JAEA-Review 2015-028 DOI:10.11484/jaea-review-2015-028



平成26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 FY2014 (April 1, 2014 – March 31, 2015)

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

KOVIDN

February 2016

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは国立研究開発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。

国立研究開発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大字白方 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, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2016

平成 26 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

(2015年9月9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。

大型計算機システムは、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利用された。本報告は、平成 26 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大字白方 2-4

i

Summaries of Research and Development Activities by using Supercomputer System of JAEA in FY2014 (April 1, 2014 – March 31, 2015)

Information Technology Systems' Management and Operating Office

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

(Received September 9, 2015)

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.

As shown in the fact that 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.

In FY2014, the system was used for R&D aiming to restore Fukushima (nuclear plant decommissioning and environmental restoration) as a priority issue, as well as for JAEA's major projects such as Fast Reactor Cycle System, Fusion R&D and Quantum Beam Science.

This report presents a great number of R&D results accomplished by using the system in FY2014, 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 26 年度における計算機利用実績	. 7
	3.1 システム稼働率・利用率	. 7
	3.2 大型計算機システムの利用者数	. 8
	3.3 大型計算機システムの利用実績	. 8
	3.4 福島復興に係る対応での利用実績	. 9
4.	大型計算機システムの利用支援	11
	4.1 計算機利用における支援	12
	4.1.1 利用相談	12
	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)	12
	4.1.3 プログラム最適化チューニング	17
	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)	19
5.	大型計算機システム利用による研究成果	20
	5.1 安全研究・防災支援部門 安全研究センター	20
	5.1.1 シビアアクシデント時の格納容器内密度成層化挙動解析	20
	5.1.2 浮遊液滴の回転と変形	22
	5.1.3 水素静的触媒式再結合器 (PAR) の作動を伴う大規模空間内熱流体解析	24
	5.1.4 航空機モニタリングの地形による線量評価への影響評価	27
	5.2 大洗研究開発センター	29
	5.2.1 高温ガス炉 HTTR の 1 次ヘリウムガスの混合挙動	29
	5.3 核燃料サイクル工学研究所	30
	5.3.1 輸送容器の許認可申請に係る安全解析コード整備	30
	5.4 核融合研究開発部門 那珂核融合研究所	31
	5.4.1 JT-60SA のダイバータ熱負荷のシミュレーション	31
	5.4.2 ELM 制御コイル摂動磁場の高エネルギーイオン閉じ込めに与える影響の研究	33
	5.4.3 ITER 水平ポート EC ランチャーの核解析	34

5.4.4	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	. 36
5.4.5	ITER 周辺トムソン散乱計測装置における集光光学系の遮蔽設計のための核解	
	析	. 39
5.4.6	モンテカルロコード MCNP を用いた ITER 用 IR サーモグラフィーのための	
	核解析	. 42
5.4.7	ITER 用周辺トムソン散乱計測装置のレーザー入射システムの遮蔽設計のため	
	の核解析	. 45
5.4.8	微小球充填体内識別コードの開発整備	. 48
5.5 核菌	融合研究開発部門 六ヶ所核融合研究所	. 51
5.5.1	ITER/TBM 遮蔽解析	. 51
5.6 原-	子力科学研究所	. 53
5.6.1	FCA 燃料貯蔵庫水没時における臨界性評価	. 53
5.6.2	加速器 BNCT 施設の遮蔽設計計算	. 55
5.6.3	JRR-4の廃止措置における放射化放射性物質の評価に必要な中性子束分布の	
	解析	. 57
5.7 原	子力科学研究部門 J-PARC センター	. 58
5.7.1	中性子散乱における試料吸収補正計算コードの並列化	. 58
5.7.2	核変換実験施設 TEF-T 第二ターゲットの成立性検討及び粒子輸送計算用詳細	
	モデルの作成	. 60
5.8 関西	西光科学研究所	. 62
5.8.1	C60フラーレンのセシウム吸着材としての可能性の理論計算	. 62
5.9 原-	子力科学研究部門 原子力基礎工学研究センター	. 65
5.9.1	局所域高分解能大気拡散予測システムの開発に向けて	. 65
5.9.2	福島第一原子力発電所から放出された ¹³³ Xe の放出量に関する検討	. 67
5.9.3	PHITS のスレッド並列化	. 70
5.9.4	環境放射線核種からの外部被ばく線量換算係数の評価	. 73
5.9.5	粒子・重イオン輸送計算コード PHITS の高度化に関する研究	. 76
5.9.6	複数の PHITS 出力ファイルを統合する機能の開発	. 79
5.9.7	PHITS ユーザー入力支援ソフトウェアの作成	. 82

5.9.8	量子分子動力学シミュレーションモデルによるフラグメント生成シミュレー
	ション
5.9.9	X線分光法と計算科学による土壤中セシウムの評価
5.9.10	JAWAS-N における中性子束分布の解析 90
5.9.11	欠陥挙動の力学と熱力学に関するマルチスケール解析
5.9.12	界面追跡法に基づく二相流-構造連成解析手法開発
5.9.13	TPFIT 界面追跡法に基づく二相流-構造連成解析手法開発
5.9.14	超臨界圧軽水炉の乱流熱伝達の促進に関する数値シミュレーション101
5.9.15	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 104
5.9.16	溶融解析コード POPCORN の並列化及び可視化手法の整備107
5.9.17	水位低下時の炉内外自然対流挙動に関する研究109
5.9.18	溶融燃料落下挙動評価手法開発に関する研究111
5.10 原-	子力科学研究部門 原子力水素・熱利用研究センター114
5.10.1	有害度発生を抑える高温ガス炉の提案と自己遮蔽効果を利用した最適設計114
5.11 原-	子力科学研究部門 先端基礎研究センター118
5.11.1	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118
5.12 原	子力科学研究部門 高崎量子応用研究所121
5.12.1	粒子線治療における低エネルギー光子によるビームモニタリング手法の検討.121
5.13 原-	子力科学研究部門 量子ビーム応用研究センター123
5.13.1	放射線による DNA 損傷のシミュレーション研究123
5.13.2	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126
5.13.3	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129
5.13.4	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.132
5.13.5	Dynamic Stark 効果による同位体選択的光解離の量子制御
5.13.6	高強度レーザーによる pump-probe 実験に向けた数値計算 137
5.13.7	レーザーを用いたプロトン生成の PIC シミュレーション140
5.13.8	デルブリュック散乱の精密な計算開発143
5.13.9	物質における構造形成シミュレーションプログラム145
5.13.10	中性子散乱データの3次元画像化プログラムの機能拡張148

5.14	高速	を炉研究開発部門 次世代高速炉サイクル研究開発センター
5.1^{-1}	4.1	燃料集合体熱流動詳細解析コード SPIRAL の開発整備151
5.1^{-1}	4.2	燃料集合体熱流動詳細解析コード SPIRAL による 3 本ピン模擬燃料集合体水
		流動試験解析
5.1^{-1}	4.3	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検証157
5.1^{-1}	4.4	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160
5.1^{-1}	4.5	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163
5.1^{-1}	4.6	連続エネルギーモンテカルロコード MVP を用いた FBR 炉心の出力分布 166
5.1^{-1}	4.7	FCA VIII-2 燃料スランピング実験による SIMMER-III 及び SIMMER-IV の検
		証
5.1^{-1}	4.8	JSFR ホットレグ配管を模擬したシングルエルボ配管流れ実験の U-RANS
		シミュレーション
5.15	高速	を炉研究開発部門 もんじゅ運営計画・研究開発センター
5.1	5.1	<u> 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</u>
		ーション
5.16	敦賀	員事業本部176
5.1	6.1	SPLICE コードによるレーザー溶断挙動の解析
5.17	バッ	yクエンド研究開発部門179
5.1'	7.1	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
		高速化・並列化(平成 26 年度)179
	1	
5.18	福島	
5.13	8.1	FLUENT: 福島原発汚染水処埋関連の解析181
5 10	3/7	マテム計賞利受センター 183
5.10	0 1	(アン) (アン) (アン) (アン) (アン) (アン) (アン) (アン)
5.10	9.1 9.9	9次元河川シミュレーションコードに上る大林ダム内の浮遊砂の振る舞いの調
0.1	0.4	
5 10	93	ユージョン・100 非従来型超伝導体の不純物耐性の理論解析 188
5.10	9.5 9.4	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 191
5.10	9.5	第二十三次和三次員シージュアージョン 191 第一百冊計算に上ス百子力材料化化機構の研究 104
0.1	0.0	31 小子口 弁にる つか 1 / 1/1/17 刀口(欧田*279) /

	5.19.6	超伝導及び磁性における多軌道効果	196
	5.19.7	銅酸化物高温超伝導体固有ジョセフソン接合列におけるテラヘルツ発振シミ	
		ュレーション	198
	5.19.8	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	201
	5.19.9	六方晶軽合金における転位と溶質元素の第一原理計算	205
	5.19.10	bcc 遷移金属の低温における He 脆化傾向	207
	5.19.11	GT5D コードの高度化	210
	5.19.12	遠隔可視化システム PBVR の開発	212
	5.19.13	原子力プラントのための3次元仮想振動台の構築	215
	5.19.14	観測地震波を用いた機器の地震応答解析	218
	5.19.15	並列版電磁波シミュレーション・プログラムの性能向上	220
	5.19.16	原子力施設の耐震シミュレーションの開発	221
6.	おわりに.		224
付	録		225
著者	名別 論	文索引	227

6.

付

Contents

1.	Intro	oduct	tion	1
2.	Supe	ercon	nputer System of JAEA	4
3.	Com	pute	r Usage Records in FY2015	7
	3.1	Ava	ailability and Utilization Rate	7
	3.2	Nu	mber of Users	8
	3.3	Cor	nputer Time	8
	3.4	Tin	ne used for the Issue of Fukushima Restoration	9
4.	User	Supp	ort of Supercomputer System of JAEA	.11
	4.1	Sup	oport for the Use of Supercomputer System of JAEA	12
	4.1	.1	Help Desk	12
	4.1	.2	Program Development, Porting, Data Visualization (Software Development	
			and Maintenance)	12
	4.1	.3	Program Optimization Tuning	17
	4.2	Tra	ining for Computer Usage Techniques (Tutorials, Seminars)	19
5.	Rese	arch	and Development Activity by using Supercomputer System of JAEA	20
	5.1	Sec	tor of Nuclear Safety Research and Emergency Preparedness	
		Nu	clear Safety Research Center	20
	5.1	.1	CFD Analysis on Density Stratification in a Containment Vessel during a	
			Severe Accident	20
	5.1.2		Rotation and Deformation of a Levitated Droplet	22
	5.1.3		Thermofluid Dynamic Analysis in Large Volume with Activation of PAR	
			(Passive Autocatalytic Recombiner) for Hydrogen	24
	5.1	.4	Effects of Geography on Dose Evaluation in Airborne Survey	27
	5.2	Oa	rai Research and Development Center	29
	5.2	.1	Mixing Behavior of Primary Helium Gas in High Temperature Gas-cooled	
			Reactor HTTR	29

5.3	Ν	uclear Fuel Cycle Engineering Laboratories	. 30
5.3	3.1	Development of Safety Analysis Code Relating to Licensing Application of	
		the Transport Container	. 30
- 4	a.		
5.4	Sec	tor of Fusion Research and Development	0.1
_	Na	ka Fusion Institute	. 31
5.4	4.1	Simulation Study of Heat Load in J/1-60SA Divertor	. 31
5.4	4.2	Effect of the Magnetic Perturbation due to ELM Coils on Energetic ion	
		Confinement	. 33
5.4	4.3	Nuclear Analysis of ITER Equatorial EC Launcher	. 34
5.4	1.4	Neutronic Analysis for Detail Design of the Microfission Chamber for ITER	
		Neutron Flux Monitor	. 36
5.4	4.5	Neutronic Analysis for Radiation Shield of the Collection Optics for ITER	
		Edge Thomson Scattering System	. 39
5.4	4.6	Neutronic Analysis for ITER Divertor IR Thermography using Monte Carlo	
		Code MCNP	. 42
5.4	1.7	Neutronic Analysis for the Design of Radiation Shield of the Laser Injection	
		System of ITER Edge Thomson Scattering System	. 45
5.4	1.8	Development of Discrimination System for Structural Material in Pebble	
		Bed	. 48
5.5	Sec	ctor of Fusion Research and Development	
	Ro	kkasho Fusion Institute	51
5.5	5.1	Shielding Analysis of ITER/TBM	. 51
F 0	NT		F 0
5.6	INU	E la transfer de la companya de la compa	. 53 7 0
5.6	5.1 	Evaluation of Criticality in FCA Fuel Storage at Submergence	. 53
5.6	5.2	Shielding Design of Accelerator-based BNCT Facility at INMRC	. 55
5.6	5.3	Analysis of Neutron Flux Distribution Required for Evaluating Radioactive	
		Inventory in Decommissioning of JRR-4	. 57
5.7	Sec	ctor of Nuclear Science Research	
	J-F	PARC Center	. 58
5.7	7.1	Parallel Processing of the Calculation Code for the Neutron Sample	
		Absorption on MLF, J-PARC	. 58

5.7.2		Feasibility Study of Second Target of TEF-T and Its Detailed Modeling for		
		Particle Transport Calculation		
5.8	Ka	nsai Photon Science Institute		
5.	8.1	Theoretical Study of Absorption of Cs and CsI to Fullerenes		
5.9	Sec	ctor of Nuclear Science Research		
	Nu	clear Science and Engineering Center		
5.	9.1	Towards Development of Local-scale Atmospheric Dispersion Prediction		
		System		
5.	9.2	Investigation on the Release Amount of ¹³³ Xe from the Fukushima Daiichi		
		Nuclear Power Station		
5.	9.3	Thread Parallelization of PHITS		
5.	9.4	Evaluation of Dose-conversion Coefficients for External Exposure to		
		Radionuclides Distributed in Environment		
5.	9.5	Development of Particle and Heavy Ion Transport Code System PHITS 76		
5.	9.6	Development of Function for Integrating Tally Results Obtained by PHITS . 79		
5.	9.7	Development of Software for Supporting the PHITS Input		
5.	9.8	Simulation of Fragmentation by Quantum Molecular Dynamics Model		
5.	9.9	Evaluation on Cs in Soils using X-ray Spectroscopy and DFT Calculation 87		
5.	9.10	Analysis of Neutron Flux Distributions in JAWAS-N		
5.	9.11	Multiscale Simulations of Defect Mechanics and Thermodynamics		
5.	9.12	Development of Two Phase Flow-structure Coupled Analysis Method Based		
		on Interface Tracking Method		
5.	9.13	The Development of the Two-phase Flow TPFIT Code using the Improved		
		Interface Tracking Method		
5.	9.14	Numerical Simulation on Enhancement of Turbulent Heat Transfer for		
		SCWRs		
5.	9.15	Development of Unsteady Thermal Hydraulic Simulation Method for		
		Inside a Reactor Core104		
5.	9.16	Parallelization of the POPCORN Code and Development of Visualization		
		Method for Result of the POPCORN Code 107		
5.	9.17	Study on Behavior of Natural Convection in and out Nuclear Reactor		
		during Draw-down		
5.	9.18	Study of Molten Fuel Fall Behavior Evaluation Method Development111		

5.10	Sec	tor of Nuclear Science Research
	Nuc	elear Hydrogen and Heat Application Research Center114
5.1	0.1	Proposal of Low Radiotixic Spent Fuel HTGR and Optimization of Nuclear
		Design by using Self-shielding Effect
5.11	Sec	tor of Nuclear Science Research
	Adv	ranced Science Research Center
5.1	1.1	Research for Ground State and Excitation Dynamics in Low-dimensional
		Strongly Correlated Systems
5.12	Sec	tor of Nuclear Science Research
	Tak	asaki Advanced Radiation Research Institute
5.1	2.1	Study of the Beam Monitoring Method by Measuring Low Energy Photons
		for Particle Therapy 121
5.13	Sec	tor of Nuclear Science Research
	Qua	antum Beam Science Center
5.1	3.1	Simulation Study for DNA Damage due to Radiation
5.1	3.2	First Principles Molecular Dynamics Simulations of Chemical Reactions 126
5.1	3.3	Development of Large Scale-molecular Simulation Method for Analyzing
		DNA Dynamics in Nucleus and its Application
5.1	3.4	Analysis of Molecular Recognition Mechanism of Biomolecular Function
		Repair Related Proteins for Radiation-damaged Molecules
5.1	3.5	Quantum Control of Isotope-selective Photodissociation based on Dynamic
		Stark Effect
5.1	3.6	Numerical Simulation for the Pump-probe Experiment by an Intense Laser
		Field
5.1	3.7	PIC Simulation of Proton Acceleration by a Laser Pulse
5.1	3.8	Development of a Detailed Calculation of the Delbruck Scattering 143
5.1	3.9	Simulation Program for Structure Formation in Materials
5.1	3.10	Extension of 3D Visualization Program for Neutron Diffraction Data

5.14	Sector of Fast Reactor Research and Development
	Advanced Fast Reactor Cycle System Research and Development Center 151

5.14.1	Development of Numerical Simulation Code SPIRAL for Thermal
	Hydraulic Analysis in Fast Reactor Fuel Assemblies
5.14.2	Numerical Analysis of 3-pin Bundle Water Model Test using Single-phase
	Thermal-hydraulic Analysis Code in An Irregular Rod Array Layout
	(SPIRAL)
5.14.3	V&V of Integrated Numerical Analysis Model for Unsteady Phenomena in
	Upper Plenum and Hot-leg Piping System of JSFR
5.14.4	Development and Validation of High-precision Numerical Simulation Code
	for Evaluation of Gas Entrainment in Fast Reactor
5.14.5	Advancement of a Computer Program for Sodium-water Reaction
	Phenomena in a Steam Generator of Fast Reactors
5.14.6	Analysis of FBR Core Power Distribution by Continuous Energy
	Monte-carlo Code MVP
5.14.7	Validation of SIMMER-III and SIMMER-IV with FCA VIII-2 Fuel
	Slumping Experiments
5.14.8	U-RANS Simulation of Single Elbow Pipe Flow Experiments Simulating
	JSFR Hot-leg Piping
5.15 Se	ector of Fast Reactor Research and Development
Μ	onju Project Management and Engineering Center
5.15.1	Simulations of the In-service Inspection of Monju and JSFR SG Tubes
	using Eddy Currents
5.16 Ts	uruga Head Office
5.16.1	Numerical Analysis of Laser Cutting Process with the SPLICE Code
5.17 Se	ctor of Decommissioning and Radioactive Waste Management
5.17.1	Acceleration and Parallelization of the Computer Program (Dtransu3D \cdot
	EL) for Analyzing 3D Saturated-unsaturated Groundwater Flow and
	Advection-dispersion Model (FY2014)
5.18 Se	ctor of Fukushima Research and Development
5.18.1	FLUENT : Analysis Relevant to Contaminated Water Treatment System of
	Fukushima Daiichi NPS

	5.19 Cer	nter for Computational Science & e-Systems	183
	5.19.1	Atomic Simulations of Physical Properties for Nuclear Fuel and Functional	
		Materials	183
	5.19.2	Evaluation of Behavior for Suspended Sediment in Ogaki Dam using 2D	
		River Simulation Code	186
	5.19.3	Theoretical Analysis About Impurity Effects in Unconventional	
		Superconductors	188
	5.19.4	Numerical Simulation of Radioactive Nuclides in an Environment	191
	5.19.5	First-principles Study on the Mechanism of Degradation for Nuclear	
		Materials	194
	5.19.6	Multi-orbital Effect for Magnetism and Superconducting State	196
	5.19.7	Multi-scale Simulations of Teraherz Radiations from Intrinsic Josephson	
		Junction Arrays	198
	5.19.8	Framework Construction of Multi-scale & Multi-physics Simulations for	
		Application of Superconductivity	201
	5.19.9	First-principles Calculation of Interaction between Solute Element and	
		Dislocation in Hexagonal Close Packed Metal	205
	5.19.10	He Embrittlement Tendency of BCC Transition Metals at Low	
		Temperatures	207
	5.19.11	Development of GT5D Code	210
	5.19.12	Development of Remote Visualization System PBVR	212
	5.19.13	R&D of 3D Vibration Simulator for Entire Nuclear Plant Facility	215
	5.19.14	Seismic Response Analysis of Components using the Observed Seismic	
		Waves	218
	5.19.15	Performance Improvement of the Parallelized Electromagnetic Simulation	
		Program	220
	5.19.16	Development of a Seismic Simulation for an Entire Nuclear Plant	221
6.	Conclusio	on	224
Ap	pendices		225
Au	thor Name	e Index	227

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、発表論文数に見てとれる(図 1.1)。 平成 26 年度、原子力機構の発表した査読付論文の総数は 1,147 件、このうち計算科学技術を利用 した論文は、256 件(22.3%)である。ここ数年 250 件程度をコンスタントに創出していること は、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 17~26 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~26 年度]

センター・部門別では、大型計算機システムの利用者が多い5部門(核融合研究開発部門、原 子力基礎工学研究センター、システム計算科学センター、高速炉研究開発部門及び量子ビーム応 用研究センター)において、計算科学技術を活用した論文の割合が高い。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26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る。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、新システムへの更新準備(設置場所及び電源容量の確保)のため、平成 26 年 7 月中旬には、システム構成を縮小(214TFLOPS→72TFLOPS)して運転を継続した。また、縮 小した大型計算機システムの計算資源の不足分を補うため、東京大学のスーパーコンピュータシ ステム(FX10 システム)の利用権(130TFLOPS 相当分)を確保した。縮小前のシステム構成 を図 2.1 に、縮小後のシステム構成を図 2.2 に、主な仕様(縮小前、縮小後)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(縮小前)



図 2.2 原子力機構スーパーコンピュータシステムの構成(縮小後)

JAEA-Review 2015-028

	縮小前		縮小後	
	平成 26 年	4月~6月	平成 26 年 7 月以降	
	大規模並列演算部 BX900	次世代コード開発部 FX1	大規模並列演算部 BX900	
タイプ	スカラ	スカラ	スカラ	
総演算性能 (TFLOPS)	200	12	72.3	
コア数	17,072	1,200	6,168	
ノード数	2,134	300	771	
CPU	Xeon X5570 4 コア/CPU	SPARC64 VII 4 コア/CPU	Xeon X5570 4 コア/CPU	
メモリ (GB/ノード)	24	16	24	
総主記憶容量 (TB)	50	4.6	18.3	
ノード間 通信性能	片方向 8GB/s (全二重)	片方向 2GB/s (全二重)	片方向 8GB/s (全二重)	
OS	Rad Hat Enterprise Linux 5	Open Solaris Solaris 10	Rad Hat Enterprise Linux 5	
コンパイラ	Fortran C/C++	Fortran C/C++	Fortran C/C++	

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

平成27年3月末現在

3. 平成 26 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 ルの発生もなく、安定に稼働しており、年間の稼働率としては過去最高の 99%を達成した。運転 の停止は、BX900 システムの更新に伴う縮小・移設作業(7月)を除き、計算機用空調機の修理 作業(8月、12月、2月)及び情報交流棟 非常用発電機の更新作業(1月)による(図 3.1:折 れ線グラフ)。また、平均コア利用率は 91%の高率となった(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(年間)

FX1は、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・検証用として利用されてきたが、平成26年6月末をもってその役目を果たし、4年3ヶ月間の運用を終了した。

3.2 大型計算機システムの利用者数

平成 26 年度の BX900 (FX10 システム含む)の利用者数は 440 名である (システムの運用要 員を除く)。部門別利用者数においては、昨年度同様に、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いる (図 3.2)。3 部門以 外では安全研究センター、次世代高速炉サイクル研究開発センター及び量子ビーム応用研究セン ターと続いている。その他では J-PARC センター、大洗研究開発センター、核燃料サイクル工学 研究所、原子力水素・熱利用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。



図 3.2 BX900 (FX10 システム含む)の部門別利用者数

3.3 大型計算機システムの利用実績

平成 26 年度の BX900 (FX10 システム含む)の利用コア時間は、4 月からの累積で 10,045 万 コア時間が利用された。分野別では、昨年度同様に、量子ビーム、計算科学、原子力基礎工、福 島復興の4分野が大きな割合を占めている(図 3.3)。続いて、次世代高速炉、もんじゅ、先端基 礎、核融合など多分野に分布している。



図 3.3 BX900 (FX10 システム含む)の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

東日本大震災以降、BX900(FX10システム含む)を利用して福島復興に係る対応を行う利用 者も多く、平成26年度は、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3.1に示す。

	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	大気拡散予測コードによる 評価	原子力基礎工学研 究部門	WSPEEDI 48	1.9	5.9.2 項
2	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	31.9	5.9.4 項

表 3.1 主な BX900 (FX10 システム含む)を利用した福島復興に係る対応 (1/2)

表 3.1 主な BX900(FX10 システム含む)を利用した福島復興に係る対応(2/
--

	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
3	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	41.6	5.9.9 項
4	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 2,048	111.7	5.9.12 項 5.9.13 項 5.9.18 項
5	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 2,048	20.4	5.9.14 項 5.9.15 項
6	粘土物質におけるセシウム の吸脱着過程の解析	量子ビーム応用研 究部門	CPMD 960	510.0	5.13.2 項
7	福島原発汚染水処理関連の 解析	福島研究開発部門	FLUENT 4	14.3	5.18.1 項
8	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 1,536	43.2	5.19.1 項
9	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	システム計算科学 センター	VASP 512	305.9	5.19.4 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 26 年度の利用相談は、年間 769 件(月平均:約 64 件)寄せられ、そのうち約 48%が大型 計算機システム(BX900:364 件、FX1:8 件)、約 14%が可視化(BX900 可視化相談・技術支援:75 件、可視化ソフトウェアのインストール支援:35 件)の利用に関するものである。導入 5 年目を迎えた大型計算機システムの相談件数は、昨年度の 0.90 倍(88 件減)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26年度は12件、作業 工数として60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1.25倍となり、作業 内容等を精査の上、11件のソフトウェア開発整備作業を採択・実施した。平成26年度の作業に ついて表4.1に示す。

平成 26 年度は、廃棄物中に含まれる核分裂性核種の総量を求める非破壊測定手法の一種であ るアクティブ法の効率的な解析評価を目的とした、MCNP・MVP コードの連続実行環境の整備 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用の格子生成サポートプログラムの開発整 備などを行った。また、可視化プログラム開発に関しては、福島第一原子力発電所の燃料取り出 しにおける熔融デブリ分布の把握を支援すべく、マルチプラットフォーム可視化アプリケーショ ンである ParaView 対応のための機能拡張を実施した。

衣 4.1 平成 26 年度ソフトリエノ 開発登傭作業(J

	作業件名	作業概要 及び 結果	関連する 成果報告
1	(新規) 輸送容器の許認可申 請に係わる安全解析 コードの整備	汎用機(メインフレーム)上の DOT3.5 コードを利用し て取得した輸送容器(FS-47型、MONJU-F型など)の 許認可の変更には、コードの違いによる比較解析を要求 されるため、BX900 上に DOT3.5 コードの移植 (Fortran、アセンブラ)を実施。これにより、以前の 遮蔽評価の確認、再現計算及び計算条件を変更した再評 価等に関して、許認可申請を所管する官庁の要求に応じ て柔軟に対応することが可能となった。	5.3.1 項
2	(継続) 微小球充填体内粒子 識別コードの開発整 備	ITER における固体増殖水冷却方式テストブランケット の増殖材微小球充填体内を流れるヘリウムパージガスを 再現するため、汎用流体解析コード(ANSYS-CFX、 FLUENT、Front/frow/red)に必要な格子生成サポート プログラムの開発を実施。これにより、実験と同じ微小 球配置でのトリチウム放出を仮定した物質拡散と充填体 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。	5.4.8 項
3	(新規) 複数の PHITS 出力 ファイルの統合機能 の作成	任意の形状・物質内における多様な放射線の挙動を解析 可能な汎用モンテカルロ計算コード PHITS の開発を支 援。モンテカルロ計算の精度はその試行回数(ヒストリ 一数)に依存するものであるため、計算条件によっては 高い計算コストを必要とする場合がある。このため、あ る一つのタリーについて、複数の出力結果ファイルを一 つに統合し、継続して再計算できる以下の機能を開発し た。 ① 複数の出力結果の統合によりヒストリ数を増加させ る機能 ② 複数の出力結果に任意の重み付けをして加重平均を 求める機能 これにより、PHITS ユーザの利便性は向上し、解析評価 作業が効率よく実施できる見通しが得られた。	5.9.6 項

