪崩現象
- ③ 境界プラズマからの運動量の非拡散的乱流輸送により維持される自発的プラズマ回転 分布

といった実験的に観測されているイオン乱流の特性を第一原理モデルで再現すること に成功し、特に、①、②の性質が開放系プラズマ現象の自己組織化臨界現象として説明で きることを明らかにした。この成果は包括的物理モデルを含む full-f シミュレーションで 分布形成まで含めた乱流シミュレーションが可能であることを示した世界初の成果であ り、第22回 IAEA 核融合エネルギー会議における口頭発表論文、あるいは、DOE ワーク ショップにおける招待講演に採用される等、国内外の主要な会議において注目された。



- 図1 JT60U実験の分布データ
 に対して計算したイオン
 乱流の不安定モード構
 造のトーラス断面分布。
 実線は磁気面を示す。
- 図2 JT60U 実験で観測されたイオン温度分布(左図)と GT5D で観測したイオン温度分布(右図)はともに勾 配特性長 T_i/T_i'が大域的に一定になる指数関数的 分布をとる。右図では加熱パワーを増加させても温 度分布がほとんど変化しない分布硬直性が見られ
- 3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
 論文、テキスト
 - "Conservative global gyrokinetic toroidal full-*f* five dimensional Vlasov simulation", Y. Idomura, M. Ida, T. Kano, N. Aiba, and S. Tokuda, Comput. Phys. Commun., 179, 391-403 (2008).
- "Kinetic simulations of turbulent fusion plasmas", Y. Idomura, T.-H. Watanabe, and H. Sugama, "Turbulent Transport in Fusion Plasmas - First ITER International Summer School" (AIP, New York, 2008), 270-286 (2008).
- 3) "Study of ion turbulent transport and profile formations using global gyrokinetic full-*f* Vlasov simulation", Y. Idomura, H. Urano, N. Aiba, and S. Tokuda, submitted to Nucl. Fusion.
- "Heat transport and pedestal structure of H-mode in the variation of current density profiles in JT-60U", H. Urano, Y. Sakamoto, T. Suzuki, T. Fujita, K. Kamiya, A. Isayama, Y. Kamada, H. Takenaga, N. Oyama, G. Matsunaga, S. Ide, Y. Idomura, and the JT-60 Team, submitted to Nucl. Fusion.

国際会議

- "Gyrokinetic toroidal full-f Vlasov simulation using non-dissipative conservative scheme", Y. Idomura, 2nd Simulation Science Symposium, Tajimi, Japan, 2008 (invited).
- "Conservative Global Gyrokinetic Toroidal Full-f 5D Vlasov Simulation", Y. Idomura, S. Tokuda, N. Aiba, and H. Urano, 22nd IAEA Fusion Energy Conference, Geneva, Switzerland, 2008 (International Atomic Energy Agency, Vienna, 2008), IAEA-CN-165/TH/8-2 (oral).
- 7) "Heat transport and pedestal structure of H-mode in the variation of current density profiles in JT-60U", H. Urano, Y. Sakamoto, T. Suzuki, T. Fujita, K. Kamiya, A. Isayama, Y. Kamada, H. Takenaga, N. Oyama, G. Matsunaga, S. Ide, Y. Idomura and the JT-60 Team, 22nd IAEA Fusion Energy Conference, Geneva, Switzerland, 2008 (International Atomic Energy Agency, Vienna, 2008), IAEA-CN-165/EX/8-5 (oral).
- 8) "Numerical EXperiment of Tokamak micro-turbulence using Gyrokinetic Toroidal full-f 5D Vlasov code GT5D", Y. Idomura, US-DOE Workshop on "Scientific Grand Challenges in Fusion Energy Sciences and the Role of Computing at the Extreme Scale", Washington, DC, USA, 2009 (invited).

9) 国内会議

"ジャイロ運動論的 full-f ブラゾフコードによるイオン温度勾配駆動乱流の長時間シ ミュレーション"、井戸村泰宏、浦野創、相羽信行、徳田伸二、プラズマ・核融合学会 第 25 回年会、2008 年 12 月 2 日、宇都宮

4. 今後の利用予定:

今後、さらに加熱パワーや磁場配位の異なる実験条件のシミュレーションを進めること によって実験的に観測されている熱輸送特性の遷移現象のシミュレーション研究を進め る。また、プラズマ回転を決定する上で重要な役割を果たす運動量の乱流輸送現象につい ても研究を進める予定である。

4.4.2 DD 中性子入射によるベリリウム積分ベンチマーク実験の解析

Analysis of integral benchmark experiment on beryllium with DD neutrons

近藤 恵太郎

核融合中性子工学研究グループ

1. 利用目的:

