JAEA-Review 2014-043



平成25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 Supercomputer System of JAEA in FY2013 (April 1, 2013 – March 31, 2014)

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

KQVIQN

February 2015

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連携成果展開部研究成果管理課 〒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 Institutional Repository Section,

Intellectual Resources Management and R&D Collaboration 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

 $\underline{\mathbb{C} \text{ Japan Atomic Energy Agency, } 2015}$

平成 25 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

(2014年10月10日受理)

日本原子力研究開発機構では、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計算科学技術が活用されている。

計算科学技術活用の高まりは著しく、日本原子力研究開発機構における計算科学技術を活 用した研究開発の成果は、全体の約2割を占めており、大型計算機システムはこの計算科学 技術を支える重要なインフラとなっている。

平成 25 年度は、優先課題として位置付けられた福島復興(発電所の廃止措置・環境修復) に向けた研究開発や、高速増殖炉サイクル研究開発、核融合研究開発及び量子ビーム応用研 究開発等といった主要事業に大型計算機システムが利用された。本報告は、平成 25 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成果を中心に、それを支える利用支援、利 用実績、システムの概要等をまとめたものである。

原子力科学研究所:〒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 Supercomputer System of JAEA in FY2013 (April 1, 2013 – March 31, 2014)

Information Technology Systems' Management and Operating Office

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

(Received October 10, 2014)

Japan Atomic Energy Agency (JAEA) conducts research and development (R&D) in various fields related to nuclear power as a comprehensive institution of nuclear energy R&Ds, and utilizes computational science and technology in many activities.

About 20 percent of papers published by JAEA are concerned with R&D using computational science, the supercomputer system of JAEA has become an important infrastructure to support computational science and technology utilization.

In FY2013, the system was used not only for JAEA's major projects such as Fast Reactor Cycle System, Fusion R&D and Quantum Beam Science, but also for R&D aiming to restore Fukushima (nuclear plant decommissioning and environmental restoration) as a priority issue.

This report presents a great amount of R&D results accomplished by using the system in FY2013, as well as user support, operational records and overviews of the system, and so on.

Keywords: Supercomputer System, Computational Science and Engineering, Simulation, Numerical Analysis, Annual Report

	目、次	
1.	はじめに	1
2.	原子力機構の大型計算機システム環境	4
3.	平成 25 年度における計算機利用実績	6
	3.1 システム稼働率・利用率	6
	3.2 大型計算機システムの利用者数	9
	3.3 大型計算機システムの利用実績	. 10
	3.4 福島復興に係る対応での利用実績	11
4.	大型計算機システムの利用支援	. 12
	4.1 計算機利用における支援	. 13
	4.1.1 利用相談	. 13
	4.1.2 プログラム開発、移植、データの可視化(ソフトウェア開発整備)	. 13
	4.1.3 プログラム最適化チューニング	. 17
	4.1.4 計算機性能調査	. 19
	4.2 計算機利用技術の向上に向けた教育(講習会・セミナー)	. 22
5.	大型計算機システム利用による研究成果	. 23
	5.1 福島技術本部	. 23
	5.1.1 鉄パイプを用いた土壌深度分布測定システムに関する性能評価	. 23
	5.2 安全研究センター	. 26
	5.2.1 水蒸気の凝縮モデルを用いた熱流動解析	. 26
	5.2.2 格納容器内密度成層に関する CFD 解析	. 29
	5.2.3 回転液滴の変形挙動	. 31
	5.2.4 NOx ガス雰囲気下における四酸化ルテニウムからニトロシルルテニウム錯体	
	への生成経路に関する理論的研究	. 33
	5.2.5 熱流動解析による加圧熱衝撃に関する検討	. 36
	5.3 先端基礎研究センター	. 37
	5.3.1 大規模殻模型計算によるエキゾチック核構造の研究	. 37

5.4	1 原子	·力基礎工学研究部門	42
ł	5.4.1	X線分光法と計算科学による土壌中セシウムの評価	42
ł	5.4.2	局所域高分解能大気拡散予測システムの開発に向けて	45
ł	5.4.3	パルス中性子 CT 計算プログラム NIPPON の高度化	46
ł	5.4.4	欠陥挙動の力学と熱力学に関するマルチスケール解析	48
ł	5.4.5	界面追跡法に基づく二相流-構造連成解析手法開発	51
ł	5.4.6	シビアアクシデント時の熱流動解析手法開発	54
ł	5.4.7	過酷時及び定常時における炉心内非定常熱流動事象評価解析手法の開発	57
ł	5.4.8	原子炉過渡時における熱流動評価解析手法の開発	60
ł	5.4.9	PHITS のスレッド並列化及びメモリ使用方法の変更	63
ł	5.4.10	粒子・重イオン輸送計算コード PHITS の高度化に関する研究	65
ł	5.4.11	PHITS を用いた J-PARC TEF-T ターゲットアセンブリの照射損傷計算	68
ł	5.4.12	環境放射性核種からの外部被ばく線量換算係数の評価 (PHITS)	70
ł	5.4.13	水素含有高速炉模擬炉心の実験解析	72
ł	5.4.14	FCA-IX 炉心における反応率比に関する JENDL-4.0 を用いた実験解析	74
5.5	5 原子	カ水素・熱利用研究センター	76
ł	5.5.1	二重非均質効果を利用したクリーンバーン高温ガス炉の核設計	76
5.6	3 量子	- ビーム応用研究部門	80
ł	5.6.1	解離チャンネルを持つ分子の異性化の量子制御:2状態1次元モデルによる理	
		論的研究	80
ł	5.6.2	フェムト秒レーザーアブレーションの分子動力学シミュレーション	82
ł	5.6.3	レーザーを用いたプロトン生成の PIC シミュレーション	83
ł	5.6.4	レーザー場中にある固体電子ダイナミクスの第一原理計算シミュレーション	85
ł	5.6.5	放射線による DNA 損傷のシミュレーション研究	88
ł	5.6.6	物質における3次元構造生成シミュレーションプログラムの作成	91
ł	5.6.7	ヒトなど真核生物の核内DNA構造ダイナミクス解析のための大規模シミュ	
		レーション技術の開発とその実行	94
ł	5.6.8	セシウム選択的イオン吸着分子の計算機予測に基づく設計	97
ł	5.6.9	放射線影響異常分子の生体機能修復関連タンパク質による分子認識機構解析	98
ł	5.6.10	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1	101

5.7 核	融合研究開発部門
5.7.1	JT-60SA のダイバータ熱負荷のシミュレーション 104
5.7.2	JT-60SA における共鳴磁場摂動(RMP)印加による三次元磁場構造の解析 106
5.7.3	ITER 水平ポート EC ランチャーの核解析108
5.7.4	JT-60U トカマクにおける高エネルギー粒子の非線形シミュレーション111
5.7.5	電磁的ジャイロ運動論に基づく高ベータ乱流輸送研究114
5.7.6	ジャイロ運動論的多粒子種乱流シミュレーションによる粒子/熱輸送解析116
5.7.7	ITER/TBM 搬送時の運転停止後線量率解析118
5.7.8	大型原型炉におけるダイバータ・プラズマの SONIC シミュレーション120
5.7.9	ITER 中性子束モニタ用マイクロフィッションチェンバーの詳細設計のための
	核解析
5.7.10	ITER におけるアルフヴェーン固有モード中の高エネルギー粒子挙動解析コー
	ド開発126
5.7.11	MCNP コードを用いた ITER 水平ポートにおける計測装置の核解析 129
5.7.12	SlimCS を目指した低磁束消費での JT-60SA 電流立ち上げの検討132
5.7.13	微小球充填層内トリチウム流動コードの開発整備134
5.8 次	世代原子力システム研究開発部門137
5.8 次 5.8.1	世代原子力システム研究開発部門137 高速炉燃料集合体内詳細熱流動解析手法の開発整備137
5.8次 $5.8.1$ $5.8.2$	世代原子力システム研究開発部門
5.8次 $5.8.1$ 5.8.2	 世代原子力システム研究開発部門
5.8次 5.8.1 5.8.2 5.8.3	 世代原子カシステム研究開発部門
5.8次 5.8.1 5.8.2 5.8.3 5.8.4	 世代原子カシステム研究開発部門
5.8次 5.8.1 5.8.2 5.8.3 5.8.4 5.8.5	 世代原子カシステム研究開発部門
5.8次 5.8.1 5.8.2 5.8.3 5.8.4 5.8.5 5.8.6	 世代原子カシステム研究開発部門
5.8 $x5.8.15.8.25.8.35.8.45.8.55.8.65.8.7$	 世代原子カシステム研究開発部門
5.8次 5.8.1 5.8.2 5.8.3 5.8.4 5.8.5 5.8.6 5.8.7	 世代原子カシステム研究開発部門
5.8次 5.8.1 5.8.2 5.8.3 5.8.4 5.8.5 5.8.6 5.8.7 5.8.8	 世代原子カシステム研究開発部門
5.8次 5.8.1 5.8.2 5.8.3 5.8.3 5.8.4 5.8.5 5.8.6 5.8.7 5.8.8 5.8.8 5.8.9	 世代原子カシステム研究開発部門
5.8次 5.8.1 5.8.2 5.8.3 5.8.3 5.8.4 5.8.5 5.8.6 5.8.7 5.8.8 5.8.8 5.8.9	 世代原子カシステム研究開発部門 137 高速炉燃料集合体内詳細熱流動解析手法の開発整備 137 高速炉ガス巻込み現象を解析できる高精度気液二相流数値解析コードの開発 と検証 140 ナトリウム燃焼計算プログラムの機能高度化 143 ナトリウム冷却高速炉の高温側1次主冷却系統合解析モデルの整備 144 高速炉蒸気発生器内ナトリウムー水反応現象数値解析コードの高度化 147 高速炉蒸気発生器内ナトリウムー水反応現象数値解析コードの高速化 150 連続エネルギーモンテカルロコード MVP を使用した FBR 炉心のドップラ反 応度解析 152 U-RANS によるトリプルエルボ配管内流動のシミュレーション 154 高速炉炉心損傷事故時の燃料集合体内部ダクト壁の破損発生機構 157
5.8 次 5.8.1 5.8.2 5.8.3 5.8.3 5.8.4 5.8.5 5.8.6 5.8.7 5.8.8 5.8.9	 世代原子カシステム研究開発部門

5.10	原子力科学研究所	163
5.10	0.1 粒子線照射用汎用線量評価システムの改良	163
5.11	核燃料サイクル工学研究所	
5.11.	.1 高放射性廃液貯槽における熱流動解析	
5.11.	.2 核データライブラリの変換	167
5.12	J-PARC センター	168
5.12	A.1 J-PARC/MLF パルス中性子イメージング装置の遮蔽性能評価	168
5.12	2.2 DCHAIN-SP 2001 計算結果に基づく線量率分布の改良	
5.13	大洗研究開発センター	
5.13	1 FLUENT:福島原発汚染水処理関連の解析	
5.14	敦賀本部	
5.14	.1 強磁性蒸気発生器伝熱管の渦電流探傷検査のための3次元有限要素シミ	ュレ
	ーション	176
5.14	2 もんじゅ熱流動機器の自然循環冷却挙動の解析	179
5.14	3 SPLICE コードによるレーザー溶断挙動の数値解析	
5.15		
5.15	5.1 CsI 分子と Cs 原子の Cs 交換反応の埋論計算による考察	
5 16	システム計算科学センター	187
5 16	31 固有値問題ソルバ「Sakurai-Sugiura」法の超伝導体への適用と大規模	並列計
0.10	第手法の開発	
5.16	.2 環境中の放射性物質の挙動に関する数値シミュレーション	
5.16	 .3 第一原理計算による原子力材料劣化機構の研究 	
5.16	.4 ネットワーク構造を考慮した量子シミュレーションコードの並列化	
5.16	3.5 超伝導及び絶縁体における多軌道効果	
5.16	6.6 層状銅酸化物高温超伝導体からのテラヘルツ発振に関する3次元マルチ	・スケ
	ールシミュレーション	200
5.16	5.7 第一原理計算による核燃料及び機能材料の物性評価	203

5.16.8	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
5.16.9	六方晶軽合金における転位と溶質元素の第一原理計算210
5.16.10	照射材料の微細構造発達シミュレーションのための第一原理計算
5.16.11	アクチノイド化合物の多様な基底状態の第一原理計算による研究 214
5.16.12	GT5D コードによるプラズマ乱流輸送研究216
5.16.13	粒子ベースボリュームレンダリングによる大規模データの遠隔可視化219
5.16.14	大規模データ可視化システムの構築
5.16.15	原子力プラントのための3次元仮想振動台の構築225
5.16.16	観測地震波を用いた原子力格納容器内機器の地震応答解析
5.16.17	冷却設備配管系構造の3次元仮想振動台用解析データの組上げ229
5.16.18	並列版電磁波シミュレーション・プログラムの性能向上
5.16.19	原子力施設の耐震シミュレーションの開発

6.	おわり	التــــــــــــــــــــــــــــــــــــ	236
付	録		:37
著者	名別	論文索引2	239

Contents

1.	Introduc	tion	1
2.	Supercor	nputer System of JAEA	4
3.	Compute	r Usage Records in FY2013	6
	3.1 Ava	ailability and Utilization Rate	6
	3.2 Nu	mber of Users	9
	3.3 Co	mputer Time	. 10
	3.4 Tin	ne used for the Issue of Fukushima Restoration	11
4.	User Supp	ort of Supercomputer System of JAEA	12
	4.1 Suj	oport for the Use of Supercomputer System of JAEA	. 13
	4.1.1	Help Desk	. 13
	4.1.2	Program Development, Porting, Data Visualization (Software Development	
		and Maintenance)	. 13
	4.1.3	Program Optimization Tuning	. 17
	4.1.4	Computer Performance Investigation	. 19
	4.2 Tra	ining for Computer Usage Techniques (Tutorials, Seminars)	. 22
5.	Research	and Development Activity by using Supercomputer System of JAEA	. 23
	5.1 He	adquarters of Fukushima Partnership Operations	. 23
	5.1.1	Study on Measurement System for Depth Profile Investigation by Steel	
		Pipe Method	. 23
	5.2 Nu	clear Safety Research Center	. 26
	5.2.1	Numerical Simulation of Thermal Flow with Steam Condensation Model	. 26
	5.2.2	CFD Analysis on Density Stratification in a Containment Vessel	. 29
	5.2.3	Shape Variation of a Rotating Liquid Droplet	. 31
	5.2.4	A Theoretical Study on the Reaction Pathway to Yield Nitrosyl Nitrate	
		Ruthenium Complex from Gaseous Ruthenium Tetraoxide in NO_X (X=1,2)	
		Gas Atmosphere	. 33
	5.2.5	Study on the Pressurization Thermal Shock Events Based on	
		Thermal-Hydraulics Analysis	. 36

JAEA-Review 2014-043

5.3	Adv	vanced Science Research Center	37
5.3	3.1	Structure of Exotic Nuclei Studied with Large-scale Shell-model	
		Calculations	37
5.3	3.2	Research for Ground State and Excitation Dynamics in Low-dimensional	
		Strongly Correlated Systems	39
5.4	Nu	clear Science and Engineering Directorate	42
5 .4	4.1	Evaluation of Cs in Soil using X-Ray Spectroscopy and DFT Calculation	42
5 .4	4.2	Towards Development of Local-scale Atmospheric Dispersion Prediction	
		System	45
5 .4	1.3	Improvement of Computed Tomography Software for Pulsed Neutron	
		Imaging	46
5 .4	1.4	Multiscale Simulations of Defect Mechanics and Thermodynamics	48
5 .4	4.5	Development of Two-Phase Flow-structure Coupled Analysis Method based	
		on Interface Tracking Method	51
5 .4	4.6	Development of Numerical Method for Thermal-hydraulics in Severe	
		Accident	54
5 .4	1.7	Development of Unsteady Thermal Hydraulic Simulation Method for	
		Inside a Reactor Core	57
5 .4	1.8	Development of Thermal-hydraulic Analysis Methods in Nuclear Reactors	
		at Transient Events	60
5 .4	1.9	Improvement of PHITS in Terms of Thread Parallelization and Memory	
		Usage	63
5 .4	4.10	Development of Particle and Heavy Ion Transport Code System PHITS	65
5 .4	4.11	Displacement Damage Calculation for Target Assembly in J-PARC TEF-T	
		using PHITS Code	68
5 .4	4.12	Evaluation of Dose-conversion Coefficients for External Exposure to	
		Radionuclides Distributed in Environment (PHITS)	70
5 .4	4.13	Experimental Analysis of Fast Reactor Core with Hydrogenous Material	72
5.4	4.14	Experimental Analyses of Reaction Rate Ratios of FCA-IX Cores by using	
		JENDL-4.0	74
5.5	Nu	clear Hydrogen and Heat Application Research Center	76
5.5	5.1	Nuclear Design of Clean Burn HTGR with Utilization of Double	
		Heterogeneous Effect	76

5.6	Qu	antum Beam Science Directorate	80
5	.6.1	Quantum Control of Molecular Isomerization Competing with a	
		Dissociation Channel: a Theoretical Study based on a Two-state	
		One-dimensional Model	80
5	.6.2	Molecular Dynamics Simulation of Femtosecond Laser Ablation	82
5	.6.3	PIC Simulation of Proton Acceleration by a Laser Pulse	83
5	.6.4	First-principle Calculation for the Electron Dynamics in a Bulk Crystal	
		under an Intense Laser Field	85
5	.6.5	Simulation Study for DNA Damage due to Radiation	88
5	.6.6	Simulation Program for 3 Dimensional Structure Generation in Materials	91
5	.6.7	Development of Large Scale-molecular Simulation Method for Analyzing	
		DNA Dynamics in Nucleus and its Application	94
5	.6.8	Computational Design of Caesium-ion Selective Binding Protein	97
5	.6.9	Analysis of Molecular Recognition Mechanism of Biomolecular Function	
		Repair Related Proteins for Radiation-damaged Molecules	98
5	.6.10	First Principles Molecular Dynamics Simulations of Chemical Reactions 1	01
57	Fu	aion Research and Development Directorate	04
5.7	7 1	Simulation Study of Host Load in IT-60SA Divortor	04
5	79	Analysis of 3D Magnetic Field Structure by RMP on JT-60SA	04
5	7.3	Nuclear Analysis of ITER Equatorial EC Launcher	00
5	74	Nonlinear Simulation of Energetic Particle Modes in JT-60U Tokamak	11
5	7.5	High-Beta Plasma Turbulence based on Electromagnetic Gyrokinetics	14
5	7.6	Turbulent Transport Analyses using Multi-species Gyrokinetic Simulations	
0		1 1	16
5	.7.7	Shutdown Dose Rate Analysis in Transportation of ITER/TBM	.18
5	.7.8	SONIC Code Simulation of Divertor Plasma in Larger DEMO Reactor 1	20
5	.7.9	Neuronic Analysis for Detail Design of the Microfission Chamber for ITER	
		Neutron Flux Monitor	23
5	.7.10	Development of a Simulation Code to Analyze Fast-Ion Confinement in	
		Alfven Eigen Modes for ITER	26
5	.7.11	Nuclear Analysis for Diagnostic System in ITER EQ Port with MCNP 1	29
5	.7.12	A study of Plasma Current Ramp up on JT-60SA under Low Flux	
		Consumption Aiming at SlimCS	32
5	.7.13	Development of Fluid Analysis Code of Tritium Transport in Pebble Bed 1	34

JAEA-Review 2014-043

5.8 Ad	lvanced Nuclear System Research and Development Directorate	137
5.8.1	Development of a Numerical Simulation Program for Detailed Thermal	
	Hydraulics in a Fast Reactor Fuel Assembly	137
5.8.2	Development and Validation of High-precision Numerical Simulation Co	de
	for Evaluation of Gas Entrainment in Fast Reactor	140
5.8.3	Enhancement of Simulation Capability for Sodium Fire Analysis Code	143
5.8.4	Development of Integrated Numerical Analysis Model for Unsteady	
	Phenomena in Upper Plenum and Hot-leg Piping System of JSFR	144
5.8.5	Advancement of a Computer Program for Sodium-water Reaction	
	Phenomena in a Steam Generator of Fast Reactors	147
5.8.6	Advancement of Computing Speed for Sodium-water Reaction Phenomen	na
	in a Steam Generator of Fast Reactors	150
5.8.7	Calculation of FBR Core Doppler Reactivity by Continuous Energy	
	Monte-Carlo Code MVP	152
5.8.8	U-RANS Simulation of Unsteady Triple-elbow Pipe Flow	154
5.8.9	Mechanism of Inner Duct Wall Failure within Fuel Subassembly during	
	Core Disruptive Accidents in an LMFBR	157
5.9 Se	ctor of Decommissioning and Radioactive Waste Management	160
5.9.1	Acceleration and Parallelization of the Computer Program (Dtransu $3D$ \cdot	
	EL) for Analyzing 3D Saturated-unsaturated Groundwater Flow and	
	Advection-dispersion Model	160
5.10 Nu	aclear Science Research Institute	163
5.10.1	Improvement of JAEA Computational Dosimetry System for Particle-bea	am
	Radiation Therapy	163
F 11 NT	aclear Fuel Cycle Engineering Laboratories	165
5.11 Ni		
5.11 Ni 5.11.1	Thermal Fluid Analysis of High Radioactive Waste Tank	165

5.12	J-P/	ARC Center	168
5.12	.1	Evaluation of Radiation Shielding of Pulsed Neutron Imaging System at	
		J-PARC MLF	168

5.12.2	Addition of Calculation Function of Dose Rate Distribution to DCHAIN-SP
	2001
5.13 Oai	rai Research and Development Center
5.13.1	FLUENT : Analysis Relevant to Contaminated Water Treatment System of
	Fukushima Daiichi NPS
5.14 Tsu	ruga Head Office176
5.14.1	Simulations of the In-service Inspection of Monju and JSFR SG Tubes
	using Eddy Currents
5.14.2	Thermal-hydraulics Analyses of Instruments of Monju 179
5.14.3	Numerical Simulation of Laser Cutting Phenomena with the SPLICE Code
5.15 Kai	nsai Photon Science Institute
5.15.1	Theoretical Investigation of the Cs Exchange Reaction Between CsI and Cs $$
	Atom
5.16 Cer	nter for Computational Science & e-Systems
5.16.1	Simulation in Superconductors with the Sakurai-sugiura Method 187
5.16.2	Numerical Simulation of Radioactive Materials in Environment 190
5.16.3	First-principles Study on the Degradation of Nuclear Materials 193
5.16.4	Parallelization Strategy for Quantum Simulation Code in Consideration of
	Network Architecture
5.16.5	Multi-orbital Effect for Insulator and Superconducting State 198
5.16.6	Full 3D Multi-scale Simulations of Terahertz Emissions from Intrinsic
	Josephson Junction Stacks
5.16.7	First-principles Study on Physical Properties of Nuclear Fuels and
	Functional Materials
5.16.8	Framework Construction of Multi-scale & Multi-physics Simulations for
	Application of Superconductivity
5.16.9	First-principles Calculation of Interaction between Solute Element and
	Dislocation in Hexagonal Close Packed Metal
5.16.10	Ab Initio Calculations for Microstructural Evolution of Irradiated
	Materials

5.16.11	First-principles Study for Variety of Ground States of F-electron
	Compounds
5.16.12	Study of Plasma Turbulent Transport using GT5D Code
5.16.13	Remote Visualization Processing using Particle-based Volume Rendering 219
5.16.14	A Visualization System for Large-scale Datasets
5.16.15	Three-dimensional Vibration Simulator for Nuclear Power Plant
5.16.16	Seismic Response Analysis of Nuclear Containment Vessel Equipment
	using the Observed Seismic Waves
5.16.17	Assembly of Cooling Equipment and Piping Structures for
	Three-dimensional Vibration Simulator
5.16.18	Performance Improvement of the Parallelized Electromagnetic Simulation
	Program
5.16.19	Development of a Seismic Simulation for an Entire Nuclear Plant

6.	Conclusion	236
Ap	pendices	237
Au	thor Name Index	239

This is a blank page.

1. はじめに

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 重要な研究手法となっている。日本原子力研究開発機構(以下「原子力機構」)においても、多く の研究開発に計算科学技術が用いられており、特に大型計算機システムは研究開発の推進に不可 欠なものとなっている。

原子力機構の研究開発における計算科学技術の重要性は、発表論文数において明らかである(図 1.1)。平成 25 年度、原子力機構の発表した査読付論文の総数は 1,360 件、このうち計算科学技術 を利用した論文は、245 件(18.0%)である。平成 25 年度は、原子力機構全体の論文数が伸び、 割合としては 20%を下回ったものの、絶対数ではここ数年 250 件程度をコンスタントに創出して おり、原子力機構の研究成果に対する計算科学技術の貢献度の高さを如実に示している。



図 1.1 計算科学技術による研究成果創出貢献度 [平成 17~25 年度] (原子力機構が発表した査読付き論文における計算科学技術を活用した論文の割合)



図 1.2 部門別計算科学技術による研究成果創出貢献度 [平成 17 年度~25 年度]

٥

全25件

全35件

全36件

全49件

H17年度 H18年度 H19年度 H20年度 H21年度 H22年度 H23年度 H24年度 H25年度

全46件

全45件

全58件

全35件

全43件

部門別では、大型計算機システムのコア利用時間が多い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及びシステム 計算科学センター)において、総じて計算科学技術を活用した論文の割合が高く、全体の成果の 1/3以上を創出している部門もあり、大型計算機システムを利用した研究開発が広く展開されてい る(図 1.2)。

本報告は、原子力機構における平成25年度の大型計算機システムを利用した研究成果をまとめたものであり、2章に原子力機構の大型計算機システムの概要を、3章に大型計算機システムの利用支援について示す。さらに、5章では、原子力機構の大型計算機システムが具体的にどのような研究開発に利用され、どのような成果を創出しているのかを示す。

2. 原子力機構の大型計算機システム環境

平成 22 年 3 月 1 日より運用を開始した大型計算機システム(原子力機構スーパーコンピュー タシステム)は、大規模シミュレーション計算処理を行うための BX900(大規模並列演算部)を 中核とし、国の施策である京コンピュータを積極的に活用するためのアプリケーション開発用と して FX1(次世代コード開発部)、及び周辺機器から構成される。システムの構成を図 2.1 に、主 な仕様を表 2.1 に示す。



図 2.1 原子力機構スーパーコンピュータシステムの構成

表 2.1	原子力機構スーパーコンピュータシステムの主な仕様
-------	--------------------------

	大規模並列演算部 BX900	次世代コード開発部 FX1
タイプ	スカラ	スカラ
総演算性能 (TFLOPS)	200	12
コア数	17,072	1,200
ノード数	2,134	300
CPU	Xeon X5570 4 コア/CPU	SPARC64 VII $4 \exists \mathcal{T} / CPU$
メモリ (GB/ノード)	24	16
総主記憶容量 (TB)	50	4.6
ノード間 通信性能	片方向 8GB/s(全二重)	片方向 2GB/s(全二重)
OS	Rad Hat Enterprise Linux 5	Open Solaris Solaris 10
コンパイラ	Fortran C/C++	Fortran C/C++

平成26年3月末現在

3. 平成 25 年度における計算機利用実績

3.1 システム稼働率・利用率

原子力機構スーパーコンピュータシステムの中核をなす BX900 は、システム停止を伴うトラブ ルの発生は一度もなく、安定に稼働しており、年間の稼働率としては 97%を達成した。残りの 3% はシステムの保守作業(4月、8月、12月)及び原子力科学研究所(以下「原科研」)全域停電(8 月、12月)による運転停止である(図 3.1:折れ線グラフ)。また、月間のコア利用率は、利用者 の旺盛な計算需要及び情報システム管理室で実施してきたジョブスケジューラの改良や利用者プ ログラムの高速化等のシステムの効率的利用促進策により、年間を通して 90%を超える高率で推 移している(図 3.1:棒グラフ、詳細な利用実績は付録 A に示す)。



図 3.1 BX900 の稼働率・利用率

FX1 においては、BX900 と同様に、システム停止を伴うトラブルの発生は一度もなく、安定に 稼働しており、年間の稼働率は 97%を達成している。また、コア利用率は 90%の高率を維持して いる。FX1 は、引き続き、本格運用(平成 24 年 9 月)を開始した京コンピュータを利用する先 導的なアプリケーションの開発・検証用として活用されている。

BX900における平成 22 年度から平成 25 年度までの稼働率・コア利用率を図 3.2 に示す。

稼働率

平成 22 年度は、システムチューニング (ノード間通信経路のパラメータ調整など) によるシステム保守が発生したため、年間 の稼働率は 90%にとどまった。平成 23 年 度は、震災の影響を受けた施設等復旧作業 に伴う原科研全域停電による運転停止を除 いて、大きなトラブル等の発生はなく、年 間の稼働率は 96%を達成した。平成 24 年 度は、これまでの運用経験を活かしたシス テムの予防保守対策(ノード間のシンボル エラー監視とリブート対策、I/O ノードのメ モリ監視とサーバキャシュの縮小対策)を 実施し、年間の稼働率は98%を達成した。 平成25年度は、年間計画の保守・点検作業 以外に、品質の低い磁気ディスクの予防交 換作業や変電所の改修工事に伴う原科研全 域停電による運転停止があったため、年間 の稼働率は昨年度よりも下がったものの、 97%の高率を維持した(図 3.2:折れ線グラ フ)。



図 3.2 BX900 の稼働率・利用率(4年間)

② コア利用率

原子力機構の計算需要(大口利用課題申請で募集枠の約2倍)は莫大であり、BX900の効率的 利用の推進は重要課題である。BX900では、複数のユーザが実行する並列度の異なる様々なジョ ブを効率的に処理するためにジョブスケジューラを使用している。一般的なジョブスケジューラ では、投入されたジョブを投入順に処理するため、順番待ちの先頭のジョブが必要とするコア数 を確保できないと、以降のジョブは全て実行を待たされる。実行待ちの間、利用されていないコ ア(空きコア)が発生しても、先頭ジョブの必要とするコア数が確保できない限り、これらの空 きコアは利用されないままとなる。このため、一般的なジョブスケジューラにおけるコア利用率 は70%程度が限界である。

情報システム管理室では、当初導入された一般的なジョブスケジューラを改良し、大規模並列 ジョブ(最大実行時間:24時間)が実行前に待つ間の空きコアを用いて、短時間(最大実行時間: 12時間、6時間)で終了する小規模並列ジョブを先に実行する機能(バックフィル機能)を実装 した(平成22年5月)。その後も、ジョブスケジューラの最適化に取り組み、表3.1に示すよう な機能改善を継続的に実施してきた。

これらの対策(表 3.1 の 2~4)が奏功し、コア利用率は、概ね年間 90%と極めて高い利用率の 維持が可能となったが、ジョブスケジューラの機能だけで 90%を超えることは難しい。このため、

表 3.1 バックフィル機能の改善

	対策日	対策内容
1	平成 22 年 5 月	バックフィル機能の導入(BX900、FX1)
2	平成 22 年 7月	ー般キュー(コア利用時間の積算対象)の小中規模ジョブ(256 コア以下) に加え、大規模ジョブ(2,048 コア以下)もバックフィルする機能を追加
3	平成 23 年 7月	ー般キューのジョブがない場合、空き待ちキュー(コア利用時間の積算対 象外)の待機ジョブをバックフィルする機能を追加
4	平成 23 年 9 月	大規模ジョブ(4,096 コア)がない場合、24 時間以内で終了する一般キュ ーのジョブを一括にバックフィルする機能を追加
5	平成 24 年 10 月	ユーザがジョブの要求時間を正確に指定するため、ユーザ毎に過去の実績 からジョブの要求時間と実行時間を表示するコマンド「jelapse」を提供
6	平成 25 年 4 月	 バックフィル機能をより効果的に活用するため、ジョブの要求時間を正確に指定することで、ユーザのジョブ実行優先度が高くなる機能を追加 順番待ちのジョブの実行順序を入れ替えてバックフィルする機能を追加(順番待ちの先頭のジョブが空きコアを確保できない場合、2番目以降のジョブを実行)

平成24年度は、ユーザ毎のジョブ実行状況に着目し、ジョブの特性に合わせた改善を検討した。 ユーザ毎のジョブ実行状況を詳細に分析した結果、多くのユーザはジョブ毎の要求時間(ユーザ が指定するもので、ジョブ実行に必要と考える時間)に対して、実行時間(実際にジョブ実行で 使われた時間)が短いことが判明し、ユーザがこの要求時間を正確に指定していれば、バックフ ィルされたと考えられるジョブを複数確認した。即ち、ユーザがジョブ投入時に要求時間を正確 に指定することで、大規模並列ジョブの実行直前までの間に処理できるバックフィル対象ジョブ が多くなり、空きコアを有効活用できる。そこで、ユーザにジョブ投入時の適切な要求時間の設 定を定着させるべく、ユーザへの啓蒙活動を実施するとともに、ユーザの過去120時間の間に終 了したジョブの要求時間と実行時間を表示するコマンドを提供した(表 3.1 の 5)。

コマンド提供後の半年で、ジョブ毎の要求時間に対する実行時間の割合は、平均値で10%向上 (36%から46%) したものの、まだ改善の余地があることから、平成25年度、適切な要求時間 を指定しているユーザのジョブ実行が優先される機能を追加した。併せて、空きコアをより効果 的に活用するため、順番待ちのジョブの実行順序を入れ替えてバックフィルする機能を追加した。 (表 3.1 の 6)。これらの対策で、空きコア資源を最大限有効に活用できるようになり、平成24 年度に比べ4% (8TFLOPS分に相当)向上し、平成25年度のコア利用率は年間94%を達成した (図 3.2:棒グラフ)。このように数々の取り組みにより、原子力機構のコア利用率は、他の独法 や大学等の利用率と比較しても、トップクラスの利用率となっている(表 3.2)。

コア 利用率	機 関 (システム演算性能:TFLOPS)			
90%~	日本原子力研究開発機構(200) 宇宙航空研究開発機構(120) 理化学研究所(96)	 出典 「今後の HPCI 計画推進の在り方に関する 検討ワーキンググループ」 (1) 第9回(H24.11.21) 参考資料1「附 		
80%~	理化学研究所「京」(10000) 海洋研究開発機構(131) 岡崎共通研究施設(127)	置研、共同利用機関、独立行政法人 におけるスーパーコンピュータの 計算資源量と稼働率」		
70%~	京都大学(550)	(2) 第 11 回(H25.1.25) 参考資料 2 「9		
60%~	東京大学(1329) 北海道大学(172) 筑波大学(95+GPU)	大学情報基盤センター及び「京」の 概要」 出典 「HPCI 計画推進委員会」		
50%~	東京工業大学(2400) 九州大学(717)	(1) 第 16 回(H25.12.26) 資料 1-1 「京 の運用状況について」		

表 3.2 主な独法、大学等におけるシステム利用率

3.2 大型計算機システムの利用者数

平成 25 年度の BX900 (FX1 含む)の利用者数は 438 名である(周辺機器の利用者を含めると 448 名。システムの運用要員を除く)。昨年度に比べ、主に福島復興に係る利用者等が増えたこと で、原子力基礎工学研究部門、システム計算科学センター、原科研(福島技術開発特別チーム及



図 3.3 BX900 (FX1 含む)の部門別利用者数

び福島技術開発試験部)及び、安全性研究センター等合わせて 41 名(約 10%)増加しており、 研究開発における計算科学技術活用が拡大している(図 3.3)。部門別利用者数においては、核融 合研究開発部門、原子力基礎工学研究部門、システム計算科学センターの 3 つの部門が大きな割 合を占めており、次に原科研、次世代原子力システム研究開発部門及び安全性研究センターと続 いている。その他では量子ビーム応用研究部門、J-PARC センター、原子力水素・熱利用研究セ ンター、先端基礎研究センターなど広範な部署によって大型計算機システム(BX900、FX1)が 利用されている。

3.3 大型計算機システムの利用実績

平成 25 年度は、4 月からの累積で 13,593 万コア時間が利用された。分野別では、図 3.4 に示 すように量子ビーム、計算科学、福島復興、原子力基礎工の 4 分野が大きな割合を占めている。 特に福島復興の利用時間が昨年度に比べ約 1.8 倍(昨年度:1,305 万コア時間)も拡大している。 続いて、次世代、核融合、FBR プラント、先端基礎、安全研究、J-PARC など多分野に分布して いる。



図 3.4 平成 25 年度分野別コア時間利用実績

3.4 福島復興に係る対応での利用実績

平成25年度は、昨年度に引き続き、大型計算機システムを利用して福島復興に係る対応を行う 利用者も多く、除染メカニズムの解明や事故解析などにおいても成果をあげた。本報告に集録し た福島復興に係る対応の一覧を表3.3に示す。

表 3.3	主な大型計算機システムを利用した福島復興に係る対応

	計算内容	部門	プログラム 名 最大並列数	利用時間 (コア時間 単位 : 万)	関連する 成果報告
1	X線分光法と計算科学による土壌中セシウムの評価	原子力基礎工学研 究部門	VASP 128	28.0	5.4.1 項
2	界面追跡法に基づく二相流- 構造連成解析手法開発	原子力基礎工学研 究部門	TPFIT 4,,096	123.5	5.4.5 項
3	シビアアクシデント時の熱 流動解析手法開発	原子力基礎工学研 究部門	ACE-3D 2,000	424.2	5.4.6 項
4	過酷時及び定常時における 炉心内非定常熱流動事象評 価解析手法の開発	原子力基礎工学研 究部門	ACE-3D 他 2,000	74.8	5.4.7 項
5	環境放射性核種からの外部 被ばく線量換算係数の評価	原子力基礎工学研 究部門	PHITS 256	7.4	5.4.12 項
6	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	量子ビーム応用研 究部門	CPMD 1,024	250.4	5.6.10 項
7	福島原発汚染水処理関連の 解析	大洗研究開発セン ター	FLUENT 4	1.7	5.13.1 項
8	環境中の放射性物質の挙動 に関する数値シミュレーシ ョン		VASP 512	1,410.4	5.16.2 項
9	第一原理計算による核燃料 及び機能材料の物性評価	システム計算科学 センター	VASP 512	67.8	5.16.7 項

4. 大型計算機システムの利用支援

大型計算機システムを利用した成果の着実な創出には、研究者における創意工夫によるところ が第一ではあるが、システムを運用管理する部門における利用者への充実した支援体制の確立も また欠かせない。大型計算機システムは、大規模かつ複雑なシステム(ハードウェア、ソフトウ ェア)の組み合わせにより成り立っており、支援体制が整っていて初めて、大型計算機システム を使いこなすことが可能になる。

大型計算機システムを有する国内の一般的な機関においては、利用者に対する相談窓口を設置 し、システムの利用方法を中心とした相談対応のみを実施しているところが多い。プログラム自 体の開発や改良が利用者任せになると、利用者の多くはプログラミングの専門家ではないため、 これらに多大な時間を費やすことになり、本来の研究の効率的な推進の妨げになる。また、シス テムの運用管理面からは、利用率と利用効率の低下を招くことになる。

原子力機構では、専門スタッフによる階層的な利用支援体制を整備することにより、初歩的な 大型計算機システムの利用相談から、高度な技術を要するプログラムの開発や改良(最適化)に 至るまでをカバーするとともに、大型計算機システムの利用技術の習得・向上を目的とする講習 会・セミナー開催などの教育を実施することにより、利用者の研究活動を計算機利用技術の向上 と利用効率化の両面から体系的に支援している(図 4.1)。この利用支援への取り組みは、3章に 示したように、大型計算機システムの利用者の拡大、利用促進に寄与している。



図 4.1 利用支援体制

4.1 計算機利用における支援

4.1.1 利用相談

利用相談では、1)計算機全般の利用に関する相談対応、2)大型計算機システムの効果的利用 についてのコンサルティング(可視化の技術支援を含む)、3)大型計算機システム利用に関する 有用な情報(ツール類を含む)やソフトウェア等のマニュアルの提供、を行っている。

平成 25 年度の利用相談は、年間 857 件(月平均:約71件)寄せられ、そのうち約 58%が大型 計算機システム(BX900:478件、FX1:17件)、約 17%が可視化(BX900可視化相談・技術支 援:107件、可視化ソフトウェアのインストール支援:35件)の利用(昨年度の2倍)に関する ものである。導入4年目を迎えた大型計算機システムの相談件数は、昨年度と同様の1.06倍(42 件増)であった。(詳細は付録 B に示す)。

4.1.2 プログラム開発、移植、データの可視化(ソフトウェア開発整備)

ソフトウェア開発整備は、利用者に代わって専門スタッフにより効率的にプログラム開発を行 うもので、原子力機構内各部門で共通に使用される原子力プログラム、大型計算機システムの先 端的利用(可視化を含む)を促進する新規ソフトウェアの作成及び、既存ソフトウェアの整備・ 改良を行っている。

また、計算機性能の飛躍的向上に伴い、シミュレーション計算結果のデータも莫大なものにな っており、これら計算結果の理解には可視化が欠かせない。データの可視化に対するソフトウェ ア開発整備も利用支援の重要な構成要素の一つである。

ソフトウェア開発整備は、毎年原子力機構内に募集をかけており、平成25年度は16件、作業 工数として85人月の申込があった。申込作業工数は、受け入れ可能工数の1.77倍となり、作業 内容等を精査の上、10件のソフトウェア開発整備作業を採択・実施した。平成25年度の作業に ついて表4.1に示す。

平成 25 年度は、J-PARC 物質・生命科学実験施設の中性子による放射化等を高精度で予測し、 実験計画や安全対策に役立てる目的とした DCHAIN-SP コードや、核融合炉固体増殖水冷却方式 ブランケットの増殖材微小球充填体内におけるヘリウムパージガスの流れ場を再現する数値シミ ュレーションコードの開発整備などを行った。また、可視化プログラム開発に関しては、加速器 BNCT プロジェクトにおける生体内線量計測技術の高度化に係る対応として、人体のほぼ全身の 医療画像スライスデータ(CT、MRI)を可視化処理するプログラム開発などを実施した。

表 4.1	平成 25 年度ソフ	トウェア開発整備作	F業(1/3)
-------	------------	-----------	---------

	作業件名	作業概要 及び 結果	関連する 成果報告
1	(継続) パルス中性子 CT 計 算プログラム NIPPON の高度化	中性子 CT 計算プログラム NIPPON に係るソフトウェア 開発の一環として、J-PARC で生成されるパルス中性子に よる 2 次元 CT データを用いた 3 次元可視化を実施した。 2 次元 CT データから 3 次元 CT データを得るには、試料 を中性子ビームに対して回転させ、その回転角度毎(ス テップ)の 2 次元 CT データから高精度の 3 次元 CT デ ータに再構成する必要がある。そこで、新たに圧縮セ ンシング法の一つである Total Variation (TV) 法を用 いた画像の先鋭化プログラムの開発を行い、NIPPON に 実装した。これにより、少ないステップ数の 2 次元 CT データから実験の成否が効率よく判断できる見通 しが得られた。	5.4.3 項
2	 (新規) 粒子法コードによる 解析結果の可視化手 法開発 	福島第一原子力発電所おける炉心構造物の溶融過程を把 握する粒子法解析コード POPCORN の開発を進めてい る。将来的な大規模データの可視化に備え、大量の粒子を 高速に処理できる可視化手段について、AVS/Express 、 EnSight 及び、PBVR(粒子ベースボリュームレンダリ ング)の使用を検討した。これにより、現有の 30 万粒 子程度のデータに対しては、AVS/Express でも十分に 有効な表示手法が開発できることが確認できた。PBVR は高速に可視化できる反面、実行パーラメータを直接指 定する必要があり、導入にあたってはユーザが簡便に使 用できるようなツール類の整備が必要となるなど、今後 の1億以上の粒子データにおける可視化の課題が明らか となった。	5.4.6 項
3	(継続) 原子炉過渡時におけ る熱流動評価解析手 法の開発 1,2	シビアアクシデントによる過酷事象を含めた過渡時の炉 心内熱流動挙動を高精度で予測する解析手法確立のた め、汎用流体解析コード FLUENT、流体解析コード FrontFlow/Red 及び、二相流解析コード ACE-3D を使用 し、以下の3つのモデル作成と評価解析を実施した。 ① 原子炉燃料集合体内サブチャンネルを簡略模擬した 円管流路体系	5.4.8 項

表 4.1	平成 25 年度ソフ	トウェ	ア開発整備作業	(2/3)
-------	------------	-----	---------	-------

	作業件名	作業概要 及び 結果	関連する 成果報告
		 ② サブチャンネル内に設置されるスペーサ形状を簡略 模擬した複雑流路体系 ③ 燃料集合体を簡略模擬したバンドル体系 これにより、温度や圧力の影響で流体物性値が急変する 過渡条件に対しても開発中の手法は対応できる見通しを 得た。この成果は、日本機械学会第26回計算力学講演 会で発表した。 	
4	 (継続) 物質における3次元 構造生成シミュレー ションプログラムの 作成 	3 次元高分子系の粘弾性モデルにおいてネットワーク構 造形成をシミュレートするプログラム及び、3 次元磁性 体における磁区構造形成をシミュレートするプログラム を開発した。可視化には汎用可視化ソフトウェア (Micro AVS)を利用した。これにより、3 次元的な複 雑なパターン形成が動的に行われる過程を明らかにし て、高分子系や磁性体などにおける構造と機能に関する 基礎的な知見が得られるようになった。	5.6.6 項
5	(継続) 微小球充填体内トリ チウム流動コードの 開発整備	増殖材微小球充填体内におけるヘリウムパージガスの流 れ場を再現するため、汎用流体解析コード FLUENT を 用いて、以下の3つのモデル作成と評価解析を実施した。 ① 充填体をランダム充填したパターン ② 充填体を最密充填したパターン ③ 充填体を最密充填したパターン これにより、トリチウムの拡散と充填体内流体中物質輸 送が再現でき、実験で得られた実現象との整合性の確認 ができる見通しを得た。この成果は、日本機械学会第 26 回計算力学講演会で発表した。	5.7.13 項
6	(新規)ナトリウム燃焼計算プログラムの機能高度化	高速炉プラント建物内ナトリウム漏えい燃焼影響解析コ ード SPHINCS の開発の一環として、PC から大型計算 機(BX900) への移植とリスタート計算機能の追加を実 施した。典型的なナトリウム燃焼問題を対象としてリス タート機能を用いた計算を実施し、PC 環境下での解析 結果と BX900 で同等の結果が得られることを確認し た。これにより、プラント安全性検討評価作業の効率化 及び、多様な事象の解析が可能となった。	5.8.3 項

表 4.1	平成 25	年度ソフ	トウェ	ア開発整備作業	(3/3)
-------	-------	------	-----	---------	-------

	作業件名	作業概要 及び 結果	関連する 成果報告
7	(継続) 高速炉蒸気発生器熱 流動コードの評価手 法開発	高速炉蒸気発生器の設計及び、安全評価に適用すること を目的として、SERAPHIM コードとTACT コードの開 発を進めている。当該コードの検証では、液体中気体噴 出現象や円筒周りの流動現象のモデル作成と解析を実施 して、検証用データ(実験結果)と比較し、再現性、解 析精度の評価を行った。これにより、当該コードのモデ ルパラメータ感度や現象の再現性能等の向上が得られ、 高速炉蒸気発生器の安全評価を数値解析で行うことがで きる見通しを得た。	5.8.6 項
8	(継続) 粒子線照射用汎用線 量評価システムの改 良	次世代がん治療(BNCT)の開発・実用化 プロジェクト の一環として、粒子線照射用線量評価システム (JCDS-PRT)の開発を進めている。JCDS-PRTでは、 人体全身の医療画像スライスデータ(CT、MRI)を用い るため、計算能力の高い大型計算機(BX900)へのPC からの移植(64ビット化)とプログラムの改良(2D 画 像表示、PHITSに対する入出力処理)を実施した。可 視化処理には並列汎用可視化ソフトウェア(AVS/PST) を利用した。これにより、300枚以上の画像を要する人 体全身の線量評価解析作業を効率的に実施することが可 能となった。	5.10.1 項
9	(新規) DCHAIN-SP2001 計算結果に基づく線 量率分布の改良	J-PARC 物質・生命科学実験施設の実験計画や安全対策 に役立てるため、高エネルギー粒子誘導放射能計算コー ド DCHAIN-SP に対し、以下の機能追加と検証作業を実 施した。 ① 1968 群の中性子反応断面積ライブラリの処理ルーチ ンの追加 ② 点線源を仮定したγ線の線量率計算機能の追加 ③ 6種類の計算結果出力に対応した PHITS のビューア ー (ANGEL) での可視化機能の追加 ④ PHITS 形式でのγ線源定義の出力機能の追加 これにより、視覚的な結果の確認が容易になり、利便性 の向上が図られ、J-PARC の中性子実験装置への持込み 機器の放射化計算やバックグランド評価が効率的にでき るようになった。	5.12.2 項

4.1.3 プログラム最適化チューニング

プログラム最適化チューニングでは、大型計算機システムで実行されるプログラムについて、 高速化・並列化チューニングを行い、実行効率の改善、処理時間の短縮を実現することで、利用 者の研究活動を加速させるとともに計算資源の有効活用を図っている。例えば、チューニングに より、計算時間が2割短縮されれば、計算機資源が2割増加した効果をももたらすため、不足す る計算機資源をより有効活用する上で重要な施策となっている。

並列度の高い大型計算機システムにおいて、その性能を十分に発揮させるためには、並列化メ リットを最大限に引き出せるようにプログラムをファインチューニングすることが不可欠である。 このチューニングには特に高度な技術を要し、一般の利用者が行うにはハードルは高く、専門ス タッフの支援が欠かせない。

プログラム最適化チューニング(高速化・並列化)は、利用者より依頼のあったプログラムに 加え、大口(大規模並列、長時間計算)利用者のプログラムにおいて、並列化効率・実行効率の 改善の必要があるプログラムを対象に実施している。

平成 25 年度の作業について表 4.2 に示す。多次元ナトリウム-水反応解析コード (SERAPHIM)では、実行性能において 1.17 倍 (4.42%→5.18%)の効率化を、粒子・重イオン 輸送計算コード (PHITS)では、ノードあたり4コアで飽和していたスレッド並列性能を8コア でも十分な並列性能が得られるようにスケーラビリティの改善を図った。

	プログラム名	高速化・並列化 チューニングの概要	高速化・並列化 チューニングによる 速度向上及び作業結果	関連する 成果報告
1	LES 局所域高分解 能拡散コード (LOHDIM-LES)	 MPI 並列化 ① BX900 へ移植・並列化の設計 ② 並列化対象のサブルーチン (27 個)の MPI 並列化 	オリジナル版(逐次版) に対して、5.5倍(8並 列)の速度向上を達成。	5.4.2 項
2	詳細二相流コード (POPCORN)	 MPI 並列化 ① 並列化の設計 ② 並列化対象のサブルーチン (26 個)の MPI 並列化 ③ 入出力処理の MPI-IO 化 	オリジナル版(逐次版) に対して、6.4 倍(16 並列)の速度向上を達 成。	5.4.6 項

表 4.2 平成 25 年度高速化·並列化作業 (1/3)

	プログラム名	高速化・並列化 チューニングの概要	高速化・並列化 チューニングによる 速度向上及び作業結果	関連する 成果報告
3	多相流溶融凝固解 析コード (JUPITER)	 大規模並列化の対応、実行効率 の向上 ① 行列計算ライブラリ(AMG ソルバ)の導入 ② AMG ソルバの評価 	オリジナル版 (64 並列、 実行効率 1.49%) に対 して、以下の実行効率の 向上を達成。 <mpi 版=""> ・256 並列 2.7倍 ・512 並列 2.0 倍 ・1,024 並列 1.4 倍</mpi>	5.4.7 項
4	粒子・重イオン輸送 計算コード (PHITS)	 スケーラビリティの改善 ① スレッド間の排他処理の改善 atomic 指示文の最適化によるオーバーヘッド削減 ② プロセスあたりの省メモリ化 巨大静的配列の動的割付け ③ プロセスの高速化 コードの最適化(インライン展開、計算順序の変更、べき乗計算の SIMD 化) ・冗長計算の削減 	オリジナル版(1x8 並 列)に対して、以下の速 度向上を達成。 <ハイブリット版> ・1x8 並列 8.5 倍	5.4.9 項
5	多次元ナトリウム ー水反応解析コー ド (SERAPHIM)	 実行効率の向上 ① スカラチューニング (条件分岐の改良、リストベクトル参照によるメモリ転送のオーバーヘッド削減、MPI 関数呼出しオーバーベッド)による高速化 ② ノンブロッキング通信(ALLREDUCE 通信)による通信時間の隠蔽 ③ リスタート時のロードバランス調整方法(ロード予測・判定方法の追加)の改善 	オリジナル版(128 並 列、実行効率 4.42%) に対して、以下の実行効 率の向上を達成。 <mpi版> ・128 並列 1.17 倍</mpi版>	5.8.6 項

表 4.2 平成 25 年度高速化·並列化作業 (2/3)

	プログラム名	高速化・並列化 チューニングの概要	高速化・並列化 チューニングによる 速度向上及び作業結果	関連する 成果報告
6	3次元飽和・不飽	高速化チューニング	オリジナル版(逐次版)	5.9.1 項
	和浸透流-移流分	 BX900への移植 	に対して、1.15 倍(逐	
	散解析プログラム	② 演算性能の改善	次版)の速度向上を達	
	(Dtransu3D·EL)	・高コストルーチンの配列設	成。	
		定部分のループ外への移動		
		・ループ分割によるキャッシ		
		ュの再利用		
		③ データ分割に関する調査		
		・データ領域を適切に分割す		
		る上で考慮すべきデータの		
		相関関係		

表 4.2 平成 25 年度高速化·並列化作業 (3/3)

4.1.4 計算機性能調查

計算機性能調査は、大型計算機システムがその基本的性能(演算性能、通信性能、I/O 性能) を十分に発揮しているかについて調査するものである。また、原子力機構の計算需要を代表する ユーザプログラムの性能を調査し、次期大型計算機システム導入のための情報を収集・解析する ものである。

情報システム管理室では、政府の定める「スーパーコンピューター導入手続き(改正)」(アク ション・プログラム実行推進委員会、平成2年)に沿って、平成24年4月からスーパーコンピ ュータシステムの調達手続きを進めている。調達には、原子力機構の最低限の要求要件をまとめ た最終仕様書、その最終仕様書の一部である性能評価基準(ベンチマークテスト)及び、総合評 価基準が必要となる。性能評価基準は、原子力機構の負荷を代表する科学計算プログラムを使用 して導入するシステムの性能を評価するもので、仕様を策定する上で最も重要な部分となる。こ のため、平成24年10月までに候補となるユーザプログラムの特徴(メモリ関係、通信関係、 I/O関係)並びにチューニング箇所・高速化手法の調査を行い、ベンチマークプログラム(表4.3) として6本を決定した。また、このベンチマークプログラムを補うものとして、通信や I/Oの基 本性能に特化した基本性能調査用ベンチマークプログラム(表4.4)を作成し4本追加した。

平成 25 年度は、これまでの調査を基に導入予定のスーパーコンピュータシステムの性能を定量 的に評価するための性能評価基準を取りまとめた。

表 4 3	ベンチマークプログラム	(ユーザプログラム)	の一覧	(1/2)
1 4.0	·· / / / / / / / / / / / / / /	(-)) -) -)	▽/ 見	

	プログラム名	①プログラムの特徴 及び ②チューニング調査	次期大型計算機の 性能評価ポイント
1	Ab-initio Real-Time Electron Dynamics simulation code (ARTED)	 通信や I/O コストは低く、メモリアクセスや 演算に関するコストが高い。 プロセス当りの演算性能は既に 2GFLOPS と 高い性能となっているが、プロセス並列軸と スレッド並列軸を分離する最適化によって、 並列化効率を更に向上させることが期待でき る。 	メモリ性能、 演算性能
2	保存型ジャイロ運 動論的トロイダル 5 次元ブラゾフコ ード (GT5D-P)	 メモリアクセスに関するコストが高く、通信 と演算の同時実行が行われている。 既に高度な最適化が実施されており、最適化 の余地は少ない。 	メモリ性能、 通信性能
3	改良界面追跡法に よる詳細二相流解 析コード (TPFIT)	 整数条件を伴う if 文が存在する DO ループが あり、メモリアクセスコストが高い(飛び飛 びのアクセスが発生)。MPI 並列数が多いと 集団通信のコストが高くなる。 DO ループの構成変更等による SIMD 化とハ イブリット化によるスケーラビリティの向上 が見込まれる。メモリアクセス性能向上と集 団通信コスト増の抑止が期待できる。 	メモリ性能、 演算性能
4	変形・欠陥メカニ クスの並列化分子 動力学コード (PMD_MechT)	 キャッシュヒット率が低いためメモリアクセスコストが高い。また、通信と I/O コストが低いためにスケーラビリティが良い。 原子のペアループ構造の変更によって、データアクセスの局所化と演算の SSE 化による性能向上が見込まれる。 	メモリ性能
5	モンテカルロ殻模 型コード (RMCSM)	 (1) 演算のコストが高く、主要な計算部分の殆ど は、BLAS ルーチン (DGEMM) による行列 ×行列の積である。 (2) ユーザコードには最適化の余地は少ないが、 ライブラリには行列サイズに合わせた最適化 の余地はある。 	演算性能
	プログラム名	①プログラムの特徴 及び ②チューニング調査	次期大型計算機の 性能評価ポイント
---	----------	---------------------------	----------------------
6	高精度気液二相流	① 行列解法に伴うメモリアクセスコストと集団	メモリ性能
	数値解析コード	通信コストが高い。MPI 並列数が固定(1024)	
	(NERGAL)	である。	
		② MPI 並列数が固定のため、スレッド並列化に	
		よるハイブリット化が必須である。これによ	
		り、メモリアクセス性能も向上できる。行列	
		解法の集団通信コストは高性能のネットワー	
		クならば問題とならない。	

表 4.3 ベンチマークプログラム (ユーザプログラム) の一覧 (2/2)

表 4.4 基本性能調査用ベンチマークプログラムの一覧

	プログラム名	プログラム概要
1	sendrecv	複数のプロセスからなる送信・受信の組み合わせを作り、半分のプロ セスから残り半分のプロセスにブロッキング通信で同時に送信し、ラ ンク0の転送に要した時間を測定するプログラム。
2	putget	ブロッキング通信ではなく RMA 通信を使って、sendrecv と同じ測 定をするプログラム。
3	allreduce	各プロセスが分散して持つデータのリダクション演算に要した時間 を測定するプログラム。
4	io	各プロセスから MPI-IO によって1つのファイルに書き出し、それに 要した時間を測定するプログラム。

4.2 計算機利用技術の向上に向けた教育(講習会・セミナー)

利用者の計算機利用技術の向上に向けた教育として、大型計算機システム上で利用されるソフ トウェアや高速化等のプログラミング方法等について講習会を開催しており、利用者のスキルア ップに努めるとともに大型計算機システムの利用促進に繋げている。

平成 25 年度の講習会は、BX900、ISV(Independent Software Vender)ソフト、可視化関連のセミナー及び講習会を 7 回開催、延べ 88 名が参加した(表 4.5)。実習による講習会も企画し、 実機を使って確実な技術習得を指向している。

	開催日時	開催場所	内容	形式	参加者
1	平成 25 年 5 月 21 日	情報交流棟 講習会室	ANSYS 技術講習会(入門コース)	実習	12 名
2	平成 25 年 6 月 25 日	情報交流棟 大会議室	FLUENT 乱流モデル /伝熱セミナー	講義	22 名
3	平成 25 年 7 月 26 日	情報交流棟 講習会室	流体分野向け EnSight 入門講習会	実習	10 名
4	平成 25 年 7 月 30 日	情報交流棟 講習会室	BX900 プログラミング講習会	講義	15 名
5	平成 25 年 11 月 26、27 日	情報交流棟 講習会室	ABAQUS 中級セミナー	実習	10 名
6	平成 26 年 2 月 21 日	情報交流棟 講習会室	MicroAVS 講習会	実習	9名
7	平成 26 年 2 月 27 日	情報交流棟 講習会室	FieldView および Pointwise の 最新機能紹介とハンズオントレー ニング	実習	10 名

表 4.5 平成 25 年度講習会

5. 大型計算機システム利用による研究成果

5.1 福島技術本部

Method

Headquarters of Fukushima Partnership Operations

5.1.1 鉄パイプを用いた土壌深度分布測定システムに関する性能評価 Study on Measurement System for Depth Profile Investigation by Steel Pipe

松田 規宏 環境動態研究グループ

(1)利用目的:

東京電力株式会社福島第一原子力発電所の事故に伴い、ヨウ素 131 や放射性セシウムなどの放 射性核種が大量に環境中に放出された。このうち放射性セシウムは、事故に起因する現在の空間 線量率上昇の主要核種である。水溶性の放射性セシウムは、雨水などに溶けた状態で土壌中の粘 度成分などに吸着されつつ土壌中に浸透していくため、土壌中における放射性セシウムの濃度分 布は深さ方向に対して指数関数的になることがチェルノブイリ事故の調査報告等から明らかに なっている。土壌中の放射性セシウムの深度分布は、外部被ばく線量評価等において重要な基本 情報である。

福島県を中心とした広い範囲の空間線量率及び放射性セシウムの土壌濃度を明らかにするた め、文部科学省(現在は、原子力規制庁)の委託事業において原子力機構は、他の大学、研究機 関と連携し、平成23年6月から平成26年3月まで計4回の大規模調査(以下、「マップ調査」 とする。)を実施してきた。マップ調査では、スクレーパープレートを用いた方法及び鉄パイプ を用いた方法の2種類の方法で、土壌中の放射性セシウムの深度分布調査を実施している。鉄パ イプを用いた方法は、スクレーパープレートを用いた方法に比べ、短時間で土壌の採取が可能で あり、かつ、専用の土壌採取器具を必要としないため、緊急時における広域を対象とした調査に 有用である。鉄パイプを用いた方法の土壌深度分布測定システムは、ゲルマニウム半導体検出器 とガンマ線コリメート用の鉛ブロックからなる単純な構成であり、非破壊で、土壌中の放射性セ シウムの深度分布を評価することができる。

粒子・重イオン輸送計算コード PHITS は、放射性セシウムの壊変に伴って放出されるガンマ 線などの放射線と、土壌、空気、鉄パイプ、又は鉛ブロックなどの物質との相互作用を含む体系 中での放射線の挙動を、詳細に取り扱うことができるモンテカルロ計算コードである。本研究で は、鉄パイプを用いた方法の土壌深度分布測定システムに関し、その性能を PHITS コードによ るシミュレーションで評価するため、大型計算機システム BX900 を利用した。モンテカルロシ ミュレーションは、試行回数を増やすことによって結果の統計精度を高める必要がある。したが って、シミュレーションにかかる多大な時間を浪費することなく、効率的に、PHITS コードを 用いた本研究を進めるためには、BX900 の利用が不可欠である。

(2)利用内容·結果:

マップ事業で用いられた土壌深度分布測定システム の概略図を図1に示す。本測定システムは、土壌試料 が保持された鉄パイプの側方に鉛コリメータ及びゲル マニウム半導体検出器を設置している。鉛コリメータ の開口の幅は5 mmで、厚さは50 mmであった。シ ミュレーションでは、土壌表面からの検出器の中心(コ リメータの開口の中心)までの距離を Depth と定義し、 図中の矢印方向の Depth を正の数値で表した。

深度 ζ (g cm⁻²) における土壌中の放射性セシウムの放 射能 A_m(ζ) (単位は Bq kg⁻¹) には、以下の数式で表 される深度分布を仮定した。

 $A_{m}(\zeta) = A_{m,0} \exp(-\zeta/\beta)$

ここで、A_{m,0} は土壌表面の放射能 (Bq kg⁻¹)、β は 緩衝深度 (g cm⁻²)である。

緩衝深度 6 は、土壌表面の放射能 Am,0 が 1/e となる 深度を表しており、これは深度分布の特徴を示す指標 として用いることができる。

深度分布を $6 = 1.0 \text{ g cm}^2$ と設定したときのシミュ レーション結果を図 2 に示す。シミュレーションで得 られた結果は $6 = 1.31 \text{ g cm}^2$ であり、本測定システム は、実際の深度分布に対して過大に評価する傾向にあ ることがわかった。

この原因は、コリメータ(厚さ50mmの鉛ブロック) の厚さが不十分であるため、コリメータを透過して検 出器に到達する成分(以下、「透過成分」とする。)及 びコリメータをかすめ、かつ、コリメータを通過して 検出器に到達する成分(以下、「ショートカット成分」 とする。)による妨害にあることがわかった。

PHITS コードには、放射線の挙動(ここでは、放射線の移動経路や相互作用の有無)によって成分を分別できる機能が用意されている。

図2のシミュレーション結果に、透過成分及び純粋 にコリメータだけを通過した成分(以下、「通過成分」 とする。)のシミュレーション結果を加えたものを図3 に示す。



図 3 シミュレーション結果 透過成分(緑)と通過成分(橙) (深度分布はβ = 1.0 g cm⁻²と設定)

Depth (mm)

通過成分は、設定した深度分布 6=1.0g cm⁻² と同等の数値となった。一方で、透過成分は、 土壌表面付近を中心とした幅の広い対称分布となっており、これは、この成分が、主に、土壌表 面付近の放射性セシウムの濃度が高い層から、コリメータを透過してやってきていることを示し ている。したがって、本測定システムが実際の深度分布を過大に評価する傾向は、この、土壌中 の放射性セシウムの濃度が指数関数的に急激に変化する特殊な深度分布にも一因があると言え る。ショートカット成分の分別は少し複雑で、

ショートカット成分 = 全体(赤) - 通過成分(橙) - 透過成分(緑) より得ることができる。この成分は、透過成分とは異なり、幾何学的な制限があるため、コリメ ータの開口周辺の層からやってくるものがその大多数を占めた。透過成分は、鉛コリメータを同 じ厚さの鉛遮蔽体(開口を設けないコリメータ)に置き換えることで、実際の測定による概算値 を得ることも可能であるが、ショートカット成分を実際の測定で分別することは不可能である。 さらに、土壌深度分布測定システムの鉛コリメータの厚さを変えたシミュレーションを実施した ところ、コリメータの厚さを 100 mm に変更することで、実際の深度分布を過大に評価する傾 向を改善(無視できるほど抑制)できることがわかった。この結果は、測定システムを小型化す るにあたっての限界を示唆している。

したがって、

実際の測定では、コリメータの透過成分及びショートカット成分を厳密に分別することは不可能であるため、測定結果を補正するための係数をシミュレーションで整備する。

ことが、福島の現場で使用することを前提とした小型で持ち運び可能なシステムを構築する場合 などには有効な解の1つとなる。

PHITS コードを用いた数々のシミュレーションを通じて、マップ事業における土壌中の放射 性セシウムの深度分布調査で実施した鉄パイプを用いた方法による土壌深度分布測定システム の性能を評価することができた。今回の土壌深度分布のような特殊な指数関数的な線源分布は、 高エネルギー加速器施設の構造遮へい体の放射化による放射性核種の濃度分布にも見られる。原 子力機構に設置された J-PARC などの加速器施設が運用を停止し、廃止された後、構造遮へい体 を一般廃棄物と放射化物に分類する際には、本研究で評価した土壌深度分布測定システムと同様 の測定システムが構築される可能性がある。一般廃棄物と放射化物の分類は現場での利用要望が あると考えられるため、本研究で得られた知見が反映されることを期待する。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 松田 規宏、斎藤 公明、「福島第一原子力発電所事故に伴う放射性物質の長期的影響把握手 法の確立(2)鉄パイプを用いた土壌深度分布測定システムに関する性能評価」、日本原子力 学会、2014 年春の年会、東京(2014).