	作業件名	作業概要 及び 結果	関連する 成果報告
4	(新規) PHITS ユーザ入力 支援ソフトウェアの 開発	ユーザ数 1500 名を超える PHITS コードの利用におい て、多くの入力ファイルのパラメータ等を視覚的に理解 して入力できるグラフィカルユーザインタフェイス (PHACE)の開発を支援。PHACE の開発にあたり、 以下の調査やサンプルプログラム作成等を実施。 ① プログラムの使用対象となるマイクロソフト社が提 供する Windows アプリケーション開発用クラスラ イブラリ関数の挙動調査 ② データ入力画面などのサンプルプログラム作成及び コントロールの動的手法の検証 これにより、PHACE のデータ入力インタフェイスでは、 画面に配置するボタンなどのコントロールの個数に制限 があることが判明するなど、今後の設計方針や実装方法 の有益な情報が得られた。	5.9.7 項
5	 (新規) アクティブ法解析に おける並列実行の環 境整備 	廃棄物中に含まれる核分裂性核種の総量を求めるアクティブ法(非破壊測定手法の一種)解析に係る環境整備を MVP・MCNP コードを用いて実施。本解析には長い計 算時間を要し、1回のジョブ実行で終了することができ ない。そこで、BX900上に、MCNP・MVP コードの並 列実行環境を整備し、自動的にジョブ投入するスクリプ トを作成した。これにより、実験結果に対するより詳細 な解析評価作業を効率よく実施できる見通しが得られ た。	5.9.10 項
6	(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。 ① スペーサ付き燃料集合体内のサブチャンネルを簡略 模擬した体系(羽根の有無、羽根の角度15°,30°) ② 燃料集合体内冷却材流路を簡略模擬した体系(4本、 7本バンドル)	5.9.15 項

表 4.1	平成 26 年度ソフ	トウェア開発整備作業	(3/4)
-------	------------	------------	-------

	作業件名	作業概要 及び 結果	関連する 成果報告
		 ③ 原子炉過酷時の炉心サブチャンネル内を簡略模擬した体系 これにより、燃料集合体内に設置するスペーサの伝熱促進効果によって熱伝導率を向上させて燃料棒表面温度を低下できる解析結果を得られ、超臨界圧軽水炉の熱設計に適用できる見通しを得た。 	
7	(継続) 炉内溶融事象可視化 プログラムの開発	福島第一原子力発電所の燃料取り出しにおける熔融デブ リ分布の見積もりのため、炉心構造物の溶融過程を評価 できる粒子法解析コード (POPCORN)の開発を支援。 POPCORN では、オープンソース、マルチプラットフォ ームの可視化アプリケーションである ParaView で可視 化するため、VTK (Visualization Tookkit) フォーマッ ト (ASCII、バイナリ)に出力する機能、また前年度開 発した AVS/Express の動画作成用アプリケーションで も VTK フォーマットを読み込み処理できるよう機能の 追加を実施。これにより、AVS/Express と同程度の品質 の動画を ParaView で作成することが可能となった。	5.9.16 項
8	 (継続) 中性子散乱データの 3 次元画像化プログ ラムの機能拡張 	コンピュータ断層撮影 (CT) で使用する計算手法を応用 して、世界初の中性子散乱データの 3 次元画像化及びム ービー化を実現するアプリケーション (Neudift)の開発 を支援。平成 24 年度に開発した Neudift ver.1 に対し、 以下の機能拡張を実施。 ① 連続スキャンによる計測データへの対応 ② 画像ピクセルデータ補正処理の追加 ③ 新アルゴリズムによる計測データ補正処理の追加 ④ CT 画像の作成 これにより、軽元素を含む構造、磁気モーメント、3 次 元的な磁区などの新しい構造情報の品質向上が図られ、 視覚的な結果の確認が容易になった。	5.13.10 項

	作業件名	作業概要 及び 結果	関連する 成果報告
9	 (継続) 多次元解析コードの 検証に係る不確かさ 評価プログラムの整備 	 原子炉の設計研究や安全評価に資するため、種々の解析 コードの開発・整備を支援。これらの解析コードの検証 において、不確かさの定量評価が必須となっている。そ こで、GCI (Grid Convergence Index) 評価 (収束率、 収束解の推定)を行うまでの一連の作業をプログラムで 実行できるように以下の機能整備を実施。 ① デジダイズ機能 (既往論文等から実験結果のグラフ を読み取る) ② 解析結果のスプライン補間機能 (格子密度を変更し て実施した解析結果をスプライン補間により参照点 に補間する) ③ GCI 評価機能 (スプライン補間したデータを用いた 6 手法による評価プログラム) これにより、複数の解析コードの検証において、解析結 果の不確かさの定量評価作業を効率的に実施することが 可能となった。 	5.14.3 項
10	(継続) 高速炉蒸気発生器熱 流動現象の評価手法 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 コードの開発を支援。当該コ ードでは、速度及び圧力に関する収束計算について、解 析体系、メッシュ分割または各種解析条件に応じて収束 性が著しく低下する状況が発生している。評価手法開発 の進捗を妨げる要因となるため、収束判定パラメータ及 びそれに関する物理量の値が反復計算中にどのように推 移するかを調査し、収束性の向上が期待できる反復計算 に関する制御変数の制御方法を適用した。これにより、 約1.7~3.5 倍の改善効果が得られ、高速炉蒸気発生器の 安全評価作業等を効率的に実施できる見通しを得た。	5.14.5 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 26 年度の主な作業について表 4.2 に示す。中性子散乱における試料吸収補正計算コード (NABSC_CYL)では、逐次プログラムから 128 プロセス並列化することにより、実行時間にお いて 112.7 倍の速度向上を、磁区構造形成モデルプログラム (MADONA)では、高速化チュー ニング及び 64 プロセス並列化により、実行時間が大幅に短縮 (1/200) されるとともに、解析規 模を拡大して実行することが可能となった。

	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	中性子散乱におけ る試料吸収補正計 算コード (NABSC_CYL)	 MPI 並列化 ① プロセス並列化及び計算負荷の標準化 ② 入出力処理の MPI-IO 	オリジナル版(逐次版) に対して、以下の速度向 上を達成。 <mpi版> ・128 並列 113 倍</mpi版>	5.7.1 項
2	LES 局所域高分解 能拡散コード (LOHDIM-LES)	スケーラビリティの改善 ① OpenMP によるスレッド並 列化 ② 入出力処理の MPI-IO 化	オリジナル版(8並列) に対して、以下の速度向 上を達成。 <ハイブリット版> ・4x2並列 1.4倍	5.9.1 項

表 4.2 平成 26 年度高速化·並列化作業 (1/2)

	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	詳細二相流コード (POPCORN)	 MPI 並列化 ① 並列化対象のサブルーチン (15 個)のプロセス並列化 ② 入出力処理の MPI-IO 化 	オリジナル版 (32 並列) に対して、以下の速度向 上を達成。 <mpi 版=""> ・32 並列 4.3 倍</mpi>	5.9.16 項
4	磁区構造形成モデ ルプログラム (MADONA)	解析規模の拡大、MPI 並列化、 高速化チューニング ① プロセス並列化 ② 冗長計算の削減 ③ 行列解法ライブラリの変更 (LAPACK→ScaLAPACK)	オリジナル版(1×8 並 列)に対して、以下の速 度向上を達成。 <mpi版> ・8 並列 72 倍 ・64 並列 200 倍</mpi版>	5.13.9 項
5	3 次元飽和・不飽 和浸透流-移流分 散解析プログラム (Dtransu3D・EL)	 MPI 並列化 ① プロセス並列化 ・高コストルーチンの行列要素やベクトル要素の計算部分と行列解法部分の簡易的な並列化 	オリジナル版(逐次版) に対して、以下の速度向 上を達成。 <mpi版> ・8 並列 4.3 倍</mpi版>	5.17.1 項

表 4.2 平成 26 年度高速化·並列化作業 (2/2)

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 26 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 4.3)。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 26 年 5 月 27 日	情報交流棟 講習会室	ANSYS Fluent UDF 初級セミナー	講義 実習	10 名
2	平成 26 年 6 月 24,25 日	情報交流棟 講習会室	ANSYS 中級セミナー	講義 実習	9名
3	平成 26 年 7 月 25 日	情報交流棟 講習会室	構造分野向け EnSight 入門講習会	講義 実習	7名
4	平成 26 年 10 月 22 日	情報交流棟 講習会室	STAR-CCM+入門セミナー	講義 実習	10名
5	平成 26 年 11 月 18 日	情報交流棟 セミナー室	CFD 理論セミナー	講義	22名
6	平成 27 年 1 月 23 日	情報交流棟 講習会室、 オープン室	「流体分野向け可視化講習会」+ 「最新機器展示会」	講義 実習 体験	10名 75名
7	平成 27 年 1 月 28.29 日	情報交流棟 講習会室	CAE 初心者向け技術講習会(構造 解析編)	講義 実習	11 名
8	平成 27 年 2 月 19,20 日	情報交流棟 講習会室	ABAQUS 線形動的解析セミナー	講義 実習	10名

表 4.3 平成 26 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 安全研究・防災支援部門 安全研究センター Sector of Nuclear Safety Research and Emergency Preparedness Nuclear Safety Research Center

5.1.1 シビアアクシデント時の格納容器内密度成層化挙動解析

CFD Analysis on Density Stratification in a Containment Vessel during a Severe Accident

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、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 うな大空間を有する体系での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 26 年度は、オープンソース CFD コードの OpenFOAM を用いて、格納容器上方部に形成された密度成層の浸食・崩壊についての解析を行った。本報告では、スイス PSI が所有する 模擬格納容器 PANDA を用いた国際ベンチマークテストに対する CFD 解析結果について紹介す る。このベンチマークテストは、Fig.1 に示すように格納容器上部にヘリウムと空気の混合気体 で形成された密度成層が下方からの鉛直ジェットにより侵食・崩壊される時間変化を CFD 解析 で予測し、実験結果と比較するというものである。

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、RANS 解析では Launder-Sharma の低 Re 型 k-c モデルをベースとして、ジェットが成層に貫入した際に生じる よどみ点での乱流生成および安定成層内での乱流抑制効果を再現できるようした、改良型モデル を用いた。

Fig. 2 に、CFD 解析で得られた可視化図と濃度の時系列変化を示す。可視化図のコンターは
ヘリウムのモル分率を示している。密度成層下流に設置されたノズルから放出されたジェットが 安定成層に感乳している様子が分かる。各地点でのヘリウムの濃度の時系列変化は成層侵食の様 子の再現性を確認する上で最も重要な指標であるが、本解析結果は実験結果と良く一致している ことが分かる。



Fig.1 解析領域

Fig.2 CFD 解析結果

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Satoshi Abe, Masahiro Ishigaki, Yasuteru Sibamoto and Taisuke Yonomoto, RANS analyses on erosion behavior of density stratification consisted of helium-air mixture gas by a low momentum vertical buoyant jet in the PANDA test facility, the third international benchmark exercise(IBE-3), Nuclear Engineering and Design, vol. 289, pp 231-239, 2015.
- 2) Satoshi Abe, Masahiro Ishigaki, Yasuteru Sibamoto and Taisuke Yonomoto, A Study on improvement of RANS analysis for erosion of density stratified layer of multicomponent gas by buoyant jet in a containment vessel, Journal of Energy and Power Engineering 9 (2015), pp.599 607, 2015, DOI: 10.17265/1934-8975/2015.07.001.

(4) 今後の利用予定:

当グループでは軽水炉の安全規制に資するため、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、本研究室で予定している小型及び大型実験に関する CFD 解析を行い、解析 コードの妥当性を評価するとともに解析精度の更なる向上を目指す予定である。

5.1.2 浮遊液滴の回転と変形

Rotation and Deformation of a Levitated 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として、RELAP5 コードによる事故進展解析、 FLUENT コードによる局所詳細解析を進めている。また、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、あわせて進めている。これは、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、振動、回転する液滴挙動の数値シミュレーションにより、測定に最適な制御パ 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ため、大型並列計算機の利用が必要 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、昨年に続き、回転する浮 遊液滴の形状変化と分裂の数値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、今年度は、非軸対称なアレイ形状 に変化した後、分裂に至るまでの過程を検討した。シミュレーション結果から、非軸対称形状に なった液滴の最大寸法と、回転速度を求めるアルゴリズムを提案し、それぞれの時系列変化の検 討を可能とした。図1に、液滴最大寸法の時間変化、図2に回転速度の時間変化を示す。図1, 2では、シミュレーション領域の大きさの影響を調べるため、3種類の異なるメッシュ数での結 果を示してある。いずれの図からも、シミュレーション領域が大きい二つのケースは、時間とと もに差が小さくなっており、回転液滴は、同じ挙動を示していることがわかる。図3には、回転 速度に対する液滴寸法の関係を示す。シミュレーション結果は、領域の大きさに関わらず、回転 速度と液滴寸法の関係が常に同じであることを示している。このことから、本シミュレーション においては、液滴の回転エネルギーは、確実に保存されてい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):

- 渡辺正、"レベルセット法による液滴ダイナミクスの数値シミュレーション"、第 53 回北陸 流体工学研究会、金沢、8 月 23 日(2014).
- 2) 渡辺正、"回転液滴の変形挙動"、日本機械学会 2014 年度年次大会、東京、9月8日(2014).

(4) 今後の利用予定:

なし









図3 回転速度と液滴寸法の関係

5.1.3 水素静的触媒式再結合器(PAR)の作動を伴う大規模空間内熱流体解析

Thermofluid Dynamic Analysis in Large Volume with Activation of PAR (Passive Autocatalytic Recombiner) for Hydrogen

佐藤 允俊

シビアアクシデント評価研究グループ

(1)利用目的:

軽水炉のシビアアクシデント時には、水蒸気とジルコニウムの化学反応等により発生した水素 が格納容器等に流入し、格納容器等の健全性に対する脅威となる爆燃/爆轟を引き起こす可能性 がある。本研究では、水素リスクを低減する対策の一つである静的触媒式再結合器(PAR: Passive Autocatalytic Recombiner)の有効性を評価する手法の整備を目指し、数値流体力学 (CFD: Computational Fluid Dynamics)コードにより、大規模実験容器を用いた PAR 性能評 価実験の熱流体解析を行う。

(2) 利用内容·結果:

a) 解析の概要

大規模並列計算機 BX900 を利用して、オープンソースの CFD コード OpenFOAM (Open Source Field Operation and Manipulation) [1]による解析を行う。本解析において用いるソル バーは、化学反応を伴う熱流体解析に適した ReactingFoam である。PAR を模擬するために、 同ソルバーのソースコードを一部修正した。

解析対象の PAR 性能評価実験は、図1に示す高さ9.2m、直径3.2m、内容積60m³の実験容器を用いて実施された[2]。実験容器の空間下部にPARを設置し、気体の初期組成、温度及び圧力を所定の値に設定した後に、水素及び酸素を所定の流量で実験容器内に注入する。

解析に用いたメッシュを図2に示す。総セル数(四面体セル)は約400000である。メッシュ 実験容器内の初期熱水力条件及び水素と酸素の注入条件は、実験における計測に基づいて設定し た。実験と同じ位置にPARの触媒反応領域を設定し、実験に用いたPARに特化した相関式によ りPARの水素再結合速度を算出する。使用した乱流モデルは二方程式型のk-ω-SSTモデルであ る。実験容器内面の境界条件は、断熱及びノンスリップとする。

b) 解析結果

実験容器内流速分布の解析結果例を図3に示す。水素及び酸素の注入により実験容器内におけ るそれらの濃度がPARの作動条件を満たすと、PARの触媒反応領域において水素と酸素の再結 合が開始する。同時に水蒸気と熱が発生してPAR内部に上昇流が形成される。実験容器内にお ける水素の体積割合及びPAR入出口における気体流速の時間変化を図4及び図5に示す。再結 合の開始に伴って流れが生じるとともに、水素の割合が徐々に減少する。これらの解析結果は実 験結果と概ね一致している。一方、実験容器内の局所的な気体温度に関しては、現時点では、実 験結果を十分に再現できない。



図1 実験容器



図2 計算メッシュ



図3 流速分布



図5 PAR 出入口の流速

参考文献

- [1] OpenFOAM The Open Source Computational Fluid Dynamics (CFD) Toolbox http://www.openfoam.com/
- [2] OECD/NEA, "OECD/NEA THAI Project, Hydrogen and Fission Product Issues Relevant for Containment Safety Assessment under Severe Accident Conditions, Final Report", NEA/CSNI/R(2010)3, 2010.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) F. Kasahara, et al. "Application of Knowledge Obtained from THAI-2 Project to Assessment of Hydrogen Risk", OECD/NEA THAI-2 Final Seminar, Nov. 18-19, 2014.

(4) 今後の利用予定:

解析を継続する。計算メッシュや乱流モデルの影響を確認するとともに、条件の異なる種々の 実験について解析を実施し、予測精度の向上を図る予定である。

5.1.4 航空機モニタリングの地形による線量評価への影響評価 Effects of Geography on Dose Evaluation in Airborne Survey

石崎 梓

放射線安全・防災研究グループ

(1)利用目的:

福島第一原子力発電所事故以降、広域な空間線量率を把握するため、航空機モニタリングが実施されている。航空機上での測定値から地上の空間線量率に換算する際に用いる手法は直下の地形が平坦であることを前提としており、傾斜や森林地帯等の地形に対する換算精度を高める評価技術の開発は吃緊の課題である。本研究では、モンテカルロシミュレーション PHITS2 を用いることによって、傾斜や森林地帯における測定および換算の精度に与える影響を評価し、高精度な評価手法の開発を目的とする。

(2) 利用内容·結果:

一般的な航空機モニタリングの飛行高度である上空 300m の位置において測定器に入射する ガンマ線の数が地形の影響によってどのように変化するかを傾斜地と森林とで計算を行った。計 算は図1に示す体系にて地表の Cs-137 からガンマ線が発生し、測定点に入射するガンマ線の数 を計数している。Cs-137 の深度分布特性は緩衝深度 β=1.0(g/cm²)とした。



図1 計算体系(①傾斜地、②樹木がある場合)

森林の場合、樹木の胸高直径、樹高、立木密度によってガンマ線の遮蔽効果が変化する。森林 の状態は図2に示す胸高直径、樹高、立木密度の関係性から算出した。

傾斜地と森林それぞれの条件ごとの計数を平坦でなおかつ森林の無い状態の計数との相対値 (相対フラックス)を図3に示す。傾斜地の場合、傾斜角度が増加するごとに線源一検出器間距 離が短い成分が増加するため、相対フラックスが増加している。森林の場合、立木密度の増加に 伴い、樹木による遮蔽効果のため相対フラックスが増加している。相対フラックスの変化は、立 木密度の増加により、単位面積当たりの本数が増加しているが、同時に樹高や胸高直径が減少し ていることにより、0.6~0.8 の範囲と評価できる。

今後、実際の地形・森林植生に対して現地調査を踏まえた測量データをもとに評価手法の改良 を行い、地形及び森林植生の影響についての影響評価を進める。



図2 立木密度に対する平均胸高直径と平均樹高の関係



図 3 上空 300m におけるガンマ線の相対フラックスの変化 ①傾斜地、②森林

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 日本原子力学会 2015 秋の大会、口頭発表、「エアボーンモニタリング手法の現状と課題(4) 山岳地帯の地形補正に関する検討」.

(4) 今後の利用予定:

今後は実在の地域の標高データに対してシミュレーションを実施し、地形による効果が測定値 に対して影響を与えるかを検証する。

5.2 大洗研究開発センター

Oarai Research and Development Center

5.2.1 高温ガス炉 HTTR の 1 次ヘリウムガスの混合挙動

Mixing Behavior of Primary Helium Gas in High Temperature Gas-cooled Reactor HTTR

栃尾 大輔 高温工学試験研究炉部 HTTR 技術課

(1) 利用目的:

将来の高温ガス炉では、発電用ガスタービンの入口温度を低温のヘリウムガスを用いて制御す る方式が検討されている。温度制御や構造材の健全性の観点から、ヘリウムガスは系統内でよく 混合されている必要がある。過去に、HTTRの出力上昇試験において、原子炉入口温度計測部で 混合平均温度より高温のヘリウムガスが検知されることにより、原子炉入口温度が規定の温度よ り低く制御されていることが確認された。この経験から、将来の高温ガス炉においても、配管形 状によってはヘリウムガスの混合が十分に行われないことにより、タービン入口温度等の温度制 御や構造材の健全性に影響を及ぼす可能性が考えられる。そこで、HTTRにおけるヘリウムガス 混合現象を明らかにするために原子力科学研究所の大型計算機システムに導入されている ANSYS FLUENT を用いて HTTR の1次系の熱流動解析を行った。

(2)利用内容•結果:

解析結果と実測値は 2%程度の誤差でよく一致しており、各 HGC より吐出された約 40℃の温 度差があるヘリウムガスは各合流部においてあまり混合されず、配管内の特定の流路を流れて約 34℃の温度差を有したまま原子炉へと流入していることが示された。これは、環状流路及び合流 部の形状により温度の異なるヘリウムガスの接触する面積が小さいため十分混合されず、高い温 度を計測したことが示唆された。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 栃尾,藤本, 高温ガス炉 HTTR の1 次 ヘリウムガスの混合挙動, 日本原子力学会 2015 年春の 年会, 茨城, 日立, 2015, p.279, CD-ROM.

(4) 今後の利用予定:

上記の結果を受けて、将来型高温ガス炉の1次系におけるヘリウムガスの混合挙動について、 解析により明らかにするとともに、高温のヘリウムガスの混合に適した配管等の設計に資するこ ととする。

5.3 核燃料サイクル工学研究所

Nuclear Fuel Cycle Engineering Laboratories

5.3.1 輸送容器の許認可申請に係る安全解析コード整備

Development of Safety Analysis Code Relating to Licensing Application of the Transport Container

菊池 圭一

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) 利用目的:

輸送容器の許認可用として使用する安全解析コードのうち、遮蔽解析コード DOT3.5 につい て、すでに整備されている核データの資源を使用した過去の解析結果の再現計算等を可能にする ため、富士通大型計算機 BX900 で使用できるよう整備を行った。

(2) 利用内容·結果:

本解析コードの整備作業は、整備する解析コードと富士通大型計算機 BX900 とで、動作環境 が異なる箇所があることから情報システム管理室に依頼して実施した。

整備作業は、既存ソースコードをサブルーチン毎のファイルに分割後、アセンブラで書かれて いる2つのルーチンを解析コードに記録されている FORTRAN 準拠のソースコードへ置き換 え、アセンブラで書かれている4つのルーチンを FORTRAN 準拠のソースコードとして作成し た。残る9つのルーチンについては、実行環境による文字コード及びエンディアンの違いで起こ るバイトオーダー反転の影響に対応させるため、既存ソースコードにおける初期値の設定等につ いて修正を行った。各ルーチンの整備後、実行モジュール作成用 Makefile を作成し、実行モジ ュールを作成した。

整備作業後、整備済みの核データと今回整備した解析コードを用いてテスト計算を行い、富士 通大型計算機 BX900 と富士通汎用計算機 GS21 200A(過去の解析で用いていた計算機)の結果 との増減比が 0.15%から-0.11%であり、双方の計算機で計算結果が同様であることを確認した。

以上により、富士通大型計算機 BX900 への遮蔽解析コードの整備作業が完了した。

今回の作業により、輸送容器の許認可申請等に使用する遮蔽解析コードとして多くの実績があ り、許認可取得性がある信頼性が高い遮蔽解析コード DOT3.5 による解析を、輸送容器の安全解 析用として使用している核データを用いて、富士通大型計算機 BX900 で実施できるように整備 できたことから、今後の輸送容器の許認可申請用の安全解析に用いる事が可能になると共に、以 前に行った遮蔽評価の確認、再現計算及び計算条件を変更した再評価等について、許認可申請を 所管する官庁の要求に応じて実施することが可能となった。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

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。

5.4 核融合研究開発部門 那珂核融合研究所 Sector of Fusion Research and Development Naka Fusion Institute

5.4.1 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 41MW 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、ダイバータ板へ達し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。放射損失を増加して熱負荷の低減を行うため、本研究で は代表的な不純物ガスであるアルゴンを入射する検討を行っている。一方、主プラズマに混入す るアルゴンイオンが増加しプラズマ周辺部での放射損失が大きくなりすぎると、主プラズマの閉 じ込め性能を劣化させてしまう。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、シミュレーション解析を行 った。今年度は、最大プラズマ電流が 5.5 MA の放電について主に調べた。

(2) 利用内容·結果:

JT-60SA では、炭素材のダイバータの実験の後、タングステン(W)ダイバータさらには金属 第一壁への改造が検討されている。WダイバータからのW不純物発生、輸送の知見を ITER に 活かし、比較検討するためである。プラズマ電流 5.5MA、加熱パワー41 MW、重水素ガスを 4.0x10²² 1/s でガスパフ、アルゴンを 0.3 Pam³/s で入射する計算条件で、IMPMC を使用して 不純物輸送のダイナミクスを解いた。SOL 領域で平均的にはアルゴンは 0.12%の混入率であっ た。この事を元に、ノンコロナモデルでアルゴンの混入率を 0.1%としてシミュレーションを行 い、結果を比較した。図1に外側ダイバータ板での電子温度の径方向の分布と熱負荷分布を示す。 ピーク熱負荷は、7.9 MW/m²(IMPMC モデル)と 6.9 MW/m²(ノンコロナモデル)程度であ り、最大許容熱負荷(15 MW/m²)に比べて十分に余裕がある。

炭素ダイバータに比べて、Wダイバータでは一般に W イオンによる放射損失量は大きくはな い。Ar による放射損失量は、21 MW 程度で、SOL における温度は比較的高く,高リサイクリ ングとなり、SOL 密度は6x10¹⁹ m⁻³と比較的高くなる。簡易モデル(ノンコロナモデル)の結 果は、電子密度、温度、熱負荷いずれも、IMPMC モデルを用いた場合と良く一致している。 IMPMC を用いて定常解を得るには、膨大な計算時間を必要とし、パラメータサーベイが困難で あった。しかし、パラメータサーベイで、概略の依存性を調べるにはノンコロナモデルでも可能 であることが明らかになった。



図1 (a) ダイバータ板での電子温度分布、(b) 熱負荷分布

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) H. Kawashima et al., "Simulation of radiative divertor plasmas by *Ar* seeding with the full *W*-wall in JT-60SA", RCM-4-D2-09 (2015).

(4) 今後の利用予定:

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)の構成から、MPMD (Multiple Program Multiple Data)への大改造が進められている。これが成功すると、複数不 純物が扱えるようになる。また、コアでの不純物輸送モデル IMPACT との結合が可能となる。 アルゴン不純物は W のスパッタリングに強い影響を与えるので、その効果を取り込んだコンシ ステントなシミュレーションが必要である。W の過剰な発生により、コアへの混入が生じ、コ アを冷却し、高閉じ込めが維持出来なくなる懸念があるからである。詳細な不純物発生、輸送モ デルを用いて、より精度の高い予測が次の焦点になる。

5.4.2 ELM 制御コイル摂動磁場の高エネルギーイオン閉じ込めに与える影響の研究 Effect of the Magnetic Perturbation due to ELM Coils on Energetic ion Confinement

篠原 孝司

先進プラズマ実験グループ

(1) 利用目的:

トカマク型国際熱核融合実験炉(ITER)では、装置保護の観点から ELM(プラズマ周辺部の 不安定性の一つ)の制御、及び、高エネルギーイオンの適切な閉じ込めが求められる。また、ITER は自己燃焼プラズマであるため、この観点からも高エネルギーイオンの適切な閉じ込めが求めら れる。ITER では、ELM 制御のために摂動磁場をかけることを計画している。この磁場を作り だすのが ELM 制御コイルであるが、ELM 制御コイルの作る摂動磁場が、高速イオンの閉じ込 めを劣化させ得る非軸対称の磁場擾乱を作ってしまう。そこで、我々は、ELM 制御コイルの作 る摂動磁場が高エネルギーイオンの閉じ込めに与える影響の評価を機構が開発した粒子追跡モ ンテカルロコードを用いて行うこととした。これが、本計算機の利用目的である。

(2)利用内容·結果:

韓国のトカマク実験装置 KSTAR では、ELM 制御コイルの実験を行ってきた。しかし、ELM 制御コイルの作る磁場摂動の構造は自明でなく、その理解が求められている。本研究では、 KSTAR において、ELM 制御コイルの作る磁場摂動の構造を理解するために、ELM 制御コイル 印加時の高速イオン損失プローブ計測(FILD)の結果を高速イオン軌道追跡モンテカルロ

(OFMC) コードを用いて解析した。モデル磁場として、磁場摂動がない場合、コイルが作る真 空磁場、真空磁場にプラズマが応答したことを考慮したモデル磁場を用いた。プラズマ応答を考 慮したモデル磁場は HINT2 コードを用いて計算した。プラズマ第一壁に到達する高速イオンの 分布が磁場構造に対応して、変化することが計算結果として観測された。対応して、FILD に受 かる高速イオンの性質も変わるが、いずれの場合も実験を再現できなかった。

加えて、ITER の実験に貢献すべく JT-60SA (那珂核融合研究所に建設中)に設置予定の誤差 磁場補正コイルにて ELM 制御に必要な磁場摂動ができるかどうかの調査とその磁場摂動が高速 イオンに与える影響の調査を行った。HINT2 コードを用いてプラズマ応答を考慮すると誤差磁 場補正コイルの設計仕様内で十分に ELM 制御に必要な磁場摂動を発生させることが可能である ことがわかった。この時の磁場が高速イオンに与える影響を OFMC コードにて計算した。磁場 摂動により高速イオンの損失が 10%程増加することがわかった。本結果を将来の運転に活かす。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) K. Shinohara et al., "Analysis of Fast Ion Loss Detector measurement in RMP field experiment in KSTAR", KSTAR conference 2015, Daejeon (South Korea).
- 2) Y. Suzuki et al., "3D plasma response to resonant external magnetic perturbation and its impact on fast ion confinement in JT-60SA plasmas", 25th IAEA Fusion Energy Conference, St. Petersburg (Russia) TH/P7-37.