原子力機構の核融合中性子源施設 FNS では、これまで様々な体系を用いた DT 中性子入 射積分実験を実施し、DT 中性子に起因する核データの検証に大きな成果を挙げてきた。 これを踏まえ、DD 中性子に起因する核データをさらに効果的に検証するため、FNS の DD 中性子源を用いた積分実験を開始した。本年度は、モンテカルロ輸送計算コード MCNP5 と最新の評価済み核データライブラリを用い、DD 中性子源の詳細な特性評価と DD 中性 子源を用いたベリリウムの積分ベンチマーク実験の解析を実施した。

2. 利用内容・結果:

FNS では重水素化チタンターゲットに加速した重陽子を入射させることで、DD 反応に よるエネルギー 2~3 MeV の単色中性子を発生させることができる。この中性子源の中性 子発生特性データを評価するため、ターゲットアッセンブリの詳細な MCNP 計算モデルを 作成した。図1に作成した MCNP 計算モデルを 3 次元表示したものを示す。また、DD 反 応によって生成する中性子のエネルギー・角度分布を運動学に基づいて記述したソース項 をインプットカードに組み込み、MCNP 計算を行った。この計算の妥当性を確認するため、 ターゲット周りの中性子強度分布を In と Ni 放射化箔を設置して測定し、計算値と比較し た。図2に¹¹⁵In(n,n')^{115m}In 反応率と ⁵⁸Ni(n,p)⁵⁸Co 反応率の実験値と計算値の比、いわゆる C/E 値を示す。計算値は実験値をよく再現することが分かり、特性評価が妥当に行えてい ることを確認した。今後のベンチマーク実験の解析では、今回の評価結果を利用していく。

ベリリウム積分ベンチマーク実験では、厚さ45cm、直径63cmのベリリウム疑似円筒体 系をDD中性子源から20cmの位置に設置し、体系内における種々の反応率を測定した。 実験解析はMCNP5コードと評価済み核データライブラリ(JENDL-3.3、ENDF/B-VII.0、 JEFF-3.1)を用いて行った。図3に0.3 MeV以上の中性子に感度のある¹¹⁵In(n,n')^{115m}In反応 率のC/E値を示す。核データ間で系統的な差が見られており、JENDL-3.3 は5%程度の過 小評価、ENDF/B-VII.0 と JEFF-3.1 は5%程度の過大評価となっている。この原因を明らか にするため、ベリリウムの核データについて、ライブラリ間の差を調査し、計算値への影 響を検討した。その結果、JENDL と他のライブラリ間で2.7 ~3.4 MeV の弾性散乱の角度 微分断面積に違いが見られることが分かった。図4には JEFF-3.1 の弾性散乱の角度分布を JENDL の評価値に変更して計算した結果を赤で示した。このような変更を行うと C/E 値は 1 に近づくことから、今回の実験結果は JENDL-3.3 の角度分布の評価を支持していると言 える。また、3 MeV 付近の(n,2n)反応断面積の評価値に違いがあり、これによって計算値 間に 10%程度の差が生じることが分かった。図5 に JENDL-3.3 の(n,2n)反応断面積を他の ライブラリの評価値に変更して計算した結果を示した。いずれの場合も変更後の C/E 値は 1に近づいており、JENDL-3.3の評価値は2.6~3 MeV で過大の可能性があることが分かった。次に、低エネルギー中性子に感度のある¹⁹⁷Au(n,γ)¹⁹⁸Au 反応率の計算値と実験値の 比を図6に示す。計算値が実験値を過大評価する傾向が見られる。核データライブラリ間 での差は小さく、上記の MeV 領域の核データの問題とは異なる原因によって過大評価が 生じていることが分かった。

3. 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- Keitaro Kondo, Kentaro Ochiai, Chuzo Kutsukake, Chikara Konno, "Characterization of the DD-neutron source for the 80 degrees beam line of the Fusion Neutronics Source (FNS)", JAEA-Technology 2008-088 (2009)
- 近藤 恵太郎、落合 謙太郎、立部 洋介、高倉 耕祐、大西 世紀、佐藤 聡、今野 力、 「DD 中性子入射によるベリリウム核データ検証積分実験」、日本原子力学会 2009 年 春の年会、2009 年 3 月、東京工業大学
- 3) Keitaro Kondo, Kentaro Ochiai, Yosuke Tatebe, Takahiro Yagi, Seiki Ohnishi, Kosuke Takakura, Satoshi Sato, Chikara Konno, "Integral experiment on beryllium with DD neutrons for nuclear data benchmarking", to be presented in 5th International Symposium on Radiation Safety and Detection Technology (ISORD-5), July 2009, Kitakyusyu

4. 今後の利用予定:

ベリリウム体系内で NE213 検出器を用いて測定した中性子スペクトルの解析を行う予 定である。



図1 ターゲットアセンブリの MCNP 計算モデル

図2 ターゲット周りの In、Niの反応率分布の 測定値(点)と計算値(線)の比較



- した場合の¹¹⁵In(n,n')^{115m}In 反応率の C/E 値の変化
- 図 6¹⁹⁷Au(n, γ)¹⁹⁸Au 反応率の計算値と 実験値の比 (C/E)