(4) 今後の利用予定:

平成 25 年度は、マップ事業の土壌中の放射性セシウムの深度分布調査で実施した鉄パイプを 用いた方法による土壌深度分布測定システムに関し、その性能を PHITS コードによるシミュレ ーションで評価するため、大型計算機システムを利用した。今後も、福島に関連した研究開発に おいて、PHITS コードを用いた解析・評価の需要があるため、平成 26 年度も継続して大型計算 機システムを利用する予定である。

5.2 安全研究センター

Nuclear Safety Research Center

5.2.1 水蒸気の凝縮モデルを用いた熱流動解析

Numerical Simulation of Thermal Flow with Steam Condensation Model

石垣 将宏 熱水力安全研究グループ

(1)利用目的:

東京電力福島第一原子力発電所では原子炉が溶融し、過酷事故(シビアアクシデント)に至った。今後の原子炉の安全審査では種々の原子炉格納容器脅威事象に対する設計対応、並びに、シ ビアアクシデントに対する評価が重要となる。これに伴い、熱水力安全研究グループでは、シビ アアクシデント時の格納容器内熱流動挙動評価の高精度化に資する研究を進めている。

原子炉格納容器は非常に大きな体積を有した容器のため、その中では多次元的な流動現象が発生する。格納容器内の熱流動を精度よく評価するためには、数値流体力学(CFD)による解析の 高精度化が必要となる。これらの背景から、格納容器のような大規模体系でのCFD解析には大 規模かつ長時間の計算が必要であり、大型計算機の利用が必須である。

(2)利用内容·結果:

平成 25 年度の解析は、格納容器内熱流動解析の第1段階として、既存の凝縮モデルをオープ ンソース CFD コードの OpenFOAM に組込み、凝縮モデルの性能評価を行い、解析の高精度化 のための課題を抽出することを目的として行った。

基礎方程式は混合体の質量保存式、運動量保存式、化学種の輸送方程式およびエネルギー保存 式である。各ガス種は理想気体の状態方程式に従うものとした。水蒸気は壁面およびボリューム 内において凝縮する。本解析では、凝縮の効果を考慮するため、Dehbiら(2013)が提案したガス の拡散量から凝縮量を評価する壁面凝縮モデルを適用した。壁面凝縮モデルを用いて得られる凝 縮量を基礎方程式に生成項として組み込んだ。本解析においてはボリューム内における液滴凝縮 の効果は考慮していない。

凝縮モデルの検証のため、Kang ら(1999)が実験を行った矩形ダクト内流動の解析を行った。 実験装置の模式図を Fig.1 に示す。Kang らは凝縮が発生する冷却面近傍での流速と温度を計測 している。Kang らの実験と同様の条件で、窒素を含む飽和蒸気(大気圧、363K)を流速 2m/s で流入させた際の壁面凝縮を解析し、速度と温度分布を比較した。底面温度は 296.7K で一定と した。底面流速は液膜の流動を考慮して、0.13、0.50、1.0m/s とした。乱流モデルには SST k-omega, laminar モデルを適用し、乱流モデルの影響についても検討した。 Fig.2,3に壁垂直方向の速度分布と温度分布の解析結果と実験結果を示す。速度と温度はバルクの値と気液界面での値により規格化している。実験結果をシンボルで示しているが、速度分布は laminar モデルを用いた結果は実験結果をよく再現している。一方、解析により得られた温度分布は laminar, SST k-omega ともに実験結果を再現しておらず、実験の方が大きな温度勾配を示している。

Kangらの実験では温度分布の実測値も報告されているので、冷却面温度ではなく、気液界面の計測温度を壁面での温度の境界条件として与えた解析を行った。Fig.4,5に速度分布と温度分布の解析結果を示す。速度分布は実験結果をよく再現しているが、境界温度を変更しても実験結果を再現することはできなかった。また、既存の凝縮量の補正モデルを適用した結果も合わせて示しているが、補正の影響はほとんど見られなかった。

流入気体と冷却面の温度差が大きい場合にはミスト生成の影響を考慮しないと温度分布を再 現できないという指摘(de la Rosa et al., 2009)がなされている。このため、今後はミスト生成 を考慮した解析を行い、モデルの妥当性評価を引き続き行う予定である。







Fig.2 速度分布 (底面温度を冷却面温度から決定)

Fig.3 温度分布 (底面温度を冷却面温度から決定)

1



Fig.4 速度分布 (底面温度を実験値から決定)

Fig.5 温度分布 (底面温度を実験値から決定)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 石垣将宏,安部諭,柴本泰照,与能本泰介,水蒸気の壁面凝縮モデルを用いた容器内熱流動 の数値解析,第 27 回数値流体力学シンポジウム,名古屋大学,2013, C09-3, (USB メモ リ).
- 2) 石垣将宏,安部諭,柴本泰照,与能本泰介,壁面凝縮モデルを用いた容器内熱流動解析,日本原子力学会 2014 年春の年会,東京都市大学, 2014, L08, (CD-ROM).
- 3) M. Ishigaki, S. Abe, Y. Sibamoto, T. Yonomoto, Numerical Simulation of Thermal Flow with Steam Condensation on Wall Using the OpenFOAM Code, CFD4NRS-5, チューリッヒ工科大学, 2014, S11-2, (Web)

(4) 今後の利用予定:

当グループでは軽水炉の安全性向上に資するため、原子炉格納容器内熱水力挙動に関する研究 を行っている。今後、模擬格納容器内の熱流動計測実験とともに、CFD コードによる大規模な 熱流動解析を行い、熱水力挙動評価手法の性能向上を目指す予定である。

5.2.2 格納容器内密度成層に関する CFD 解析

CFD Analysis on Density Stratification in a Containment Vessel

安部 諭

熱水力安全研究グループ

(1)利用目的:

東京電力福島第一原子力発電所では原子炉が溶融し、過酷事故(シビアアクシデント)に至った。今後の原子炉の安全審査では種々の原子炉格納容器脅威事象に対する設計や、アクシデント マネジメント策の有効性の評価が重要となる。本研究グループでは、シビアアクシデント時にお ける格納容器内熱流動挙動に関する研究を進めている。

原子炉格納容器では多次元的な流動現象が発生するため、格納容器内の熱流動現象を把握する ためには、数値流体力学(CFD)が重要な解析ツールとなる。これらの背景から、格納容器のよ うな大規模体系でのCFD解析には大規模かつ長時間の計算が必要であり、大型計算機の利用が 必須である。

(2)利用内容·結果:

平成 25 年度の解析は、格納容器内熱流動解析の第 1 段階として、オープンソース CFD コードの OpenFOAM を用いて、解析領域下端に設置した鉛直ノズルからのジェットによる上方部に形成された安定成層の浸食・崩壊について解析を行った。本解析では、Large-eddy simulation (LES)解析と Reynolds averaged Navier-Stokes (RANS)解析の結果を比較した。

基礎方程式は混合体の質量保存式、運動量保存 式、化学種の輸送方程式およびエネルギー保存式 である。各ガス種は理想気体の状態方程式に従う ものとした。乱流モデルは、LES では標準 Smagorinsky モデル、RANS 解析では Launder-Sharmaの低Re型k-εモデルを用いた。

解析対象は、平成 26 年度に実験を計画してい る高さ 1.8m、底面 1.5m×1.5mの直方体容器内で の密度成層解析である(Fig.1)。初期条件として、 1.3m より上方に安定成層を作り、安定性成層内で の質量分率はヘリウム 0.077、空気 0.923 とした。 下方の鉛直ジェット流入口は中心部分に直径 0.03m の円形ノズルを設定し、流速 1.5m/s、質量 分率はヘリウム 0.022、空気 0.978 とした。また、 底面 4 ヶ所には大気放出用の流出口を設置した。

Fig.2、3 に解析開始から 60 秒での速度ベクト ルと質量分率の可視化図を示す。LES、RANSの



Fig.1 解析領域

両解析ともに下方からの鉛直ジェットが上方の安定成層内に貫入し、乱流根混合により成層が浸 食されていることが分かる。その成層浸食は、明らかに RANS 解析の方が LES 解析よりも速い。 今後実験との比較が必要であるが、この結果は RANS 解析では乱流による混合効果を過大に予 測している可能性があることを示唆しており、欧州における既往研究(ISP-47、2007)の結果と類 似するものである。今後は、実験との CFD 解析との比較を行い、原子炉格納容器のような大き な体系での解析を可能とするため RANS 解析の精度向上を目指す。



Fig.2 速度ベクトルとヘリウム質量分率 (LES 解析)



Fig.3 速度ベクトルとヘリウム質量分率 (RANS 解析)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 安部諭、石垣将宏,柴本泰照,与能本泰介,浮力ジェットによる容器内多成分気体密度成層 挙動に関する RANS および LES 解析,第27回数値流体力学シンポジウム,名古屋大学, 2013, C10-2, (USB メモリ).
- 2) 安部論,石垣将宏,柴本泰照,与能本泰介,LES による格納容器内多成分気体の密度成層 に関するパラメータ解析 2014 年春の年会,東京都市大学,2014,L06,(CD-ROM).
- 3) Abe S, Ishigaki M, Sibamoto Y, Yonomoto T. RANS and LES analyses on a density stratified layer behavior of multicomponent gas by buoyant jet in a small vessel. the 22th International Conference on Nuclear Engineering; 2014 July, Prague.

(4) 今後の利用予定:

当グループでは軽水炉の安全性向上に資するため、原子炉格納容器内熱水力挙動に関する研究 を行っている。今後、模擬格納容器実験とともに、CFD コードによる大規模な解析を行い、熱 水力挙動評価手法の性能向上を目指す予定である。

5.2.3 回転液滴の変形挙動

Shape Variation of a Rotating Liquid Droplet

中村 秀夫、渡辺 正*1

安全研究センター、*1福井大学附属国際原子力工学研究所

(1)利用目的:

福井大学原子力工学研究所では、原子力機構熱水力安全研究室とシビアアクシデント事故防止 のためのアクシデントマネージメントに関する共同研究を実施している。福井大では、PWR プ ラントの電源喪失事故時の熱流動挙動の研究を進めており、その一環として、シビアアクシデン ト事故解析に必要となる高温溶融材料の物性を測定するための技術開発を進めている。直接計測 が困難である高温溶融物を浮遊液滴とし、その形状振動や回転形状変化等を利用して物性値を算 出するもので、液滴挙動の数値シミュレーションを行い、最適な制御パラメータ等を検討してい る。定量的な計測に資するためには、詳細かつ高精度なシミュレーションが不可欠であり、また、 様々な条件での検討が必要となる。このため、大型並列計算機の利用は必要不可欠である。

(2)利用内容·結果:

3次元ナビエストークス方程式をレベルセット法により解くことで、回転液滴の形状変化のシ ミュレーションを行った。静止する球形状の浮遊液滴に剛体回転を与えることにより、その後の 回転液滴の形状変化を調べた。液滴は、初期の球形状から回転により楕円体形状に変化し、振動 しながら回転を続けることがわかった。回転液滴は、ある回転数以上になると、球から回転楕円 体を経て、さらにアレイ形状に変化することが示された(図1参照)。また、アレイ形状の液滴 は、回転速度を低下させながらゆるやかに伸長し、最終的に分裂に至ることがわかった。回転速 度とアレイ形状液滴の伸長の関係は、角運動量保存を満たしており、分裂直前までの過渡挙動の 間の液滴サイズと回転速度の関係は、既存の実験結果とほぼ一致することが明らかとなった(図 2参照)。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 T.Watanabe, "Numerical Simulation of the Transient Shape Variation of a Rotating Liquid Droplet", Int. Conf. of Fluid Mech. And Thermal Eng., (ICFMTE 2013), Zurich, Switzerland, July 30-31 (2013), Proc. WASET, 79 (2013) pp.2103-2107.

(4) 今後の利用予定:

今後、より精確な評価を目指して、メッシュ依存性等の検討を進め、粘性測定に必要な、分裂 直前の液滴内部流動についての検討を進めていく予定である。



 5.2.4 NO_Xガス雰囲気下における四酸化ルテニウムからニトロシルルテニウム錯体への 生成経路に関する理論的研究 A Theoretical Study on the Reaction Pathway to Yield Nitrosyl Nitrate Ruthenium Complex from Gaseous Ruthenium Tetraoxide in NO_X (X=1,2) Gas Atmosphere

城戸 健太朗

シビアアクシデント評価研究グループ

(1) 利用目的:

核燃料の再処理施設では、濃硝酸水溶液を用いてウランやプルトニウムと核分裂によって生じ たその他の元素を分離する。その廃液は高いレベルの放射能を有し、絶えず崩壊熱が発生する。 そのため、それらを内蔵する貯槽は常に冷却する必要がある。何らかの原因でこの冷却機能が失 われると廃液が沸騰し、硝酸などとルテニウム化合物が反応して揮発性化合物(四酸化ルテニウ ム, RuO4)を生じる。ルテニウムはこの沸騰事故における主要な放射線源であり、この化合物の 施設外への移行は環境に大きく影響する。故に、その正確な定量的評価は原子力施設の安全性を 確保する上で果たす役割は大きい。一方で、この化学過程の詳細は不明であり、実験的手法では 反応機構の分子論的側面を明らかにすることは難しい。

本研究では、第一原理分子軌道法を用いて廃液沸騰時に気相で起こりうる四酸化ルテニウムと NOxガス(X=1,2)の反応プロファイルを検討した。この検討には様々な反応経路の探索が要求さ れることに加え、振動数や intrinsic reaction coordinate (IRC)の計算など比較的コストが大きな ジョブを実行しなければならない。このため、大型計算機の利用が必須の課題である。

(2)利用内容·結果:

すべての計算は分子軌道計算パッケージ GAMESS を用いて BX900 によって実施された。構造最適化は DFT(B3LYP)法によって行い、エネルギー評価には B3LYP 法と DFT(M06)法をそれ ぞれ採用した。Ruの基底関数は構造最適化に LANL2DZ、エネルギー評価に LANL2TZ をそれ ぞれ用いた。その他の原子は構造最適化に aug-cc-pVDZ を、エネルギー評価には aug-cc-pVTZ をそれぞれ用いた。

反応が NO によって開始される場合(path I)と、NO2によって開始される場合(path II)の二つの経路を得た。ここでは紙面の都合上、前者の一部について報告する。Fig. 1 は、MO6 法によって得られた自由エネルギープロファイルである。この図に示された分子の構造は Fig. 2 に与えられている。

RuO4 から TS1-2 を経て中間体 2 を生じる経路は 19.3 kcal/mol の活性障壁を有し、11.6

kcal/mol の発熱を伴う。この間に RuO4から二つの酸素原子が引き抜かれ、ルテニウムの形式的 な酸化数は+VIII から+V まで減少する。つまり、ルテニウムの還元がこのステップの駆動力で ある。中間体2の基底状態は2重項であった。4NOから最終生成物までの経路は省略されている が、この活性障壁を超える過程はなく、この経路は path I の律速段階に相当する。実験的にこ の反応は35℃程度で進行することが知られており、この計算結果と矛盾しない。生成物2はNO 分子と水分子の付加によって前駆体 3 を生じる。水分子は水素結合によって安定化されている が、水分子の付加は2分子から1分子を生成するため、自由エネルギー的には不利である(12.7 kcal/mol の吸熱過程)。前駆体3の幾何構造はTS8-4と非常によく似ており、結果として OH 結 合の活性化エネルギーは非常に小さい(4.8 kcal/mol)。2NOから中間体4に至るまですべて基底状 態は1重項であった。中間体4にNOが直接的にRuに付加することによって4Noが生じる。 Ru-N3-O8の角度は169度であり、3つの原子はおおよそ一直線上に並んでいる。これは典型的 な Ru-NO⁺の構造であり、実際に NBO 解析では NO から Ru への 0.31e の電荷移動であること を確認した。よって、ルテニウムの形式的な酸化数は+III である。このニトロシル基はそのまま 最終生成物まで残る。赤外分光法によってこのニトロシル基のNO 伸縮振動が検出されている。 計算された最終生成物における NO 振動数は 1873.1cm⁻¹であり、実験値(1873-1874cm⁻¹)を良く 再現した。



reaction coordinate





Fig. 2 Fig. 1 に与えられた分子の構造 結合長の単位はÅ。

(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:

高レベル放射性廃液の沸騰によって四酸化ルテニウムが生成するメカニズムの検討を計画している。この過程は溶液内で進行するため、多数の水分子や硝酸分子が反応に関わる。それらが四酸化ルテニウムの生成にどのように影響するかを調べるには分子レベルの記述が必要である。 こうした枠組みにはこれまでよりも高コストの計算資源が必要であり、引き続き大型計算機の使用が不可欠である。

5.2.5 熱流動解析による加圧熱衝撃に関する検討 Study on the Pressurization Thermal Shock Events Based on Thermal-Hydraulics Analysis

勝又 源七郎

構造健全性評価研究グループ

(1) 利用目的:

加圧水型原子炉(PWR)の事故時には、非常用炉心冷却系(ECCS)の作動により、低温の冷却水 が高温高圧の一次系内に注入される。低温側配管に注入された低温水は、配管内の流動状況によ っては、十分に混合されないまま圧力容器に到達し、ダウンカマーを流下することが考えられる。 この際、高圧条件下で高温の壁面を低温水が流れることによる加圧熱衝撃(PTS)が、構造健全性 の観点から懸念されている。近年、実験や数値流体力学コードによる熱流動解析により、低温水 の広がりが3次元的であることが示されており、構造側への影響についても流動状況を考慮した 詳細な検討が望まれている。

平成 25 年度は、想定すべき荷重条件に及ぼすコールドレグのループ流量や ECCS 水の流量・ 温度等の影響を評価することを目的に、平成 24 年度に整備した熱水力を含む詳細解析モデルを 改良して、これらの影響についての感度解析を実施した。

(2) 利用内容•結果:

コールドレグおよびダウンカマーを模擬した体系において、ECCSから注入される低温水とコ ールドレグの高温水の混合挙動に関する感度解析を実施し、PTSが懸念される炉心領域部の温 度分布等に関する知見を得た。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 勝又源七郎,勝山仁哉,渡辺正,鬼沢邦雄,西山裕孝,李銀生,"三次元熱流動解析による加圧熱衝撃時の温度条件の検討",日本原子力学会秋の大会,2014年9月,京都.

(4) 今後の利用予定:

平成 26 年度も、必要に応じて解析モデルの改良を行うとともに、代表的な過渡事象についての3次元的な解析を行い、従来評価法との比較を行っていく予定である。

5.3 先端基礎研究センター

Advanced Science Research Center

5.3.1 大規模設模型計算によるエキゾチック核構造の研究

Structure of Exotic Nuclei Studied with Large-scale Shell-model Calculations

宇都野 穣

重原子核反応フロンティア研究グループ

(1)利用目的:

天然に存在する安定核種に比べて陽子あるいは中性子が極度に多い原子核はエキゾチック核 と呼ばれている。エキゾチック核の性質は近年急速に明らかにされ、その中には安定核種とは著 しく異なった性質を持つものがいくつもあることがわかってきた。原子核の基本的性質を支配す る殻構造も例外ではなく、最近では、安定核からエキゾチック核へと移るにつれ、殻構造は大き く変化するという「殻進化」と呼ばれる現象が普遍的に見られると考えられており、そのメカニ ズムに注目が集まっている。殻進化の結果として起こる、魔法数の消滅や新魔法数の出現もいく つか知られている。殻構造は原子核の質量や電磁遷移確率などの実験値に対して大きな影響を与 えるものの、そこから直接的に引き出すことはできない。そこで本研究では、原子核構造の代表 的な微視的模型である殻模型による大規模数値解析から、エキゾチック核の殻進化に対する有用 な情報を引き出すとともに、それを支配するメカニズムの探求を行う。

(2)利用内容·結果:

前年度までの研究から、中性子数 28 領域のエキゾチック核の核構造を良く記述する殻模型有 効相互作用が得られており、平成 25 年度ではその有効相互作用によって得られたエキゾチック 核の性質をより詳細に解析した。その具体的内容は以下の 2 点である。

第一点は、中性子数 34 の新魔法数に関するより詳細な解析である。殻進化の結果、カルシウ ム同位体にて中性子数 34 において新しい魔法数が出現することが 10 年ほど前に我々のグルー プによって予言されていたが、平成 25 年になって初めてその直接的な実験的証拠がカルシウム 54 の第一励起準位から得られた。カルシウム 54 をはじめとする、中性子過剰なカルシウムおよ びスカンジウム同位体のエネルギー準位を殻模型計算によって解析した結果、魔法数 34 に対応 する、p1/2 軌道と f5/2 軌道との間に約 2.5 MeV の一粒子エネルギーギャップがあることを明らか にした。このエネルギーギャップは、テンソル力と中心力のコヒーレントな働きにより、カルシ ウムから陽子数を増やすと急激に減少することもわかった。さらに、カルシウムから陽子を減ら した非常に中性子過剰な核でもこの新魔法数 34 の一粒子エネルギーギャップは保たれるという 予言が得られた。

第二点は、中性子数 28 近辺のイオウ同位体で知られる核異性体(アイソマー)の性質の探求 である。最近、中性子数 27 であるイオウ 43 の第一励起状態はアイソマーとなっていることが 知られるとともに、イオウ44の第一4+状態もアイソマーとなっているという実験的示唆が得られている。第一4+状態がアイソマーとなる核は皆無といってよく、それが本当ならば極めてエキゾチックな現象である。殻模型計算では、イオウ44の第一4+状態がアイソマーとなるという結果が二つの異なる有効相互作用を用いた計算から得られているが、平均場近似に基づいた核構造計算からはそのようなアイソマーは得られない。本研究では、殻模型で得られた複雑な多体波動関数を平均場描像に基づいた解析を行うことにより、中性子過剰イオウ同位体におけるアイソマー出現メカニズムを提示した。まず、角運動量射影したハートリーフォック近似を行い、それが殻模型波動関数に非常に近いことを得た。角運動量射影したハートリーフォック近似から K 量子数の分布が得られ、第一4+状態は K=4 状態が支配していることがわかった。この K=4 状態は単一スレーター行列式レベルで時間反転対称性を破っているため、時間反転対称性を課した最近の平均場近似計算では出現しないことがわかった。イオウ44における K=4 状態の出現や、イオウ43におけるアイソマーは、二つの変形軌道 Ω =1/2 と Ω =7/2 がほぼ縮退することによるものであるという結果が得られた。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

原著論文

- 1) D. Steppenbeck et al., Evidence for a new nuclear 'magic number' from the level structure of ⁵⁴Ca, Nature 502, 2013, pp.207-210.
- 2) Y. Tsunoda, T. Otsuka, N. Shimizu, M. Honma, and Y. Utsuno, Novel shape evolution in exotic Ni isotopes and configuration-dependent shell structure, Phys. Rev. C 89, 2014, 031301(R), pp.1-5.
- Y. Utsuno, T. Otsuka, N. Shimizu, M. Honma, T. Mizusaki, Y. Tsunoda, and T. Abe, Recent shell-model results for exotic nuclei, EPJ Web of Conferences 66, 2014, 02106, pp.1-8.

口頭発表(招待講演)

4) Y. Utsuno, T. Otsuka, N. Shimizu, M. Honma, T. Mizusaki, Y. Tsunoda, and T. Abe, Recent shell-model results for exotic nuclei, 25th International Nuclear Physics Conference (INPC 2013), Firenze, Italy, June 3-7, 2013.

口頭発表(一般講演)

- 5) Y. Utsuno, N. Shimizu, T. Otsuka, S. Ebata, and M. Honma, Photonuclear reactions of calcium isotopes with the nuclear shell model, The Fourth International Symposium on Innovative Nuclear Energy Systems (INES-4), Tokyo, Japan, Nov. 6-8, 2013.
- 6) 宇都野穣、清水則孝、大塚孝治、吉田亨、角田佑介、中性子過剰S同位体の核構造、日本物 理学会 2013 年秋季大会、高知、2013 年 9月 20-23 日.

(4) 今後の利用予定:

大規模並列計算が可能な殻模型計算コードが最近共同研究者によって開発されたので、それを 用いて中重核や高励起状態の解析を行い、より詳細な殻進化の様子を明らかにしていく。

5.3.2 低次元強相関系の基底状態および励起ダイナミクスの研究

Research for Ground State and Excitation Dynamics in Low-dimensional Strongly Correlated Systems

大西 弘明、杉本 貴則、森 道康、Gu Bo、Xu Zhuo 量子物性理論研究グループ

(1)利用目的:

本研究は、高温超伝導と深く関係した低次元強相関系の低温磁性の性質(基底状態および励起 ダイナミクス)を理解することを目的としている。低次元強相関系では、強い量子揺らぎのため 平均場理論などの手法を単純に適用できず、実験で得られる励起スペクトルを解析的に求めるこ とが難しい。この物理を理解するには、数値シミュレーションが強力な解析手法となる。本研究 で用いるコードの根幹を成す動的密度行列繰り込み群は、低次元強相関系の有効模型の励起スペ クトルを計算する上で非常に有効な手法である。数値対角化に比べて格段に大きなサイズを取り 扱えるだけでなく、磁気的フラストレーション系に対しても量子モンテカルロ法のような負符合 問題が生じない。この手法を用いることで、J-PARC などでの中性子散乱実験で得られる磁気励 起スペクトルと直接比較可能なデータを得ることができる。これにより、低次元強相関系の低温 磁性に関する理解を深めることができ、新規超伝導体発見への糸口を掴むことが期待される。

(2)利用内容·結果:

低次元強相関系の中でも特に、磁気的フラストレーシ ョンを持つ低次元量子スピン系に焦点を当てて研究を 行った。対象物質として着目した LiCuVO4 は、強磁場 で2マグノン束縛状態がボーズ凝縮したスピン多極子相 が実現する可能性が指摘され、近年注目を集めている。 理論面では、先行研究により磁場中の基底状態相図は描 かれているが、励起ダイナミクスに関する知見は乏し い。そこで本研究では、磁気励起スペクトルの磁場依存 性について詳細な数値解析を行った。その結果、磁気相 関の異方的な振る舞いを反映して、磁気励起スペクトル の縱成分と横成分とで異なる磁気励起構造を持つこと を明らかにした(図1)。また、磁気異方性の効果を明ら かにするために、容易面型異方性と容易軸型異方性それ ぞれの場合について調べた結果、磁気異方性に応じて励 起エネルギーギャップの大きさが変化して、それに対応 してスペクトル強度の移動が生じるが、磁気励起構造の 全体的な形にはあまり影響しないことが分かった(図2)。



図 1: 動的密度行列繰り込み群により計算された LiCuVO4 の高磁場相での磁気励起スペクトルの 磁場平行成分(上)と磁場垂直成分(下)。

これらの結果は、中性子散乱実験で測定される磁気励起スペクトルと直接比較することができ

る。強磁場での中性子非弾性散乱実験は実験上の困難から未だ成功しておらず、本研究の結果は 今後の実験研究を理論面から牽引・サポートするものである。



磁気異方性なし(左)、容易面型異方性(中)、容易軸型異方性(右)。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学術論文

- 1) T. Sugimoto, M. Mori, T. Tohyama, and S. Maekawa, "Effects of frustration on magnetic excitations in a two-leg spin-ladder system", Phys. Rev. B 87, 155143 (2013).
- 2) A. Annadi, Q. Zhang, X. Renshaw Wang, N. Tuzla, K. Gopinadhan, W. M. Lu, A. Roy Barman, Z. Q. Liu, A. Srivastava, S. Saha, Y. L. Zhao, S. W. Zeng, S. Dhar, E. Olsson, B. Gu, S. Yunoki, S. Maekawa, H. Hilgenkamp, T. Venkatesan, and Ariando, "Anisotropic two-dimensional electron gas at the LaAlO₃/SrTiO₃ (110) interface", Nature Commn. 4, 1838 (2013).
- 3) Z. Deng, K. Zhao, B. Gu, W. Han, J. L. Zhu, X. C. Wang, X. Li, Q. Q. Liu, R. C. Yu, T. Goko, B. Frandsen, L. Liu, Jinsong Zhang, Yayu Wang, F. L. Ning, S. Maekawa, Y. J. Uemura, and C. Q. Jin, "Diluted ferromagnetic semiconductor Li(Zn,Mn)P with decoupled charge and spin doping", Phys. Rev. B 88, 081203(R) (2013).
- 4) O. P. Sushkov, A. I. Milstein, <u>M. Mori</u>, S. Maekawa, "Relativistic effects in scattering of polarized electrons", Europhys. Lett. 103, 47003 (2013).
- 5) M. Sekino, S. Okamoto, W. Koshibae, <u>M. Mori</u>, and S. Maekawa, "Temperature dependence of thermopower in strongly correlated multiorbital systems", JPS Conf. Proc. 3, 017014 (2014).
- 6) <u>H. Onishi</u>, "Ground state of S=1 zigzag spin-orbital chain", JPS Conf. Proc. 3, 014025 (2014).
- 7) <u>T. Sugimoto, M. Mori</u>, T. Tohyama, and S. Maekawa, "Spin-spin correlation enhanced by impurities in a frustrated two-leg spin ladder", JPS Conf. Proc. 3, 014016 (2014).

国際会議

- 8) <u>B. Gu</u>, T. Ziman, and S. Maekawa, "Theory of the spin Hall effect, and its inverse, in a ferromagnetic metal near the Curie temperature", The 8th International Symposium on Metallic Multilayers, Kyoto, Japan (2013 年 5 月).
- 9) <u>T. Sugimoto</u>, <u>M. Mori</u>, T. Tohyama, and S. Maekawa, "Phase transition induced by

magnetic field in a two-leg spin-ladder system", 7th ISSP International Workshop and Symposium "Emergent Quantum Phases in Condensed Matter –from topological to first principles approaches", Kashiwa, Japan (2013 年 6 月).

- 10) <u>H. Onishi</u>, "Electronic state induced by spin-orbit coupling in 5d transition metal oxides", The IMR-ASRC 4th REIMEI International Workshop, Tokai, Japan (2013 年 7 月).
- 11) <u>T. Sugimoto, M. Mori</u>, T. Tohyama, and S. Maekawa, "Effects of Magnetic Anisotropy and Magnetic Field on a Frustrated Two-Leg Spin-Ladder System", International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, Tokyo, Japan (2013 年 8 月).
- 12) <u>H. Onishi</u>, "Ground state of S=1 zigzag spin-orbital chain", The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, Tokyo, Japan (2013 年 8 月).
- 13) <u>T. Sugimoto, M. Mori</u>, T. Tohyama, and S. Maekawa, "Effects of impurity in a two-leg spin ladder", Light and Particle Beams in Materials Science 2013, Tsukuba, Japan (2013 年 8 月).
- 14) <u>H. Onishi</u>, "Magnetic excitations of spin-1/2 frustrated anisotropic ferromagnetic chain in magnetic field", Light and Particle Beams in Materials Science 2013, Tsukuba, Japan (2013 年 8 月).
- 15) <u>M. Mori</u>, "Spin-phonon coupling and phonon Hall effect", 2013 Gordon Godfrey Workshop on Spins and Strong Correlations, Sydney, Australia (2013 年 11 月).
- 16) <u>T. Sugimoto</u>, <u>M. Mori</u>, T. Tohyama, and S. Maekawa, "Successive magnetic-phase transitions in a frustrated two-leg spin ladder", APS March Meeting 2014, Denver, U. S. A. (2014 年 3 月).

国内会議

- 17) <u>森道康</u>, "超伝導/強磁性接合における輸送特性", CROSSroad of Users and J-PARC「機能する界面、反応する表面」, 東海 (2013 年 8 月).
- 18) <u>杉本貴則</u>, <u>森道康</u>, 遠山貴己, 前川禎通, "フラストレートスピン梯子系 BiCu2PO6 における 不純物誘起長距離秩序", 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島 (2013 年 9 月).
- 19) <u>大西弘明</u>, "S=1 ジグザグスピン軌道鎖の基底状態", 日本物理学会 2013 年秋季大会, 徳島 (2013 年 9 月).
- 20) <u>杉本貴則</u>, <u>森道康</u>, 遠山貴己, 前川禎通, "フラストレートした二本足スピン梯子系における 磁場効果", 量子スピン系研究会, 福井 (2013 年 12 月).
- 21) <u>大西弘明</u>, "強磁性フラストレート鎖の強磁場でのスピンダイナミクス", 量子スピン系研究 会, 福井 (2013 年 12 月).
- 22) 大西弘明, "ジグザグ鎖構造を持つバナジウム酸化物のスピン軌道状態",日本物理学会第69 回年次大会,湘南(2014年3月).

(4) 今後の利用予定:

実験との定量的比較を見据えた磁気励起ダイナミクスの精密な解析を進めるとともに、超伝導 などの輸送特性に関連した現象に注目して解析を行う予定である。

5.4 原子力基礎工学研究部門

Nuclear Science and Engineering Directorate

5.4.1 X線分光法と計算科学による土壌中セシウムの評価

Evaluation of Cs in Soil using X-Ray Spectroscopy and DFT Calculation

鈴木 知史

材料モデル評価研究グループ

(1) 利用目的:

本研究は、福島第一原子力発電所の事故により放出された放射性物質のうち、特に半減期が 30年と比較的長いセシウム(Cs)137の除染に資するために実施している、「廃棄物減容のための Cs動態研究に関する JAEA-NIMS 共同研究」の一部として実施した物である。

土壌中の Cs は、主としてバーミキュライトを始めとした粘土鉱物に吸着していると考えられる。最近の研究では、土壌中でのセシウムの吸着挙動は、従来の知見と異なることが示唆されているが、その詳細は明らかではない。したがって、Cs を土壌中から除去するために必要な Cs 吸脱着機構の解明のためには、Cs の局所構造や結合状態を含めた基礎レベルからの詳細な吸着挙動などの評価が求められている。

そこで本研究では、Cs吸脱着機構解明の一環として土壌中のCsの状態についての詳細な評価 を行うため、軟X線を用いたXASやXESの測定結果を評価していく。さらに、この測定結果 を第一原理計算により解析して、XASやXESの微細構造を評価する手法を構築していく。これ により、局所構造と結合状態の詳細を明らかにして、Csのバーミキュライトを始めとした粘土 鉱物への吸着状態に関して重要な現象を特定して詳細に評価する。さらに、この吸着状態に立脚 して第一原理計算と組み合わせることにより、土壌中のCsの吸着・剥離挙動を解明する。

(2)利用内容·結果:

Cs の除染を行うにあたり、除染の効率化や除染に伴う廃棄物の減容化が求められている。そ こで、種々の状態の Cs の評価が行われている。この一環として土壌中の Cs に関する軟 X 線を 用いた吸収端近傍 X 線微細構造(NEXAFS)の測定が進められている。この NEXAFS は XAS の 中でも特に吸収端近傍の部分である。NEXAFS を評価するにあたり、基準となる物質である Cs ハロゲン化物について、第一原理計算を用いて検討した。さらに、土壌中の Cs について評価し た。これまでの研究で、カリウム(K)が Cs と共存する場合があり、結合状態への影響が指摘され ている。また、Cs の周囲の六員環のシリコン(Si)の一部がアルミニウム(Al)に置換する場合に Cs の状態が変化する可能性が考えられる。そこで、土壌中に Cs と K が共存する状態、および、 Cs の周囲の六員環の Si の一部が Al に置換する状態について、NEXAFS を検討した。

土壌物質の構造最適化の計算方法として、擬ポテンシャル第一原理計算コードである VASP を 用いた。また、NEXAFS の解析のための計算方法として、全電子系第一原理計算コードである Wien2kを用いた。基準となる物質として、Cs ハロゲン化物である塩化セシウム(CsCl)、フッ化 セシウム(CsF)、臭化セシウム(CsBr)、ヨウ化セシウム(CsI)について、計算を実施した。また、 Csのみ吸着した場合とCsとKの共存した場合、および、Cs周囲の六員環のSiの一部がAlと 置換しない場合と置換する場合について、計算を実施した。なお、測定が進められている Cs M4.5 NEXAFS の解析のため、Cs 3d の内殻空孔を考慮して計算を行った。NEXAFS の計算に用いた 単位胞は、Cs ハロゲン化物では、CsCl、CsF、CsBr、CsI のスーパーセルである Cs27Cl27、Cs32F32、 Cs27Br27、Cs27I27とし、Csの吸着した土壌物質ではCs4Si16Al4Mg8O48、CsとKが共存した土 壌物質では CsK3Si16Al4Mg8O48、Cs 周囲の六員環の Si が Al に置換した土壌物質では $Cs_4Si_{12}Al_8Mg_4O_{48} \ge Lt_{\sim}$



	a	
表	Cs	の有効電荷

物質	有効電荷
\mathbf{CsF}	1.32
CsCl	1.18
CsBr	1.19
CsI	1.17
土壌中の Cs	1.37

図1 Cs ハロゲン化物の NEXAFS の(a) 計算結果と(b) 実験結果¹⁾



Intensity (arb.units) Siのみの く冒環 0 5 10 15 20 25 30 35 40 Energy (eV)

-部AIIC置換

図 2 K が存在する場合としない場合の土壌中 のCsのCs M_{4.5} NEXAFS の計算結果



Cs M_{4,5} NEXAFS のような軟 X 線による X 線分光法を評価するためには、内殻空孔の減衰の 影響を考慮する必要があることが示唆されている。そこで Cs ハロゲン化物の Cs M_{4,5} NEXAFS に関して検討した結果、内殻空孔の減衰により内殻空孔の影響が 60%となる場合、図 1 のよう に NEXAFS の計算結果は測定結果 ¹¹と良く一致した。また、Cs の有効電荷を評価したところ、 表 1 より、Cs の状態は CsCl と CsBr と CsI ではほぼ同じであり、CsF では異なることが示さ れた。また、土壌中の Cs は CsF に近いことが分かった。したがって土壌中の Cs の電子状態は CsF に近いと考えられる。

内殻空孔の評価に基づき、土壌物質への吸着が Cs のみの場合、および、Cs と K が共存する 場場合について、Cs M_{4,5} NEXAFS の理論計算を実施した。図 2 に示すように土壌物質中で Cs と K が共存する場合でも Cs M_{4,5} NEXAFS の違いは小さかった。また、Cs の周囲の六員環の Si を Al に置換した場合としない場合の Cs M_{4,5} NEXAFS の計算を実施した。図 3 に示すよう には Si を Al に置換するとピークの高エネルギー側にテールが見られるようになった。

参考文献

1) R. Ruus et al., "Cs 3d absorption and resonant photoemission study of caesium halogenides", Physica Scripta T115 (2005) pp.396-398.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

査読付論文

- 1) C. Suzuki, T. Nishi, M. Nakada, M. Akabori, T. Tsuru, M. Hirata, Y. Kaji, "DFT study on the electronic structure and chemical state of Americium in an (Am,U) mixed oxide", J. Phys. Chem. Solid 74 (2013)pp.1769-1774.
- 2) K. Yoshii, Y. Yoneda, I. Jarrige, T. Fukuda, Y. Nishihata, C. Suzuki, Y. Itoh, S. Yoshikado, S. Fukushima, "Electronic structure of BaTiO₃ using resonant X-ray emission spectroscopy at the Ba-L₃ and Ti-K absorption edges", J. Phys. Chem. Solid 75 (2014) pp.339-343.

学会発表

3) 鈴木知史, 矢板毅, 加治芳行, "X線分光法と計算科学による Cs 化合物と土壌中 Cs の評価", 日本原子力学会 2014 年春の年会, 東京 (2014).

(4) 今後の利用予定:

今後は、モデル物質の軟 X 線を用いた NEXAFS を第一原理計算により解析する。特に、 NEXAFS の微細構造と結合状態の関係を評価する。その際、これまで行ってきた近似的な内 殻空孔の減衰過程や Cs や Si サイトの置換、空孔形成の NEXAFS への影響に関する知見を 適用する。これと平行して、より高精度の内殻空孔の減衰過程の評価手法の構築を進める。

5.4.2 局所域高分解能大気拡散予測システムの開発に向けて

Towards Development of Local-scale Atmospheric Dispersion Prediction System

中山 浩成 環境動態研究グループ

(1) 利用目的:

原子力施設から排出される放射性核種の拡散挙動を局所域スケールで評価する場合、建屋群や 局所地形の影響を考慮することが重要である。原子力事故対応のための拡散予測システムとし て、原子力機構ではこれまで緊急時環境線量情報予測システム SPEEDIを開発してきた。SPEEDI は、数10-100kmの領域を数100m程度の計算格子で地表面形状を解像しているため、数mオー ダーの建物周りや急峻地形上における複雑乱流場での拡散予測はできない。そのため、高分解能 計算格子を用いて建物形状や局所地形を精緻に解像し、乱流拡散の非定常挙動の予測に優れた Large-Eddy Simulation (LES)モデルに基づく大気拡散予測モデルの開発を新たに行っている。し かしながら、高解像度化に伴い、要求される計算格子数が飛躍的に増大してくるために計算時間 が1か月程度かかり、実用性に課題があった。そこで、本研究では、計算時間の高速化、および、 計算領域を拡大した大規模計算の実現のための領域分割計算を確立することで実用性を高める ことを目的とする。

(2) 利用内容•結果:

現在、BX900 を利用した試計算を行い、8 並列で 5 倍以上の計算時間が短縮され、並列化の 効果を確認できたところである。

(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:

局地域高分解能大気拡散予測による原子力施設近傍の影響評価機能の開発概要:原子力施設からの小規模な放射性物質の放出に対して、施設周辺の地形と建屋の影響を詳細に考慮した高分解能大気拡散シミュレーションにより、施設近傍の影響評価を迅速に実施する機能を開発する。具体的には局地域高分解能拡散予測モデルの並列化により実行時間の短縮を図るとともに、あらゆる気象条件に対して、想定される放出地点について全ケースの拡散解析を大規模計算により実施し、拡散データベースを作成する。また、データベースを用いて、即時の影響評価及び放出源推定可能な解析機能を開発する。

5.4.3 パルス中性子 CT 計算プログラム NIPPON の高度化

Improvement of Computed Tomography Software for Pulsed Neutron Imaging

瀬川 麻里子

原子力センシング研究グループ

(1) 利用目的:

本件は原子力基礎工学研究部門が開発及び整備を進めている中性子 CT 計算プログラム NIPPON に係るソフトウェア開発である。パルス中性子による CT データを可視化する新たな アルゴリズムを内部関数として整備することを目的とする。

(2) 利用内容·結果:

J-PARC で生成されるパルス中性子を用いた3次元 CT 可視化技術は、物質の中性子エネルギ 一依存性を利用し元素等の3次元分布情報が得られる新技術である。

3次元 CT 画像を得るには、試料の回転角度毎及び中性子エネルギー毎に2次元画像データを 測定した後、中性子 CT 計算プログラムを用い3次元再構成をする必要である。従って、少ない 回転角度数の2次元データからでも3次元 CT 画像を取得し、ビームタイムの早い段階で実験の 成否が判断出来れば、効率よく成果を創出する事が可能となる。それには、試料のもつ定量的情 報を大きく損なうことなく、CT 画像を先鋭化するアルゴリズムが必要である。そこで、本研究 では TotalVariation (TV) 法に注目した。

TV 法は、解に対する先験的知識に基づく制約条件と誤差最小化とを組み合わせ正則化に基づいて画像を修復する画像処理技術で、医用やフェーズコントラストに適用した応用研究なども大きな成果を上げている。本研究では当グループが開発を進めている中性子 CT 計算プログラム (NIPPON)内に整備された逐次近似的な再構成法の一つである MELM 法に、新たに TV 法の アルゴリズムを組み込み(以下 MLEM+TV 法と記す)、実験データから再構成した 3 次元画像を 用い TV 法の有効性を検証した。

実験は J-PARC 物質生命実験施設ビームライン 10 番(BL10) にて実施した。実験システム は中性子源より 13.7 m 位置に設置し、ターンテーブル、中性子コンバーター、レンズ、イメー ジインテンシファイヤ(I.I.)、産業用カメラ、制御用コンピュータで構成される。試料を透過し た中性子をカメラ手前にある中性子コンバーターによって可視光に変換し、カメラで試料を 10 度刻みで回転させ 2 次元画像データを取得後、大型計算機及び前述の再構成プログラムを用い 3

次元 CT 画像を再構成した。試料は、8 mm φ の Al 円管に厚さ 5 μm の In 箔を巻き付け固定した。以下に述べる 3 次元 CT 画像は、図 1 試 料の断面を再構成した。図 2 (a,b)に MLEM 法、MLEM+TV 法を 用い円管状の共鳴試料(In)を 3 次元再構成した CT 画像を示す。

図 2(c)に、図 2(a,b)の同心円上での CT 値プロファイルを比較した (図 2(c))。図 2(c)より、MLEM+TV 法による再構成 CT 画像にお ける試料端は、MLEM 法と比較し先鋭化されていることがわかる。

以上から、本研究は中性子 CT 計算プログラム NIPPON に新たな



アルゴリズムを内部関数として整備した結果、定量的情報を大きく損なうことなく試料をより先 鋭化した3次元再構成画像が取得可能である事を示した。



(b) MLEM+TV 法による再構成画像



図2 MLEM 法及び MLEM+TV 法による再構成画像(a,b)と同じピクセルでの CT プロファイル比較(c)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 瀬川麻里子、大井元貴、甲斐哲也、篠原武尚、呉田昌俊,高速度イメージングとフォトニク スに関する総合シンポジウム,高感度・高速ゲートカメラシステムを用いた3次元パルス中 性子イメージング,2013, (English), CD-ROM.
- 2) M.Segawa et.al., "Development of a pulsed neutron three-dimensionalimaging system using a highly sensitive image-intensifier at J-PARC", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 769 (2015), pp.97-104.

(4) 今後の利用予定:

大型計算機及び本アルゴリズムを用い3次元画像の先鋭化を進めていく予定である。

5.4.4 欠陥挙動の力学と熱力学に関するマルチスケール解析

Multiscale Simulations of Defect Mechanics and Thermodynamics

都留 智仁

照射材料工学研究グループ

(1)利用目的:

当該課題では、照射材や超微細粒材料などの金属欠陥に注目した大規模原子シミュレーション と第一原理計算に基づく力学・熱力学特性の評価法の構築を目的として研究を行った。

① 照射材の変形では、照射欠陥に起因した特異な機構を生じることが知られているが、欠陥 組織や腐食挙動とマクロな変形特性の関係における定量的な評価法は得られていない。本研究で は、微視的に存在する照射欠陥および転位の運動と、巨視的な照射硬化および塑性変形を同時に 表現可能なマルチスケール解析手法を構築する。大規模原子モデルから欠陥相互作用の局所的な 影響を数理モデルによって再現し結晶塑性解析と連携を目的とする。

② 六方晶金属では、結晶構造に由来してすべり系によって変形特性が大きく異なることが知られている。そこで、非経験的手法に基づく塑性変形の評価法として、第一原理計算と連係して 転位芯構造を再現する評価法の構築を目的とする。

(2) 利用内容·結果:

① 大規模 MD シミュレーションにより転位源を有す る二次元多結晶モデルに対する変形解析を行った。図 1(a)に異なる初期転位密度を用いて得られた応力–ひず み関係、図 2(b)に初期転位密度が 5 nm の際の変形過程 の欠陥配置を示す。図から転位源の広がりによる初期降 伏以降の流動応力は、図 1(c)に示すように粒界における 転位の伝播の臨界応力 tTM によって決定されることがわ かった。また、塑性変形は転位源の活性化と粒界におけ る転位のすべり伝播との関係によって決定され、粒径の 微細化により粒径依存の強化機構は粒径と逆比例の関係 にあることを明らかにした。これは、平方根の逆比例で ある従来の Hall-Petch 関係を越えた強化機構に明確な 理解を与えるものであり、超微細粒金属の強度向上を理 論的に明らかにした成果として報告された(論文(1,2))。

② 積層欠陥エネルギーを転位運動の予測に適用する ため離散変分 Peierls-Nabbaro モデルの構築を行った。 ここで、転位芯における積層欠陥に由来したミスフィッ



図1 多結晶モデルの変形解析

トエネルギー成分は $\int_{-\infty}^{+\infty} \gamma(\delta(x)) dx \rightarrow \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \gamma(\delta(x_n)) \Delta x$ のように表され、第一原理計算によって得られ た積層欠陥エネルギーを利用して転位芯構造に反映することができる。Mg 合金に対しての柱面 転位芯構造と Peierls 応力の推定を行った結果、図 2(a)のように Al 添加によって転位芯の広が りが小さくなる一方、Y 添加では積層欠陥エネルギーの低下によって転位芯が広がることがわか った。また、せん断エネルギーの平衡状態から得られる Mg 柱面転位の Peierls 応力は、図 2(b) のように、Y 添加によって大きく低下し、底面転位と柱面転位の塑性異方性を低下する作用を持 つことが明らかになった。



図2 離散変分 PN モデルによる転位芯構造と Peierls 応力

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文(査読付き)

- 1) 都留智仁,青柳吉輝,加治芳行,下川智嗣,「超微細粒金属の機械特性に対する粒内転位生成と粒界におけるすべり伝播の影響」,日本金属学会誌,第78巻1号(2014), pp.45-51.
- 2) T. Tsuru, Y. Aoyagi, Y. Kaji and T. Shimokawa, "Influence of competition between intragranular dislocation nucleation and intergranular slip transfer on mechanical properties of ultrafine-grained metals", Materials Transaction, 54-9 (2013), pp.1580-1586.
- 3) T. Tsuru and Y. Kaji, "First-principles thermodynamic calculations of diffusion characteristics of impurities in γ-iron", Journal of Nuclear Materials, 442 (2013), S684–S687.
- 4) Y. Aoyagi, T. Tsuru, Y. Kaji, "A Phenomenological Micromechanical Model of FCC Metals under Radiation Induced Crystal Defects" ASTM STP: Effects of Radiation on Nuclear Materials, 25 (2013), pp.1547-1565.
- 5) Y. Shibutani, T. Hirouchi and T. Tsuru, "Transfer and Incorporation of Dislocations to Σ3 Tilt Grain Boundaries under Uniaxial Compression", Journal of Solid Mechanics and Materials Engineering, 7 (2013), pp.571-584.
- 6) T. Suzudo, M. Yamaguchi and T. Tsuru, "Atomistic modeling of He embrittlement at grain boundaries of α -Fe: a common feature over different grain boundaries", Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 21-8 (2013), 085013.

- 7) H. Serizawa, J. Matsunaga, Y. Haga, K. Nakajima, M. Akabori, T. Tsuru, Y. Kaji, S. Kashibe, Y. Ohisi, S. Yamanaka, "Formation and growth of image crystals by helium precipitation", Crystal Growth & Design, 13 (2013), pp.2815-2813.
- 8) C. Suzuki, T. Nishi, M. Nakada, T. Tsuru, M. Akabori, M. Hirata and Y. Kaji, "DFT study on the electronic structure and chemical state of americium in Am-U mixed oxide", Journal of Physics and Chemistry of Solids, 74 (2013), pp.1769-1774.
- 9) Y. Aoyagi, T. Tsuru and T. Shimokawa, "Crystal Plasticity Modeling and Simulation Considering the Behavior of the Dislocation Source of Ultrafine-Grained Metal", I. J. Plast., 55 (2014), pp.43-57.

国際会議

- T. Tsuru, "Atomistic simulations of initial yield mechanism in ultrafine-grained metals", 2nd International Conference and Exhibition on Materials Science & Engineering, Oct. 7-9, 2013, Las Vegas, USA.
- 11) Y. Aoyagi, T. Tsuru and T. Shimokawa, "Crystal Plasticity simulation considering the effect of dislocation source on yield stress (Plenary talk)", International Symposium on Plasticity 2014, Jan. 3-8, 2014, Freeport, Bahamas.
- 12) Y. Kaji and T. Tsuru, "Overview on modeling and simulation of structural materials in Japan: Atomistic simulations of meso-scale defect mechanics", OECD/NEA workshop and 9th WPMM on May 13-15, 2013.
- 13) Y. Shibutani, T. Tsuru and T. Hirouchi, "Defects Interactions between Dislocations and Grain boundaries by Molecular Dynamics Simulations", 3rd International Conference on Material Modelling 2013 (ICMM), Sep. 8-11, 2013, Univ. of Warsaw, Poland.
- 14) Y. Shibutani, T. Tsuru and T. Hirouchi, "Near-field Defects Interaction between Dislocations and Grain boundary(Plenary talk)", International Symposium on Atomistic Modeling for Mechanics and Multiphysics of Materials (ISAM4),Jul. 22-24, 2013, The University of Tokyo, Japan.

招待講演

15) T. Tsuru, Y. Aoyagi, Y. Kaji and T. Shimokawa, "Atomistic Simulations of Size-dependent Yield Mechanism of Ultrafine-grained Metals (Invited lecture)", International Symposium on Plasticity 2014, Jan. 3-8, 2014, Freeport, Bahamas.

(4) 今後の利用予定:

三次元多結晶モデルに対する大規模分子動力学解析によって超微細金属で発現する Bauschinger 効果の転位密度依存性の検討を行う。また、逆格子空間の転位の弾性解から得られ た構造を用いて第一原理計算に基づく転位運動の解析を行う。

5.4.5 界面追跡法に基づく二相流-構造連成解析手法開発

Development of Two-Phase Flow-structure Coupled Analysis Method based on Interface Tracking Method

吉田 啓之、鈴木 貴行 熱流動研究グループ

(1)利用目的:

1.溶融燃料落下挙動評価手法開発に関する研究

これまで気液二相流を対象に開発してきた詳細解析コード TPFIT を溶融燃料落下時の熱流動 解析に対応できるように拡張することで、複雑な構造物を内包する、BWR 炉心下部プレナムな どへの溶融燃料落下時の熱流動現象を、詳細に評価できる解析手法を開発する。平成 25 年度は、 解析コードの改良を実施し昨年度までに明らかとなった課題を解決するとともに、BWR 下部プ レナムを模擬した実験に対する解析を実施した。なお、本研究は国際廃炉研究開発機構からの受 託研究として実施した。

2.構造体・流体振動時の詳細二相流評価手法の開発

地震時などの構造体及びシステム全体に加速度が付加された場合の二相流挙動を詳細に把握 するため、地震加速度付加機能を TPFIT に追加するとともに、筑波大学で実施する流動加振実 験及び構造加振実験で取得するデータベースによる検証を実施している。平成 25 年度は縦型構 造物加振実験を模擬した解析を実施し、加振による速度場への影響について検討した。

(2) 利用内容·結果:

1. 燃料落下挙動評価手法開発に関する研究

溶融燃料落下挙動実験を対象とした解析体系を図 1 に示す。解析結果の一例として、溶融燃料模擬物質の界 面形状の実験結果との比較を時系列で図 2 に示す。水 中に射出されたフロリナートはジェット状に進入し、そ の後、界面が不安定となり、微粒化を起こす様子が見ら れる。また、微粒化したフロリナートは構造物間のギャ ップ部を通り、隣接するチャンネルへと移行する様子が 実験結果とよく一致している。次に、ジェット先端位置 の実験との比較を図 3 に示す。図より、ジェット先端 位置の時間進展は実験と定量的に一致していることが 確認できる。これらの結果から、解析コードの妥当性を 確認した。

2. 構造体・流体振動時の詳細二相流評価手法の開発

構造体・流体振動時の、二相流挙動に関して、筑波大 学で実施した実験を模擬した解析を実施し、実験結果と



の比較を行った。解析体系を図4に示す。図5に、その一例として、流体振動時の条件に対し、 解析及び実験で取得した気泡の形状やその周囲の速度分布を示す。解析により得られた気泡形状 は、実験結果を定性的に再現しており、また、気泡に下流(流れは図の左から右に流れる)おい て形成される渦により、速度の大きな領域が表れることもなどについても、実験との一致が得ら れた。



(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

外部発表

- T. Suzuki, H. Yoshida, F. Nagase, Y. Abe, A. Kaneko, Development of Numerical Simulation for Jet Breakup Behavior in Complicates Structure of BWR Lower Plenum (1) Preliminary Analysis of Jet Breakup Behavior in Complicated Structure by TPFIT, Proc. of ICONE21, ICONE21-15744 (2013).
- 2) H. Yoshida, T. Nagatake, K. Takase, A. Kaneko, H. Monji, Y. Abe, Development of Prediction Technology of Two-Phase Flow Dynamics under Earthquake Acceleration (10) Numerical Prediction of Velocity Profile around Bubble under Accelerating Condition, Proc. of ICONE21, ICONE21-15447 (2013).
- 3) N. Horiguchi, H. Yoshida, S. Uesawa, A. Kaneko, Y. Abe, Research and Development of Self-Priming Venturi Scrubber for Filter Venting: Preliminary Analysis And Observation of Hydraulic Behavior in Venturi Scrubber, Proc. of ICONE21, ICONE21-16287 (2013).
- 4) 鈴木貴行,吉田啓之,永瀬文久,阿部豊,金子暁子,BWR 下部プレナム複雑構造物内ジェットブレイクアップ現象予測手法の開発(4)界面追跡法による複数チャンネル実験解析,日本原子力学会2013年秋の大会,(2013).
- 5) 吉田啓之, 永武拓, 高瀬和之, 文字秀明, 金子暁子, 阿部豊, 地震加速度付加時の気液二相流 の詳細予測技術高度化に関する研究 (19) 加振周波数が気泡挙動に及ぼす影響の数値解析, 日本原子力学会 2013 年秋の大会, (2013).
- 6) 焦利芳,吉田啓之,高瀬和之,界面追跡法による垂直管内上昇気泡流の数値解析,2013年日 本機械学会茨城講演会論文集,No.130-2 (2013) pp.107-108.
- 7) H. Yoshida, T. Nagatake, K. Takase, A. Kaneko, H. Monji, Y. Abe, Numerical Simulation of Rising Bubble Behavior under Accelerating Conditions, Proc. of The 24th International Symposium on Transport Phenomena, December 1-5, 2013, Tokyo University of Science, Ube, Yamaguchi, Japan, (2013) pp.474-480.
- 8) L.F. Jiao, H. Yoshida, K. Takase, Numerical Simulation of Bubbly Flow Simulation in A Vertical Pipe Flow Using TPFIT Code, Proc. of The 24th International Symposium on Transport Phenomena, December 1-5, 2013, Tokyo University of Science, Ube, Yamaguchi, Japan, (2013) pp. 482-P487.
- 9) 鈴木貴行,吉田啓之,永瀬文久,阿部豊,金子暁子,BWR 下部プレナム複雑構造物内ジェットブレイクアップ現象予測手法の開発 (6)複数チャンネル実験解析による模擬溶融物内の 速度分布の評価,日本原子力学会 2014 年春の年会,(2014).
- 10) 吉田啓之, 永武拓, 高瀬和之, 文字秀明, 金子暁子, 阿部豊, 地震加速度付加時の気液二相流 の詳細予測技術高度化に関する研究 (23) 地震加速度付加時の気泡流挙動の応答特性解析, 日本原子力学会 2014 年春の年会, (2014).