(4) 今後の利用予定:

引き続き、実験条件、機器の配置、3次元磁場擾乱の条件などをかえて、評価を行う。

5.4.3 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(C-LITE ver.1)を用い水平ポート EC ランチャーでの停止後線量(SDDR)計算を行った。

1) 評価モデル

ITER モデル (C-LITE ver.1) を用いて、上部、中央部を 40 度モデルとして、中央部は両サ イドのポートをダミープラグとし 40 度位置で反射設定とした (Fig.1 参照)。上部ポートおよび 下部ポートにおいてはポート内をボイド指定としポート内の粒子を全て殺す (KILL) 設定とし た。

下記に評価ケースを示す。

- 1. Original EC Launcher model
- 2. Original EC Launcher model Gap size change between the port and plug



Fig. 1 評価モデル図



Fig. 2 評価モデル図 プラグとポートとの間のギャップ寸法変更位置

2) 評価結果

MCNP を使用し、C-LITE モデルを用いてプラグとポートの間のギャップを変更したモデル (Fig.2 参照) を評価し、オリジナルモデルとの比較を行った。フランジ後方中央部の Sphere Tally で比較すると、ギャップ寸法を変更したケースは 188µSV/h となりオリジナルモデル 173µSV/h より約 10%高い値となった。フランジ後方での停止後線量分布図で比較しても 10% 程度全体的に高い結果となり、分布図中央部でもオリジナルギャップモデルより高い線量となる ことが確認出来る。両者の結果を比較することにより、ギャップ寸法を広げる事によるギャップ ストリーミングの影響を定量的に評価した。今後ギャップ寸法がより広くなる事が予想されるた め評価時には十分考慮が必要になる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Design and Nuclear Analysis of the Equatorial Launcher for EC Heating and Current Drive of ITER Plasma, Proceeding of 23rd Int'l Conference on Nuclear Engineering.
- 2) K. Takahashi, G. Abe, K. Kajiwara, Y. Oda, M. Isozaki, R. Ikeda, K. Sakamoto, T. Omori, M. Henderson, Design Modification of ITER Equatorial EC Launcher for Electron Cyclotron Heating and Current Drive Optimization, Fusion Engineering and Design 96-97 (2015), pp.602-606.

(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。

5.4.4 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 Neutronic 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(以下、MFC)計測装置は真空容器内に検出器やケーブルを設置するため、ITER 運転停止後の廃棄に当たり、真空容器内機器の放射化量を予め見積もる必要がある。このため、 本研究においては、大型計算機 BX900 を利用した核解析を実施し、ITERの運転シナリオに基 づいて MFC 真空容器内機器の放射化量の評価を行なった。

(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 MFC 検出器を基に 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 図 2 に示すように、二重の被覆を持った無機絶縁

(MI)ケーブルを使用して伝送し、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、ITER 運転停止後の真空容器内機器の廃棄に向けて、一番 の問題となる MFC 検出器の放射化計算を大型計算 機 BX900 を用いて実施した。



図1 MFCのITER への設置の概要



図2 MFC 真空容器内機器の概要

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、第1評価として MFC の真空容器内機器位置での中性子束を求め、その情報をも とに第2評価として放射化計算を行なって放射化量 を求めている。

第1評価では、中性子束を計算する為に、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。また、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-lite モデル)を利用し、 そのモデルに MFC 検出器等の真空容器内機器を組 み込んだ。中性子源としては、ITER の 500 MW 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。

第2評価の放射化計算では、第1評価で得られた 中性子束を用いて、放射化計算コード FISPACT 7.0 を利用して放射化量を求めた。

2.2 計算結果

(a) MFC 検出器位置での中性子束の評価

第1評価で得られた MFC 検出器位置(図3参照) での中性子スペクトルを図4に示す。核融合反応が 起きた時に発生する中性子のエネルギーは 14.1MeV だが、ブランケットモジュール等で減速さ れ、ブロードなスペクトルを有していることが分か る。本計算により、通常の500 MW 運転時の中性子 束は~ $1.5 \times 1012 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ 程度と評価された。

MFC検出器

図 3 MCNP 用 ITER トカマク モデル (C-lite モデル)



(b) MFC 検出器の運転停止後の放射化計算

第1評価で得られた結果を入力データとして、MFC 検出器の構成物質の 90%以上を占める SUS304 に対して ITER 運転停止後の放射化量の計算を、放射化計算コード FISPACT を用いて 行なった。ITER の運転シナリオとしては、通常の核融合出力 500MW に加えて、終盤の2週間 に核融合出力 700MW の高性能運転を実施する SA2 シナリオというモデルを用いて放射化計算 を行なった。放射化計算に当たっては、運転停止後の放射化量に特に影響を与える以下の核種に ついてのみ放射化量を評価した。

⁵¹Cr、⁵⁴Mn、⁵⁶Mn、⁵⁵Fe、⁵⁷Co、⁵⁸Co、⁶⁰Co

本計算で得られた運転停止後から各核種の放射化量の時間経過を図5に示す。運転停止直後は 56Mn や ⁵¹Cr の核種が放射化の大部分を占めるが、運転停止後30日を過ぎると ⁵⁵Fe や ⁶⁰Co が 支配的になることが分かった。

また、表1に全放射化量の時間変化を示す。

After Shutdown	Radioactivity [Bq]		
1 hour	4.38E+14		
1 day	1.67E+14		
30 days	1.22E+14		
1 year	6.14E+13		

表1 放射化量の時間変化



本解析で得られた放射化量の時間変化の情報を現在 ITER 機構に提供しており、運転停止後の 機器の廃棄方法について協議をしているところである。もし、放射化量の低減を要求された場合、 図5で得られた結果から、MFC 検出器で使用している SUS304の内、⁵⁵Fe 及び ⁶⁰Co の使用割 合を減らしていく必要がある。

3. まとめ

本解析で、機器の廃棄に必要な放射化量の評価を BX900 を利用して実施した。その結果、各 核種の放射化量の時間変化を詳細に評価することができた。今後これらのデータを用いて、ITER 機構で実施される MFC の真空容器内機器の最終設計レビューで求められる「廃棄物管理」に関 する文書をまとめていく予定である。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 石川 他、「ITER 用中性子東モニタマイクロフィッションチェンバーの詳細設計の進展」 第 10 回核融合エネルギー連合講演会、2014 年 5 月 19, 20 日、茨城.

(4) 今後の利用予定:

平成 27 年度は、MFC 計測装置を除く、他の計測装置の予備設計レビューが実施され、核解 析の結果は予備設計の中でも重要な設計結果として位置づけられているだけでなく、各装置の設 計そのものにも重要な影響を与える。そのため、核解析の評価の中でも特に重要な機器の吸収線 量の評価やメンテナンス空間での停止後線量率に対して詳細かつ高精度な評価を実施していく。

5.4.5 ITER 周辺トムソン散乱計測装置における集光光学系の遮蔽設計のための核解析 Neutronic Analysis for Radiation Shield of the Collection Optics for ITER Edge Thomson Scattering System

谷塚 英一 計測開発グループ

(1) 利用目的:

ITER 計画で、日本は周辺トムソン散乱計測装置の開発を担当する。トムソン散乱計測の信号 は微弱であるため、ITER の計測ポート内で、最大 400 mm 程度の大口径ミラーを用いて炉心か らポート外に光を取り出す。一方、ITER の安全要求を満たすためには、核融合反応で生成され た中性子を遮蔽する必要がある。従って、トムソン散乱計測の集光光学系では、ポート内で効果 的な迷路状光路を形成することが必須である。本研究では、周辺トムソン散乱計測装置の集光光 学系について、現状の遮蔽設計と、それに追加の遮蔽物質を設置した場合のインタースペースに おける運転停止約 12 日後の線量率の計算を行い、その遮蔽効果を評価するため、BX900 大型計 算機による並列計算を行った。

(2) 利用内容·結果:

図1に概要を示す ITER の周辺ト ムソン散乱計測装置(ETS)は、水 平ポートに設置される。ITER の設 計では、一つの計測装置の設置によ る運転停止後約 12 日後のインター スペースにおける線量率の増加分は 15 · Sv/h 以下と目標値が定められ ている。特に ETS は、レーザーを入 射するレーザー入射システムと入射 レーザーによる電子からの散乱光子 を計測する集光光学システムからな り、これらのシステムは、レーザー 入射と計測のための貫通孔をそれぞ れ必要とすることから、それら二つ の貫通孔を通ってやってくる中性子 によるインタースペースの停止後線



図1 周辺トムソン散乱計測装置の概要

量率の増加分の評価を行う必要がある。今年度の研究では、これら二つのシステムの内、集光光 学システムによる停止後線量率の増加分の評価を行った。計算条件を以下に示す。

解析モデル	:	Local model (水平ポートのみを模擬した簡易的なモデルに集光光学 系のミラーと貫通孔を設けたもの)
計算コード	:	MCNP V5
断面積ライブラリー	:	FENDL 2.1
中性子発生分布	:	ITER の出力 700MW 運転を想定

運転停止後線量率は、図2の評価領域内で の平均値の他、クロージャープレートから約 25cm、75cm、125cm、225cmの位置に直径 25cmか40cmの球状の計算領域を設定し、 それぞれの位置における線量率を計算する 事でインタースペースにおける運転停止後 線量率の空間分布も評価した。



2.1 現状の設計による停止後線量率

周辺トムソン散乱計測装置の集光光学シ ステムでは、貫通孔を折り曲げて迷路構造に



することでプラズマからインタースペースへ直接到達する中性子を無くし、ドロワー内の遮蔽体 (ステンレス鋼と冷却水)で効果的に中性子を減衰できるように設計している。ここでは、この 迷路構造を採用した現在の設計による運転停止後線量率の評価を行った。結果を図3に示す。計 算の結果、運転停止後線量率は、評価領域で43μSv/hとなり、設計目標値の15μSv/hを上回っ た。また、運転停止後線量率の分布をみると、クロージャープレートから25 cm離れたプラズマ に近い領域では、最大で326μSv/hとなり非常に大きな値を示した。



図3 遮蔽体をステンレス鋼と冷却水のみとしたときの中性子束(カラー) および停止後線量率(数値)

2.2 遮蔽版を追加した場合の停止後線量率の評価

そこで、ドロワーの遮蔽体を通過してくる中性子を更に低減させるため、ドロワーとクロージ ャープレートの間に熱中性子を吸収する効果を持つホウ素を含むボロンカーバイド(B₄C)を設 置し、同様の計算を行った。その結果、図4に示すように、インタースペースの評価領域におけ る運転停止後線量率は2µSv/hに減少し、設計目標値を満足した。また、線量率はクロージャー プレートから25cm離れた位置でも最大11µSv/hとなり、B₄Cの遮蔽版のない場合に比べ、約 1/20まで減少した。これらの結果から、適切な遮蔽を行うことで、十分な遮蔽性能を持つ設計 が可能であることが確認できた。



図 4 B₄C 遮蔽体を追加したときの中性子束(カラー)および停止後線量率(数値)

(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 27 年度は、ETS のレーザー入射システムについても遮蔽性能の評価を行うとともに、当該年度の秋から冬に予定される予備設計レビューの終了に向けて、大型計算機 BX900 を利用した、さらに詳細で現実的な設計による核解析計算を行っていく予定である。

5.4.6 モンテカルロコード MCNP を用いた ITER 用 IR サーモグラフィーのための核解析 Neutronic Analysis for ITER Divertor IR Thermography using Monte Carlo Code MCNP

竹内 正樹、嶋田 恭彦 計測開発グループ

(1)利用目的:

国際プロジェクトである ITER 計画において、原子力機構は日本国内機関として複数の計測装 置の開発を担当している。ダイバータ IR サーモグラフィー(IRTh)は、ダイバータ板から放出 される赤外光からダイバータ板の表面温度を計測する装置である。ポートプラグ内に設置する光 学ミラーの冷却システムを設計する目的から、炉心プラズマからの放射線による光学ミラーの核 発熱の評価を行うことは重要である。また、機器の保守・点検の観点から、インタースペースの 運転停止後線量率の評価が必要となる。平成 26 年度は IRTh について設計変更が行われたため、 モンテカルロ中性子輸送解析コードである MCNP を用いた核解析によって、光学ミラーの核発 熱と運転停止後線量率の評価を行った。その際、計算結果について高い統計精度を得るため、 BX900 大型計算機による並列計算(ジョブクラス p128 及び p32)を実施した。

(2) 利用内容·結果:

2.1 はじめに

図1に示すように、IRThの光学系は、外側ダ イバータ用光学システムと内側ダイバータ用光 学システムから構成され、それぞれのシステムに ついて水平ポートプラグ内に光路と光学ミラー を設置することで、ダイバータ板からの赤外線領 域における光の伝送を行う。

IRThの上部に別の計測装置が設置されること になり、平成 26 年度に光学設計の変更が行われ た。そこで、新たな光学設計についてモデル化を 行い、光学ミラーの核発熱とインタースペースの 運転停止後線量率について、MCNP による核解 析を行った。計算モデル(図 2)及び計算条件を 以下に示す。

光学ミラーの材質は外側用・内側用光学システ ムの第一ミラーは共にモリブデンを使用した。ま た、それ以外のミラーについてはアルミニウムを 使用した。水平ポートは、主としてステンレス鋼 (SUS316L) 80 %と水 20 %とした。



図1 ITER 炉心とダイバータ IR サーモ グラフィーの概要

2.2 解析モデル

Local model (図 2)	:	計算時間の短縮のため、水平ポートのみを模擬した簡易的なモデル
計算コード	:	MCNP V5
中性子発生分布	:	ITER の出力 500 MW 運転(核発熱解析)および
		出力 700 MW 運転(運転停止後線量率解析)を想定

2.3 光学ミラーの核発熱

外側および内側ダイバータ用光学シ ステムの光学ミラー位置(図3)と核 発熱計算結果(図4、図5)を示す。 また、比較のため変更前の光学設計 (2012年)による値も示す。光学ミラ ーの核発熱は最大で0.2 W/cc程度とな り、設計変更前とほぼ同じ値となった。 外側用第9ミラーを除く他のミラーの 核発熱は、10%以下の高い統計精度 である。これらの結果から、設計変更 による光学ミラーの核発熱への影響は 小さいことが確認できた。

2.4 インタースペースの運転停止後線 量率の計算結果

インタースペースの運転停止後線量 率は、設計変更前の解析結果である 13 μSv/h から 2 μSv/h (統計精度 7 %) に大きく低減された。その際の中性子 束分布のコンター図を図 6 に示す。 IRTh の光学システム設置による線量 率の増加分の設計目標値は 7 μSv/h

(IRTh 上部に設置される他の計測装置と合わせて 15 μSv/h)であり、この



図 2 解析モデル (Local model)



図3 光学ミラーの位置

値を満足することが出来た。これは、設計変更によって光路の径が小さくなったことにより、光路を通過する放射線に対する遮蔽効果が高まったためと考えられる。

2.5 まとめ

本作業では、BX900大型計算機による並列計算を行う事で、IRTh について、新たな光学設計 による核解析を相対誤差10%以下の高い精度で行うことが出来た。今後、これらの核解析結果 をもとに、ミラーの冷却システム等について更に詳細な機械設計を行っていく。



図 4 外側ダイバータ用光学システムの 光学ミラーの核発熱

図 5 内側ダイバータ用光学システムの 光学ミラーの核発熱

5 6

Inner



図 6 インタースペース内の計算領域における運転停止後線量率と中性子束分布

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 竹内正樹, 杉江達夫, 竹山茂治, 嶋田恭彦, 石川正男, 山本剛史, 中村来, 北澤真一, 伊丹潔, 「ITER ダイバータ IR サーモグラフィー計測装置の詳細設計の進展」,第32回プラズマ・ 核融合学会年会, 2015年11月24日, 名古屋大学東山キャンパス.

(4) 今後の利用予定:

平成 27 年度は、当該年度中に予定される IRTh の予備設計レビューに向けて、大型計算機 BX900 を利用することによって、光学設計に詳細な機械設計(冷却システム、シャッター等) を含めたモデルによる核解析計算を行っていく予定である。

5.4.7 ITER 用周辺トムソン散乱計測装置のレーザー入射システムの遮蔽設計のための 核解析

Neutronic Analysis for the Design of Radiation Shield of the Laser Injection System of ITER Edge Thomson Scattering System

> 嶋田 恭彦 計測開発グループ

(1)利用目的:

日本が調達を進める国際熱核融合炉(ITER)の計測装置について、装置の保護や人手による 保守等の観点から、核解析による放射線遮蔽性能の評価は必須である。

日本が調達する各計測装置の内、光学機器は高温・高磁場・高放射線状態となる炉心のプラズ マ領域から離れた計測ポート(図1)と呼ばれる遮蔽体の内部や後部に設置される。しかし、運 転中にプラズマで発生する光を計測するためには、遮蔽体に貫通孔を開ける必要があり、この貫 通孔が放射線の通り道となり、以下に示すような悪影響を与える恐れがある。

・放射線による核発熱で光学ミラー等の計測機器が変形し、計測精度を劣化させる

・貫通孔を通過した放射線が周囲を放射化させ、計測機器の保守・点検のための空間(図1の インタースペース)の線量が上昇し、人の立ち入りを困難にする。

そこで、各計測機器では、これらの影響を低減させるために貫通孔を折り曲げ、その曲がり角

に光学ミラーを設置する事で、プラズマから 直接到達する放射線を遮蔽する迷路構造を採 用している。核解析は、この迷路構造等の遮 蔽性能を評価し、光学システムの設計のため の指針を与えることを目的としており、それ により、測定精度と遮蔽性能の両方の要求を 満たす光学機器の設計が可能となる。平成26 年度は、日本が調達する計測機器の一つであ る周辺トムソン散乱計測装置のレーザー入射 システムの遮蔽性能について、BX900 大型計 算機を用いた核解析により評価を行った。



図1 ITER の概要図

(2) 利用内容·結果:

2.1 はじめに

日本が調達する計測装置の周辺トムソン散乱計測装置(ETS)は、高いエネルギーのレーザー をプラズマに打ち込み、散乱された光を計測する事で、プラズマ周辺部の電子の密度と温度を計 測する装置で、水平ポートに設置される。図2にETSの概要を示す。ETSは、レーザー入射シ ステムと光学システムから成り、この内、レーザー入射システムは、機器の保守や調整を容易に するため、光学ミラーを含む全ての構成機器をインタースペース内に設置しなくてはならず、光 学ミラーをポートプラグ内に設置することができないことから、貫通孔を折り曲げることが出来 ない。そのため、プラズマからまっすぐ貫通孔を通過してくる中性子を遮蔽するため、貫通孔の 奥に遮蔽材(中性子ダンプ)が設置される。しかし、これまで行った核解析の結果から、この中 性子ダンプによって反射された中性子がインタースペースの線量を増加させることが分かった ため、今年度は、この反射中性子を低減させるため、中性子ダンプの材質や形状について核解析 によって検討した。

2.2 解析モデル

計算モデルと計算条件を以下に示す。

Local model (図 3) : 水平ポート (ポートプラグとインタースペースを含む領域)のみを 模擬した簡易的なモデルにレーザー入射システムの構造物と貫通 孔を設けたもの

- 計算コード : MCNP V5
- 断面積ライブラリー : FENDL 2.1

中性子発生分布 : ITER の出力 500 MW 運転を想定

計算は、レーザー入射システムのみの影響を評価するため、集光光学システムを含まないモデ ルで行った。

2.3 計算結果

2.3.1 材質の検討

中性子ダンプの材質について、中性子 の遮蔽効果のある遮蔽コンクリートか ら、熱中性子を吸収する効果のあるホウ 素を含むボロンカーバイド(B₄C)に変 更して計算を行った。その結果、中性子 ダンプによって反射されてインタースペ ースへやってくる中性子を 20%低減す る事が出来た(図 4(a)参照)。

2.3.2 形状の検討

中性子ダンプの表面で反射される中性 子を低減するため、B₄C を材質とした中 性子ダンプの表面にレーザー入射用の貫 通孔と同じ径 10 cm、深さは 35 cmの穴を 開け、穴の底面で反射された放射線を側 面で吸収する形状(図 5 参照)に変更し、 解析計算によりその効果を調べた。その 結果、インタースペースへやってくる中 性子束を更に約 20%低減することに成 功した(図 4(b)参照)。



図2 周辺トムソン散乱計測装置の概要



図 3 解析モデル (Local model)

2.4 まとめ

これらの結果から、中性子ダンプの材質と形状を適切な物に変更する事で、インタースペースへやってくる反射中性子を効果的に低減させることができることを示した。



図 4 中性子ダンプの材質と形状を変化させたときのインタースペースの中性子束 (中性子ダンプがコンクリートの場合で規格化)



図 5 中性子ダンプ表面に設けた穴による反射中性子の低減の様子 (中性子源と中性子ダンプのみの簡単なモデルで計算)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 嶋田他、「モンテカルロ粒子輸送コード MCNP による周辺トムソン散乱計測システムの核解 析」第31回プラズマ・核融合学会年会、2014年11月18-21日、新潟.

(4) 今後の利用予定:

平成 27 年度は、本研究結果を基に ETS のレーザー入射システムによる運転停止後線量率への 影響評価を行うとともに、システムの構造物の表面線量率等についても核解析による評価を行 う。また、秋から冬に予定される予備設計レビューの終了に向けて、大型計算機 BX900 を利用 した、さらに詳細な機械設計による核解析計算を行っていく予定である。

5.4.8 微小球充填体内識別コードの開発整備

Development of Discrimination System for Structural Material 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は、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重要である。

これまでの開発において、微小球充填を個別要素法 DEM 解析で実施し、様々な充填方法で流 動解析を可能とした。他方、充填体内流動実験(図1)も実現象把握のため実施しており、再現 性確認のために、実験結果と充填体内流体解析の直接比較は重要である(図2)。そのために充 填体内流動実験での充填配置をそのまま取り出し再構築(数値化)することが必要であり、流体 解析の境界条件を実験と同一にし、実験結果と直接比較することが求められる。本開発整備では、 充填体内流動実験での微小球充填体をレーザーシート光でスキャンし、数値データとして取り出 すコード開発を実施した。さらに、再構築された粒子の空隙に計算格子を作成することで、流体 解析を実施した。粒子近傍の空隙により多くの格子を必要とするため計算コストは膨大であり、 大規模かつ長時間となる数値計算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。



体系図

(2) 利用内容•結果:

および流れの可視化

これまでは個別要素法 DEM 解析で仮想的に粒子を充填し、流体解析を実施してきた。今回、3 次元的に動画でスキャンした充填体をデジタル化するために、図3に示すフローで微小球充填体 内識別コードを開発し、流体解析を実施した。微小球充填体内識別コードでは、図 4 (左図)の ユーザーインターフェースから粒子の中心点を抽出し、図 4 (右図)の充填配置をデジタル的に 再構築することが可能である。粒子抽出精度の確認のため既知の中心位置が必要であり、充填筐 体(x,y,z=150 mm×28 mm×150 mm)に模擬粒子(直径 15 mm)をデジタル上で充填し た。模擬粒子を実験データの粒子と仮定し、微小球充填体内識別コードで抽出した。中心位置が 既知の模擬粒子と抽出した中心位置との差は、平均で約 0.5 mm(最大約 1.2 mm)であり、粒子 直径に対して約 3%の精度で粒子を抽出することに成功した(図 5)。



図3 微小球充填体内識別コードから流体解析へのフローチャート



図4 微小球充填体内識別コード。左:ユーザーインターフェース例 右:抽出粒子



図5 模擬粒子の粒子中心位置と充填体識別コードで抽出した粒子中心位置との差



図 6 微小球充填体内の流速[m/s]コンター図。(A)汎用ソフトで作成された模擬粒子。(B)開発した充填体識別コードで構築した粒子。

さらに、模擬粒子と再構築された抽出粒子の2種類の充填体において、充填体内部の3次元流体解析を実施した。粒子が存在しない空隙部分に計算格子を作成して粒子の境界面を Non-slip 条件とし、流体は27℃の水とした。図6に各充填体における断面(壁からx方向に7mm)の速度 コンター図を示す。模擬粒子と再構築された抽出粒子の充填体において、速度分布の有意な差は 観察されず、今回開発した充填体識別コードで粒子が精度よく抽出された事が実証された。

本コード開発により、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精度を実証可能とした。本コードは汎用性が高く、産業のみならず学術的にも重要なツールとして期待される。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

(4) 今後の利用予定:

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。

5.5 核融合研究開発部門 六ヶ所核融合研究所 Sector of Fusion Research and Development Rokkasho Fusion Institute

5.5.1 ITER/TBM 遮蔽解析

Shielding Analysis 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。TBM 及び遮蔽 体、配管、生体遮蔽体等の CAD データを CAD/MCNP 変換コードを用いて MCNP データに変換し、これらの MCNP データ を ITER 全体の MCNP データに組み込 み、MCNP 解析を行い、TBM ポート内 の運転中の実効線量率、運転停止後の実 効線量率等を評価した。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。 計算モデルを図 1~3 示す。運転停止約 12 日後の TBM の中心に沿った実効線量 率の分布を図4に示す。TBM を取り付け



図1 MCNP 形状入力データ(垂直断面)



図2 MCNP 形状入力データ (水平断面)

るためのフレームと TBM ポート壁間にはスリット状のギャップがあり、Case 1 はギャップからの放射線ストリーミングを考慮した場合の線量率、Case 2 はギャップを透過する粒子を消滅さ

せた場合の線量率である。TBM は ハンズオンアクセスによるメンテ ナンスが必要であり、運転停止約 12 日後に、遮蔽体の背面での実効 線量率が毎時100µSv以下となるこ とが要求されている。Case 2 では 実効線量率が上限値以下であるが、 Case 1 では上限値を超えている。 今後は、フレームとポート壁間のギ ャップからの放射線ストリーミン グを低減させることが課題である。



図3 MCNP 形状入力データ(垂直断面拡大図)



図4 運転停止約12日後のTBMの中心に沿った実効線量率分布

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) S. Sato, H. Iida, H. Tanigawa, T. Hirose, K. Ochiai, C. Konno, M. Enoeda, Shielding analysis of ITER/TBM, Plasma2014, Niigata, 2014, 19PB-086, http://www.jspf.or.jp/PLASMA2014.