(4) 今後の利用予定:

これまで、様々な条件において、界面追跡法に基づく二相流解析手法の適用のため、大型計算 機を利用してきた。今後は水から蒸気への相変化を含む条件での解析および詳細な現象の把握を 目的とした大規模解析の遂行のため、大型計算機の利用を進める予定である。

5.4.6 シビアアクシデント時の熱流動解析手法開発

Development of Numerical Method for Thermal-hydraulics in Severe Accident

永武 拓

熱流動研究グループ

(1)利用目的:

熱流動研究グループでは、これまでに三次元二流体モデル解析コードを境界適合座標系に拡張 した ACE-3D/BFC や、粒子法に基づく多相流解析コード POPCORN を開発するとともに、そ の検証を行ってきた。本技術開発では、ACE-3D/BFC や POPCORN を、原子炉事故時の熱流動 挙動評価に適用するための改良を行うとともに、妥当性評価を行った。

(2)利用内容•結果:

① 原子炉内水位低下時炉内温度分布評価解析

福島第一原子力発電所事故の廃止措置に向けては、溶 融燃料や炉内構造物の分布等の、詳細な炉内状況を把握 することが急務である。炉心水位の低下に起因する燃料 棒露出により燃料棒がヒートアップした時の燃料集合体 や制御棒を含む炉内温度分布を評価する事は、構造材温 度が融点に達した後の炉心の溶融過程を把握する上で重 要である。平成25年度は、事故炉心を簡略模擬した体系 の水位低下時における被覆管、チャンネルボックス、制 御棒の温度分布を評価した。



図1 解析体系

図 1 に解析体系を示す。本解析では、事故炉心におけるチャンネルボックスに隣接する燃料 棒、チャンネルボックス、および制御棒を図に示すように簡略模擬した体系で解析を行った。燃 料棒・チャンネルボックス間流路幅は、チャンネルボックスに隣接する燃料棒とチャンネルボッ クスの最近接距離より設定した。本解析では、燃料棒が露出し蒸気単相で満たされた領域を解析 対象とし、TRAC-BF1 による事故解析より、最も炉内水位が低下した時刻における崩壊熱、炉 内水位、および水面から発生する蒸気流量を抽出し、表1の解析条件を設定した。

また、本解析では、被覆管・チャンネルボックス間およびチャンネルボックス・制御棒間の輻射 熱伝達を考慮し、輻射が温度分布に与える影響を調べるために、輻射の有無やジルカロイやステ ンレスの放射吸収率をパラメータとして、3 ケースの解析を行った。輻射を考慮した 2 ケース については、ジルカロイやステンレスがとり得る最大および最小の輻射吸収率を設定した。

図2 に、加熱区間下端より 3.24 m における断面内温度分布を示す。輻射を考慮したケースでは、輻射なしのケースと比べ、被覆管温度が減少し、制御棒温度が上昇することにより、被覆管

と制御棒の温度差が減少しており、加熱区間下 端より 3.24 m における被覆管と制御棒の温度 差は、ケースA が 75 K であるのに対し、ケー ス B では 15 K、ケース C でも 30 K と大きく 減少している。このことから、水位低下時の制 御棒温度分布には、輻射熱伝達の影響が大きい

表	1	解析条件
1	-	/1/////////////////////////////////////

毎日また	輻射吸収率		
所生の	チャンネルボックス	制御棒	
1) = X	(ジルカロイ)	(ステンレス)	
Case A	輻射なし		
Case B	0.53	0.84	

ことが分かった。なお、本開発の一部は、資源エネ ルギー庁公募「シビアアクシデント時の燃料破損・ 溶融過程解析手法の高度化」として実施した。

② 海水熱伝達解析手法開発

福島第一原子力発電所事故においては、事故収束 の過程において、冷却のために、冷却水に代わり海 水が事故炉心内に注入された。冷却水とは異なる海 水の特徴が炉心内の熱伝達や流動に与える影響を 調べる事は、事故時における炉内状況の推移を把握 する上で、重要である。本研究では、ACE-3D/BFC を拡張することにより、海水熱伝達解析手法の開発 を行う。平成25年度は、海水を作動流体として用 いた場合の熱流動解析を可能とする海水熱伝達解 析機能のACE-3D/BFC への組み込みを実施し、原 子力機構で実施した海水熱伝達基礎実験を対象と した実験解析を実施することにより、組み込んだ海 水熱伝達解析機能の妥当性を確認する。

本解析では、内径 12mm、外径 24mm、助走区 間長さ 0.7m、加熱区間長さ 1m の二重円管を解析 体系とした。加熱区間の内壁面には、80 kW/m²の 熱流束を一様に付加した。外壁面は一様に断熱条件 とした。流路下端とり圧力 0.103MPa の水溶液が、 質量速度 300kg/m²s、温度 330K で流入するものと する。本解析では、塩化ナトリウムの濃度をパラメ



ータとし、0%、7%、14.3%の3ケースについて解析した。乱流モデルは、標準k-εモデルを 適用し、壁面近傍の乱流熱流束の評価には、等価熱流束モデルを適用した。

図3に、加熱区間下端より0.99mにおける内管壁面温度を示す。実験結果において、塩化ナトリウムの濃度が増加するにつれて壁面温度が上昇する傾向が、解析結果でも再現できており、 実験結果と良く一致している。

以上より、海水熱伝達解析機能を組み込んだ ACE-3D/BFC を用いて、異なる濃度に対する円 管内熱伝達を予測できる事を確認した。

③ 粒子法による熱-構造連成解析手法開発

福島第一原子力発電所廃止措置で行われる溶融燃料取り出しに向けて必要とされる、燃料溶融 挙動の詳細評価のため、粒子法による流体解析コード POPCORN を基に、熱伝導解析機能、固 液相変化解析機能、輻射解析機能などを追加することで、溶融過程を含めて熱構造連成解析を可 能とする手法を開発する。平成 25 年度は、熱伝導解析及び単一成分に対する相変化解析機能に ついて、その妥当性の検討を行った。なお、本開発の一部は、資源エネルギー庁公募「シビアア クシデント時の燃料破損・溶融過程解析手法の高度化」として実施した。また併せて POPCORN コードの高速化ならびに可視化ルーチンの開発を大型計算機利用支援のもと行った。

MPS 法をベースとした粒子法に基づく多相流解析コード POPCORN に熱伝導解析機能、及び

相変化中における物性値変化を考慮した固液相変化モデルを導入し、円柱形状の鉛が溶融する過 程について、併せて行った実験体系を簡略模擬した解析を実施した。

解析体系は、直径 20mm、高さ 5mm の鉛の円柱をアルミナの板の上に置いた状況を模擬した、 雰囲気温度及び下部のアルミナ板の初期温度は及び雰囲気温度は 377.3℃(鉛の融点 327.3℃+ 50℃)、鉛は 300℃とした。また外部雰囲気と表面粒子間の熱伝達係数を 10 W/m²/K、固液間の 接触角は 120°とした。図4 に解析結果の一例として、固相率の時間変化を示す。固相率は各粒 子中に存在する固相の割合を示している。(a)~(c)はそれぞれ計算開始から 0.0 秒、4.0 秒、8.0 秒後の側面から見た可視化画像である。下部のアルミナ板からの熱伝導により鉛の下部から融解 していく様子が計算できている。また表面張力により、融解した粒子が固体下部にとどまる挙動 が見られる。これらは別途実施した実験結果と定性的に一致しており、本計算手法により、金属 の融解挙動を定性的に解析可能であることを確認した。



図4 円柱鉛の溶融解析結果

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Nagatake T., Furuya. M., Takase K., Yoshida H. and Nagase F., "Development of Numerical Method for Simulating Melting Behavior of Fuel Elements Based on Particle Method", The 24th International Symposium on Transport Phenomena, (2013).
- 2) 永武拓、高瀬和之、古谷正裕、吉田啓之、永瀬文久、"燃料棒溶融数値解析手法の開発 (2) 溶融実験の数値解析結果",混相流シンポジウム 2013,(2013).
- 3) 永武拓、高瀬和之、吉田啓之、倉田正輝、"粒子法を用いた燃料溶融挙動解析手法の開発 (3) 円筒形状鉛の溶融解析",原子力学会 2014 春の年会,(2014).
- 4) 三澤丈治、吉田啓之、高瀬和之、"スーパー高速炉の研究開発(7)燃料集合体内熱流動解析", 日本原子力学会 2013 年秋の大会,(2013).
- 5) 三澤丈治、吉田啓之、高瀬和之、"SCWR 燃料集合体内熱流動に及ぼす冷却材流れ方向の影響評価",日本機械学会 第25回計算力学講演会,(2013).

(4) 今後の利用予定:

なし。
5.4.7 過酷時及び定常時における炉心内非定常熱流動事象評価解析手法の開発 Development of Unsteady Thermal Hydraulic Simulation Method for Inside a Reactor Core

山下 晋、永武 拓、焦 利芳、柴田 光彦、三澤 丈晴、劉 維、中塚 亨、高瀬 和之 熱流動研究グループ

(1) 利用目的:

福島原発事故対応として、 今後の燃料取り出しに向けての最優先課題である「溶融燃料の容 器底部における現在位置や炉内構造物の損傷程度」(「東京電力(株)福島第一原子力発電所 1~4 号機の廃止措置等に向けた中長期ロードマップ」について)の評価を可能にすることを目的とし て、溶融した燃料が周囲の構造物を溶かしながら圧力容器底部に落下して蓄積する挙動を定量的 に評価できる機構論的熱流動解析手法を開発し、燃料取り出しに必要な情報の解析的取得の実現 を目指した解析手法開発を行っている。本研究では、シミュレーションによる評価手法の開発を 行って、詳細な燃料溶融挙動の基礎的解析機能の開発及び妥当性を確認することを目的とする。

(2) 利用内容·結果:

炉心内溶融物移行挙動解析コード JUPITER の開発

福島原発事故では、冷却材喪失による炉心冷却機能の低下により、原子炉内に設置されている 燃料集合体が高温になり、その結果、任意の燃料棒で溶融が発生し、それが次第に拡大して炉心 の崩落を引き起こしたことが推察される。このような溶融事象の進展を明らかにするためには、 溶融現象を詳細に予測できる

解析コードが必要である。そ こで、炉心内溶融物移行挙動 解析コード JUPITER (Jaea Utility Program with Immersed boundary Technique and Equations of multiphase flow analysis for simulating Relocation behavior of molten debris)の 開発を行っている。JUPITER は数値流体力学的手法に基づ いている。炉内溶融物の流れ は、非圧縮性粘性流体で表さ れると仮定すると、支配方程 式は、Navier-Stokes 方程式、



連続の式、エネルギー方程式、界面移流方程式で表される。JUPITER において、圧力ポアソン 方程式を反復解法により求解する必要があるが、大規模計算においては反復回数が急激に増加す る。並列数の増加に伴う反復回数の増加をできるだけ抑制するために、マルチグリッド前処理反 復解法 AMGS を導入した。その結果、並列数が大きい場合において反復回数が抑制され、従来 より高い並列性能を達成することができた。

BWR 炉心形状を簡略模擬した体系で、多成分系での炉心溶融事象を解析するに当たり、必要 とされる基本的な解析機能(燃料物の溶融・流下挙動、構造物上での凝固、その発熱による構造 物溶融及び凝固した燃料物の再溶融等)を確認するため、3次元予備解析を実施した。図1に示 す解析体系は、圧力 容器内の炉心上端より下部を簡略模擬したもので、燃料集合体、炉心支持 板、制御棒案内管等の部分簡略モデルを含むものとする。計算では、簡略化のため、燃料は UO₂ (融点 2800K)、その他炉心支持板や制御棒案内管等の構造物はすべてステンレス鋼(融点

1750K)とした。解析の初期温度は、蒸気冷却の影響を考慮し、燃料集合体の上端部を融点近傍 (2800K)とし、下端部まで線形的に温度が減少するように設定した。その他に関しては、体系 上端部から炉心支持板までを 1500K とし、シュラウトド底部温度 500 K まで高さに比例して 減少させた。崩壊熱を模擬するための発熱項は、燃料集合体のみに最大 4MW/m³ を与え、鉛直 下方は一定、半径方向は一定割合で減少するように設定した。



(a)

(b)図 2 多成分解析機能確認計算

(c)

図 2(a)-(c)に、発熱する溶融物及び発熱しない構造物の移行挙動の時間変化を可視化した結果を 示す。図 2 より、集合体上部より溶融が進展し、支持板に落下した溶融燃料(図中黄色領域) は支持板に熱を奪われ凝固する。一方、凝固しなかった溶融燃料は案内管内へ流入し、模擬制御 棒や案内管を溶かしながら溶融構造物(図中白色領域)と共に下部プレナムへ移行する。また、 支持板上で凝固した燃料物質は、時間と共に自らの発熱により再溶融する。以上より、発熱体と 非発熱体の熱収支に起因する溶融移行・凝固挙動は概ね物理的に妥当であり、多成分解析機能が 問題なく動作することを確認した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) S. Yamashita et al., "Development of Numerical Simulation Method for Relocation Behavior of Molten Debris in Nuclear Reactors(2) Analysis of relocation behavior for molten materials with a simulated decay heat model", Proceedings of 22nd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-22) (DVD-ROM), 7Pages, 2014/07
- 2) S. Yamashita et al., "Numerical simulation for relocation behavior of molten materials in nuclear reactors on severe accident", Proceedings of 1st international conference on Computational Engineering and Science for Safety and Environmental Problems, Sendai, Japan, April, (2014).
- 3) 山下他、原子炉過酷事故時における炉内構造物の溶融移行挙動シミュレーション(崩壊熱 模擬のための発熱体の取り扱いに関する検討)、第26回計算力学講演論文集、佐賀、11月 (2013).
- 4) S. Yamashita, et al., "Development of Numerical Simulation Method for Relocation Behavior of Molten Debris in Nuclear Reactors (1) Preliminary Analysis of Relocation of Molten Debris to Lower Plenum", Proceedings of 21th International Conference of Nuclear Engineering (ICONE-21), Chengdu, China, July, (2013).
- 5) 山下 他、原子炉燃料集合体の溶融シミュレーションに関する基礎的検討、日本機械学会第 25 回計算力学講演論文集、神戸、10月 (2012).
- 6) 山下 他、原子炉内溶融燃料移行挙動数値解析手法の開発(1)下部プレナムへの溶融燃料移行 挙動予備解析、日本原子力学会 2013 年春の年会、3 月 (2013).

(4) 今後の利用予定:

これまでに構築した多成分解析機能を更に拡張し、N(任意の整数)成分が扱える様にする。 それを用いて、実機の炉内構成材(UO₂, Zr, SUS, B₄C)を用いる場合の予備解析を実施し、多 成分解析機能の確認を行う。

解析機能の実装及び機能確認を実施した上で、燃料集合体1組の溶融及びその下部プレナムへの溶融進展挙動及び流下経路についての評価を実施する予定である。規模は実機に近い体系を設定し、格子数は2000万~数億点、並列数1024並列~数万並列を想定している。

JUPITER は並列化されているが、BX900 でのチューニングは未実施である。従って、今後も継続的に大規模計算に向けたコードの最適化を行っていき、次期スーパーコンピュータでのチュ ーニングも実施していく予定である。

5.4.8 原子炉過渡時における熱流動評価解析手法の開発

Development of Thermal-hydraulic Analysis Methods in Nuclear Reactors at Transient Events

> 高瀬 和之、三澤 丈晴 熱流動研究グループ

(1)利用目的:

軽水炉の熱流動安全性を評価する場合、シビアアクシデントによる過酷事象を含めた過渡時の 炉心内熱流動挙動を高精度で予測できる解析手法が必要である。そこで、これまでに開発してき た熱流動解析コードをベースに、

- ① 原子炉燃料集合体内サブチャンネルを簡略模擬した円管流路体系
- ② サブチャンネル内に設置されるスペーサ形状を簡略模擬した複雑流路体系
- ③ 燃料集合体を簡略模擬したバンドル体系

の3つの条件に対して解析を行い、それぞれの予測結果に対して物理的な妥当性を検討すると ともに、今後の過渡解析に要求される新たな解析機能の摘出等を行った。

(2)利用内容•結果:

- 1) 結果の概要
 - 軸対称の二次元円管流路モデルを作成して解析を行い、円管内加熱流の乱流熱伝達に影響 する支配因子を数値的に明らかにすることができた。
 - ② サブチャンネル内に設置されるスペーサによる伝熱促進挙動を定量的に評価できることを明らかにした。
 - ③ 燃料棒本数が4本と7本の2つの体系について解析を行い、バンドル内熱流動に及ぼすチャンネルボックスの影響を明らかにした。
 - ④ 冷却材を微小流量から大流量まで変化させた条件や燃料棒加熱量を低から高に変えた条件で解析を行い、今後の過渡事象解析に対する計算の成立性を調べ、現状の解析機能の問題点を抽出した。
- 2) 主な結果

主な結果としてスペーサによる伝熱促進挙動に関する解析結果を示す。サブチャンネル内の乱 流熱伝達を促進させるために、図1に示すような羽根状突起付きスペーサを考案し、その伝熱性 能を数値的に調べた。解析では、流れ方向に対する羽根状突起の傾き角度をパラメータとして0 度、15度、30度の3ケースを実施した。水平断面内速度分布の予測結果を図2に示す。ここで、 (a)はスペーサに羽根状突起を設置しない場合、(b)は流れ方向に対する羽根状突起の迎え角が15 度の場合、同様に(c)は30度の場合である。(a)の場合は対称的な分布を示すが、(b)、(c)では不 均一性が増大する。特に(c)の場合には、旋回的な広がりが見られる。同様に、水平断面内乱流エ ネルギー分布の予測結果を図3に、温度分布の予測結果を図4に示す。





図2 水平断面内速度分布の予測結果



図3 水平断面内乱流エネルギー分布の予測結果



図4 水平断面内温度分布の予測結果

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 北村 竜明、坂本 健作、高瀬 和之、超臨界圧条件における原子炉サブチャンネル模擬流路 内熱流動シミュレーション、日本機械学会第26回計算力学講演会論文集(CD-ROM)、2013、 pp.703_1 - 703_2.
- 三澤 丈治、吉田 啓之、高瀬 和之、SCWR 燃料集合体内熱流動に及ぼす冷却材流れ方向の 影響評価解析、日本機械学会第 26 回計算力学講演会論文集(CD-ROM)、2013、 pp.702_1 - 702_2.
- 3) 小瀬 裕男*; 吉森 本*; 三澤 丈治; 吉田 啓之; 高瀬 和之、三次元二流体モデルに基づく超 臨界圧水の単管内熱伝達特性に関する数値予測、日本機械学会第 26 回計算力学講演会論文 集(CD-ROM), 2013、pp.701_1 - 701_2.
- 4) 山下 晋; 高瀬 和之; 吉田 啓之、 原子炉過酷事故時における炉内構造物の溶融移行挙動 シミュレーション、日本機械学会第 26 回計算力学講演会論文集(CD-ROM), 2013、 pp.704_1 - 704_2.
- 5) 高瀬 和之、三澤 丈治、吉田 啓之、Numerical analysis of heat transfer enhancement by spacers in subchannels at supercritical pressure condition、Proceedings of 4th International Conference on Jets, Wakes and Separated Flows (ICJWSF 2013) (CD-ROM)、2013、6p.

(4) 今後の利用予定:

平成 26 年度も引き続きプログラム開発を進め、シビアアクシデントによる過酷事象を含めた 軽水炉過渡時の熱流動安全性を予測評価できる解析手法の確立に目途をつける。

5.4.9 PHITS のスレッド並列化及びメモリ使用方法の変更

Improvement of PHITS in Terms of Thread Parallelization and Memory Usage

佐藤 達彦 放射線防護研究グループ

(1)利用目的:

原子力機構が中心となって開発している PHITS は、中性子・陽子・光子・電子・重イオンな ど様々な放射線の挙動を解析可能な汎用計算コードである。PHITS は、モンテカルロ法に基づ いて放射線挙動を解析するため、その高速化は極めて重要となるが、一部のサブルーチンがメモリ 共有型(スレッド)並列に適切に対応できていなかった。そこで、本開発では、原子力機構の大型計 算機を利用し、PHITS の全てのサブルーチンをスレッド並列に対応させるとともに、一部のサ ブルーチンを高速化した。これらの改良は、原子力コードの高速化作業の一環として実施した成 果である。

(2)利用内容•結果:

高速化を開始する前に、従来の PHITS (version2.52) を用いて、PHITS パッケージに含ま れる奨励設定入力ファイルの計算時間をサブルーチン毎に調べた。その結果、計算時間の掛かる サブルーチンは、ttracxyz, chkcll, tsedrz, dedxspar, thetxyz, fcell などであることが分かった。 そこで、これらのサブルーチンを重点的に高速化した。具体的には、メモリ初期化の効率化、指 数関数や対数関数多用の回避、goto 文削除による効率的なスレッド並列化、インライン展開など を実施した。また、サブルーチン analyz や乱数発生ルーチンを最適化することにより、多くの コアを使用したスレッド並列でも効率的に計算時間を短縮できるようにした。これらの成果は、

PHITS 最新版に組み込まれ、 version2.64として平成25年12月にリ リースされた。

表1に、PHITS2.52 と PHITS2.64 を用いて奨励設定入力ファイルを実行 したときの計算時間を示す。表より、 多くの奨励設定ファイルで計算時間が 短縮できたことが分かる。一部の奨励 設定ファイルで計算時間が長くなった のは、 詳細脱励起モデルなど、 PHITS2.64で新たにいくつかの計算機 能を導入したためである。

図 1 に、PHITS2.52 と PHITS2.64 を用いて同じ入力ファイルを計算した

表1 PHITS2.52 と PHITS2.64 を用いて奨励設定

入力ファイルを	「実行したときの	の計算時間

奨励設定 入力ファイル名	計算時間 (秒) PHITS2.52	計算時間 (秒) PHITS2.64
Counter	118.8	103.8
DetectorResponse	109.8	106.4
H10multiplier	116.2	110.5
NuclearReaction	124.5	25.4
ParticleTherapy	115.0	84.3
PhotonTherapy	122.8	127.1
SemiConductor	123.7	131.1
Shielding	151.0	116.0

場合の使用コア数と計算時間の 関係を示す。図より、PHITS2.52 は、コア数が増えると逆に計算時 間が長くなってしまう問題点が あったが、PHITS2.64 では、多 くのコアを用いても計算時間が コア数にほぼ反比例して短縮さ れていることが分かる。これは、 サブルーチン analyz や乱数発生 ルーチンを最適化したことに起 因する。

これらの成果により、PHITS が高速化され、BX900 をはじめ とする様々なコンピューターで より効率よく利用可能となった。



図 1 PHITS2.52 と PHITS2.64 を用いて同じ
入力ファイルを計算した場合の使用コア
数と計算時間の関係

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- T. Sato, K. Niita, N. Matsuda, S. Hashimoto, Y. Iwamoto, S. Noda, T. Ogawa, H. Iwase, H. Nakashima, T. Fukahori, K. Okumura, T. Kai, S. Chiba, T. Furuta and L. Sihver, Particle and Heavy Ion Transport Code System PHITS, Version 2.52, J. Nucl. Sci. Technol. 50:9, pp.913-923 (2013).
- 2) T. Sato, K. Niita, N. Matsuda, S. Hashimoto, Y. Iwamoto, H. Iwase, S. Noda, T. Ogawa, H. Nakashima, T. Fukahori, K. Okumura, S. Chiba, T. Furuta, L. Sihver, RECENT UPGRADE OF THE PHITS CODE AND ITS APPLICATIONS, Neutron and Ion Dosimetry Symposium 12, Aix-en-Provence, June, 2013.
- 3) 佐藤達彦,岩元洋介,橋本慎太郎,松田規宏,仁井田浩二,岩瀬広 第46回日本原子力学 会賞 特賞・技術賞「粒子・重イオン輸送計算コード PHITS」平成26年3月27日.

(4) 今後の利用予定:

PHITS は、国内外での総ユーザー数が 1,300 名を超え、平成 25 年度の原子力機構からのコン ピュータプログラム等の機構外提供件数は、その約 6 割(486 件中 331 件)が PHITS であった。 その利用範囲は、原子力分野のみならず、理学・工学・医学など多岐に渡っており、原子力コー ドが他分野にも応用可能なことを示した極めて貴重な例である。一方、利用者数の増加に伴い、 その高速化やユーザー利便性の向上に対する要望が多数寄せられている。今後は、原子力コード の高速化作業を利用して引き続き PHITS の高速化を行うとともに、プログラム開発整備作業を利用して グラフィカルユーザーインタフェイス(GUI)に基づく PHITS 計算入力ファイルの作成支援ツールの開 発を実施したいと考えている。

5.4.10 粒子・重イオン輸送計算コード PHITS の高度化に関する研究 Development of Particle and Heavy Ion Transport Code System PHITS

佐藤 達彦、武田 和雄*1、仁井田 浩二*1、松田 規宏、 橋本 慎太郎、岩元 洋介、小川 達彦、岩瀬 広*2

原子力基礎工学研究部門

*1 高度情報科学技術研究機構

*2 高エネルギー加速器研究機構

(1) 利用目的:

原子力機構は、国内外の様々な研究機関と共同研究を締結し、粒子・重イオン輸送計算コード PHITS の開発を進めている。その中核となる共同研究は、原子力機構、高エネルギー加速器研 究機構及び高度情報科学技術研究機構の3機関で平成25年度から26年度にかけて実施してい る「粒子・重イオン輸送計算コード PHITS の高度化に関する研究(III)」である。この共同研究 では、PHITS コードの更なる高度化のため、その核反応モデルの改良、高エネルギー加速器研 究機構が開発中の EGS5 コードに基づく電磁カスケード輸送アルゴリズムの改訂、ユーザー利 便性の拡張などを実施してきた1-4)。また、PHITS 普及のための講習会・研究会の開催、最新 バージョンの管理と公開、ユーザーサポートなどもこの共同研究の一環として実施されてきた。 この共同研究により、PHITS は、国内のみならず国外でも幅広く用いられる放射線輸送計算コ ードとなり、現在、1300名以上のユーザーが工学・理学・医学の様々な分野で PHITS を利用し ている。

また、多くの一般ユーザーが放射線申請、遮蔽設計、被ばく評価等の実務面で PHITS を利用 しているため、PHITS コードの改良を配布バージョンに反映させる際には、これまでのバージ ョンとの違いやバグの洗い出し等の細かいチェックが必要となる。特に大規模な施設等の輸送計 算では、微視的な核反応モデルの改良がどのように巨視的な体系の計算結果として現れるかを検 証する必要がある。そこで、大規模な計算を含む PHITS コードのベンチマーク計算が、共同研 究のひとつの目的に加えられており、そのために、原子力機構の大型計算機 BX900、FX1 を利 用してきた。

(2)利用内容·結果:

PHITS コードの様々な分野での利用のなかで、J-PARC の物質生命科学実験施設の遮蔽評価 は、PHITS の開発当初からの重要な課題である。特に核破砕中性子を利用する中性子実験施設 は、23 本のほぼ全てのビームラインで PHITS を用いた遮蔽設計を行ってきており、現在でも実 験装置の改造による変更申請等があるため、PHITS による評価が現在も行われている。この施 設は、核破砕ターゲットから中性子散乱施設まで長いところでは数 10m を越える大規模な施設 であり、また、高エネルギーの 3GeV の陽子ビームを用い、最終的に測定される中性子は meV の低エネルギーで、12桁のエネルギー領域をシミュレートしなければならないので、PHITSの ベンチマーク計算の対象としては重要なものであり、十分な統計の計算結果を得るには大型計算 機の利用が必須である。

図1に中性子実験装置 BL22 とその周辺の PHITS 計算モデルを示す。また、図2及び3に、 この BL22 のビームラインにビームを通し、周辺の線量分布を PHITS で計算した結果を示す。 図2は平成24年度に公開した PHITS2.52、図3は平成25年度に公開した PHITS2.64による 結果である。PHITS2.52から PHITS2.64への改良では、この計算に影響を及ぼす改変はないこ とが予想されていたが、この計算結果より、両者の結果は統計誤差の範囲内で同等であることが 確かめられた。幅広いユーザーを有する PHITS コードの信頼性を確保するためには、新しいバ ージョンを公開する前に、微視的な核反応等のベンチマーク計算だけでなく、このような大規模 な体系でのベンチマーク計算を行うことが極めて重要となる。



図1 中性子実験装置 BL22 周辺の PHITS 計算モデル



図2 中性子実験装置 BL22 周辺の中性子・光子線量分布に対する PHITS2.52 の計算結果



図3 中性子実験装置 BL22 周辺の中性子・光子線量分布に対する PHITS2.64 の計算結果

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- T. Sato, K. Niita, N. Matsuda, S. Hashimoto, Y. Iwamoto, S. Noda, T. Ogawa, H. Iwase, H. Nakashima, T. Fukahori, K. Okumura, T. Kai, S. Chiba, T. Furuta and L. Sihver, Particle and Heavy Ion Transport Code System PHITS, Version 2.52, J. Nucl. Sci. Technol. 50:9, pp.913-923 (2013).
- 2) T. Ogawa, T. Sato, S. Hashimoto and K. Niita, Analysis of multi-fragmentation reactions induced by relativistic heavy ions using the statistical multi-fragmentation model, Nucl. Instr. Meth. A 723, pp.36-46 (2013).
- 3) T. Ogawa, S. Hashimoto, T. Sato, K. Niita, Development of gamma de-excitation model for prediction of prompt gamma-rays and isomer production based on energy-dependent level structure treatment, Nucl. Instr. Meth. B 325, pp.35-42 (2014).
- T. Ogawa, M.N. Morev, T. Sato and S. Hashimoto, Analysis of fragmentation excitation functions of lead by carbon ions up to 400 MeV/u, Nucl. Instr. Meth. B 300, pp.35-45 (2013).

(4) 今後の利用予定:

PHITS コードは、今後も定期的に最新版を公開する予定であり、その信頼性を確保するために、引き続き大型計算機を用いた大規模ベンチマーク計算を実施する予定である。

5.4.11 PHITS を用いた J-PARC TEF-T ターゲットアセンブリの照射損傷計算

Displacement Damage Calculation for Target Assembly in J-PARC TEF-T using PHITS Code

岩元 洋介

放射線防護研究グループ

(1)利用目的:

放射線照射による加速器機器等の損傷の評価の指標として、照射領域に存在する全格子原子数 に対するはじき出された格子原子数の比で定義される DPA 値がある。また DPA 値は、照射領域 の粒子フルエンスとはじき出し断面積の積で表される。加速器施設の機器の設計において、許容 できる DPA 値が設定されるため、DPA 値の評価精度が機器等のメンテナンス時期に大きく影響 する。当グループでは、これまで幅広いエネルギーの種々の粒子に対する加速器構造材の照射損 傷を評価するため、核反応とクーロン散乱を考慮してはじき出し断面積を導出できる計算手法を 粒子・重イオン輸送計算コード PHITS において開発した。また、PHITS を用いて中性子・陽子 入射に対する鉄、銅、タングステンのはじき出し断面積を計算した。

平成 25 年度は、合金(Type316、T91)のはじき出し断面積を導出し、J-PARC 施設の ADS タ ーゲット試験施設(J-PARC TEF-T)のターゲットアセンブリの照射損傷計算を行った。

(2) 利用内容·結果:

1) 合金(Type316、T91)のはじき出し断面積の計算

PHITS では入射粒子が荷電粒子の場合、最初に入射粒子とターゲット核種とのクーロン散乱 からはじき出し断面積を導出する。続いて、核反応モデル(INCL4.6/GEM)により生成する二次 荷電粒子を用いて、はじき出し断面積を導出する。入射粒子が 20MeV 未満の中性子に対して核 反応モデルを用いて荷電粒子を生成しはじき出し断面積を導出する。

合金のはじき出し断面積を導出するために、その 組成元素毎のはじき出し断面積を計算し、組成比で 重み付けを行った。計算に用いた合金の原子数密度 の比を以下に示す。

Type 316: Fe (67.44%), Cr (18.4%), Ni (11.52%), Mo (1.47%), Mn (1.0%), C (0.19%)

T91: Fe (87.65%), Cr (9.57%), Si (0.59%), Mo (0.58%), Mn (0.50%), C (0.46%), V (0.22%), Ni(0.19%), Nb (0.05%)

Type316 の陽子・中性子照射に対するはじき出 し断面積の計算結果を図1に示す。欠陥生成効率の 影響は、約 1MeV 以上で大きく、エネルギー約 100MeV において、欠陥生成効率ありのはじき出し 断面積に対する欠陥生成効率なしの断面積の比は



図 1 Type316 に対するはじき出し断面 積の計算結果

約0.5となった。これらの断面積を用いて、照射損傷評価を行うことが可能となった。

2) TEF-T のターゲットアセンブリにおける照射試料 Type316 の DPA 分布計算

図2にPHITSで作成したTEF-Tのターゲットアセンブリの模式図を示す。また、図3に鉛 ビスマス液体金属に挿入した照射試料 Type316 中の DPA 二次元分布の計算結果を示す。 400MeV 陽子がフルストップする13.5cm 深さの位置でのDPA 値よりも、高エネルギー粒子に よる核反応生成物の影響で、ビーム入射面でのDPA 値が最も高くなることがわかった。この結 果は、様々な照射試料においても入射面において照射損傷の効果が大きいことを示し、TEF-T での照射試験計画の目安となる。



図3 Type316における DPA 二次元分布の計算結果

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) Y. Iwamoto, H. Iwamoto, M. Harada, K. Niita, "Calculation of displacement cross-sections for structural materials in accelerators using PHITS event generator and its applications to radiation damage", J. Nucl. Sci. Technol. 51, (2014) pp. 98-107.

(4) 今後の利用予定:

高エネルギー陽子照射に対する金属材料のはじき出し断面積の実験的検証を平成25年度に開始した。今後は実験環境の放射線輸送シミュレーションを実施し、得られた実験データのバック グラウンド影響等の補正計算を行う予定である。

5.4.12 環境放射性核種からの外部被ばく線量換算係数の評価 (PHITS)

Evaluation of Dose-conversion Coefficients for External Exposure to Radionuclides Distributed in Environment (PHITS)

佐藤 大樹

放射線防護研究グループ

(1)利用目的:

環境中に分布した放射性核種からの外部被ばく線量を推定するには、測定可能な放射性核種の 放射能濃度や空間線量から実効線量などへの換算に利用できる係数(線量換算係数)が必要とな る。本研究では、放射線防護に関する最新の知見を取り入れ、モンテカルロ法に基づく放射線輸 送シミュレーションにより、この線量換算係数の整備を進めている。環境における様々な被ばく 条件に対応できる高精度な線量換算係数を評価するには、環境を模擬した半無限体系における長 時間かつ大規模な放射線輸送シミュレーションが必要となるため、大型計算機システムによる並 列環境は不可欠である。

(2)利用内容·結果:

平成 24 年度は放射性核種が土壌表面および土壌中に沈着している場合に対して、換算係数を 整備した。平成 25 年度は、放射性核種が大気中に分布している被ばく条件に対する計算につい て報告する。

計算は、BX900の256並列により実施した。放射線輸送シミュレーションには、原子力機構 が開発を進めている粒子・重イオン輸送計算コード PHITS を用いた。環境を模擬するため半球 状の大気領域と円筒状の土壌領域を定義した計算体系を構築し、大気領域に単色エネルギー光子 線源を一様に分布させた。本計算で取り扱った光子線源のエネルギーは、0.01MeV から 10MeV までの11 点である。また、計算体系の半径は光子線源のエネルギーに依存して変化させ、半無 限体系として十分な大きさであると考えられる光子の大気に対する平均自由行程の5倍とした。 光子は線源から等方に放出され、環境中の放射線輸送シミュレーションにより、地表面近傍の放 射線場を決定した。図1に、大気中に0.5MeV の単色エネルギー光子線源が一様分布した場合の、 地表面から高さ 100cm における光子の放射線場を示す。0.5MeV 付近にみられるピークは、線 源から放出された光子が環境中で相互作用することなく到達した直達成分である。また、より低 いエネルギー領域にみられる幅広いピークは、大気中の分子や土壌との相互作用によりエネルギ ーを低下させた光子による散乱成分である。

次に、この放射線場の中に人体を精密に模擬したボクセルファントムを配置し、放射線輸送シ ミュレーションにより臓器吸収線量を計算し、それに基づき実効線量を導出した。吸収線量は、 光子と人体構成元素との相互作用により生成された電子の沈着エネルギーから評価した。また、 環境放射線場を使った同様のシミュレーションから、自由空気中の空気カーマや周辺線量当量 H*(10)も計算した。図2に大気に分布した光子線源からの実効線量および周辺線量当量の計算結 果を示す。この計算により、光子線源が一様分布した大気における外部被ばくでは、実効線量は 周辺線量当量に比べ全エネルギー領域において保守的な値を与えることを明らかにした。



図1 大気中に0.5MeVの単色エネルギー光子線源が一様分布した場合の 地表面から高さ100cmにおける光子のフルエンス率



図2 大気中に一様分布した光子線源からの空気カーマ当たりの実効線量

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 佐藤大樹, 遠藤章, W. Bolch, C. Lee, 環境に分布した放射性核種に対する外部被ばく線量換 算係数の評価—汚染土壌からの被ばく—, 日本原子力学会 2013 年秋の大会(平成 25 年 9 月、八戸).

(4) 今後の利用予定:

平成 26 年度は、環境中に電子放出核種が分布している場合の外部被ばく線量換算係数の整備 を進める。この目的を達成するためには多大な計算資源が必要となるため、今後も大型計算機シ ステムの利用を継続して行いたい。

5.4.13 水素含有高速炉模擬炉心の実験解析

Experimental Analysis of Fast Reactor Core with Hydrogenous Material

久語 輝彦 炉物理研究グループ

(1)利用目的:

高速炉の冷却材ボイド反応度は一般的に正となる。このため、液体金属冷却高速炉では、基本 的には、炉心を扁平化し、冷却材のボイド時に、軸方向への中性子の漏洩を増加させることによ って、正の冷却材ボイド反応度を緩和する対策が適用される。ただし、この対策を講じるために は、炉心高さに比べ炉心径を大きくするため、炉心容器を大型化させる必要がある。一方、超臨 界圧水を用いた高速炉概念では、炉心が高圧であることから、圧力容器の大型化は不可能である ため、炉心を扁平化することにより冷却材ボイド反応度を緩和する方策を適用することはできな い。正の冷却材ボイド反応度を緩和する別の方策として、水素化物(水素化ジルコニウム)を炉 心内に導入することが考えられている。これは、冷却材のボイド時においても、減速材となる水 素化物が炉内に存在するために、中性子を水素化物で減速させ親物質である U-238 に吸収させ て中性子バランスを負に維持しようとする考えである。

高速炉臨界実験装置 FCA では、水素を含有した高速炉模擬臨界実験が実施されており、水素 含有量を変化させたときの冷却材ボイド反応度が系統的に測定されている。本研究では、測定さ れた冷却材ボイド反応度を解析することにより、超臨界水冷却高速炉の実機設計に用いる汎用核 設計コード SRAC に基づく決定論的手法の妥当性を確認すること、及び参照解である連続エネ ルギーモンテカルロコード MVP の解析値を含めて解析結果をデータベースとして整理すること である。大型計算機システム、特に BX900 の利用目的は、多大な計算時間を必要とする、MVP による参照解を評価することである。

(2) 利用内容·結果:

水素化ジルコニウム(ZrH)を装荷した高速炉の模擬実験が FCA を用いて行われている。実 験体系(FCA-XVIII 実験体系)では、炉心中心部に試験領域が設けられ、ジルコニウム板とポ リスチレン板を用いて、水素化ジルコニウムを模擬している。水素含有量による冷却材ボイド反 応度への影響を調べるため、試験領域の発泡性ポリスチレン板のボイド率を 45%、80%及び 95% に変化させた実験体系が構築されている。試験領域の水素対重金属原子数比は、それぞれ、0.130、 0.052 及び 0.022 である。冷却材ボイド反応度は、試験領域のナトリウム板の一部をボイド缶に 置換し、ナトリウムがボイド化した状態を模擬することにより測定されている。ボイド化する領 域は、炉心中心部の 3 行×3 列の格子の領域(約 15cm×約 15cm)を対象とし、軸方向高さは、 片側炉心について炉中心部の高さ 15.24cm の範囲である。

冷却材ボイド反応度の解析には、水素を含有することを考慮して、決定論的手法として、汎用の熱中性子炉体系用の計算コード SRAC を用いた。SRAC は、超臨界圧水高速炉炉心の設計計算に用いられており、本実験解析により、その計算精度が検証できる。SRAC による計算では、

107 群のエネルギー群数による体系計算を実施し、中性子輸送計算コード DANTSYS を用いて、 冷却材ボイド反応度を評価した。なお、実効断面積は、超詳細エネルギー群での共鳴計算及びポ リスチレン板を陽に扱った非均質セル体系計算により評価した。参照解は、連続エネルギーモン テカルロコード MVP により評価した。MVP による計算では、実験体系を忠実に模擬した計算 体系に加え、炉心中央の密着面の間隙を無視した決定論的計算と同等の体系による評価も行っ た。核データライブラリとして JENDL-4.0 を用いて評価した結果を図1に示す。



炉心内の水素含有物質(発泡性ポリスチレン)のボイド率

図1 冷却材ボイド反応度の実験値と解析値の比較

連続エネルギーモンテカルロコード MVP による評価値は、数%から 10%程度の統計誤差を有 するが、ポリスチレン版のボイド率が 95%及び 80%の場合、計算体系を忠実に模擬した体系で 数%程度の過小評価、密着面の間隙を無視した決定論的手法と同等の体系で数%程度の過大評価 となった。したがって、この間隙を無視したことによる影響は、冷却材ボイド反応度を 10%程 度大きく評価することが明らかになった。間隙を無視した、SRAC に基づく決定論的手法は、炉 中心部における冷却材ボイド反応度に関する実験値とほぼ一致したが、密着面における間隙を考 慮した場合、10%程度実験値を過小評価することに注意を要することがわかった。

本報告は、文部科学省のエネルギー対策特別会計委託事業による委託業務として、学校法人早 稲田大学が実施した平成25年度「軽水冷却スーパー高速炉に関する研究開発」の成果を含む。

(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:

今後は、冷却材ボイド反応度の核データ感度を用いた不確かさ評価を実施する予定である。

5.4.14 FCA-IX 炉心における反応率比に関する JENDL-4.0 を用いた実験解析 Experimental Analyses of Reaction Rate Ratios of FCA-IX Cores by using JENDL-4.0

福島 昌宏 炉物理研究グループ

(1)利用目的:

長寿命放射性核種の核変換処理を目的とした加速器駆動未臨界システム (ADS) では、マイナ ーアクチニド (MA) を多く含む燃料が使用され、同システムにおける MA の核変換率の予測精 度向上は重要な課題の一つとなっている。これに対して、1980 年代に実施された FCA-IX シリ ーズ実験において MA 核種等の核分裂率比に関するデータが系統的に取得され、これらの活用は MA 核種の核データの積分評価に有用である。FCA-IX シリーズ実験では、7 つの炉心(以下、 IX-1~IX-7 炉心と呼ぶ)が構築され、いずれも実験解析が容易となるように単純組成且つ単純 形状となっており、各炉心の特徴は次のとおりである。IX-1~IX-3 炉心は希釈材としてグラフ ァイトを用いた高濃縮ウラン炉心、IX-4~IX-6 炉心は希釈材としてステンレス鋼を用いた高濃 縮ウラン炉心、IX-7 炉心は希釈材無しの低濃縮ウラン炉心となっている。特に IX-1 炉心から IX-6 炉心では、希釈材の割合及び種類の違いにより、炉心番号が大きくなるに従って中性子スペクト ルが系統的に硬化するように調整されている。本研究では、これらの炉心で測定された核分裂率 比(237Np/239Pu、238Pu/239Pu、242Pu/239Pu、241Am/239Pu、243Am/239Pu、244Cm/239Pu) に対し て、JENDL-4.0を用いて連続エネルギーモンテカルロコード MVP による実験解析を行った。 大型計算機システム BX900 の利用目的は、多大な計算時間を必要とする MVP による参照解を 評価することである。

(2) 利用内容·結果:



図1 平行板型小型核分裂計数管

図2 炉心中心のドロワの詳細構造

Movable side drawe

核分裂率測定では、図1に示す平行板型小型核分裂計数管(237Np、238Pu、239Pu、242Pu、241Am、243Am及び244Cm)が使用されている。図2に核分裂計数管を装填した炉心中心ドロワの詳細な構造を示す。炉心中心ドロワは、計数管の装填のため空隙が設けられており、燃料及び模擬物質のみで構成された通常のドロワとは異なっている。そのため、本解析ではMVPによ

りこれらの実験上の幾何形状(計数管及びその装填に伴う空隙、密着面付近の空隙等)を詳細に モデル化することで参照解を計算した。計数管内部をタリーに設定して各反応率の計算を行っ た。

解析では、核データライブラリとして JENDL-4.0 に加えて旧版 JENDL-3.3 も併せて計算し、 両核データ間の比較を行った。図 3 に解析値と実験値の比(C/E 値)を示す。その結果、特に 244Cm/239Pu 核分裂率比に関しては、JENDL-3.3 における C/E 値は 0.98~1.06 であるのに対 して、JENDL-4.0 における C/E 値は 1.10~1.18 と大幅に過大評価することが分かった。また、 同核分裂率比の C/E 値はスペクトルが硬化するに従い、C/E 値が増加傾向にあることが分かっ た。その他の ²⁴¹Am/²³⁹Pu、²⁴³Am/²³⁹Pu、²³⁷Np/²³⁹Pu、²³⁸Pu/²³⁹Pu、²⁴²Pu/²³⁹Pu については、 両ライブラリーにおいても 10%の範囲で実験値を再現することが分かった。



図3 核分裂率比の実験値と解析値の比較

以上の参照解の計算に加えて、決定論的手法による実験解析が可能となるように解析モデルの 簡略化を行った。MVP では実験条件を忠実にモデル化した参照解の評価が可能であるが、決定 論的手法による解析では幾何形状を詳細に扱うことは困難である。そこで、これら核分裂計数管 及びその装填に伴う空隙、密着面付近の空隙等が核分裂率比に与える影響を MVP により評価し て、決定論的手法による解析に必要な補正係数の整備を行った。

(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:

今後は、JENDL-4.0 及び JENDL-3.3 による解析結果の差異について、決定論的手法により 感度解析を実施し、要因分析を実施する予定である。

5.5 原子力水素・熱利用研究センター Nuclear Hydrogen and Heat Application Research Center

5.5.1 二重非均質効果を利用したクリーンバーン高温ガス炉の核設計 Nuclear Design of Clean Burn HTGR with Utilization of Double Heterogeneous Effect

深谷 裕司、後藤 実 原子炉設計グループ

(1) 利用目的:

高温ガス炉は冷却材そのものが喪失しても熱伝導・輻射伝熱のみにより炉心からの崩壊熱の除 去が可能であり非常に高い安全性を有する。さらに、炉心スペクトルが軟らかく効率的な核燃料 物質の燃焼が可能であり、安全かつ効率の高い Pu 専焼炉を実現できる炉型として期待されてい る。しかし、日本では核不拡散の観点から Pu は単体で扱わないこととされている。U を混合し た MOX という形態での Pu 燃焼が可能であるが、混合した U から新たに発生する Pu により、 Pu 消費率が低下するという問題がある。この問題を解決するために、日本原子力研究開発機構 では、Pu に化学的に非常に安定な不活性母材 YSZ を混合した PuO2-YSZ 被覆粒子燃料を用いる クリーンバーン高温ガス炉を Pu 専焼炉として提案し研究開発を開始した。PuO2-YSZ 燃料に含 まれるアクチノイド核種は Pu のみであるため効率的な燃焼が期待できる。また、その化学的安 定性により PuO2-YSZ 燃料は硝酸にほとんど溶けないため Pu の取り出しが困難であり、高い核 拡散抵抗性が期待できる。さらに、不活性母材燃料を用いることにより、燃料健全性に有利な物 性、地層処分時の安定性など副次的な効果が得られる。

クリーンバーン高温ガス炉では、燃料に親物質が含まれないため余剰反応度の制御の重要性が 増すが、制御棒のみに頼ると制御棒飛び出し事故時の炉心添加反応度が大きくなるとともに、制 御棒の炉心挿入量が大きくなり出力分布がゆがむ等の不都合が発生する。このため、一般的に可 燃性毒物が用いられる。一方で、このような可燃性毒物の利用は適切な設計が実現できなければ、 中性子経済の悪化により核燃料物質の燃焼効率を低下させることは知られており、可燃性毒物に できるだけ頼らない設計が望ましい。これらの点を考慮して最適な設計を実現することが本研究 の目的である。なお、不活性母材を用いることによる副次効果は核特性にも有効に働き、本研究 のキーテクノロジーとなっている。

(2)利用内容•結果:

上記の目的を実現するため、 炉心内部の中性子の挙動をモンテカルロ法により、 炉心体系を直 接的に模擬して解析した。 今回は燃焼計算と呼ばれる原子炉の運転による燃料組成の変化も考慮



した。このような、炉心体系における燃焼計算は多くの計算量を必要とするため、大型計算機 BX900 を利用して解析を実施した。

Fig.1 高温ガス炉の燃料構造

Fig.2 NNDの概念

モンテカルロ法による中性子輸送計算は、モデル化の近似が少なく中性子挙動の高精度な評価 が可能である。しかし、高温ガス炉燃料は Fig. 1 に示すように被覆粒子燃料と呼ばれる微小の粒 子状の燃料が燃料コンパクト内に無数に充填されており、その全粒子の位置を特定しモデル化す ることも、モデル化された体系を解析することも、現在の計算機性能での実施は合理的とは言え ない。そこで、確率的幾何形状を用いることにより被覆粒子燃料の合理的なモデル化を行った。

確率的幾何形状では、NND (Nearest Neighbor Distribution)と呼ばれる累積密度関数により、 中性子の飛程に沿って被覆燃料粒子の位置を確率的に配置する。この累積密度関数は被覆燃料粒 子の直径を単位とした中性子の飛程の関数として与えられる。Fig.2 に示す概念図のように、被 覆燃料粒子がランダムに分布している媒体の中を中性子が一定方向に進んでいくと、進めば進む ほど、被覆燃料粒子に衝突する確率は高くなる。この累積関数はゼロから始まり、独立変数に対 し単調増加し、1 に漸近する。適切な NND を用い、中性子の飛行先に被覆燃料粒子を配置し燃 料と中性子の反応を精度よく評価する。炉心設計では臨界性など炉心全体の平均的な核的挙動の 評価が求められ、一見すると被覆燃料粒子の局所的な分布を考慮せずに燃料物質を均質化して も、平均的な核的挙動の評価結果に大きな差が現れないように思われる。しかし、実際は中性子 に対する燃料領域の自己遮蔽効果により核的挙動が変化する。自己遮蔽効果とは特定の中性子エ ネルギーに対し吸収反応が増大する共鳴反応により、該当エネルギー領域の中性子の大半が燃料 領域の表面で吸収され、燃料領域の内部における反応が大きく低下する現象である。このような 効果により、核的挙動は必ずしも平均化できないことが多い。特に、高温ガス炉燃料では大きな 燃料領域である燃料コンパクトとその内部に分布する被覆燃料粒子という2つの非均質性を持 つ。炉物理ではこの2つの非均質性に対する自己遮蔽効果を二重非均質効果と呼ぶ。ウラン燃料 炉心ではこの二重非均質効果により²³⁸Uの共鳴捕獲反応が抑制され、²³⁵Uの効率的な燃焼が行 えることが知られている。

Pu 専焼炉であるクリーンバーン高温ガス炉では、Pu を YSZ 母材により希釈した燃料を用い る。Pu の装荷量自体は性能要求から決定される燃焼(発熱)量により一意的に決まるが、PuO₂ と YSZ の混合割合(モル分率)は調整の余地がある。被覆燃料粒子のサイズを固定した場合に は、YSZ の混合量を増やし、PuO₂モル分率を低くすると、Pu 装荷量を固定している関係から、 被覆燃料粒子の数が増えることとなる。結果として燃料コンパクト内部に燃料物質が均一化され ることとなり、二重非均質効果が弱まる。つまり、PuO₂のモル分率により二重非均質効果を調 整できる。Fig. 3 に全炉心に新燃料を装荷した1バッチ炉心における増倍率とドップラー係数の 解析結果を示す。増倍率に関しては、PuO₂モル分率を低下させることにより、二重非均質性が 緩和され共鳴捕獲反応が増加し、燃焼初期における余剰反応度が低下する。しかも、達成燃焼度 自体は変化がない。このことは、燃焼初期において増倍率が逆転していることからわかるように、 燃焼初期における共鳴吸収反応の増加が、核分裂性物質の転換につながり、燃焼末期の臨界性に 寄与するためである。このことは、クリーンバーン高温ガス炉が、運転中に転換の恩恵が受けら れる程度の非常に高い燃焼度を得られる設計がなされたためと理解できる。また、Pu 炉心では ドップラー係数が正側へ移行することが懸念されるが、PuO₂モル分率の低下は、負のドップラ ー係数の増加につながる。

このように、YSZ を用いた燃料希釈により二重非均質効果の調整が可能であることを発見し、 PuO₂ モル分率が低い設計が望ましいという傾向を確認した。そして、被覆燃料粒子充填率(粒 子数)の製造技術の観点から 30%程度が限界であり、それに相当する PuO₂ モル分率 30%が最 適であるとの結果を得た。この設計点の決定を基に、4 バッチ炉心、全炉心燃焼計算を実施し、 取り出し平均燃焼度 500GWd/t、²³⁹Pu 燃焼率 95%程度の高い炉心性能を確認した。なお、²³⁹Pu は核分裂性 Pu の大半を占め、半減期が 2 万 4000 年程度と長く、長期的な核拡散が懸念される 核種である。



Fig. 3 増倍率とドップラー係数

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Y. Fukaya, M. Goto, H. Ohashi, Y. Tachibana, K. Kunitomi and Satoshi Chiba: "Proposal of a plutonium burner system based on HTGR with high proliferation resistance," J. Nucl. Sci. Tech., 51, (2014), pp.818-831.
- 2) 深谷裕司: "クリーンバーン高温ガス炉の研究開発 ―システム概念と今後の展望― シリー ズ発表資料集 日本原子力学会 2013 年秋の大会," JAEA-Review 2014-010, (2014), 33p.

(4) 今後の利用予定:

上記の通り、二重非均質効果を利用した最適設計範囲の特定が完了した。今後はこの設計範囲 を基により詳細な設計へと進めていく予定である。また、二重非均質モデルの取扱いについての 検証および高度化を行っていく予定である。これまで、二重非均質モデルの NND の再現性を金 相写真により垂直方向の相関のみを確認しているが、直接的に実機体系との臨界性の比較検討は なされてこなかった。このたび、Fig. 4 に示すように、模擬燃料の CT 撮影を行い全粒子位置の 把握に成功した。今後はこのデータを基に、直接的な 3 次元モデルの作成による二重非均質モデ ルの精度確認および、NND 評価の検討を行い、今後の高温ガス炉の核特性評価精度の向上につ なげていきたい。



Fig. 4 被覆粒子燃料の CT 画像

5.6 量子ビーム応用研究部門 Quantum Beam Science Directorate

5.6.1 解離チャンネルを持つ分子の異性化の量子制御:2 状態 1 次元モデルによる理論 的研究

Quantum Control of Molecular Isomerization Competing with a Dissociation Channel: a Theoretical Study based on a Two-state One-dimensional Model

黒崎 譲

レーザー量子制御研究グループ

(1)利用目的:

本研究では、解離チャンネルを持つ分子の異性化のレーザー場による量子制御について、最適 制御理論(optimal control theory, OCT)に基づき考察する。ここでは交差がある2本のポテンシ ャル曲線を考え、交差点近傍での非断熱遷移過程も考慮する。例としてオゾン(O₃)分子の open-cyclic 異性化を対象とし、open 体から解離チャンネルを回避して cyclic 体へ効率的に異性 化させるレーザー場を理論的に見出すことを試みる。本計算では、wave packet の長時間発展を 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:

図1に、計算で用いた diabatic ポテンシャルの対角項(V_{11^d} , V_{22^d})及び非対角項(V_{12^d})を、図2 に diabatic 双極子モーメント μ^d のオゾン分子の頂角の2等分線上への射影値を示す。

OCT 計算においては、以下に与えられる汎関数 J

$$J = \left| \left\langle \psi(T) \right| \Phi \right\rangle \right|^2 - \alpha_0 \int_0^T dt \varepsilon(t)^2 - 2 \operatorname{Re} \left[\left\langle \psi(T) \right| \Phi \right\rangle \int_0^T dt \left\langle \chi(t) \right| \frac{\partial}{\partial t} + i(H_0 - \mu \varepsilon(t)) \left| \psi(t) \right\rangle \right]$$
(1)

を考え、これを最大にするレーザー場 $\varepsilon(t)$ を求める。 $\varepsilon(t)$ は直線偏光しているとし、その向きはオ ゾン分子の頂角の 2 等分線と平行に固定する。式(1)においてΦは target 状態、すなわち cyclic 体の振動基底状態を表す。第 2 項はレーザーのフルエンスを表す (α_0 は正の整数)。第 3 項中の $\chi(t)$ は Lagrange の未定乗数である。wave packet の時間発展は行列形式の Schrödinger 方程式

$$i\frac{\partial}{\partial t}\mathbf{\psi} = \mathbf{H}\mathbf{\psi}$$
 (2)

に従い、 $\psi = t(\psi_1(t) \psi_2(t))$ である。ここで、 $\psi_1(t)$ 、 $\psi_2(t)$ はそれぞれ wave packet の diabatic ポ テンシャル V_{11} d、 V_{22} d 上の成分である。

図3にOCT 計算により得られた最適レーザー場、図4にそのスペクトルを示す。このレーザー場は target への遷移確率 0.982 を与える。その振動数は時刻t = 20000 au 付近を境に減少し (図3)、スペクトルはω=0.15 および 0.01 hartree 付近に主な成分を持っている(図4)。よって、このレーザー場による異性化の機構は、初期の wave packet がまず基底状態から励起状態 に励起され、そこからポテンシャルの坂を下って交差点を経由し最終的に target に至るもので あると理解できる。レーザー場の最大振幅は 0.212 au であり、基底状態のポテンシャルのみを 考慮した場合の 2 割程度の大きさである。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 黒崎 譲, Tak-San Ho, Herschel Rabitz, "化学反応の量子制御における非線形電場効果", 第7回分子科学討論会(2013年9月,京都).
- 2) Y. Kurosaki, T.-S. Ho, H. Rabitz, "Quantum optimal control pathways of ozone isomerization dynamics subject to competing dissociation: A two-state one-dimensional model", J. Chem. Phys. 140, 084305 (2014), 11 p.

(4) 今後の利用予定:

今後も、量子制御の理論研究のために大型計算機システムを継続利用する予定である。



5.6.2 フェムト秒レーザーアブレーションの分子動力学シミュレーション

Molecular Dynamics Simulation of Femtosecond Laser Ablation

錦野 将元、大西 直文*1

X線レーザー応用研究グループ、*1 東北大学大学院 工学研究科

(1)利用目的:

大規模な分子動力学シミュレーションによって、フェムト秒レーザーを照射した固体金属表面 のアブレーション過程を調査することで、レーザーフルエンスの閾値近傍におけるアブレーショ ン形態の遷移メカニズムを明らかにするとともに、実験との比較による質量噴出率の定量的評価 や表面構造形成過程の解明を目的とした。

(2) 利用内容·結果:

当該計算機システムでは、申請コア時間 の関係上、比較的大規模な計算を1ケース のみ行うことができた。無償公開されてい る古典分子動力学コード LAMMPS を用 い、初期に 図 1 のような 50.2×50.2× 75.0 nm³ の大きさで固体となっている白 金に対し、レーザーの浸透厚さ程度の表面





領域に 100 fs エネルギーを付与した。このとき原子数はおおよそ 1200 万個である。

アブレーションが起こる閾値よりも少し低い強度に相当するエネルギー付与率により 300 ps まで計算を行った結果、それまで行っていたより小さい領域に対する計算と同様に表面に振動が 現れたが、計算境界からの反射波に起因するものと見られ、実験で観測されている表面振動とは 時間スケールが異なっていた。実験では 100 ps オーダーの振動が見られているため、さらに長 時間の計算によって原因を探る必要がある。

また、表面に一様にエネルギーを付与したにも関わらず、20 nm 程度の大きさの凹凸が形成 され、それが 300 ps 後の計算終了時にも残留していた。この時点ではまだ、十分に熱緩和して いないものの、このような凹凸が実験で得られている多パルス照射後の自己組織化の種となる可 能性があるため、さらに長時間の計算を行うことによって、1パルス終了後にどの程度凹凸が残 留する可能性があるかを見積もる必要がある。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 羽富大起,大西直文,錦野将元,長谷川登,富田卓朗,伊藤篤史,河内哲哉,山極満,末元 徹,「フェムト秒レーザー照射に伴う金属表面剥離過程の分子動力学解析」,日本物理学会第 69回年次大会,東海大学,28aAP-4,2014年3月28日.