(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。

5.6 原子力科学研究所 Nuclear Science Research Institute

5.6.1 FCA 燃料貯蔵庫水没時における臨界性評価 Evaluation of Criticality in FCA Fuel Storage at Submergence

江口 悠太、福島 昌宏、大泉 昭人 核変換システム開発グループ

(1) 利用目的:

高速炉臨界実験装置(FCA)の保安規定変更に伴う安全評価の一環として、燃料貯蔵庫の水没時を想定した貯蔵庫内燃料の臨界性評価を、連続エネルギーモンテカルロコード MVP 及び核デ ータライブラリ JENDL-4.0 により実施した。計算体系が複雑且つ非均質体系であったため、計 算時間及び計算負荷の観点から大規模並列計算機 BX900の利用が必要不可欠であった。

(2) 利用内容·結果:

FCA に存在する高濃縮ウラン燃料 及びプルトニウム燃料について、ま ず、FCA 燃料専用収納容器内での燃 料配置形状による臨界性への影響を 検証するため、各々の専用収納容器 のみを積み重ねた図 1 に示すような 体系を作成し、燃料の間隙及び周囲 を水で満たし、燃料間隙寸法(GAPX, GAPY)をパラメータとして計算を実 施した。

その後、図2に示すような燃料専 用収納容器(BC)及び燃料を収納し た核燃料輸送のための収納容器

(Container)が貯蔵庫内で混在した 体系を作成し、各収納容器の周囲を 覆う水の原子個数密度をパラメータ として臨界性評価を実施した。

解析体系1の結果について述べる。 専用収納容器内部の燃料配置につい て、各々の専用収納容器の幾何構造 上取りうる最大間隙まで、燃料間隙



図 1 解析体系 1 (収納容器内燃料配置形状による 臨界性への影響評価)



図 2 解析体系 2 (専用収納容器及び燃料輸送のための収納容器混在時の臨界性評価)

寸法(GAPX,GAPY)を変化させて実効増倍率を計算した。この計算結果から得られた実効増 倍率が最大となる燃料形状を用いて図2に示す解析体系2を作成し、貯蔵庫内の燃料専用収納容 器(BC)と核燃料輸送のための収納容器(Container)が混在した場合の臨界性について評価を 実施した。

解析体系2の結果を図3に示す。燃料専用収納容器(BC)及び核燃料輸送のための収納容器 (Container)に収納される高濃縮ウラン燃料及びプルトニウム燃料の組み合わせ毎に、水の原 子個数密度を完全水没(水密度100%)から真空(水密度0%)まで変化させた計算を実施した。 いずれの条件においても実効増倍率が0.95を超えることはなく、貯蔵庫内は未臨界状態である ことを確認した。



図3 解析体系2の計算結果

(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:

本評価結果は委員会等で審議された後、適切な修正及び再計算を求められる可能性がある。臨 界計算、遮蔽計算等、原子炉の安全評価を進めていく上で必要な検討において大型計算機を利用 した解析計算は必要不可欠であり、今後も本評価に係る再計算に加え、原子炉施設の安全評価等 で利用していきたい。

5.6.2 加速器 BNCT 施設の遮蔽設計計算

Shielding Design of Accelerator-based BNCT Facility at INMRC

中村 剛実 研究炉利用課

(1)利用目的:

加速器 BNCT 装置は、加速器及び BNCT の治療を行う中性子源から構成される。これらの装置はそれぞれ加速器室及び照射室に設置され、排気・排水設備等周辺機器を配置する機械室等を含めて、加速器 BNCT 施設を構成する。この施設は、放射線障害防止法(RI法)に基づく施設として、管理区域を設定する必要がある。そこで、RI 法に基づく使用変更許可申請を行うため、加速器 BNCT 装置等を含めた照射室の遮蔽設計計算を行い、線量を評価した。本遮蔽解析ではモンテカルロコード MCNP を使用しているため統計精度を高める必要がある。このため、大型並列計算機 BX900 の利用が不可欠である。

(2)利用内容·結果:

照射室内に設置する加速器 BNCT 装置、加速器加速管及びそれらの遮蔽体等に関して、材質、 寸法、配置条件等にかかる最適化を行い、照射室全体の遮蔽計算を行った。図1に照射室の計算 モデルと線量評価点を示す。評価位置⑦、⑪、⑬における基準は、常時人が立ち入る管理区域の 1mSv/週である。また、評価位置②、④、⑤、⑥、⑨、⑫、⑭における基準は、管理区域にかか る遮蔽外側における線量、1.3mSv/3 月である。表1に常時人が立ち入る管理区域における線量 の計算結果を、表2に管理区域に係る遮蔽外側における線量の計算結果を示す。表より、加速器 BNCT 装置を設置した照射室は、管理区域としての基準を満たしていることが分かる。図2 に

照射室内の2次元線量分布を示す。加 速器 BNCT 装置周りの遮蔽体及び加 速管周りの遮蔽体により、中性子及び ガンマ線は十分遮蔽されていること が確認できる。また、ビーム孔及び加 速管からの中性子ビームは、壁との相 互作用により散乱線及び2次ガンマ線 を発生させ、照射室内の空間線量を高 くする要因となっていることが分か る。

以上より、これらの結果は法令を十 分に満たす結果となり、申請が可能で あることを示している。今後、本解析 結果に基づいて変更許可申請及び遮 蔽体等の製作を進める予定である。

表1 線量計算の結果 (常時人が立ち入る管理区域の線量)

評価位置	FSD		線量率 (mSv/週)		
	中性子	ガンマ線	中性子	ガンマ線	中性子 + ガンマ線
Ø	0.279	0.343	4.81x10 ⁻⁹	3.99x10 ⁻⁴	3.99x10 ⁻⁴
\odot	0.260	0.078	1.16x10 ⁻³	4.46x10 ⁻¹	$4.47 \text{x} 10^{-1}$
13	0.293	0.894	1.19x10 ⁻⁴	2.16x10 ⁻³	2.35x10 ⁻³

表 2 線量計算の結果 (管理区域にかかる遮蔽外側における線量)

苏/正/六里。	FSD		線量率 (mSv/3月)		
₱쒸1Щ1辺100 -	中性子	ガンマ線	中性子	ガンマ線	中性子+ガンマ線
0	0.228	0.067	$2.84 \text{x} 10^{-6}$	1.25x10 ⁻²	1.25×10^{-2}
4	0.233	0.280	1.81×10^{-3}	1.52x10 ⁻¹	1.54×10^{-1}
5	0.553	0.103	$3.40 \mathrm{x10^{-6}}$	1.58x10 ⁻²	1.58×10^{-2}
6	0.285	0.110	$1.49 \mathrm{x10}^{-4}$	3.73x10 ⁻²	3.75x10 ⁻²
9	0.415	0.292	8.95x10 ⁻⁹	5.85x10 ⁻³	5.85x10 ⁻³
$^{\odot}$	0.697	0.332	3.83x10 ⁻⁷	8.13x10 ⁻³	8.13x10 ⁻³
. 4	0.505	0.139	1.95×10^{-7}	1.24×10^{-2}	1.24×10^{-2}



図1 照射室の計算モデル及び線量評価点



図2 照射室内2次元線量分布

(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:

加速器 BNCT 装置の放射化計算及びコリメータ部の詳細設計を行う予定である。
5.6.3 JRR-4 の廃止措置における放射化放射性物質の評価に必要な中性子束分布の 解析

Analysis of Neutron Flux Distribution Required for Evaluating Radioactive Inventory in Decommissioning of JRR-4

> 石黒 裕大 JRR-4 管理課

(1)利用目的:

2013年9月の日本原子力研究開発機構改革計画において、JRR-4を廃止する方針が決定となった。そのため、JRR-4では規制行政庁に提出する廃止措置計画申請書を作成することとなった。 廃止措置計画申請書では、全ての放射化放射性物質を評価することが求められていることから、 第1ステップとしてまず中性子束分布を解析する必要があり、以下の条件を満足することが要求 された。

①全ての放射化放射性物質を求める必要があることから炉心近傍のみならず放射化の可能性のあるコンクリート領域をも含めた広範囲な評価が必要であること。

②JRR-4 は比較的複雑な体系であるため、モデルを詳細に入力できる計算コードであること。 ③経済的に有利な廃止措置を実施させるため、精度良く評価できる計算コードであること。

これらを満足するためには PC では時間がかかりすぎてしまう等の問題があるため、本解析で は機構のスパコン BX900 上で MCNP を用いて広範囲かつ複雑な体系下での中性子束分布を精 度良く解析することとした。

(2)利用内容·結果:

JRR-4 では、これまで No.1 プールと No.2 プー ルでの運転実績がある。それぞれの運転時におけ る中性子束分布について解析した結果、測定値等 とほぼ同じ値を得ることができ中性子束分布を 広範囲に精度良く解析することができた。

参考に、図に No.1 プールの中性子束分布結果 を示す。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):



1) Yasuhiro ISHIKURO, Nobuhiko HIRANE and Tomoaki KATO "Decommissioning Plan of JRR-4", 8th International Symposium on Materials Testing Reactors (ISMTR-8), 2015, Australia

(4) 今後の利用予定:

今後は、第1ステップで求めた中性子束分布、運転実績、中性子放射化量及び核分裂生成物生成量等の計算コード ORIGEN-S、ORIGEN-S用ライブラリ作成コード COUPLE を用いて放射化放射性物質を評価し、JRR-4の廃止措置計画申請書の作成に資する。なお、JRR-4の廃止措置計画申請書は平成 27 年度中に申請する予定である。

5.7 原子力科学研究部門 J-PARCセンター Sector of Nuclear Science Research J-PARC Center

5.7.1 中性子散乱における試料吸収補正計算コードの並列化 Parallel Processing of the Calculation Code for the Neutron Sample Absorption on MLF, J-PARC

稲村 泰弘、伊藤 崇芳*1、山田 武*1
物質・生命科学ディビジョン 中性子利用セクション、
*1 総合科学研究機構 東海事業センター(CROSS) 利用促進部

(1) 利用目的:

日本原子力研究開発機構と高エネルギー加速器研究機構は共同で大強度陽子加速器施設 (J-PARC)を運営している。本施設の中の物質・生命科学実験施設(MLF)では、核破砕パル ス中性子源の周囲に放射状に中性子ビームラインを配置し基礎科学から産業利用に渡る広範な 中性子実験が実施されている。

ビームラインの中性子散乱装置では、測定試料に様々なエネルギーの中性子ビームを入射す る。中性子は物質内部で原子や分子と散乱を起こしエネルギーや軌道が変化するが、この散乱さ れた中性子を試料周りに設置した検出器により感知する。検出器にて検出された場所や時刻、強 度などから、試料内部でどのようなエネルギーや運動量の変化が起きているのかを観測でき、そ こから原子や分子の配置や格子振動などのエネルギー励起の現象に対する物理量を知ることが できる。

ただし、中性子は試料内部で散乱だけではなく吸収も起こす。この結果、検出器に到達する強 度が変化し観測される物理量に誤差が生じる。そこでより精度の高い物理量を得るためには、試 料内部で発生する吸収過程を計算し、観測された中性子散乱強度に対して補正を行う必要があ る。

この計算には、試料の原子分子の種類と存在比、中性子に対する吸収断面積、試料の形状、入 射する中性子と散乱された中性子の方位などから考えられる試料内部の中性子の通過経路、など の情報を利用する。中性子ビームラインでは観測の精度を上げるために、この吸収補正の値を計 算するコードをソフトウェア会社に発注し、測定結果の解析に利用している。その計算自体は、 ビームラインに設置されたワークステーションや PC を利用して行っているが、試料に入射する エネルギー分布の情報、試料の組成と形状、検出器の配置情報、散乱中性子のエネルギー情報な どで計算量が多くなり、計算に数日の時間がかかっている。また実験ごとに異なる試料形状など 必要となる条件も異なるため、再計算も必要な場合も多く、計算の高速化は大きな課題となって いた。このコードを高速に処理することが目的である。

(2) 利用内容•結果:

対象となる中性子吸収補正計算プログラムは C++で書かれており、1 台のワークステーション 上で動作している。このプログラムは、テキストファイルに書かれている試料情報(組成、質量、 形状)を読み込んで、検出器単位ごとに補正用データを計算する。実際に使用される場合、検出 器の数およびエネルギーの分割数などが膨大となっており、一つの試料につき1台のワークステ ーション上で一日から数日の計算時間が必要となっている。このコードに対する高速化・並列化 処理の実現の作業を依頼した。

実際にMLFのビームラインに設置されている中性子散乱装置の検出器の配置や、試料(組成 と割合、形状は2重円筒)、測定条件(入射エネルギー、散乱後のエネルギー)などの情報をテ キストの入力データとし、それぞれの入力に対する補正値をテキストデータとして出力すること とした。高速化・分散化を行うコードでは、1つの検出器の位置と1組の入射/散乱エネルギー から吸収補正に必要な4つの値を計算する処理を、すべての検出器位置および測定条件に合致す るすべての入射/散乱エネルギーを組み合わせて多数行う。高速化の作業においてはこれらの処 理を組み合わせごとに並列化させ、また計算処理負荷の平準化を静的、および動的に分散し、効 率を調査していただいた。その結果、若干動的不可分散が数%遅いという結果であったが、対象 となる処理のサイズが大きくなると差異はほぼなくなるという結論を得た。

これらの高速化・並列化および負荷の平準化処理により、128 並列で実行した場合、ほぼ 100 倍以上の高速化を達成した。これはこれまで通常数日かけていた処理が1時間程度で終了するこ とを意味する。MLFにおいて、外部ユーザーが測定を行うのは数時間から数日のスパンであり、 この成果の活用次第ではユーザーの測定中に補正値の計算を行い、より精度の高い物理量を測定 中に得ることができることになろう。これは MLF の中性子散乱施設における成果創出に大いに 資するものと考えられる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

(4) 今後の利用予定:

今回の高速化により、ビームラインの測定条件に合わせた吸収補正値がその測定時間内に計算 でき、得られた結果に即反映させて、その場でより精度の高い物理量を得られる可能性が十分に あることが明らかになった。今後はこの補正値計算処理と、日々行われている測定・解析処理と を、どのように結びつけるかが次の課題である。またコードの開発としてはさらに異なる試料形 状に対応させることや、入出力のデータをより扱いやすいものへと改良することなどを考えてい る。

5.7.2 核変換実験施設 TEF-T 第二ターゲットの成立性検討及び粒子輸送計算用詳細モ デルの作成

Feasibility Study of Second Target of TEF-T and Its Detailed Modeling for Particle Transport Calculation

岩元 大樹、武田 和雄*1

核変換システム開発グループ、*1 高度情報科学技術研究機構

(1) 利用目的:

J-PARC において、加速器駆動核変換システム(ADS)による長寿命核種の核変換技術に関 する実験研究を行うためにADS ターゲット試験施設(TEF-T)の建設を計画している。TEF-T では、ADS 特有のターゲット及び陽子ビーム窓の熱構造、高放射線量下での材料の腐食等に関 する研究を目的とする鉛ビスマス合金ターゲット(以下、第一ターゲットと呼ぶ)と、多目的利 用に供される第二ターゲットを設置することを想定している。本検討は、多目的利用として「超 冷中性子実験」及び「宇宙線模擬中性子照射試験」を実施することを想定して、TEF-T 第二タ ーゲットの成立性を調査するとともに、第二ターゲットを考慮した TEF-T ターゲット施設の粒 子輸送計算用詳細モデルの作成を行うことを目的とした。

粒子輸送計算では、第一及び第二ターゲットから発生する中性子の時間構造を十分に把握する ことは、超冷中性子実験の成立性を検討するうえで重要であり、宇宙線模擬中性子照射試験の検 討においては、遮蔽体中の非常に長い中性子導管を通過する粒子のスペクトルを精度よく予測す る必要がある。そこで本検討は、これらの解析機能を有し、計算精度が検証されている粒子・重 イオン輸送計算コード PHITS を用いて解析を行った。本解析は粒子場の正確な評価のために、 ターゲット及び遮蔽体の3次元的な複雑形状における多大な計算時間を必要とする。そのため、 大型計算機システム BX900 による並列環境が不可欠である。

(2) 利用内容·結果:

図1に、第二ターゲットのモデルを示す。第二ターゲットは、第一ターゲットに設置する陽子 ビーム窓と同様、挿入プラグ方式とし、タングステンを用いて 400 MeV 陽子ビームがフルスト ップする構造とした。タングステン上部には、中性子のエネルギーを冷・超冷中性子領域に減速 させるために、液体ヘリウムを配置し、液体ヘリウムから陽子ビーム入射軸 90 度方向に超冷中 性子導管を設けた。さらに、宇宙線模擬中性子照射用に、タングステンからビーム入射軸 30 度 方向に中性子導管を設けた。

本検討では、はじめに第二ターゲットから生成される超冷中性子と第一ターゲットから発生す る二次中性子の時間構造を評価し、時間的に弁別可能な第二ターゲットの最適な位置を決定し た。決定した位置をもとに、第二ターゲットを配置することによる追加の遮蔽体の厚さ及び物量 を評価し、遮蔽体外側で目標線量を下回るように最適化した。次に第二ターゲットから発生する ビーム入射軸 30 度方向の中性子スペクトルを評価し、これが遮蔽体外側の測定点で宇宙線中性 子スペクトルと類似していることを確認した。



図1 第二ターゲットのモデル

以上の検討結果を踏まえ、第二ターゲット及び追加遮蔽体を含めた TEF-T ターゲット設備の 粒子輸送計算用詳細モデルを作成した。図2に、第二ターゲット及びその周辺部のモデルを示す。



図2 第二ターゲット及びその周辺部のモデル

(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:

TEF-T 詳細モデルの作成を継続して実施していく予定である。

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

5.8.1 C60 フラーレンのセシウム吸着材としての可能性の理論計算

Theoretical Study of Absorption of Cs and Csl to Fullerenes

小林 孝徳、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:

私達は、長寿命のセシウム同位体¹³⁵Cs(τ=2.3×10⁶ yr)を選択的に分離回収することを目的 として研究を進めている。長寿命同位体を含む放射性廃棄物の最終処理について、現段階ではガ ラスなどで固化させて地層深くに埋める計画である。しかし、特に Cs などは水に溶けやすい為、 地層処分後でも土壌に流れ出てしまう可能性が考えられる。そこで、長寿命同位体のみを分離し、 核変換できる技術が実現すれば、超長時間の保管の必要が無くなる為、管理等の負担を大幅に減 らすことが出来る。

選択的な分離回収の実現の為に、私達は二原子分子 CsI 同位体の回転定数の違いを利用して分離することを計画した。その模式図が図 1 である。その計画は次の流れによるものである。(1) 二原子分子 CsI で特定の同位体のみを選択的に回転励起する。(2)回転励起した CsI 分子のみを 選択的に解離する。(3)解離で生成した Cs のみを選択的に吸着回収する。このようにして ¹³⁵Cs のみを回収することが出来たら、これに中性子を衝突させることによって核変換を起こし、安定 な核種に変換させることが出来る。¹³⁵Cs の場合は、¹³⁶Cs ($\tau = 12$ day)を経由して ¹³⁶Ba に変換する。



図1 当計画による同位体選択的な Cs の分離回収スキーム。(a) 特定の同位体 CsI のみ、回転 励起を起こす。この段階では、回転励起されている CsI と励起されていない CsI が存在 する。(b) 回転励起された CsI のみ、その結合を切断する。この段階では CsI、Cs そし て I が存在する。(c) 結合切断された Cs のみ、吸着材で吸着する。

本計画では、チャンバー内に二原子分子 CsI の蒸気を発生させ、そのうちの特定の同位体¹³⁵CsI のみを解離し¹³⁵Cs を生成させることになるとおもわれる。チャンバー内は、CsI が大量に存在 する中、¹³⁵Cs は存在することになる。その為、吸着回収プロセスには、CsI は吸着せず Cs は吸 着するような性質を持つ物質を吸着剤として用いることが考えられる。

ところで、CsI はその電荷が大きく偏り、化学的特性は Cs+と I のそれと同様だと考えられる。 このことから、CsI との相互作用は静電相互作用によるものが優先されるであろう。それに対し、 Cs 原子は電子ドナーと成り、相手と結合を形成することが考えられる。このことから、電子授 受による相互作用が優先されるであろう。この CsI と Cs 原子の化学的特性の違いを利用するこ とで、Cs のみを回収できる可能性がある。

CsIとの静電相互作用は弱いがCs原子と電子授受をし易いであろう物質として、我々は半導体を考え、その代表としてフラーレンを考えた。本研究では、フラーレンと、CsそしてCsIとの相互作用エネルギーを密度汎関数法にて求めた。C60が、本計画におけるCs吸着材として適当であるかどうかを示す。

(2) 利用内容·結果:

 C_{60} と Cs そして CsI との吸着体について、構造最 適化、振動計算を行った。さらに、振動計算から得 られるパラメータを元に、ギブスエネルギー、平衡 定数、そして Cs 吸着と CsI 吸着の平衡定数比を求め た。分子計算には全て Gaussian 09 を用いた。レベ ルは混合密度汎関数法 CAM-B3LYP を用いた。基底 関数についてであるが、構造最適化、振動計算には、 C: 6-31G(d)、Cs、I: def2-SVP を用いた。この構造 最適化で得られた構造を用い、C: 6-31+G(d)、Cs、 I: def2-TZVPP を用いてエネルギー計算を行った。

図 2 に最適化構造を示す。何種類かの初期構造か らの最適化計算を試みたが、Cs-C60、CsI-C60共にこ の一種類に最適化された。共に、Cs原子は C60 の 6 員環上空に最適化された。しかし、Csのフラーレン からの距離に差異が見られた。Cs-C60 の場合、その 距離は 3.312 Å であったのに対し、CsI-C60 の場合は 3.710 Å と計算され、より遠い位置に最適化された。 これは C60 に対する、CsI と Cs との相互作用の強さ の違いによる結果であると思われる。 Cs CsI Cs CsI Cs CsI Cs CsI Cs 3.434 Å 3.710 Å 4.219 Å Cs 3.434 Å 4.219 Å

図 2 最適化構造。幾つかの構造パラ メータもこの図に載せた。尚、 同レベルにおける CsI 二原子分 子の結合距離は 3.399 Å であ り、C60 に吸着することでわず かながら結合距離が伸びた。

相互作用エネルギーを見ると、Cs-C₆₀は 34.16 kcal mol⁻¹であったのに対し、CsI-C₆₀は 2.90 kcal mol⁻¹となり、かなりのエネルギー差が算出された。この結果の差異の原因は、結合による 電子移動の有無によるところが大きい。Cs-C₆₀の場合、Cs の 6s 電子がほとんど全て C₆₀ へ移動 したのに対し、CsI-C₆₀の場合は電子移動はほとんど起こらなかった。電子移動の有無によって、 吸着物質を分けることが出来る可能性があるものとして C₆₀を候補としたが、これはあたったことを示唆している。



図3 (左)ギブスエネルギーの温度依存性。(右) Cs 吸着の平衡定数と CsI 吸着の平衡定数 の比の温度依存性。平衡定数比は対数による表示である。

図3に、ギブスエネルギーの温度依存性を載せた。CsI-C60の吸着ギブスエネルギーは200Kにおいて既に正であり、自発吸着は起こりにくいことを示している。それに対し Cs-C60の吸着ギブスエネルギーは 200Kから 1200Kの温度領域で常に負であり、自発的な吸着が起こることが期待される。

図3には、Cs 吸着の平衡定数とCsI 吸着の平衡定数の比の温度依存性も載せた。この値が大きいほど、Cs とCsI の分離が良くなることが期待されることを表している。温度が高ければ高いほど、その分離は単調に悪くなる。それでも800 K では約10⁹、1000 K でも約10⁷程度の分離が期待できる。この温度領域は、我々がCsI 結晶から、この二原子分子を発生させる為に想定している温度となる。この計算結果から、C60 は、我々の計画において、CsI を吸着させずにCs を吸着させる物質として適している物質の1つといえる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) "Cs 及び CsI のフラーレンへの吸着についての理論計算",小林孝徳,横山啓一,分子科学討論会,2014 年 9 月 27-30 日,東広島.
- 2) "C₆₀フラーレンのセシウム吸着材としての可能性の理論計算",小林孝徳,横山啓一,理論化 学討論会,2015年5月20-22日,大阪.

(4) 今後の利用予定:

平成 26 年度は特に、C₆₀一分子と各種吸着物質 1 分子との相互作用を計算した。しかし、実際吸着された後にも、光解離されていない(同位体選択的に解離していない)CsI 等との Cs 交換反応が、C₆₀表面でも起こる可能性がある。その為、一時的にでも Cs が他の物質との化学反応を起こさないようにすることが必要である。その可能性の 1 つとして、C₆₀結晶内に潜り込む 過程について現在考察している。

5.9 原子力科学研究部門 原子力基礎工学研究センター Sector of Nuclear Science Research Nuclear Science and Engineering Center

5.9.1 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:

基本計算例として、平板境界層乱流を対象に LES 計算を実行した。一般に、風洞実験のよう に高レイノルズ数流れを対象にする場合、地表面ごく近傍の薄い層を十分に解像しなければなら ない。そのため、計算負荷の問題から、十分に高いレイノルズ数を設定することはできなかった。 しかしながら、計算時間の高速化・領域分割計算の実現により、風洞実験並みの高レイノルズ数 流れの計算が可能となった。図1は、その境界層流れの瞬間場を表したものである。地表面との 摩擦により、下層部で境界層が活発に揺らいでいる様子などが捉えられているのが分かる。



図1 境界層乱流の瞬間場(左側:鉛直-主流断面、右側:鉛直-水平断面)

(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。

5.9.2 福島第一原子力発電所から放出された¹³³Xe の放出量に関する検討 Investigation on the Release Amount of ¹³³Xe from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Station

古野 朗子、小田 哲三+1、永井 晴康 環境動態研究グループ、+1 核不拡散・核セキュリティ総合支援センター

(1)利用目的:

福島第一原子力発電所(1F)の事故で大気中に放出された放射性物質の移行挙動は、1Fを含む数百~1000km 領域においては明らかになってきている。一方、半球規模における移行挙動に関しては、いくつかのグループが試みているものの、定量的には再現できていない。本研究では、世界版緊急時環境線量情報予測システム WSPEEDI-II の広域シミュレーションにおける課題であった、粒子数不足による過小評価を並列計算により改善し、日本領域~全球まで一貫した移行挙動解析および放出源情報推定を目的としている。本年度は、未解明の部分の多い沈着過程を考慮する必要のない希ガス(¹³³Xe)について、WSPEEDI-II を用いた北半球規模の解析を行い、北半球の CTBT 測定データと比較して検証を行った。その際、検証の前提となる¹³³Xe の放出量の未解明部分についても考察を行った。

(2) 利用内容·結果:

1) 大気拡散解析

気象予測計算および北半球領域の拡散解析に BX900 を利用した。気象予測計算は、北極を中 心としたポーラーステレオ図法で約 10,000km 四方、水平分解能 40km の格子を設定し、1F 事 故が起こった 2011 年 3 月 11 日の 00 UTC(世界時間)を計算開始時刻として、5 月中旬までの およそ 2 か月分を 32 並列で実施した。一方、拡散計算については、気象予測計算と同様の領域、 水平分解能、計算期間に関し、3 月 12 日 03 時~3 月 27 日 00 時までを放出期間と仮定した拡散 計算を実施した。放出期間のうち 3 月 17 日 00 時までを 3 時間ごとに、以後 3 月 27 日までの期 間を 24 時間ごとに分割し、それぞれの期間のみ放出を行う 48 ケースを設定して並列計算を実 施した。各ケースとも、3 時間ないし 24 時間の放出継続時間について 200 万個の仮想粒子を放 出させた。この計算に要したメモリは約 190GB、計算時間は 12 時間であった。

検証データとしては、CTBT 国際観測所網のデータを利用した。上記の計算期間内、ほぼ欠測 なく1日2回¹³³Xe 測定を実施していた観測所は、計算領域中に9地点(高崎、米国4地点、欧 州2地点、極東2地点)存在する。

放出量としては、Hoshi et al. (2012) *1、Stohl (2012) *2 が提唱した放出量、および本研 究で提唱したシンプルな放出モード(各号機からの短期放出および炉内残存 133Iの壊変を考慮し た継続的放出)の3つを仮定して拡散計算を実施した。これらの結果と測定値を比較した結果、 ファクター5以内で計算できた割合が約7割に達し、従来の課題であった粒子数不足による過小 評価の改善を確認した。

JAEA-Review 2015-028

図1に、事故から約10日が経過した2011年3月21日09時(日本時間)における¹³³Xeの 水平濃度分布図を示す。左図は従来の放出期間を分割しない1度の計算で粒子数250万個を用 いた結果、右図は今回の並列計算手法を用いた結果である。図中の青い点は検証に用いたCTBT の測定点を示す。左図では濃度分布の中心付近でもプルームの形がはっきりせず、濃度が一様で ない。これは粒子数が不足していることにより、統計誤差が大きくなったことを示す。一方右図 では、分布の周辺では濃度の不均一性が多少みられるものの、中心部分では改善されている。



図1 2011 年3月21日09時における¹³³Xeの水平分布図。 左は従来の放出期間を分割しない 1度の計算(放出粒子数250万個)の結果、右は並列計算手法(3時間放出の480ケース それぞれに粒子数200万個)の結果である。

2) 放出量推定

前節で用いた3つの推定放出量は、1Fの1,2,3各号機の圧力減少のタイミングに応じてインベントリほぼ全量の放出を仮定している点で概ね共通しているが、3月14日に圧力が上昇した2号機の事象に関連する放出については、タイミングに差異がある。

1号機で水素爆発が発生した3月12日、3号機で水素爆発が発生した3月13日ともに東日本 領域で西風が卓越しており、1Fから放出された放射性物質は主に太平洋方向に流されていた。 一方、3月14日から15日にかけて弱い低気圧が日本付近を通過したことにより風向きが変わり、 3月15日午前中には関東地方各地で、午後には福島県や宮城県等で空間線量率が上昇した。こ のような気象状況により、3月14日の2号機の放出におけるタイミングの差異による拡散計算 への影響を確認できたのは、前節で利用した CTBT 測定点8地点のうち高崎のみであった。

高崎測定点のデータを利用して3月14日の放出量推定を実施するには、前節で実施した北半 球領域のシミュレーションでは分解能が粗く困難であるため、東日本領域を対象とした高分解能 な狭域計算を実施した。

気象予測計算では、北緯38度、東経139.4度を中心としたランベルト図法で投影した南北960

km×東西 690 km の領域を水平分解能 3 km で解像し、2011 年 3 月 11 日 00 時(世界時間)か ら 4 月 1 日 00 時までの期間について、BX900 の 48 並列で実行した。拡散計算では、各放出時 間帯の寄与を比較するため単位放出とし、200 万個の仮想粒子を放出させた。

関東地方各県における事故直後からの空間線量率データと計算結果を比較したところ、計算は 誤差3時間以内で3月15日の線量上昇を再現していることが確認できた。CTBTの高崎測定所 の¹³³Xe 濃度と計算結果を比較した結果、3月14日18時以前に放出された¹³³Xe は高崎での濃 度上昇への寄与率が低く、3月15日~16日の測定値を説明可能な時間帯は15日00時~03時 であることが確認できた。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) 古野朗子、小田哲三、永井晴康、"福島第一原子力発電所から放出された¹³³Xe の北半球規 模での移行挙動解析"、日本原子力学会 2014 年秋の大会、2014 年 9 月、京都市.
- 2) 古野朗子、小田哲三、永井晴康、"福島第一原子力発電所から放出された ¹³³Xe の放出量に 関する検討"、日本原子力学会 2015 年春の大会、2015 年 3 月、茨城県.