(4) 今後の利用予定:

上記成果に記載の通り、さらに長時間の計算が必要となるため、平成 26 年度も継続して大型 計算機システムを使用することを予定している。

5.6.3 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 X線レーザー応用研究グループ

(1)利用目的:

レーザーによる陽子発生において、実応用に必要とされる高エネルギーかつ高品質で、かつ十 分な個数を有した陽子ビームを生成するための条件を、コンピューターシミュレーションにより 調査・研究する。用いるターゲットの素材や構成の違いにより、得られる陽子ビームのエネルギ ーと品質は大きく異なってくる。最適な条件をシミュレーションにより調査・研究することは、 レーザーによる数十 MeV 級陽子発生技術の開発には重要である。今年度の研究では、昨年度ま でに得られた成果を用い、実際の医療応用に必要とされている 200MeV 陽子の生成条件の検討 を実施した。使用するレーザーは、現在実際に利用可能なレーザー性能である、出力=620TW、 強度=5×10²¹W/cm²、エネルギー=18J、集光径とパルス幅は半値幅でそれぞれ 4 λ と 10 λ (λ =0.8 μ m) である。目的とするエネルギーの陽子ビームを得るための研究であるので、より正確 な生成陽子のエネルギーを得る必要がある。よって、3 次元解析とし大規模計算を実施した。

(2)利用内容·結果:

昨年度に、水素のターゲットを用いるこ とで、200MeVの陽子ビームが得られるこ とを示した。しかし、水素は室温で気体で あるため、水素ターゲットの作成と取扱い には困難が予想される。そこで今年度は、 水素を多く含みかつ利便性に優れた物質 としてポリエチレン(CH₂)を取り上げ、生



成陽子の特性を調査・研究した。そして、ポリエチレン(CH₂)ターゲットを用いた場合、レーザ ー垂直入射(図1)において170MeV、30°入射(図2)において210MeVの陽子が生成される ことを示した。この時、陽子の加速過程において、まず Radiation Pressure Acceleration(RPA) により、CH₂は炭素イオンと水素イオン(陽子)の2層に分離する。その後の各層のクーロン爆 発と各層間の電荷反発力により、陽子は高エネルギーとなることがわかった。

次に、ポリエチレンと同様に炭素と水素を含んだ物質であるが、水素の割合が非常に小さい物 質として、炭素のディスクに水素をドープさせたターゲット(ドープドターゲット)を用いた場 合の検討を実施した。このとき、加速過程初期において、ドープドターゲットは、炭素層の上に

低密度の薄い水素層を配置したダブルレイヤーターゲット を構成することを示した。その結果、エネルギー広がりの 小さな陽子ビームを生成することがわかった。ターゲット 前方に、ピンホールを設置することで、平均エネルギーが 120MeV で、エネルギー広がりが 7%の高品質な陽子ビーム が得られることを示した(図3)。ダブルレイヤーターゲッ トの作成に関しては、そのサイズおよび構成に起因する困



難さが指摘されていた。しかし、ダブルレイヤーターゲットは必ずしも事前に作成・準備する必 要は無く、それは重い物質と少量の軽い物質(水素)から成るターゲットを用いると、加速過程

の初期においてRPAの作用で構成される

ことを示した。

炭素と水素が混ざった物質において、 水素の割合が高い物質をターゲットに用 いることで、高エネルギー(200MeV 以 上)が、水素の割合が低い物質を用いる ことで、エネルギー広がりの小さい高品 質な陽子ビームが得られることを示し た。そして、それは RPA、クーロン爆発、 電荷反発力の結果であることを示した。



(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

発表

- T. Morita "Proton acceleration by using the deformation and movement of a target "6-th Asian Summer School and Symposium on Laser-Plasma Acceleration and Radiation (ASSS-6) 2013 年9月3-6日、関西光科学研究所(木津).
- 2) T. Morita "Layer formation of a target in laser ion acceleration" High Energy/Average Power Lasers and Intense Beam Applications VIII SPIE Photonics West 2014, 1-6 February 2014, San Francisco, United States.

論文

- 3) T. Morita "Laser ion acceleration by using the dynamic motion of a target " Physics of Plasmas **20**, 093107 (2013).
- 4) T. Morita "Approach towards quasi-monoenergetic laser ion acceleration with doped target" Physics of Plasmas **21**, 053104 (2014).
- 5) T.Esirkepov, J.Koga, A.Sunahara, T.Morita, M.Nishikino, et al. "Prepulse and amplified spontaneous emission effects on the interaction of a petawatt class laser with thin solid targets " Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A **745**, (2014), pp.150-163.

(4) 今後の利用予定:

これまでの成果を生かし、より高エネルギーかつ高品質な陽子ビーム生成条件の調査・研究を 実施する予定である。今年度までの研究においては、ディスク形状のターゲットを用いてきた。 それは、その形状が高エネルギーの陽子を生成するには有利である場合が多いからである。しか し、今年度の用いたターゲットは、直径=6.4µm、厚み=0.4µm であり、その作成は容易ではない 面もある。そこで今後の課題は、実機製作の観点から、より作成が容易なフォイル状のターゲッ トを使用した場合の検討を行なうことである。シミュレーションにおいては、大規模3次元計算 を実施するため高性能な計算機が必要となり、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。

5.6.4 レーザー場中にある固体電子ダイナミクスの第一原理計算シミュレーション

First-principle Calculation for the Electron Dynamics in a Bulk Crystal under an Intense Laser Field

乙部 智仁

高強度場物質制御研究グループ

(1)利用目的:

強い長波長光によって電子励起が起きない状況でも光学特性が大きく変化する現象(動的フラ ンツーケルディッシュ効果)を数値計算から明らかにし、固体の量子制御実験の研究計画決定に 於ける基本的知見を与える。

(2) 利用内容·結果:

図1に典型的計算例を示した。図1(a)は MIR 光(青破線)とUV 光(赤実線)を示した。プ ローブ光であるUV 光のパルスのピークの時刻Tpは13fsとし、MIR 光電場のピークと一致さ せた。この時得られたUV 光に対する電流密度を図1(b)の青破線で示した。この電流密度と電場 のフーリエ変換の比から誘電率の虚部が計算できる(図1(c))。図1(c)中の青点破線はMIR 光が 無い場合、赤破線はMIR 光の場合の誘電関数である。この二つの量の差がDFKEのシグナルと なり黒実線でしめしてある。明らかにバンドギャップである5.5eVより下で吸収が発生し、それ より上のエネルギー領域では吸収効率の減少が起きている。これが正しくDFKEの特徴である 光物性の変化であり、計算機上での時間分解 pump-probe 実験に成功している事がわかる。

図 2 紫外光の時刻 Tp を変化させた時の DFKE のシグナルの変化を示した。(a)は規格化した MIR 光の電場、(b)-(f)は MIR 光の最大電場強度を変えた場合の結果をそれぞれ示している。各 図に股がっている実線と破線はそれぞれ MIR 光の電場の絶対値最大と最小の時刻をしめしてい る。MIR 光が弱い時は DFKE シグナルが MIR 光の電場が最小になる時にピークを示している。 また明らかに MIR 光の強度が上がると共に DFKE シグナルの時刻が移動していっていることが 分かる。このことから DFKE シグナルは長波長光の強度によって非常に敏感に変化することが 明らかとなった。

またシミュレーションと同時に2準位放物線バンド系を仮定した解析的理論を構築した。この 理論を用いた計算結果を図3に示した。単純なモデル系にも関わらず、DFKE シグナルが MIR 強度の増加と共に移動して行く様子が再現されている。理論式から DFKE が誘電関数の実部と 虚部を混ぜる効果があり、この効果と多光子過程によるサイドバンドの構造が相まって DFKE シグナルの時刻を決めている事が明らかとなった。これは高強度場に曝された物質に於ける普遍 的な効果であり、高強度 THz 光だけでなく様々な高強度場による物質制御の基本的性質を明ら かにした。

以上数値計算から得られた時間分解 DFKE に対する知見はこれまでの実験、理論では得られ なかったものである。本研究は未だ実験では難しい時間分解 DFKE の観測を、数値実験を用い て行いそれに対する理論研究も行うことで高強度場に曝された物質の光物性の詳細を明らかに した重要な成果である。



の電場波形と(b)UV 光による電流密度 (c)
(b)の結果から得られた誘電関数の虚部





(a) 規格化した MIR 光電場
(e)-(f)各 MIR 光強度における誘電
関数の虚部の時間変化

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

原著論文

- 1) S. A. Sato, K. Yabana, Y. Shinohara, T. Otobe, and G.-F. Bertsch, [Numerical pump-probe experiments of laser-excited silicon in nonequilibrium phase], Physical Review B 89, 064304 (2014).
- 2) K.-M. Lee, Chul Min Kim, Shunsuke A. Sato, Tomohito Otobe, Yasushi Shinohara, Kazuhiro Yabana, and Tae Moon Jeong, 「First-principles simulation of the optical response of bulk and thin-film α-quartz irradiated with an ultrashort intense laser pulse」, Journal of applied physics 115, 053519 (2014).
- 3) Takayuki Kumada, Hiroshi Akagi, Ryuji Itakura, Tomohito Otobe, and Atsushi Yokoyama, Femtosecond laser ablation dynamics of fused silica extracted from oscillation of time-resolved reflectivity, Journal of applied physics 115,103504 (2041).

学会発表等

- 4) T. Otobe, Y. Shinohara, S.A. Sato, and K. Yabana, 「First-principle real-time calculation for the dynamic Franz-Keldysh effect」,励起ナノプロセス研究会.
- 5) T. Otobe, Y. Shinohara, S.A. Sato, and K. Yabana, 「First-principle real-time calculation for the dynamic Franz-Keldysh effect」, 光量子シンポジウム.
- 6) 乙部智仁,「高強度 THz レーザーによる超高速光スイッチ実現に向けた数値実験」, 京コン ピュータ中間報告会.
- 7) 乙部智仁、篠原康、佐藤駿丞、矢花一浩,「動的 Franz-Keldysh 効果測定の理論及び第一原 理計算」,応用物理学会秋季大会、招待講演.

(4) 今後の利用予定:

- ・ 電子励起がある時の誘電体の光物性変化の時間依存性のシミュレーション
- ・ レーザーによる電子励起過程の解析的理論構築
- ・ レーザーによる非熱加工解明に向けたシミュレーション

5.6.5 放射線による DNA 損傷のシミュレーション研究

Simulation Study for DNA Damage due to Radiation

森林 健悟

照射細胞解析研究グループ

(1)利用目的:

記粒子線によるがん治療は高い治療効果を持つことが知られているが、その有力な理由として クラスターDNA 損傷ができるためと考えられている。しかしながら、イオンビーム照射による クラスターDNA 損傷の生成機構は分かっていない。この機構が分かれば、より高い治療効果を もつがん治療の実施につながるので、シミュレーションで炭素線でのクラスターDNA 損傷の生 成機構を調べる。

(2) 利用内容•結果:

クラスターDNA 損傷の実体は今だ明らかにされていないため、シミュレーションを用いてイ オンビームによって生成する DNA 損傷の予測を進めている。従来の DNA 損傷生成シミュレー ションでは、イオンビームが分子を電離させる効果、さらにはそのとき生じる電子が DNA に作 用する効果が考慮されてきた。しかし、それらに加え、このコードを用いて、様々なエネルギー での陽子及び炭素イオン照射により生成される水分子イオンとその水分子イオンが作る電場、お よび形成された電場に影響を受ける電子の運動を解析した。その結果、イオンビームの衝突電離 断面積が大きいとき、多くの二次電子がイオンビームの軌道付近に束縛されていることを明らか にした。

平成 25 年度は、この電子の運動のシミュレーションを用いて炭素線よる動径線量の研究を行った。動径線量は場所ごとの線量を表すが、イオンと物質との相互作用を理解する上で重要な物理量であり、生命医科学の分野に広く応用されている。すなわち、動径線量分布は、クラスター DNA 損傷生成過程の研究に不可欠な DNA 損傷の空間分布を示すことになり、この生成過程の 解明には、動径線量分布が有用であることがわかる。動径線量が最も大きな値を持つ場所は入射 イオンの軌道からナノメータ辺りであるが、現在のところナノメータの分解能で観測する手段が なく、実験は非常に困難で、シミュレーション研究が不可欠である。普及されている動径線量に は、その動径に沿って付与する線量が大きく異なる二通りのモデルがある。これは、イオンと物 質との相互作用の理論モデルが二通りあり、それらがそれぞれ異なった線量分布を導き出したた めである。我々の新規モデルは、従来の二通りの理論モデルの特徴を合わせ持つので、イオンエ ネルギー領域ごとに従来の動径線量分布の計算モデルが正しく物理現象を記述しているかどう かの判決が期待できる。 図1に動径線量と入射イオン(3 MeV/u、15MeV/u、80 MeV/u)の軌道からの距離との関係を 示す。この図には、我々の新規モデルと従来の二通りのモデル(2通りのモデルの相違は、電子 の振動運動の有無)から算出した動径線量の値を示している。エネルギーが3 MeV/u のとき電 子の振動運動は入射イオンの軌道付近で動径線量に大きな影響を与えることがわかった。一方、 イオンエネルギーが高くなるにつれて、電子の振動運動の影響力は小さくなることがわかった。

従来の二通りの理論モデルの特徴を合わせ持つ我々の新規モデルを用いると、炭素線のイオン エネルギー領域により,従来の二通りの動径線量分布モデルのどちらかの傾向が現れるように自 動的に振り分けることができた。これは、従来のモデルよりも現実に近い物理現象が記述できる ことを示唆した結果である。



図1 動径線量と炭素線 [(a) 3 MeV/u, (b) 15 MeV/u, (c) 80 MeV/u] の軌道からの距離(r)
との関係. 我々の新規モデル(◇)、電子の振動運度を考慮しないモデル(▲)、電子の振
動運度を考慮するモデル(---)での動径線量分布を示した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文

- 1) K. Moribayashi, 'Movement of secondary electrons due to the irradiation of heavy ions: Role of the composite electric field formed from the polarization of molecules and molecular ions', Rad. Phys. Chem., vol.85, (2013), pp.36 - 41.
- K. Moribayashi, 'Demonstrations for the effect of composite electric fields of molecular ions on the motion of secondary electrons due to ion irradiation', Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B, vol.314, (2013), pp.30 – 33.

 K. Moribayashi, 'Radial dose calculation due to the irradiation of a heavy ion: Role of composite electric field formed from the polarization of molecules and molecular ions', Rad. Phys. Chem., vol. 96, (2014), pp.211 - 216.

学会発表

- 4) 森林健悟,「重粒子線で生成するプラズマ中での再結合の役割」,日本物理学会 2013 年秋季 大会,徳島大,徳島市,2013 年 9 月.
- 5) 森林健悟,「新規モデル:イオンビームで生じる電場の DNA 損傷への効果」,第8回高崎量 子応用研究シンポジウム,高崎シティーギャラリー,高崎市,2013年10月(招待講演).
- 6) 森林健悟,「重粒子線で生成するプラズマ中での再結合の役割 II」,日本物理学会 2014 年次 大会,東海大,平塚市,2014 年 3 月.

(4) 今後の利用予定:

従来のモデルでは、動径線量は、電子の衝突電子励起・電離過程によるエネルギーの減少量か ら評価されている。我々の新規モデルでも同じ過程から動径線量を評価した。イオン入射後 100 フェムト秒の時点で電子となった電子のエネルギーは水分子の電子励起や電離を起こせないぐ らい低くなっていた。それ故に、動径線量シミュレーションとしては、100 フェムト秒で十分と 判断した。しかしながら、これらの低エネルギー電子は、長い時間を掛けて弾性散乱により標的 の温度を増加させ、電子・分子間の捕獲解離、分子の回転励起などを起こし、エネルギーを減少 しながら放射線生物学で使用されている化学的過程へと移行する。そこで、100 フェムト秒以降 の物理的過程から化学的過程への移行中での物理現象の解明を目指す。さらに、標的の水中に DNA を挿入した標的も取り扱う予定である。電子・DNA の部位間の捕獲解離過程では、この過 程のエネルギーの減少量は数 eV と電子励起や電離(一回の衝突に対して、エネルギーの減少量 は 10-30eV 程度)より低く、動径線量の評価では無視できるが、DNA 損傷への効果としては無 視できない。さらに、水分子イオンのクーロン爆発も取り扱うことを予定している。これらの分 子イオンは非常に多く存在し、クーロン爆発により DNA と衝突して、大きな損傷を与えること が予測できる。

5.6.6 物質における3次元構造生成シミュレーションプログラムの作成

Simulation Program for 3 Dimensional Structure Generation in Materials

横田 光史

多重自由度相関研究グループ

(1) 利用目的:

物質における構造生成は、小さいスケールでは磁性体、高分子系などの物質科学分野から、大 きなスケールでは宇宙の大規模構造のような宇宙論にまで及んでいる。構造生成過程の詳細は複 雑な非線形、非平衡問題なので、それを明らかにするためにはコンピューターシミュレーション が不可欠である。特に、生成される構造が複雑な場合には多大な計算時間が必要となるので、大 型計算機の利用が有効である。

高分子系の粘弾性相分離現象においては、粘性の大きな少数成分がネットワーク構造を作るこ とが知られている。宇宙の大規模構造もネットワーク的な構造をとることが知られている。2つ の系は流体力学的な方程式で記述することが可能で、両者の間に近似的な関連があることが指摘 され、2次元において調べられている。3次元系においても両者の関連性を明らかにするために シミュレーションを行っていく。

磁性体における磁区構造生成は、パターン形成という観点および記憶媒体という実用性の点からも盛んに研究されてきた。それらの点から、磁性体の構造の乱れの影響は大きな課題となっている。今までに2次元的な薄膜系において、交換相互作用にランダムネスがある系におけるシミュレーションを行ってきた。磁性体に厚みがある3次元的な場合は、実験的には内部の磁化分布を調べることができないので、シミュレーションを用いた研究の重要性が大きいと思われる。

(2)利用内容·結果:

今までに2次元系でネットワーク構造形成が見られる、ある種の高分子系を記述する流体モデルとそれを近似して得られる2次元に拡張したバーガース方程式についてのシミュレーションを行い、構造パターンと構造因子について調べてきた。(T. Yokota, Phys. Lett. A 377 (2013) pp.139-144)

これを3次元系に拡張した。高分子系の粘弾性相分離において粘性の大きな成分がネットワーク構造をつくっていく過程は、2流体モデルの方程式系によって記述される。この2流体モデルは3次元の場合、近似的に多次元拡張したバーガース類似方程式に帰着する。バーガース方程式は宇宙の大規模構造生成のモデルとしても利用されてきている。これらの方程式についてのシミュレーションも行い、構造パターンとスケールされた構造因子の時間発展を求めた。

図 1 に 2 流体モデルとバーガース類似方程式によって生成された 3 次元ネットワーク構造の 時間発展の例を示す。両者で定性的に似たネットワーク構造が生成されていることがわかる。

JAEA-Review 2014-043



t=300

t=200

図1 ネットワーク構造生成の時間発展 (左:2流体モデル、右:バーガース類似方程式)

また、薄膜磁性体における磁区構造生成についても、交換相互作用のランダムネスの影響を中 心にシミュレーションによって調べてきた。図2にランダムネスによる磁区パターンの変化を示 す。


図2 磁区構造生成における交換相互作用ランダムネスの影響(*δ*: ランダムネスの大きさ)

パターンの他、磁化分布や構造因子などを調べている。

さらに、磁性体の厚みを考慮したシミュレーションも計画しており、例えば図3のようなパタ ーンが得られる。



図 3 磁性体の厚み(Lz=5)を考慮した時の磁区構造(δ=0.6)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 横田光史、「2次元磁区パターン形成におけるランダムネスの影響」、日本物理学会 2013 年 秋季大会(2013.9.25-28)(徳島).
- 2) 横田光史、「2次元磁区パターン形成におけるランダムネスの影響 II」、日本物理学会第 69 回年次大会(2014.3.27-30)(平塚).

(4) 今後の利用予定:

ここに示したランダム磁性体における磁区形成現象のシミュレーションは磁性体の厚みを大 きくしていくなどすると計算時間が多くかかってくるので、プログラムを並列化するなどして、 大型計算機システムの利用を継続していきたい。 5.6.7 ヒトなど真核生物の核内DNA構造ダイナミクス解析のための大規模シミュレーション技術の開発とその実行

Development of Large Scale-molecular Simulation Method for Analyzing DNA Dynamics in Nucleus and its Application

> 河野 秀俊、池部 仁善、櫻庭 俊 分子シミュレーション研究グループ

(1) 利用目的:

DNA の転写、複製、修復、組み換えは、生命活動の根幹をなす現象である。ヒトを含め、真 核生物の DNA は、数メートルに及ぶ DNA が直径約数ミクロンの核の中にコンパクトに収納さ れている。その収納された構造の基本単位構造がヌクレオソームである。ヌクレオソームを構成 するタンパク質分子の組成やヌクレオソームのゲノム上での位置を変えたりすることにより、上 記の現象が制御されていることがわかってきた。本解析では、その分子機構を解明する。分子生 物学的な手法では、ゲノムのどの位置にヌクレオソームがあったかという静的な情報は得ること ができるが、その位置を変える様子や分子のダイナミクスを観察することはできない。そこで、 計算機シミュレーションを用い、さまざまなヌクレオソーム(タンパク質組成の違い、化学修飾 の違い)のダイナミクスを明らかにすることが本研究の目的である。

(2) 利用内容·結果:

ヌクレオソームを構成するヒストンタンパク質 には、ふらふらとして特定の構造をとらない領域 (テール)が存在する(図1)。その領域は化学修 飾を受ける部位であり、修飾によりヌクレオソー ムの構造やダイナミクス、他の分子との相互作用 が変わる。従って、その振る舞いを調べることは 分子機能の解明に不可欠である。昨年度に開発し その有効性を実証した、静電相互作用が強い系で も効率的に構造探索を可能とする新たなアルゴリ ズム、Adaptive Lambda Square Dynamics (ALSD)法を用いて、ヒストンタンパク質のテール 部分の構造プロファイルを明らかにした。また、 ヒストンテールには+1の電荷を持つ2種類のア ミノ酸残基(アルギニンとリジン)が多数存在する が、ヒストンテール構造内におけるこの2種類の アミノ酸残基の役割が大きく異なる(図 2)こと が示唆された。リジンは、アルギニンと比べて比



図1 ヌクレオソームの全体図。H3 ヒス トンテールを赤色で示す。 較的溶媒側に露出することが多かったのに対し、アルギニンは DNA と相互作用していることが 多かった。このことから、アルギニンは、構造の安定化に寄与していると考えられる。一方、リ ジンは化学修飾を受け、分子マーカーとして重要な働きをしていることが知られている。この観 点からみて、比較的高頻度に溶媒に露出するリジン残基の振る舞いは、エピジェネティクスにお ける分子マーカーとしての働きと相矛盾しない。つまり、リジン残基は、進化的に分子マーカー としての役割を果たすようになってきたと想像される。



図2 H3 ヒストンテールのアミノ酸残基の DNA コンタクト率

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

招待講演

- 1) Kono. H, "Understanding Protein-DNA Recognition by Structural Bioinformatics and Molecular Dynamics Simulation", Second BMIRC International Symposium on Advances in Bioinformatics and Medical Engineering, Iizuka, (2014/1).
- 2) Kon. H, ヒストンバリアントとヌクレオソーム構造の安定性. HPCI 戦略プログラム分野1 ×分野2 in 名大シンポジウム「生体分子複合システムを計算する-相互作用は何をもたらす のか-」,名古屋, (2013/12).
- 3) Kono. H, "立体構造から探るタンパク質-DNA 認識機", 2013 年年会生命医薬情報学連合大 会, 東京, (2013/10).
- 4) Kono. H, Yonetani. Y, Ikebe. J, Sakuraba. S & Ishida. H, Free Energy Profile for Nucleosomal DNA Unwrapping, 第 51 回日本生物物理学会年会, 京都, (2013/10).

学会発表

5) Kono. H & Yonetani. Y, "Dissociation Free-Energy Profiles Of Specific And Non-Specific Dna-Lacrepressor Complexes:Adaptive Biasingforce Molecular Dynamics Study", Biophysical Society 58th Annual Meeting, San Francisco,U.S.A, (2014/02).

- 6) Ikebe. J, Sakuraba. S & Kono. H, Adaptive lambda square dynamics simulation: an efficient conformational sampling method for biomolecules. In Biophysical Society 58th Annual Meeting, SanFrancisco, USA (2014/02).
- 7) Arimura. Y, Osakabe. A, Shirayama. K, Takeda. Y, Miya. Y, Tachiwana. H, Kono. H & Kurumizaka. H, "HCENP-A ヌクレオソームにおける動的な DNA 構造とその制御機構", 第 36 回日本分子生物学会年会, 神戸, (2013/12).
- 8) Shirayama. K, Arimura. Y, Tachiwana. H, Kono. H & Kurumizaka. H, "CENP-A ヌクレ オソーム特異的な DNA 構造の構造生物学的・生化学的解析", 第86回日本生化学会大会, 横 浜, (2013/9).

論文発表

- 9) Ikebe. J, Sakuraba. S & Kono. H, "daptive lambda square dynamics simulation: an efficient conformational sampling method for biomolecules", J Comp Chem 35, pp.39-50, (2014).
- 10) Yonetani. Y & Kono. H, "Dissociation Free-Energy Profiles of Specific and Nonspecific DNA-Protein Complexes", J Phys Chem B 117, pp.7535-45, (2013).
- 11) Sunami. T & Kono. H, "Local Conformational Changes in the DNA Interfaces of Proteins", PLoSONE (Internet) 8, e56080, (2013).
- 12) Kai. T, Tokuhisa. A & Kono. H, "Calculation of Molecular-Structure-Based Damage Caused by Short-Pulse High-Intensity X-ray Lasers", Journal of the Physical Society of Japan, 114301 (6 pages), (2013).

(4) 今後の利用予定:

平成 25 年度は ALSD 法によりヌクレオソーム上に存在する H3 ヒストンテールの構造探索 を行うことができた。平成 26 年度は本計算結果の更なる解析を進める予定である。また、さま ざまな化学修飾を受けた H3 ヒストンテールについて同様の計算を実行し、化学的修飾の有無に よるヒストンテールの構造の違いやヒストンテールを認識する他のタンパク質分子との相互作 用機構を明らかにしていく計画である。

5.6.8 セシウム選択的イオン吸着分子の計算機予測に基づく設計

Computational Design of Caesium-ion Selective Binding Protein

櫻庭 俊

分子シミュレーション研究グループ

(1)利用目的:

福島第一原子力発電所事故処理のための環境修復技術の開発は本機構の主要な任務の一つで ある。本研究では、セシウムイオン原子を選択的に吸着するタンパク質を計算機の支援により設 計する。セシウムイオン原子はその化学的な性質が同族元素であるカリウム・ナトリウム原子と 似通っているため、こうした原子からセシウムイオンを選択的に峻別する人工タンパク質を設計 する必要がある。

本研究では古典分子動力学計算と自由エネルギー摂動法を用いて人工タンパク質を設計する。 人工タンパク質の構造を予測し、分子動力学計算によりその安定性を評価し、分子動力学計算に 自由エネルギー摂動法を組み合わせることでその結合自由エネルギーを評価する。

(2)利用内容•結果:

本課題は平成 25 年下半期に 開始したものであり、現在予備 計算を完了し、本計算を実施中 である。これまでの計算により 候補タンパク質の安定性を評価 し、また一部のタンパク質につ いてそのイオン結合能力を、自 由エネルギー摂動法を用いて比 較した。現在までに見つかった 候補タンパク質にはセシウムイ オンをナトリウムイオンに比べ 100 倍以上強く吸着すると予測 されるものが含まれている(図 1)。



図1 (左) 設計により発見された、セシウムイオン吸着たんぱ く質の候補構造の一つ。この配列はセシウムイオンをナトリウ ムイオンに比べ強力に(>100 倍)結合すると予測される。(右) セ シウムイオン結合部位の拡大図。ベンゼン環とセシウムイオン の相互作用により、イオンを安定に保持すると予測されている。

(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:

本課題での計算機利用は予定通り2014年3月で終了した。計算による予測結果に基づき、現 在、生物学実験による検証が進行中である。現在のところ後続の計算の計画・予定は無いが、実 験の結果如何によってはフィードバックを受けての再度の設計が必要となる。再設計の際には可 能であれば大型計算機を利用することを計画している。

5.6.9 放射線影響異常分子の生体機能修復関連タンパク質による分子認識機構解析 Analysis of Molecular Recognition Mechanism of Biomolecular Function

Repair Related Proteins for Radiation-damaged Molecules

石田 恒、松本 淳

分子シミュレーション研究グループ

(1) 利用目的:

生体分子は様々な構造変化をおこし、その機能を発揮する。このような構造変化を原子レベル で観測するには、分子動力学シミュレーションを用いるのが最適である。

巨大な酵素複合体であるプロテアソームは、生体内でできた異常タンパク質や役目を終えて不 要になったタンパク質を分解・排除する。更にプロテアソームは活性調節因子と結合して様々な 生命現象(癌、免疫、DNA 修復、神経、老化)において中心的な役割を果たしている。本年度 は、異常タンパク質を認識し分解するプロテアソームを主な対象(図1参照)とし、その分子認 識機構を解析した。

プロテアソームのゲート構造(図1参照、赤で示された Tyr8 近傍のアミノ酸で構成される構造)が基質タンパク質移動に重要であることは生化学実験によりわかっている。しかし、その仕組みの考察は静的な X 線構造解析、電子顕微鏡像構造解析によるものがほとんどであり、プロテアソーム内部にある基質タンパク質のダイナミクスを広範囲(50Å以上、図1参照)かつ原子レベルで観測することは、現在の実験的手法ではほぼ不可能である。また、プロテアソームおよび基質タンパク質のダイナミクスに注目した分子シミュレーション研究は計算規模が大きくな



図 1 活性調節因子(activator、右側)はプロテアソーム(CP、左側)に結合してプロテアソーム のゲート(gate、赤)を開く。これにより基質タンパク質(substrate、黒)がプロテアソー ム内部に取り込まれ、短いペプチド断片に分解される。

るため、これまでなかった。本研究では、原子力機構と東大が共同開発している大規模並列分子 動力学シミュレーションプログラム SCUBA を用いることで、タンパク質分解酵素プロテアソー ムと ATP 依存型および非 ATP 依存型の活性調整因子複合体の内部を移動する基質タンパク質の 移動自由エネルギー地形を得るに成功し、プロテアソームの機能発現メカニズムの一端を明らか にすることができた。

(2) 利用内容·結果:

1. 大規模系自由エネルギー計算を用いることにより、タンパク質分解酵素プロテアソーム内 部を通過する基質移動の反応遷移状態を観測し、自由エネルギー地形を計算した。計算方法は、 自由エネルギー計算手法の一つである ABMD (Adaptively Biased Molecular Dynamics) 法を 用いた。東大・原子力機構が共同開発している大規模並列分子動力学シミュレーションプログラ ム SCUBA に ABMD 法を搭載することで、これまでには不可能であった大規模系自由エネルギ ー計算が可能となった。

自由エネルギー地形を解析することにより、プロテアソームのゲート開閉が基質タンパク質の 移動に及ぼす影響を定量的に評価することができた。特に、ゲートから伸びた構造をとらない N 末端ペプチドの構造エントロピー変化が自由エネルギー地形に決定的な影響を与えていること が初めてわかった。本解析により、免疫反応における抗原ペプチド生成・排出に関与するハイブ リッドプロテアソームの機能発現モデルを提唱することができた(図2参照)。



- 図 2 タンパク質分解酵素プロテアソーム、19S (ATP 依存型活性調整因子)、PA28 (非 ATP 依存型活性調整因子)から構成されるハイブリッドプロテアソームに おける、基質タンパク質の移動自由エネルギー地形モデル。
 - (a) 基質タンパク質が外部から 19S に入る。
 - (b) 基質タンパク質がほどける。(ATP 加水分解エネルギーを用いる。)
 - (c) 基質タンパク質が 19S からプロテアソームに移動し、短いペプチド断片に 分解される。
 - (d) ペプチド断片がプロテアソームから PA28 へ移動し、最終的には PA28 側か ら外部へ排出される。

2. 大規模系自由エネルギー計算手法(ABMD 法)を拡張して、反応座標の自由度をこれまでの1次元から2次元以上を取り扱えるようにした。これにより、分子の並進、回転についての自由エネルギー計算が可能となった。そして、DNA ポリメラーゼと結合した放射線損傷 DNAの並進、回転の2次元自由エネルギー計算を開始した。これらの自由エネルギー地形から、DNAポリメラーゼの機能発現メカニズムが明らかになると期待される。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文

1) Ishida, H., Essential function of the N-termini tails of the proteasome for the gating mechanism revealed by molecular dynamics simulations, Proteins (2014) (DOI: 10.1002/prot.24553).

国内学会

- Iwasaki, K., Takagi, J., and <u>Matsumoto, A</u>. Superimposition of a crystal structure over 2-D EM images, 69th Annual Meeting of Japanese Society of Microscopy (平成 25 年 5 月、大阪).
- 3) Kono, H., Yonetani, Y. Ikebe, J. Sakuraba, S. and **Ishida, H**., Free Energy Profile for Nucleosomal DNA unwrapping, 第51回日本生物物理学会年会(平成25年10月、京都).
- 4) **Ishida, H. and Matsumoto, A**., Free energy landscape of substrate passing inside proteasome activator complex, 第51回日本生物物理学会年会(平成25年10月、京都).
- 5) <u>Matsumoto, A</u>., Takagi, J, and Iwasaki, K.: A new approach to build 3D atomic model from single electron microsope image, 第51回日本生物物理学会年会(平成25年10月、 京都).
- 6) <u>石田恒</u>、分子動力学シミュレーションによる DNA ポリメラーゼ η の損傷乗り越え修復メカ ニズム解析, 第 22 回 DNA 複製・組換え・修復ワークショップ (平成 25 年 11 月、仙台).

(4) 今後の利用予定:

SCUBAの更なる開発を進め、生体機能修復関連タンパク質群における大規模分子動力学シミュレーションによる機能発現解析を継続する。

5.6.10 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

量子シミュレーション研究グループ

(1) 利用目的:

当課題は、新機能物質・材料の創製に資するため、第一原理分子動力学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目的とする。平成25年度に実施した2つのサブテーマの 目的及び意義を以下に記す。

① カーボンアロイ型 PEFC カソード触媒の触媒機構の研究

本サブテーマは、NEDO プロジェクトの一環として実施した。第一原理分子動力学に基づい た化学反応シミュレーションを駆使してカーボンアロイ触媒における触媒機構を解明し、燃料電 池の実用化に必要な安価で高効率な白金代替触媒の開発指針を示すことを目指している。

② 粘土物質におけるセシウムの吸脱着過程の研究

土壌から放射性物質を効率的に分離回収する技術の開発は福島の本格除染を実施する上で喫 緊の技術課題となっている。本サブテーマでは、福島支援の一環として、土壌から放射性物質を より効率的に分離回収するための技術開発に資することを目的に、放射性セシウムを吸着しやす い粘土物質におけるアルカリ金属イオンの吸脱着過程を原子レベルで解明する。

(2) 利用内容·結果:

① 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 25 年度は、昨年度有用性を実証した電極電位を考慮した第一原理分子動力学熱平衡状態 計算による活性化過電圧の定量的評価に基づいて、カーボンアロイ触媒での酸素還元活性の最適 化、および触媒活性の支配因子の特定を試みた。これまでの検討から、最高活性が期待される N-S 共ドープ系カーボンアロイ触媒における酸素還元反応による自由エネルギーの変化を図 1 に示す。このモデル触媒では右上の挿入図に示したようにグラフェンエッジに graphitic N と thiopyran-like S がドープされており、これらはそれぞれ sp^2 炭素の電子供与性と電子受容性を 増大させるように働く。昨年度の検討から graphitic N のみがグラフェンエッジにドープされた 場合には、 O_2 分子は graphitic N の隣のエッジ炭素に吸着するが、電位を 0.3 V vs. SHE 以上に すると電気化学反応による C=O の還元速度が著しく遅くなるため、触媒活性が低下することが 示唆されている。thiopyran-like S を共存させ π 電子の過剰状態を解消すると、C=O の電気化学 反応による還元が 0.75 V vs. SHE でも速やかに進行するようになることがわかった。これは sp^2 炭素の電子供与性と電子受容性を調整しバランスを取ることで、カーボンアロイ触媒の酸素還元 活性を最適化できることを示している。さらに、酸素吸着・脱着の活性化障壁がどちらも 0.3 eV であることが最適化の目安となることが示唆された。



図 1 電極電位 U を考慮した第一原理分子動力学熱平衡状態計算から得られた最高活性が期待 される窒素と硫黄を共ドープしたカーボンアロイ触媒における酸素還元反応による自由 エネルギーの変化。

② 粘土物質におけるセシウムの吸脱着過程の研究

平成25年度は、福島の土壌に豊富に含まれるバーミキュライトを対象に、セシウムを吸着することによる層間水の脱水機構を検討した。バーミキュライトの層間をそれぞれMg²⁺、K⁺、およびCs⁺で飽和した場合の層間水の平均二乗変位を図2に示す。Mg²⁺とK⁺の周囲の水は粘弾性を示すのに対してCs⁺では弾性が失われることがわかった。また平均二乗変位から求めた拡散係数の粘土層に並行な成分は、通常の水の2倍程度に増大することがわかった。これはCs⁺が層間に入ることにより層間水が維持できなくなることを示唆している。



図 2 Mg²⁺, K⁺, Cs⁺ で飽和させたバーミキュライトにおける層間水の平均二乗変位 (MSD)。
実線(破線)は粘土層に並行(垂直)成分である。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表等

- 1) <u>T. Ikeda</u>, G. Chai, Z. Hou, and K. Terakura, "Possibilities of nitrogen-doped defects in graphene as catalytic sites of oxygen reduction reactions", RPGR2013, September 9-13/ Tokyo, Japan.
- 2) Z. Hou, D. Shu, G. Chai, <u>T. Ikeda</u>, and K. Terakura, "Oxidation of Monovacancy and Its Influence on Nitrogen Doping in Graphene", RPGR2013, September 9-13/Tokyo, Japan.
- 3) G. Chai, Z. Hou, D. Shu, <u>T. Ikeda</u>, and K. Terakura, "Mechanisms for Oxygen Reduction of Nitrogen-Doped Carbon Alloy Catalytss", RPGR2013, September 9-13/Tokyo, Japan.
- 4) <u>T. Ikeda</u>, "Molecular Dynamics Simulation for Cs Sorption Behavior under Various Kinds of Conditions", Caesium Workshop, September 30-October 3/Fukushima, Japan.
- 5) <u>池田隆司</u>、「Metadynamics 法の理論と応用」、近畿化学協会コンピュータ化学部会公開講演 会「化学反応経路の自動探索」6月10日/大阪市(依頼講演).
- 6) <u>池田隆司</u>、G. Chai、Z. Hou、寺倉清之、「第一原理分子動力学法によるカーボンアロイ触媒 における酸素還元反応機構の研究 II」、日本物理学会 2013 年秋季大会 9 月 25-28 日/徳島市.
- 7) <u>池田隆司</u>、G. Chai、Z. Hou、寺倉清之、「第一原理分子動力学法によるカーボンアロイ触媒 における酸素還元反応機構の研究 III」、日本物理学会第 69 回年次大会 3 月 27-30 日/平塚市.

原著論文

- 8) H. Niwa, M. Saito, M. Kobayashi, Y. Harada, M. Oshima, S. Moriya, K. Matsubayashi, Y. Nabae, S.Kuroki, <u>T. Ikeda</u>, K. Terakura, J. Ozaki, and S. Miyata, "Probing carbon edge exposure of iron phthalocyaninebased oxygen reduction catalysts by soft X-ray absorption spectroscopy", J. Power Sources **223**, pp.30-35 (2013).
- Z. Hou, X. Wang, <u>T. Ikeda</u>, K. Terakura, M. Oshima, and M. Kakimoto, "Electronic Structures of N-doped Graphene with Native Point Defects", Phys. Rev. B 87, 165401 (2013).
- 10) X. Wang, Z. Hou, <u>T. Ikeda</u>, M. Oshima, M. Kakimoto, and K. Terakura, "Theoretical Characterization of X-ray Absorption, Emission, and Photoelectron Spectra of Nitrogen Doped along Graphene Edges", J.Phys. Chem. A **117**, pp.579-589 (2013).
- 11) <u>T. Ikeda</u>, Z. Hou, G. Chai, and K. Terakura, "Possible Oxygen Reduction Reactions for Graphene Edges from First Principles", J. Phys. Chem. C **118**, pp.17616-17625 (2014).

解説等

- 12) <u>池田隆司</u>, 片山芳則, 「高温高圧水の構造と動的性質」, 低温科学 71, pp. 125-129 (2013).
- 13) 矢板 毅, <u>池田隆司</u>, 松村大樹, 「粘土鉱物へのセシウムの吸脱着機構の解明」, 日本原子力 学会誌 56, pp.366-371 (2014).

(4) 今後の利用予定:

第一原理分子動力学に基づいた化学反応のシミュレーションを当面継続する。

5.7 核融合研究開発部門 Fusion Research and Development Directorate

5.7.1 JT-60SA のダイバータ熱負荷のシミュレーション Simulation Study of Heat Load in JT-60SA Divertor

櫻井 真治JT-60 本体開発グループ

(1) 利用目的:

JT-60SAでは40MWの加熱が行われ、その熱エネルギーは主プラズマから周辺プラズマ(SOL) に流出し、最終的にはダイバータ板に大きな熱負荷となる。装置の健全性の観点から、最大許容 熱負荷は15 MW/m²に制限される。このため、不純物ガス、アルゴンを入射して、ダイバータ を冷却する事が検討されている。一方、主プラズマに不必要にアルゴンが混入すると、主プラズ マの閉じ込め性能を劣化させることになる。こうした事情を考慮して放電条件の最適化を図るた め、ダイバータ統合コード SONIC (SOLDOR/NEUT2D/IMPMC)を用いて、特に JT-60SA の 完全電流駆動のシミュレーションを行った。電流駆動効率の観点から SOL での密度が高くとれ ないため、ダイバータ板への過大な熱負荷が懸念されたからである。

(2) 利用内容·結果:

炭素のスパッタリングだけでは 16 MW 程度の放射損失のため (SOL に流入する熱流束は $P_{SOL} = 37 \text{ MW}$)、外側ストライク点での温度、密度共に高く、ピーク熱負荷は 15 MW/m^2 で、 SOL 密度は高く、 $3.5 \times 10^{19} \text{m}^{-3}$ にもなる。0.75 Pam^3/s 程度のアルゴンをパフする事で、炭素 10 MW、アルゴン 18 MW の放射損失となり、SOL 密度は $1.6 \times 10^{19} \text{m}^{-3}$ まで下がった。

図1に、アルゴンとプラズマイオンとの比をしめす。主プラズマ内での比は、2%程度で大きな値ではないので閉じ込め劣化をもたらすものでは無い。図2に外側ダイバータ板での熱負荷分布を示す。ピーク熱負荷は10 MW/m²程度であり、最大許容熱負荷以下である。懸念された SOL での高い密度であるが、アルゴンパフにより、ダイバータ板での温度が低下し、ストライク点でのリサイクリングが減少(電離断面積の著しい減少に伴い)、ダイバータ密度が減るとともに、SOL 上流での密度が下がった。アルゴンによる冷却により、SOL での低密度と熱負荷が両立することが、本シミュレーションで明らかになった。



図1 アルゴンとプラズマイオンとの比率



図2 外側ダイバータ板での熱負荷分布

- (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
- 櫻井真治,「JT-60SA 機器組み立てと製作及びプラズマ対向機器の開発の進捗状況」, 核融 合フォーラム炉工学クラスター第1回「ダイバータサブクラスター会合」つくば, 2013 年 8 月 29 日~30 日.

(4) 今後の利用予定:

JT-60SA では、炭素ダイバータ実験の後に、タングステンに変更する事が予定されており、こ の時ダイバータ特性がどう変化するかを検討するシミュレーション解析を進めている。現在の IMPMC コードは複数の不純物を扱う事はできない。モデリンググループで、統合ダイバータコ ード SONIC は SPMD (Single Program Multiple Data)の造りから、MPMD (Multiple Program Multiple Data)への改造を進めているが、これが成功すると、複数不純物が扱えるようになる。 この新しい SONIC コードを用いてアルゴンによる炭素壁、W 壁のスパッタリング効果を調べる 予定である。

5.7.2 JT-60SA における共鳴磁場摂動(RMP)印加による三次元磁場構造の解析 Analysis of 3D Magnetic Field Structure by RMP on JT-60SA

松永 剛

JT-60 本体開発グループ

(1)利用目的:

国際熱核融合実験炉(ITER)計画の幅広いアプローチ活動として日欧共同で実施するサテライトトカマク計画と、わが国で検討を進めてきたトカマク国内重点化装置計画の合同計画として現在建設を進めているJT-60SAでは、閉じ込め性能を左右する磁気流体(MHD)不安定性を様々な機器で制御し高圧力プラズマの定常維持を目指す。特にプラズマ周辺領域で発生する周辺局在化不安定性(ELM)は間欠的なエネルギー放出を伴うため、対向壁への熱負荷が懸念されており、その制御手法の確立が急務となっている。JT-60SAでは誤差磁場補正のために真空容器内に設置を予定しているコイル(EFCC)によって、周辺閉じ込め磁場と共鳴する摂動磁場(RMP)を印加し、磁場構造をストキャスティックにすることで ELM を緩和する計画がある。そこで、EFCC により RMP を印加した場合の磁場構造の変化を三次元磁力線追跡で評価した。

(2) 利用内容·結果:

EFCC による RMP 印加時の磁力線追跡は、別途平衡磁場計算で求めた軸対称(二次元)閉じ込め磁場と、Biot-Savart 法を用いて計算した EFCC による三次元磁場を重畳(真空近似)して行った。那珂解析サーバ上で可視化データ解析用ソフトウェア PV-WAVE v10.0 と IMSL 数値計算ライブラリを用いて磁力線を追跡した。磁力線は簡便な連立上微分方程式で表されるため、5 ないし6次の Runge-Kutta-Verner 法によって磁力線の方程式を解いている。ステップ幅はトロイダ

ル角(ϕ)5 度をとし、トロイダル方向に 100 回追跡した。磁場データの計算メッ シュは、径方向 105×垂直方向 201×トロ イダル方向 72 である。図1に、本計算で 使用した EFCC を VTK 可視化ライブラ リによってモデル化したものを示す。三 次元コイルを VTK 可視化することで 様々な角度、位置、スケールで確認する ことでき有用である。磁力線の座標は、 トーラス中心軸を主軸とした円筒座標系 (R,Z,ϕ)から、閉じ込め磁場の磁気面を考 慮した磁気面座標(ρ, χ, ϕ)(ρ は磁気面 ラベル、 χ はポロイダル角)へのマッピン グを行い、RMP 磁場による磁気面構造へ



図 1 VTK 可視化ライブラリによってモデル化した EFCC コイル。トロイダル方向6個×ポロイダル方向3個。

の影響を評価した。図2にコイル電流を0kA、5kA、10kAとした場合の磁力線の軌跡(ポアンカレ図)を示す。コイル電流のパターンはトロイダル方向周期 n=3 とし、上下段コイルは同位相、 中段コイルは逆位相とした。縦軸は磁気面ラベル(ρ)であり、横軸はポロイダル角(χ)を示す。縦 方向の軌跡は磁気面を横切ることに対応する。コイル電流を印加しない場合(ϵ)、磁力線の軌跡 は横方向にしか移動せず入れ子状の平衡磁場が形成されていることが分かる。コイル電流を 5kA 印加した場合(中央)、有理面(点線)において磁気島構造が現れるとともに、磁力線の軌跡が縦方向 に幅を持ち始める(磁気面 ρ >0.97)。この幅が十分に大きくなることでストキャスティックな磁場 構造となる。コイル電流を 10kA とした場合(右)、磁気面 ρ >0.92 でストキャスティックな構造 となっている。ストキャスティックな磁場構造は、有理面に発生する磁気島が隣り合う磁気島と 重なることに起因する。本計算では、EFCC によって生成する実際の磁場パターンを用いており、 n=3 よりも高次の成分により n=3 に対応する有理面間にさらに高次の磁気島が生成され、より効 果的にストキャスティックになっていることが分かった。これは、単一のヘリシティ(n)でストキ ャスティックな領域を評価していたこれまでの評価を拡張する必要があることを示唆する結果 となった。



図 2 磁力線追跡によって得られた n=3 ポアンカレ図。左から EFCC 電流 0, 5, 10kA。

(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:

本解析により得られたデータをもとに、EFCCを用いた RMP 印加による周辺閉じ込め磁場への影響評価を進めるとともに、粒子軌道への影響等の解析を進める。

5.7.3 ITER 水平ポート EC ランチャーの核解析

Nuclear Analysis of ITER Equatorial EC Launcher

高橋 幸司 RF 加熱開発グループ

(1)利用目的:

ITER 水平ポート EC ランチャーの遮蔽設計のための核解析を実施する。

(2)利用内容·結果:

モンテカルロコード MCNP を使用し、ITER モデル(B·LITE ver.3)を用い水平ポート EC ラン チャーでの停止後線量(SDDR)、及び核発熱計算を行った。

評価結果

1) ITER モデル(B-LITE ver.3)を用いた二重屈曲構造における停止後線量の評価 (SDDR)

ITER モデル(B-LITE ver.3)を用いて、ランチャー周りのギャップ形状を二重屈曲構造(Double Labyrint)にモデル修正し、停止後線量計算を行い、各評価結果を比較した。

評価ケースを下記に示す。

- ② ITER モデル(B-LITE ver.3) Double Labyrinth 後方 2.0cm gap
- ③ ITER モデル(B-LITE ver.3) Single Labyrinth 後方 2.0cm gap
- ④ ITER モデル(B-LITE ver.3) Single Labyrinth 後方 0.5cm gap 1.5cm shim

評価した ITER(B-LITE ver.3) 前方二重屈曲構造(Double Labyrinth)モデル(後方屈曲有り無 し)(Fig. 1)と、前方一重屈曲構造(Single Labyrinth)モデル(後方屈曲無し)(Fig. 2)を比較すると、 フランジ後方中央部で前方二重屈曲が 140µSV/h、前方一重屈曲(後方屈曲無し)が 250µSV/h と なり、二重屈曲が 44%低い値となることが明らかとなった。

2) ITER モデル(B-LITE ver.3)を用いた二重屈曲構造における核発熱の評価

ITER モデル(B-LITE ver.3)を用いて、ランチャー周りのギャップ形状を二重屈曲構造(Double Labyrinth)において、二重屈曲構造を形成するために真空容器に取り付ける凸部の後付けを想定しており、核発熱除去に課題があると考えられる。そこで、凸部(セル No. 91701~91704)での 核発熱計算を行うためのセルを Fig. 3 に示すように作成して計算した。X 方向(奥行)にセルを分 割するため、セグメントカード(FSn)を使用した。

その結果、最前面での核発熱率は 0.2W/cc、一番奥側で 00.1~0.02W/cc となることが明らかと なった。この結果を用いて熱解析をして成立性を確認する必要がある。



Fig. 1 二重屈曲構造 (Double Labyrinth) モデル



Fig. 2 一重屈曲構造(Single Labyrinth)モデル



Fig.3 二重屈曲構造における核発熱モデル

(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:

ITER 水平ポート EC ランチャーの最終設計の遮蔽性向上を目的とした核解析を継続して実施する。

5.7.4 JT-60Uトカマクにおける高エネルギー粒子の非線形シミュレーション Nonlinear Simulation of Energetic Particle Modes in JT-60U Tokamak

Andreas BIERWAGE

BA プロジェクトユニット・プラズマ理論シミュレーショングループ

(1)利用目的:

In order to explore conditions in self-sustained nuclear fusion plasmas, JT-60U experiments were previously performed with strong neutral beam drive. The beams create a population of highly energetic ions that carry a significant amount of the plasma pressure, while having a relatively low number density. This is similar to the conditions to be realized in ITER [www.iter.org], where energetic alpha particles created by fusion reactions are expected to heat and sustain the plasma. These fast ions (beam ions as well as fusion alphas) interact with magnetohydrodynamic (MHD) waves of the shear Alfvén branch. This causes a redistribution of the fast ions, which may affect the fusion performance, current drive, and heat loads on the wall. The overall goal of our research is to understand the physics behind these wave-particle interactions through numerical simulations, and develop the capability to make predictions for experiments such as JT-60SA and ITER at the required accuracy.

Within the scope of this long-term effort, the goal of the research conducted in FY2013 was to examine the role of Energetic Particle Modes (EPM) with toroidal mode numbers n>1, besides the n=1 EPM studied previously [1]. The mutual interactions between EPM with different toroidal mode numbers and their effect on the fast ion transport are examined.

(2)利用内容·結果:

We use the hybrid code MEGA, which was originally developed by Prof. Y. Todo at NIFS [Y. Todo et al., *Phys. Plasmas* **12** (2005) 012503]. MEGA employs MPI to parallelize computations via decompositions in both space and particles. BX900 was used for simulations that can be completed within a wall time of 12 to 36 hours on 64 to 256 nodes. In particular, this was the case when exploring new simulation scenarios through parameter scans at low resolution or when testing new interfaces and diagnostics.

The JT-60U plasma of interest is characterized by a high thermal plasma pressure compared to magnetic pressure: the toroidal beta value at the magnetic axis was estimated to be $\beta_{eq,0}=3.6\%$. As a first step, we examined the stability of this plasma within the scope of the resistive MHD model used. With the normalized resistivity $\eta=10^{-6}$, which is the value required to dissipate small-scale structures that cannot be resolved by the grid, resistive MHD ballooning modes with toroidal mode numbers n>4 were found to be unstable as shown in Fig.1(a). These modes were then filtered out from the simulations in order to allow the study of energetic particle modes (EPM) with n=1-4.

JAEA-Review 2014-043

While EPM with n=1 was previously shown to be relatively insensitive to $\beta_{eq,0}$ [1], the use of realistic $\beta_{eq,0}$ value is necessary here because EPM with *n*>1 are found to be more sensitive. As an example, Fig.1(b) shows the power spectra of the *n*=3 EPMs for $\beta_{eq,0}=0$, $\beta_{eq,0}=1.7\%$ and $\beta_{eq,0}=3.6\%$. Depending on the value of $\beta_{eq,0}$, the *n*=3 mode lies in the upper or lower shear Alfvén continuum or in the toroidicity induced gap. This affects the continuum damping and the nonlinear evolution of the mode.



Fig.1: (a) Growth rates of resistive MHD ballooning modes found in the simulations. Results for two values of the normalized resistivity η are plotted and an example of the mode structure is also shown. (b) Contours of the power spectra of fast-ion-driven modes with toroidal mode number n=3 in the linear regime for three values of the plasma beta $\beta_{eq,0}$. White dotted lines represent the shear Alfvén continua.

In addition to realistic bulk plasma pressure, we employed our recently developed method to initialize MEGA simulation with realistic fast ion distributions computed with an orbit-following Monte-Carlo code as reported in [1]. As shown in Fig.2(a), we include only the high-energy tail (150-400 keV) of the distribution, since this is where most of the interactions occur. In the relevant regions of the phase space and for mode frequencies around 50 kHz as seen in the JT-60U experiments, only the n=1 and n=3 harmonics resonate with the fast ions. Their resonance conditions are also plotted in Fig.2(a).

Before proceeding to multi-*n* simulations, a thorough study of the linear properties and nonlinear dynamics of the single *n*=3 mode was performed. One of the most important results was that this mode undergoes a significant convective amplification (CA) when the fast ion drive parameter β_{h0} is increased above a certain threshold. This can be seen in Fig.2(b), where the first and second saturation amplitudes are plotted as dashed lines. The onset of CA occurs around $\beta_{h0}=0.6\%$.

When the simulations are performed with multiple n=1-4, the effect of CA becomes smaller as can be seen by inspecting the solid lines in Fig.2(b). When drive is weak ($\beta_{h0} < 0.7\%$) the n=3 mode is amplified by the n=1 mode, which has a lower growth rate but larger saturation amplitude than n=3. When the drive is strong ($\beta_{h0} > 0.7\%$), the n=3 mode undergoes some convective amplification, but the amplitude increase with increasing β_{h0} is not as steep as in the single-n case. This is found to be due to coupling with the n=1 mode, which is not a direct mode-mode coupling but occurs via mutual scattering of respective resonant particles. These results were reported as an invited talk at the 2013 IAEA Technical Meeting on Energetic Particles [2] and in a peer-reviewed journal paper [3].



Fig.2: (a) Energy-pitch-angle distribution of the fast ion tail (150-400 keV) and resonance conditions for the instabilities with toroidal mode numbers n=1 and n=3 as found in the simulations. (b) Dependence of the n=3 mode saturation amplitude on the strength of the instability drive. Results for single-n (dashed) and multi-n simulations (solid) are plotted. When the saturation occurs in two steps, blue lines represent the first saturation amplitude and red lines the second (final) saturation amplitude.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) A. Bierwage, K. Shinohara, N. Aiba and Y. Todo, "Role of convective amplification of n=1 energetic particle modes for N-NB ion dynamics in JT-60U", *Nuclear Fusion* **53**(7), pp. 073007_1 073007_12, (2013).
- 2) A. Bierwage, Y. Todo, N. Aiba, G. Matsunaga, K. Shinohara and M. Yagi, "Properties of Energetic Particle Modes in N-NB Driven JT-60U Plasmas", Proceedings of the 13th IAEA Technical Meeting on Energetic Particles in Magnetic Confinement Systems 2013, Beijing, P.R.China (International Atomic Energy Agency, Vienna, 2014), invited talk.
- 3) A. Bierwage, K. Shinohara, N. Aiba and Y. Todo, "Dynamics of low-n shear Alfvén modes driven by energetic N-NB ions in JT-60U", Nuclear Fusion, 54(10), pp.104001-1-104001-14, (2014).

(4) 今後の利用予定:

Wave-particle interactions and transport of fast ions will be studied in detail. For instance, the trajectories of resonant and nonresonant particles as well as the mechanisms underlying the observed convective amplification and frequency chirping will be studied.

5.7.5 電磁的ジャイロ運動論に基づく高ベータ乱流輸送研究

High-Beta Plasma Turbulence based on Electromagnetic Gyrokinetics

前山 伸也 プラズマ理論シミュレーショングループ

(1)利用目的:

高ベータプラズマにおける乱流輸送解析 を目的として、運動論的バルーニングモード によって駆動される乱流のシミュレーショ ンを行う。高ベータプラズマでは磁場揺動を 伴う電磁的乱流が駆動されるため、静電的乱 流とは異なる飽和過程となることが予測さ れる。電磁的不安定性である運動論的バルー ニングモードにより駆動される乱流を解析 することで、高ベータプラズマにおける電磁 的乱流の定性的理解が構築できると期待さ れる。

(2) 利用内容·結果:

本研究では、昨年度の成果により得られた 流出境界とローパスフィルタを組み合わせ た低散逸数値解法を適用し高ベータプラズ マにおける乱流輸送の解析を行った。図1に ベータ値に対する線形不安定モードの変化 を示す。低ベータ領域ではイオン温度勾配不 安定性と呼ばれる静電的モードが不安定化 するが、高ベータ領域では運動論的バルーニ ングモードと呼ばれる磁場揺動を伴う電磁 的モードが不安定化する。この閾値は 8i~ 数%程度であり、トカマク実験においても起 こりうるパラメータ領域である。

乱流揺動の駆動と散逸の関係を表すエン トロピーバランスに基づき、運動論的バルー ニングモードの飽和機構についての解析を 行った結果を図2に示す。この結果、運動論 的バルーニングモードによって駆動される 乱流では、粒子と電磁場の相互作用により、



図1 微視的不安定性のベータ値依存性



図 2 運動論的バルーニングモードにおける
エントロピーバランス。イオン駆動項
(赤)とイオン散逸項+電子散逸項
(緑、紫)がバランスすることで定常
状態となる。この際、粒子と電磁場の
相互作用により、イオン→電磁場→電
子とエントロピーの伝達が起こること
を明らかにした。

電磁場を介してイオンから電子へとエントロピーの伝達が起こり、イオン駆動項とイオン散逸項 +電子散逸項がバランスすることで飽和に至ることを明らかにした。このことは、イオン駆動項 とイオン散逸項のみのバランスで飽和に至るイオン温度勾配不安定性駆動乱流とは大きく異な る結果であり、静電的乱流と電磁的乱流における本質的な物理機構の違いを示すものである。ま た、輸送フラックスの詳細解析から、圧力揺動と静電揺動の位相差により、乱流による熱輸送が 小さくなる場合があることが明らかになった。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

【投稿論文】

- 1) S. Maeyama, A. Ishizawa, T.-H. Watanabe, M. Nakata, N. Miyato, and Y. Idomura, "Kinetic Ballooning Mode Turbulence Simulation based on Electromagnetic Gyrokinetics", Plasma Fusion Res. 9, 1203020 (2014).
- 2) S. Maeyama, A. Ishizawa, T.-H. Watanabe, M. Nakata, N. Miyato, M. Yagi, and Y. Idomura, "Comparison between kinetic-ballooning-mode-driven turbulence and ion-temperature-gradient-driven turbulence", Phys. Plasmas 21, 052301 (2014).

【学会発表】

- 3) S. Maeyama, A. Ishizawa, T.-H. Watanabe, M. Nakata, and Y. Idomura, "Comparison between kinetic-ballooning-mode-driven turbulence and ion-temperaturegradient-driven one", 40th EPS Conference on Plasma Physics, July 4, (2013).
- 4) S. Maeyama, A. Ishizawa, T.-H. Watanabe, M. Nakata, and Y. Idomura, "Gyrokinetic simulation of kinetic ballooning mode driven turbulence", 19th NEXT Workshop, Kyoto, Japan, Aug. 30, 2013.
- 5) 前山伸也,石澤明宏,渡邉智彦,仲田資季,宮戸直亮,井戸村泰宏,"トカマクにおける運動論的バルーニングモードの非線形シミュレーション",第3回 IFERC-CSC 研究会,航空会館,2014年2月20日.

【招待講演】

6) 前山伸也,石澤明宏,渡邉智彦,仲田資季,宮戸直亮,井戸村泰宏,"電磁的 ジャイロ運動 論に基づく高ベータプラズマ乱流シミュレーション",第 30 回プラズマ・核融合学会年会, 東京工業大学,2013年12月5日.

(4) 今後の利用予定:

本研究により、開発した計算手法・コードの高圧領域での乱流シミュレーションの適用可能性 が示されたとともに、電磁的乱流での新しい飽和機構が明らかになった。今後は、現実的な磁場 配位を含めた電磁乱流解析へのコード拡張を進める。さらに、高圧力領域での電磁的乱流輸送現 象における磁場配位効果の解析に取り組む予定である。

5.7.6 ジャイロ運動論的多粒子種乱流シミュレーションによる粒子/熱輸送解析 Turbulent Transport Analyses using Multi-species Gyrokinetic Simulations

仲田 資季

プラズマ理論シミュレーショングループ

(1)利用目的:

磁場閉じ込め核融合炉の実現を目指す上で重要な課題として、炉心プラズマ中の乱流現象によって引き起こされる燃料粒子や熱エネルギーの損失(輸送)が挙げられる。乱流輸送の抑制はプラズマの閉じ込め性能の改善と密接に関連するため、輸送機構を明らかにし、高い精度で輸送レベルを評価/予測がすることが求められており、核融合プラズマの第一原理モデルであるジャイロ運動論に基づいた乱流シミュレーション研究が展開されている。特に、核融合反応を伴う燃焼プラズマにおいては、燃料イオン(重水素及び三重水素イオン)、電子、不純物イオンが混合された状態であるため、多粒子種を同時に取り扱うシミュレーションモデルの構築が急がれている。

本課題では、ジャイロ運動論に基づく多粒子種乱流シミュレーションコードGKV-Jの拡張を さらに推し進め、燃焼プラズマにおいて支配的となるイオン温度勾配/捕捉電子モード (ITG-TEM)乱流中の輸送特性を解析するとともに、計算コードの定量予測性能の検証を行う。

(2) 利用内容·結果:

本研究課題において、下記の成果が得られた。

① 実プラズマ形状を導入するコード拡張とインターフェースの開発

実際のプラズマ実験装置においては、プラズマ断面形状に非円形度を与えることにより、巨視 的安定性を向上させている。GKV-J で解析される微視的安定性や乱流輸送特性に対しても非円 形形状の効果を正確に取り入れるため、MHD 平衡コード MEUDAS から計算される実プラズマ 形状を活用するインターフェースを新たに開発し、従来、円形断面プラズマに限定されていた GKV-J のシミュレーションモデルを拡張した。コード実装の健全性は国外で利用されている他 の計算コードとの ITG 不安定性解析に関するベンチマークにより検証され、コード間の結果の 良い一致を確認した。

② トカマク実験装置 JT-60U 及び JT-60SA の実プラズマ形状を用いた微視的安定性解析

拡張された GKV-J を用いて JT-60U の L-mode プラズマにおける微視的安定性解析を実施し、 プラズマの径方向領域に応じて異なる不安定モードが支配的となることを同定した。また、現在 建設中の次期トカマク実験装置である JT-60SA プラズマに対する微視的安定性解析を実施し、 ITG 不安定性の成長率やモード構造、さらには輸送抑制の重要な因子である残留ゾーナルフロー レベルに対するプラズマ形状効果の依存性を明らかにした[図 1 参照]。

③ JT-60U 実験との比較による乱流輸送シミュレーションの定量性検証

JT-60UのL-mode プラズマ形状を用いた ITG-TEM 乱流輸送シミュレーションを実施し、イオン及び電子熱輸送レベルに関する実験結果との比較を行った。その結果、炉心領域において、GKV-Jによるシミュレーション結果が実験結果を高い精度で再現することが確認された。



図 1 断面形状が異なる二つの JT-60SA 配位[(a)及び(b)]とインタフェースコードにより生成さ れた Boozer 座標。(c)拡張された GKV-J コードにより実施された残留ゾーナルフローレ ベルの比較[Circular(IT)は円形断面近似での結果で、R-H はそのときの理論予測]。詳細 は文献 2)に記載。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文

- 1) M. Nakata and Y. Idomura, "Plasma size and collisionality scaling of ion-temperature-gradient-driven turbulence", Nucl.Fusion 53, 113039 (2013).
- 2) M. Nakata, A. Matsuyama, N. Aiba, S. Maeyama, M. Nunami, and T.-H. Watanabe, "Local Gyrokinetic Vlasov Simulations with Realistic Tokamak MHD Equilibria", Plasma Fusion Res. 9, 1403029(2014).
- 3) M. Yoshida, S. Ide, H. Takenaga, M. Honda, H. Urano, T. Kobayashi, M. Nakata, N. Miyato and Y. Kamada, "Temporal and spatial responses of temperature, density and rotation to electron cyclotron heating in JT-60U", Nucl. Fusion 53,083022(2013).

国際会議

- 4) M. Nakata and Y. Idomura, "Comparisons on plasma size and collisionality dependence of ITG turbulent transport among fixed-flux, fixed-gradient, and fluxtube models", 40th European Physical Society Conference on Plasma Physics, Finland, July 2013.
- 5) M. Nakata, M. Honda, M.Yoshida, E. Narita, S. Maeyama, and N. Miyato, "Validation study with GKV and TGLF against JT-60U L-mode plasma", International Tokamak Physics Activity Meetings, Kyushu, October 2013.
- 6) M. Yoshida, S. Ide, H. Takenaga, M. Honda, H. Urano, T. Kobayashi, M. Nakata, N. Miyato and Y. Kamada, "Temporal and spatial responses of temperature, density and rotation to electron cyclotron heating in JT-60U", 14th International Workshop on H-mode Physics and Transport barriers, Kyushu, October 2013.

(4) 今後の利用予定:

平成 26 年度以降は燃料イオンや電子の輸送解析に加え、燃焼反応により生じるヘリウムイオンや、壁材に由来する金属イオン等の不純物イオンが混在する場合の乱流輸送過程の物理解析に 取り組む予定である。

5.7.7 ITER/TBM 搬送時の運転停止後線量率解析

Shutdown Dose Rate Analysis in Transportation of ITER/TBM

佐藤 聡

核融合中性子工学研究グループ

(1)利用目的:

ITER に設置する日本のテストブランケットモジュール(TBM)の遮蔽解析を、BX900 にてモン テカルロ計算コードを用いた並列計算により行い、TBM 及び TBM ポートの設計に反映させる。

(2) 利用内容·結果:

モンテカルロ計算コード MCNP-5.14、核融合用評価済み核データライブラリーFENDL-2.1 を用いて、ITER に設置する日本のテストブランケットモジュール(TBM)の遮蔽解析を行ってい る。今回、運転停止後 TBM を搬送する際の、放射化した TBM からの崩壊ガンマ線による実効 線量率を計算した。計算では、MCNP プログラム及び核データライブラリーを変更し、即発ガ ンマ線スペクトルを崩壊ガンマ線スペクトルに置換えることにより、運転中の中性子輸送計算と 崩壊ガンマ線輸送計算を直接1回の MCNP 計算で行う Direct 1 Step MCNP を用いた。TBM の MCNP 形状入力データは、CAD データを MCNP 形状入力データへ変換するプログラム GEOMIT を用いて、TBM の CAD データから作成した。この形状入力データに、TBM 以外の 遮蔽体、フレーム、フランジ、ポート、生体遮蔽体、真空容器、冷却水配管、ヘリウムガス配管 等の形状をマニュアルで追加し、最終的な MCNP 形状入力データとした。計算モデルを図1に 示す。TBM のみから崩壊ガンマ線を発生させ、TBM 周囲の実効線量率を計算した。運転停止1 月後の TBM 前面及び背面の実効線量率の分布を、各々図2及び3に示す。併せて、各々の図に 表面から 5cm、1m、3m 離れた位置での実効線量率の値を表に示す。図に示す通り、実効線量 率は非常に高い値である。今後、TBM 搬送時のキャスクの設計を行う。



図1 MCNP 形状入力データ(ポート中心での垂直断面)



図2 TBM 搬送時の運転停止1月後のTBM 前面の実効線量率



図3 TBM 搬送時の運転停止1月後のTBM 背面の実効線量率

(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:

継続して ITER の TBM の遮蔽解析を最新のモデルで行い、TBM 及びポートの設計に反映させる。

5.7.8 大型原型炉におけるダイバータ・プラズマの SONIC シミュレーション

SONIC Code Simulation of Divertor Plasma in Larger DEMO Reactor

朝倉 伸幸、室伏 昭、星野 一生、徳永 晋介、田辺 豪信 六ヶ所 BA プロジェクトユニット 核融合炉システム研究グループ

(1) 利用目的:

BA 原型炉設計活動におけるダイバータ設計のため、大型パラレル計算機 BX900 を使用して、 原子力機構により開発管理されているダイバータ・シミュレーションコード(SONIC)の計算を行 った。SONIC は、ダイバータプラズマ、中性粒子および放射損失を増加するために入射する不 純物イオンの 2 次元輸送を、それぞれ反復計算により定常・安定解が得られるまで計算を行う複 合シミュレーションである。

原型炉の大きさを ITER サイズ(主半径 6m)から拡大すると共に核融合出力を 3GW レベルか ら半分程度にする新たなコンセプトに対応するダイバータ形状の検討を行うと共に、プラズマに 入射する不純物ガス量に伴う放射損失パワーの変化に対して、非接触ダイバータプラズマの発生 状況およびダイバータ板が受ける熱負荷の最大値(ピーク)の増減について評価した。

(2)利用内容·結果:

SONIC コードは、プラズマ電磁流体コード(SOLDOR)と中性粒子および不純物輸送モンテカ ルロコード(NEUT2D, IMPMC)からなる複合コードであり、原子力機構により開発管理されて いる。主プラズマから放出されダイバータ板へ輸送される熱流束およびプラズマ粒子束の2次元 の物理プロセスは SOLDOR コードにより計算される。また、ガスパフにより入射された中性粒 子および不純物ガス・イオンの2次元輸送プロセスはNEUT2DコードとIMPMCコードにより、 それぞれ反復計算を行ない、定常な安定解を得ることで収束解としている。

本検討では、ITER より大きなサイズ(主半径 8m)で核融合出力 2GW の主プラズマから周 辺部に放出される大きな熱エネルギー(約 400MW)を、多量の不純物ガスを入射して主プラズ マ周辺部とダイバータにおいて放射損失パワーを増加し、ダイバータ板への熱流を(最大 10MWm⁻²以下に)低減するダイバータの物理設計を行うため、SONIC を使用してプラズマお よび不純物の輸送を評価している。図 1(左)に、新たな原型炉のコンセプトにおけるトロイダル 及びポロイダルコイル位置、真空容器とダイバータの第1案およびプラズマ平衡磁場の計算結果 を示す。それに基づき SONIC 用のメッシュを作成し、図 1(右)に示す。

本検討では、アルゴン不純物ガスを入射する計算を行っているが、その量を変化させプラズマから排出された熱エネルギー(400MW)の92%,85%,80%,75%に相当する放射損失が得られる収束解をそれぞれ求めた。今回の計算で、モデリングの修正点が見つかり、今後改善する必要がある。収束状況はまだ十分ではないが、全放射損失が92%(370MW)に達した初期結果について内側及び外側ダイバータ板に沿ったプラズマ温度・密度分布および熱負荷分布を図2に示す。



図2 内側及び外側ダイバータ板に沿ったプラズマ温度・密度分布および熱負荷分布

内側及び外側ダイバータ共に、プラズマ温度は低温(1eV)で完全非接触ダイバータ・プラズマ に達している。しかし、内側ダイバータではプラズマ熱流(convection +conduction)による熱負 荷は 5MWm⁻² と低下しているが、イオン束が散逸せずタイバータ付近でも密度が高いため表面 再結合(surface recombination)による熱負荷が 7MWm⁻²以上に達し、体積再結合により発生し た中性粒子負荷と合わせ合計は 20 MWm⁻²に達する。昨年度まで行った ITER サイズの原型炉 (核融合出力 3GW レベル)では、内側ダイバータにおいては同様な完全非接触であったがプラズ マ粒子束は本結果と比較して少ないため、大きな問題ではなかった。今後、ダイバータ形状およ びモデリングプロセスの修正による影響などについて原因を明らかにしたいと考える。

また、今回は主プラズマから放出された熱流が昨年度と比較して小さいため、全放射損失が 92%の場合、内側および外側共に完全非接触ダイバータとなり、放射損失領域もダイバータ板か ら大きく離れるため放射損失(radiation)による熱負荷は小さい。不純物ガスを入射量を減らし全 放射損失を減少すると、放射損失領域の移動によりこれらは増加する。内側と外側ダイバータは 中性粒子や不純物粒子のダイバータ下部での輸送および SOL プラズマの輸送として繋がってい るため、ダイバータプラズマや放射損失分布の非対称性に影響を及ぼすが、この点に注意してシ ミュレーションの開発及びダイバータ設計を進める予定である。

(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:

平成 26 年度も原型炉レベルの核融合炉において、ダイバータ形状や不純物イオンの選択など の検討を SONIC コードの開発とともに進める。同時に、非接触プラズマの生成に大きく影響す る物理機構のモデル化の検討も進める予定である。

5.7.9 ITER 中性子東モニタ用マイクロフィッションチェンバーの詳細設計のための核解析 Neuronic Analysis for Detail Design of the Microfission Chamber for ITER Neutron Flux Monitor

石川 正男 計測開発グループ

(1)利用目的:

国際熱核融合実験炉(ITER)の開発計画において、原子力機構は日本国内機関(JADA)として、各種計測装置(マイクロフィッションチェンバー計測装置、ポロイダル偏光計測装置、IRサーモグラフィー、ダイバータ不純物モニタ、周辺トムソン散乱計測装置)の調達を行う。この内、ITERの中性子束モニタとしてプラズマからの全中性子発生量を測定するマイクロフィッションチェンバー計測装置(以下、MFC)は真空容器内に検出器やケーブルを設置するため、高い核発熱に伴う温度上昇による機器の損傷が懸念されている。このため、MFCの詳細設計を行う為に、その前提条件となる真空容器内機器の核発熱を大型計算機 BX900 による並列計算により、精度よく求めた。

(2) 利用内容·結果:

1. はじめに

ITER の MFC は、プラズマから発生する中性子の総 量を計測し、それを基に核融合出力を評価することを目 的とする中性子束モニタであり、原子力機構は 2012 年 4月に ITER 機構との間で調達取決めを締結して、現在、 実機の調達活動を進めている。ITER で使用する検出器

(小型核分裂計数管)は、ウラン 235 を用いた沸騰水 型原子炉用マイクロフィッションチェンバーを基に開 発を行っており、ブランケットモジュールと真空容器と の間に、ポロイダル方向2カ所(上部外側、下部外側、 図1参照)、トロイダル方向2カ所の合計4カ所に設置 する。検出器からの信号は、図1及び2に示すように、 二重の被覆を持った MIケーブル(外径6.6 mm)を使 用して伝送し、上部ポートに設置される真空導入端子

(Feedthrough) を通して真空容器外に取り出される。

本研究では、MFCの詳細設計の一貫として、真空容 器内機器の健全性評価を行う為に実施する熱解析及び 熱応力解析に必要な機器の核発熱量の詳細な評価を、大 型計算機 BX900 を用いた核解析により行った。



図1 MFCのITER への設置の概要



図 2 MI ケーブルの真空容器内配線の概要

2. MFC の詳細設計のための核解析

2.1 解析コード及び解析条件

本解析では、中性子輸送解析コード MCNP 5.1.4 を用い、断 面積コードとして FENDL 2.1 を利用した。ITER トカマクのモ デルとして、図 3 に示すように、ブランケットモジュールや真 空容器を詳細に模擬した 40℃セクターの最新モデル (C-litem モデル)を利用し、そのモデルに MFC の真空容器内機器を組み 込んだ。中性子源としては、ITER の 500MW 運転の運転シナ リオに基づいて計算された中性子発生分布を利用している。

プランケット 見空容器 プランケット モジュール

図 3 MCNP 用 ITER トカマクモデル

2.2 MIケーブルの核発熱量の評価

ITER で使用する MI ケ ーブルはステンレス鋼 (SUS304)、芯線としての 銅そして絶縁体としての シリカ (SiO2) から構成さ れるため、それぞれの材質 に対して、MCNP を用い た核解析により核発熱量 を評価した。図4に示した のは、MI ケーブルの詳細 な位置でのステンレス鋼 の核発熱量である。核発熱 は中性子 (Neutron) 及び γ線 (Photon) によって生 じるが、図4に示すように v線による発熱が支配的



図 4 MI ケーブルのステンレス鋼(SUS304)の核発熱量
(a)上側設置位置、(b)中央設置位置

である。全核発熱量は基本的に 0.2 W/cc 程度であるが、ブランケットモジュールの隙間(Gap) の背面では、急激に上昇し、最大で約1W/cc 程度まで高くなっていることがわかる。これは、 ブランケットモジュールの隙間を通過するストリーミング中性子及びγ線が MI ケーブルに高い 核発熱をもたらす為であり、この高核発熱量による MI ケーブルの大きな温度上昇を避ける為に、 冷却用のクランプを適切に配置する必要があることが核解析の結果から示唆される。

MFC の詳細設計では、これらの核発熱量の詳細な情報を真空容器内機器の熱解析の入力条件 として利用し、冷却用のクランプの設置位置及び構造等の決定を行った。

2.3 真空導入端子の核発熱量の評価

MFCの真空導入端子(図1のFeed-through)は、検出器からの信号を真空容器外に伝える役割を持つとともに、ITERの真空境界を形成する重要な機器である。このため、ITERの安全重要クラス指定の機器に指定されており、様々な設計基準を満たさなくてはいけない。核発熱によ

る温度上昇に耐えうる設計であることも示す必要があり、この度、真空導入端子の核発熱量も評価した。

MFCの真空導入端子は主にステンレス鋼、コバール材(Ni-Fe-Cu 合金)及びセラミック材で あるアルミナから構成される。本解析では、図5に示す通り、真空導入端子(Feedthrough)を 一つの構造体とし、それにそれぞれの材質が用いられた場合の核発熱量を評価した。また、通常 上部ポートプラグは中に入る構造物以外は遮蔽体が設置されているが、真空導入端子の核発熱量 及びそれに伴う温度上昇を安全側に評価する為に、ポートプラグ内は真空(遮蔽体なし)の状態 で解析を実施した。解析結果を表1に示す。上部ポートプラグに遮蔽体が無いことにより、遮蔽 体がある時に比べ核発熱量は約1桁程度増加していることが確認できたが、プラズマ発生源から 遠いこともあり、核発熱量は全ての材質に対して

10⁻⁵ W/cc 以下であると評価された。

表1 真空導入端子の核発熱量

(カッコは統計誤差を示す)

これらの結果をもとに、熱解析を行った結果、 ITER 運転中の真空導入端子の最高温度は、真空導 入端子の運転上限温度よりも十分に低い値であるこ とが確認され、放射線による核発熱は大きな問題と ならないことを示すことができた。





図5 真空導入端子の核発熱量の評価のための解析モデル

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 石川 他、「ITER 中性子東モニタ用マイクロフィッションチェンバーの開発の進展」第 30 回プラズマ核融合学会年会、2014 年 12 月 3-6 日、東京.
- 2) 石川 他「ITER 中性子東モニタ用マイクロフィッションチェンバーの詳細設計のための核解 析」日本原子力学会 2014 年春の年会、2014 年 3 月 26-28 日、東京.

(4) 今後の利用予定:

MFC の詳細設計における核解析では、運転中の健全性及び運転停止後の適切な廃棄手法の検討のために、核発熱量の評価以外に、機器の吸収線量の評価及び運転停止後の放射線量の評価も必要である。今後、引き続き大型計算機を利用した核解析を行い、ITER の調達活動を進めていく。

5.7.10 ITER におけるアルフヴェーン固有モード中の高エネルギー粒子挙動解析コード開発 Development of a Simulation Code to Analyze Fast-Ion Confinement in Alfven Eigen Modes for ITER

杉江 達夫、谷 啓二計測開発グループ

(1)利用目的:

ITER の最大の開発目的は、核融合反応で生成される高エネルギーアルファ粒子によりプラズ マの高温状態と核融合反応が持続される事を実験的に検証することにある。このことから、高エ ネルギー粒子の蓄積に起因する AE モードと高エネルギー粒子間の相互作用は、ITER にとって 最重要検討課題の1つになっている。そこで、既存の軌道追跡モンテカルロ(OFMC)コードに AE モード中での高エネルギー粒子軌道追跡機能を追加し、ITER および JT60U における AE モ ードの高エネルギー粒子閉じ込めに及ぼす影響を評価する。

(2)利用内容·結果:

核融合科学研究所で開発された AE モード解析コード MEGA の出力データをインターフェイ スを介して OFMC にファイル入力し、核融合生成アルファ粒子および NBI 生成高速イオンの全 減速過程における AE モードのそれらの閉じ込めに及ぼす影響を評価した。AE モードは、ポロ イダル断面内の全 (R,Z) メッシュ点上で $Cos(\omega t - n\varphi)$ および $Sin(\omega t - n\varphi)$ の係数として読み 込む。ここで、 ω は AE モードの周波数、 φ はトロイダル角である。典型的な ITER の 9MA 運 転シナリオにおける AE 搖動磁場の R 成分を図 1 に示す。今回提供された AE モードは、 $\omega = -4.228 \times 10^5$ 、n = 13のシングルモードである。

MEGA コードの解析対象空間 とOFMCの対象空間はその解析 対象の違いから異なっている。こ のため、MEGA の出力データは インターフェイスを介して OFMC 空間上にキュービックス プラインを用いて再構築される。 MEGA コードの出力結果には、 その解析手法に起因する微小な 高次高調波成分が含まれている。 この高次高調波成分がインター フェイスにおけるキュービック スプライン補間の精度に重大な 影響を与えることが判明した。そ こで、二項フィルターを開発して 2次元の全AE 電磁場係数に適用



図1 ITER の 9MA 運転シナリオにおける AE モード磁場
R 成分のポロイダル断面分布。
左図: Cosine、右図 Sine 係数。

した。これにより、AE 電磁場のダ イバージェンスフリー条件、誘導 電磁場条件などがすべて OFMC 空間上で良好に再構成されること を確認した。

減速過程でアルファ粒子からバ ルクプラズマに入力されるパワー の径分布を計算した。AE モードだ けを誤差磁場として採用した場合 と、誤差磁場がない軸対称磁場の 場合について計算し、それらの結 果の差分から AE モードの入力パ ワー分布の寄与を見積もった。結 果を図2に示す。

(A)図の赤線はAEモードを含め た結果で、青線はAEモードの無 い軸対称磁場中の結果である。両 者の差分を軸対称磁場中の分布で 規格化した結果を(B)図に示す。AE モードは、 $\psi/\psi_a \approx 0.2$ 付近に存在 しているが、アルファ粒子はその 影響を受けて径方向に移動し、そ の近傍のパワー入力が変化する様 子が示されている。図1に示すよ



図 2 ITER の 9MA 運転シナリオにおける減速過程で アルファ粒子からバルクプラズマに入力される パワーの径分布。(A)の赤線は AE モード中、青 線は軸対称磁場中の結果。(B)は、両者の差分を 軸対称磁場中の分布で規格化した結果

うに、ITERの9MA運転シナリオではAEモードはある磁気面を境にモードの様子が変化する。 図2には、その微細なAEモードの構造の変化も反映されているように見える。

もう一つの適用例として、JT60-U の結果を示す。JT60-U の AE モードのトロイダルモード 数は、n=1、周波数は、 $\omega = 2.023 \times 10^5$ である。AE モード磁場の $\phi/\pi = 0.0 \ge \phi/\pi = 0.5$ で の R の各成分のポロイダル断面分布を、図 3 に示す。同様に、減速過程で NBI 生成高エネルギ ー粒子からバルクプラズマに入力されるパワーの径分布を計算した。AE モードだけを誤差磁場 として採用した場合と、誤差磁場がない軸対称磁場の場合について計算し、それらの結果の差分 から AE モードの入力パワー分布の寄与を見積もった。結果を図 4 に示す。(A)図の赤線は AE モードを含めた結果で、青線は AE モードの無い軸対称磁場中の結果である。両者の差分を軸対 称磁場中の分布で規格化した結果を(B)図に示す。JT60U では、AE モードは図 3 に示すように、 プラズマ中心付近でも強く、また、プラズマ周辺近くまで広く分布している。このため、(B)に 示されるように、プラズマ中心付近の高エネルギー粒子が周辺部に輸送されている様子が示され ている。

JAEA-Review 2014-043



図 3 JT60U における AE モード磁場の R 成分の $\phi/\pi = 0.0$ (左図) 及び $\phi/\pi = 0.5$ (右図) でのポロイダル断面分布。



図 4 減速過程で NBI 粒子からバルクプラズマに入力されるパワーの径分布。(A)の赤線は AE モード中、青線は軸対称磁場中の結果。(B)は、両者の差分を軸対称磁場中の分布 で規格化した結果。

(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:

ITER のより広範な運転シナリオでの評価計算および JT60SA の実験予測計算。
5.7.11 MCNP コードを用いた ITER 水平ポートにおける計測装置の核解析 Nuclear Analysis for Diagnostic System in ITER EQ Port with MCNP

嶋田 恭彦 計測開発グループ

(1)利用目的:

国際熱核融合実験炉(ITER)の開発計画において、原子力機構は日本国内機関(JADA)と して、各種計測装置(マイクロフィッションチェンバー、ポロイダル偏光計測装置、IR サーモ グラフィー、ダイバータ不純物モニター、周辺トムソン散乱計測装置)の調達を行う。この内、 マイクロフィッションチェンバーを除く計測装置では、ミラー等の光学機器をポートプラグ内に 設置して計測を行うため、計測精度を維持する目的から、放射線による計測機器や遮蔽体の核発 熱の評価を行うことは重要である。また、人手による機器のメンテナスの観点から、運転停止後 線量率の評価が必要となる。そこで、JADAでは、中性子輸送解析コード MCNP を用いた核解 析を行っており、高い統計精度を得る為、BX900 大型計算機による並列計算を実施した。

(2) 利用内容·結果:

1. はじめに

平成 25 年度の作業では、昨年度に引き続き、ITER の 水平ポート(図 1)内に設置される IR サーモグラフィー 及び周辺トムソン散乱計測装置について、3 次元形状でモ デル化を行い、様々な核解析計算を行った。ここでは、そ れらの解析作業の内、IR サーモグラフィーについて行っ た解析計算の一部について紹介する。

ミラーボックスの核発熱及びインタースペースにおける運転停止後線量率への影響評価

IR サーモグラフィーはダイバーター板(図1参照)か ら放出される赤外線からダイバーターの表面温度を測定 する計測装置である。図2に示すように、水平ポートプラ グ内にミラーボックスを設置し、その中に光学ミラーを設 置することで、ダイバータ板からの赤外線光の伝送を行 う。しかし、プラズマからの中性子やγ線による核発熱に よってミラーボックスが加熱されると、ミラーボックス自 身が赤外線の発生源となり、それがノイズ源となって計測 精度の低下を招く恐れがある。その為、ミラーボックスの 核発熱を低く抑える必要があり、材質の最適化が核発熱低 下の為の一つの手段である。



図1 MCNPによるITER 炉心 モデル



図 2 ミラーボックスにおける核 発熱の計算位置(P1~P4)

本研究では、ミラーボックスに対してステンレス鋼(以下、SUS)及びアルミニウム(以下 AL)という2種類の材質を選択し、各解析により、それらの材質を組み合わせた場合の、

1) ミラーボックス内の核発熱量

2) インタースペース(図1)における運転停止後(12日後)線量率

を計算することで、材質の組み合わせの最適化を行った。計算には、解析コードとして MCNP5 ver5.1.4、断面積ライブラリーとして核融合用に作成された FENDL2.1 を使用した。また、SUS や AL の物性値については標準的な値[1]を使い、計測用の貫通孔内は真空とした。

2.1 ミラーボックス全体の材質を変えた場合の解析結果

はじめに、ミラーボックス全体 を"SUS80%+水 20%"及び、"AL80%+水 20%"の材質とした場合の解析を行った。 その結果を表1に示す。表1の「SUS」 はミラーボックス全体を SUS80%+水 20%の材質とした場合、「AL」はミラーボ ックス全体を AL80%+水 20%の材質とし た場合のミラーボックスの各位置での核 発熱及び、インタースペースでの停止後線 量率を表している。

ミラーボックスの核発熱量は、プラズマ

表 1	ミラーボックスの各位置における
	核発熱と運転停止後線量率

		SUS	AL	AL/SUS
	P1	9.98E-01	4.16E-01	0.4
核発熱	P2	1.49E-01	6.49E-02	0.4
(W/cc)	P3	1.59E-03	3.93E-03	2.5
	P4	2.19E-03	3.62E-03	1.7
停止後	1. 4			
線量率	インタースペース	1.30E+01	1.19E+02	9.2
$(\mu Sv/h)$				

から近い位置 (P1、P2) では AL の場合の方が SUS の場合に比べて核発熱が約 60%低くなった。 一方で、プラズマから遠い位置 (P3、P4) では、AL の場合の核発熱は、SUS の場合に対し、 それぞれ 1.7 倍、2.5 倍の値となった。また、IR サーモグラフィーによるインタースペースの運 転停止後線量率の増加分は、SUS の場合は 13μ Sv/h であるのに対し、AL の場合は 119μ Sv/h となり、9 倍程度に増加した。ITER では、運転停止から 12 日後の、計測装置一つ当たりの運 転停止後線量率への寄与分の目安を 15μ Sv/h としており、AL の場合ではこの値を大きく超え てしまう。

これらの解析結果から、AL は SUS に比べて中性子やγ線がエネルギーを落とす割合が低い ため、核発熱を低く抑えることができ、同じ中性子束・γ線束の位置での核発熱量の低下には有 用であると言える。しかし、このことは逆に、ALの遮蔽性能が低いということを意味している。

このため、ポートプラグ後方の中性子束は大幅に増加してしまい、インタースペースの停止後 線量率の大幅な増加も招くことから、ミラーボックス全体を AL に変えることは大きな問題とな ることが分かった。

2.2 計測用の貫通孔周辺を AL カバーで覆った場合の核発熱解析

2.1 節の結果から、ミラーボックスの内、核発熱が高く、ミラーボックスからの赤外放射が計 測精度に大きく影響すると考えられる、プラズマ近傍の貫通孔周辺のみに AL (AL のフォルダ ー)を使用し、それ以外の部分は SUS を使用したモデル(図 3)を考案し、 1) 貫通孔周辺の核発熱量

2) インタースペースにおける運転停止後線量率 を計算した。ALフォルダーは、幅が貫通孔の直径 に対して1.2倍とした場合について計算を行った。 また、この計算では、計算時間の短縮の為に水平 ポートプラグの部分のみを模擬した解析モデルを 使用した。結果を表2に示す。

AL のフォルダーを使用した場合、貫通孔周辺の 核発熱量は、ミラーボックス全てが SUS の場合に 比べて、60%程度低減させることが出来た。一方で、 インタースペースにおける運転停止後線量率の増 加分は 21 µ Sv/h となった。AL の使用範囲を貫通 孔近傍に限定したことにより、ミラーボックス全 体で AL を使用した場合(119 µ Sv/h)と比べて、 増加分を大きく低減することができた。しかし、 それでも計測装置一つ毎の運転停止後線量率への 寄与分の目安である 15 µ Sv/h を超えてしまう。そ こで、AL フォルダーの設置位置をミラーボックス 前面から第2 ミラーまでに限定した所、核発熱を 低減させたまま運転停止後線量率の増加分を15μ Sv/h まで減少させることが出来た(表2の右段)。 第3ミラー、第4ミラー付近の構造体の核発熱量 は逆に増加するが、それまでの遮蔽効果により値 自身が低いため、ノイズ源とはなりにくい。この 結果から、プラズマに近い前面領域の貫通孔周辺 のみに AL フォルダーを使用することで、ミラー ボックス全体の遮蔽性能を維持したまま、核発熱 による赤外ノイズからのノイズ低減が可能である ことを示すことができた。



- 図3 貫通孔周辺のALフォルダーを設置 したケースの解析モデル
- 表2 貫通孔周辺のALフォルダーの核発 熱量とインタースペースの停止後 線量率(核発熱量の値はALフォル ダーを含めミラーボックス全体が SUS である時を1とした時の割合

		AL folder (全て AL)	AL folder (M2→M5 ≀‡ SUS)	
核発熱量	front→M1	0.39	0.39	
	M1 \rightarrow M2	0.41	0.42	
	M2→M3	0.42	1.13 (SUS)	
	M3→M4	0.42	1.18 (SUS)	
	$M4 \rightarrow M5$	0.42	1.08 (SUS)	
停止後線量率 (µSv/h)		21	15	

[1] 玉虫文一他編, 岩波理化学辞典 第3版, 岩波書店, 1972年.

(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:

ITER における各計測機器の調達活動は詳細設計の段階に入り、様々なケースについて、より 長時間の解析計算が必要となる。その為、今後も大型計算機を用いた解析計算を行う予定である。

5.7.12 SlimCS を目指した低磁束消費での JT-60SA 電流立ち上げの検討

A study of Plasma Current Ramp up on JT-60SA under Low Flux Consumption Aiming at SlimCS

鈴木 隆博、高瀬 雄一*1、若月 琢馬*1

先進プラズマモデリンググループ、*1 東京大学

(1)利用目的:

JT-60SA の研究目標は高規格化ベータプラズマの定常化である。その実現のためには、NBI 等による外部からの電流駆動だけでなく、自発電流(ブートストラップ電流)を最大限利用する ことが肝要である。またこれらの方法をプラズマ電流立ち上げ時に利用することにより、センタ ーソレノイド(CS)に対する要求を大幅に軽減することが可能になる。これが実現できれば、 SlimCS や VECTOR のような、より高磁場でコンパクトな核融合炉の実現性が高まり、加熱・ 電流駆動設備の簡素化および循環電力の低減にもつながるため、その意義は高い。

本研究では統合プラズマシュミレーションコード TOPICS を用いた計算を行うために大型計 算機システムを使用する必要があった。

(2)利用内容·結果:

本研究では主に TOPICS コードを用い、JT-60SA の電流立ち上げシナリオの検討を行った。 特に JT-60SA の大目標の一つである、SlimCS デモ炉における CS の使用を最小限に抑えたプラ ズマ電流立ち上げシナリオの開発に資することを目標としている。

検討したシナリオにおいて、初期プラズマ生成後のプラズマ電流が低い段階で CS による誘導 駆動電流がゼロの Full CD 状態を達成し、その状態を保ったままプラズマ電流を立ち上げること を目指した。このようなシナリオが実現できれば、必要な CS 磁束は初期プラズマ生成および Full CD 状態に移行するまでに消費される分だけとなり、全電流を CS による誘導で駆動する場 合に比べて大幅に小さくできると期待できる。

平成 24 年度までの研究成果として、密度、温度の時間発展を仮定して立ち上げシナリオの計算を行い、どのような密度、温度、電流駆動の組み合わせで Full CD を保ったプラズマ電流立ち



Fig.1 シミュレーションにおいて仮定された密度分布の時間発展(左図)、CDBM 輸送モデルに 基づいて計算された電子温度の時間発展(中央図)と Full CD が達成される 5 秒における 電流分布。jtot, jOH, jBS, jNB はそれぞれ、全電流、オーミック電流、ブートストラップ電 流、NBI 駆動電流の分布を示す。

上げが可能であるかが示されている。 この結果からは、強い内部輸送障壁を 持つプラズマを放電初期に達成し、そ の状態を保ったままプラズマ電流を 立ち上げることができれば、ブートス トラップ電流によってプラズマ電流 の8割程度を駆動することが可能にな り、JT-60SAで予定されている加熱、 電流駆動入力の範囲内で2.1 MAまで の電流立ち上げができる可能性があ ることが分かっている。

平成25年度ではその結果を受けて、 温度分布の発展を輸送モデルに基づ



Fig.2 プラズマ電流(I_p)とそのうちのブートストラップ電流(I_{BS})、NBI 駆動電流(I¬NB)、誘導電流(IOH)の時間発展。5 秒より後は Full CDの状態になっている。

いて計算するシミュレーションを行った。用いた輸送モデルは CDBM 輸送モデルという、 JT-60Uの内部輸送障壁が形成されたプラズマのシミュレーションで妥当な結果を得ることがで きているものである。このシミュレーションでは、ブートストラップ電流と、off-axis な負イオ ン接線 NBI の駆動電流によって負磁気シアが形成され、内部輸送障壁が形成できることがわか った(Fig. 1)。その結果、温度を計算するシミュレーションにおいても Full CD を保った電流立 ち上げシナリオの計算が行えることが明らかになった(Fig.2)。またこの時、CS によって駆動さ れた電流量の指標である抵抗性の磁束消費が NBI,ECH を全く用いない場合と比較して 1/10 に 低減できることがわかった。

ここまで計算されたシナリオはすべて L-mode プラズマを仮定していたが、加熱入力は H-mode 遷移の閾値を超えている。そこで、H-mode スケーリングから予想されるペデスタルの 密度、温度を仮定した計算を行った結果、この場合でも Full CD を保ったまま 2.1 MA までのプ ラズマ電流立ち上げシナリオを計算できることが明らかになった。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

口頭発表

- 1) T. Wakatsuki, Y. Takase, T. Suzuki, N. Hayashi and S. Ide, "Accessing advanced scenario with small magnetic flux consumption", "JT-60SA 3rd Research Coordination Meeting", 2014 年 5 月 19-23 日, 那珂.
- 2) T. Wakatsuki, T. Suzuki, N. Hayashi, J. Shiraishi, S. Ide and Y. Takase, "Simulation of plasma current ramp-up with reduced magnetic flux consumption in JT-60SA using TOPICS transport code", "56th Annual Meeting of APS-DPP", 2014年10月27-31日, New Orleans (USA).

(4) 今後の利用予定:

特になし。

5.7.13 微小球充填層内トリチウム流動コードの開発整備

Development of Fluid Analysis Code of Tritium Transport in Pebble Bed

関 洋治

ブランケット工学研究グループ

(1)利用目的:

核融合炉固体増殖水冷却方式ブランケットの増殖材微小球充填体内を流れるヘリウム (He) パージガスと固体増殖材から放出されるトリチウム輸送を解析するためのコード開発整備を目 的とする。核融合炉ブランケット内でのトリチウムは、増殖材微小球の構成元素であるリチウム と核融合炉内のプラズマから照射される中性子の反応により生成する。トリチウムは、増殖材固 体内で拡散し、微小球表面から同位体交換反応により放出した後、ヘリウムパージガスにより充 填体内を通過し、トリチウム処理施設へ輸送される。従って、ブランケットの設計とトリチウム 回収総合評価上の観点から、時系列での回収されるトリチウム量の予測が必須の課題となる。

本解析コードでは、微小球の充填を個別要素法 DEM 解析で実施し、最密充填、自然充填、加 振充填等、様々な充填方法での解析モデル(図1)において流動解析を実施可能とした。さらに は、本開発整備では、容器の壁内にトリチウムがどのように拡散していくかを把握するため、ト リチウム輸送を流体と固体内の数値計算を連成するにより、微小球充填体内のトリチウム濃度を 把握することを目的とする。壁近傍の空隙により多くの格子を必要とするため(図3)、計算コ ストは膨大であり、大規模かつ長時間となる数値シミュレーションを実施する必要があるため、 大型並列計算機の利用が不可欠である。



図1 増殖材充填体解析モデル

(2) 利用内容·結果:



図 2 充填体モデルの断面図(A) 最密充填、(B) ランダム充填、(C) ランダム充填後に加振

これまでの解析では、粒子を規則正しく充填し、流れ場と温度場、物質拡散を解くことで輸送 現象を予測していた。今回、最密充填、ランダム充填、ランダム充填後に加振した充填の3パタ ーンで充填体モデルを作成し(図2)、粒子一つ一つの境界面を Non-slip 条件とし、充填体内部 の3次元流動解析を実施した。



図3 充填体出口付近の断面における速度コンター図 (記号は図2と同じ。)

図3に各充填方法における充填体出口付近断面の速度コンター図を示す。粒子を規則正しく充 填した最密充填モデルでは、これまで知られているとおり、壁近傍の空隙の大きな領域で速度が 大きくなっていることが再現されている。他方、ランダム充填では、壁近傍だけでなく、充填体 内部の空隙においても比較的大きな速度が観察された。さらに、ランダム充填後に加振した充填 体モデルでは、空隙の間欠性がさらに顕著となり、壁近傍と内部で流動パスが存在する部分のみ に大きな速度が存在する傾向となった。本解析で、各充填モデルでの速度分布の違いが明確とな り、充填体を体積力として扱う多孔質体モデルでは再現できなかった空隙分布による速度場への 影響を定量的に取得することに成功した。



図4 充填容器の壁を模擬した解析モデル

図5 ログスケール物質濃度(質量密度)

さらに、充填体壁を模擬し、壁内部の物質拡散の連成解析も実施した(図 4)。トカマク核融 合炉のトロイダル方向の充填体内トリチウム分布は一様と仮定し、半径方向の分布については1 次元核熱解析のトリチウム生成量から物質輸送方程式のソース項へ反映することにより、トリチ ウム濃度分布の予測も可能とした(図 5)。本解析コードの開発により微小球の充填から充填体 内の流体拡散によるトリチウム輸送、そして壁内拡散まで、マルチスケールの現象を再現するこ とが可能となった。これにより、微小球充填構造の様相やトリチウム回収量と微小球充填体内の トリチウム濃度を把握する強力な予測ツールの基礎構築を達成した。本解析の結果は、実現象の 結果と比較することが可能であり、その整合性の評価結果は、産業のみならず学術的にも重要な 成果が期待される。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 関洋治、榎枝幹男、久保田仁一、坂本健作、"核融合炉ブランケットにおける増殖材充填体 内のトリチウムパージガス挙動に関する工学的研究" 日本機械学会第 26 回計算力学講演 会、佐賀、2013, 706, CD-ROM.

(4) 今後の利用予定:

実機試験体に合わせるための計算対象を用いて、Verification&Validation を実施し、本計算 体系の信頼性向上とトリチウム輸送データベースの充実化を引き続き進める予定である。

5.8 次世代原子カシステム研究開発部門 Advanced Nuclear System Research and Development Directorate

5.8.1 高速炉燃料集合体内詳細熱流動解析手法の開発整備

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

> 堂田 哲広、西村 正弘、今井 康友 冷却材挙動解析グループ

(1) 利用目的:

高速炉の実用化に向けては、経済性向上の一環として燃料の高燃焼度化・高線出力化が指向されている。この実現には、過度な保守性を排除した合理的な燃料設計がなされる必要があるが、 そのためには、燃料ピンの変形を含む様々な運転モードに対して燃料集合体内の熱流動挙動を詳 細に解明することが必須となる。この現象解明に資することを目的として、次世代部門冷却材挙 動解析グループでは、昨今の計算機処理能力を背景に、燃料集合体変形・熱流動解析シミュレー ションシステムの構築を実施している。本件は、このシミュレーションシステムを構成する局所 詳細解析コード SPIRAL について、集合体流動試験の再現解析を通してコードの妥当性を確認 することを目的とする。

(2) 利用内容·結果:

SPIRAL コードは、燃料ピンやワイヤスペーサ等の存在により複雑となる燃料集合体内形状を 正確に取り扱うため、形状模擬性に優れた有限要素法を採用するとともに、運動量保存、エネル ギー保存式のそれぞれに対する複数の乱流モデルを選択・適用できるという特徴を有する。これ までに様々な基本検証を実施してきたが、平成 25 年度は内部ダクト型集合体の伝熱流動特性を 評価するため、正六角管型 37 本ピン集合体、および、同集合体の一角から4本の燃料ピンを取 り除いた内部ダクト型 33 本ピン集合体を対象とした熱流動解析を実施した。

図1に解析体系を示す。解析対象は典型的な集合体仕様値(燃料ピン径 D=6.50mm、ワイヤ 径 d=1.32mm、燃料ピン配列ピッチ P=7.87mm、ワイヤ巻きピッチ H=307.0mm、燃料ピン発 熱長 L=930.0mm、P/D=1.21、H/D=30.29、L/H=3.029)を有する 37 本ピン/33 本ピン燃料集 合体であり、集合体軸方向に対しては4巻きワイヤピッチを対象とした。要素総数は約300万 要素(流体領域200万要素、構造材領域100万要素)であり、水平断面あたりでは約1.5万要 素となる。境界条件に関しては、流動場では流入流出境界を周期境界条件として、壁境界は Non-Slip 条件を課した上で壁関数を適用した。温度場では流入境界の温度を一定のTin=397℃ として、燃料ピン発熱は被覆管内表面に対して軸方向分布を有する熱流束条件を与えて模擬し た。また、集合体軸方向の温度レベルを一致させるため、燃料ピン線出力、冷却材流入温度、お よび、集合体発熱/流量比を集合体間で一致さ せた。作動流体はナトリウムであり、集合体流 入流速 win=4.94m/s、等価直径 D_{eq} =3.40mm から算出されるレイノルズ数は Re=51280 と なる。数値計算モデルに関しては、風上化法と して SUPG 法を、乱流モデルとして SPIRAL オリジナルの Hybrid 型 k- ϵ/k_0 - ϵ_0 モデルをそ れぞれ採用した。

解析結果の一例として、図2、図3に燃料ピン発熱部上端における軸方向流速と冷却材温度の分布を示す。軸方向流速に関して、正六角管型集合体と内部ダクト集合体では、分布の傾向は概ね一致しており、ピーク流速等に顕著な差は現れていない。また、冷却材温度に関して、正六角管型集合体に比べて内部ダクト型集合体では、集合体中心のピーク温度が約5°Cの高温となる結果が得られている。

以上の解析結果は、SPIRAL コードの検証 として利用されるだけでなく、燃料集合体サブ チャンネル解析コード ASFRE の検証用デー タとしても利用されており、現在整備中である 同コードの変形集合体解析モデルの構築に寄 与している。



図1 解析体系



六角管型 37 本ピン集合体

内部ダクト型 33本ピン集合体

図2 燃料ピン発熱部上端における軸方向流速の分布



図3 燃料ピン発熱部上端における冷却材温度の分布

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 西村正弘、佐藤博之、上出英樹、大島宏之、長澤一嘉、今井康友、「燃料ピンバンドル内サ ブチャンネルにおけるワイヤスペーサ近傍の冷却材流速分布」、日本原子力学会 2012 年春 の年会 (2012).
- 2) M. Nishimura, H. Sato, H. Kamide, H. Ohshima, K. Nagasawa, Y. Imai, "Investigation on velocity distribution around the wrapping wire in an inner subchannel of fuel pin bundle", ICONE-20 (2012).

(4) 今後の利用予定:

種々の集合体試験による検証解析を継続的に実施して、SPIRAL コードの検証を深める予定で ある。また、実機条件への適用として、内部ダクト型集合体の熱流動特性評価解析、集合体局所 閉塞事象評価解析等の大規模解析を実施する予定である。

5.8.2 高速炉ガス巻込み現象を解析できる高精度気液二相流数値解析コードの開発と 検証

Development and Validation of High-precision Numerical Simulation Code for Evaluation of Gas Entrainment in Fast Reactor

> 伊藤 啓、河村 拓己 冷却材挙動解析グループ

(1) 利用目的:

冷却材挙動解析グループでは、Na 冷却大型高速炉の安全設計クライテリア構築の一環として、 炉容器内自由液面におけるガス巻込み現象を評価できる手法の整備を行っている。本研究では、 高速炉ガス巻込み現象を数値解析によって評価することを目指し、非構造格子系における高精度 気液二相流数値解析コード(NERGAL: NumERical Gas Entrainment AnaLysis)の開発・整 備を行った¹⁾。

(2) 利用内容·結果:

本研究では、高速炉体系に対する NERGAL コードの適用性を評価するため、自由液面を含む 高速炉上部プレナム部の形状模擬モデル(1/4 セクター領域を 1/1.8 縮尺にてモデル化した大型 水流動試験, Fig.1)を対象とした数値解析を BX900(96PEs)にて実施し、ガス巻込みを引き 起こす可能性があるくぼみ渦の発生挙動を検討した。

解析体系内の流況を把握するため、流れ場が十分に発達した解析時間 190s から 200s までの 10 秒間の時間平均流線を Fig.2 に示す。入口側(Fig.2 中右側)からの主流は入口側のコールド レグ(C/L1)に衝突して配管群内側と炉壁(R/V)側の二手に分岐する。配管群内側の流れは内 壁との間にある広い流路を出口へと流れる。一方、RV 近傍では配管脇で流路は狭小で流速が増 すが、ホットレグ(H/L)付近から R/V とディッププレート(D/P)間隙の吸込みにより水平方 向流速は減衰し、出口側のコールドレグ(C/L2)付近で、D/P 間隙へ吸い込まれる。また、C/L1-H/L 間には配管群内側の主流の一部が C/L1 の回り込む流れや H/L 正面で分岐する流れが流入し、 H/L 下の D/P 間隙の吸込み流れによって液面から D/P へ向かう下降流が形成されている。

Fig.3 に C/L1 後方で発生したくぼみ渦の 0.5s 毎のスナップショットを示す。左図は自由液面 (VOF 値 0.5 の等数値面)、右図は液面下 2cm 水平断面における流速(ベクトル:水平方向流 速、色:垂直方向流速)を表し、いずれも液面上方から見たものである。くぼみ渦は、C/L1 を 回り込んだ流れに H/L によって分岐した主流の一部が合流することで成長し、C/L1 を R/V 側か ら回り込む流れが減衰するとくぼみ渦も減衰する。

Fig.4 に 130~200s までの 70 秒間におけるくぼみ渦の発生位置を示す。くぼみ渦は C/L1-H/L 間と H/L 後方両脇で多く発生し、H/L 後方のくぼみ渦はそれぞれ H/L を横切る流れが管壁から 剥離する際に生じている。また、C/L1 と H/L の間では、管壁からの剥離に加えて、配管を回り 込む流れや R/V 側を通過する流れの合流やせん断によって生じた渦に D/P 間隙の吸込み流れが 干渉することでくぼみ渦が発達している。 本件では高速炉ガス巻込み現象を解析できる高精度気液二相流数値解析コードの開発と検証 の一環として,実規模ガス巻込み現象への適用性確認を実施した。1/1.8 部分モデル試験を対象 として解析を行った結果、配管近傍における渦流れ場の非定常挙動とそれに伴うくぼみ渦発生挙 動が再現可能であることを確認した。また、解析結果において観察できたくぼみ渦を分析した結 果、流れのせん断や合流によって生じる比較的強い渦流れに D/P 吸込みによる下降流速が干渉 する領域において発生頻度が増すことを把握した。



Fig.1 1/1.8 縮尺液面部分モデル水流動試験装置



Fig.2 時間平均流線(10秒間)

JAEA-Review 2014-043



Fig.3 くぼみ渦 (0.5 秒毎のスナップショット)



Fig.4 くぼみ渦発生位置(解析時間 70 秒間)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 Kei Ito, Tomoaki Kunugi, Hiroyuki Ohshima, Takumi Kawamura, "A volume-conservative PLIC algorithm on three-dimensional fully unstructured meshes", Computers & Fluids 88 (2013) pp.250-261.

(4) 今後の利用予定:

高速炉上部プレナム自由液面からのガス巻込み現象評価の検討を進めるため、より詳細な解析 格子を用いた数値解析や、液位や境界流速などガス巻込み現象に影響を及ぼすと考えられるパラ メータを変化させた際のガス巻込み挙動評価を予定している。

5.8.3 ナトリウム燃焼計算プログラムの機能高度化

Enhancement of Simulation Capability for Sodium Fire Analysis Code

(1)利用目的:

高速炉プラントの冷却材ナトリ ウムは高温で空気中の酸素や湿分 に触れると発熱を伴う化学反応(燃 焼)を生じる。このため、万一の事 故時のプラント安全性評価や影響 緩和方策の検討に資することを目 的に、ナトリウム燃焼時の熱影響を 数値シミュレーションする解析コ ード SPHINCS を開発整備してい る。同コード(図1)は、液体ナト リウムがスプレイ状に飛散または 床上でプール状に広がり燃焼する



大野 修司

冷却材挙動解析グループ

図1 ナトリウム燃焼解析コード SPHINCS の解析対象

場合の熱と物質(ガス成分や微粒子状の煙)が建物内を移行拡散する挙動を扱う。

(2) 利用内容·結果:

SPHINCS コードは通常 PC 上で使われるプログラムであるが、今般これを大型計算機に移植 し、標準的問題で比較計算を行って PC と大型計算機で同等の計算結果が得られることを確認し た。その上で、SPHINCS コードを構成する計算モジュールのうち多セル間のフローネットワー ク計算部及び構造物熱伝導計算部についてリスタート計算機能を付加する改良を実施した。典型 的なナトリウム燃焼問題を用いて、リスタート計算が正常に行われることを確認した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- S. Ohno, E. Hamase, H. Kamide, "Ongoing Validation of Sodium Fire Analysis Code System for SFR Safety Evaluation," Proc. ICAPP 2013, Jeju Island, Korea, April 14-18, 2013, FF228 (2013).
- 2) 大野修司、浜瀬枝里菜、"ナトリウム燃焼影響解析評価手法の開発研究、"日本機械学会 2013 年度年次大会、S083012 (2013).

(4) 今後の利用予定:

今回実施した大型計算機への移植によって、計算機資源を有効活用した大規模解析をより高 速・効率的に行うことが可能となった。また、リスタート計算機能を付加改良したことで、評価 対象とする事象進展の広範化、境界条件変化への対応の柔軟化が図られたと同時に、解析コード の改良・整備やシミュレーション実行のスピードアップも期待される。

5.8.4 ナトリウム冷却高速炉の高温側1次主冷却系統合解析モデルの整備 Development of Integrated Numerical Analysis Model for Unsteady Phenomena in Upper Plenum and Hot-leg Piping System of JSFR

田中 正暁 流動・系統解析グループ

(1) 利用目的:

ナトリウム冷却型高速炉の主冷却系ホットレグ(HL)配管と、接続する炉上部プレナム内の 解析モデルを統合した高温側一次主冷却系統合解析手法(以下「統合解析モデル」)を整備して いる。本解析手法では、比較的流速の遅い炉上部プレナムから高流速となる HL 配管に吸い込ま れる過程で発生する HL 配管入口近傍での液中渦によるキャビテーションの発生評価および入 口部で発生する速度乱れによる HL 配管およびその下流のショートエルボ部での流動励起振動 評価をはじめとして、上部プレナム部と HL 配管部における非定常熱流動現象に起因する課題評 価に必要な熱流動情報の提供を目的としている。流動励起振動評価においては、これまでに、シ ョートエルボ部を含む HL 配管部に着目した水流動試験および数値解析により、評価指針(案) をまとめてきたところであるが、既往検討においては炉上部プレナムから HL 配管への吸い込み の過程で発生する速度乱れの影響把握が課題となっていた。そこで、流動励起振動評価の観点で 過去に整備してきた HL 配管単体を対象とした解析モデルと、炉上部プレナム内の代表的な評価 課題である温度成層化現象を対象として別途整備してきた上部プレナム解析モデルとを統合し て、新しい解析モデル(統合解析モデル)を整備することとした。平成24年度には、大型計算 機システムを利用して、長時間の非定常流動解析が可能となるよう解析メッシュ適正化の検討を 行い、基本機能についての動作確認を行った。平成25年度には、適正化した統合解析モデルを 用いて、上部プレナム部での非定常流動特性について把握するとともに、非定常流動解析から得 られる圧力変動データを用いたショートエルボ部を含む HL 配管の構造応答(流動励起振動)解 析評価手法の整備を実施した。また、過渡解析時の計算負荷低減を目的として、更なる解析メッ シュの合理化を図った。

(2)利用内容•結果:

① 統合解析モデルの検証

大型高速炉の上部プレナム部を約 1/11 縮尺模擬した水試験条件を対象として、統合解析モデ ルの検証解析を実施した。使用した CFD コードは STAR-CD Ver.4.12 である。解析には総メッ シュ数約 1,100 万のフルセクタモデルを使用した (図 1 参照)。図 2 (a) および (b) にエルボ 入口から 2D 上流位置での時間平均流速分布として (a) に HL 配管断面内の流速分布 (二次流 れ)の様子を示し、(b) に軸方向流速の直径方向分布を示す。図 2 (a) の二次流れについて 1/11 縮尺水試験結果との比較により、渦の出現位置や向きが概ね一致することを確認した。また、図 2 (b) から、軸方向流速分布についても実験結果を概ね再現できることを確認した。ただし、数 値解析では平均値算出に用いたデータ数が1,500個と少なく、実験結果との定量比較が十分とは 言い難い状況であることに注意が必要である。今後、さらに、検証解析を継続する必要がある。

② 解析メッシュの更なる合理化

過渡解析時の計算負荷低減を目的として、「①統合解析モデルの検証」で使用した総メッシュ 数約 1,100 万のフルセクタモデルから更なる合理化を図った。「①統合解析モデルの検証」の非 定常解析の結果から、メッシュ数増加に寄与している UIS 周辺領域の流動場を確認したところ、 顕著な渦流れは形成されていないことが分かった。このため UIS 周辺のメッシュを径方向に 8 メッシュ低減させ、総メッシュ数を約 1,100 万から約 900 万まで減少させた解析メッシュを構築 した。しかしながら、解析結果を確認したところ、これまでの知見と一部整合しない結果が生じ た(はく離領域が小さい)。さらに要因分析を進め、解析負荷の低減(合理化)を検討していく。

③ 合理化メッシュの機能確認

合理化したメッシュを使用して非定常解析を実施した。「①統合解析モデルの検証」とは条件 が異なり、本解析では作動流体を 550℃のナトリウムとし、HL 配管内の時間平均軸方向流速 *U*mが大型炉条件(9.2m/s)となるように炉心出口流速を設定した。図3(a)に炉上部プレナム 内の瞬時渦流れの様子と、図3(b)に HL 配管部を拡大した流動場の様子を示す。図3(b)の HL 配管拡大図では、図3(b-1)に図3(a)から HL 配管部(赤点線)を拡大した図および図3

(b·2) に同位置での時間平均した結果を示す。図3(a) においてショートエルボ部出口近傍で 馬蹄状のアーチ渦が点在しているが、図3(b)の時間平均場ではこれらは消滅している。すな わち、ショートエルボ内のはく離開始点を起点として馬蹄状渦が間欠的に生成され、それらが下 流に流れていくことで、大きな速度変動および圧力変動を引き起こす原因となる。これは、HL 配管単体での既往検討で得られた知見と整合している。また、HL 配管内において HL 配管入口 部から延びる複数の縦渦(主流方向に平行な渦軸を持つ)が観察できる。ただし、この縦渦はエ ルボ背側に存在しており、先に述べた馬蹄渦の運動に影響を及ぼすことはない。今後、合理化メ ッシュについても「①統合解析モデルの検証」と同様の検証解析を実施して適用性を確認する必 要がある。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 田中、藤崎、「ナトリウム冷却高速炉のショートエルボ配管を有する炉上部プレナム部の非 定常解析モデルの整備」、日本機械学会 2013 茨城講演会、日立市、2013、(CD-ROM) (2013 年9月).

(4) 今後の利用予定:

大型炉 HL 配管部と上部プレナム部とを接合した統合解析モデルを用いた数値解析結果を詳 細に分析するとともに、HL 配管の流動励起振動解析評価に向けた境界条件となる圧力変動デー タ取得に向け、大型計算機システムを活用して必要な数値解析を実施していく。







図3 非定常渦構造の可視化(Q=-100)

(渦構造は、速度勾配テンソルの第2不変量Qという渦の強さを示す指標の等値面で表した)

5.8.5 高速炉蒸気発生器内ナトリウムー水反応現象数値解析コードの高度化 Advancement of a Computer Program for Sodium-water Reaction Phenomena in a Steam Generator of Fast Reactors

内堀 昭寛

システム安全解析グループ

(1)利用目的:

ナトリウム (Na) 冷却高速炉の蒸気発生器 (SG) において伝熱管壁に貫通破損孔が生じると、 高圧の水または水蒸気が Na 中へ噴出し、Na と水の化学反応 (Na-水反応) を伴う高速・高温・ 腐食性ジェットが形成される。隣接する伝熱管にこの反応ジェットが衝突すると、管壁の損耗(ウ ェステージ) や高温化に伴う強度低下を引き起こし、それらが進行すると隣接伝熱管が二次的な 破損(破損伝播)に至る。SG の設計及び安全評価では破損伝播の発生する可能性を評価するこ とが重要な課題となっていることから、本研究では数値解析により伝熱管破損時事象を評価する 機構論的解析評価システムを開発している (図 1)。本評価システムは複数の数値解析コードか ら構成され、その最も重要な構成要素である Na-水反応・圧縮性多成分多相流解析コード SERAPHIM については大型計算機を利用して解析モデルの構築や検証解析を進めている。平成 25 年度は、これまでに構築した複数の解析モデルを併用した場合の実機条件に対する総合的な 適用性確認を目的として、実機条件を模擬した液体 Na 中水蒸気噴出試験を本コードで解析した。 本件で得られる成果は、実機適用評価時の解析結果の信頼性を示す根拠となるものである。



図1 伝熱管破損時事象に対する解析評価システムの概要

(2) 利用内容·結果:

液体 Na 中水蒸気噴出試験に対する解析領域及び解析メッシュを図2に示す。解析領域には内 部構造物として注水管、ターゲット管、及びその支持板が存在する。解析領域は最初液体 Na で 満たされ、注水管中央の注水孔より水蒸気が鉛直上向きに噴出する。注水孔では、その直前位置 における水蒸気温度・圧力の測定値を境界条件として与えた。液体 Na の初期温度・圧力につい ても試験と同じ条件を与えた。これらの温度・圧力はいずれも実機における条件となっている。 本解析では、従来 SERAPHIM コードに備わっている圧縮性多成分多相流モデル及び化学反応モ デルに加え、平成24年度までに開発した液滴エントレインメント・輸送モデルを使用した。

温度・圧力条件やターゲット管配置を変更した複数ケースの解析を実施した。そのうち代表的 なケースとして、図3に水蒸気圧力17.17MPa、水蒸気温度374.4℃、注水管-ターゲット管距 離 68mm のケースにおける解析結果を示す。同図には、20ms 間で平均した垂直断面内の気相温 度、気相流速、液滴速度の分布を表示している。注水孔からターゲット管下側までの範囲では、 水蒸気を比較的多く含む未反応の気相が占めるため気相温度が周囲より低くなっている。その周 辺からターゲット管の上方にかけては、化学反応が進行することで高温領域が形成されている。 気相温度は化学反応により最大で1200~1300℃程度まで上昇する結果となった。本解析結果の 試験結果に対する整合性を確認するため、熱電対設置位置に相当するターゲット管の下端より下 方 34mm の位置、及び、上端より上方 34mm の位置での質量平均温度を上述の 20ms 間時間平 均結果から求め、これを測定値と比較した。いずれのケースでも、解析結果は50~100℃程度高 く評価しているものの、解析と実験の間で傾向が一致することを確認した。気相流速の分布から は、噴出孔上方で不足膨張やマッハディスクと呼ばれる衝撃波が発生し、不足膨張領域では超音 速状態となっていることが分かる。不足膨張領域とマッハディスクの出現は一般的に知られてい る現象であり、妥当な結果である。不足膨張領域の境界付近では、気液界面からエントレインさ れた液滴が気相の流れに随伴して加速され、液滴速度が高くなっている。同図には表示断面を 90°回転した管軸方向と平行な垂直断面での液滴速度分布を示している。この図に示す通り、タ ーゲット管の中心(注水孔の直上)から管軸方向へおよそ 10~20mm 離れた位置に液滴が衝突 しているが、試験でも概ね同等の位置にウェステージ痕が存在し、解析結果はこれに整合してい る。以上の通り、大型計算機の利用により複数ケースの並列計算を実施し、混相流動と化学反応 の複合によって形成される温度場や、隣接伝熱管ウェステージ発生の要因となる液滴挙動に対す る予測結果が概ね妥当であることを確認した。



図2 液体 Na 中水蒸気噴出試験の解析体系



図3 解析結果(一例)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) A. Uchibori and H. Ohshima, "Numerical Methods for Compressible Multiphase Flow with Sodium-Water Chemical Reaction", Journal of Power and Energy Systems, Vol.7, No.2, 2013, pp.106-121.
- 2) 内堀昭寛, 菊地晋, 栗原成計, 浜田広次, 大島宏之, "高速炉蒸気発生器の伝熱管破損時事象 に対する解析評価手法の開発", 日本機械学会論文集 B 編, 79 巻 808 号, 2013, pp.2635-2639.
- 3) 内堀昭寛,大島宏之, "高速炉蒸気発生器における伝熱管破損事象に関する研究(29)ウェス テージ環境評価モデルの基本検証",日本原子力学会 2014 年春の年会, 2014.
- 4) 内堀昭寛, 大島宏之, "高速炉蒸気発生器の伝熱管破損時事象に対する解析評価手法の開発 -実機条件に対する適用性検証-", 第19回動力・エネルギー技術シンポジウム, 2014.
- 5) A. Uchibori and H. Ohshima, "Development of a Wastage Environment Evaluation Model for a Sodium-Water Reaction Analysis Code SERAPHIM", Proceedings of the Ninth Korea-Japan Symposium on Nuclear Thermal Hydraulics and Safety (NTHAS9), Buyeo, Korea, November 16- 19, 2014, N9P0050.