(4) 今後の利用予定:

平成 26 年度は、未解明の部分の多い降雨沈着プロセス等を考慮しなくてもよい希ガス (¹³³Xe) を対象としたシミュレーションを実施した。今後は、Katata *et al.* (2015) ^{*3}で提唱された最 新の放出量および沈着過程プロセスを用い、ヨウ素やセシウムを対象とした半球規模シミュレー ションを実施する予定である。

参考文献

- %1 H. Hoshi et al.: Document of Side Event by Government of Japan at 56th IAEA General Conference, 2012.
- *2 A. Stohl et al. : Atmos. Chem. Phys., 12, pp.2313-2343, 2012.
- X3 Katata et al., Atmos. Chem. Phys., 15, pp.1029-1070, 2015.

5.9.3 PHITS のスレッド並列化

Thread Parallelization of PHITS

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、近年新たに組み込んだ電磁 カスケード輸送計算コード EGS5 に関連するアルゴリズムがメモリ共有型(スレッド)並列に 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 EGS5 に関連するサブルーチンをスレッド並列に対応させた。この改良は、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:

プログラムをスレッド並列化するためには、その中で使われている全ての変数を共有型 (shared) と分散型 (private) に分ける必要がある。従来の EGS5 は全ての変数を private と して扱う save オプションを使ってコンパイルされていたため、まずは、save オプションを使わ ずにコンパイルできるように EGS5 を改良した。次に、EGS5 で使われている common 変数の 中から、分散型とするべき変数を見つけ出し、private 宣言した。そして、それらの変数を適切 に初期化するように新たに初期化ルーチンを加えた。これらの改良により、EGS5 部分がスレッ ド並列化され、PHITS の全ての機能がスレッド並列で動作可能となった。これらの成果は、 PHITS 最新版に組み込まれ、version2.76 として 2015 年 3 月に公開された。

表1に、逐次計算版とスレッド並列版の PHITS2.76 を用いて PHITS 奨励設定入力ファイル を実行した条件での計算時間を示す。これらの計算には、全て電磁カスケード計算アルゴリズム として EGS5 を使用している。また、スレッド並列時に使用したコア数は8 個である。表より、 全ての計算条件において、スレッド並列版の方が逐次計算版と比較して計算時間が短いことが分 かる。計算条件によっては、スレッド並列の計算時間短縮効果があまり顕著に見られない場合も あるが、これは、極めてシンプルな計算条件(例えば薄膜内で起きる核反応を計算する semi-conductor.inp など)の場合、スレッド並列化したループの外側にある統計処理アルゴリズ ムに大部分の計算時間が使われているためである。

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に、PHITS を公開した平成22 年から平成27 年3 月末ま での国内 PHITS ユーザー数の変化を示す。平成26 年度の新規ユーザー数は368 名(うち、機 構外ユーザーは344 名)であり、平成26 年度12 月までに機構外提供されたコードのおおよそ8 割が PHITS であった(http://ccse-intra.jaea.go.jp/library/teikyou_h2612/05-15.html)。

奨励設定入力ファイル名	逐次計算版 (秒)	スレッド並列版 (秒)
Counter	4.65	3.30
DetectorResponse	6.59	2.87
H10multiplier	22.97	13.37
NuclearReaction	14.37	3.66
ParticleTherapy	20.92	4.66
PhotonTherapy	10.06	6.14
SemiConductor	48.27	37.27
Shielding	29.45	10.50

表1 逐次計算版とスレッド並列計算版のPHITS2.76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



図1 平成 22 年(2010 年)から平成 27 年(2015 年)3 月末までの 国内 PHITS ユーザー数の変化

(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, JNST Most Popular Article Award 2014, Journal Editorial Board, Atomic Energy Society of Japan 平 成 27 年 2 月 6 日.
- 2) S. Noda, S. Hashimoto, T. Sato, T. Fukahori, S. Chiba and K. Niita, Improvement of photonuclear reaction model below 140 MeV in the PHITS code, J. Nucl. Sci. Technol. 52, pp.57-62 (2015).
- 3) T. Sato, K. Niita, N. Matsuda, S. Hashimoto, Y. Iwamoto, T. Furuta, S. Noda, T. Ogawa, H. Iwase, H. Nakashima, T. Fukahori, K. Okumura, T. Kai, S. Chiba, L. Sihver, Overview of particle and heavy ion transport code system PHITS. Ann. Nucl. Energy (2014) DOI: 10.1016/j.anucene.2014.08.023.
- 4) T. Ogawa, T. Sato, S. Hashimoto, K. Niita, Development of a reaction ejectile sampling algorithm to recover kinematic correlations from inclusive cross-section data in Monte-Carlo particle transport simulations, Nucl. Instr. Meth. A 763, pp.575-590 (2014).
- 5) S. Hashimoto, Y. Iwamoto, T. Sato, K. Niita, A. Boudard, J. Cugnon, J.C. David, S. Leray and D. Mancusi, New approach for describing nuclear reactions based on intra-nuclear cascade coupled with DWBA, Prog. Nucl. Sci. Technol. 4, pp.418-421 (2014).
- 6) S. Hashimoto, Y. Iwamoto, T. Sato, K. Niita, A. Boudard, J. Cugnon, J.C. David, S. Leray, D. Mancusi, New approach to description of (d,xn) spectra at energies below 50 MeV in Monte Carlo simulation by intra-nuclear cascade code with Distorted Wave Born Approximation, Nucl. Instr. Meth. B 333, pp.27-41 (2014).
- 7) 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).
- 8) 佐藤達彦、PHITS の概要と医学応用、日本原子力学会 2015 年春の大会、放射線工学部会 企画セッション、平成 27 年 3 月 22 日.

(4) 今後の利用予定:

PHITS 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 カ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。

5.9.4 環境放射線核種からの外部被ばく線量換算係数の評価

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

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への換算に利用できる係数(線量換算係数)が必要となる。 特に、福島第一原発事故後に問題となっている土壌に分布した放射性核種に対する線量換算係数 の整備は、福島支援の一環として原子力機構が取り組むべき喫緊の課題である。本研究では、放 射線防護に関する最新の知見を取り入れ、原子力機構が開発しているモンテカルロ法に基づく放 射線輸送シミュレーションコード PHITS を用いて、環境の線量換算係数を整備した。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。よって、本研究 を遂行するためには、大型計算機システムによる超並列計算環境は不可欠であった。

(2) 利用内容·結果:

平成 24 年度は放射性核種が土壌に沈着している場合に対して、平成 25 年度は放射性核種が 大気中に分布している場合に対して線量換算係数を計算し、その結果を報告した。平成 26 年度 は、放射性核種が水中に分布している場合を想定した計算を実施するとともに、環境中に電子放 出核種が分布している場合についても換算係数を整備した。これにより、土壌、大気、水中に分 布した放射性核種に対する線量換算係数のデータベースが完成した。

計算は、BX900の256並列により実施した。実効線量の算出には、人体中の組織・臓器にお ける吸収線量を計算する必要がある。この目的のため、臓器を含めた人体形状を、ボクセルと呼 ばれる微小な立方素子で精密に再現したボクセルファントムを利用した。本研究では、成人男女 に対してはICRPが開発した成人標準ファントムを、小児男女(新生児、1歳、5歳、10歳、15 歳)に対してはフロリダ大学の開発したファントムを採用した。放射線源を一様に分布させた水 球の中心にファントムを配置し、線源から放出される放射線の輸送およびエネルギー沈着を PHITS により計算した。球状の水領域の半径は、構築する線量換算係数データベースの最大エ ネルギーである 8MeV の光子の水に対する平均自由行程の5倍に相当する200cmとした。この サイズは、半無限の水環境を模擬するのに十分である。図1および図2に、水中に光子線源およ び電子線源を一様分布させた場合の成人の実効線量への換算係数を示す。また、図2には、電子 放出核種の存在する汚染水へ浸かった場合に問題となる皮膚の等価線量への換算係数も示した。 光子線源の場合、身体深部の臓器にまで十分に到達する約0.1MeV 以上のエネルギー領域では、 線源エネルギーの増加に伴い実効線量も直線的に増加している。電子線源では光子線源に比べ て、放射能濃度当たりの実効線量の値は1桁から4桁程度小さい。また、約1MeV以下のエネ ルギー領域では、実効線量のほとんどが皮膚における線量で構成されることが分かった。これは、 低エネルギー電子は飛程が短くほぼすべてが皮膚領域で停止し、エネルギーを沈着するためであ る。一方、約1MeV以上の電子は、飛程が伸びるとともに制動放射によって光子を生成するた め、皮膚のみではなく深部の組織・臓器にもエネルギーを付与していることを示した。



図1 水中に一様分布した光子線源に対する実効線量への換算係数



図2 水中に一様分布した電子線源に対する実効線量および皮膚の等価線量への換算係数

平成 24 年度から開始した本研究によって構築した線量換算係数データベースの応用として、 土壌に分布した放射性セシウム(¹³⁴Cs および¹³⁷Cs)による年齢別の線量換算係数を導出した。 その結果を、サーベイメータによって測定される周辺線量当量への換算係数とともに図 3 に示 す。年齢別の実効線量への換算係数は、年齢が小さくなるほど大きくなり、新生児の値は成人に 比べて最大で 70%程度大きな値を示した。これは、年齢が小さくなるほど組織・臓器の位置が 線源である土壌に近づき、より強い放射線場に曝されるためである。しかし、いずれの年齢にお ける実効線量の値も、周辺線量当量の値を超えないことを確認した。このことは、事故直後より 継続して測定されている周辺線量当量の値によって住民の外部被ばく線量を管理した場合、実効 線量に対して保守的な線量管理が行えることを示している。



図 3 土壌中に平板分布した¹³⁴Cs(左)および¹³⁷Cs(右)に対する実効線量への換算係数。 ただし、¹³⁷Cs 線源に対しては放射平衡にある^{137m}Ba からの光子による寄与を含む。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 佐藤大樹、古田琢哉、高橋史明、遠藤章、Choonsik Lee、Wesley E. Bolch、"土壌に分布した放射性セシウムによる外部被ばく線量換算係数の計算"、JAEA-Research 2014-017、2014、pp.1-25.
- 2) Daiki Satoh, Takuya Furuta, Fumiaki Takahashi, Akira Endo, Choonsik Lee, Wesley E. Bolch, "Age-dependent dose conversion coefficients for external exposure to radioactive cesium in soil", Journal of Nuclear Science and Technology, DOI: 10.1080/00223131.2015.1021286, 2015.

(4) 今後の利用予定:

今後、ICRPの開発した小児に対する標準ファントムが公開される予定である。その際、この 標準ファントムを用いて様々な被ばく条件に対応した線量換算係数を計算して、提供する必要が ある。我々は、この線量換算係数を計算・整備し、ICRPに提供する計画であるため、今後も継 続して大型計算機システムの利用を行いたい。

5.9.5 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}

放射線防護研究グループ、

*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た「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。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、1,500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。 本年度は、ビーム強度を増加した運転のための許可変更申請に資するために、既存の全ての中 性子実験装置の構造や配置を精度よく考慮した高精度の計算モデルを作成した。図1に第一実験 ホールの既存の11本のビームライン全体をひとつのPHITS計算モデルにしたものの3次元表 示、図2は第二実験ホールの10本のビームライン全体をひとつのPHITS計算モデルにしたも のの3次元表示である。



図 1 第一実験ホールの 11 本のビームラインの PHITS 計算モデル



図 2 第二実験ホールの 10 本のビームラインの PHITS 計算モデル

図 3 及び図 4 に中性子実験装置 BL21 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 3 は平成 25 年度に公開した PHITS2.64、図 4 は平成 26 年 度に公開した PHITS2.71 による結果である。PHITS2.64 から PHITS2.71 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 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



図 4 中性子実験装置 BL22 周辺の中性子・光子線量分布に対する PHITS2.71 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, JNST Most Popular Article Award 2014, Journal Editorial Board, Atomic Energy Society of Japan 平 成 27 年 2 月 6 日.
- 2) T. Sato, K. Niita, N. Matsuda, S. Hashimoto, Y. Iwamoto, T. Furuta, S. Noda, T. Ogawa, H. Iwase, H. Nakashima, T. Fukahori, K. Okumura, T. Kai, S. Chiba, L. Sihver, Overview of particle and heavy ion transport code system PHITS. Ann. Nucl. Energy (2014) DOI: 10.1016/j.anucene.2014.08.023.

(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。

5.9.6 複数の PHITS 出力ファイルを統合する機能の開発

Development of Function for Integrating Tally Results Obtained by PHITS

橋本 慎太郎 放射線防護研究グループ

(1)利用目的:

粒子・重イオン輸送計算コード PHITS は、任意の3次元体系における様々な放射線の挙動を 解析することができる汎用のモンテカルロ計算コードである。モンテカルロ計算の精度はその試 行回数(放射線輸送計算では、発生させる粒子数)に依存するものであるため、解析条件によっ ては高い計算コストを必要とする場合がある。ここで、例えば、複数の線種を線源とするシミュ レーションを行う場合は、各線源を個別に計算した後に任意の重み付けをして足し合わせること で、非常に効率的に計算結果を得ることができる。また、スーパーコンピュータのようなクラス ター計算システムが利用できないユーザーに対しては、複数の PC で求めた PHITS の計算結果 を一つに統合して試行回数の大きな結果を得る機能が有用となり、その開発も望まれていた。

そこで、本開発では原子力機構の大型計算機(BX900)を利用し、複数の計算結果を統合する 機能を PHITS に追加した。上記の目的に応じて、複数の結果に任意の重み付けをして加重平均 を求める機能と、複数の結果を統合しそれらの総試行回数の結果を求める機能の2つをオプショ ンで選択できるようにした。この開発は、スーパーコンピュータ利用に係るソフトウェア開発整 備作業の一環として実施した成果である。

(2) 利用内容·結果:

複数の結果に任意の重み付けをして加重平均を求める機能と、複数の結果を統合しそれらの総 試行回数の結果を求める機能を開発した。これらの2つの機能は、輸送された粒子の飛跡長を求 める [t-track]タリー(仮想的な検出器)と物質における吸収線量を求める[t-deposit]タリーの両 方で動作するようにした。座標情報を指定する xyz メッシュなど、これらのタリーで設定できる 全ての条件で利用することができる。利用する場合は、足しあわせたい複数のタリー結果のファ イルを用意し、sumtally サブセクションを PHITS のインプットファイルに書き加えて PHITS を実行する。

加重平均を求める機能を利用することで、発生位置や照射方向が違う複数の線源が存在するような放射線場のシミュレーションを効率的に行うことができるようになる。従来の PHITS では、 各線源の強度を変更する度にシミュレーションを行う必要があり、様々な照射条件を比較するた めには莫大な計算時間が必要であった。しかし、本機能を利用することにより、各線源の結果を 一度求めてしまえば、その結果を重み付けして足し合わせることで容易に様々な照射条件の結果 を求めることができる。図1は、水ファントムに対してzの負の方向から4MeVの光子を照射 させた場合の線量分布(左上図)と、zの正の方向から同じ粒子を照射させた場合の結果(左下 図)を、加重平均の計算機能により足し合わせた結果(右図)である。2つの線量分布を加重平 均することにより、**x=0cm**の軸を中心に線量が集中した結果が得られていることが確認できる。 このように、本機能を用いることにより、様々な重み付けを条件として与えた場合の結果を、再 計算を実行することなく得ることができる。



図1 統合機能により、2つの線量分布(左上図と左下図)を加重平均した結果(右図)

また、複数の結果を統合しそれらの総試行回数の結果を求める機能を用いることで、並列計算 を手動で行うことが可能となる。複数台の PC において同じ計算体系のシミュレーションを実行 させ、それらの結果を足し合わせることで、実質的に多数の CPU コアを利用する計算環境を得 ることができる。ただし、その際はモンテカルロ計算による合理的な結果を得るため、各端末で 別の乱数を用いて計算を実行させる必要がある。図2は、水ファントムにzの負の方向から 4MeV の光子を照射した場合の線量分布の統計誤差(相対誤差)を示したものである。左図が試行回数 を 10 万とした場合の結果の一例である。これと同様に乱数のみを変えながら試行回数を 10 万 とした計算を他に 9 回行い、計 10 回分の計算結果を本機能により足し合わせた結果が右図であ る。すなわち、総試行回数が 100 万 (=10 万×10)の場合の計算結果を得たことになる。x=0cm の軸付近の誤差の値を見てみると、左図では約 10%(黄色)であった相対誤差が、右図では数%

(黄緑色)に減っていることがわかる。このように、例えば 10 台の PC を使って計算した 10 回分の結果を本機能を用いて統合することにより、総試行回数が 10 倍となる統計誤差の小さな 結果を得ることができる。

本統合機能の開発により、BX900をはじめとする色々なコンピュータで PHITS コードの利便 性が格段に向上した。本機能は PHITS の最新版に組み込まれ利用が開始されている。平成 26 年度における PHITS の国内における新規ユーザー数は 368 名(その内、344 名が機構外のユー ザー)である。近年、デスクトップ PC やノート PC で本コードを使用するユーザーが増えてき ており、これらのユーザーが本機能を利用することで、PHITS コードを用いた研究成果の増加 が期待される。



図 2 線量分布の統計誤差を手動並列計算機能により足し合わせた結果。左図は試行回数が 10万の場合の相対誤差の結果で、右図はその10倍となる100万回の試行回数の結果。

(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:

PHITS には[t-track]と[t-deposit]以外にも、用途に応じて利用できる様々なタリーがある。今後はこれらのタリーでも統合機能が利用できるようにし、PHITS がユーザーにとって更に利用しやすいコードになるよう開発を進める。

5.9.7 PHITS ユーザー入力支援ソフトウェアの作成

Development of Software for Supporting the PHITS Input

岩元 洋介 放射線防護研究グループ

(1)利用目的:

粒子・重イオン輸送計算コード PHITS は、任意の形状・物質内における多様な放射線の挙動 を解析可能な汎用モンテカルロ計算コードである。現在、PHITS の国内外のユーザー登録者数 は 1500 名を超え、応用分野は、放射線検出器開発、加速器遮蔽設計、医療応用、線量評価等、 多岐にわたる。一方で、PHITS ユーザーは多くの入力ファイルのパラメータ等をマニュアルに より理解し、テキスト形式で入力ファイルを作成する必要があるため、特に初心者にとっては PHITS の利用の敷居が高いという印象が持たれる。そこで、ユーザー等が視覚的に各パラメー タを理解して入力できるグラフィカルユーザーインタフェイス(GUI)による PHITS 入力ファ イル作成支援ソフトウェア PHACE(PHits graphical user interfACE)の開発を行う。本作業 により作成されたツールを用いることで、PHITS ユーザーが容易にパラメータ等を理解して、 視覚的に入力ファイルを作成できるようになる。そのため、新規ユーザーの PHITS に対する理 解促進に大きく貢献し、ユーザー数の更なる拡大が期待される。また、既存の PHITS ユーザー に対する入力支援も可能となる。

(2) 利用内容·結果:

平成 26 年度は、PHACE の基本的な枠組みを検討することを目的とし、PHACE のデータ入 力を行う操作画面の表示や制御、入力データの保存や画面等への反映といったデータ入力処理部 のプログラム開発を行った。ここでは、使用するシステムのライブラリなどの仕様についての情 報収集、データ入力処理などで使用する操作画面の整備も合わせて行った。開発言語は、多様な OS 環境(Linux、Windows、Mac)への展開を考えて、極力、各環境への移植性の高い汎用言 語として C++のコンパイル言語を使用し、環境に依存するライブラリ(例、.NET framework など)は使用しないこととした。

今回作成した PHACE のデータ入力インターフェイスの基本的な画面構成を図 1 に示す。また、図 1 に示される各部位、その機能または表示内容を表 1 にまとめる。

図1の①部の「機能切り替えタブ」で、PHITSの入力ファイルの追加及び選択を行う。図1 の②の「編集パラメータツリー」において、PHITSの各セクションに対応する幾何形状、物理 量等のパラメータの追加を指定すると、指定されたパラメータに関連する入力フォームが、図1 の③部の「パラメータ入力フォーム」の「アイテム」に追加される。また、「アイテム」に対す る説明文が「コメント」に表示される。入力されたパラメータやコメント等のデータは、「デー タ入力用ページダイアログ」にて保存及び管理される。④部の「パラメータ入力情報表示」に、 ③部を用いて作成した PHITS の入力ファイルが表示される。また、操作においては、PHACE のウインドウサイズの変更に伴う画面の再描画、スクロール処理が可能である。

	MACE				
)			
	■ 入力データ 白-■ セクション1 	パラメータ 1	<u>アイテム 1</u> 1 アイテム 1	• الريد	^
		パラメータ 2	174762 174762 174763 174764 174765 174765		E
	·····[]]]]]77XF2	パラメータ 1	アイテム 1	1	
6	2	パラメータ 2	<i>Р</i> 1762		
Ч		テキスト 1			×
					•
			E		
	STAT_1				STAT_2

図 1. PHACE のデータ入力インターフェイスの表示ウインドウ

	名称	機能または表示内容
0	機能切り替えタブ	ウインドウの画面切り替え用タブ。
Ū		INPUT を選択する。
2	編集パラメータ表示ツリー	編集パラメータのツリー表示を行う。
3	パラメータ入力フォーム	パラメータの入力フォームを表示する。
4	パラメータ入力情報表示	パラメータ入力情報を表示する。

表1 データ入力インターフェイスに示される部位

(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:

実際に PHACE を用いて PHITS の入力ファイルを作成するため、入力の各セクションに対応 するパラメータ及びその説明文等を PHACE に追加し、PHITS のパッケージに含まれる例題を 用いて、PHACE の動作確認と性能向上を進める予定である。

5.9.8 量子分子動力学シミュレーションモデルによるフラグメント生成シミュレーション

Simulation of Fragmentation by Quantum Molecular Dynamics Model

小川 達彦

放射線防護研究グループ

(1)利用目的:

近年利用が拡大している重粒子線治療においては、数百 MeV/u の炭素線を物体に照射するが、 その破砕片による被ばくや照射野のモニタリングが注目されている。当グループで研究開発を進 めている放射線輸送コード PHITS において、破砕片の生成は量子分子動力学モデル(JQMD) と統計崩壊モデルで計算されるが、JQMD は原子核の周辺同士が擦れるような反応(周辺衝突 反応)の再現精度が低く、改良の必要性が指摘されてきた。

本研究では、JQMD を改良して周辺衝突反応の再現精度を改善し、フラグメント生成断面積 や中性子二重微分収量に対する影響を評価した。これらのモデルを検証する場合、希少なイベン トを使う必要があり十分な統計を取るには計算時間が長いこと、また開発版のコードは動作が遅 いことから、大型計算機による計算が必要となった。

(2) 利用内容·結果:

1) JQMD の改良

原子核同士の衝突を再現する JQMD においては、以下のステップを経て反応を記述する。(1) 原子核の基底状態の設定、(2) 基底状態核同士を互いに衝突する座標系へ移動、(3) 原子核同士 の衝突を 1fm/c の時間ステップごとに計算、(4) 時間発展後の核子を相互に結合し終状態を決定。 ここで、(1)で設定した核は、静止座標系であれば安定に存在できるが、これまで核子間の相互作 用が座標系に依存させない補正が抜けていたために、(2)で移動した後の座標系では不安定にな り、核が崩壊していた。このような崩壊と周辺衝突反応による崩壊とが区別できなかったために、 周辺衝突反応の計算精度の低下が起こっていた。また、時折(1)のステップで設定された核の中に

は不安定なものが混じっ ており、これを取り除く必 要もある。こうした工夫に より核の疑似的な崩壊を 防ぎ、周辺衝突反応を中心 に計算精度の向上を図っ た(図1)。

これらの改良に加えて、 核子・核子散乱の断面積が 核内でパウリブロッキン グにより減少する効果を 取り入れたり、周辺衝突の 場合核同士が衝突したと



図1 疑似的崩壊を防ぐために行った JQMD 改良の模式図

みなす場合の判定条件を核の励起エネルギーに基づいて厳密に行ったりと、反応メカニズムをより正確に再現できるような改良を加えた。この改良型 JQMD となる RJQMD を JQMD の代わりに用いて原子核・原子核衝突の計算に使用し、反応断面積の検証を行った。

2) フラグメンテーション反応断面積の改善

JQMD、RJQMD をそれぞれ用いて原子核・原子核衝突反応の破砕片生成断面積を計算した例 を図2に示す。精度検証のため、それぞれ文献の実験値と比較した。





図 2(a)及び(b)はエネルギーもターゲット核も異なるが、RJQMD は破砕片生成断面積をより正確に再現することに成功している。特に電荷や質量がターゲット核に近い(大きい)場合、すなわち周辺衝突反応によって生成するような核種の生成断面積が、これまで JQMD が過小評価していた一方、RJQMD は正確に再現できるようになっている。

3) 中性子二重微分収量への影響

RJQMD は核反応全体の描像に影響するため、破砕片の生成だけでなく陽子や中性子の生成に も影響を及ぼす。しかし、これまで JQMD によって計算された中性子生成断面積は実験とよく 合っていたことから、中性子生成断面積には影響しないような改良が求められていた。図 3 は 290MeV/u の炭素イオンを銅ターゲットに照射した際に、ビーム進行方向から見て 15°と 90° 方向に生成した中性子のエネルギースペクトルを示している。従来の PHITS (JQMD) では高 エネルギーのピークから低エネルギーのプラトー部分までその傾向を再現しているが、RJQMD を用いて計算した中性子エネルギースペクトルも JQMD による計算値とほとんど変わらない。 図 3(b)は特に計算値の間の差異が殆ど存在せず、図 3(a)では、ピークや 10MeV 付近で RJQMD の計算値の方がより実験値に近い傾向が得られた。

この改良により、従来 JQMD が得意としてきた中性子生成断面積の計算精度を損ねることな く、破砕片生成断面積の再現精度を改善することができた。このことから、本研究により PHITS の加速器施設等への適用性は一段と高まった[1]。

[1] T. Ogawa, et al., "Energy-dependent fragmentation cross sections of relativistic 12C", PHYSICAL REVIEW C 92, 024614 (2015).