(4) 今後の利用予定:

実機相当の試験を対象として、管群の存在する体系や水リーク率の異なる場合などより広範な 条件に対し、大型計算機を利用して検証解析を実施する予定である。

5.8.6 高速炉蒸気発生器内ナトリウムー水反応現象数値解析コードの高速化 Advancement of Computing Speed for Sodium-water Reaction Phenomena in a Steam Generator of Fast Reactors

内堀 昭寛 システム安全解析グループ

(1) 利用目的:

ナトリウム (Na) 冷却高速炉の蒸気発生器 (SG) において伝熱管壁に貫通破損孔が生じると、 高圧の水または水蒸気が Na 中へ噴出し、Na と水の化学反応 (Na-水反応) を伴う高速・高温・ 腐食性ジェットが形成される。隣接する伝熱管にこの反応ジェットが衝突すると、管壁の損耗(ウ ェステージ) や高温化に伴う強度低下を引き起こし、それらが進行すると隣接伝熱管が二次的な 破損(破損伝播)に至る。SG の設計及び安全評価では破損伝播の発生する可能性を評価するこ とが重要な課題となっていることから、本研究では数値解析により伝熱管破損時事象を評価する 機構論的解析評価システムを開発している (図 1)。本評価システムは、Na-水反応・圧縮性多 成分多相流現象数値解析コード SERAPHIM や隣接伝熱管熱移行解析コード TACT 等によって 構成されている。SERAPHIM コードでは超音速となる混相流現象を対象とするため、一般的な 熱流動現象解析コードに比べて計算負荷が高い。そのため並列計算が必須であり、また可能な限 り高速化を図り計算機資源を有効活用することが重要である。平成 25 年度は、SERAPHIM コ ードへ高速化のための改良を施した。TACT コードについては、解析モデルの個別検証を継続し て実施することが課題となっており、その一部として基礎的な円筒周りの流動問題を解析した。



図1 伝熱管破損時事象に対する解析評価システムの概要

(2) 利用内容·結果:

SERAPHIM コードについては、1)スカラチューニングによる高速化、2)ノンブロッキング通信による通信時間の隠蔽、3)ロードバランス調整方法の改善、により高速化を図った。1)については、反復計算中における分岐構造の見直し、除算の省略、MPI 関数呼び出しによるオーバー

ヘッドの減少等の高速化方策を適用した。2)については、性能調査の結果 ALLREDUCE 通信を 行う箇所がボトルネックとなっていたことが明らかとなったため、当該 ALLREDUCE 通信と、 従来それとは違うタイミングで実施していた演算をオーバーラップさせるようプログラムを変 更し、ある一定の高速化効果が得られた。3)は、並列計算時のプロセス間の計算量(ロードバラ ンス)を均一化させるための方策である。従来の SERAPHIM コードでは並列計算を行う場合に 領域をほぼ均等に分割していたが、プロセス間での計算量が状況によっては不均一になる問題が あったため、計算量が均一となるように領域を不均等に分割する機能をこれまでの高速化作業で 導入したが、最大の性能が得られるように不均等分割の方法を最適化することが課題として残さ れていた。本件では、ロードバランスに影響する物理量の分布に着目し、それをパラメータとし た領域分割方法を導入することでロードバランスの均一化を図った。さらに、ロードバランスが 低下した場合に解析を中断し、再度不均等分割を施してリスタート計算を自動実行する機能を導 入した。以上の高速化方策を実装した結果、表 1 に示す通り 128 並列計算の場合に計算速度は 約 1.1 倍程度増大することを確認した。

TACT コードについては、基礎的な円筒周りの流動問題を対象として検証解析を実施した。その結果、円筒周りに形成される圧力と流速の分布を再現できることが分かった。これにより、 TACT コードの一部である流動解析モジュールが妥当であることを確認した。

	1)	2	3
スカラチューニング	なし	あり	あり
ノンブロッキング通信	なし	あり	あり
ロードバランス調整	なし	なし	あり
Elapsed [sec]	4159.7	3768.9	3708.2
速度向上率	1.00	1.104	1.122

表1 SERAPHIM コードの高速化方策の効果(128 並列計算時)

(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:

SERAPHIM コードについては、ロードバランスのさらなる最適化、より広範な条件に対して の性能確認とチューニング、スレッド並列化、ノンブロッキング通信の API の適用、反復計算 時の収束性能向上等々の方策を検討し、高速化を図る予定である。TACT コードについては、解 析モデルの個別検証を継続することに加え、総合的な検証も実施する予定である。

5.8.7 連続エネルギーモンテカルロコード MVP を使用した FBR 炉心のドップラ反応度解 析

Calculation of FBR Core Doppler Reactivity by Continuous Energy Monte-Carlo Code MVP

> 丸山 修平、菰田 宏、曽我 彰 炉システム開発計画室

(1) 利用目的:

高速炉の炉心の安全性に係る研究の一環として、炉心核設計手法の検証及び妥当性確認のため に、連続エネルギーモンテカルロコード(MVP)を用いた炉心核特性解析を実施する。

燃料集合体内や制御棒集合体内を忠実に模擬した複雑な炉心体系においては、現実的な時間の 範囲で十分な統計精度を以って炉心核特性を評価するために大型計算機システムの利用が必要 不可欠である。

(2) 利用内容·結果:

平成 25 年度も引き続き、MVP コードにより得られる諸炉心核特性の評価結果を参照解として、炉心核設計で用いられている決定論的解析手法の検証や妥当性確認を行った。

本年度に実施した解析の一例を述べると、燃料集合体内の燃料ピンや内部ダクト、及び、制御 棒集合体内の吸収体ピン等を忠実に模擬した体系(例:図1、図2)において、MVP コードで ドップラ反応度の解析を実施した。燃料組成や核分裂生成物核種の取り扱い方をパラメータにし て、決定論的手法で得られたドップラ反応度を MVP コードによって得られるものと比較したと ころ、決定論的手法で得られた値と矛盾する結果は見られなかった。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

今後、学会発表等を通じてこれらの結果を随時発信していく予定である。

(4) 今後の利用予定:

高速炉の炉心核設計手法の検証や妥当性評価のため、モンテカルロ法を用いた解析コードによる炉心核特性評価を引き続き実施していく予定である。今後は MVP コードのみならず燃焼計算の機能が付随した MVPBURN コードについても使用する予定であり、平成 26 年度以降も大型計算機システムの利用が必要とされる。

JAEA-Review 2014-043



図1 MVP コードにおける燃料ピンのモデル化の例



図2 MVP コードにおける炉心部のモデル化の例

5.8.8 U-RANS によるトリプルエルボ配管内流動のシミュレーション

U-RANS Simulation of Unsteady Triple-elbow Pipe Flow

山野 秀将、和田 明^{*1} 炉システム開発計画室、*1 NESI

(1) 利用目的:

ナトリウム冷却大型高速炉の流力振動起因の配管破損によるガス巻き込み現象に係るクライ テリア構築のための根拠となるデータを取得することを目的として、単一エルボ体系を対象に構築した解析手法を用い、実機コールドレグ配管の1/7縮尺試験体を用いた3段エルボ配管試験を 対象に非定常解析を実施した。具体的には、単一エルボ体系を対象に構築した解析手法の3段エ ルボ体系への適用性確認、3段エルボ配管内の非定常流動特性の把握、2段~3段エルボ間距離 の影響を確認した。この解析研究を実施するためには、詳細なメッシュを用いて長時間の非定常 流動解析を実施する必要があり、大規模並列計算機の利用が必要不可欠である。

(2) 利用内容·結果:

2.1 解析条件及び解析ケース

解析には、これまで実績のある汎用熱流体解析コード STAR-CD Ver.4.12 を用いた。図1に解 析体系とメッシュ分割図を示す。2 段~3 段エルボ間距離の影響を確認するため、2 段~3 段エ ルボ間距離を 6.4D と 5D(配管径を D とする)で比較した。



図1 解析体系とメッシュ分割図

2.2 解析結果

まず、1/7 縮尺試験で得た1段、2段、3段エルボ試験を対象に解析を行った結果、第1エル ボ下流の流速分布は一致しており、流況を再現できた。図2に3段エルボ体系の流速分布を示す。 第1~第2エルボ間で生じた強い旋回流により第2エルボ下流の剥離は形成されず、試験結果を 再現できた。また、その旋回流は第3エルボ入口まで継続することにより、第3エルボ下流の剥 離域は第1エルボよりやや小さくなった。図3に3段エルボの圧力変動パワースペクトル密度

(PSD)(エルボ下流 0.4D 位置)を示す。圧力変動 PSD は、2段目と3段目では旋回流により やや大きくなる程度であった。これにより本解析手法が3段エルボ体系配管流動への適用性を確 認するとともに、エルボ配管内流動特性が明らかになった。



(a)第1エルボ

(b)第2エルボ図2 3段エルボ体系の時間平均流速分布





図3 3段エルボの圧力変動 PSD (エルボ下流 0.4D 位置)

今後の設計進捗を考えると、エルボ間距離を変更する可能性があることから、エルボ間距離の 影響を解析的に調べた。図4に第2~第3エルボ間距離6.4Dの流速分布を、図5に第2~第3 エルボ間距離5Dの流速分布を示す。第3エルボ入口の第2~第3エルボ間距離の影響を調べる ため、6.4Dと5.0Dの場合を比較した。旋回流の高速域がエルボ腹側から少しずれるため剥離域 はやや小さくなった。図6の時間平均流速分布では、流速分布はほとんど変化がない。この程度 のエルボ間距離の変更は影響が小さく、流力振動評価の観点では設計変更に影響を与えないこと を示唆する。



図4 第3エルボ入口の流速分布(6.4D)

図5 第3エルボ入口の流速分布(5D)



図 6 エルボ間距離の流速分布への影響

- (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
- 山野秀将、田中正暁、和田明、江原真司、橋爪秀利、「URANS によるコールドレグ 1/7 縮 尺3段エルボ試験解析」日本原子力学会 2014 年春の年会、東京都市大学(2014 年 3 月 26 ~28 日) M17.

(4) 今後の利用予定:

エルボ間距離の影響、実機入口流況の影響を調べる事を目的として、大規模数値解析を実施する。

5.8.9 高速炉炉心損傷事故時の燃料集合体内部ダクト壁の破損発生機構

Mechanism of Inner Duct Wall Failure within Fuel Subassembly during Core Disruptive Accidents in an LMFBR

> 豊岡 淳一、高橋 一彦、飛田 吉春 炉心安全評価グループ

(1)利用目的:

原子力機構では、第4世代炉の安全設計クライテリアを満たす設計概念として、溶融燃料プールの揺動に起因した再臨界を回避する目的で燃料集合体内部に溶融燃料が流出する経路(内部ダクト)を設けた燃料集合体(FAIDUS)を設置する方策を検討している。

FAIDUSの概念図を図1に示した。図1には FAIDUSの内部ダクトとして、集合体の上部、 あるいは下部に溶融燃料の排出口を有する2種類の検討事例を示している。FAIDUS設計が炉 心損傷事故時にその目的を達成するためには、燃料集合体のラッパ管壁が破損する以前の早期段 階において内部ダクト壁が破損し、燃料集合体内に生成された溶融燃料が集合体外に流出する必 要がある。このため、カザフスタン国立原子力研究センター(NNC/RK)の試験炉 IGR にて、 FAIDUS による再臨界排除機能の原理的有効性確認を目的とした EAGLE-1 試験が実施されて いる。溶融燃料流出挙動を評価するための試験(ケース名:<u>ID1</u>)を対象としたパラメトリック 解析による試験結果の再現性確認、および内部ダクト壁破損メカニズムの把握が必要となる。

評価に際しては、多成分・多相・多速度場モデルによる炉心損 傷事故解析コード SIMMER-III による種々の伝熱パラメータを 用いた解析評価を実施しなければならないため、複雑でパラメト リックな評価を迅速に実行できる膨大な計算機資源が必要とな り、大型並列計算機の利用が不可欠である。

本研究では、まず液体スティールによる内部ダクト壁への伝熱 促進効果および液体スティールの密度分離効果の妥当性を確認 するとともに、多様な境界条件の下での応答特性を解析的に把握 する。次に ID1 試験における伝熱メカニズムの理解および燃料 とスティールの混合融体から内部ダクトへの伝熱の基本メカニ ズムに対する理解を深める。以上より種々の設計条件や過渡条件 に適用できる一般性を有する評価手法を構築するための留意点 を明らかにすることを目的とした。



図1 FAIDUS 設計概念図

(2) 利用内容·結果:

本研究では、汎用2次元非定常熱伝導解析コードによる非定常熱伝導解析により、ID1 試験で のダクト壁内面(ナトリウム側)に設置された熱電対(TC)データから実質的なダクト壁破損時の 熱的条件を評価した。

その結果(図 2)、実験で得られたダクト壁 破損推定時刻(IGR出力パルス印加後約4.9秒) において、ダクト壁内面温度は約1100 K、TC の熱容量効果を無視できる代表部位の融体に 接する融体側ダクト壁外表面温度は1625 K と 評価された。この結果から、以降で述べる SIMMER-III コードによる解析においては、融 体側ダクト壁外表面温度が1625 K に到達する 時刻とダクト壁破損観測時刻(IGR パルス印加 後4.9秒)をもとにダクト壁への伝熱挙動の模 擬性を評価することとした。

壁面への熱流束は、二成分融体(溶融燃料お よび溶融スティール)として高温の金属成分で ある溶融スティールの存在が主原因と推定、燃 料とスティールの接触表面積はスティールへ の伝熱量を介して溶融スティールの温度を支 配することから、SIMMER-IIIコードを用いた 解析では、溶融スティールの液滴径が重要と考 えた。解析の手順として、始めにまず溶融ステ ィールの液滴径を固定としてその影響を評価 し、次に溶融燃料と溶融スティールの流速差に 基づく微粒化メカニズムを考慮した解析、ステ ィール蒸気の凝縮を考慮した解析、更に溶融ス ティールの存在割合をパラメータとした解析 を実施した。

SIMMER-III コードによるスティール液滴 径を固定のパラメータとした解析においてダ クト外表面温度が 1625 K に到達する時刻、す なわち実験におけるダクト破損時の実験デー タに整合したダクト温度に到達する時刻を図 3 に示す。同図より、液滴径が 1 mm 以下では実 験結果と同様の解析結果が得られることが分 かる。一方、液滴径が 2 mm 以上では 1 mm 以 下に比べ、伝熱表面積が小さいため、ダクト外 表面温度が 1625 K に到達する時刻は実験結果 より遅れる結果となる。



図4は5秒時点での燃料クラストの形成を各パラメータ解析ケースで比較したものである。各 パラメータ解析ケースでの比較から、スティール液滴半径が4mmのケース(プールからの伝熱 が小さい)を除き、スティール液滴からの高熱流束によって燃料クラストが連続的に存在しない 領域が存在し、内部ダクトの早期破損が予測されている。このように、溶融スティールの存在が 高熱流束の発生に重要と推測されることから、その推測を下に溶融プール内のスティール量を変 化させたパラメータ解析(スティール体積比を可変として評価)を実施した。

図 5 にスティール液滴径として固定 液滴径 0.5 mm の解析条件下でのステ ィール体積割合をパラメータとした解 析においてダクト破損が予測される時 間を示した。スティール体積割合が基 準ケースの 80%以下になるとダクト破 損予測は大幅に遅れることが分かる。 これは溶融スティールの体積割合減少 に伴い壁面に接触するスティールが減

少することによる熱流束低下の影響で



図 5 各スティール体積比でのダクト壁破損予測時間

ある。一方でスティール体積割合が 90%以上では、わずかながらスティール体積割合が増加す ることで、ダクト破損予測が遅くなる傾向がある。これは、スティール体積割合の増加により、 燃料からの伝熱によるスティールの温度上昇が遅くなるためである。

以上より、EAGLE-1 試験シリーズの中で最も実機条件の代表性の高い ID1 試験を対象として 選定し、SIMMER-III コードを用いて燃料/スティール混合融体プールから内部ダクトへの伝熱 挙動を評価した。この結果、ID1 試験における混合融体プールから内部ダクトへの高い熱流束発 生と内部ダクトの早期破損には、溶融スティールの存在が大きく寄与していることを確認した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 豊岡淳一, 遠藤寛, 飛田吉春, 高橋実, "高速炉炉心損傷事故時の燃料集合体内部ダクト壁の 破損発生機構に関する研究 - 伝熱に関わるパラメータ解析結果 -," 日本原子力学会和文論 文集, Vol. 13, No. 2, 2014, pp. 35-50.
- 2) 豊岡淳一, 遠藤寛, 飛田吉春, 二ノ方壽, "EAGLE 試験解析に基づく高速炉炉心損傷事故時の燃料集合体内部ダクト壁の早期・高熱流束破損の発生機構に関する研究," 日本原子力学会和文論文集, Vol. 12, No. 1, 2013, pp. 50-66.

(4) 今後の利用予定:

本研究で実現した評価手法は、今後、ID1 試験以外の EAGLE-1 シリーズ試験などに適用する ことでモデルの妥当性を確認してゆくことが期待され、実機評価に適用すべき標準的な評価手法 確立のための基盤として活用することができる。以上を実施するため、今後も引き続き大型並列 計算機を使用する予定である。

5.9 バックエンド研究開発部門

Sector of Decommissioning and Radioactive Waste Management

5.9.1 3 次元飽和・不飽和浸透流一移流分散解析プログラム (Dtransu3D・EL)の高速 化・並列化 Acceleration and Parallelization of the Computer Program (Dtransu3D・EL) for Analyzing 3D Saturated-unsaturated Groundwater Flow and Advection-dispersion Model

天野 健治、

竹内 竜史+1、尾上 博則+1、大山 卓也+2、前川 恵輔+3、 細見 達男+4、鶴岡 卓也+4、清水 大志+4

地層処分研究開発部門 地質環境研究統合グループ

+1 地層処分研究開発部門 東濃地科学研究ユニット 結晶質岩地質環境研究グループ
+2 地層処分研究開発部門 幌延深地層研究ユニット 堆積岩地質環環境研究グループ
+3 地層処分研究開発部門 地層処分基盤研究開発ユニット ニアフィールド研究グループ
+4 システム計算科学センター 情報システム管理室

(1) 利用目的:

原子力機構が進める深地層の研究施設計画においては、地下水の流れを正確に再現、予測する ことが最も重要な技術的課題の一つとして挙げられており、数値解析的手法がその中核的な技術 として用いられている。しかしながら、汎用的な計算機や数値解析プログラムを用いた方法では、 実際の水理地質構造に近いスケールでの大規模計算に対応することが難しく、モデルの単純化や スケールの縮小、もしくは数週間~数カ月にも及ぶ長期の計算に頼らざるを得ず、精度と効率の 両立に課題を残してきた。

以上のような経緯から、本研究では、岡山大学と民間企業が開発し、国内でも広く運用実績の ある3次元飽和・不飽和浸透流-移流分散解析プログラム(Dtransu3D・EL)の MPI 並列化に よる高速化を試み、地下水流動解析における解析精度および解析効率の抜本的解決を図ることを 目的として実施した。

(2) 利用内容・結果:

解析プログラム (Dtransu3D・EL) を MPI 並列化によって高速化するために、本年度は、① プログラムの BX900 および富士通 FORTRAN への移植、②コストの高いサブルーチンおよび ファンクションの解析、チューニング、③MPI 並列化へ向けてのデータ分割の調査の 3 項目を 実施した。主な結果を以下に示す。

① プログラムの BX900 および富士通 FORTRAN への移植

原子力機構のプログラム実行環境に対応するため、ソースコードの適用性確認を行い、実行 に必要なプログラムの修正を行った。具体的には、ファイルの解読性を高めるためのファイ ル分割と標準文字エンコード(UTF-8)の適用、配列等の引用時添字の範囲、変数等の引用 時変数の値定義のチェック・修正を実施し、原子力機構のプログラム実行環境で問題無く動 作することを確認した。

② コストの高いサブルーチンおよびファンクションの解析、チューニング

プロファイラによるコスト分析に基づき、全実行時間の 95%を占めている 3 カ所のサブル ーチンを特定するとともに、冗長な計算部とその原因である定数を使った配列の計算部分を 確認した。次に、それらのサブルーチンに対して、コンパイルオプションならびにループ処 理の改善による高速化を順次図り、最終的に実行速度が修正前のプログラムと比較して約 13%まで改善することを確認した(図 1)。

③ MPI 並列化へ向けてのデータ分割

並列化の準備作業として、プログラム内のデータ領域を適切に分割する上で、考慮すべきデ ータの相関関係を調査し、着目した配列に考慮漏れが無いこと、ならびに分割後に作成され る行列のオーダリングが変わることによる収束性能変化の評価を行った。方法としては、(1) 全節点 X 座標でソート、(2)4 節点入れ替え、(3)全節点シフトの3種類のソートが可能なプ ログラムを用いて行い、対照データと比べて3桁以上の精度で一致していることを確認し、 対象となる配列に実用上問題の無いことが分かった。一方で、領域分割を物理的な考慮無し に行った場合、解法する行列のオーダリングに影響し、収束性が劣化するという課題も明ら かとなった。

(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:

今回の試みは、MPI 並列化に向けた第一段階の成果であり、今後、プログラムの MPI 並列化 に向けた改良を本格化するために、原子力機構の大型計算機を用いた作業を継続していく予定で ある。また、国内外で開発されている他の並列化地下水・物質移行解析プログラムの調査を行う とともに、深地層の研究施設(瑞浪・幌延)における地下水流動解析をはじめとする他の地層処 分研究開発分野への適用を視野に入れた検討を関連部署と連携して行っていく予定である。



図1 特定サブルーチンの高速化処理結果(約20万の要素数を有する3次元の水理地質構造モデ ルを用いた地下水浸透流解析の解析事例) コンパイルオプション((1)~(3))、ループ処理の 改善((4)~(5)) を順次適用することにより、実行速度が約13%改善した。

5.10 原子力科学研究所

Nuclear Science Research Institute

5.10.1 粒子線照射用汎用線量評価システムの改良

Improvement of JAEA Computational Dosimetry System for Particle-beam Radiation Therapy

中村 剛実 研究炉利用課

(1) 利用目的:

茨城県では、「次世代がん治療(BNCT)の開発・実用化」がつくば国際戦略総合特区の先導的プロジェクトとして位置づけられている。このため、筑波大学、北海道大学、高エネルギー加速器研究機構、原子力機構及び茨城県は、密接な連携・協力と役割分担のもとに、一般の病院に設置可能な小型加速器中性子源装置等を世界に先駆けて開発し、先進医療としての実用化を図り、BNCTの国際標準モデルの構築を行うために協力合意書を平成24年7月に締結した。日本原子力研究開発機構が協力を行う分野は、①モデレータ、コリメータ、遮蔽(MCS)システムの設計、製作及び設置に関すること、②測定装置の設計、製作及び試験に関することである。これらの開発では、照射場の設計にも重視される患者の全身被ばく線量の計算シミュレーションや生体内ホウ素濃度分布に関連した計算シミュレーション等を行う必要がある。このため、BNCTに不可欠な治療計画作成を支援するアプリケーションである粒子線照射用汎用線量評価システム(JCDS-PRT)では、多量の医療画像スライスデータ(CT,MRI)を使用しなければならず、より強力な計算機環境への移行が不可欠であった。これらのことから、機構のスパコン BX900 上で運用可能とするためにプログラムコードを改変し、BX900 対応版 JCDS-PRT の製作を行った。

(2) 利用内容·結果:

プログラムコードの改良は、平成 24 年度に作成した JCDS-PRT に基づき、①既存プログラ ムコードの書き換え、②2D 画像表示 UI の改良、③PHITS 入出力インターフェイスの組み入れ について実施した。

① 既存プログラムコードの書き換え:

JCDS-PRT は、前身である JCDS の開発を開始した 2002 年より数社のソフトウェア開発会 社に渡る多くの技術者の手によって開発が進められてきた。プログラムのソースコードに見られ た問題点として、開発のためのプログラミング言語として採用されている C 言語の言語仕様を 著しく逸脱しているものがあり、これは JCDS-PRT の実行時に見られる変数境界の破壊による 異常動作の根本原因の一つとなっていることは明らかであった。その他、他のプログラミング言 語によって開発したソースコードを部分的に挿入しているものや、モジュールの機能と関係ない 目的不明なコードやデバッグライト等が大量に組み込まれたものが散見された。加えて初期の頃 に作成されたプログラムのソースコードには、米国 AVS 社によって改変された現 AVS/Express の仕様に対応していないものもあった。このため、問題があると判断し得るプログラムのソース コードに対しては、処理の目的を維持させながら問題を修正したソースコードとして新たに書き 直した。これにより、ファイルの入出力時および AVS/Express の基盤システムとの間のデータ 入出力時に発生していた変数境界の破壊によるアプリケーションの異常動作が解消された。

② 2D 画像表示 UI の改良

AVS/Express には、マニュアルなどに記載されない仕様が数多く存在している。2D 画像表示 モジュールにおける縦横のピクセル値の制限もその一つである。AVS/Express は、表示する 2D 画像には縦横 4096 ピクセルという上限を設定している。このため、2D 画像を表示する際には、 AVS/Express を使用してアプリケーションを開発する側からピクセル数の上限値を超えないよ うに画像のサイズを調整しなければならない。JCDS・PRT では、読み込んだ CT、MRI 画像を タイル上に1枚の画像として並べて表示するユーザインターフェイスを使用している。実装され ている仕様では、横方向に最大 6 枚となっており、画像表示時の画像の縮小率から横方向にはピ クセルの制限を越えないようになっている。しかしながら、縦方向には読み込む CT、MRI など の画像の枚数によって無制限に増えるため、取り回せる画像の枚数に自ずと限界がある。既存の JCDS-PRT の仕様では、縦方向に11 枚の画像を配置した辺りから動作が不明となり表示の保証 が無いことが確認できる。これにより、JCDS・PRT は、画像にしておよそ 130 枚程度しか取り 扱うことができず、300 枚以上の枚数を要する全身にプログラムを対応させることができない。 そこで、読み込んだ画像を一回に表示できる枚数毎に区切り、タイル上に並べたものを切り替え て表示するように新たな機構を作成して組み込むことで、AVS/Express が仕様としている 2D 画 像表示時のメモリ使用量の制限を回避することに成功した。

③ PHITS 入出力インターフェイスの組み入れ

JCDS-PRT の PHITS に対する入出力処理は、その開発経緯から外部プログラムを使用して MCNP の入出力ファイルを相互に変換して行うように作成されている。この機構は、実行環境 が Microsoft-Windows 上であったこれまでは、なんら問題なく機能していた。しかしながら BX900 上でのバッチジョブによる実行では、JCDS-PRT 本体のプロセスと入出力ファイルを変 換する外部プログラムのプロセスとで同期が取れずに機能しなかった。このため、本体プログラ ムのプロセスと呼び出した外部プログラムのプロセスの同期を図らずに済むように、外部プログ ラムの処理を JCDS-PRT 本体に組み込むことでこの問題を解消した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

特になし。

(4) 今後の利用予定:

加速器 BNCT の協力合意書に基づき、改良した JCDS-PRT を用いて、加速器 BNCT 照射場 での全身被ばく線量の計算シミュレーションを実施する予定である。
5.11 核燃料サイクル工学研究所

Nuclear Fuel Cycle Engineering Laboratories

5.11.1 高放射性廃液貯槽における熱流動解析

Thermal Fluid Analysis of High Radioactive Waste Tank

三浦 隆智

再処理技術開発センター 処理部 化学処理第1課

(1)利用目的:

高放射性廃液(HAW)は、核分裂生成物の崩壊熱により温度が上昇することから、貯槽内冷 却水を供給し一定温度(60℃)以下に管理している。また、福島第一原発事故以降に実施した緊 急安全対策、ストレステストでは、全交流電源が喪失した場合に HAW 貯槽、プルトニウム貯槽 等が何時間で沸騰に至るかを断熱モデルで評価し、沸騰に至る前までに十分な時間余裕を持って 冷却水及び電源の確保ができることを確認している。

一方、断熱モデルでは、実際の各貯槽の温度上昇過程よりも保守的な評価となっており、実際のHAWの温度上昇過程を詳細に評価するには至っていない。そのため、HAWの温度上昇過程を詳細に評価できれば、より現実に則した安全対策を実施できることが期待されている。

本研究では、東海再処理施設に貯蔵管理されている高放射性廃液貯槽の中で最も発熱量の大きい高放射性廃液貯蔵場の HAW 貯槽を代表とし、熱流体解析コードを用いた解析にて、HAW の物性を詳細に評価することを目的としている。

(2) 利用内容·結果:

解析対象はストレステスト報告書において、 最短時間(48.5 時間)で沸騰すると評価された 高放射性廃液貯蔵場の HAW 貯槽とし、汎用熱 流体解析コード FLUENT を用いて、HAW 貯 槽内の HAW の温度上昇による自然対流を模擬 した評価を実施した。

解析モデルでは、セル換気及び水素掃気によ る HAW 貯槽への空冷を考慮し、HAW 貯槽及 び HAW 貯槽を収納したセルを範囲とした (Fig.1)。また、HAW の冷却には、貯槽内部 のコイル状の配管に冷却水を供給して冷却する 冷却コイル部分と、貯槽底部に冷却水を供給し



Fig.1 モデル鳥瞰図 (セル)

て冷却する貯槽底部ジャケット部分が存在 することから、冷却コイル部分は実際のコイ ルと同等の空隙率を有した中空円筒管とし て模擬をし、貯槽底部ジャケット部分では、 底部鏡板にジャケット分の熱抵抗・熱容量を 持たせることでモデル化した(Fig. 2)。

解析条件は、巡視点検記録の数値を基に HAW 冷却運転時(通常運転時)を模擬して 設定を行った。

解析による温度分布結果を Fig.3 に示す。 計測器による温度の実測値が 31.6℃なのに 対し、同地点における温度の解析値は 32.0℃ とほぼ同等の値を示し、解析モデルが妥当で あることを確認した。また、温度分布として は、貯槽中にあるパルセータ内部の温度が他 の場所に比べ高温となった。これはパルセー タ内部に冷却コイルがなく、周囲をステンレ ス鋼で覆われているため、外部に放熱できず に HAW の温度上昇に寄与していることが原 因と考えられる。実際の運転では、定期的に 撹拌用空気が供給され、パルセータ内の HAW はパルセータ外への送られるため、沸



Fig.2 モデル鳥瞰図(HAW 貯槽)



Fig.3 通常運転時の HAW の温度分布

騰の心配はないが、全交流電源が喪失し、HAW 冷却機能が全て停止した場合は、パルセータ内部がより高温になることが予想される結果となった。

(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:

HAW 貯槽における解析モデルの妥当性が確認できたことから、HAW の冷却機能が全て停止 した場合の温度上昇過程について解析を実施する。また、HAW 冷却水流量が減少した場合の HAW の温度上昇過程について評価し、断熱モデルと比較しながら、HAW の詳細な温度上昇メ カニズムの解明を行っていく。

5.11.2 核データライブラリの変換

Conversion of Nuclear Data Library

菊池 圭一、浅川 健一*1 プルトニウム燃料技術開発センター 技術部 核物質管理課 *1 エイ・ティ・エス株式会社

(1)利用目的:

平成25年3月に富士通汎用計算機GS21200Aが廃止されることに伴い、当該汎用計算機で 輸送容器の許認可用として使用していた原子力コード用核データライブラリを富士通大型計算 機BX900で使用できるように変換作業を行った。

(2) 利用内容·結果:

本核データライブラリの変換作業は、富士通汎用計算機 GS21 200A と富士通大型計算機 BX900 との間で、変換対象ファイルの互換性がないために情報システム管理室に依頼して実施 した。

変換対象ファイルは、遮蔽解析用核データライブラリが2ファイル、及び臨界解析用ライブラ リが3ファイルである。

変換作業は、富士通汎用計算機 GS21 200A 上で書式なし形式から書式付き形式のファイルに 変換して富士通大型計算機 BX900 に転送し、書式付き形式から書式なし形式のファイルに変換 した。各核データライブラリファイルの変換には、ライブラリ毎に書式なし形式から書式付き形 式及び書式付き形式から書式なし形式への専用の変換プログラムを作成し、変換作業を行った。 なお、遮蔽解析用核データライブラリに関しては、解析コードによってデータの並びが核種別形 式とエネルギー群別形式とで異なるため、書式変換後、核データライブラリを変換する原子カコ ード GIP を用いてデータ変換を行った。

以上により、新しい計算機環境である富士通大型計算機 BX900 への核データライブラリの変 換作業が完了した。

今回の作業により、富士通汎用計算機 GS21 200A で輸送容器の設計変更等に係る安全解析用 として使用していた核データライブラリが、富士通大型計算機 BX900 においても、これまでと 同様に使用できるように整備できた。

(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:

今後実施する輸送容器の設計変更等に係る安全解析で使用する。

5.12 J-PARCセンター J-PARC Center

5.12.1 J-PARC/MLF パルス中性子イメージング装置の遮蔽性能評価

Evaluation of Radiation Shielding of Pulsed Neutron Imaging System at J-PARC MLF

篠原 武尚 物質生命科学ディビジョン 中性子利用セクション

(1) 利用目的:

日本原子力研究開発機構(原子力機構)と高エネルギー加速器研究機構(KEK)は共同で、 大強度陽子加速器施設(J-PARC)を運営している。J-PARCでは、その施設の一部である物質・ 生命科学実験施設(MLF)において、核破砕パルス中性子源の建設を平成19年に完了し、平成20 年度からビーム運転を開始している。原子力機構では、平成24年度から平成26年度の3年間 をかけて、材料・構造物等の透過画像観察を行うパルス中性子イメージング装置の建設を進める ことが決定し、そのための実験装置周りの遮蔽体の評価を計算により行ってきた。計算の主なも のは実験者を放射線被曝から防護する実験装置周囲の遮蔽体(以後、中性子実験装置遮蔽または 単に遮蔽体という)の効果に関する線量評価であり、モンテカルロ粒子輸送計算コード PHITS によって行われる。数meV~3GeVまでの広いエネルギー範囲の中性子・ガンマ線の統計精度の 高い評価が必要であるので、大型計算機による長時間かつ大規模な計算が必要になる。

(2) 利用内容·結果:

遮蔽記算は、並列計算機 BX900 システムによって実施した。計算コードは PHITS、核データ は JENDL3.2 を用いた。また、J-PARC 中性子源のモデレーターから放出される中性子、光子 の強度、スペクトルはモデレーター表面での計算値が J-PARC の中性子源グループから公開され ており、本検討ではそれを遮蔽計算の線源として用いた。(出力は 1MW として計算を実施。)図 1 に原子力機構が建設を進めている実験装置(BL22 パルス中性子イメージング装置)の遮蔽 計算に用いたモデル体系(平面図)を示す。これは、最終図面に基づいた構造モデルであり、主 としてコンクリート、鉄、ポリエチレン、B 含有中性子吸収材をそれぞれ図面寸法に則した位置、 厚さで配置している。左側の円の中心がパルス中性子源である。中性子源で発生した中性子は線 源から 18m および 23m 位置に設置した試料によってその一部が散乱・吸収され、それ以外は試 料を透過して最終的に 28m 位置付近に設置されたビームストップで止められる。試料としては 実際の実験に使用される観察対象と同程度の中性子散乱性能を考慮し、線源から 23m の位置に は一辺が 30cm、厚さ 2.5cm、18m の位置には 10cm 角、厚さ 10cm の鉄を配置した。図 2 およ び図3にそれぞれの試料位置条件(18m および23m)での遮蔽評価計算の結果を示す。中性子 とフォトン(ガンマ線)の線量の分布が示されている。これらの計算結果より、中性子ビームは ビームストップで十分止められているとともに、鉄試料により散乱して遮蔽体内に充満している 中性子および中性子の吸収により発生したガンマ線も遮蔽体の側壁において十分に止めること ができており、遮蔽体周囲には青のレベル(基準値である 6.25 µ Sv/h 以下の線量)しか観測さ れないことがわかる。

また、12m よりも上流側の部分には高線量の領域が見られるが、ここは隣接するビームラインと接していて人が立ち入ることができない区域であり、放射線安全上の問題はない。これらの計算結果から、この遮蔽体構造は1 MW の J-PARC の最高到達強度でも十分な遮蔽性能を有することが確認された。



図1 計算モデル体系



図2 線源から18m 位置に試料を配置した際の遮蔽計算結果



図3 線源から23m 位置に試料を配置した際の遮蔽計算結果

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) T. Shinohara 他, Construction of the pulsed neutron imaging instrument in J-PARC for the energy resolved neutron imaging experiments, NOP&D2013, Munchen, Germany, 2013.
- 2) T. Shinohara 他, Construction of a Pulsed Neutron Imaging Instrument at J-PARC MLF, The 13th Japan-Korea Meeting on Neutron Science, Buyeo, Korea, 2014.

(4) 今後の利用予定:

パルス中性子イメージング装置の遮蔽性能の評価は平成 25 年度の計算機利用によって終了したため、今後の利用予定については未定である。

5.12.2 DCHAIN-SP 2001 計算結果に基づく線量率分布の改良

Addition of Calculation Function of Dose Rate Distribution to DCHAIN-SP 2001

甲斐 哲也、原田 正英、高田 弘

物質・生命科学ディビジョン 中性子源セクション

(1) 利用目的:

J-PARC センターの物質・生命科学実験施設では、3 GeV 陽子ビームを水銀ターゲットに入射 し、核破砕反応によって中性子を生成し、これを減速した後に中性子利用実験に提供している。 この中性子源の運転・保守、高度化において、核破砕反応等によって生成する放射能を精度よく 予測するため、高エネルギー粒子誘導放射能計算コード DCHAIN-SP を使用している。しかし ながら、断面積ライブラリの群構造の粗さに起因する計算精度不足が生じる場合がある、結果の 確認に時間を要するといった問題点があった。そこで、計算精度の向上、及び結果の一部を可視 化する機能を追加する等の改良を行った。

(2)利用内容·結果:

1) 高精度中性子反応断面積ライブラリへの対応

DCHAIN-SP で使用する従来の中性子反応断面積ライブラリは 175 群構造であり、0.32eV 以下を1 群で扱っていることや群の粗さのために共鳴反応の精度が必ずしも十分でないことから、低エネルギー中性子が関与する(n,y)反応の計算精度が不十分な場合が想定される。また、このような反応に対しては、個別に他のコードで実効断面積を計算して中性子束と掛け合わせて誘導放射能を評価する必要があった。このような課題を解決するために詳細な 1968 群の中性子反応断面積ライブラリを DCHAIN-SP で使用できるよう改造を施した。その結果、DCHAIN-SP 単独で、実効断面積を使った計算と同等の結果を得ることが可能となった。

2) 入力形式の変更

DCHAIN-SP の入力は、指定された順番でパラメータのみを記述する方式であったため、数値 が羅列された入力ファイルとなり、可読性が低いものであった。そこで、入力ファイルの作成・ 確認時の効率向上を目的として、入力ファイルを「パラメータ名称=パラメータ値」という形式 に変更した。

3) 点線源を仮定したγ線の線量率計算機能の追加

DCHAIN-SP は、時間及び領域毎に放射能、崩壊熱、γ線スペクトルを計算し、出力する機能 を有している。誘導放射能からの放射線防護を考える場合、放射能の値ではなく、γ線の線量率 を元に検討を行う。DCHAIN-SP の計算結果を利用する場合、核種毎の放射能に線量換算係数を かけて線量率に変換するか、γ線スペクトルを元に他の計算コードを使用して計算する必要があ った。そこで、DCHAIN-SPのライブラリに含まれる全核種についてγ線スペクトルから核種毎 の線量換算係数を計算し、新たに3144 核種(換算係数がゼロとなるγ線を放出しない核種を含む) のデータを格納したライブラリを作成し、これを利用できるよう DCHAIN-SP を改良した。この 結果、それぞれの核種によるγ線の線量率(放射能×線量当量率定数の値)、及び時間毎、領域毎 の線量率の積算値を出力することが出来るようになった。単位は[µSv/h・m²]であり、線源から 1m 離れた場所における線量率となる。距離[m]の2乗で割ることにより、任意の位置での線量率 を得ることが出来る。誘導放射能の危険度を簡便に判断することが可能となったため、遮蔽の必 要性の検討等に要する作業時間が短縮された。

4) PHITS 形式での y線源定義の出力

項目 3)の改良は、誘導放射能が点線源と仮定でき、遮蔽が無い場合に限定されるため、線源の 空間分布の考慮が必要な場合や、遮蔽を設けた場合の線量評価には、γ線スペクトルを元に、モ ンテカルロコード等によりγ線の輸送計算を行う必要がある。現行版の DCHAIN-SP 2001 が作 成された当時、高エネルギー領域の入力データは NMTC/JAM コード(現在、原子力機構が開発を 進めている PHITS コードの前身)により作成し、低エネルギー領域は MCNP コードを用いて作 成していた。上記のようなγ線の輸送計算には MCNP が主として使われていたため、MCNP コ ードの入力として使用できる形式でγ線スペクトルを出力する機能を DCHAIN-SP に設けた。し かしながら近年、PHITS の利用・機能が拡大し、MCNP を用いることなく DCHAIN-SP の入力 を作成することが可能となったため、γ線輸送計算を PHITS で行うための機能を強化して欲し いという利用者の要望が増加しつつある。そこで PHITS の入力として利用可能な形式でγ線ス ペクトルを出力する機能を DCHAIN-SP に追加した。これにより、MCNP を利用することなく 高エネルギー粒子の誘導放射能に伴う遮蔽計算を行うことが容易となり、利用者の利便性を向上 させることが出来た。

5) 計算結果出力の可視化補助機能の追加

DCHAIN-SP の出力結果は数値のみで出力されるため、放射能や崩壊熱等の時間変化の傾向や 分布を視覚的に認識する際は、数値を抜き出してグラフ化する必要があった。これを補助するた めの表形式出力機能があるものの、設計の最適化に必要なパラメータサーベイを行う際など、多 くの計算を行う際に利用者の負荷を高めるものであった。そこで、下の6種類の計算結果につい て、PHITS で用いられている可視化機能(ANGEL)で時間変化のグラフを作成することを前提と したファイルを出力する機能を使いした。

- α線放出核種の崩壊熱
- β線放出核種の崩壊熱
- γ 線放出核種の崩壊熱
- ・ 線量率(放射能×線量当量率定数の値)
- · 全放射能
- ・ 全崩壊熱



図1 領域別の線量率の時間変化を可視化した例

図1に線量率の時間変化を示した。対象とする項目や領域は、入力ファイルで指定することが 出来る。この可視化機能の追加により、視覚的な結果の確認が容易になり、利便性の向上を図る ことが出来た。

(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:

平成 25 年度には、DCHAIN-SP 2001 について、計算精度の向上、及び結果の一部を可視化 する機能等による利用時の利便性を向上させるための改良や機能の追加を行った。今後、新規機 能について検証を行い、現在公開している DCHAIN-SP の改訂版として公開する予定としてい る。

5.13 大洗研究開発センター

Oarai Research and Development Center

5.13.1 FLUENT:福島原発汚染水処理関連の解析

FLUENT: Analysis Relevant to Contaminated Water Treatment System of Fukushima Daiichi NPS

寺田 敦彦 大洗研福島技術開発特別チーム 廃ゼオライト保管挙動評価グループ

(1) 利用目的:

福島第一原子力発電所における高濃度汚染滞留水の浄化処理用セシウム吸着装置については、 装置本体部であるセシウム吸着塔を使用後に長期保管する際に、塔内の残留水及びセシウム吸着 材であるゼオライト中の水分が放射線により分解して水素を発生する。このため、長期保管に当 たっては、塔内での水素濃度の上昇による燃焼・爆発の可能性の可否の評価が喫緊の課題となっ ている。この課題に対応するため、発生する水素が塔内でどのように分布するか等について、現 行の水素対策及び最新のゼオライトの性状調査の知見を反映しつつ、数値解析を通して評価し た。解析においては、3次元の詳細解析が必要なため大型計算機システムを用いた。

(2)利用内容•結果:

1) 利用内容-解析モデル及び使用コード

福島原発事故の滞留水処理において使用済みのセシウム吸着塔は、塩分腐食を防ぐために、内部を淡水で洗浄した後に保管場所に移設される。洗浄後には、吸着塔底部に水出口管を通して抜けきらない水分が残留し、水出口管を閉塞する懸念がある(図 1)。そこで、実機吸着塔の内部構造を CAD で 3 次元図面化(図 1)し、それを基に水出口管を閉塞した解析格子モデルを作成した。解析精度を確保するために解析格子数は最高 800 万である。また、解析の入力条件となるゼオライト層における水素発生率、及び発熱密度は基礎工学研究センターで算出したデータを、ゼオライト層の有効熱伝導率については北海道大学にて取得したデータを用い、システム計算科学センターの FLUENT Ver.12 で吸着塔内での水素の拡散挙動、温度分布等について 3 次元解析を行った。

2) 解析結果

解析結果から、セシウム吸着材での発熱や放射線水分解による水素発生により、塔内で浮力や 混合ガスの密度変化が生じている。これらが吸着塔付属の水入口開放配管から空気を吸着塔内に 流入させる駆動力となり水素濃度の低減を促進すること、さらに、現行の水素対策としてとられ ているベント管プラグの開口部から水素混合ガスが流出することにより、水素濃度は爆発下限界 (4vol%)以下(図 2)に維持されることが分かった。また、充填されているセシウム吸着材の 温度は水素の自己着火温度(560℃)よりもはるかに低い温度上昇(図 3)にとどまることが分 かった。

なお、本成果はシステム計算科学センターの多大な支援により得られた。紙面を借りて感謝する。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Yoshiyuki Koma, et al., "Research and development on Waste Management for the Fukushima Daiichi NPS by JAEA", International Nuclear Fuel Cycle Conference (GLOBAL) 2013, Sep.29-Oct.3, Salt Lake City.
- 2) 寺田敦彦他、"廃ゼオライトの長期保管方策の検討(4)水素拡散解析評価"、日本原子力学会 2014 春の年会.

(4) 今後の利用予定:

平成 26 年度は、空気置換現象のメカニズムを検証するとともに、最新の崩壊熱分布等を考慮 した吸着塔内の温度・水素濃度評価を行う予定である。

これらの解析評価には大型計算機システムの利用が不可欠であり、平成 26 年度においても利 用を継続したい。





ベント管、水入口管は大気開放

図1 KURION 吸着塔の概観





5.14 敦賀本部 Tsuruga Head Office

5.14.1 強磁性蒸気発生器伝熱管の渦電流探傷検査のための3次元有限要素シミュレー ション

Simulations of the In-service Inspection of Monju and JSFR SG Tubes using Eddy Currents

Mihalache Ovidiu 保全技術開発グループ

(1) 利用目的:

The simulations aim to validate experimental ECT data taken in mock-up of SG tubes similar to Monju FBR tubes, to confirm detectability of defects in helical SG tubes under support plates and improve the ISI of Monju SGs.

(2)利用内容·結果:

In the In-Service Inspection (ISI) of Monju SG tubes, eddy current testing (ECT) is employed in order to check the tubes soundness and their integrity. Due to the complicated geometry of the helical tubes and support plates (SP), full 3D numerical electromagnetic simulations were used to validate multi-frequency ECT algorithms that could reveal defects near SP on the outer tube surface.

The electromagnetic code 3D-RFECT, which was developed by authors in-house in JAEA, uses FEM to compute ECT signal at various frequencies from Monju ECT sensors. The 3D parallel simulations based on a hybrid OpenMP-MPI approach were conducted with up to 1024 CPUs divided in 128 nodes with 8 cores/node using BX900. Validation of simulations with experimental measurements were conducted for a SP model with three helical SG tubes, with a 250 mm tube curvature, (as in Figure 1a) and three defects: full circumferential outer defect (OD) 20%tw (tube wall thickness depth), 10 mm wide and partial OD 30%tw, 10 mm wide with a 90° degree spanned in circumferential direction. The 3D FEM model to simulate one point in the ECT signal (as the ECT sensor moves inside tube) had 5,100,000 tetrahedrons and 7,000,000 nodes resulting in a 41.9 million DOF and 1.25 billion non-zero values in FEM matrix for one point simulation. The disturbance of SP signal (calculated using 91 points simulations) due to presence of defects is simulated in Figure 1b-c in several configurations: location of OD20% change from lower to middle and upper tube (see Figure 1b) or the defect signal is computed when there is a SP model; with one or three tubes (defect located all the time on middle tube). The 3D simulation is then able to calculate variation in SP and defect signal when defect is located on various tubes (low, up or middle) or electromagnetic interference because of close proximity of other tubes in the large SP model.



Figure 1. a) FEM model for SP with helical SG; b-c) FEM simulation of defect signal



Figure 2. Multifrequency (MF) and window-multifrequency (WMF) for straight SG tubes: a) relative positions of defects to SP; b) principle of WMF; c) Application of MF and WMF to experimental data



Figure 3. Window-multifrequency using 3D FEM numerical simulations of helical SG tubes.



Figure 4. Dynamic window-multifrequency for defects under SP using experimental measurements

While in previous years multi-frequency (MF) technique was applied to ECT data, this time the authors developed and tested an enhanced method: "Windows multi-frequency technique" (WMF), which improve signal/noise (S/N) ratio for partial outer tube defects. In WMF (see Figure 2), a standard MF is applied to a mix of ECT signal at two frequencies in a selected band of signals that scans the original longer signal. The width of band is related to the width of the defect going to be investigated. A point in the WMF representation represents the S/N ratio of MF in the chosen window-band. Applications of WMF to the 3D simulated signals are shown in Figure 3 for OD20% and partial OD30%, resulting S/N ratio larger than 2, indicating presence of defects under SP. Validation of WMF algorithms with experimental measurements in mock-up SG tubes are shown in Figure 4, where an enhanced dynamical variant of WMF was employed for further increase the S/N ratio. While in WMF the optimum parameters of MF remain constant when changing the band position along ECT signal, in dynamic WMF these parameters change from point to point and provide the highest S/N in each band.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

Based on simulations articles were published and communicated at international conferences: The articles are now in review process to be published in journals.

- 1) Ovidiu MIHALACHE, Toshihiko YAMAGUCHI and Masashi UEDA, "Validations of Multifrequency ECT Algorithms for Helical SG Tubes of FBR", Electromagnetic Nondestructive Evaluation (XVII), Studies in Applied Electromagnetics and Mechanics, IOS Press ,Vol. **39**, July, pp. 109-119, (2014).
- 2) Toshihiko YAMAGUCHI, Ovidiu MIHALACHE, Masashi UEDA, "Experimental Measurements and Simulations of ECT Signal for Ferromagnetic SG Tubes Covered by a Sodium Layer", Electromagnetic Nondestructive Evaluation (XVII), Studies in Applied Electromagnetics and Mechanics, IOS Press, Vol. **39**, July, pp. 144-154, (2014).
- 3) Daniel Garcia-Rodriguez, Ovidiu Mihalache, Masashi Ueda, "EMAT Simulations based on a Two-Dimensional FEM Coupled Electro-Mechanical Formulation", International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics, Vol. **45**, pp. 543-549, (2014).

(4) 今後の利用予定:

Future work will continue validation of WMF and dynamic WMF with numerical simulated ECT by taking into account other source noises as: ECT probe vibrations or periodical variations in tube inner radius, sodium noise, others. Optimum WMF algorithms will be evaluated for either large defects or small defects near tube SP.

5.14.2 もんじゅ熱流動機器の自然循環冷却挙動の解析

Thermal-hydraulics Analyses of Instruments of Monju

大野 純

プラント特性評価グループ

(1)利用目的:

「もんじゅ」の安全評価や予測解析では、動特性解析コード Super-COPD が用いられている が、Super-COPD は 1 次元のフローネットワークモデルを採用しており、検証や妥当性確認が 欠かせない。しかし、新規制基準において「もんじゅ」の安全評価上の重要な設備である炉外燃 料貯蔵槽(EVST)には温度測定点が 3 点あるのみであり、流動を詳細に把握することは困難であ る。

以上より、この解析評価の目的は試験デ ータにより直接または間接的に評価する ことが困難な「もんじゅ」EVST内の流況 や温度分布を定量的に評価することであ る。また、この結果は、1次元プラント動 特性解析コード Super-COPD によるシビ アアクシデント時の解析に反映する。

(2)利用内容·結果:

a) 解析条件

EVST の概要を図1に示す。本研究で は、EVST 内の構造体をほぼすべて模擬 したフルセクタの解析モデル(約2400万 要素)を用いた。解析に関する諸条件を表 1に示す。発熱側の境界条件は燃料移送ポ ットの表面熱流束として設定した。熱流 束は、全ポットで空間的に均一、かつ時 間的に一定とし、発熱総量は定格最大の 660kWとした。冷却側の境界条件は2次 系入口の流量と温度とし、定格運転から 全交流電源喪失に至る事象を想定した過 渡条件(表 2)を設定した。この条件はB、 Cループの2系統定格運転から全交流電 源喪失に至り、その1800秒後に各ループ の空気冷却器ベーン開度を調整開度から 全開にするというシーケンスをたどる。



図1 炉外燃料貯蔵装置のシステム

表1 解析の諸条件

コード	STAR-CCM+ ver.8.04		
離散化精度	2次精度		
モデルの要素数	2,400万		
1次冷却材	ナトリウム		
2次冷却材	ナトリウム		
冷却管	SUS304		

表2 2次系入口の境界条件

時間			時間	流	量
sec	K		sec	kg/s	%
0	475		0	12.5	100
300	475		3	5	40
600	443		6	2.5	20
900	453		15	1.25	10
2700	453		30	0.9375	7.5
3000	433		60	0.625	5
3600	433		600	1.25	10
		-	3600	1.25	10

b)解析結果

図 2 に示す循環流量と総除熱量の過渡 変化より、全交流電源喪失時の EVST の 循環流量は定格運転時の約 42 kg/s から 除熱量の減少に従って低下し、1200 秒時 に最低流量約 19 kg/s を示し、その後の除 熱量の回復とともに緩やかに回復する。 また図 3 および図 4 に示す垂直断面の温 度・速度分布より、特に回転ラック内は どの時間帯においても 1 次元的な分布で あることを確認した。これより、当該領 域への 1 次元フローネットワークモデル の適用は十分妥当であると判断される。







図3 温度分布の過渡変化



(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) J. Ohno, et al., "Multidimensional Thermal-hydraulic Analysis on Natural Circulation Behavior in Ex-Vessel Fuel Storage Tank of MONJU," Proc. of International Mechanical Engineering Congress & Exposition (IMECE), November 17-21, 2013, San Diego, California, USA.
- 2) 大野 他,「シビアアクシデント時のもんじゅ炉外燃料貯蔵槽に関する熱流動解析」,日本機 械学会 動力・エネルギーシンポジウム, June 26-27, 2014, Fukui, Japan.

(4) 今後の利用予定:

平成26年度は課題利用申請を行わない予定である。

5.14.3 SPLICE コードによるレーザー溶断挙動の数値解析

Numerical Simulation of Laser Cutting Phenomena with the SPLICE Code

村松 壽晴、吉氏 崇浩^{*1} レーザー共同研究所 レーザー応用技術開発室、*1 ㈱ NESI

(1)利用目的:

東日本大震災による東京電力・福島第一原子 力発電所事故では、様々な状況証拠から炉心溶 融が発生したと推定されており、今後の事故処 理作業では燃料と炉内構造物とが溶融混合凝固 したデブリベッドを取出し対象とする必要があ る。過去に炉心溶融を起こした米国・スリーマ イル島第二原子力発電所(TMI-2)(図 1)の復旧 作業では、信頼性の高い解体工法として、人工 ダイヤモンドカッターによるボーリングマシン が利用されたものの、デブリベッドの一部は急 冷凝固によりセラミックス化しており、数多く のカッター破損が発生したと報告されている。



図1 TMI-2 における炉心溶融の様子

そのためこれに代わる方法として、レーザー共同研究所では、ファイバーレーザー照射による 福島第一原子力発電所のデブリ等プラント解体技術の確立を目指した研究・開発を進めている。 レーザー溶断過程は、非常に多くの物理機構が内在する複合物理現象であり、その複雑さや計測 の難しさから、数値シミュレーションを用いた現象解釈が必要不可欠である。これまでレーザー 溶断の過程について、SPLICE コード 2) による 2 次元解析をワークステーションにより進めて きており、その解析結果は実験から得られた挙動と概ね一致することを確認している。^{1),3)}



図2に解析結果と実験結果の一例を示す。解析は、厚さ30mmのSS400炭素鋼材を4kWの レーザー光で溶断するものであり、解析上のパラメータは、レーザー加工ヘッドのスウィープ速 度(60 - 150mm/min)とした。図2(a)にスウィープ速度を90mm/minとした場合の瞬時熱流動 場を示す。図中のベクトル(緑色)はアシストガスの流速と流れの方向を表し、カラーコンターは 温度分布(赤1600℃~紫20℃)を表している。図2(b)に、同じスウィープ速度での溶断試験後 の試験片溶断面を示す。解析結果は、試験片下部に溶断残りが発生している実験結果の傾向を、 概ね再現できているのが分かる。

(2)利用内容·結果:

これまで2次元解析を進めてきたが溶断現象は3次元挙動であることから、3次元解析による 現象解釈が必要である。そのため、大型計算機で SPLICE コードを利用した場合の適応性を見 るため、①計算機の違いによる影響確認、②ノード数の違いによる動作確認を行った。

① 2次元解析を用いた計算機の違いによる影響確認

大型計算機においてワークステーションと同じ条件で、SPLICE コードによる2次元解析を実施した。解析は一定の条件でアシストガスを流し、流れ場が定常となった時点で流速の違いを比較した。図3に、ワークステーションによる流れ場が定常となった時点の瞬時熱流動場と、流速を比較した測定位置((a)x=10mm 縦方向、(b)z=40mm 横方向)を示す。図4に大型計算機とワークステーションの流速を比較した結果を示す。結果から、主流部にていては概ね同じであることが確認できる。



② 3次元解析を用いたノード数の違いによる動作確認

大型計算機における3次元解析について、図5に数値解析モデルを解析条件とともに示す。解 析は2次元解析モデルに奥行き方向(10mm)を追加した3次元解析モデルであり、レーザー照射 (4kW)と照射位置の移動(90 mm/min)を開始させてから0.1msec(2200step)のシミュレーション を、ノード数をパラメータとして実施した。表1に、ノード数毎の計算に要した時間を示す。



表1から、ノード数32で計算した場合、ノード数1と比べて約29倍の速さで計算可能であることが確認できた。具体例として、図5で示した3次元解析モデルにおいてレーザー移動速度60mm/min、溶断長さ15mmを条件に解析(15sec{約3.42×108step})を実施した場合、ワークステーション(ノード数1の場合に相当)では約1年を要するが、大型計算機(ノード数32の場合)では約2週間で計算が可能であり、大幅な計算時間の短縮が図れる見通しを得た。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

村松壽晴、山田知典、グェン・フィ・ロン、吉氏崇浩、近藤敦哉、古谷章「レーザー光を用いた福島燃料デブリ取出し技術に関する研究開発 (10)レーザー加工プロセスシミュレーションコード SPLICE による溶断時過渡温度特性」日本原子力学会 2014 年春の大会 I60 (2014 年 3 月).

論文

- 2) T. Muramatsu, Thermohydraulic aspects in laser welding and cutting processes, Proc. The 31th International Congress on Applications of Lasers & Electro-Optics (ICALEO-31), No. 1904, pp. 661-669 (2012).
- 3) 村松壽晴、山田知典、羽成敏秀、武部俊彦、松永幸大「レーザー光を用いた燃料デブリ・炉 内構造物取り出しに向けた研究(I)」JAEA-Research 2013-024 (2013), 49p.

プレス発表

- 4) 「福島燃料デブリを想定した不規則形状/セラミックス混合試験体のレーザー溶断・破砕試験」(2013 年 11 月 13 日).
- 5) 「福島燃料デブリを想定した不規則形状/セラミックス混合試験体の水中環境でのレーザー 溶断・破砕試験」(2014年2月24日).

(4) 今後の利用予定:

燃料デブリを模擬した実機体系での溶断解析を3次元体系で実施し、SPLICE コードの適用可 能性を評価する。この後、コード公開手続きを経て外部利用を図る。

5.15 関西光科学研究所 Kansai Photon Science Institute

5.15.1 Csl 分子とCs 原子のCs 交換反応の理論計算による考察

Theoretical Investigation of the Cs Exchange Reaction Between CsI and Cs Atom

小林 孝徳、橋本 雅史+1、横山 啓一+1 プロジェクト推進室、+1 レーザー量子制御研究グループ

(1) 利用目的:

セシウムの同位体は、様々なものが知られているが、特に、安定な同位体である¹³³Csの他、 半減期 30 年程度でβ崩壊する¹³⁷Cs、2.3×10⁶年という極めて長い半減期でβ崩壊する¹³⁵Cs等が 有名である。これらは原子力発電におけるウラン核分裂の際の生成物である。しかも、水に溶け やすいため、簡単に土壌あるいは海洋に流れてしまう。その為、場合によっては極めて長い期間、 安全に管理される必要がある。しかし、もし例えば¹³⁵Csのみを分離回収し、無害化することが 出来たら、管理の負担は激減するであろう。

特定の同位体原子のみを選択的に励起状態にすることは現在の技術でも難しい。これは ¹³³Cs と ¹³⁵Cs の間の同位体効果は核スピンのみに効き、しかもそのシフトが小さい為である。それに 対して、CsI などの分子に対して同位体効果を狙うと、同位体効果は分子の回転定数などの質量 に関わる部分に効く為、選択的に励起することが先のものと比べて容易になる。

我々のグループは、テラヘルツパルスを利用することで、同位体選択的に二原子分子を回転励 起させることが出来ることを示していた。このことを利用して、図1のような同位体選択的に分 子を回転励起から無害化するまでの大まかなプロセスを考えた。これは、(1) テラヘルツ光によ るパルス列を利用して、同位体選択的に回転励起する。(2) 同位体選択的に回転励起した分子の みを振動あるいは電子励起させ、分子を光解離させる。(3) 光解離で生成した Cs を回収する。 (4) 中性子を照射するなどをして無害化する。というプロセスである。

回収計画の問題の1つに、「どのようにして、光解離した Cs のみを回収するか」という点が ある。この問題点に関連して、同位体選択的に解離した Cs が、解離していない CsI と衝突し、 同位体交換反応が起こる可能性があるかどうかが問題になる。この交換反応は起こるのか。もし 起こるのであれば、どの程度の速度で起こるかを見積もる事は、回収反応の時間的猶予を定量的 に見積もるのに必要である。本研究では、CsI と Cs の間の反応について研究した。CsI 周りの Cs に対するポテンシャル曲面を計算した。また、独自にモデル化した反応断面積計算法を利用 して反応速度定数を算出した。



 図 1 当グループで計画している Cs の同位体選択的光解離から無害化までのスキーム。
 1、テラヘルツ光のパルス列で、特定の同位体分子のみを回転励起する。2、回転励起した分子のみを光解離する。3、光解離した Cs を回収する。4、中性子を当てる等をして 核変換し、無害化する。

(2)利用内容·結果:

CsICs 三原子分子の構造最適化、振動数計算、そして CsI と Cs の間の相互作用ポテンシャル は、全て Gaussian 09 を用いた。レベルは、混合密度汎関数法 M06 を用いた。基底関数は、 def2-TZVPPD を用いた。その他、マリケン電荷や NBO 電荷も計算した。反応断面積は、「系の 運動エネルギーよりも強い引き込みポテンシャル領域にお互いが侵入すると、それは反応する」 という仮定等から、計算から得られた 2 次元ポテンシャル曲面を用いて求めた。これをボルツマ ン分布で平均化することで、交換反応の速度定数を求めた。ここでは、ポテンシャルエネルギー 曲面と速度定数について示す。

得られたポテンシャルエネルギーを図 2(a)に載せた。ここから、CsI と Cs の反応では、活性 化障壁無しに Cs-I-Cs 中間体となることがわかった。また、Cs-I-Cs の最小エネルギー構造は C_{2v} の対称性を持ち、2 つある Cs-I 間の結合距離が同じになることがわかった。このことから、Cs が CsI に捕まったら、2 つある Cs-I 結合について化学的な区別をつけることが出来なくなるこ とがわかった。

反応速度定数の温度に対するグラフが図 2(b)である。1000 K 程度の温度領域では 1.3×10⁻¹⁰

cm² molec⁻¹ s⁻¹程度と、衝突律速の反応としての典型的な値が算出された。また負の温度依存性 も算出されたが、これも衝突律速の反応によく表れる傾向である。

この計算から、光解離した Cs と CsI との間では、衝突律速で反応が進むことがわかった。しかし、この交換反応を抑える方法は少なくとも2つ考えられる。1つ目は系の圧力を下げることで CsI の存在量を少なくすることである。このことによって、衝突確率を下げることが出来る。2つ目は、系内の分子あるいは原子の運動エネルギーを高くすることである。このようにすると、引き込みの領域が小さくなる為、やはり交換反応の確率を下げることが出来る。



図 2 (a)CsI-Cs 間の 2 次元ポテンシャルエネルギー曲面。等高線は 0.5 kcal mol⁻¹毎に引いた。 (b)CsI-Cs の、Cs 交換反応の速度定数とその温度依存性。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 小林孝徳,橋本雅史,横山啓一, "CsI 分子と Cs 原子の Cs 交換反応の理論計算による考察", 日本化学会第 94 春季年会,名古屋,2014 年 3 月 27-30 日.
- T. Kobayashi, M. Hashimoto and K. Yokoyama, "Theoretical Study of the Cs Exchange Reaction Rate Constant of Cs+CsI→CsI+Cs", "30th Symposium on Chemical Kinetics and Dynamics", Himeji, 4-6 June 2014.

(4) 今後の利用予定:

現在は、「解離によって生成した Cs は吸着するが、系内に沢山存在するであろう CsI は吸着 しない物質」の考察の為の計算に利用している。先述した通り、回収スキームの問題点の一つは、 「どのようにして光解離した Cs のみを回収するか」という点である。大多数の CsI の中から、 特定の同位体の CsI のみを光解離し、Cs にするわけだから、その回収のための吸着物質として は、CsI との親和力は小さく、光解離した後の Cs とは親和力が大きいことが望ましい。

ところで、CsI の電荷はほぼ完全に Cs+-I と分極している。そのことから、それらの化学的性質はそれぞれのカチオンあるいはアニオンと類似しているものと思われる。そしてそれは Cs 原子のそれとは大分異なるのではないかと推察される。この化学的性質の違いを利用することで、先の目標を達成する可能性があるかどうかを検証する予定である。

5.16 システム計算科学センター Center for Computational Science & e-Systems

5.16.1 固有値問題ソルバ「Sakurai-Sugiura」法の超伝導体への適用と大規模並列計算 手法の開発 Simulation in Superconductors with the Sakurai-sugiura Method

永井 佑紀シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

中期計画におけるエネルギー機能材料の一つである超伝導を利用した高機能デバイス開発に 資するため、Sakurai-Sugiura 法と呼ばれる高精度固有値問題ソルバを超伝導体モデルへ適用 し、その大規模並列計算手法の開発を行う。高機能デバイス材料としてナノ構造超伝導体に着目 し、ボゴリフボフ・ドジャン理論を用いた大規模シミュレーションを行うコード開発を行う。ボ ゴリフボフ・ドジャン理論による計算には、超並列版チェビシェフ多項式による数値計算手法を 23 年度及び 24 年度に開発しており、この手法と Sakurai-Sugiura 法を組み合わせる事で熱伝 導率や光学伝導度などの物理量を精度よく計算するシミュレーション技術を開発する。

(2)利用内容·結果:

平成24年度には、超並列チェビシェフ多項式によるBX900上の4096コア並列時にもストロ ングスケーリングが十分に成り立つシミュレーションコードを開発することができている。しか し、この手法ではグリーン関数を求められても固有値や固有ベクトルを求めることが困難であっ たため、Sakurai-Sugiura法をこのコードに実装し、固有値固有ベクトルも精度よく求めるシミ ュレーションコードの開発を行った。Sakurai-Sugiura法とは、複素平面上の指定した領域に散 らばる固有値をすべて求める事ができる手法であり、一般化固有値問題をも解くことができる強 力な手法である。本年度では、線形連立方程式を解く箇所における並列性に着目し、大規模並列 計算が可能となった。また、固有ベクトルを精度よく求めることで、超伝導体の熱伝導率や光学 伝導度の計算を精度よく実行できるようになった。なお、このコードでは、8192×8192の行列 (非ゼロ要素数49152)の固有値分布の中央の50個を求める為に必要な時間は、1CPUコアで 30 秒以下である。Sakurai-Suigura法は固有値が実数である必要もないため、超伝導シミュレ

ーションのみならず他分野への応用をすることが可能である。

図1は、固有値分布の中央の30個を計算するのにかかった経過時間のシステムサイズ依存性 である。計算する固有値の数が等しい場合、ほぼO(N)でスケールし、非常に高速であることが わかる。図2は、開発したシミュレーションコードを用いて、磁場中s波超伝導体の熱伝導率の 磁束間距離依存性である。超伝導体の熱伝導率は磁束に束縛された準粒子が担っており、磁束間の距離が遠くなるにつれて準粒子の単位面積当たりの密度が小さくなり、熱伝導率が小さくなっている。



図1 固有値数が同じ場合の経過時間のシステムサイズ依存性(1コア使用)[文献2より]



図2 s波超伝導体の磁場中熱伝導率の磁束間距離依存性[文献2より]

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文(査読付き)6本 第一著者3本、共著3本

- 1) Y. Higashi, Y. Nagai, M. Machida, and N. Hayashi, "Field-angle resolved flux-flow resistivity as a phase-sensitive probe of unconventional Cooper pairing", Phys. Rev. B 88 224511-1 224511-6 (2013).
- 2) Y. Nagai, Y. Shinohara, Y. Futamura, Y. Ota, and T. Sakurai, "Numerical construction of a low-energy effective Hamiltonian in a self-consistent Bogoliubov-de Gennes approach of superconductivity", J. Phys. Soc. Jpn. 82 094701-1,094701-10 (2013).
- 3) T. Yamane, Y. Nagai, K. Tanaka, and N. Hayashi, "Impurity scattering effect on the zero-energy peak of the local density of states in a multi-quantum vortex core", Physica C 494 (2013) 128.
- 4) Y. Nagai, H. Nakamura, M. Machida, "Surface and vortex bound states in topological superconductors", Physica C 494 (2013) 17.
- 5) Y. Nagai, H. Nakamura, M. Machida JPS Conf. Proc. 3, 015013 (2014) http://dx.doi.org/10.7566/JPSCP.3.015013.
- 6) Yoichi HIGASHI Yuki NAGAI, and Nobuhiko HAYASHI JPS Conf. Proc. 3, 015003 (2014) http://dx.doi.org/10.7566/JPSCP.3.015003.

国際会議発表

- 7) Y. Nagai, H. Nakamura, and M. Machida, "Effective theory in Bulk topological superconductors", 14th International Workshop on Vortex Matter in Superconductors 2013 (Nanjing, China, 2013) (招待講演).
- 8) Y. Higashi, Y. Nagai, N. Hayashi, "Impurity Effect on the Local Density of States around a Vortex in Noncentrosymmetric Superconductors", The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2013 (SCES2013), Tokyo (Japan), 5 - 9 August 2013, poster.
- 9) Y. Nagai, H. Nakamura, and M. Machida, "Inhomogeneity Effects in Topological Superconductors", The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2013 (SCES2013), Tokyo (Japan), 5 9 August 2013, poster.

(4) 今後の利用予定:

BX900の入れ替えにより FX10後継機が次のスーパーコンピューターとなるが、現在のシミ ュレーションコードは intel CPU 用に最適化されており、また、必要なライブラリが FX10後継 機には存在しないためにそのままでは実行できない。そこで、FX系の計算機でも高速に動かせ るように改良するとともに、必要なライブラリの再選定を行い、より高速で使い勝手のよいコー ドへと改良をする。また、Sakurai-Sugiura 法は並列化の余地がまだ残っているので、ボトルネ ックを解消し数千並列でも支障無く動かせるようなコードに拡張する予定である。そして、これ らのコードの、超伝導シミュレーション以外の分野への応用も模索する。

5.16.2 環境中の放射性物質の挙動に関する数値シミュレーション Numerical Simulation of Radioactive Materials in Environment

(1)利用目的:

2011 年 3 月 11 日の東北地方太平洋 沖地震に起因する東京電力福島第一原子 力発電所事故によって、大量の放射性物 質が環境中に放出された。中でも放射性 セシウムは半減期が長く、さらに、土壌 の表層に強く吸着するため空間線量が下 がらず広域的避難の一番の要因となって おり、現在、大規模な除染が行われてい る。しかし、除染による除去土壌の量は、 福島県とその他の地域合わせて最大で東 京ドーム約33 個分(2011 年環境省)にも 上ると試算(図1)されており、その効 率的減容手法の開発は、福島環境修復に 当り、最重要研究開発課題の一つに位置 づけられる。しかし、決定的な減容化技 術は確立されておらず、国内外の関連研 究者による「知の結集」が謳われている。

減容化技術の進歩が遅い大きな理由の 一つに、セシウムの土壌への原子レベル 奥村 雅彦 シミュレーション技術開発室



図1 除去土壌は東京ドーム 33 個分と試算



図2 粘土鉱物の吸着サイト

での吸着様態が十分に理解されていないことが挙げられる。これまでの実験により、放射性セシ ウムは土壌中の粘土鉱物に特に強く吸着されることが分かっており、更に、複数の詳細な実験か ら、粘土鉱物の Frayed Edge Site (FES)に強く吸着されることが予想されている(図 2)。しか し、FES の吸着機構の本質は粘土鉱物の原子レベルの構造変化にあると考えられており、それ を実験で直接確かめる事は大変困難であるため、セシウムとの化学結合形態は未だ分かっていな い。実験的研究が上記のような困難に直面している一方、理論及び仮想モデルを構築し原子・分 子レベルの数値シミュレーションによって、FES の構造と吸着能を理解するという試みに期待 が持たれてきたが、FES の情報が少ないため、FES モデルの構築の成功例は皆無であった。

申請者らは、上記の現状を鑑み、本課題の主要研究目的を「土壌(FES)への選択的・不可逆 的放射性セシウム吸着機構の解明」とし、第一原理計算(密度反関数法)を用いて、FESのモ デリングとそこでのセシウム交換反応に的を絞り、解析を行った。本研究により吸着機構が解明 されれば、その知見を活かした除去土壌の減容化技術開発が期待できる。

(2)利用内容·結果:

本研究では、FES の本質部分のみをモデル化して第一原理計算による計算を可能にし、FES がセシウムを吸着する反応の前後のエネルギー差を評価し(図3)、以下の結果を得た。



図3 FES のモデリングと Cs 吸着のエネルギー差 ΔE、層間距離 d

① 構築した FES モデルは実験値を良く再現する事を示した。

構築した FES モデルは簡易的なものでありながら、実験値を良く再現する事が分かった。

② FES はセシウムを選択的に吸着する事を示した。

FES にあらかじめ Li,Na,K,Rb が吸着していても、ある程度の層間距離がある場合は、Cs が 吸着した方がエネルギーが低くなる事を示した(図 4)。つまり、粘土鉱物周辺の水に他のイオ ンが共存している場合でも、粘土鉱物は選択的にセシウムを吸着する事が示された。また、その 吸着の強さは粘土鉱物の層間距離に依存する事から、Cs のイオン半径に適した層間距離ができ る事により、選択的吸着が起こる事がわかった。

③ セシウムと粘土鉱物の軌道相互作用が FES の不可逆的吸着の原因である事を明らかにした。

多量の Cs が FES に吸着されると FES が閉じてしまい、Cs が取り出せなくなってしまう事が 実験によって確認されていた。しかし、Cs を吸着して閉じた FES が開いてしまわない理由は知 られていなかった。我々は、FES モデルの一部をさらにモデル化したものを、分子軌道法によ って解析し、強い結合の起源が軌道相互作用にあることを明らかにした(図 5)。





図 5 分子軌道(a) K と粘土鉱物にはみられないが、
 (b) Cs との間には軌道相互作用がみられる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

解説

- 1) 奥村雅彦、中村博樹、町田昌彦、"粘土鉱物へのセシウム吸着機構解明(2) -第一原理計 算による原子・分子レベルの吸着挙動解析"、日本原子力学会誌「アトモス」 56、pp.372-377 (2014).
- 2) 奥村雅彦, 中村博樹, 町田昌彦, "放射性セシウムの土壌吸着反応における数値シミュレーション解析の進展", RIST NEWS 55, pp.24-33 (2013).

学会発表

- 3) 奥村雅彦, 中村博樹, 町田昌彦, "粘土鉱物による高濃度 Cs 吸着挙動の第一原理計算による解析", 日本原子力学会 2014 年春の大会, 2014 年3 月 26 日~28 日, 東京.
- 4) 奥村雅彦,中村博樹,町田昌彦, "第一原理計算による粘土鉱物に吸着したセシウムの電子 状態の解析",日本原子力学会 2013 年秋の大会,2013 年9月3日~5日,八戸.
- 5) 奥村雅彦、中村博樹、町田昌彦、"第一原理計算による土壌における放射性セシウム吸着様態の解析",第29回「バックエンド」夏期セミナー,2013年8月7日~8日,福島.

国際会議発表

- 6) M. Okumura, H. Nakamura, and M. Machida, "Microscopic Mechanism of Cs Strong Affinity on Clay Minerals through ab initio Calculations", The 3rd International Conference on Molecular Simulation, Nov. 18-20, 2013, Kobe, Japan.
- 7) M. Okumura, H. Nakamura, and M. Machida, "First-principles Calculation Studies for Radioactive Cesium Adsorption to Clay Minerals", American Nuclear Society National Meeting 2013 Winter Meeting and Technology Expo, Nov. 10-14, 2013, Washington D.C., United States of America.
- 8) M. Okumura, H. Nakamura, and M. Machida, "Cs Adsorption and Related Reactive Dynamics in Frayed Edge of Micaceous Minerals", Caesium Workshop: Fukushima recovery –understanding, modeling, and managing radiocaesium decontamination, Sep. 30-Oct. 3, 2013, Fukushima, Japan.

(4) 今後の利用予定:

これまでは特殊な吸着特性を示す白雲母の FES の吸着特性に集中して解析を進めてきたが、 今後はその他の吸着サイトや、福島の土壌に含まれるその他の土壌の吸着サイトについても、吸 着特性と化学結合形態を明らかにしていく予定である。特に、水と直接接する吸着サイトの解析 のために、水を直接導入した第一原理計算シミュレーションを行い、現実に起こっている吸着現 象を計算機上で再現することによって、吸着機構解明を目指す。また、得られた吸着機構等の知 見を活かし、セシウム脱離のためのシミュレーションの可能性を探る。

5.16.3 第一原理計算による原子力材料劣化機構の研究

First-principles Study on the Degradation of Nuclear Materials

山口 正剛シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

原子炉材料の劣化(脆化)メカニズムを解明することにより、原子炉材料の高経年化対策に科学的・合理的知見を提供する。また、原子論的な劣化メカニズム解明は、原子力分野以外の金属材料においても共通して重要なテーマであるため、自動車用構造材料の軽量化を通した CO₂ 排出低減、構造材料における元素戦略などにも貢献できる。また、燃料被覆管ジルコニウム合金への応用を目指してマグネシウムに関する計算手法を開発している。

(2)利用内容·結果:

【中期計画:鉄鋼材料の粒界脆化、元素戦略プロジェクト】

前年度までに解明した、鉄鋼材料(Ni-Cr鋼)のマクロな破壊靭性値と結晶粒界の原子間凝集 エネルギーとの関係を、それ以前に解明していた水素モバイル効果による粒界脆化効果と結合さ せて鉄鋼の水素誘起粒界割れに適用し、低速破壊における限界応力拡大係数 Kth の固溶水素濃 度依存性を明らかにした。この結果を含めた粒界脆化研究に関する招待・依頼講演を、平成 25 年度中に5件行った。

【シンクロ型 LPSO 構造の材料科学(科研費新学術領域)】

シンクロ型 LPSO 構造を持つマグネシウム合金は、加工時に「キンク変形」という特異な変 形をすることにより強度が高まり、これまでにない高強度マグネシウム合金開発への道筋を開い ている。我々は、LPSO 構造の一般化積層欠陥エネルギーを第一原理により計算し、滑りの性質 を調べている。その結果、強い異方性があることがわかった。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

■主著論文

- 1) Intergranular Decohesion induced by Mobile Hydrogen in Iron with and without Segregated Carbon: First-principles calculations, Proceedings of 2012 International Hydrogen Conference - Hydrogen-Materials Interactions - , ASTM.
- 2) Multiscale Thermodynamic Analysis on Fracture Toughness Loss Induced by Solute Segregation in Steel, Masatake Yamaguchi, Jun Kameda, Philosophical Magazine, published online 30 Apr 2014.

3) 鉄鋼の焼戻し脆性と粒界水素脆性におけるマルチスケール解析:第一原理計算と破壊力学試験山口正剛、亀田純、第57回日本学術会議材料工学連合講演会講演論文集、2013/11/25,26 (京都テルサ).

■依頼・招待講演

- 4) (依頼講演)鉄鋼の焼戻し脆性と粒界水素脆性のマルチスケール解析:第一原理計算と破壊 靭性試験、山口正剛、亀田純、第151回超塑性研究会、2013/05/10、神戸大学.
- 5) (Invited) Temper and hydrogen-induced intergranular embrittlement of alloy steel: first-principles calculations and fracture mechanics experiments, M. Yamaguchi, J. Kameda, The 8th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM8), Waikoloa, Hawaii 2013/08/04-09 (USA).
- 6) (招待講演)鉄鋼の焼戻し脆性と粒界水素脆性におけるマルチスケール解析:第一原理計算 と破壊力学試験山口正剛、亀田純第57回日本学術会議材料工学連合講演会 2013/11/25-26 (京都テルサ).
- 7) (依頼講演)「高強度鋼の粒界水素脆性に対する原子間凝集力低下理論からの理解」山口正 剛、亀田純、日本学術振興会 産学協力研究委員会 材料の微細組織と機能性第133 委員会 第 219 回研究会『第一原理計算を中心とした構造材料の理論研究』2014/01/25 京都テルサ.
- 8) (基調講演)「マグネシウムの加工性改善のための元素探索:第一原理計算」山口正剛、板 倉充洋、蕪木英雄、日本機械学会関西支部第89期定時総会講演会、2014/03/18-19、大阪府 立大学(中百舌鳥キャンパス).
- 9) (基調講演)「高強度鋼の粒界水素脆性における原子間凝集エネルギー低下理論からの理解」 山口正剛、亀田純、日本金属学会公募シンポジウム「プラストンの材料科学」2014/03/21-23 東京工業大学(大岡山).

■主著講演

- 10) 微視き裂進展に伴う塑性仕事の粒界凝集エネルギーへの依存性 山口正剛、亀田純、日本鉄 鋼協会 講演大会、2013/09/17-19 金沢大学、金沢市.
- 11) 一軸圧縮下の LPSO 構造における転位のパイエルス応力低下,山口正剛、板倉充洋、志賀基 之、蕪木英雄、(東大工) 阿部英司、日本金属学会 2014/03/21-23 東京工業大学.
- 12) マグネシウムの成形性改善のための元素探索:第一原理計算 山口正剛、〇板倉充洋、蕪木 英雄、都留智仁、日本金属学会 2014/03/21-23 東京工業大学.

(4) 今後の利用予定:

引き続き、原子力材料の劣化メカニズム解明等を進める。

5.16.4 ネットワーク構造を考慮した量子シミュレーションコードの並列化

Parallelization Strategy for Quantum Simulation Code in Consideration of Network Architecture

山田 進シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

当室の中期計画の研究開発テーマの1つに「原子力分野における新奇ナノデバイス開発に貢献 するマルチスケールシミュレーション手法の構築」があり、計算機シミュレーションにより超伝 導及び超流動等を利用した新しいタイプの放射線検出デバイスの動作原理解明に貢献すること を目指している。このためには、BX900上でナノデバイスの物性を高精度かつ高速にシミュレ ーションするための計算手法を提案することが必須であり、平成25年度は、ナノデバイスの物 性を模擬できるシミュレーション手法である厳密対角化法の並列計算手法の開発およびその手 法を用いた物性のシミュレーションを実施した。具体的には

1) 多軌道ハバードクラスタモデルに対する厳密対角化法の並列化手法の提案

- 2) マルチコアプロセッサを考慮した通信方法の提案
- の2つを中心に研究を実施した。

(2)利用内容·結果:

1) 多軌道ハバードクラスタモデルに対する厳密対角化法の並列化手法の提案

通常のハバードモデルから導かれるハミルトニアンは反発力やポテンシャルから導かれる対 角行列とアップスピン、ダウンスピンそれぞれから導出される対称疎行列の和に分割できること を利用することで、大規模な並列化が可能である。しかし多軌道モデルには上記の行列に加え、 フント結合やペアホッピングといったアップスピンとダウンスピンの両方の影響により構成さ れる行列があるため、これまでに提案した並列化手法をそのまま用いることができない。そこで、

- a) フント結合やペアホッピングから導かれる行列に対する並列化方法を提案し、通常のハバ ードモデルに対する並列化と組み合わせる
- b) モデルを適切に分割し、それに基づいてハミルトニアンを分割し、その並列性を利用して 並列化する
- の2つの方法で並列化を実施した。

2) マルチコアプロセッサを考慮した通信方法の提案

上記の a)、b)どちらの並列化方法でも全プロセス間でデータのやり取りを行う all-to-all 通信 を行う必要があるが、BX900 のようなマルチコアプロセッサで構成された並列計算機ではコア あたりのネットワークの帯域はかなり小さいため、通常の all-to-all 通信命令を用いたのでは通 信の競合が発生し非常に多くの通信時間がかかることが知られている(図1参照)。一方、全プ ロセスでの同時の通信を回避できる図2のような通信方法が提案されているが、通信量が2倍に なることが指摘されている。そこで、b)の方法において、モデルを適切に分割し、その性質を利 用してデータを適切にプロセッサに割り当てることで、通信量の増加を防ぐ並列化方法を提案し た。この2つの並列化方法のBX900上での計算時間を表1、2に示す。この結果から、方法b) は、実際に通信性能は向上することが確認できた。一方で、提案した通信方法を実現するように データを分割しているため、計算性能は低下している。しかしながら2048コアまでの並列計算 では、全体の実行時間では b)の方法が高速であることから、提案した通信手法はBX900のよう なマルチコアプロセッサで構成された並列計算機向きの通信方法であると考えられる。



- 図1 4プロセスでの通常の all-to-all 通信 の模式図。全てのプロセス間で同時 に通信するため、通信の競合が発生 する可能性がある。方法 a)で並列化 を行う際には、この方法を利用する。
- 図2 2段階の通信により all-to-all 通信と同様 の結果を得る通信方法。全プロセス間で 同時の通信を行う必要はないが、通信量 が2倍になる。方法 b)は、この通信方法 を採用している。

並列数		反復回数	経過時間。 (秒)	反復1回あたりの時間(秒)			
MPI OpenMP	経過時間			掛け算部分			
				通信	演算		
32	4	638	5750.45	9.01	4.43	1.89	
64	4	1493	7140.55	4.78	2.51	0.91	
128	4	1098	2978.86	2.71	1.73	0.46	
256	4	2226	4061.32	1.82	1.50	0.27	
512	4	784	1215.99	1.55	1.23	0.17	

表1 通常の並列化方法 a)による計算時間

表 2 モデルの性質を利用した並列化方法 b)による計算時間

並列数		反復回数	経過時間 (秒)	反復1回あたりの時間(秒)			
MPI OpenMP	経過時間			掛け算部分			
				通信	演算		
32	4	1827	11463.3	6.27	1.59	2.58	
64	4	1274	4502.08	3.53	0.94	1.65	
128	4	2806	6874.34	2.45	0.64	1.22	
256	4	720	1212.05	1.68	0.41	0.92	
512	4	1455	2117.07	1.46	0.38	0.83	

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文

 Susumu Yamada, Toshiyuki Imamura, Masahiko Machida, Parallel Computing Design for Exact Diagonalization Scheme on Multi-band Hubbard Cluster Models, Parallel Computing: Accelerating Computational Science and Engineering, Vol. 25, pp.427-436, (2014).

口頭発表

- 2) 山田進、板倉充洋、奥村雅彦、町田昌彦、福島長期環境動態研究:(6)二次元河川コード を用いた河川内放射性物質の堆積分布予測、日本原子力学会秋の年会 2013 年 9 月 3 日、八 戸工業大学.
- 3) S. Yamada, T. Imamura, and, M. Machida, Parallel Computing Design for Exact Diagonalization Scheme on Multi-band Hubbard Cluster Models, Parco2013, 2013 年 9 月 13 日, Technische Universität München, Germany.
- 4) 山田進、小林恵太、奥村雅彦、町田昌彦、並列 DMRG 法による 2 次元周期系ハイゼンベル グモデルの大規模シミュレーション、日本物理学会年会、2013 年 9 月 25 日、徳島大学.
- 5) 山田進、今村俊幸、町田昌彦、ネットワーク構造を考慮したマルチバンドハバードクラスタ モデルの厳密対角化の並列化、今後の HPC(基盤技術と応用) に関するワークショップ、 2013年12月8日、長崎市立図書館.

(4) 今後の利用予定:

計算性能を低下させずに通信性能を向上させるデータの分割方法を考案するとともに、実際の 多軌道ハバードクラスタモデルのシミュレーションを行う予定である。

また、これまでに得られた並列化・高速化技術を利用して河川による放射性セシウムの移動を シミュレーションするコードを高性能化することで、福島の環境回復のために資する成果を得る ことを目指す。

5.16.5 超伝導及び絶縁体における多軌道効果

Multi-orbital Effect for Insulator and Superconducting State

小林 恵太

シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

遷移金属、アクチノイドなどにおいて多軌道効果は複雑な秩序相を生み出すことが知られてい る。また、近年、鉄系超伝導などの多軌道効果が本質的に重要となる超伝導物質が発見されてい る。本プロジェクトでは、固体物性のシミュレーターとして注目を集めている、冷却フェルミ原 子気体を中心に多軌道効果が引き起こす新規な物性の探索を行った。計算手法として密度行列繰 り込み群を用いた。

(2)利用内容•結果:

本プロジェクトでは多軌道効果を取り入れた電子模型である多軌道ハバード模型に対する解 析を行った。主な計算手法は、低次元量子系の基底状態を正確に求めることが出来る、密度行列 繰り込み群(DMRG)を用いたものである。本年度は p 軌道中の冷却フェルミ原子気体におけ る絶縁体相、多軌道超伝導における集団励起の解析を行った。本研究により明らかになったこと を以下に要約する。

・p軌道中の冷却フェルミ原子気体

量子効果によりハルデン絶縁体相が実現することを明らかにした(図1上段左)。この相はバル クの部分は絶縁体であり、端の部分には特徴的な密度波が現れる。また、この系に有限磁化を導 入することにより、相分離現象が引き起こされることが解った(図1上段右)。

・多軌道超伝導における集団励起

3及び4バンド BCS モデルに対する解析を行った。バンド間に働くフラストレーションの効果 により、集団励起の質量がほぼゼロになる場合があることが解った(図1下段)。特に4バンド では広域な範囲で集団励起のソフト化が起こることを明らかにした。

・上記の他に、p軌道中の冷却フェルミ原子気体における強磁性状態の解析などを行った。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文発表

- 1) Keita Kobayashi, Masahiko Okumura, Yukihiro Ota, Susumu Yamada, and Masahiko Machida, "Ferromagnetism in multi-orbital Fermi gas loaded on a one-dimensional optical lattice", JPS Conference Proceedings, 3, 016006 (2014).
- 2) Keita Kobayashi, Yukihiro Ota, Masahiko Okumura, Susumu Yamada, and Masahiko Machida, "Quantum phases in degenerate-p-orbital attractive one-dimensional fermionic optical lattices", Physical Review A 89 023625 (2014).

- 3) Keita Kobayashi, Masahiko Machida, Yukihiro Ota, and Franco Nori, "Massless collective excitations in frustrated multi-band superconductors", Physical Review B 88 224516 (2013).
- 4) Keita Kobayashi, Yukihiro Ota, and Masahiko Machida, "Analysis of collective excitation for multi band superconductor: Frustrated spin model approach", PhysicaC 494 pp.13-16 (2013).

学会発表

- 5) 小林恵太, 奥村雅彦, 山田進, 町田昌彦, 青木秀夫 "ダイアモンド鎖斥力ハバード模型にお ける超伝導の DMRG 解析", 日本物理学会第 69 年次大会, 東海大学, 2014 年 3 月.
- 6) 小林恵太,山田進,奥村雅彦,町田昌彦,"多成分フェルミ原子気体に対する数値解析",日本 物理学会 2013 年秋季大会,徳島大学,2013 年 9 月.

(4) 今後の利用予定:

2 次元系、多バンドを系に対し、DMRG を用いることにより量子強相関現象、高温超伝導の メカニズム解明などを行う。動的 DMRG、時間依存 DMRG の計算を行うことにより、励起ス ペクトルの情報などを解析したいと考えている。これらの計算には膨大な計算時間が必要となる ため、平成 26 年度においても大型計算機システムの利用を継続して行いたい。



図1 上段:p軌道を持つフェルミ原子気体の密度分布(赤線)、スピン密度分布(青線)。下段:3、 4バンドを持つ、多軌道超伝導体における集団励起の質量(軌道間の相互作用をパラメー ターとしている(横軸、縦軸))。

5.16.6 層状銅酸化物高温超伝導体からのテラヘルツ発振に関する3次元マルチスケー ルシミュレーション

Full 3D Multi-scale Simulations of Terahertz Emissions from Intrinsic Josephson Junction Stacks

太田 幸宏

シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

銅酸化物超伝導体は、現在のところ最も高い超伝導転移温度を示す超伝導材料群である。その 応用をめぐり研究開発が活発に実施されている。中でも、その単結晶を加工することで作成され る固有ジョセフソン接合列は、光と電波の中間領域であるテラヘルツ帯(いわゆるテラヘルツギ ャップ)の発振源として注目されている。これは、約数千枚の超伝導層が特定軸(*c* 軸)方向へ配 列されることで構成された、原子スケールのジョセフソン接合列デバイスに相当する。この多重 超伝導層間の協同現象が豊かな物理を誘起する。

2007年にOzyuzerら(Science、2007)による報告を契機に、様々な形状や実験状況下で発振 が確認されている。こうした状況において、高出力化、周波数帯の制御、デバイスの最適設計等 について、大規模数値シミュレーションによる解決が期待されている。当該デバイスの数値シミ ュレーションを実施する上で、最も大きな障害となる事実は、対象系には複数の(大きく異なっ た)空間スケールが含まれることである。まず、超伝導体の空間スケールは c 軸方向侵入長 λ_c 、 ジョセフソン侵入長 λ_J 、デバイスの厚み dがあり、それぞれ $\lambda_c=10^2\mu$ m、 $\lambda_J\sim1\mu$ m、 $d\sim10^3$ μ m 程度とされる。次に、超伝導体の外側には電磁波が伝搬する真空領域が存在しており、その 空間スケールは $10^2\mu$ m 程度(テラヘルツ波の波長に相当)とされる。こうして、デバイスと真空 領域をあわせると、空間スケールは $10^3\mu$ m $\sim10^2\mu$ m に渡る。この広範な空間スケールの自由 度を曖昧さのなく記述することが必須である。そのために、本格的なシミュレーションは行われ てこなかった。

Koyama ら(PRB、2009 及び SUST、2011) は本課題を達成するための理論手法を定式化し、 空間 2 次元モデルに関する数値シミュレーションを実施した。こうしてテラヘルツ発振デバイス の機能予測は現実的なものになりつつある。しかし、空間 3 次元モデルや c 軸方向の有限サイ ズ効果を取り入れた本格的なマルチスケールシミュレーションは未だ実装されていない。本研究 の主たる目的は、固有ジョセフソン接合列からのテラヘルツ発振現象の予測に向けた、空間 3 次 元マルチスケールシミュレーションを実施する計算コードを完成させることにある。

(2)利用内容•結果:

Koyama ら(PRB、2009 及び SUST、2011)が提案した手法を単一プロセッサで実行するコードに基づき、大規模計算に向けた並列化コードを作成した。得られたコードを利用し、マルチ スケールシミュレーションのベンチマークテストを行い、その正当性について検証をした。
理論および計算手法の詳細をまとめる。理論には2種の偏微分方程式が含まれる。第1に超伝 導層間のダイナミックスを記述する結合サイン・ゴルドン方程式、第2に電磁場応答を記述する マックスウェル方程式である。両方程式を互いに結合させることで、固有ジョセフソン接合列か らのテラヘルツ発振シミュレーションが可能となる。時間発展は有限差分時間領域法により達成 される。具体的には4次ルンゲクッタ法とカエル跳び(leap-frog)アルゴリズムの組み合わせに より、超伝導位相、電場、磁場の時間発展が算出される。境界条件は開放端条件であり、全計算 領域の端近傍では吸収体として perfect matching layer を設ける。本手法の最大の特徴は、超伝 導体内外における電磁場を自然な形で接続させることにある。これは物質内外での光速の違いに 起因するインピーダンスミスマッチングを、by hand ではなく、理論の有する性質から自然と解 決することを目指したものである。具体的には、(1)超伝導体内外でメッシュサイズを変化させ、 (2)超伝導体内の電磁場を算出し、(3)それを超伝導外にメッシュサイズに合わせて粗視化(平均 化)することで、内外を接続する。

シミュレーション結果を説明する。全ての空間スケールは入。で規格化されている。全空間サ イズは 1.5 × 1.5 × 1.5 であり、超伝導体の空間サイズは 0.5 × 0.02 である。超伝導 層の枚数は 100 とした。空間微小増分は dx = dy =0.01、dz=0.002 である。図1 に得られた電流 電圧特性と発振特性を示す。シミュレーションはバイアス電流がジョセフソン臨界電流密度より 低い領域、すなわち低バイアス領域で実施された。電流電圧特性に示された縦方向の線が接合の 幾何的構造から導かれる空洞共振共鳴条件に相当する。また、電圧値 6.0 近傍で電流電圧特性に ステップがみられ、これは Koyama ら(SUST、2011)でも報告されているシャピロステップに相 当する。発振特性からわかるように、空洞共振共鳴条件に近い位置で強いピークがみられる。こ の結果も Koyama ら(SUST、2011)の報告と酷似したものである。したがって、今回開発したコ ードによりテラヘルツ発振は記述できていると言える。ただし、今回得られたピークのいくつか は先行研究では見られていないものがあるため、正当性の確認を行う必要がある。



図1 電流電圧特性 (左図) と発振特性 (右図)

図2に電圧値11.46 でのピークに対する発振特性の角度分解データを示す。この結果から、z軸 直上方向への発振は強く抑制されていることが見て取れる。これはダイポールアンテナによる有 効モデルの挙動と酷似している。このような特性もまた、Koyama ら(SUST、2011)により報告 されており、今回のコードがよく動作していることを示している。



図2 角度分解発振特性(電圧値 11.46)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

口頭発表

1) 太田幸宏、町田昌彦、羽多野毅、小山富男、松本秀樹、"テラヘルツ発振の3次元シミュレ ーション: 接合長・接合数と発振モードの相関","日本物理学会第69回年次大会"、2014年3 月28日、東海大学湘南キャンパス.

(4) 今後の利用予定:

主として、3個の課題に取り組む。第1に、今回得られた低バイアス領域の結果の妥当性をさ らに検証する。特に、これまでのシミュレーションでは見られなかった発振ピークの妥当性を吟 味し、より精密に動作する計算コードを開発する。第2に、最近の実験では高バイアス領域で、 周波数制御に関する興味深い成果が報告されていることを考慮し、高バイアス電流領域をシミュ レーションすることが可能となる枠組みを作る。そのために、高バイアス領域で発生すると考え られているホットスポット(超伝導体の温度が局所的に増大し、周辺部位と比較し、著しく超伝 導性が弱められている領域)の効果を取り込むシミュレーションを達成する。第3に、実際のデ バイスに存在し得る空間非一様性を取り入れ、より現実的なシミュレーションを可能にし、実験 結果の解釈やデバイスの性能向上へ貢献できる研究を目指す。

5.16.7 第一原理計算による核燃料及び機能材料の物性評価

First-principles Study on Physical Properties of Nuclear Fuels and Functional Materials

中村 博樹 シミュレーション技術開発室

(1)利用目的:

本研究の目的は、第一原理計算を中心とした物性推算手法を、核燃料物質と機能材料に応用し、 それらの物質の研究開発に貢献することである。核燃料物質としては酸化物燃料の主成分である 二酸化アクチノイドを取り扱う。一方、機能材料としては、東京電力福島第一原子力発電所事故 による汚染水の除染に使われている Cs 吸着剤のゼオライトを扱った。

① 核燃料物質

二酸化プルトニウムを始めとしたアクチノイド化合物はその取り扱い上の制限などから頻繁 に実験を行い、精度の高い物性評価をすることは極めて困難である。そのため、物性を精度良く 再現できるシミュレーション手法を確立することが極めて重要である。そのために、我々はシミ ュレーション手法として、経験的パラメータを必要としない第一原理計算を採用してきた。これ までの成果として、強相関効果を適切に取り入れ、二酸化プルトニウムの低温での物性を正しく 評価できる手法を用いて1400K程度までの比熱を計算することに成功した。平成25年度は、こ の手法に対して他の二酸化アクチノイドに応用できるような近似法による比熱の評価を目的と した。また、これまで二酸化プルトニウムの電子状態評価に用いていた LDA+U 法以外に、電子 状態を正しく評価できる手法の開発も行なった。

② 機能材料

本テーマではゼオライトを中心とした吸着材料に注目し、その物性を推算する。ゼオライトは、 福島原発事故により発生した汚染水の除染用に Cs の吸着剤として使われている。海水などの多 くの不純物が混ざった汚染水から効率よく Cs を除染するために、Cs の選択性がより高い高性能 な吸着剤が望まれている。しかし、ゼオライトの種類は 100 種類以上あり、その中から高性能な 吸着剤を探索するのは実験的には困難である。そこで、本研究ではモンテカルロ法を用いて数値 計算によって選択性を評価する手法を開発し、新規吸着剤の提案を行うことによって福島での除 染への貢献を目指す。

(2)利用内容·結果:

① 核燃料物質

二酸化プルトニウムに用いた第一原理計算手法(LDA+U)をそのまま他の二酸化アクチノイド に用いるのは計算コストの面から不利となるため、電子状態を精密には再現できないが、原子間 の結合を十分な精度で再現できる手法(PBE)を選択し、二酸化アクチノイドの比熱の評価を行なった。図1にあるように十分な精度で実験と合っている。また、ハイブリッド DFT 法による電子状態計算手法の開発にも成功した。



図1 二酸化アクチノイドの比熱の計算値と測定値 実線が計算値、点が実験値

② 機能材料

ゼオライトなどのイオン交換による吸着の選択性はイオン交換等温曲線によって評価できる。 今回はモンテカルロ法を用いたイオン交換等温曲線の評価手法を開発し、いくつかのゼオライト における陽イオン選択性を評価した。その結果、図2にあるように測定された等温曲線を良い精 度で再現することができた。この手法を用いれば、Cs吸着材の候補となる多くの材料に対して、 数値計算でCs選択性を評価でき、より高性能な吸着材の開発を提案することが可能となる。こ れによって福島での汚染水処理に貢献することが期待される。





(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文発表

- 1) H. Nakamura, M. Machida, "Effects of van der Waals interaction for first-principles calculations on iron-based superconductors", Physica C 494, 17 (2013).
- 2) H. Nakamura, M. Machida, "Hybrid Density Functional Study on Plutonium Dioxide", JPS Conf. Proc. 3, 017034 (2014).

会議発表

- 3) 中村博樹、奥村雅彦、町田昌彦、「モンテカルロシミュレーションによるゼオライトの Cs 吸着性能の評価」、原子力学会 2013 年 秋の大会、2013 年 9 月、八戸.
- 4) 中村博樹、町田昌彦、「第一原理計算に基づく二酸化アクチニドの比熱の評価」、原子力学会 2014 年 春の大会、東京、2014 年 3 月.
- 5) H. Nakamura, M. Machida, "Hybrid Density Functional Study on Plutonium Dioxide", International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, Tokyo, Aug, 2013.

(4) 今後の利用予定:

核燃料物質に関しては、ウランやプルトニウム、他のマイナーアクチニドを含んだ MA-MOX の比熱の評価に応用を行っていく予定である。また、吸着物質に関しては、セシウムのみならず、 ストロンチウムなどの2価イオンへの適用を目指す。

5.16.8 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

Framework Construction of Multi-scale & Multi-physics Simulations for Application of Superconductivity

町田 昌彦

シミュレーション技術開発室

(1)利用目的:

本課題の研究目標は、エネルギー材料に係わる基礎及び応用研究をシミュレーションにより行 い、また、それと同時にその研究手段としてのシミュレーション基盤を構築することである。各 項目に対する目的、意義は以下の通りである。

① 鉄系超電導の機構解明のためのシミュレーション

本課題では、鉄系高温超伝導体の超伝導発現機構を調べるため、重イオン照射や不純物導入に 対する超伝導転移温度の変化の機構をシミュレーションを用いて明らかにする。特に、平成 25 年度は、電子相関のより緻密な取り扱いを行い、BX900 上での超並列計算を行い、実験結果と 理論シミュレーション結果の対応関係を明らかにする。

② ナノ構造超伝導体の大規模超並列微視的シミュレーション研究およびコード開発

中期計画におけるエネルギー機能材料の研究に資するシミュレーション基盤構築のため、高機 能デバイス材料としてのナノ構造超伝導体に着目し、ボゴリフボフ・ドジャン理論を用いた大規 模シミュレーションを行うコード開発を行う。ボゴリフボフ・ドジャン理論による計算には、23 年度及び24年度に開発された超並列版チェビシェフ多項式による計算手法を用いる。この手法 は並列化効率が極めて高いことに特徴があり、BX900による大規模超並列シミュレーションに 最適であり、実際、23-25年度は1000コア以上の超並列計算において高いパフォーマンスを発 揮した。本研究では、具体的な物質への適用として、トポロジカル超伝導体の電子状態を詳細の シミュレーションを行う。

③ 固有値問題ソルバ「Sakurai-Sugiura」法の超伝導体への適用と大規模並列計算手法の開発

中期計画におけるエネルギー機能材料の一つである超伝導を利用した高機能デバイス開発に 資するため、Sakurai-Sugiura 法と呼ばれる高精度固有値問題ソルバを超伝導体モデルへ適用 し、その大規模並列計算手法の開発を行う。当該課題では、本手法を用いて、②で計算すること ができない熱伝導率や光学伝導度などの物理量を精度よく計算するシミュレーション技術を開 発する。

④ 量子系シミュレーションコードの大規模並列化と超伝導体及び磁性体等の機能発現機構の 解明

量子相関の強い系の計算機シミュレーションによる解析は、高温超伝導体の機構解明に不可欠 であるがその計算量は膨大になる。そのため、計算機資源の有効利用の観点から、計算機の性能 を引き出せるような並列化・高速化手法を利用することが重要である。そこで、BX900のプロ セッサやネットワーク構造を考慮した DMRG 法および厳密対角化法の並列化・高速化アルゴリ ズムを開発する。これにより、多くのパラメータでの量子系に対するシミュレーションが可能に なり、その物性を解析することで J-PARC などで得られる実験結果の説明に用いる等、新物質の 物性予測に威力を発揮すると期待される。さらに、「京」コンピュータのような超大規模な計算 機資源を有効に利用することを視野に入れ、超大規模並列計算機向きの計算手法等の開発を行 う。

⑤ 大規模第一原理計算による複合秩序系の量子状態解析

本課題では多くの強相関 f 電子系物質の多様な秩序相における量子状態解析を実施するため、 前年度までに作成した f 電子のスピン - 軌道自由度が織り成す多自由度秩序系の大規模並列化 第一原理計算プログラムコードを用いて、アクチナイド物質の新奇な秩序状態の探索と機能性材 料の設計を目指す。

(2)利用内容·結果:

① 鉄系超電導の機構解明のためのシミュレーション

BX900 上での大規模並列計算に対応できる電子相関の効果を取り入れた超伝導転移温度計算 コードの開発を行った。その際、既存のベクトル機用コードを MPI+OpenMP のハイブリッド 並列計算に対応できるように改良を行った。また、マイクロ波測定による超伝導磁場侵入長の実 験結果とシミュレーション結果を比較した論文(本プロジェクト昨年度の成果)が、Journal of the Physical Society of Japan の「2012 Highly Cited Article」を受賞した。

② ナノ構造超伝導体の大規模超並列微視的シミュレーション研究およびコード開発

H24 年度に開発したコードを拡張し、三次元形状の超伝導体の電子状態を高精度に計算でき るように改良した。また、開発したコードを磁場中の三次元トポロジカル超伝導体の電子状態の 計算に用いることで、スピン偏極渦状態という特異な電子状態が、表面が存在している場合にお いても強固に生き残ることがわかった。

③ 固有値問題ソルバ「Sakurai-Sugiura」法の超伝導体への適用と大規模並列計算手法の開発

線形連立方程式を解く箇所における並列性に着目し、H24 年度に開発したコードを拡張する ことで、大規模並列計算が可能となった。また、固有ベクトルを精度よく求めることで、超伝導 体の熱伝導率や光学伝導度の計算を精度よく実行できるようになった。

④ 量子系シミュレーションコードの大規模並列化と超伝導体及び磁性体等の機能発現機構の 解明

DMRG 法の並列化・高速化により、大規模なモデルの系統的なシミュレーションが可能になった。DMRG 法の並列化・高速化により、大規模なモデルの系統的なシミュレーションが可能になった。並列化された DMRG を多軌道模型に適用することにより、中性フェルミ原子気体に

おけるハルデーン絶縁体相の実現、及び有限磁場化において引き起こされる強い相分離などを予 言した。また多軌道模型における超伝導相の解析において、新たなギャップレス集団励起が現れ ることを明らかにした。この成果は Physical Review B 2013 年 12 月号の Kaleidoscope (WEB 版の表紙) に選ばれた。また、「京」のような超大規模並列計算機では、計算コアあたりのネッ トワークの帯域が小さくなるため、その性能を極限まで利用する場合、ネットワーク構造に適し た通信方法を採用することが求められる。そのため、量子モデルの物理的性質を考慮し、ネット ワークの通信帯域を有効に利用する厳密対角化法(疎行列固有値ソルバ)を開発し、BX900 の 1000 を超える並列数においても並列化の効果が得られることを確認している。さらに、大規模 シミュレーションではコードによっては計算誤差が累積し得られた結果の精度がほとんどない ケースがある。そのため、倍精度演算を組み合わせて4倍精度線形方程式ソルバ(直接法)を開 発した。実際に BX900 を利用した並列計算により、このソルバは 100 並列を超えても並列化の 効果が得られることを確認した。

⑤ 大規模第一原理計算による複合秩序系の量子状態解析

アクチナイド酸化物 AnO₂ (An=U, Np, Pu, Am, Cm)の磁気的多極子秩序状態を含む基底状態 に関する系統的な大規模第一原理計算を実施し、秩序形成に伴う電子状態の変化がこれら物質の 絶縁体化機構に密接に関与していることや実験的に観測される結晶場基底状態と電子状態との 対応を明らかにした。本研究に関する研究成果は高精度な計算手法に基づき二酸化アクチノイド の基底状態の電子状態を解明したとして、Physical Review B, 88,195146 (2013)に掲載された。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文(査読付き)

- 1) Keita Kobayashi, Masahiko Machida, Yukihiro Ota, and Franco Nori, "Massless collective excitations in frustrated multi-band superconductors", Physical Review B 88. 224516 (2013). Kaleidoscope.
- 2) Keita Kobayashi, Masahiko Okumura, Yukihiro Ota, Susumu Yamada, and Masahiko Machida, "Ferromagnetism in multi-orbital Fermi gas loaded on a one-dimensional optical lattice", JPS Conference Proceedings 3, 016006 (2014).
- 3) Keita Kobayashi, Yukihiro Ota, and Masahiko Machida, "Analysis of collective excitation for multiband superconductor: Frustrated spin model approach", Physica C 494 pp.13-16 (2013).
- 4) Machida Masahiko, Keita Kobayashi and Tomio Koyama, "Quantum phases in intrinsic Josephson junctions: Quantum magnetism analogy", Physica C 491 pp.44-45 (2013).
- 5) Y. Higashi, Y. Nagai, M. Machida, and N. Hayashi, "Field-angle resolved flux-flow resistivity as a phase-sensitive probe of unconventional Cooper pairing", Phys. Rev. B 88 224511-1 224511-6 (2013).
- 6) Y. Nagai, Y. Shinohara, Y. Futamura, Y. Ota, and T. Sakurai, "Numerical construction of a low-energy effective Hamiltonian in a self-consistent Bogoliubov-de Gennes approach of superconductivity", J.Phys. Soc. Jpn. 82 094701-1,094701-10 (2013).

- 7) T. Yamane, Y. Nagai, K. Tanaka, and N. Hayashi, "Impurity scattering effect on the zero-energy peak of the local density of states in a multi-quantum vortex core", Physica C 494 (2013) 128.
- 8) Y. Nagai, H. Nakamura, M. Machida, "Surface and vortex bound states in topological superconductors", Physica C 494 (2013) 17.
- 9) Y. Nagai, H. Nakamura, M. Machida, "Inhomogeneity Effects in Topological Superconductors", JPS Conference Proceedings 3, 015013 (2014).
- 10) Y. Higashi, Y. Nagai, N. Hayashi, "Impurity Effect on the Local Density of States around a Vortex in Noncentrosymmetric Superconductors", JPS Conference Proceedings 3, 015003 (2014).
- 11) M.-T. Suzuki, N. Magnani, and P. M. Oppeneer, "Microscopic theory of the insulating electronic ground states of actinide dioxides AnO₂ (An=Np, Pu, Am, and Cm)", Phys. Rev. B 88, 194146 (2013).
- 12) Keita Kobayashi, Yukihiro Ota, Masahiko Okumura, Susumu Yamada, and Masahiko Machida, "Quantum phases in p-orbital degenerated attractive 1D fermionic optical lattices", Physical Review A 89, 023625(2014).
- 13) S. Yamada, T. Imamura, and, M. Machida, "Parallel Computing Design for Exact Diagonalization Scheme on Multi-band Hubbard Cluster Models", Parallel Computing: Accelerating Computational Science and Engineering, Vol. 25, pp.427-436, (2014).
- 14) Y. Nagai, H. Nakamura and M. Machida, "Spin-polarized Majorana bound states inside a vortex core in topological superconductors", Journal of the Physical Society of Japan 83, 064703(2014).
- 15) Y. Nagai, Y. Ota and M. Machida, "Impurity effects in a two-dimensional topological superconductor: A link of Tc-robustness with a topological number", Journal of the Physical Society of Japan 83, 094722 (2014).
- 16) Y. Nagai, H. Nakamura and M. Machida, "Quasiclassical Treatment and Odd-parity/Triplet Correspondence in Topological Superconductors", Journal of the Physical Society of Japan 83, 053705 (2014).

招待講演

17) 鈴木通人「非クラマース二重項結晶場基底を持つ Pr 系化合物の四極子秩序と電子状態」,第 三回「強相関電子系理論の最前線」研究会, 2013 年 12/16-12/18, 勝浦観光ホテル(和歌山).

受賞

18) Y. Imai, H. Takahashi, K. Kitagawa, K. Matsubayashi, N. Nakai, Y. Nagai, Y. Uwatoko, M. Machida, A. Maeda, "2012 Highly Cited Article", Journal of the Physical Society of Japan.

(4) 今後の利用予定:

平成 26 年度以降も超伝導材料の原子力分野への応用を目指し、THz 発振、中性子検出器、耐 放射性デバイス等への応用を目標とした基礎物性シミュレーションを実施する予定である。

5.16.9 六方晶軽合金における転位と溶質元素の第一原理計算

First-principles Calculation of Interaction between Solute Element and Dislocation in Hexagonal Close Packed Metal

板倉 充洋 シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

添加元素や原子炉の照射損傷による金属構造材料(炉鋼材および燃料被覆管)の塑性への影響 を定量的にモデル化することは原子炉の経年劣化を評価する上で理論的裏付けとなる重要な課 題である。炉鋼材に用いられるフェライト鋼やオーステナイト鋼についてはミクロからマクロな スケールに至る様々なモデルが構築されており研究が進んでいる一方、燃料被覆管を構成するジ ルコニウム合金(ジルカロイ)は六方晶の結晶構造を持ち塑性の機構が複雑で、鉄系合金ほど研 究が進んでいない。本研究ではまず六方晶金属の塑性および添加元素の影響についての計算およ びモデル化の方法論を確立するために、六方晶金属の中で高速に第一原理計算を行えるマグネシ ウムを対象としてまず研究を行い、基礎的知見を蓄積することとした。マグネシウムは軽量かつ 適度な強度を持っており、特に自動車の軽量化による燃費向上を目指して合金の開発が行われて いるが、結晶構造に起因した加工性の低さが問題となっている。六方晶は結晶構造の異方性のた め特定の方向にのみ変形しやすいためであり、こうした異方性はジルカロイ燃料被覆管の経年変 化においても顕著である。その基本メカニズムを明らかにすることが経年変化のモデル化に必須 となる。最近、添加元素によりマグネシウムの塑性が向上することが分かったがそのメカニズム は不明である。こうした添加元素の影響は原子スケールでの量子力学的相互作用で決定されるた め、本課題では第一原理計算を用いて添加元素が六方晶金属の塑性変形に与える影響を調べた。

(2)利用内容•結果:

塑性変形を担う転位の移動プロセスと、不純物元素がそれに与える影響について第一原理計算 を用いて解析した。六方晶軽合金では結晶の対称性が低いために、図1左に示す転位移動プロセ スのみが起こりやすく、図1右に示すようなそれ以外のプロセスが起こりにくいことから塑性変 形の方向が限定される。本解析では図1右に示した本来困難な転位の移動プロセスが不純物元素 によりどのような影響を受けるかを、移動に要するエネルギーを計算することで見積もった。そ の結果、転位が移動する経路の途中に希土類原子が一個存在した場合、移動に必要なエネルギー が 0.2eV 程度低下することが分かり、このプロセスを引き起こすのに必要な温度が数百度ほど 低下することが分かった。またその原因は不純物元素と転位の間の強い引力によるものであると 判明した。この結果から希土類原子がこの合金において塑性の向上に寄与するメカニズムを明ら かにできた。



図1 六方晶金属における代表的な二種類の転位移動プロセス。左のプロセス (底面滑り)は起こりやすく、右のプロセス(非底面滑り)は起こりにくい。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

国際会議

1) Mitsuhiro Itakura, Hideo Kaburaki, Masatake Yamaguchi, Tomohito Tsuru, "First-Principles Calculations of the Core Structure and Mobility of Pyramidal Dislocations in Mg", MRS 2013 Fall Meeting (Dec 2, 2013,Boston, USA).

国内会議

- 2) 板倉充洋、山口正剛、蕪木英雄、都留智仁、第一原理計算および分子動力学法によるマグネ シウム<a>らせん転位の交差滑りの計算、日本金属学会 2013 春期講演大会(2013/03/27 東 京理科大(神楽坂)).
- 3) 板倉充洋、蕪木英雄、転位と水素の相互作用の第一原理計算、「水素脆化研究の基盤構築」 研究会最終報告会「水素脆化研究の基盤構築」2013 年 10 月 18 日早稲田大学.

論文

4) M. Itakura, H. Kaburaki, M. Yamaguchi and T. Okita, "The effect of Hydrogen atom on the Screw Dislocation Mobility in BCC Iron : A First-Principles Study", Acta Mater. 61, pp.6857-6867 (2013).

(4) 今後の利用予定:

多結晶の六方晶金属においては、塑性変形において今回調べたような図1右のような変形モー ドだけでなく、結晶を斜めに切るような面(錐面)での滑りおよび転位の生成、移動が必要とな る。このような転位はより複雑な構造を持つためにより規模の大きい計算が必要となる。境界条 件や原子配置を工夫することで出来る限り効率化し計算を行っていく予定である。またこうして 得られた知見および計算の方法論を元にジルカロイ合金の機械的特性の経年変化のモデル化を 行っていく。

5.16.10 照射材料の微細構造発達シミュレーションのための第一原理計算

Ab Initio Calculations for Microstructural Evolution of Irradiated Materials

鈴土知明シミュレーション技術開発室

(1)利用目的:

核融合炉で用いられる予定のタングステン材はほぼ純タングステンに近くいわゆる合金では ない。しかしながら中性子照射によって核変換反応が起き一部のタングステン原子はレニウム原 子に変化する。よって純タングステン材は徐々にタングステン・レニウムの合金になっていく。 照射下ではタングステン中のレニウムが析出し(照射誘起析出)、材料の硬化をもたらす。本課題 ではタングステン中のレニウムの安定性や移動性を、第一原理計算を用いて解析し、タングステ ン材の照射誘起析出の詳細なメカニズムを明らかにし、照射による機械的性質の変化のモデル構 築のための基礎データとする。

(2)利用内容•結果:

第一原理計算の結果、タングステン中のレニウム格子間原子はレニウムとタングステンがペア になった欠陥(混合ダンベル)になり、その方向は非常に回転しやすく(図 1)、レニウム格子 間原子はタングステン中で容易に移動することがわかった。これにより、乱雑な位置にあったレ ニウムがタングステン中で徐々に集まってきて別の相を作り、析出するものと考えられる。すな わち、照射誘起析出現象の発生はタングステン・レニウムの混合ダンベルの回転容易性によると ころ大きいことが明らかになった。自己格子間原子は1次元運動するが、レニウム格子間原子は 回転によって3次元運動する。よってタングステン・レニウム合金では格子間原子が空孔と再結 合する確率が高くなることが予測されるので、本合金で照射スウェリングが抑制される原因もこ の回転容易性であると予測される。なお核変換によってオスミウムも生じるため、オスミウム格 子間原子についても同様の計算を行いレニウムと同様の結果を得た(図 1)。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 鈴土知明、山口正剛、都留智仁、"alpha 鉄の He 粒界脆化に関する原子論的モデリング"、 日本金属学会秋の講演会 (2013).
- 2) 鈴土知明、山口正剛、長谷川晃、"第一原理計算手法による W-Re, W-Os, Mo-Re 合金における照射欠陥解析"、金研ワークショップ、仙台(2013).
- 3) T. Suzudo, T. Tsuru, M. Yamaguchi, H. Kaburaki, "An atomistic modeling of He bubble stability at grain boundaries in alpha-Fe", J. Nucl. Mater., 442 (2013) S655.
- 4) T. Suzudo, M. Yamaguchi, T. Tsuru, "Atomistic modeling of He embrittlement at grain boundaries of alpha-Fe: a common feature over different grain boundaries", Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 21 (2013) 085013.

- 5) T. Suzudo, M. Yamaguchi, A. Hasegawa, "Stability and mobility of rhenium and osmium in tungsten: first principles study", Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 22 (2014) 075006.
- 6) Ken-ichi Ebihara, Tomoaki Suzudo, Masatake Yamaguchi, Yutaka Nishiyama, "Introduction of vacancy drag effect to first-principles-based rate theory model for irradiation-induced grain-boundary phosphorus segregation", J. Nucl. Mater., 440 (2013) 627.