図3 290 MeV/u 炭素イオン入射に対する NatCu(12C,x) 反応での中性子生成二重微分断面積

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文 国際学会プロシーディングス

- 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", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, **325**, pp.35-42 (2014).
- 2) T. Ogawa, T. Sato, S. Hashimoto, K. Niita, "Incorporation of the statistical multi-fragmentation model in PHITS and its application for simulation of fragmentation by heavy ions and protons", *Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2013*, 02101 (2014).
- 3) T. Ogawa, T. Sato, S. Hashimoto, K. Niita, "Application of the new nuclear de-excitation model of PHITS for prediction of isomer yields and prompt gamma-ray production", *Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2013*, 02102 (2014).
- 4) T. Ogawa, T. Sato, S. Hashimoto, K. Niita, "Development of a reaction ejectile sampling algorithm to recover kinematic correlations from inclusive cross-section data in Monte-Carlo particle transport simulations", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 763, pp.575–590 (2014).
- 5) T. Ogawa, T. Sato, S. Hashimoto, D. Satoh, and S. Tsuda, "Energy-dependent fragmentation cross sections of relativistic 12C", *PHYSICAL REVIEW C* 92, 024614 (2015).

(4) 今後の利用予定:

今回開発した RJQMD はアルゴリズムに無駄な計算ステップが多く、従来の二倍以上の計算時間を 要していることから、アルゴリズムを詳細に検討することで計算の高速化を図る。また、鉛やウランなどの 銀以上に重いターゲットが扱えるかどうかを検証していないため、その検証も計画している。

また、最近 PHITS に実装された新しい反応モデル PHITS-NRF(核共鳴蛍光散乱)の応用方法に ついて研究するためにも大型計算機の利用を予定している。

5.9.9 X線分光法と計算科学による土壌中セシウムの評価

Evaluation on Cs in Soils using X-ray Spectroscopy and DFT Calculation

鈴木 知史

炉内状況解析研究グループ

(1) 利用目的:

東日本大震災によって起こった福島第一原子力発電所の事故においては、大量の放射性物質が 環境中に放出され大きな問題となっている。このような放射性物質の中でも特に問題となってい るのは、半減期が 30 年と長いセシウム 137 である。現在、このセシウム(Cs)を土壌中から取 り除く等の除染が行われている。また、汚染された土壌等の廃棄物の処理を容易にするために、 廃棄物の減容が求められている。このような課題に対処するため、「廃棄物減容のための Cs 動態 研究に関する JAEA-NIMS 共同研究」が実施され、その一環として、Cs 吸脱着機構解明研究が 進められている。

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。最近の評価により得られている知見から、土壌中でのセシウムの吸着挙動は、従来考えられていたものと異なる可能性がある。しかしながら、詳細は明らかになっていないため、Cs 吸脱着機構について、基礎レベルから評価を行うことが必要である。このために、Cs の局所構造や結合状態を解明して Cs の吸着挙動を評価する必要がある。

近年、X 線顕微鏡を用いた二次元的な X 線吸収スペクトル (XAS) や X 線発光スペクトル (XES)による分析が行われ、種々の物質の基礎的な構造や化学状態の変化についての評価が可 能となっている。この X 線顕微鏡による Cs の土壌中の詳細な評価が進められている。これまで、 放射性物質の XAS や XES は、主として透過性の高エネルギーの硬 X 線を用いて行われてきた が、X 線顕微鏡では低エネルギーの軟 X 線を用いた測定が進められている。軟 X 線による XAS や XES は自然幅が小さく結合状態について詳細な情報を得ることができる。しかしながら、小 さい自然幅により帰属が困難な微細構造が現れる可能性が有る。このような微細構造は、現在で も必ずしも解釈が確立されていない。

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 について、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、Cs に関する局所構造と 結合状態の詳細を明らかにして、バーミキュライトを始めとした粘土鉱物への Cs 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。さらに、ここで確立した 手法を適用して、炉内外における FP の放出・移行挙動に対する評価を着手する。

以上のような研究を行うことで、土壌中の Cs の吸着挙動の評価や予測が可能となる。本研究 で扱う手法は量子論的な第一原理計算のアプローチであることから、吸着した Cs の局所構造や 結合状態の詳細を解明することができるため、吸着挙動や結合状態について定量的に議論を行う ことが可能である。解析の結果から、土壌中の Cs の吸着挙動の評価や予測を行う手法が確立さ れ、非経験的な手法により土壌中からの Cs の吸着・剥離に関する知見が得られ、効果的な除染 や除染に伴う廃棄物の減容に資することが出来る。さらに、Cs の吸着挙動の評価に用いた手法 を、炉内外における FP の放出・移行挙動に対する評価に適用することで、燃料デブリの取り出 しの準備に資することができる。

(2) 利用内容・結果:

《土壤中のセシウムの評価の研究》

福島第一原子力発電所事故で放出された Cs の除染では、その効率化や除染に伴う廃棄物の減 容が求められている。そのため、種々の状態での Cs が評価されており、その一環として粘土鉱 物中の Cs に関して Cs M4,5 NEXAFS の測定が進められている。そこで、この NEXAFS につい て第一原理計算を用いて評価を進めている。また、測定時に形成される内殻空孔と励起電子との 相互作用を取り込むため、内殻空孔強度(CHS)¹⁾について検討した。さらに、この結果に基づ き、粘土鉱物中の NEXAFS を評価するとともに、電子状態の解析を行った。

解析には、全電子系第一原理計算コードである WIEN2k²⁾を用いた。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、測定時に形成される内殻空孔と励起電子と



図1 粘土鉱物の Cs M_{4,5} NEXAFS の(a)計算結果と(b) 実験結果



図2 粘土鉱物の励起電子の電子密度(a) NEXAFSの主ピーク領域(b)テール構造領域

の相互作用を取り込む必要がある ¹⁾ 。Cs ハロゲン化物である塩化セシウム (CsCl) について、 CHS をパラメータとした計算を実施したところ、CHS が 0.65 で実験結果と良い一致が得られ た。また、その他の Cs ハロゲン化物である、フッ化セシウム (CsF)、臭化セシウム (CsBr)、 ヨウ化セシウム (CsI)、および、Cs を含む粘土鉱物について、CHS=0.65 を用いて計算したと ころ、実験結果との良い一致が確認された。その一例として、粘土鉱物の Cs M_{4.5} NEXAFS の 計算結果を実験結果と比較して図1に示す。主ピークとともにテール構造が再現されていること が分かる。さらに、粘土鉱物に対し、主ピークの領域とテール構造の領域の励起電子について、 電荷密度を計算した結果を図2に示す。主ピークの領域の励起電子は局在し、テール構造の領域 の励起電子は定在波を形成して非局在化していた。このことから、主ピークは束縛状態に対応し、 テール構造は連続状態に対応することが分かった。今後、NEXAFS を用いてこのような解析を 進めることで、粘土鉱物中の Cs の局所構造や結合状態の評価が可能となり、Cs の粘土鉱物への 吸脱着機構の解明に資することが出来る。

また、福島第一原子力発電所の炉内外における FP の放出・移行挙動の評価に対して、本研究 で開発した手法の適用を開始した。

- 1) P. Moreau *et al.*, Electron energy-loss spectra calculations and experiments as a tool for the identification of a lamellar C3N4 compound, Phys. Rev. B 73 (2006) 195111.
- 2) P. Blaha *et al.*, Wien2k, An Augmented Plane Wave+Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, Karlheinz Schwarz, Twchin, Austria, Universitat Wien, 2001.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

査読付論文

- 1) <u>C. Suzuki</u>, H. Yoshida, D. K. Shuh, S. Suzuki, T. Yaita, "NEXAFS analysis and electronic state of cesium in clay minerals", Proceedings of ICONE-23 (2015) 1652.
- 2) S. Sugihara, T. Igarashi, <u>C. Suzuki</u>, K. Hatanaka, "Microscopic approach to water by using the DV-X α Method, and some innovative application", The DV-X α molecular-orbital calculation method (2015) pp.257-290.

学会発表

- 3) <u>鈴木知史</u>, 矢板毅, 鈴木伸一, 吉田啓之, "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 2015 年春の年会, 日立 (2015).
- 4) <u>C. Suzuki</u>, H. Yoshida, D. K. Shuh, S. Suzuki, T. Yaita, "NEXAFS analysis and electronic state of cesium in clay minerals", The 23rd International Conference on Nuclear Engineering, Chiba (2015).

(4) 今後の利用予定:

今後は、実際の土壌について軟X線を用いたNEXAFSを第一原理計算により解析する。その際、これまで行ってきた近似的な内殻空孔と励起電子との相互作用に関する知見を適用する。また、NEXAFSの微細構造と化学状態や結合状態との対応を検討する。これと平行して、より高精度の内殻空孔と励起電子との相互作用の評価手法の構築を進める。

5.9.10 JAWAS-N における中性子束分布の解析

Analysis of Neutron Flux Distributions in JAWAS-N

米田 政夫

原子力センシング研究グループ

(1)利用目的:

非破壊測定手法の一つである高速中性子直接問いかけ(FNDI: Fast Neutron Direct Interrogation)法は、核分裂性核種を含む放射性廃棄物に14MeVのパルス中性子を照射した際に発生する誘発核分裂中性子を測定することにより、廃棄物に含まれる核分裂性核種の総量を求める手法である。FNDI 法の解析には、MCNP コード等のモンテカルロコードを用いている。一般的に、ターゲットに含まれる核分裂性核種の量は少ないため、誘発核分裂中性子数は中性子発生管から発生する中性子数に比べて格段に少ない数となる。FNDI 法の解析では、誘発核分裂中性子の時間推移を詳細に求める必要があることから、多くの計算時間を要する。このため、大型計算機の使用が有効である。ところで、本解析には多くの計算時間が必要であり、大型計算機の1回のジョブでは完了することができず、相応数のリスタート計算が必要となる。平成 26 年度の大型計算機利用に係るプログラミング支援作業において、並列計算を効率的に実施するための計算環境の整備及び計算実行用スクリプトの作成を行った。これら支援作業の成果を用いることにより、従来に比べて効率的に計算を実施することができた。

(2) 利用内容·結果:

FNDI 法を用いたウラン廃棄物ドラム缶の測定装置として、JAWAS-N と呼ばれる装置が当機 構人形峠環境技術センターに設置されている。JAWAS-N 体系の概略は、中性子発生管、ドラム 缶及び中性子検出器バンクの周りを厚さ約 50cm のコンクリートブロック(内張りに B₄C ゴム) で囲んだものとなる。検出器バンクには He-3 検出器が 14 本入っており、検出器の周りにポリ エチレンが配置され、更にバンクの外周には Cd 板が取り付けられている。

JAWAS-N 体系についての MCNP を用いた解析を実施した。中性子検出反応の時間推移の計算結果を図1に示す。このケースでの核分裂性物質は U₃O₈を 180g 含む。約 200µs までは、実験値に数え落としが発生しているため、計算値の方が高くなっているが、それ以降は計算値と実験値は良く一致している。

図2及び図3は、それぞれ高速中性子(100keV~20MeV)及び熱中性子(0~0.53eV)の中 性子束の空間分布を示している(体系中心高さにおけるX-Y断面)。高速中性子束分布に関して、 中性子発生管近傍で急激(3桁近く)に減衰している一方、それ以降は比較的広範囲に分布して ることが確認できた。熱中性子束分布に関して、コンクリート内側に取り付けている B₄C ゴム 及び検出器バンク外側に取り付けているCd板による中性子の吸収効果が、視覚的にも明確に確 認できた。なお、内側の円筒形状がドラム缶を表している。ドラム缶の外周部の値が高くなって いるのは、ドラム缶に入射する中性子を減速させるために取り付けたポリエチレンの効果であ





図1 計算結果と実験結果の比較(ウラン重量:180g)



(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) Masao KOMEDA, Akira OHZU, Mitsuo HARUYAMA, Misao TAKASE, Masatoshi KURETA,Yoshiaki NAKATSUKA, Naoki ZAIMA, Shin'ichi NAKASHIMA, Yoshimasa OHTSUKA, "Analytical study on uranium measurement in uranium waste drums by the fast neutron direct interrogation method", Proceedings of the 55th Annual Meeting of the Institute of Nuclear Materials Management (2014).

(4) 今後の利用予定:

アクティブ中性子法を用いた福島燃料デブリの解析を進めていく予定である。

5.9.11 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、阿部 陽介 照射材料工学研究グループ

(1) 利用目的:

① 照射によって導入される欠陥構造は機械特性に大きな影響を与える。原子シミュレーションによる詳細なメカニズムと、現象論によるマクロな機械特性との関係を理解することは、特異な力学挙動を示す照射材の変形機構を解明する上で有効な手段であると考えられる。そこで、本研究では照射欠陥を原子レベルから理解するとともに、変形時の運動やその他の材料欠陥との相互作用を動的な手法によって捉えることを目的とする。

② 前項の材料欠陥の原子モデルとの関係で、科研費新学術領域研究「バルクナノメタル」に参 画し、材料の内部組織と機械特性という包括的なテーマで研究を進めている。照射材の変形と同 様に、強加工を施された材料では硬化と同時に脆化を示すことが知られている。強加工によって 結晶粒径が小さくなると、強度が粒径の平行根に反比例するという Hall-Petch の関係に従うこ とが知られているが、超微細材料と呼ばれる結晶粒径が数ミクロン以下の材料では、Hall-Petch の関係が成り立たずに、極度に強度が進むことがわかってきた。当該研究では、超微細材料に対 して多結晶材を模擬した2次元および3次元の原子シミュレーションによって再現し、これまで わかっていない強化機構や微細粒材料に特有の Bauschinger 効果を明らかにすることを目的と する。

③ 電子顕微鏡による観察技術の発展により、欠陥構造である転位を原子レベルの分解能で観察 することが可能になった。本研究では、カリフォルニア大学バークレー校との共同研究を通じ、 最新の電子顕微鏡による観察と計算科学による連携により、六方晶 Ti の転位芯と O 原子の相互 作用について明らかにすることを目的とした。

(2) 利用内容•結果:

① 昨年度に続き照射欠陥を原子モデルによって再現し、欠陥のエネルギーと転位運動の障害物 としての強度に関するデータベースを完成させた。また、核融合炉材料を対象とした He バブル による硬化現象に関する分子動力学シミュレーションを行い、温度や静水圧の影響について検討 を行った。これらのデータは、欠陥成長の速度論的解析やマクロな機械特性との関係を解析する ための連続体解析との連携による解析を行った。

② 超微細粒金属の粒内および粒界における塑性変形と力学特性の関係を明らかにするため、転 位源としての Frank-Read 源を含んだ薄板多結晶モデルを用いた大規模原子シミュレーション
を行った。粒界の流動応力に与える影響を明確にするため、原子モデルとして結晶学的にすべり 伝播が容易な粒界と困難な粒界を生じるような二つの異なる多結晶モデルを検討した。粗大粒材 料と同様に、いずれのモデルにおいても、最初の塑性変形は粒内に存在する転位源の運動によっ て開始する一方、初期の降伏以降の塑性変形は粒界における転位の通過によるすべり伝播の抵抗 に大きく影響されることが示された。粒内の転位源の運動とすべり伝播に必要な臨界応力の間の 大小関係が材料強度に与える影響について検討し、超微細粒金属の強度の結晶粒径と転位源長さ に関連した局所的な欠陥構造に依存性を定量的に示した。これらの結果は、金属学会の秋期・春 期大会で基調講演を行うとともに、成果リスト(8)の日本金属学会論文賞(力学特性部門 1/1 件中) を受賞しており、高い評価を得た。また、図1に3次元多結晶モデルの変形に関して初期転位密 度がことなる場合の繰り返し変形の降伏応力について示す。この結果から、Bauschinger 効果は 初期転位密度が低い場合に顕著になることがわかった。Bauschinger 効果の発生機構は従来の加 工硬化と異なり、転位密度が極端に減少することで、粒界転位源の発生に起因した塑性異方性や 繰り返し変形による降伏挙動の違いによって生じることを明らかにした。



図1 3D 多結晶モデルの繰り返し変形による降伏応力と初期転位密度の関係

③ 溶質元素がらせん転位の長距離弾性場と弱い相互作用をすることから、固溶硬化は可動転位 と比較的弱い影響しか持たないとこれまで考えられてきたが、これらの相互作用は直接確認する ことが困難であり、Ti の強化機構についての固溶元素の影響が見直されている。そこで、六方 晶のチタンを対象に実験と計算によって強化機構について検討を行った。高解像度その場観察電 子顕微鏡を駆使して、柱面を運動するらせん転位と酸素が非常に強い相互作用をすることを示し た。また、第一原理計算から、格子間型の溶質酸素が転位芯と短距離ながら強い結合を生じるこ とを明らかにした。これらは、従来の知見と異なり格子間固溶元素が強化機構に重要な役割を持 つことを示した重要な成果として成果リスト(1)で Science 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)

- Q. Yu, L. Qi, T. Tsuru, R. Traylor, D Rugg, J. W. Morris Jr, M Asta, D. C. Chrzan, A. M. Minor, "Origin of dramatic oxygen solute strengthening effect in Titanium", Science, 347 (2015), pp.635-639.
- 2) 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 (2014), pp.45-51.
- 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.
- 4) T. Tsuru and D. C. Chrzan, "Effect of Solute Atoms on Dislocation Motion: An Electronic Structure Perspective", Scientific Reports, 5-8793 (2015), 1-8.
- 5) S. Shi, N. Oono, S. Ukai, Y. Abe, "Synthesis of bubble dispersion strengthened copper by using pyrolysis gases of Poly (methyl methacrylate)", Materials Science & Engineering A, 617 (2014) pp.61-65.

受賞

6) 第 62 回 日本金属学会論文賞, 「T. Tsuru, Y. Aoyagi, Y. Kaji and T. Shimokawa, Materials Transaction, 54-9 (2013), 1580-1586.」, 日本金属学会, 2014 年 9 月.

基調・招待講演

- 7) (基調講演)都留智仁・青柳吉輝・加治芳行・下川智嗣,「超微細粒金属の変形機構に関す る大規模原子シミュレーション」,日本金属学会秋期講演大会 2014, 2014 年 9 月 24-26 日, 名古屋大学.
- 8) (基調講演)都留智仁・青柳吉輝・下川智嗣・山口正剛・板倉充洋・蕪木英雄・加治芳行・ D. C. Chrzan,「結晶構造・微細組織構造によって生じる塑性異方性の素過程に関する計算 科学的検討」,日本金属学会春期講演大会 2015,2015 年 3 月 18-20 日,東京大学駒場キャ ンパス.
- 9) (依頼講演)都留智仁,「超微細粒材料の特異な機械特性に関する大規模原子シミュレーション」,第63期第5回塑性工学部門合同委員会,2015年3月10日,東北大東京分室.

(4) 今後の利用予定:

第一原理計算に基づく転位芯構造解析では、2元系から3元系までの合金元素が転位構造や運動に及ぼす影響を検討する。また、大規模 MD シミュレーションにより、三次元多結晶モデル について引張り・圧縮異方性を検討する。

5.9.12 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 熱流動研究グループ

(1) 利用目的:

本課題では、気泡流から液膜流までの流動様式への適用性を確認した TPFIT に対し、解析手 法の改良や機能追加を行うとともに、BX900 の利用により複雑な状況の解析を実施し、計算領 域や流動様式の拡大に伴う適用範囲の拡大や、新たな現象への展開を行った。平成 26 年度の実 施内容に関する目的・意義を以下に示す。

1. 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実験で取得 するデータベースによる検証や、解析・実験結果による地震加速度付加時の二相流挙動の把握・ 検討を実施した。平成 26 年度は、水平管内二相流に地震加速度付加時の周波数応答解析を実施 し、管内流れを減・加速させた時の渦度評価を行った。なお、本研究は筑波大学との共同研究と して実施した。

2. 原子力システム内二相流評価手法の開発

TPFIT は気泡流に対しては広範な評価が行われているものの、その他の流動様式に対する評価が十分ではない。そこで、環状噴霧流体系に対する評価の一環として、これまでに水噴流実験等を模擬した解析を実施した。平成 26 年度は、適用性を検討した解析手法を、原子炉過酷事故時に使用される、フィルタードベント機器内の二相流解析に適用し、作動条件などを把握するための二相流挙動把握を行った。また、小さな気泡から大きな気泡までの広い範囲に対する適用性を確認するための解析を実施した。

(2) 利用内容·結果:

1. 構造体・流体振動時の詳細二相流評価手法の開発

水平管内二相流に地震加速度付加時の周波数応答解析を実施し、管内流れを減・加速させた時 の渦度評価を行った結果を図1に示す。従来、単相流に対し加速時に渦度が減少するという知見 はあったが、二相流に対しても減速時での渦度の減少、加速時の渦度の増加が解析的に確認され た。また、減速時の渦度の減少が起こる際においても、気泡の周囲では有意な渦度が存在するこ とが明らかとなった。

2. 原子炉システム内二相流評価手法の開発

噴霧流および高速流動条件下への TPFIT の適用性評価の一環として、フィルタードベント機器内に存在するベンチュリースクラバー内部流動の解析を実施した。図 2(a)に解析体系を示す。 幅、奥行はそれぞれ 60.0[mm]、高さは 280.0[mm]、初期条件は常温常圧とし、体系の底部にベンチュリースクラバーを模擬し、その外周部は水で満たされている。ベンチュリースクラバーの 喉部には直径 2.0[mm]の自吸口が設置されており、底部より空気が流入することにより圧力差が 生じ、それにより、水がベンチュリースクラバー内部に流入する構造となっている。解析格子数 は 106×106×400 とし、約 450 万格子とした。図 2(b)に解析結果の一例として、ベンチュリー スクラバー内部の液相体積率を可視化処理したものを示す。自吸口より流入した水が壁面に液膜 状に分布する様子が見られる。また、流入した水の一部が液滴として存在する様子が確認できる。 次に、図 3 に自吸口付近での速度分布と液滴発生の様子を示す。自吸口より流入した水が、周囲 の強いせん断力により引きちぎられ、微少な液滴へと分裂する様子が解析により再現されてい る。これらは既存の実験結果と定性的に一致しており、TPFIT コードが高流速域の噴霧流解析 にも適用可能であることが確認された。



(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

査読付論文

1) N. Horiguchi, et al., "Relationship between self-priming and hydraulic behavior in Venturi Scrubber", Mechanical Engineering Journal, Vol. 1 No. 4 p. TEP0026 (2014).

2) H. Yoshida, et al., "Development of prediction technology of two-phase flow dynamics under earthquake acceleration", Mechanical Engineering Journal, Vol. 1 No. 4 p. TEP0025 (2014).

査読付論文発表

- 3) N. Horiguchi, et al., "Relationship between Flow Pattern and Pressure Distribution in Venturi Scrubber", 22nd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE22), ICONE22-30117, Prague, Czech Republic, Jul., 2014.
- 4) H. Yoshida, et al., "Development of Prediction Technology of Two-Phase Flow Dynamics under Earthquake Acceleration (14) Numerical Simulation of Two-Phase Flow in Subchannels under Accelerating Condition, 22nd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE22)," Prague, Czech Republic, Jul., 2014.
- 5) R. Saito, Y. Abe, A. Kaneko, T. Suzuki, H. Yoshida and F. Nagase, "Development of Numerical Simulation for Jet Breakup Behavior in Complicated Structure of BWR Lower Plenum (3) Influence by Complicated Structure on Jet Breakup and Fragmentation Behavior" 22nd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE22), ICONE22-30037, Prague, Czech Republic, Jul., 2014.
- 6) N. Horiguchi, et al., "Development of Evaluation Method of Liquid Flow Rate by Self-Priming Phenomena in Venturi Scrubber", 9th Korea-Japan Symposium on Nuclear Thermal Hydraulics and Safety (NTHAS-9), Buyeo, Korea, N9P0090, Nov., 2014.

口頭発表

- 7) 堀口、他、「ベンチュリースクラバー内部の二相流動構造と圧力分布に関する実験的研究」、 日本原子力学会 2014 年秋の大会、J22、京都大学.
- 8) 吉田、他、「詳細二相流解析コード TPFIT を用いたベンチュリースクラバー内圧力分布の数 値解析」、日本原子力学会 2014 年秋の大会、J23、京都大学.
- 9) 堀口、他、「ベンチュリースクラバーにおける液滴の可視化観測」、日本原子力学会 2015 年 春の年会、茨城大学.
- 10) 加藤、他、「地震加速度付時の気液二相流詳細予測技術高化に関する研究; (26)構造物加振に 対する水平管内気泡流の圧力応答」、日本原子力学会 2015 年春の年会、茨城大学.
- 11) 成島、他、「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;
 (8) LIF による複雑構造物内でのジェット落下挙動計測」、日本原子力学会 2015 年春の年 会、茨城大学.

招待講演

12) H. Yoshida, "Thermal-Hydraulic research activities in JAEA to support development of severe accident analysis for LWRs", Keynote Lecture 3, Korea-Japan Student Seminar in Gyeongju (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開発のため、大型計算機 を利用してきた。今後は、詳細な現象の把握を目的とした大規模解析の実施や、水-蒸気系など の相変化を伴う条件での解析や現象の把握のために大型計算機の利用を進める予定である。

5.9.13 TPFIT 界面追跡法に基づく二相流-構造連成解析手法開発

The Development of the Two-phase Flow TPFIT Code using the Improved Interface Tracking Method

焦 利芳 熱流動技術開発グループ

(1) 利用目的:

原子力機構で開発中の界面追跡法による二相流解析コード TPFIT の適用性評価の一環として、既存の垂直管内上昇気泡流の数値解析するためのコード開発整備を目的とする。

流路は長いから多くの格子を必要とするため(L=1.5m)、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。

Details:

In Japan Atomic Energy Agency, a detailed two-phase flow analysis code named TPFIT has been developed to simulate and evaluate two-phase flow characteristics in nuclear energy systems. Since the TPFIT is based on an improved interface tracking method for calculating an interface between liquid and gas phases in the two-phase flows, it can precisely transport the interface in both time and space direction with high accuracy in comparison with conventional two-phase flow analysis methods such as the two-fluid model and the volume of fluid (VOF).

It has been proved that the TPFIT codes can be successfully applied to the slug flow, including complex two-phase fluid mixing phenomena, in the sub-channels of the fuel bundles at high pressure [1].

However, further validation studies are required to evaluate and classify the detailed two-phase flow phenomena in the reactor systems. Bubbly flow is one of the most common phenomena in two-phase flow area. Therefore, it is important and necessary to check the applicability of the TPFIT in the bubbly flow as to further expend the application of TPFIT code in nuclear systems. In this work, The TPFIT was used to simulate the developing process of an upward vertical bubbly flow. The experimental data measured by Matos et al. [2] was used as validation data here. By comparing the development of the bubble distribution in the flow direction in numerical simulation and experiments, the applicability of the TPFIT in the bubbly flow was discussed.

(2) 利用内容·結果:

Objective:

The size of the simulated channel is $34\text{mm} \times 34\text{mm}$ and 1.5m in length. Bubbles were generated by injecting air through 6×6 nozzles, whose inner diameter is 0.5mm, at the inlet

section of the pipe, as shown in Fig. 1.

Mesh grid was created based on a rectangular structure. And grid was refined in the air-inlet-nozzle area. The grid size is 0.25mm in the nozzle area and around 0.45mm in other areas, the total grid number is $Nx \times Ny \times Nz = 72 \times 72 \times 3000 = 15552000$. The no slip condition is applied to the solid walls. At the inlet, velocities for both phases were prescribed as superficial velocities: liquid 0.946m/s and gas 0.041m/s. The phases were clearly defined with the primary phase as water and the secondary phase as air. The volume fraction and density of each phase were both prescribed at the inlet.



Fig. 1 3D geometry of the computational domain



Results:

(a) Numerical simulatin results (b)Experimen

(b)Experimental results from A. Matos et al. 2004

Fig.2 Contour map of the void fraction distribution over the entire cross-section. Superficial velocity (J_L , J_G), equal to (0.946m/s, 0.041m/s), average void fraction, <alpha>, equals to 3.3%

Bubble distribution in the developed region was shown in Fig.2, which contains both the experimental results and the numerical simulation results. It is clearly shown in Fig.2, the

bubbles finally moved to the area near the wall to form wall peak distribution in the channel in both experiment and numerical simulation. And the void fraction in the corner of the channel is especially high comparing to other areas.