(4) 今後の利用予定:

課題担当者らは平成25年度までに、ヘリウムの鉄粒界への偏析による脆化について詳細な解 析を行った。その結果、粒界強度の低下率はヘリウムの粒界面での濃度が同じであれば粒界種に はあまり依存しないことがわかった。今後は鉄と同じ体心立方結晶構造をもつ遷移金属全般につ いて、照射で生じたヘリウムの粒界偏析による強度低下の第一原理計算を行い、粒界脆化の金属 元素依存性を調査する。上記計算結果から、どの程度のヘリウム蓄積量までなら耐えられるかと いう、限界ヘリウム量を推定することができる。それらは照射材料設計の基本的なデータとなる ことが期待される。また、体心立方結晶構造をもつ遷移金属を系統的に調査することにより、ヘ リウム脆化しやすい金属の共通の特徴を抽出できる可能性もある。これらの結果は、高照射環境 にさらされる核融合炉材料の設計のための貴重なデータとなる。



図1 タングステン材料中の自己格子間原子(SIA)、レニウム(Re)格子間原子、オスミウム(Os)格 子間原子の形成エネルギー。SIA および Re 格子間原子では<111>ダンベルが、Os 格子間 原子では<110>ダンベルが最も安定である。これらの回転障壁エネルギーは<111>と<110> のエネルギー差に相当する。SIA に比べて、Re と Os の格子間原子の<111>方向と<110> 方向のエネルギー差が小さくなっていることがわかる。

5.16.11 アクチノイド化合物の多様な基底状態の第一原理計算による研究

First-principles Study for Variety of Ground States of F-electron Compounds

鈴木 通人 シミュレーション技術開発室

(1)利用目的:

本プロジェクトの目的は希土類・アクチノイド化合物で実現する多様な基底状態の電子状態に 対する第一原理計算手法の開発によって、これらの*f*電子系化合物で実現する多彩な秩序相の量 子状態を明らかにし、秩序下において見られる物性現象の起原を明らかにすることを目的として いる。

(2)利用内容•結果:

アクチノイド化合物では、アクチノイドf原子の持つスピンと軌道の自由度を利用した、多彩 な秩序形成が起こる。このような秩序の中には、未だにその詳しい秩序構造がわかっていない物 質が多く存在し、二酸化アクチノイドに見られる多様な秩序形成や「隠れた秩序相」と呼ばれる URu₂Si₂の低温秩序相などが長年にわたる研究対象となっている。本プロジェクトでは、アクチ ノイド化合物で見られるこれらの多様な基底状態に対する第一原理計算手法を開発し、秩序状態 の電子構造、秩序パラメータ、安定性などを定量的に求めることに成功している。

これらの研究に関して実施された計算から得られた研究成果として、以下の2点が挙げられる。

- 1. 二酸化アクチノイドの秩序相の系統的な電子状態計算により、各化合物の詳細な秩序状態を明らかにした。
- 2. URu₂Si₂の隠れた非秩序相・秩序相における電子構造の計算を行い、秩序下に伴う電子構造の変化などを明らかにした(図1)。

上記1の研究成果は論文としてまとめられ、Physical Review Bに出版されている。また、2 の研究成果に関しては、先端基礎研究センターの NMR グループとの共同研究により URu₂Si₂ の磁場下における状態密度の変化を明らかにし、その研究成果をまとめた論文が Physical Review Letters に採択されている。



図1 URu₂Si₂の状態密度とf軌道のエネルギー分布

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文

- H. Sakai, Y. Tokunaga, S. Kambe, R. R. Urbano, M.-T. Suzuki, P. L. Kuhns, A. P. Reyes, P. H. Tobash, F. Ronning, E. D. Bauer, and J. D. Thompson, "Emergent antiferromagnetism out of the 'hidden-order' state in URu₂Si₂: High magnetic field nuclear magnetic resonance to 40 T", Physical Review Letters, 112(23), 2014, p.236401_1 - 236401_5.
- 2) M.-T. Suzuki, N. Magnani, and P. M. Oppeneer, "Microscopic theory of the insulating electronic ground states of actinide dioxides AnO_2 (An=U, Np, Pu, Am, and Cm)", Phys. Rev. B 88, 2013, p.195146.

国際会議

- 3) Michi-To Suzuki, "Electronic-magnetic states investigation of hidden order phase in URu₂Si₂", The International Conference on Strongly Correlated Systems (SCES2013), 2013 年 8 月 9 日, 東京大学 (本郷キャンパス).
- 4) Michi-To Suzuki, "Microscopic theory of the insulating electronic ground states of actinides dioxides *AnO*₂ (with *An*=U, Np, Pu, Am and Cm)", ACTINIDES 2013, 2013 年 7 月 25 日, カールスルエ.

(4) 今後の利用予定:

今後の利用予定はない。

5.16.12 GT5D コードによるプラズマ乱流輸送研究

Study of Plasma Turbulent Transport using GT5D Code

井戸村 泰宏 高度計算機技術開発室

(1)利用目的:

国際熱核融合実験炉 ITER における核燃焼プラズマ実験の性能予測や運転シナリオ設計を行 う上で、信頼性の高いプラズマ乱流シミュレーションが必要とされている。核燃焼プラズマは燃 料プラズマ、ヘリウム灰、不純物等の多種イオンがプラズマ乱流や粒子衝突を介して相互作用す る複雑系となっており、輸送現象の高精度な評価・予測には第一原理モデル(5 次元ジャイロ運 動論モデル)に基づくプラズマ乱流コードが必要不可欠である。本研究では、第一原理プラズマ 乱流コード GT5D の物理モデルやシミュレーション技術の開発を行うとともに、それを用いた シミュレーション研究を推進する。

(2)利用内容·結果:

平成 25 年度は多種イオンから構成される核燃焼プラズマ系で必須となる異種粒子衝突演算子の開発を行った。また、これまでに開発を進めてきた GT5D コードを用いた応用研究を京コン ピュータ、Helios 等のペタスケール計算機で推進し、長時間スケールのプラズマ乱流シミュレー ションにおける定常プラズマ分布の形成機構等に関する成果が得られた。

異種粒子衝突演算子の数値計算手法の開発

核燃焼プラズマ系における多種イオンの粒子衝突による相互作用を計算するために異種粒子 衝突演算子の計算手法を開発した。開発にあたっては衝突演算子の基本特性である自己随伴性と 保存特性(粒子、運動量、エネルギー)を両立する衝突モデル[Sugama, Phys. Plasmas 2010] を採用し、厳密に保存特性を満たす数値計算手法を開発した。衝突演算子の保存特性等の検証に 加え、2 種イオン系のテスト計算を実施し、衝突効果による温度緩和時間等の基本的な物理特性 を確認した(図 1)。



図1 水素同位体を含む2種イオン系(H·H、H·D、H·T、H:水素、D:重水素、T:三重水素)に おける衝突緩和テストで観測した(a)粒子数保存、(b)エネルギー保存、および、(c)H-D系 における温度緩和。

② 閉じ込め時間スケールのイオン系乱流シミュレーション

核融合プラズマ乱流シミュレーションは、これまで、5次元位相空間の粒子分布fを背景分布 f₀と乱流揺動 & f に分けて、それらの時空間スケールを分離する仮定の下にf₀を固定して & のみ を取り扱う、いわゆる & モデルによる研究が行われてきたが、GT5D では両者を同じ第一原理 モデルで無撞着に発展させる full-f モデルを採用している。full-f モデルは巨視的な温度分布変化 と微視的な乱流揺動の相互作用がもたらす熱流束の雪崩的な伝搬による非局所的輸送、あるい は、巨視的な電場構造が形成する平均流による乱流揺動の安定化といったマルチスケールダイナ ミクスを取り扱うことが可能であるが、温度分布やプラズマ回転分布といった巨視的なプラズマ 分布が定常状態に至るまで非常に長時間の乱流シミュレーションが必要になるという課題があ った。

本課題では乱流発展の時間スケール(~数10µsec)の1000倍以上の長時間スケールのイオン系 乱流シミュレーションを実施し、巨視的なプラズマ分布が定常状態に収束していく過程を調べ た。この結果、線形安定なプラズマを初期条件として炉心を加熱する場合には、閉じ込め時間(乱 流輸送によるエネルギー散逸の時定数)スケールの長時間の時間発展を追跡する必要があるのに 対し、線形不安定なプラズマを初期条件として初期に強い乱流場を励起して過渡的に乱流輸送を 増大することで、プラズマ分布の緩和過程を加速することが可能であることを示した(図2)。

また、このシミュレーションで得られた定常プラズマ分布を解析し、定常プラズマ分布を維持 する輸送機構を明らかにした。熱輸送に関しては、炉心の加熱入力と乱流輸送による熱流束がバ ランスするように定常温度分布が決定されることを示した。一方、運動量輸送に関しては、炉心 に粒子ビーム等のトルク入力が無い状態でも乱流輸送による運動量束はゼロにならず、磁力線方 向の乱流波数スペクトルの非対称性によって決定される非拡散的な運動量輸送が存在すること、 さらに、それが粒子衝突効果による運動量拡散とバランスすることで定常回転分布が維持される ことを示した。



図 2 線形不安定(R/L_{ti}=10)および線形安定(R/L_{ti}=4.5)な初期条件から発展させたイオン系乱流 シミュレーションで観測した(a)蓄積エネルギーと(b)、(c)温度分布の時間発展。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文

- "Communication overlap techniques for improved strong scaling of gyrokinetic Eulerian code beyond 100k cores on the K-computer", Y. Idomura, M. Nakata, S. Yamada, M. Machida, T. Imamura, T.-H. Watanabe, M. Nunami, H. Inoue, S. Tsutsumi, I. Miyoshi, and N. Shida, International Journal of High Performance Computing Applications 28, 73-86(2014).
- 2) "Full-f gyrokinetic simulation over a confinement time", Y. Idomura, Phys. Plasmas 21, 022517 (2014).
- 3) "Plasma Size and Power Scaling of Ion Temperature Gradient Driven Turbulence", Y. Idomura and M. Nakata, Y. Idomura and M. Nakata, Phys. Plasmas 21, 020706 (2014).
- 4) "Plasma size and collisionality scaling of ion-temperature-gradient-driven turbulence", M. Nakata and Y. Idomura, Nucl. Fusion 53, 113039 (2013).

主要会議

- 5) "Full-f gyrokinetic simulation over a confinement time", Y.Idomura, 40th EPS Conference on Plasma Physics, 1-5 July 2013, Espoo, Finland (oral).
- 6) "Progress of full-f gyrokinetic simulation toward reactor relevant numerical experiments", Y. Idomura, 23rd International Toki Conference on Large-scale Simulation and Fusion Science, 18-21 November 2013, Toki, Japan(invited).
- "Plasma size scan of ITG turbulence simulations on the K-computer", Y. Idomura and M.Nakata, 23rd International Conference on Numerical Simulation of Plasmas, 14-16 September 2013, Beijing, China (poster).
- 8) "Fixed-gradient and fixed-flux full-f simulations of global ion temperature gradient driven turbulent transport", M.Nakata, Y.Idomura, 40th EPS Conference on Plasma Physics, 1-5 July 2013, Espoo, Finland (poster).
- 9) "ペタスケール計算機における核融合プラズマ乱流コードの最適化"、井戸村泰宏、プラズ マシミュレータシンポジウム 2013、2013 年 9 月 11 日~12 日、土岐 (invited).
- 10) "大域及び局所ジャイロ運動論モデルに基づく固定勾配/固定熱流駆動 ITG 乱流シミュレーション"、仲田資季、井戸村泰宏、プラズマシミュレータシンポジウム 2013、2013 年 9 月
 11 日~12 日、土岐(invited).
- 11) "閉じ込め時間スケールの full-f ジャイロ運動論シミュレーション"、井戸村泰宏、プラズ マ・核融合学会第 30 回年会、2013 年 12 月 2 日、東京 (poster).
- 12) "イオン温度勾配駆動乱流のプラズマサイズ および加熱パワー依存性"、井戸村泰宏、仲田 資季、日本物理学会第69回年次大会、2014年3月27日~30日、平塚 (oral).

(4) 今後の利用予定:

実験データとの比較に向けて GT5D コードの物理モデルやシミュレーション技術の高度化を さらに進める。

5.16.13 粒子ベースボリュームレンダリングによる大規模データの遠隔可視化

Remote Visualization Processing using Particle-based Volume Rendering

河村 拓馬 高度計算機技術開発室

(1)利用目的:

昨今のシミュレーション技術の発展に伴い、結果データは大規模化し、1ケース当たり数テラ から数ペタバイトのデータが生成されるようになった。そのようなデータを可視化するために、 遠隔地にあるスーパーコンピュータから結果データを手元のワークステーションに転送して可 視化を行う従来的なスタイルは、データ転送量とメモリ容量の観点で処理性能の限界を超え、可 視化作業に数日から数週間かかるという問題がある。そこで、サーバ上で可視化処理を行い、生 成した可視化要素をクライアントに転送することで対話的な可視化を行うクライアント/サー バ型可視化が重要な技術になっている。

しかし、多くの商用ソフトで採用されている等値面表示はデータの大規模化に比例してポリゴ ン数が増大するため、サーバからのデータ転送量が問題になる。加えて、等値面による可視化は ユーザが閾値を自由に変更してデータ探索をする必要があるが、可視化処理速度が不足し対話的 な探索が困難である。また商用ソフト上に実装された従来的なボリュームレンダリングは、並列 数を増加させても処理速度がスケールせず、加えて画像生成のためにユーザ PC に展開されるデ ータが元データの格子情報よりも大きくなりメモリを圧迫する。サーバ上で描画処理を行い、生 成した画像データをクライアントに転送することもできるが、サーフェス生成の閾値の変更や視 点の移動といったデータ探索が困難になるという問題がある。

この問題を解決するために、粒子ベースボリュームレンダリング(Particle-Based Volume rendering, PBVR)を利用した、データ転送量の少ない、対話的な可視化が可能なクライアント/サーバ可視化システムを開発している。粒子ベースボリュームレンダリング

(Particle-Based Volume rendering, PBVR)は、結果データ(ボリュームデータ)の格子内部 に描画要素となる粒子を生成して高速に画像を生成できる可視化手法であり、粒子データのサイ ズは画像解像度から決定される。この性質を利用して大規模なボリュームデータに対しても、転 送量が少ない効率的なクライアント/サーバ可視化システムが構築できる。クライアントはユー ザ PC 上で実装され、粒子データを利用することで自由な視点移動や時系列変化などの対話的な データ探索が可能になる。

(2)利用内容 結果:

開発中の PBVR のクライアント/サーバモデルによる遠隔可視化システムは、粒子生成処理 をサーバで行い、生成した粒子データをクライアント PC に転送して、グラフィックカードを利 用して対話的な視点移動を行う。システムの概略を図1に示す。サーバは大規模データを読み込 み、伝達関数を参照してボリュームデータに対して粒子生成を行う。粒子データのサイズは通常 10~100MB のオーダーであり、ソケット通信によりクライアント PC に転送される。クライア



ント PC 上で粒子データはメインメ モリに格納され、レンダリングに使 用される。粒子データは時系列順に 逐次転送され、時系列データの可視 化が可能である。

PBVR のクライアント/サーバ システムで円滑に可視化を行うた めには、サーバ側が高速に粒子生成 を行う必要がある。粒子生成処理は

図1 PBVR によるクライアント/サーバ型可視化

要素毎に実行されるモンテカルロシミュレーションであり、要素並列処理による高速化を行った。また、物理値から決定される生成粒子数は各要素で不均一であるので、ノード間で領域分割 されたサブボリュームをマスター・スレーブ方式で動的に割り当て、粒子生成負荷が均等になる ように負荷分散を行った。前処理としてボリュームデータにフィルター処理を適用し、八分木モ デルを利用して可視化用に粒度の細かいサブボリュームを生成した。

提案システムのパフォーマンスを計測するために、BX900上で2種類の大規模構造格子・非 構造格子を処理した。一つはGT5D(Gyrokinetic Toroidal five dimensional Eulerian code)から 得られた結果であり、もう一つはHTTR (High Temperature engineering Test Reactor)をモ デル化したデータに対して、地震動下における構造解析を行った結果である。

GT5D データは、曲線座標系で表現されたトーラス型の構造格子データであり(図 2)、本実験 では静電ポテンシャルを可視化した。このデータは、2000 タイムステップで構成され、格子解 像度は 610×610×768 (1.1GB/step、全体で 2.3TB、座標データで 3.4GB)である。

HTTR データは四面体一次要素の非構造格子データであり(図 3)、ミーゼス応力を可視化した。 このデータは 200 タイムステップで構成され、要素数約 126M (4.2GB/step、合計 840GB)であ る。画面解像度は 1024×1024、生成粒子数は約 1000 万である。



図2 GT5Dの可視化結果

図 3 HTTR の可視化結果





図 5 HTTR の処理時間

GT5D、HTTR を処理した結果を、図 4、図 5 に示す。 並列数を 1024 まで増やした結果、GT5D データは1タイムステップを約1秒で処理した。また、処理時間の合計は 90%近い並列化効率 になり、I/O を除いた粒子生成時間に着目すると 99%以上の並列化効率を達成した。HTTR デ ータは1タイムステップを約0.2秒で処理し、粒子生成の並列化効率は120%以上というスーパ ーリニアを達成した。使用した並列数は、超並列計算機上で可視化ノードが使用できる並列数と して妥当なものであり、提案手法により大規模データを高速に処理できた。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文

1) 河村拓馬、井戸村泰宏、宮村浩子、武宮博、"粒子ベースボリュームレンダリングを利用し た遠隔可視化システム"、日本シミュレーション学会論文誌、第5巻、第4号、2014.

口頭発表

- 2) 河村拓馬、宮村(中村)浩子、井戸村泰宏、武宮博、"粒子ベースボリュームレンダリング による大規模データの可視化技術"、第58回システム制御情報学会研究発表講演会 (SCI'14)、(京都テルサ、2014年5月21~23日).
- 3) 河村拓馬他、"粒子ベースボリュームレンダリングを利用した原子力分野における大規模有 限要素シミュレーション結果向けのクライアント/サーバ可視化システム"、日本原子力学 会 2013 年秋の大会(八戸、日本、2013 年 9 月 3 日~9 月 5 日).
- 河村拓馬、"粒子データによるクライアント/サーバ可視化システム 粒子データの分割 4) 転送による効率的な時系列データのレンダリングー"、可視化情報シンポジウム(東京、日本、 2013年7月16日~7月17日).

受賞

5) 第11回日本原子力学会計算科学技術部会 部会 CG 賞.

(4) 今後の利用予定:

現状のシステムにある、1024 並列以上で I/O やジョブ割り当ての負荷が増加する欠点を克服 し、エクサスケール時代を見据えた更なる要素技術開発を展開するため、今後も大型計算機シス テムを利用したい。

5.16.14 大規模データ可視化システムの構築

A Visualization System for Large-scale Datasets

宮村 浩子

高度計算機技術開発室・基盤技術チーム

(1) 利用目的:

システム計算科学センターが開発に取り組んでいる、大規模4次元シミュレーション結果解析 のための可視化システムを構築する。数値シミュレーションでは、ある変量軸を設定して計算を 実行し、その変量の変化に応じてシミュレーション結果が変化する様子を観察することがしばし ば行なわれる。対象となるモデルが3次元である場合、シミュレーション結果は4次元となる。 このような4次元以上の多次元データの解析は、空間軸と変量軸で構成された多次元空間内を精 査して特徴領域を特定する必要がある。しかし、多次元かつ大規模な対象データから特徴領域を 探し出す作業は、膨大な手間と時間を要する。さらにすべての特徴領域を見逃しなく発見するこ とは困難である。そこで、4次元データから特徴領域を見逃しなく発見するために、動画像解析 技術として利用されている時空間画像を応用した2次元可視化手法を開発し、本手法を用いた大 規模可視化システムを構築する。なお、可視化システムでの可視化対象データは、大規模データ に対応するように並列化実装する。

また、実際に提案手法を原子力施設の時系列耐震シミュレーション結果と固有値解析シミュレ ーション結果に適用し、応力値が相対的に高い領域の発見や、周波数ごとに影響を受ける領域の 探索を実施し、提案手法を用いることで複雑かつ大規模な4次元データから特徴領域を効率的に 発見できることを確認する。

(2)利用内容·結果:

まず、大規模複雑な4次元データから特徴 領域を発見するための2次元可視化手法を用 いた可視化システムを紹介する。本システム では、領域を再帰的に8分割した8分木を横 軸にとる。これに垂直に変量軸をとり、デー タの値を色に割り当てることで4次元データ を2次元画像として観察できる。ここで、こ の2次元空間上から値の分布を観察し、特徴 ある値を発見したらその領域の位置は三面図 から把握することができる(図1)。



この 4 次元データマップを生成するにあた 図1 4 次元データマップ

り、シミュレーション結果から4次元データマップの読み込みデータである8分木を生成する必要がある。このデータを可視化システムで読み込むことで4次元データマップが生成される。この4次元データマップから特徴領域を指定すると、その領域の3次元モデルを生成して観察できる。これら一連の処理の中で、シミュレーション結果から4次元データマップの読み込みデータ

である8分木を生成する処理は大型計算機側で行なう。これによって処理の高速化が図れるだけ でなく、大規模な数値シミュレーション結果データをクライアント側に転送する必要がなくな る。また、観察者が指定した特徴領域の3次元モデル生成に関しても、元データが保存されてい る大型計算機側で実施する(図2)。



図2 4次元データマップ生成処理手順

提案手法を原子力施設の時系列耐震シミュレーション結果と固有値解析シミュレーション結 果に適用した。なお、ここで使用するデータは原子力施設を3次元モデル化し、シミュレーショ ン実験を実施した結果である。

原子力施設の耐震シミュレーション結果から4次元データマップを生成した。縦軸は時刻歴、 横軸は8分木構造によって表現された空間、色は8分木構造のノードにあたる矩形領域内の最大 応力値を表している。ここでは、4階層のデータマップを生成した。図3に示すシミュレーショ ン結果を分析すると、例えば①から③の領域に特徴を発見した。まず、最大ミーゼス応力値が最 も高い①の領域について観察すると、機器に接続する配管の付け根の下部に相対的ミーゼス応力

次に、やはりミーゼス応力値が相対的に 高かった②の領域に注目すると、配管の 内側にミーゼス応力値が相対的に高い領 域を発見した。また、ミーゼス応力の値 の変動を観察するために、縦方向の色の 縞模様の間隔に注目すると、縞模様の間 隔が他の領域と比べて狭い③の領域を発 見することができる。この領域は、青と 水色の縞模様であるため大きな力がかか っているわけではないが、破線が他の領 域と比較して規則的に生じているように

値が高い領域を見つけることができた。



図3 時系列耐震シミュレーション結果の4次元 データマップ

認識でき、長時間にわたって短い間隔 で力が加わっていることがわかる。

次に固有値解析による各領域の影響 を分析するため、4次元データマップを 図4に示す。縦軸は周波数を示すモー ド番号であり、上から下に向けて周波 数が高くなる。横軸は8分木構造によ って表現され、色は8分木構造のノー ドにあたる矩形領域内の最大変位量を 表している。

4 次元データマップから1 階層目(全 領域を 8 分割した矩形領域)を観察す る。左端(オレンジ枠)の領域は原子



図4 固有値解析シミュレーション結果の 4次元データマップ。

力施設の下部に位置し、この領域で低周波振動において最大変位量が比較的大きな値が断続的に 表れている。この領域は2重配管であり、内側の配管がこれらの周波数に対して共鳴的な反応を していることがわかった。次に紫枠で示す領域では、複雑に接続された細い配管群が属する矩形 領域であり、4次元データマップから複数の周波数で値が変化していることがわかる。また、元 の3次元形状モデルを可視化し、確認すると、変位が生じているのは細い配管であることがわか った。青枠で示す領域では、制御棒を格納する配管群が属する領域である。この領域は広範囲に わたって色の変化がみられるだけでなく、多くの周波数で色が変化しており、この範囲の周波数 で共鳴が起こりやすいことがわかる。また実空間で可視化すると、幅広い周波数領域で応答し、 その変位分布は周波数に応じて周辺部、もしくは中央付近に集中していることがわかった。最後 に黄枠で示す領域では、実際の地震に近い周波数に共鳴的な応答をしていることがわかった。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 宮村(中村) 浩子,河村 拓馬,鈴木 喜雄,井戸村 泰宏,武宮 博,「4次元データ解析の ための2次元投影可視化」,情報処理学会論文誌, Vol. 55, No. 9, pp.2216-2224, (2014).
- 2) 宮村(中村) 浩子,「大規模科学技術データ解析のための情報可視化技術」、第4回情報可 視化セミナー,2013年9月,八王子.
- 3) 宮村(中村) 浩子,河村 拓馬,鈴木 喜雄,井戸村 泰宏,武宮 博,「4 次元数値シミュレ ーションデータ探索のための対話的情報可視化」,情報処理学会第 154 回グラフィクスと CAD 研究発表会,2014年2月,和光.
- 4) 宮村(中村) 浩子, 櫻井 大督, Hsiang-Yun Wu, 高橋 成雄, 井戸村 泰宏, 武宮 博, 「環 境放射線データの適応的可視化アプローチ」, 原子力学会秋の大会, 2014 年 9 月, 京都.

(4) 今後の利用予定:

様々な大規模データに適用実験していく。

5.16.15 原子カプラントのための3次元仮想振動台の構築

Three-dimensional Vibration Simulator for Nuclear Power Plant

西田 明美 高度計算機技術開発室

(1) 利用目的:

これまでに、3次元仮想振動台の要素技術の一つとして、構造物を構成部品単位で独立して扱い、部品間の連成を考慮することで巨大施設の全体解析を可能とする技術を提案し、組立構造解析コード FIESTA にて実現している。また、ネットワークに接続された複数の計算機のメモリおよび計算処理能力を合理的に利用する技術を開発し、単独の計算機の処理能力をはるかに超える大規模数値計算・大規模数値処理への適用性が期待されている並列分散環境を利用することで、3次元仮想振動台のシステムのフレームワークを実現している。

本解析の目的は、大型計算機の大規模ジョブクラスを利用し、中期計画の平成25年度計画「開発した弾塑性解析機能の妥当性を評価するために、機構内実験施設の地震観測データ等と計算結果を比較し、機能の確認と検証を行う。」を達成することにある。本解析の意義は、観測記録と解析結果の比較により、原子力施設の耐震性評価に対する3次元仮想振動台の弾塑性解析機能の有用性を示すことで、2011年東北地方太平洋沖地震以降急務となっている多様な地震動に対する原子力施設の耐震性評価の実施に対応可能な3次元仮想振動台を構築し、中期計画の達成に資することにある。

(2)利用内容•結果:

開発した弾塑性解析機能の妥当性を評価するために、機構内実験施設を対象とし、3月11日 に発生した東北地方太平洋沖地震時の地震波を入力とした応答解析を建設部と協力してすすめ、 弾塑性解析を完了。地震観測データや従来手法による計算結果との比較を実施し、実挙動の把握 及び壁のひび割れ箇所等の情報を取得した。

具体的には、

・計算対象として図1に示すような不整形な形状を有する機構内実験施設を設定し、地盤を含む 3次元モデルを構築した。弾塑性解析を実施するにあたり、コンクリート壁に鉄筋情報を設定し、 弾塑性解析時にコンクリートだけでなく鉄筋の影響を考慮できるようにした。

・構築したモデルのパラメータ感度解析を実施し、観測記録を再現するためには建屋・地盤間の 相互作用を表す地盤バネ、建屋の底部にあたる基礎版の剛性、減衰等の設定に留意する必要があ ることがわかった。

・観測記録及び従来法である質点系モデルとの比較を実施し、従来法では再現が困難な卓越周波数を3次元モデルにより捉えることに成功した。3者の比較図を図2に示す。

・解析結果より、4階付近の壁に最初にひびわれが発生した可能性があると推定され、担当部署

によるひびわれ現地調査の結果からも近傍の耐震壁でひび割れが確認された。これにより、弾塑 性解析におけるコンクリートのひずみの評価に対する有用性を示すことに成功した。



これらの成果により、平成25年度の年度計画を達成に導いた。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

ジャーナル論文と査読有国際会議論文等:(2報)

- 1) N. Nakajima, A. Nishida, Y. Suzuki, "Assembly Structural Analysis System", Transactions SMiRT22 (San Francisco, USA, August 18-23, 2013).
- 2) Akemi Nishida, Sayaka Igarashi, Shigehiro Sakamoto, Yasuo Uchiyama, Yu Yamamoto,Ken Muramatsu and Tsuyoshi Takada, "Characteristics of Simulated Ground Motions Consistent with Seismic Hazard, "Transactions SMiRT22 (San Francisco, USA, August 18-23, 2013).

口頭発表・講演等:(招待講演1件)

3) 西田明美、「原子力施設のための3次元仮想振動台の構築」、平成25年度高経年化技術評価 高度化事業委員会コンクリート建屋・システム安全検討会(東京、日本、2013年10月31 日)(招待講演).

(4) 今後の利用予定:

これまでに開発した3次元仮想振動台技術を用いて、弾塑性挙動を含む原子力施設の応答解析 を実施し、原子力施設の機器や配管の耐震余裕評価に資する結果データを取得する予定である。

5.16.16 観測地震波を用いた原子力格納容器内機器の地震応答解析

Seismic Response Analysis of Nuclear Containment Vessel Equipment using the Observed Seismic Waves

> 西田 明美 高度計算機技術開発室

(1) 利用目的:

本解析の大目的は、大型計算機の大規模ジョブクラスを利用し、原子力機構・システム計算科 学センターの第二次中期計画「原子力施設の耐震性評価に資するため、グリッド等先端計算機シ ステムを活用して、弾塑性解析技術を開発し、原子力施設全体において新基準地震動を用いた挙 動解析を可能とする」の達成に資することにある。本解析では、原子力機構大洗研究開発センタ ーの高温工学試験研究炉建屋(HTTR 建屋)の原子炉圧力容器および主冷却設備配管系構造を対 象として、3次元 FEM モデルによる地震時挙動を把握することを目的とし、東北地方太平洋沖 地震を入力とする時刻歴応答解析を実施する。本解析の意義は、これまでに開発してきた3次元 仮想振動台システムのフレームワークが、2011年東北地方太平洋沖地震以降急務となっている 多様な地震動に対する原子力施設の耐震性評価の実施に対応可能であることを検証することに ある。

(2)利用内容·結果:

機構内実験施設である高温工学試験研究炉の格納容器内主要機器である圧力容器を対象とし、 2011年3月11日に発生した東北地方太平洋沖地震時の地震波を入力とした応答解析を実施。地 震観測データや従来手法による計算結果との比較を実施し、実挙動を把握するためのデータを取 得した。圧力容器は3次元 FEM モデルであり、約6000万自由度である。

建屋解析から得られた地震応答を対象機器のすべての支持構造物端部より強制変位として入 カし、時刻歴応答解析を実施した。対象計算時間は主要動を含む5秒(500Step)とした。解析ソ ルバーは3次元仮想振動台のメインコードであるFIESTAを用いた。使用コア数は2096コア並 列および4098コア並列であり、使用コア数と計算時間の概要を表1に示す。解析結果ファイル は500STEPで合計1TBの容量となった。解析結果のうち、ミーゼス応力分布を図1に示す。

コア数	計算時間	モデル規模	STEP数	ファイル容量	出力成分	
(並列数)	(時間)		-	(GB)	-	
2096	92.31	6000万自由度	500	1000	変位・加速度・応力	
4098	171.43					

表1 使用コア数と計算時間概要

JAEA-Review 2014-043



(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

ジャーナル論文と査読有国際会議論文等:(1報)

1) N. Nakajima, A. Nishida, Y. Suzuki, "Assembly Structural Analysis System", Transactions SMiRT22 (San Francisco, USA, August 18-23, 2013).

口頭発表・講演等:(招待講演1件)

2) 西田明美、「原子力施設のための3次元仮想振動台の構築」、平成25年度高経年化技術評価 高度化事業委員会コンクリート建屋・システム安全検討会(東京、日本、2013年10月31 日)(招待講演).

(4) 今後の利用予定:

圧力容器以外の冷却設備配管系構造についても地震時挙動解析を実施し、原子力施設全体の3次元詳細モデルによる解析結果を取得する予定である。近い将来、得られた結果から耐震性評価 上着目すべき部位を抽出する技術と合わせて3次元仮想振動台技術のフレームワークの拡充を 図る予定である。

5.16.17 冷却設備配管系構造の3次元仮想振動台用解析データの組上げ

Assembly of Cooling Equipment and Piping Structures for Three-dimensional Vibration Simulator

> 西田 明美 高度計算機技術開発室

(1) 利用目的:

本解析の目的は、原子力施設の配管系構造の耐震余裕評価に資するため、大型計算機の大規模 ジョブクラスを利用して実プラントの冷却設備配管系構造の3次元メッシュデータを整備するこ とにある。具体的には、部品ごとに作成された対象構造物の3次元メッシュデータを原子力機構 で開発したソフトウェア CONNECT 等を用いて組上げ作業を行い、同じく原子力機構にて開発 したソフトウェア FIESTA を用いて並列処理による静解析を実施し、解析結果の妥当性を検証 する。

(2)利用内容•結果:

機構内実験施設である高温工学試験研究炉の冷却設備配管系構造(補助系および加圧水系)を 対象とし、部品ごとに作成された3次元メッシュデータを構造部位ごとに組上げ、それらをさら に組上げていくことで構造物全体を結合した。結合の精度を確認するために静解析を実施し、解 析が正常終了すること、得られた解析結果が応力、変位ともに連続的に妥当に分布していること などを確認した。冷却設備配管系構造は3次元 FEM モデルであり、補助系が約1900万自由度、 加圧水系が約550万自由度である。

本作業で実施した組上げデータ及び解析結果の例として、補助冷却設備配管系構造のモデルお よび解析結果の例を、それぞれ図1および図2に示す。図に示すように、配管系の支持構造物も 3次元 FEM モデルとして作成し、組み上げている。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

ジャーナル論文と査読有国際会議論文等:(1報)

1) N. Nakajima, A. Nishida, Y. Suzuki, "Assembly Structural Analysis System", Transactions SMiRT22 (San Francisco, USA, August 18-23, 2013).

口頭発表・講演等:(招待講演1件)

2) 西田明美、「原子力施設のための3次元仮想振動台の構築」、平成25年度高経年化技術評価 高度化事業委員会コンクリート建屋・システム安全検討会(東京、日本、2013年10月31 日)(招待講演).



図1 補助冷却設備配管系モデル

図2 解析結果の例

(4) 今後の利用予定:

今回組み上げた冷却設備配管系構造について地震時挙動解析を実施し、原子力施設全体の3次 元詳細モデルによる解析結果を取得する予定である。また、3次元詳細モデルによる耐震余裕評 価と、従来法による耐震余裕評価の結果の違いを定量的に示していく予定である。

5.16.18 並列版電磁波シミュレーション・プログラムの性能向上

Performance Improvement of the Parallelized Electromagnetic Simulation Program

> 伊奈 拓也 情報システム利用推進室

(1) 利用目的:

可視光と電波の境界に位置する電磁波であるテラヘルツ波は、光波と電波の性質を併せ持つこ とから、非金属や生体の非破壊検査、超高速通信、バイオテクノロジー、環境モニタリングなど の様々な用途が期待されている。このため、テラヘルツ発振装置の実用化に向けて高温超伝導体 素子によるテラヘルツ発振システムの設計を行うためのテラヘルツ発振システムの大規模数値 シミュレーションの高速化が求められている。

CCSE では、テラヘルツ発振システムの大規模数値シミュレーションの並列処理を行ってき た。効率の良い並列処理の実現には通信処理の最適化が必須であるが、今回は、一対一通信を片 側通信にすることで高速化を図る。すなわち、開発当初の自然なプログラミングにおいて一対一 通信が用いられていたが、この場合、同期処理が必要なため少数プロセスで性能が頭打ちとなっ てしまうことから、送信側が受信確認を待たない片側通信を実装することで高速化を図る。

(2)利用内容 結果:

テラヘルツ電磁波シミュレーションの計算領域は、真空領域とジャンクション領域から構成される。ジャンクション領域は高温超伝導体素子で構成されたテラヘルツ発振装置を模擬している。マルチスケール化された現在のバージョンでは、真空領域とジャンクション領域では異なる スケールの格子を用いるため、プロセス間で複雑な通信を必要とする。

初期のプログラムは、一対一通信を用いており、通信処理と計算処理を逐次処理していた。片 側通信を実装することで計算処理と通信処理のオーバーラップ制御を実現し、その結果、並列処 理性能が大幅に向上した。

マルチスケールテラヘルツ電磁波シミュレーション・プログラムにおいて、一対一通信を用いた場合と片側通信を用いた場合の高速化率の比較を図1に示す。計算は BX900 で行った。

片側通信を用いたプログラムでは 16 プロセスで頭打ちとなる高速化率が、片側通信では 256 プロセスまでスケールすることを確認した。

(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:

片側通信を用いて並列化することで 256 プロセスまでスケールするが並列化効率は 50%程度 である。平成 25 年度に作成したプログラムは同一プロセスに複数回の通信を行うため、プロセ ス数が増えることで通信処理に掛かる時間が増加する。同一プロセスの通信を一度の通信にまと めることで通信処理の効率化を行い並列化効率の改善を行う。



図1 並列化したマルチスケールテラヘルツ電磁波シミュレーション・プログラムの 高速化率。赤線が理想的な高速化率。青線が片側通信を用いたプログラムの 高速化率。紫線が一対一通信を用いたプログラムの高速化率。

5.16.19 原子力施設の耐震シミュレーションの開発

Development of a Seismic Simulation for an Entire Nuclear Plant

鈴木 喜雄

情報システム利用推進室、高度計算機技術開発室

(1)利用目的:

第2期中期計画「原子力施設の耐震性評価に資するため、グリッド等先端計算機システムを活 用して、弾塑性解析技術を開発し、原子力施設全体において新基準地震動を用いた挙動解析を可 能とする」において、原子力施設全体において新基準地震動を用いた挙動解析を可能とするため の研究開発を実施している。具体的には、機器の詳細な挙動を把握するために、地盤・建屋・機器(ビ ームモデル)の統合構造シミュレーションにより原子力施設全体の挙動解析を行い、ここから得 られる荷重情報を用いて、部品から機器(ソリッドモデル)の組立構造シミュレーションにより機 器の挙動解析を行えるフレームワーク(図1)を構築する。



図1 フレームワークの概念図

(2)利用内容•結果:

組立構造シミュレーションでは、多点拘束法のうち、自由度消去法と呼ばれる手法を用いている。本手法では、部品間接合面でメッシュ節点の位置が一致していない部品どうしを組み立てて 解析する場合に、部品間で主従(master-slave)関係(組立順序)を設定する必要があり、この設定 が結果の精度に影響を与えることは知られていたが、定量的な評価は十分に行われていなかっ た。そこで、この評価のため、まずは片持ち梁のモデル(図 2)を用いて、master-slave 接合面で のメッシュサイズ比が異なる7ケースに対して、それぞれメッシュ数を倍々に変更した3ケース を準備し、これら計 21ケース(表 1)を対象として、組立順序が結果にどのように影響するかを調 べた(要素種類は六面体 1 次)。図 3、図 4 に結果を示す。図 3 では、master-slave 接合面でのメ ッシュサイズ比が異なる7ケースに対して、最大メッシュサイズを変更した場合の相当応力(図 2 に示されている位置で計測)をプロットしている。またこれらの値から求まるメッシュサイズ 0 への外挿値(推定値)も合わせてプロットしている。さらに図 4 では、master-slave 接合面でのメ ッシュサイズ比を横軸に取り、それぞれ最大メッシュサイズ=0.5[m]での値と、その不確かさを エラーバーによりプロットしている。これらの結果から、master-slave 接合面でのメッシュサイ ズ比が1よりも大きな場合、すなわち、master 側接合面のメッシュ数が slave 側接合面のメッ シュ数よりも多い場合、1)接合面近傍で過度な応力が発生する、2)メッシュサイズ縮小による解 の収束が保証されない、3)不確かさが大きくなる、という問題が生じることを確認した。したが って、組立順序が結果に強く依存しており、これを正しく設定しなければならない。従来、 master-slave の設定は手動で行われていることが多かった。さらにここで実施しているような規 模の部品数を対象として設定する事例は見られない。そのため、複数部品の順序を最適に自動設 定できる機能を新しく開発することで、これらの問題解決を図った。



部品数:2 (master, slave) サイズ: 40 x 8 x 8 [m] ヤング率: 1.82e+11 [Pa] ポアソン比: 0.3

図2 片持ち梁のモデル

master/slave = 8

master/slave = 2

master/slave = 0.5

master/slave = 0.125

0.5

-master/slave = 4

1.0

max mesh size [m]

サイズ比が異なる7ケースにお

ける相当応力のメッシュサイズ

図 3 master-slave 接合面のメッシュ

1.5

-master/slave = 0.25

1.e+7

1.e+6

1.e+5

0.0

相当応力 [ba]

表1 21 ケースのメッシュ数

	最大メッシュサイズ 0.5[m]	最大メッシュサイズ1.0[m]	最大メッシュサイズ2.0[m]
master-slave 接合面	master/slave メッシュ数	master/slave メッシュ数	master/slave メッシュ数
でのメッシュサイズ比	(長さ×高さ×幅)	(長さ×高さ×幅)	(長さ×高さ×幅)
8	$20 \times 128 \times 128/20 \times 16 \times 16$	$20 \times 64 \times 64/20 \times 8 \times 8$	$20 \times 32 \times 32/20 \times 4 \times 4$
4	$20 \times 64 \times 64/20 \times 16 \times 16$	$20 \times 32 \times 32/20 \times 8 \times 8$	$20 \times 16 \times 16/20 \times 4 \times 4$
2	$20 \times 32 \times 32/20 \times 16 \times 16$	$20{\times}16{\times}16/20{\times}8{\times}8$	$20 \times 8 \times 8/20 \times 4 \times 4$
1	$20 \times 16 \times 16/20 \times 16 \times 16$	$20 \times 8 \times 8/20 \times 8 \times 8$	$20 \times 4 \times 4/20 \times 4 \times 4$
0.5	$20 \times 16 \times 16/20 \times 32 \times 32$	$20 \times 8 \times 8/20 \times 16 \times 16$	$20 \times 4 \times 4/20 \times 8 \times 8$
0.25	$20 \times 16 \times 16/20 \times 64 \times 64$	$20 \times 8 \times 8/20 \times 32 \times 32$	$20{\times}4{\times}4/20{\times}16{\times}16$
0.125	$20 \times 16 \times 16/20 \times 128 \times 128$	$20 \times 8 \times 8/20 \times 64 \times 64$	$20 \times 4 \times 4/20 \times 32 \times 32$





図 5、図 6 に開発した機能を主冷却設備の組立構造シミュレーション(静的弾性解析)に適用した結果を示す。本解析では主冷却設備は 698 部品で構成している(要素種類は六面体 1 次)。図 5 では、横軸に、機能を適用する前の組立順序が最適化されていない場合の各部品における slave 側接合面でのメッシュ数を、縦軸に、機能を適用し組立順序を最適化した場合の各部品における slave 側接合面でのメッシュ数をとっている。図 6 では、横軸に、適用前の組立順序で解析した 場合の相当応力を、縦軸に、適用後の組立順序で解析した場合の相当応力をとっている。これら の図から、適用前と比べて適用後には、slave 側接合面でのメッシュ数が増加しており、応力値 が低減されていることが確認できる。この結果は、片持ち梁を対象に評価した結果からの類推に より、組立順序の最適化が正しく実施され、相当応力の値が改善していると考えることができる。

ただし、これらの図において、適用前と比べて適用後にメッシュ数が減少しており、改悪して いると思われる部品が一部存在している。これは、複数部品が接合し、master-slave のメッシュ 数の関係が巡回している場合(例えば、A、B、C の 3 部品があり、A と B の接合面では A の方 がメッシュ数が多く、BとCの接合面ではBの方がメッシュ数が多く、CとAの接合面ではC の方がメッシュ数が多い場合など)に、自動的に設定できないことに起因している。この回避に は、メッシュを生成し直すか、対象となる部品を分割し接合面を分ける方法などが考えられる。



接合面メッシュ数の比較

比較(最大値で規格化している)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

査読無論文

1) 中島 憲宏, 西田 明美, 松原 仁, 羽間 収, 鈴木 喜雄, 沢 和弘, 飯垣 和彦, "Assembly structure analysis system", Transactions of 22nd International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-22) (CD-ROM)(2013).

口頭発表

- 2) 中島 憲宏, 西田 明美, 川上 義明, 岡田 達夫, 鶴田 理, 鈴木 喜雄, 「組立構造解析手法に よる部品集積解析」 日本原子力学会 2013 年秋の年会(八戸、日本、2013 年 9 月 3 日~5 日).
- 3) 鈴木 喜雄, 坂本 健作, 中島 憲宏, 「巨大地震下における原子力施設全体の挙動解析」 日 本原子力学会2013年秋の大会(八戸、日本、2013年9月3日~5日).

(4) 今後の利用予定:

平成 26 年度は、平成 25 年度に引き続き、第2 期中期計画の達成に向け、原子力施設の挙動 解析を可能とするための技術開発を行う。

6. おわりに

本報告集には、原子力機構における多分野にわたる大型計算機システムを利用した優れた研究 成果がまとめられている。これらの研究成果は、研究者の探究心と努力によることは勿論ではあ るが、原子力機構の大型計算機システムが研究開発の現場において必要不可欠であることを改め て示している。これら大型計算機システムへの計算需要は今後も増大していく傾向にある一方、 現大型計算機システムの計算機資源は、大型計算機利用委員会への大口利用課題申請において募 集枠の2倍近くの申請があるなど、原子力機構の計算需要に対して大幅に不足している。また、 コアの利用状況は90.7%(4年間平均)、94.0%(平成25年度)と極めて高い利用率で推移し、 ジョブの実行待ち時間は増大しており、処理能力の限界に達している。この計算機資源不足を改 善するため、情報システム管理室では、現大型計算機システムのリース期間満了に合わせ、新シ ステムへ更新すべく調達手続きを進めている。

本報告集をまとめるにあたり、情報システム管理室に編集ワーキンググループを設置した。本 ワーキンググループでは平成25年度における大型計算機システムの利用状況を調査し、利用コア 時間の多かった利用者に報告書作成を依頼した。利用者から提出された報告書を編集・校正し、 本報告集が完成した。多忙にもかかわらず報告書を作成して頂いた利用者の皆様並びに本報告集 作成にご協力を頂いた関係者各位にこの場を借りて感謝申し上げる。

本報告集が、原子力機構における大型計算機システムを利用した研究成果のさらなる増進に、 また分野を越えた情報共有による更なる研究開発の発展に役立つことを期待している。

平成 26 年 9 月

編集ワーキンググループ
 リーダー:久米 悦雄
 スタッフ:清水 大志、庄司 誠、菅谷 寿男
 事務局 :坂本 健作、桧山 一夫、伊巻 頼子
付録

付録A

	BX900			FX1			
	バッチ 処理件数	会話 処理件数	コア 時間(H)	バッチ 処理件数	会話 処理件数	コア 時間(H)	
4月	14,987	29,731	10,121,808	798	118	595,490	
5 月	14,921	15,054	11,813,057	497	75	753,088	
6月	15,774	22,895	11,341,170	1,261	120	744,471	
7月	16,170	29,394	12,064,271	1,048	116	824,918	
8月	16,069	5,639	10,288,730	991	128	705,195	
9月	14,363	5,364	11,233,158	1,061	211	703,625	
10 月	17,748	6,263	11,942,687	1,180	118	820,820	
11 月	25,150	5,919	11,480,468	920	133	821,344	
12 月	16,736	5,993	10,704,503	1,074	204	763,980	
1月	19,111	6,203	12,068,120	1,647	247	847,536	
2 月	15,607	5,920	10,865,287	1,423	161	772,781	
3月	18,297	5,540	12,022,963	934	142	854,794	
合計	204,933	143,915	135,946,222	12,834	1,773	9,208,042	

表 A.1 平成 25 年度原子力機構スーパーコンピュータシステム利用実績

付録B

	BX900	FX1/ M9000	UNIX (Linux)	汎用機	パソコン	network	その他 (利用一般)	合計
4月	44	4	1	0	8	0	12	69
5 月	40	0	6	1	8	1	11	67
6月	54	0	4	0	3	0	17	78
7月	45	0	0	1	2	1	7	56
8月	41	1	0	0	3	0	8	53
9月	34	1	1	0	4	1	10	51
10 月	50	3	2	0	5	1	5	66
11 月	42	1	4	0	2	3	4	56
12 月	31	2	0	0	3	1	14	51
1月	51	1	4	0	7	3	6	72
2 月	28	4	0	1	4	2	12	51
3月	18	0	4	0	9	3	10	44
合計	478	17	26	3	58	16	116	714

表 B.1 平成 25 年度利用相談件数(可視化を除く)

表 B.2 平成 25 年度可視化相談件数

1.	可視化相談(技術支援)
1	BX900 可視化ノード及び遠隔可視化用表示装置可視化相談・技術支援(108 件)
2	PC 版 MicroAVS インストール支援(26 件)
3	PC 版 AVS/Express インストール支援(5 件)
4	EnSight DR インストール支援(4 件)

2. 可視化ツール提供等

- ① neu2ucd 出力データ時系列データの鳥瞰図作成機能
- ② Abaqus inp ファイル対応エッジサイズ抽出ツール
- ③ EnSight How To マニュアルの作成
- ④ Abaqus inp ファイルの六面体要素分割ツール

著者名別 論文索引

A-Z

Andreas, Bierwage	111
Gu, Bo	39
Mihalache, Ovidiu	176
Xu, Zhuo	39

あ

浅川	健一	167
朝倉	伸幸	120
安部	諭	29
天野	健治	160

ł١

池田	隆司	
池部	仁善	
石垣	将宏	
石川	正男	
石田	恒	
板倉	充洋	
伊藤	啓	
井戸村	† 泰宏	
伊奈	拓也	
今井	康友	
岩瀬	広	65
岩元	洋介	

う

内堀	昭寛	 	147,	150
宇都野	穣	 		37

お

太田 幸	宏	200
------	---	-----

大西	直文82
大西	弘明39
大野	修司143
大野	純179
大山	卓也160
小川	達彦65
奥村	雅彦190
乙部	智仁
尾上	博則160

か

甲斐	哲也171
勝又	源七郎
河村	拓馬219
河村	拓己140

き

菊池	圭一	. 167
吉氏	崇浩	. 181
城戸	健太朗	33

<

久語	輝彦	72
黒崎	譲	30

٢

河野	秀俊	
後藤	実	
小林	孝徳	
小林	恵太	
菰田	宏	

さ

櫻井	真治	104
櫻庭	俊	94, 97
佐藤	聡	118
佐藤	大樹	70
佐藤	達彦	63, 65

ι

篠原	武尚	168
柴田	光彦	57
嶋田	恭彦	129
清水	大志	160
焦 利	芳	57

す

杉江	達夫	
杉本	貴則	
鈴木	隆博	132
鈴木	貴行	51
鈴木	知史	42
鈴木	通人	214
鈴木	喜雄	233
鈴土	知明	212

せ

瀬川		麻里子	46
関	洋	兰治	.134

そ

曽我	彰152	

た

高瀬	和之	57, 60
高瀬	雄一	132
高田	弘	171

高橋	一彦	
高橋	幸司	
竹内	竜史	
武田	和雄	
田中	正暁	
田辺	豪信	
谷 啓	د	

っ

都留	智仁
鶴岡	卓也160

て

寺田	敦彦	174
----	----	-----

と

堂田	哲広137
徳永	晋介120
飛田	吉春157
豊岡	淳一157

な

 永井
 仲田
 永武
 中塚
 中村
 中村
 中村
 中山

に

仁井田	浩二	65
錦野	将元	82
西田	明美2	25, 227, 229
西村	正弘	137

は

橋本	慎太郎	65
橋本	雅史	184
原田	正英	171

રુ

深谷	裕司	76
福島	昌宏	74

ほ

星野	一生120	ļ
細見	達男160	

ま

前川	恵輔	160
前山	伸也	114
町田	昌彦	206
松田	規宏	23, 65
松永	岡山	106
松本	淳	
丸山	修平	

み

隆智	165
丈晴	57, 60
浩子	222
	隆智 丈晴 浩子

む

村松	壽晴	181
室伏	昭	120

Ł

森	道康	39
守田	1 利昌	
森林	、健悟	

Ф

山口	正剛193
山下	晋57
山田	進195
山野	秀将154

よ

横田	光史91
横山	啓一184
吉田	啓之51

ŋ

劉	維	57
100	1.122 ·	••

わ

若月	琢馬132
和田	明154
渡辺	正31

This is a blank page.

表 1. SI 基本単位					
甘大昌	SI 基本単位				
盔半里	名称	記号			
長さ	メートル	m			
質 量	キログラム	kg			
時 間	秒	s			
電 流	アンペア	Α			
熱力学温度	ケルビン	Κ			
物質量	モル	mol			
光 度	カンデラ	cd			

表 2. 基本単位を	2用いて表されるSI組立単位	立の例
如去量	SI 基本単位	
和立里	名称	記号
面積	平方メートル	m ²
体 積	立法メートル	m^3
速 さ , 速 度	メートル毎秒	m/s
加 速 度	メートル毎秒毎秒	m/s^2
波 数	毎メートル	m ⁻¹
密度,質量密度	キログラム毎立方メートル	kg/m ³
面積密度	キログラム毎平方メートル	kg/m ²
比 体 積	立方メートル毎キログラム	m ³ /kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m^2
磁界の強さ	アンペア毎メートル	A/m
量濃度 ^(a) ,濃度	モル毎立方メートル	mol/m ⁸
質量濃度	キログラム毎立法メートル	kg/m ³
輝 度	カンデラ毎平方メートル	cd/m ²
屈 折 率 ^(b)	(数字の) 1	1
比透磁率(b)	(数字の) 1	1
(a) 量濃度 (amount conce	entration)は臨床化学の分野では	物質濃度
(substance concentration	on) ともよげれる	

(b) これらは無次元量あるいは次元1をもつ量であるが、そのことを表す単位記号である数字の1は通常は表記しない。

表3. 固有の名称と記号で表されるSI組立単位

			SI 租工单位	
組立量	名称	記号	他のSI単位による 表し方	SI基本単位による 表し方
平 面 負	自 ラジアン ^(b)	rad	1 (в)	m/m
立 体 自	コステラジアン ^(b)	sr ^(c)	1 (b)	$m^{2/}m^2$
周 波 数	なヘルツ ^(d)	Hz	-	s ⁻¹
力 力	ニュートン	Ν		m kg s ⁻²
压力,応力	パスカル	Pa	N/m ²	m ⁻¹ kg s ⁻²
エネルギー,仕事,熱量	± ジュール	J	N m	$m^2 kg s^2$
仕事率,工率,放射,	ミワット	W	J/s	m ² kg s ⁻³
電荷、電気量	と クーロン	С		s A
電位差(電圧),起電力	ゴボルト	V	W/A	$m^2 kg s^{-3} A^{-1}$
静電容量	コアラド	F	C/V	$m^{-2} kg^{-1} s^4 A^2$
電気抵抗	1オーム	Ω	V/A	$m^2 kg s^{-3} A^{-2}$
コンダクタンス	、ジーメンス	s	A/V	$m^{-2} kg^{-1} s^3 A^2$
磁 身	E ウエーバ	Wb	Vs	$m^2 kg s^2 A^1$
磁東密厚	E テスラ	Т	Wb/m ²	$\text{kg s}^{2} \text{A}^{1}$
インダクタンス	ペーンリー	Н	Wb/A	$m^2 kg s^{-2} A^{-2}$
セルシウス温厚	モ セルシウス度 ^(e)	°C		K
光 剪	ミルーメン	lm	cd sr ^(c)	cd
照月	E ルクス	lx	lm/m ²	m ⁻² cd
放射性核種の放射能 ^(f)	ベクレル ^(d)	Bq		s ⁻¹
吸収線量, 比エネルギー分与, カーマ	グレイ	Gy	J/kg	$m^2 s^{-2}$
線量当量,周辺線量当量,方向 性線量当量,個人線量当量) シーベルト ^(g)	Sv	J/kg	$m^2 s^{-2}$
酸素活性	も カタール	kat		s ⁻¹ mol

酸素活性(カタール) kat [s¹ mol
 (a)SI接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはや ュヒーレントではない。
 (b)ラジアンとステラジアンは数字の1に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。 実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号である数字の1は明 示されない。
 (a)測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。
 (a)へルツは周頻現象についてのみ、ペラレルは放射性核種の統計的過程についてのみ使用される。
 (a)やレシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。やレシウス度とケルビンの
 (b)からさは同一である。したがって、温度差や理慮問摘を決す数値はどもらの単位で表しても同じである。
 (b)放射性核種の放射能(activity referred to a radionuclide) は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。
 (g)単位シーベルト(PV,2002,70,205) についてはCIPM動音2 (CI-2002) を参照。

表4.単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

	S	I 組立単位	
組立量	名称	記号	SI 基本単位による 表し方
粘度	パスカル秒	Pa s	m ⁻¹ kg s ⁻¹
カのモーメント	ニュートンメートル	N m	m ² kg s ⁻²
表 面 張 九	ニュートン毎メートル	N/m	kg s ⁻²
角 速 度	ラジアン毎秒	rad/s	m m ⁻¹ s ⁻¹ =s ⁻¹
角 加 速 度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s^2	$m m^{-1} s^{-2} = s^{-2}$
熱流密度,放射照度	ワット毎平方メートル	W/m ²	kg s ⁻³
熱容量、エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	$m^2 kg s^{-2} K^{-1}$
比熱容量, 比エントロピー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	$m^2 s^{-2} K^{-1}$
比エネルギー	ジュール毎キログラム	J/kg	$m^2 s^{-2}$
熱伝導率	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s ⁻³ K ⁻¹
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ⁻¹ kg s ⁻²
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	m kg s ⁻³ A ⁻¹
電 荷 密 度	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ⁻³ sA
表 面 電 荷	「クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² sA
電 束 密 度 , 電 気 変 位	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² sA
誘 電 率	ファラド毎メートル	F/m	$m^{-3} kg^{-1} s^4 A^2$
透磁 率	ペンリー毎メートル	H/m	m kg s ⁻² A ⁻²
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mol	$m^2 kg s^2 mol^1$
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	$m^2 kg s^{-2} K^{-1} mol^{-1}$
照射線量(X線及びγ線)	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ sA
吸収線量率	グレイ毎秒	Gy/s	$m^{2} s^{3}$
放 射 強 度	ワット毎ステラジアン	W/sr	$m^4 m^{-2} kg s^{-3} = m^2 kg s^{-3}$
放射輝度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	$W/(m^2 sr)$	m ² m ⁻² kg s ⁻³ =kg s ⁻³
酸素活性濃度	カタール毎立方メートル	kat/m ³	m ⁻³ e ⁻¹ mol

表 5. SI 接頭語							
乗数	接頭語	語 記号 乗数		接頭語	記号		
10^{24}	ヨ タ	Y	10 ⁻¹	デシ	d		
10^{21}	ゼタ	Z	10 ⁻²	センチ	с		
10^{18}	エクサ	E	10 ⁻³	ミリ	m		
10^{15}	ペタ	Р	10 ⁻⁶	マイクロ	μ		
10^{12}	テラ	Т	10 ⁻⁹	ナノ	n		
10^{9}	ギガ	G	10^{-12}	ピ コ	р		
10^{6}	メガ	M	10^{-15}	フェムト	f		
10^3	+ 1	k	10 ⁻¹⁸	アト	а		
10^{2}	ヘクト	h	10^{-21}	ゼプト	z		
10^{1}	デカ	da	10^{-24}	ヨクト	v		

表6.SIに属さないが、SIと併用される単位					
名称	記号	SI 単位による値			
分	min	1 min=60s			
時	h	1h =60 min=3600 s			
日	d	1 d=24 h=86 400 s			
度	٥	1°=(п/180) rad			
分	,	1'=(1/60)°=(п/10800) rad			
秒	"	1"=(1/60)'=(п/648000) rad			
ヘクタール	ha	1ha=1hm ² =10 ⁴ m ²			
リットル	L, 1	1L=11=1dm ³ =10 ³ cm ³ =10 ⁻³ m ³			
トン	t	$1t=10^{3}$ kg			

表7. SIに属さないが、SIと併用される単位で、SI単位で

衣される剱値が美敏的に侍られるもの					
	名	称		記号	SI 単位で表される数値
電	子 オ	ベル	ŀ	eV	1eV=1.602 176 53(14)×10 ⁻¹⁹ J
ダ	ル	ŀ	\sim	Da	1Da=1.660 538 86(28)×10 ⁻²⁷ kg
統-	一原子	質量単	单位	u	1u=1 Da
天	文	単	位	ua	1ua=1.495 978 706 91(6)×10 ¹¹ m

表8. SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

名称	記号	SI 単位で表される数値
バール	bar	1 bar=0.1MPa=100kPa=10 ⁵ Pa
水銀柱ミリメートル	mmHg	1mmHg=133.322Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1nm=100pm=10 ⁻¹⁰ m
海 里	Μ	1 M=1852m
バーン	b	$1 \text{ b}=100 \text{ fm}^2=(10^{\cdot 12} \text{ cm})2=10^{\cdot 28} \text{m}^2$
ノット	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネーパ	Np	SI単位しの粉信的な間径け
ベル	В	対数量の定義に依存。
デジベル	dB -	

表9. 固有の名称をもつCGS組立単位

名称	記号	SI 単位で表される数値		
エルグ	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J		
ダイン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N		
ポアズ	Р	1 P=1 dyn s cm ⁻² =0.1Pa s		
ストークス	St	$1 \text{ St} = 1 \text{ cm}^2 \text{ s}^{\cdot 1} = 10^{\cdot 4} \text{ m}^2 \text{ s}^{\cdot 1}$		
スチルブ	$^{\rm sb}$	$1 \text{ sb} = 1 \text{ cd } \text{ cm}^{\cdot 2} = 10^4 \text{ cd } \text{m}^{\cdot 2}$		
フォト	ph	1 ph=1cd sr cm ⁻² 10 ⁴ lx		
ガル	Gal	$1 \text{ Gal} = 1 \text{ cm s}^{-2} = 10^{-2} \text{ ms}^{-2}$		
マクスウェル	Mx	$1 \text{ Mx} = 1 \text{ G cm}^2 = 10^{-8} \text{Wb}$		
ガウス	G	1 G =1Mx cm ⁻² =10 ⁻⁴ T		
エルステッド ^(c)	Oe	1 Oe ≙ (10 ³ /4π)A m ⁻¹		
(c) 3元系のCGS単位系とSIでは直接比較できないため、等号「 ▲ 」				

は対応関係を示すものである。

	表10. SIに属さないその他の単位の例					
	名称			記号	SI 単位で表される数値	
キ	ユ	IJ	ĺ	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq	
$\scriptstyle u$	ン	トゲ	\sim	R	$1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{C/kg}$	
ラ			ド	rad	1 rad=1cGy=10 ⁻² Gy	
$\scriptstyle u$			L	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv	
ガ		\sim	7	γ	1 γ =1 nT=10-9T	
フ	T.	ル	"		1フェルミ=1 fm=10-15m	
メー	ートル	系カラ	ット		1メートル系カラット = 200 mg = 2×10-4kg	
ŀ			N	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa	
標	準	大 気	圧	atm	1 atm = 101 325 Pa	
力		IJ	ļ	cal	1cal=4.1858J(「15℃」カロリー), 4.1868J (「IT」カロリー) 4.184J(「熱化学」カロリー)	
3	カ	17	~		$1 = 1 = 10^{-6}$ m	