However, serious bubble coalescence was found in the numerical simulation. As expressed in Fig.3, bubble size gradually increases in the flow direction which is the result of the bubble coalescence. In this numerical simulation, the size of the grid near the wall is around 0.45mm, and bubble size is around 2-3mm in diameter. If the interfaces of the neighboring bubbles are in the same control volume, the two neighboring bubbles will be assumed as one larger bubble in the advanced interface tracking method used in this numerical simulation. Then pseudo-bubble-coalescence happened. As to improve the simulation results, it is thought that the grid size near the wall should be refined firstly.



Fig. 3 Bubble size development in the flow direction in the numerical simulation

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

N/A

(4) 今後の利用予定:

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炉内データベースの充実化を引き続き進める予定である。

5.9.14 超臨界圧軽水炉の乱流熱伝達の促進に関する数値シミュレーション Numerical Simulation on Enhancement of Turbulent Heat Transfer for

SCWRs

高瀬 和之 熱流動研究グループ

(1) 利用目的:

福島第一原子力発電所事故に関連する解析やコードの開発並びに将来型炉の熱設計手法開発 などに関する研究を行うために大型計算機システムを使用した。一連の研究のうち、今回は将来 型炉の熱設計手法開発の一環として実施した超臨界圧軽水炉の乱流熱伝達に関する予測計算の 結果について報告する。

超臨界圧水冷却炉では、燃料被覆管材料の健全性及び信頼性の観点から被覆管表面最高温度は 700℃に制限される。一方、原子炉熱効率向上の観点から炉心出口冷却材温度を高く設定するこ とが検討されており、その結果として上昇する燃料被覆管表面温度をいかに低減させるかが課題 になっている。そこで本研究は、燃料被覆管表面温度上昇の抑制を目的として、乱れ促進用スペ ーサによって乱流熱伝達率を向上させることで燃料被覆管表面温度の上昇を抑制できるかどう か数値的に調べた結果を報告する。

(2)利用内容•結果:

本研究では、スペーサ付き燃料集合体内サブチャンネルを簡略模擬した体系に対して3次元解 析を行い、スペーサによって促進される伝熱挙動を定量的に評価した。

解析では、支配方程式として非定常圧縮性 Navie-Stokes 方程式とエネルギー式を用いた。解 法には、時間積分はオイラー陰解法、移流項の離散化は2次精度風上差分、圧力補正にはSIMPLE 法、行列式の解法には BiCGStab 法を使用した。また、乱流モデルに関する検討結果を基に、本 研究では SST モデルを使用した。さらに、作動流体である超臨界水の熱物性値評価には汎用プ ログラムパッケージ PROPATH を用いた。

解析は、直径 7mm の燃料棒 4本に囲まれた全長 600 mmのサブチャンネル内にスペーサが設置 されている体系に対して行った。燃料棒は正方格子状に配置され、隣り合う燃料棒との間隔は 1mm である。Fig.1 に解析体系の水平断面形状を示す。冷却材である超臨界水は鉛直下方から 上方に向かって流れる。



Fig.1 An example of computational grid in the horizontal direction



Fig.2 An example of three-dimensional computational grid at the vicinity of a spacer with a couple of vanes; in case that an attack angle is 30°.



a) attack angle= 0° (b) attack angle= 30° Fig.3 Predicted velocity vector distributions

(a) attack angle=0° (b) attack angle=15° (c) attack angle=30° Fig.4 Predicted fluid temperature distributions

サブチャンネル内の乱流熱伝達を促進させるため、スペーサには Fig.2 に示すような羽根状突 起を設けた。流れ方向に対する突起の傾き角度をパラメータとして 0°、15°、30°の 3 ケースを 設定し、突起の傾き角度が熱伝達率に及ぼす影響を調べた。その他の主な解析条件は、流路入口 平均流速 3 m/s、燃料棒表面熱流 560 kW/m²、流路入口における超臨界圧水の圧力 25 MPa と温 度 633K、スペーサ材質 SUS、燃料棒外壁材質 SUS である。

解析結果の例として、流れ方向の速度ベクトルの3次元予測結果をFig.3に示す。ここで、(a) はスペーサに羽根状突起がない場合、(b)は流れ方向に対する羽根状突起の迎え角が30°の場合で ある。Fig.3(a)の場合はスペーサ前後で大きな乱れはなく、流れは入口から出口に向かって水平 断面内で広く分布する。一方、(b)の場合は、スペーサ後流に大きな乱れを生じている。

同様に、流れ方向の温度分布の3次元予測結果を Fig.4 に示す。ここで、(a)は突起なし、(b) は突起の迎え角15°、(c)は迎え角30°の場合である。迎え角に依存する乱れの増加によって流体 温度混合の促進が確認できる。

(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、超臨界流体中に存在するスペーサまわりの伝熱流動に関す る数値解析、岩手大学工学部、2014年、CD-ROM. http://www.jsme.or.jp/conference/cmdconf14/

(4) 今後の利用予定:

軽水炉の熱流動安全性評価の観点から、シビアアクシデントによる過酷事象を含めた炉内熱流 動を評価できる解析手法が必要である。特に、炉心溶融等の事象の詳細を解析的に評価するため には、熱によって固体から液体に変化する現象を予測する解析手法が必要であり、現在実施して いる炉心熱流動解析手法整備に、これらの手法開発を加えて行う考えである。

5.9.15 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、吉田 啓之、柴田 光彦、高瀬 和之、作花 拓 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、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機構論的熱流動解析手法 の開発を行っている。本課題では、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、原子力過渡時における熱流動評 価解析手法の開発として、燃料集合体サブチャンネル体系での熱伝達挙動評価すること、及び、 福島支援として、炉心内非定常熱流動事象解析を行うことを目的とする。

(2)利用内容•結果:

1) 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(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 の開発 を行っている。炉心内燃料要素の溶融過程における液体金 属は流体であることから、非圧縮粘性流体を仮定すると支 配方程式は、連続の式、Navier-Stokes 方程式、エネルギ ー方程式で記述される。

また、固相・気相・液相といった多相流体を表現するた めに、本研究ではVOF法により各種流体を識別している。 H26 年度では、実機で用いられている炉内構成材の全種 類を流体または固体として扱えるようにすることを目的 として、多成分解析機能の拡張を行った。従来は、3 成分 のみしか表現できなかったが、拡張により任意のn成分を 扱う(n成分分の界面の追跡)ことができるようになった。



また、簡易的な輻射伝熱解析機能と酸化反応熱モデルとして水ージルコニウム反応モデルである Baker - Just の式を導入し計算の定性的な妥当性を確認した。以下、輻射伝熱解析機能確認計算 体系(図1)と結果(図2)及び水ージルコニウム反応モデル確認解析について述べる。

2) 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

燃料要素内温度分布と溶融物の移行挙動を評価するために、図1に示すような制御棒、チャン ネルボックス、燃料棒から成る2次元体系を考える。輻射による伝熱により、各物質の温度が上 昇し、溶融する挙動を確認した。図1に示す計算領域幅は、縦、横共に2.4 cm とし、UO2のみ 内部発熱量 10⁶ W/m³を与える。

図 2 (a), (b), (c), (d)に、輻射伝熱による温度分布の時間変化と制御棒の溶融挙動計算結果を示 す。図 2 (a)では、燃料である UO_2 からの熱伝導により、被覆管に相当する Zry が溶融して下方 へ溶け落ちる様子(黄色部分が溶融 Zry)が確認された。その後、時間が進行し、 UO_2 からチャ ンネルボックスの Zry を介して輻射により制御棒へ熱が伝わり、図 2 (b)に示す様に、融点の低 い B₄C から溶融が生じていることが分かる。その後、SUS も融点に達し、B₄C と共に下方へ流 出していく挙動を確認できた。

水ージルコニウム反応モデルの機能確認解析を図1の体系にて実施した。反応熱は、Zry 表面 1 格子にのみ存在するとし、表面の Zry が酸化により全て ZrO₂になった時点で酸化反応は終了 するとした。計算結果では、水ージルコニウム反応により、Zry 表面から徐々に温度が上昇して いく様子が確認できた。

以上より、過酷時の炉内の主要熱源であるといわれている酸化反応熱と輻射伝熱が機能していることを確認できたことは今後炉内状況の詳細な把握において重要な成果であるといえる。

3) 原子力過渡時における熱流動評価解析手法の開発

超臨界圧水冷却炉の炉心熱設計において、燃料被覆管材料の健全性及び信頼性の観点から被覆 管表面最高温度は 700℃に制限されている。しかし、原子炉の熱効率を向上させるためには炉心 出口冷却材温度を上昇させる必要があり、その結果として燃料被覆管表面温度の上昇を招くこと が課題である。そこで、被覆管表面近傍の熱伝達率を向上させることによって燃料被覆管表面温 度を減少させる方法を提案した。具体的には、燃料被覆管表面温度が 700℃を超える高温領域に 乱れ促進用スペーサ(図 3)を設置することで、燃料被覆管表面温度が低下することを計画した。

スペーサ付き燃料集合体内サブチャンネルを簡略模擬した体系に対して3次元解析を行い、ス ペーサによって促進される熱伝達挙動を定量的に評価した。解析では、支配方程式として非定常 圧縮性 Navie-Stokes 方程式とエネルギー式を使用した。解析は、直径7mmの燃料棒4本に囲 まれた全長 600mmのサブチャンネル内にスペーサが設置されている体系に対して行った。各燃 料棒は正方格子状に配置され、隣り合う燃料棒との間隔は1mmである。図4に解析体系の水平 断面形状を示す。冷却材である超臨界水は鉛直下方から上方に向かって流れる。流れ方向の速度 ベクトルの3次元予測結果を図5に示す。ここで、(a)はスペーサに羽根状突起がない場合、(b) は流れ方向に対する羽根状突起の迎え角が30°の場合である。(a)の場合はスペーサ前後で大き な乱れはなく、流れは入口から出口に向かって水平断面内で広く分布する。(a)の場合はスペー サ前後で大きな乱れはなく、流れは入口から出口に向かって水平断面内で広く分布する。一方(b) の場合は、突起後方で旋回流が発生しており、期待通りにスペーサ後流に大きな乱れを生じるこ とがわかる。同様に、流れ方向の温度分布の3次元予測結果を図6に示す。ここで、(a)は突起 なし、(b)は突起の迎え角15°、(c)は迎え角30°の場合である。迎え角に依存する乱れの増加に よって流体温度混合の促進が確認できる。以上より、超臨界圧水冷却炉の被覆管表面最高温度を 減少させる手段として、羽根状突起付きスペーサが有効であることを数値的に確認できた。



(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", Proc. ICONE23, 2015.
- 2) T. Nagatake, et al., "Development of POPCORN for simulating Melting Behavior of Fuel Elements: Fundamental Code Validation and Melting Analysis", Proc. ICONE23, 2015.
- 3) 北村、他2名、第27回計算力学講演論文集、岩手、11月(2014).

(4) 今後の利用予定:

過酷時炉内の主要熱源であると考えられる輻射熱モデルと酸化反応熱モデルの改良を進め、実 機体系に近い3次元体系における溶融物の移行挙動解析を実施する。加えて、溶融現象に対し非 常に重要な共晶反応モデルの開発・導入を行う。

計算規模としては、燃料集合体1体及び燃料支持金具等下部機構を含む体系を想定し、格子数は1000万~数億点、並列数は、数百~数千並列を想定している。

JUPITER における計算負荷のホットスポットは、圧力ポアッソン方程式における反復計算が 大半を占めているため、解法の改良や高速化チューニング等を実施していき、次期大型計算機で のチューニングも実施していく予定である。

5.9.16 溶融解析コード POPCORN の並列化及び可視化手法の整備

Parallelization of the POPCORN Code and Development of Visualization Method for Result of the POPCORN Code

> 永武 拓、高瀬 和之 熱流動研究グループ

(1) 利用目的:

熱流動技術開発グループでは燃料溶融現象を解明するため粒子法を基にした燃料破損解析コード POPCORN を開発している。本件では POPCORN コードによる大規模解析を目指し、MPI による並列化及び可視化用ソフトウェアの整備に関する検討を行った。

(2) 利用内容·結果:

2.1 MPI による高速化の検討

現状の POPCORN コードは OpenMP による並列化がなされている。POPCORN コードは粒 子法を基にした解析コードであり計算負荷が大きいため、大規模解析を実施するに当り MPI に よる並列化は必須事項となる。従って本件において、一部のサブルーチンに対し MPI による並 列化を実施した。

表1にプロセス数/スレッド数を変えた場合の実行時間を示す。計算速度は32プロセス/1 スレッドの場合、1プロセス/1スレッドと比較して10.5倍となっている。プロセス数の増加に 伴って計算速度はスムースに増加し、平均するとプロセス数2倍で計算速度は1.6倍となってい る。しかしながら並列化前と比較すると、1プロセス実行では大幅に実行時間が増加している。 一方、スレッド数を増加させてもさほど性能が上がらない。これはスレッド並列実行した場合に 一部サブルーチンにおいてコストが急激に増加するためである。

今後はスレッド並列化に関しての最適化及び MPI 化を未実施のサブルーチンに関して並列化 を実施していく予定である。

	並列化前	1プロセス	2プロセス	4プロセス	8プロセス	16 プロセス	32 プロセス
1スレッド	866	2108	1217	1037	592	309	200
2スレッド	-	1833	1075	734	475	273	-
4スレッド	-	1693	845	671	592	-	-
8スレッド	674	1629	858	691	-	-	-

表1 サンプル計算の実行時間 [秒]

2.2 可視化手法の整備

POPCORN コードは離散データを出力する。従って実際の流動の様子を分かりやすく可視化 するために、可視化手法の工夫が必要である。本件では MicroAVS 及び ParaView を用いた可視 化を実施した。図1に MicroAVS、図2に ParaView の PointSprite プラグインを用いた可視化 を行った図を示す。両図共に模擬燃料棒が溶融していく様子を滑らかに可視化できている。今後 はボリュームレンダリング等を用いた手法により、より分かりやすい可視化を行えるよう検討を 進めていく予定である。



図1 MicroAVS による可視化結果



図 2 ParaView による可視化結果

(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:

今後は並列化後の POPCORN コードを使用した燃料溶融解析を実施したい。

5.9.17 水位低下時の炉内外自然対流挙動に関する研究

Study on Behavior of Natural Convection in and out Nuclear Reactor during Draw-down

高瀬 和之、永武 拓、佐竹 信一*1 熱流動研究グループ、*1 東京理科大学 基礎工学部 電子応用工学科

(1)利用目的:

炉心内や使用済み燃料プールにおいて冷却水の流動が停止した場合、燃料棒による加熱によっ て冷却水は沸騰し、それに伴って水位が徐々に低下する。その結果、燃料集合体の内外で大規模 な蒸気自然対流が発生する。燃料集合体の長さは約4mであり、そのため発生する自然対流は 層流から乱流に遷移することが考えられる。また、自然対流は燃料集合体の内外で、幅が1·3mm 程度の非常に狭隘な流路を流れる。さらには、燃料集合体内には隣り合う燃料棒との間隔を一定 に保つために流れ方向に数個のグリッドスペーサが設置されている。このような複雑な条件下 で、自然対流による燃料棒冷却への影響を評価するためには、障害物を有する狭隘流路内での乱 流遷移自然対流を正確に予測できる解析手法の開発が必要である。そこで、本研究では、水位低 下時の炉内外自然対流挙動に着目し、障害物を有する狭隘流路内乱流遷移自然対流を高精度で予 測できる解析手法について研究する。解析手法について原子力機構と東京理科大学は共同で検討 し、その結果を基にそれぞれが解析コードの開発や既存解析コードの改良を行う。

(2) 利用内容·結果:

本年度では狭隘流路内乱流遷移自然対流の準備段階として、狭隘流路内乱流ケースを想定し、 まず高レイノルズ数円管乱流の DNS を行う。BX900 を使うことにより、大規模な数値計算を可 能とし詳細な乱流構造分布及び熱統計量を得ることができる。本年度は、一定圧力勾配下のもと で数値計算を行い乱流構造の可視化を行った。また、計算コードを MPI から MPI+OpenMP の ハイブリッドコードに変更し高速化をはかった。基礎方程式は円筒座標において3次元非圧縮性 Navier-Stokes 方程式、連続の式を用いており、圧力ポアソン方程式の周期方向にはフーリエ変 換を径方向の離散化には2次精度中心差分を適用し3重対角行列解法を用いている。時間離散化 には非線形項に3次精度 Runge-Kutta 法、粘性項は Crank-Nicolson 法により時間積分を行っ た。さらに並列化についてのアルゴリズムは前述のフーリエ変換を行うために別々の並列軸をも つ2つの配列の軸反転を行うアルゴリズムを用いている。格子解像度は、流れ方向、径方向、円 周方向にそれぞれ 2048×512×768の格子を用いた。壁面摩擦速度と半径で無次元化されたレイ ノルズ数は、1050 である。図1に低速ストリークのコンター図を示す。円管中心まで大きな構 造が生じている。その大きな構造はクラスタリングを生じ円周方向において縞状構造ではなく接 続し大きな構造を有している。低レイノルズ数の場合はこのような大規模な構造は存在せず、自 然対流における加速が生じた場合、これら大規模構造のスケールがどのように影響していくの か、今後検討していきたいと考えている。



図1 低速ストリーク(u+<-3.0))

(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:

今後は浮力項を入れ、さらに温度方程式も解くことを想定しており、平成 28 年度においても 大型計算システムの利用の継続を行いたい。

5.9.18 溶融燃料落下挙動評価手法開発に関する研究

Study of Molten Fuel Fall Behavior Evaluation Method Development

鈴木 貴行

炉内状況解析研究グループ

(1)利用目的:

シビアアクシデント (SA) 解析コードの高度化のためには、炉心溶融時の熱流動挙動を適切 にモデル化し、解析コードに反映させる必要がある。本研究では、これまで主に気液二相流を対 象に開発してきた詳細二相流解析コード TPFIT を、溶融燃料落下時の流動挙動に対応できるよ うに拡張および改良することによって、複雑な構造物を有する BWR 下部炉心プレナムへの余裕 燃料落下挙動を、詳細に評価できる解析手法を開発する。平成 26 年度は溶融燃料模擬物質の物 性値の影響を評価するための解析を実施した。なお、本研究の一部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) 利用内容·結果:

筑波大学で実施された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。詳細な現象の把握を目的とし、格子解像度はおよそ0.5mm 程度とした。これにより、総格子数は4600万 程度となる。解析では、作動流体となる溶融燃料模擬物質の物性値として、フロリナート(密度 1830kg/m³、表面張力係数0.043N/m、動粘性係数0.82mm²/s)を用いた条件【ケース1】とフ ロリナートより密度及び表面張力が大きい、溶融燃料(密度7300kg/m³、表面張力係数0.573N/m、 動粘性係数0.57mm²/s)を模擬した条件【ケース2】の2ケース実施した。解析結果の一例とし て、x-y 断面における溶融燃料模擬物質の界面形状の可視化結果を時系列で図2に、x-z 断面で の可視化結果を図3に示す。図2より、ノズルより射出された溶融燃料模擬物質は溶融ジェット を形成する様子がケース1およびケース2ともにみられる。また、フロリナートよりも溶融ジェ ット先端位置の進展速度は溶融物質の方が速いことが確認できる。さらに、ケース1と比較して、 ケース2ではジェットの直進性が高く、ギャップ部への模擬物質の流入が少ないことも確認でき る。図3より、ケース1では、チャンネル中央の模擬溶融物質はギャップへ流体塊のまま進入し、 隣接チャンネルへと移行する様子が見られる。一方、ケース3では、模擬溶融物質はギャップ部 で微粒化し、微粒化物が隣接チャンネルへと移行することが確認できる。この結果より、模擬物 質の密度及び表面張力が溶融ジェットの流動挙動に及ぼす影響が大きいことが明らかとなった。

図4に模擬溶融物質が微粒化した際の微粒化径の分布図を示す。ケース1と実験結果を比較すると、解析結果では2.0-3.0mm 程度の比較的大きい微粒化物が確認できるものの、微粒化径の存在割合が多くなるピーク値は0.6-1.0mm 程度でよく一致していることが確認できる。

今年度は、界面形状および微粒化径などの定量的な比較を実施し、模擬物質の物性値がジェットブレイクアップ現象に与える影響を評価した。これらの結果より、改良および拡張した TPFIT が溶融燃料落下挙動を詳細に評価できる見通しが得られた。



図1 解析体系

図2 x-y 断面での界面形状可視化結果



図3 y-z 断面での界面形状可視化結果



図4 溶融燃料模擬物質の微粒化径分布

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 鈴木貴行,吉田啓之,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 (7)複数チャンネル内ジェットブレイクアップ現象に対する 模擬溶融燃料の物性値の影響,日本原子力学会 2014 年秋の大会,(2014).
- 鈴木貴行,吉田啓之,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 (9)高空間解像度解析による複雑構造物内溶融ジェット挙動 の把握,日本原子力学会 2015 年春の年会,(2015).
- 3) T. Suzuki, H. Yoshida, Y. Abe, A. Kaneko, Development of Numerical Simulation for Jet Breakup Behavior in Complicates Structure of BWR Lower Plenum (4) Multi-Channel Experimental Analysis by Detailed Two-Phase Analysis Code TPFIT, Proceedings of the International Conference on Nuclear Engineering, ICONE22-30154 (2014).
- 4) T. Suzuki, H. Yoshida, F. Nagase, Development of numerical evaluation method for fluid dynamics effects on jet breakup phenomena in BWR lower plenum, Journal of Nuclear Science and Technology, Vol51:7-8, pp.968-976 (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開発のため、大型計算機 を利用してきた。今後は、詳細な現象の把握を目的とした大規模解析の実施や、水-蒸気系など の相変化を伴う条件での解析や現象の把握のために大型計算機の利用を進める予定である。

5.10 原子力科学研究部門 原子力水素・熱利用研究センター Sector of Nuclear Science Research Nuclear Hydrogen and Heat Application Research Center

5.10.1 有害度発生を抑える高温ガス炉の提案と自己遮蔽効果を利用した最適設計 Proposal of Low Radiotoxic Spent Fuel HTGR and Optimization of Nuclear Design by using Self-shielding 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。この特性と共に、原子力発電に特有の問題である、 環境負荷となる放射性廃棄物の問題が解決されることが望ましい。この観点から、長半減期核種 の発生を抑え有害度を低減する高温ガス炉である Low Radiotoxic Spent Fuel (LRSF)-HTGR を 提案した。放射性廃棄物に関しては、放射性物質の減衰により経口摂取による有害度の総量が低 下し、核燃料製造のために自然界より採掘された天然ウラン (U)の持つ有害度よりも低減すれ ばよいとする考え方がある。この考え方は総量管理の理念に適ったものである。廃棄物に含まれ る放射性物質には、核分裂生成物 (FP)、マイナーアクチノイド (MA) がある。FP の有害度が 天然 U レベルまで減衰するのに 300 年、MA では 10 万年かかるといわれており、最近では MA を核分裂できる加速器駆動システム (ADS)が注目されている。核破砕中性子源は 20 倍程度に 増倍されるため反応自体は臨界炉と同様に増倍された中性子が主体であり、その核変換性能自体 はベースとしている高速炉と大きく変わりはなく、サイクルあたりのアクチノイド核種の燃焼は 1割程度にとどまる。核変換性能は主に、マルチリサイクルによるものである。また、ADS で 想定している乾式再処理技術は一般的に用いられている湿式再処理技術とは異なり、実用化され ておらず、今後、実証が必要な技術である。

一方で、今回提案した LRSF-HTGR は MA の主な発生源である U-238 を用いず、高濃縮 U を燃料に用い、MA の発生そのものを抑えるという考え方によるものであり、ADS や高速炉と 根本的に考え方が異なる。そのため、プルトニウム (Pu)の発生も抑えられ余剰 Pu の問題も発 生せず、直接処分においても、その有害度が天然 U レベルまで減衰するのに 800 年程度で済み、 人類が管理しうる程度の期間に短縮できる。再処理技術が十分に実用化に至らない場合の核燃料 サイクルオプションとして非常に有用である。本オプションは、大きな実証試験を必要としない 技術である。一方で、高濃縮 U を用いるため、核拡散のリスクが懸念される。この問題は化学 的に安定で硝酸に溶けにくいイットリア・スタビライズド・ジルコニア (YSZ) に U を固溶し、 UO₂-YSZ 被覆粒子燃料を採用することにより解決した。これは、前年度に提案した PuO₂-YSZ 被覆粒子燃料を用いる Pu 専焼炉、クリーンバーン高温ガス炉(CB・HTGR)と同じ発想である。 また、原子炉の自己制御性に大きく貢献する U-238 を排除したことにより、反応度係数が正 となる懸念がある。そこで、エルビウム(Er)を添加し反応度係数を改善する。この技術は CB・HTGRの成立に必要な共通の課題である。なお、Er は軽水炉の可燃性毒物としても検討さ れているように、添加法が不適切であれば臨界性を妨げ、達成燃焼度を著しく下げる。資源の偏 在の問題を考えると少量で効果的に用いる必要もある。如何に効果的に負の反応度係数を得られ るように Er を装荷するかが、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。今回は燃焼計算を行い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。モンテカルロ法による計算では、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。特に、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、その適切なモデル化は後述のように決定論的手法では困難である。



Fig.1 高温ガス炉の燃料構造

また、Er装荷による反応度係数の改善は Er-167のみの寄与が大半であること、広範囲の添加では、燃焼が過剰に進み燃焼末期に負の反応度係数が維持できないことなどが経験上知られてい

る。その反応のほとんどが 0.5eV にピークを持つ共鳴捕獲反応であり、効果的な自己遮蔽効果の 発現を促す設計が求められる。以下に、共鳴ピークを含むエネルギー群の実効断面積を示す。

$$\sigma_{eff,g} = f_g(T,\sigma_0)\sigma_{\infty,g}(T) \qquad (1), \qquad \sigma_{0,n} = \frac{1}{N_n} \sum_{m \neq n} N_m \sigma_{t,m} + \frac{(1-C)\Sigma_e}{N_n} \qquad (2)$$

一般的に、温度(T)による自己遮蔽効果の変化はドップラー効果として有名であるが、運転中の温度は変えることができないので、もう一つのパラメーターである背景断面積(σ_0)の変化による設計の最適化を考える。背景断面積が大きな場合は自己遮蔽効果が緩和され、背景断面積が無限大の場合は自己遮蔽効果が一切発生せず(f=1)、その断面積は無限希釈断面積(σ_∞)と呼ばれる。背景断面積(式(2))は、他の核種の断面積の効果である体積項(第1項)とErの塊からの漏えいの効果の表面項(第2項)からなる。体系が複雑なため、これらの項の正確な評価は難しく、今回は、モンテカルロ法中性子輸送計算の結果を用い、逆算して推定した。Table 1 に装荷法と装荷法毎の自己遮蔽因子及び背景断面積を示す。

	Mixing in kernel	Binary packing	Loading in graphite shaft			
Loading method	Mixture of Fuel & Er Fuel & Er Er compact Graphite shaft					
Effective cross section (barn)	1.88×10^3	$1.55 \text{ x}10^3$	1.01×10^3			
Resonance shielding factor (-) Background cross section (barn)	0.718	0.592	0.386			
Total	$5.03 \text{ x}10^3$	$2.20 \text{ x}10^3$	$3.72 \text{ x}10^2$			
Volume term	$2.56 ext{ x10}^3$	$6.79 ext{ x10}^{1}$	$7.25 \text{ x}10^{1}$			
Surface term	$2.47 \text{ x}10^3$	$2.14 \text{ x}10^3$	$2.99 \text{ x}10^2$			
Spatial shielding factor (-)	0.875	0.761	0.483			

Table 1 Er 装荷法と自己遮蔽効果 (0.3eV 付近の Er-167 の断面積)

Er 装荷法としては、燃料核への混合、燃料粒子と Er 粒子の2粒子系、黒鉛心棒への装荷の3 種類である。Er の装荷量は統一してある。背景断面積の体積項は、燃料核への混合が断面積の 大きいアクチノイド核種と同じ領域に装荷したため、2 桁程度も大きい。Er は独立して装荷す るほうが有利である。表面項に関しては、被覆粒子に分散させて装荷するよりも、黒鉛心棒の中 心にまとめたほうが、1 桁程度小さい。被覆粒子は広域に分散しており、中性子の再入射の効果 (ダンコフ補正)が寄与しそうであるが、粒子核の絶対的な小ささの効果が寄与し、表面項が大 きい。表面項を小さくするためには、黒鉛心棒の中心に Er を集中させ塊を大きくしたほうがよ い。結果として黒鉛心棒への装荷が最も背景断面積を小さくでき、効果的な自己遮蔽効果が得ら れることがわかる。実効断面積は燃料核への混合の半分程度に収まる。さらに、空間自己遮蔽効 果も最も大きく発現し、空間自己遮蔽因子も半分程度である。最終的に、黒鉛心棒に装荷した場 合 Er-167の反応率は、燃料核への混合に比べ 1/4 (1/2 x 1/2)に収まり、燃焼末期に効果的に必要な量の Er-167を温存できる最適な設計であることが機構論的に確認できた。

さらに、今後の安全解析に備え、決定論的手法の設計ツールの整備も行った。現状の断面積作 成のためのセル計算コード(SRAC-PIJ)では、二重非均質性の取扱いや超詳細群中性子減速計 算の熱エネルギー領域の取扱いに問題がある。この問題は、LRSF-HTGR にも関連した問題で ある。当面の利用を考えて、モンテカルロ法中性子輸送コード(MVP)による断面積作成シス テムを整備した。MVP 自体、開発部署により断面積作成の目的で開発が進められてきたが、拡 散係数の算出機能など、未だに機能が不足している。そこで、MVP と SRAC-PIJ を組み合わせ た Hybrid システムを作成した。SRAC-PIJ の断面積のうち問題があるものを MVP の断面積で

置き換えるシステムである。MVPに より燃焼計算を行い、その燃焼組成を 用いてSRAC-PIJによる解析を行う。 時間を要する MVP 解析は BX900 上 で実施し、端末で実施する SRAC-PIJ 解析も並列化ができるため、従来法と 比較し短時間の処理が可能となった。 Fig.2 は CB-HTGR のセル計算の結果 である。SRAC は MVP と違い 10% Δ k/kk'程度の差が見られるが Hybrid システムで生成された断面積 を使った解析はMVPの結果をよく再 現している。



Fig.2 増倍率の比較

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Y. Fukaya, K. Kunitomi, M. Ogawa : "Study on reduction of potential radiotoxicity for spent fuel by using HTGR," J. At. Energy Soc. Jpn. 14(3), (2015), pp.189-201.
- 2) Y. Fukaya, M. Goto, T. Nishihara : "Study on erbium loading method to improve reactivity coefficients for low radiotoxic spent fuel HTGR," Nucl. Eng. Des., 293, (2015), pp.30-37.
- 深谷裕司、後藤実、西原哲夫: "クリーンバーン高温ガス炉詳細設計のための核設計モデルの整備," JAEA-Technology 2015-017, (2015).

(4) 今後の利用予定:

今後は決定論的手法を用いた設計に移行する。今回は当面の利用のために Hybrid システムを 整備したが、SRAC における熱エネルギー領域の取扱いの高度化を行っていく予定である。

5.11 原子力科学研究部門 先端基礎研究センター Sector of Nuclear Science Research Advanced Science Research Center

5.11.1 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磁場平行縦成分と磁場 垂直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)。特に、横成分では、2 マグノン束縛状態の形成を反映してギャップモードが現れる。低磁場では量子効果によってπ/2 側に繰り込まれた位置にスペクトル強度のピークが生じ、飽和磁場に近づくにつれてピーク位置 が古典的なピッチアングルにシフトしていくことが分かった。この効果は、磁気的フラストレー ションが強い領域でより顕著に観られる。ボゾン化による先行研究では、π/2 にピークが生じる と報告されていたが、弱結合理論であるボゾン化では、磁気的フラストレーションが強い領域を 記述するには不充分であった。本研究の数値解析により初めて、磁気的フラストレーションが強 い領域まで含めて、磁気励起スペクトルの磁場依存性の振る舞いが明らかとなった。

JAEA-Review 2015-028

さらに、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)。また、容易軸型異方性によって 2 マグノン束縛状態が安定化する ことを見出した。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。



図2 磁気異方性を考慮した場合のLiCuVO4の磁気励起スペクトルの横成分

また一方、低次元フラストレート量子スピン系の新しい候補である、フラストレートスピン梯 子系における磁場誘起相転移について解析を行った。昨今、候補物質 BiCu2PO6 において多数 の磁気相転移が観測された。この多段磁気相転移は、フラストレートスピン鎖やフラストレーシ ョンのないスピン梯子系では起こりえず、フラストレートスピン梯子系特有の興味深い現象であ る。我々は、この現象を解明するため、フラストレートスピン梯子系の磁化過程を理論的解析し て、複数の磁気相転移が起こることを見出した。このうち幾つかの相転移は、BiCu2PO6のパラ メータ領域に位置しており、実験で観測された多段磁気相転移の物理を掴んでいると考えられ る。一方、同パラメータ領域の高磁場側では、磁化曲線が平坦になる磁化プラトー現象が現れる ことが分かった。磁化プラトー現象は、幾つかの低次元量子スピン系で理論的に確認されている が、現実の物質での観測例は少ない。我々の理論的予想が正しければ、BiCu2PO6 がその貴重な 一例となりうる。

(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, "Spin-spin correlation enhanced by impurities in a frustrated two-leg spin ladder", JPS Conf. Proc. 3, 014016 (2014).
- 2) H. Onishi, "Ground state of S=1 zigzag spin-orbital chain", JPS Conf. Proc. 3, 014025 (2014).
- 3) M. Sekino, S. Okamoto, W. Koshibae, M. Mori, and S. Maekawa, "Temperature dependence of thermopower in strongly correlated multiorbital systems", JPS Conf. Proc. 3, 017014 (2014).
- 4) S. Hikino, M. Mori, and S. Maekawa, "Zero-field Fiske resonance coupled with spin waves in ferromagnetic Josephson junctions", J. Phys. Soc. Jpn. 83, 074704(2014).
- 5) M. Mori, W. Koshibae, S. Hikino, and S. Maekawa, "Possible method to observe the breathing mode of a magnetic domain wall in the Josephson junction", J. Phys.: Condens. Matter 26, 255702 (2014).
- 6) M. Mori, A. Spencer-Smith, O. P. Sushkov, and S. Maekawa, "Origin of the phonon Hall effect in rare-earth garnets", Phys. Rev. Lett. 133, 265901 (2014).
- 7) H. Onishi and S. Miyashita, "Doping control of realization of an extended Nagaoka ferromagnetic state from the Mott state", Phys. Rev. B 90, 224426 (2014).
- 8) Z. Xu, B. Gu, M. Mori, T. Ziman, and S. Maekawa, "Sign change of the spin Hall effect due to electron correlation in non-magnetic CuIr alloys", Phys. Rev. Lett. 114, 017202 (2015).
- 9) B. Gu, Z. Xu, M. Mori, T. Ziman, and S. Maekawa, "Enhanced spin Hall effect by electron correlations in CuBi alloys", J. Appl. Phys. 117, 17D503 (2015).
- 10) H. Onishi, "Effects of magnetic anisotropy on spin dynamics of ferromagnetic frustrated chain", J. Phys.: Conf. Ser. 592, 012109 (2015).
- 11) T. Sugimoto, M. Mori, T. Tohyama, and S. Maekawa, "Lifshitz transition induced by magnetic field for frustrated two-leg spin-ladder system", JPS Conf. Proc. 8, 034005 (2015).

プレス発表

- 12) 森道康, アレックススペンサースミス, オレグスシュコフ, 前川禎通,「熱の流れが磁場で変わる仕組みを解明—磁場を用いた熱流制御の可能性—」(2014年12月12日).
- 13) 徐卓, 顧波, 森道康, ティモシーザイマン, 前川禎通, 「金属中の磁気・電気の流れを切り替 える―原子力分野での熱電発電利用に向けて―」(2014 年 12 月 19 日).

(4) 今後の利用予定:

量子磁性体における新奇量子スピン状態を探索するとともに、スピンによる熱伝導、スピン輸送、超伝導など、輸送特性に関連した現象に注目して解析を行う。

5.12 原子力科学研究部門 高崎量子応用研究所 Sector of Nuclear Science Research Takasaki Advanced Radiation Research Institute

5.12.1 粒子線治療における低エネルギー光子によるビームモニタリング手法の検討 Study of the Beam Monitoring Method by Measuring Low Energy Photons for Particle Therapy

山口 充孝、長尾 悠人*1 ビーム技術開発課、*1 照射施設管理課

(1) 利用目的:

粒子線がん治療の信頼性向上のため、入射粒子線の飛跡から放出される低エネルギー光子 (63-68 keV)の測定による粒子線到達深さのリアルタイムモニター手法を開発している(M. Yamaguchi et al., Phys. Med. Biol. 57 (2012) 2843-56)。本手法は、検出器に入射する低エネル ギーの二次粒子は、二次電子制動輻射による光子が支配的であることを仮定している。しかし、 実際は、陽電子消滅ガンマ線や即発ガンマ線といった高エネルギー光子の散乱線や、光子以外の 粒子が検出器に入射してバックグラウンドイベントを形成する。そのため、本手法の前提となる 上記仮定が正しいかどうかを示すことを大型計算機利用の目的としている。低エネルギー光子の シミュレーションには入射粒子線による二次電子生成の計算が必要であるため計算量が膨大と なり、大型計算機利用が不可欠となる。

(2) 利用内容·結果:

大型計算機 BX900 において、PHITS コードを用いたモンテカルロシミュレーションを実施し た。290 MeV/u の炭素 12 ビームを直径 10 cm の円柱形の水ファントムに、ビーム軸と水ファン トムの回転対称軸を一致させる配置で入射し、水ファントムの周囲に、ビーム軸に対して回転対 称形状を持つ鉛製コリメータと検出器を配置した。コリメータは動径方向に 10 cm の厚さを持 ち、ビーム軸方向に 2 cm 間隔で 5 箇所のスリット(幅 6 mm)を持つ。水ファントムに対面す る面をコリメータの前面として、コリメータの後面に動径方向に 0.5 mm の厚さを持つ 5 つの検 出器を、各スリットと各検出器のビーム軸方向の中央位置が一致するように配置し、検出器に入 射する粒子の種類とエネルギースペクトルを記録した。まず、二次電子発生の影響を加味した計 算として、発生する二次電子のエネルギー下限値を、観測する光子のエネルギーよりも低い値(60 keV)に設定してシミュレーションを行った。次に、前述のジオメトリーにおいて二次電子発生 及び電子制動輻射をそれぞれ抑制した条件でのシミュレーションを行い、合計3つの条件のシミ ュレーション結果を比較することで、二次電子制動輻射に起因する光子の収量と、それ以外の物 理過程に起因する光子の収量の比率を求めた。

シミュレーション結果として、まず、低エネルギー領域(おおよそ 200 keV 以下)では、検 出器に入射する粒子は光子と中性子が同程度で最も多く、電子がそれらの 10 分の1 程度であり、 その他の粒子は無視できる量であることが分かった。また、イオンの到達位置よりも浅い領域を 観測する検出器では、二次電子制動輻射に起因する光子の収量がそれ以外の物理過程に起因する 光子の収量の 10 倍程度であり、光子の生成過程としては、二次電子制動輻射が支配的であるこ とが分かった。さらに、二次電子制動輻射に起因する光子の収量は、イオン到達位置よりも深い 検出器位置ではほぼ 0 となり、光子収量と検出器位置との間に見られる相関が、上記の文献の実 測結果と同様の傾向にあることが示された。

結論として、今回のシミュレーションによる考察によって、検出器に入射する低エネルギーの 二次粒子は、二次電子制動輻射による光子が支配的であることが示せた。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 Mitsutaka Yamaguchi, Yuto Nagao, Yuichi Saito, Naoki Kawachi, Shu Fujimaki, Seiichi Yamamoto, Masataka Komori, Toshiyuki Toshito, "An Experimental Test of a Beam Monitoring Method by Measuring Low Energy Photons Using a Gamma Camera", 2014 IEEE Nuclear Science Symposium & Medical Imaging Conference; 21st Symposium on Room-Temperature Semiconductor X-ray and Gamma-ray Detectors (NSS/MIC/RTSD 2014), Seattle (U. S. A.), 8-15 November 2014.

(4) 今後の利用予定:

低エネルギー光子の発生過程を詳細に分析するため、様々な物理量が記録可能となる「ユーザ ー定義タリー」を利用した PHITS シミュレーションの準備を進めている。また、本手法の陽子 線治療への応用の可能性を、PHITS を用いたシミュレーションを通して調査する予定である。

5.13 原子力科学研究部門 量子ビーム応用研究センター Sector of Nuclear Science Research Quantum Beam Science Center

5.13.1 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:

重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:

重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おり、その理由の一つはクラス ターDNA 損傷を作るからと考えられている。しかしながら、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 に繋がるので、 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研究を行っている。こ の機構解明に 必要な重粒子線照射による物理過程(照射ごと数 fs 以内に起きる現象)と化学過 程(数 ps 以上で起きる現象)の機構はおおよそのことはわかっている。しかしながら、物理過 程から化学過程に移行する途中はほとんど研究されておらず、そのとき起こる物理現象がよくわ かっていない。

平成 26 年度は、この解明に向けて(i) 重粒子線照射で生成する水分子イオンの電場による水 分子、水分子イオンの運動の MD コード開発に成功した。物理過程 から化学過程に移行すると き、標的分子の運動を解析する必要があり、本年度開発した MD コードは、その解析に役立つ ことが期待できる。このコードを用いて照射後 100 fs 程度で重粒子線照射により生成した分子 イオンの動き出す可能性を明らかにした。(ii) 重粒子線の動径線量シミュレーションを行い、 その結果から新しい動径線量分布の経験式を作成した。動径線量は重粒子線照射 により標的分 子に付与するエネルギーの空間分布を表すもので、標的分子の運動の解析に役に立つと考えられ る。 図1に動径線量と炭素イオン線(8 MeV/u、12 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、簡便式、従来の二通りのモデルから算出した動径線量の値を示 している。簡便式は我々のシミュレーションから得られた動径線量を再現していることがわか る。

本研究では、世界で最も現実に近いモデルを用いて高精度に動径線量をシミュレーションする ことに成功し、新しい見解を示すことができた。さらに、我々の作成した動径線量の経験式はシ ミュレーションの結果を使いやすくしたものであり、この経験式はクラスターDNA 損傷の生成 過程の解明、重粒子線がん治療の治療計画の高度化に繋がることが期待できる。



図1 動径線量と炭素イオン線[(a) 8 MeV/u, (b) 12MeV/u]の軌道からの距離(r)との関係。
 我々の新規モデル(◇)、簡便式(→→)、従来のモデル(▲、---)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

- 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, pp.211 - 216 (2014).
- K.Moribayashi, 'Relaxation of Plasma Created from Irradiation of a Heavy Ion', JPS Conference Proceedings, vol.1, pp. 013089 - 013092 (2014).
- 3) 森林健悟、「解説 重粒子線の動径線量」、原子衝突学会誌「しょうとつ」、第 11 巻 3 号、 pp.73-91 (2014).

4) K. Moribayashi, 'Development of the radial dose distribution function relevant to the treatment planning system for heavy particle cancer therapy', Phys. Scr., vol.90 pp.054013 - 054017 (2015).

学会発表

- 5) 森林健悟、「重粒子線による標的分子の運動」、日本物理学会 2014 年秋季大会、中部大、春日井市、2014 年 9 月.
- 6) K. Moribayashi, 'New simulation model for radial dose relevant to the treatment planning system for heavy particle cancer therapy', ICAMDATA2014, イェーナ、ドイツ、 2014 年 9 月.
- 7) K. Moribayashi, 'Atomic collision physics relevant to the treatment planning system for heavy particle cancer therapy'、原子衝突学会第 39 回年会、東北大、東北市、2014 年 10 月.
- 8) 森林健悟、「重粒子線による動径線量:重粒子線の電荷の影響」、日本物理学会第70回年次 大会、早稲田大、東京、2015年3月.

(4) 今後の利用予定:

今後は動径線量シミュレーションの高度化を目指す。そのために、二次電子の放出角度の実験 データ、分子の振動及び回転励起、弾性散乱をシミュレーションコードに取り入れる。現状は、 照射後、100fs までしか取り扱っていないが、今後は、1ps まで取り扱う。さらに、電離電子、 標的分子の両方の運動を同時に取り扱い、物理過程から化学過程への移行中の物理現象のさらな る解明を目指す。

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。

5.13.2 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26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す。

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環境を回復する上で喫緊の 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

カーボンアロイ触媒における酸素還元反応では酸素の2電子還元による過酸化水素の生成が 無視できないことがわかっている。第一原理分子動力学計算により過酸化水素の生成機構を調べ たところ、グラフェンのジグザグ端にカルボニル酸素とピリジン状窒素が近接して存在すると、 ピリジン状窒素が電気化学反応により容易に水素化されるため、酸素還元とエッジ官能基の酸化

が共役反応として起 きることがわかっ た。電極電位 Uを考 慮した熱平衡状態で の第一原理分子動力 学計算から求めた酸 素の2電子還元反応 の自由エネルギーの 変化を図1に示す。 電位0V vs. SHE で は、グラフェンのジ



図 1 第一原理分子動力学計算から示唆されたカーボンアロイ触媒での 酸素の2電子還元反応機構

グザグ端でのカルボニル酸素とピリジン状窒素の水素化により系の自由エネルギーがそれぞれ 約0.81 eV と0.70 eV 低下する。その後の酸素還元とエッジ官能基の酸化共役反応は反応前後の 自由エネルギー差が0.1 eV 以下と小さいことがわかった。またこの共役反応の活性化障壁は約 0.33 eV と見積もられたが、この値は、これまでの検討により得られた酸素吸着の活性化障壁の 計算値と比べると、ほとんどの場合かなり小さい。この結果は、酸素の2電子還元が約0.76 V vs. SHE で起きることを示唆している。以上の結果から、過酸化水素の生成を抑制するには実触媒 におけるエッジ官能基に関する詳細な知見の取得およびエッジ官能基の制御が今後の重要課題 と考えられる。

② 粘土物質におけるセシウムの吸脱着過程の研究

SPring-8 の原子 力機構専用ビーム ラインでの DXAFS 実験により福島の 土壌に豊富に含ま れるバーミキュラ イトにセシウムが 取り込まれ固定さ れる過程が観察さ れ、セシウムがバー ミキュライトの層 間に取り込まれる ことにより層間か らの脱水が速やか に進行することが 示唆されている。そ こで、今年度は第一



図 2 シミュレーションに用いたバーミキュライトの構造(左)と第一 原理定温定圧分子動力学計算により得られた格子定数の単位構造 あたりの層間水分子数 n に対する依存性(右)

原理定温定圧分子動力学コードを高速化および高度化し、それを用いてセシウムが吸着したバー ミキュライトの層間からの脱水過程を調べた。計算には図2左に示した単位格子に層間を2つ含 む2M構造を用いた。図2右にバーミキュライトの単位構造あたりの水分子数nの関数として求 めた格子定数を示す。2つある層間のうち1つは水分子数をn=6.0に保ちもう一つを図2右の値 に変化させたところ、c軸の長さが不連続に変化し格子が膨張する可能性があることが示唆され た。これは層間水が高密度層構造と低密度層構造の2状態を取り得ることに由っており、粘土層 の組成に強く依存する現象であることがわかった。この計算結果は、膨張した層間では陽イオン 交換が促進されることが期待されるため、セシウムの層間への固定と別の層間へのセシウムの取 り込みが連鎖的に進行し、放射性セシウムが特定の粘土鉱物微粒子に凝集する可能性を示唆して いる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表等

- 1) <u>池田隆司</u>、「第一原理分子動力学シミュレーションによる粘土鉱物の層間水の研究」、日本物 理学会 2014 年秋季大会 9月 7-10 日/春日井市.
- 2) 平川皓郎、浦元優太、武田篤哉、三村大輔、<u>池田隆司</u>、柳澤将、稲垣耕司、森川良忠、「水 溶液中での鈴木-宮浦クロスカップリング反応の律速段階の解明」、日本物理学会 2014 年 秋季大会 9 月 7-10 日/春日井市.
- 3) <u>池田隆司</u>、「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」、 第 34 回表面科学学術講演会 11 月 6-8 日/松江市(依頼講演).
- 4) <u>池田隆司</u>、「第一原理分子動力学シミュレーションによる粘土鉱物の層間水の研究 II」、日本 物理学会第 70 回年次大会 3 月 21-24 日/東京.

原著論文

- 5) X. Wang, Z. Hou, <u>T. Ikeda</u>, and K. Terakura, "NMR chemical shifts of 15N-bearing graphene", J. Phys. Chem. C 118, 13929-13935 (2014).
- 6) <u>T. Ikeda</u>, Z. Hou, G.-L. Chai, and K. Terakura, "Possible Oxygen Reduction Reactions for Graphene Edges from First Principles", J. Phys. Chem. C 118, 17616-17625 (2014).
- 7) G.-L. Chai, Z. Hou, D.-J. Shu, <u>T. Ikeda</u>, and K. Terakura, "Active Sites for Oxygen Reduction Reaction of Nitrogen-Doped Carbon Alloy Catalysts: Stone-Wales Defect with Curvature Effect", J. Am. Chem. Soc. 136, 13629-13640 (2014).
- Z. Hou, D.-J. Shu, G.-L. Chai, <u>T. Ikeda</u>, and K. Terakura, "Interplay between Oxidized Monovacancy and Nitrogen Doping in Graphene", J. Phys. Chem. C 118, 19795-19805 (2014).
- 9) <u>T. Ikeda</u>, "Infrared absorption and Raman scattering spectra of water under pressure via first principles molecular dynamics", J. Chem. Phys. 141, 044501 (2014).
- 10) <u>T. Ikeda</u>, "FIRST PRINCIPLES MOLECULAR DYNAMICS STUDY OF INTERLAYER WATER AND CATIONS IN VERMICULITE", Clay Science 18, 23-31 (2014).

解説等

- 11) 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解明(1) 原子・分子レベル構造解析から新しく何がみえるか? 」、日本原子力学会誌 56, pp.366-371 (2014).
- 12) 矢板毅、小林徹、元川竜平、<u>池田隆司</u>、松村大樹、町田昌彦、奥村雅彦、中村弘樹、「放射 光および第一原理計算による物質科学に基づくセシウムの粘土への吸着機構」、日本放射光 学会誌 27, pp.315-322 (2014).
- 13) 池田隆司、Z. Hou、G.-L. Chai、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」、表面科学 36, pp.345-350 (2015).

(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。
5.13.3 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

(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が化 学修飾を受けることによって、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 子機構の一端を解明する。化学修飾を受ける部分は、 ヒストンテール(図 1 の赤い部分)と呼ばれ、基本 的に一定の構造をとらず、X 線結晶構造解析や NMR 分光学でその構造を知ることができない。また、ヒ ストンテールはプラスに帯電しており(図 2)、マイ 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



図1 ヌクレオソームの全体図。 ヒストンテールを赤色で示す。 らせんが巻き付いた DNA。

ナス電荷を持つ DNA と強く相互作用する。そのため、構造サンプリングとしては厄介な対象で ある。我々は、効率的に構造をサンプリングできる方法を開発しており、その方法を化学修飾あ りとなしのヒストンテールの構造サンプリングに適用する。得られた構造アンサンブルを比較す ることにより、化学修飾がテールや DNA の構造分布にどのような影響を与えるかを解析し、核 内での DNA 構造ダイナミクスを探る。

H3 tails (first 40 a.a.) ARTKQ TARKS TGGKA PRKQL ATKAA RKSAP ATGGV KKPHR - NCP

図2 H3テールのアミノ酸配列。青の部分がプラスに帯電

(2) 利用内容·結果:

我々が開発した、効率的に構造探索を可能とするアルゴリズム、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分布を調べた。結果、 ヌクレオソーム構造でのテール空間の広がり、向き、テールを構成している各アミノ酸の向きな どを明らかにした。特に、+1の電荷を持つ2種類のアミノ酸 (アルギニンとリジン)の向き が大きく異なり、リジンが高頻度で溶媒に露出することで、化学修飾を受けやすいことがわかった。次に、リジンを化学修飾して電荷を中和すると、テールの分布が小さくなること、結果として DNA がヒストンタンパク質から剥がれやすくなることがわかった(図3)。この違いがヌクレオソームの集まった状態に大きな影響を与え、遺伝子の発現制御と関係することが示唆された。



図3 アセチル化あり、なしでの DNA の空間占有率のちがい。アセチル化ありの場合、テール の空間分布が小さくなって、DNA がヒストンから離れやすくなる(クリーム色部分)に 対し、修飾のない方では DNA はヒストンに巻き付いたままの構造が多く存在する(灰 色)。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

招待講演

- 1) Kono H. Differences in Dynamics among Nucleosomes with Distinct Histone Compositions; 2015/02. RIKEN Epigenetics in Kobe. Kobe.
- 2) 河野秀俊 (2014/09) シミュレーションによる動的クロマチンダイナミクス. 分子研研究会 「細胞核内反応の分子化学」. 岡崎.
- 3) 河野秀俊, 池部仁善 (2014/06) ヌクレオソームにおける H3 ヒストンテールの構造アンサンブル. 第14回日本蛋白質科学学会年会. 横浜(日本).

学会発表

- 4) Kono H, Sakuraba S, Ishida H (2015/02) Free Energy Profile for Nucleosomal DNA Unwrapping. Biophysical Society 59th Annual Meeting. Baltimore(USA).
- 5) Ikebe J, Sakuraba S, Kono H (2015/02) Conformational sampling of unmodified and acetylated H3 histone tails on a nucleosome by all-atom model molecular dynamics simulations. Biophysical Society 59th Annual Meeting. Baltimore(USA).

- 6) 池部仁善, 櫻庭俊, 河野秀俊 (2014/12) ヒストンテールのアセチル化はその立体構造にどのような影響を与えるか. 第 32 回染色体ワークショップ・第 13 回核ダイナミクス研究会. 広島 廿日市市.
- 7) 櫻庭俊, 河野秀俊 (2014/11) 生体分子 MD の間違い探し. 第 28 回分子シミュレーション討論会. 仙台.
- 8) Sunami T, Kono H (2014/09) Designing a new artificial transcription factor based on engrailed homeodomain. 第 52 回日本生物物理学会年会. 札幌.
- 9) Kono H, Sakuraba S, Ishida H (2014/09) Free Energy Profile of Nucleosomal DNA Unwrapping. 第 52 回日本生物物理学会年会. 札幌.
- 10) Nakagawa H, Yonetani Y, Nakajima K, Ohira-kawamura S, Kikuchi T, Inamura Y, Kataoka M, Kono H (2014/07) Relationship between Hydration Induced DNA Dynamical Transition and DNA-sequence Dependent Deformability. The 2nd International Symposium on Science at J-PARC. Tsukuba,Ibaraki (Japan).

論文発表

*corresponding author

- 11) 櫻庭俊* (2014) 相関から眺める生体分子運動の解析. 統計数理 62, pp. 171-184.
- 12) Kono H*, Shirayama K, Arimura Y, Tachiwana H, Kurumizaka H (2015) Two Arginine Residues Suppress the Flexibility of Nucleosomal DNA in the Canonical Nucleosome Core. PLoS ONE. 10, e0120635.
- 13) Nakagawa H, Yonetani Y, Nakajima K, Ohira-kawamura S, Kikuchi T, Inamura, Y, Kataoka, M.* and Kono, H.* (2014) Local Dynamics Coupled to Hydration Water Determines DNA-sequence Dependent Deformability. Physical Reviews E 90: 022723-022711.
- 14) Li H, Sakuraba S, Chandrasekaran A, Yang L* (2014) Molecular binding sites are located near the interface of intrinsic dynamics domains (IDDs). Journal of Chemical Information and Modeling. 54, pp.2275-2285.
- 15) Kai T*, Tokuhisa A, Moribayashi K, Fukuda Y, Kono H, et al. (2014) Intensity of diffracted X-rays from biomolecules with radiation damage caused by strong X-ray pulses. Journal of the Physical Society of Japan 83: 094301.
- 16) Ikebe J, Sakuraba S, Kono H* (2014) Adaptive lambda square dynamics simulation: an efficient conformational sampling method for biomolecules. Journal of Computational Chemistry 35: pp.39-50.

(4) 今後の利用予定:

本年度は、複数のアセチル化リジンを持つ H3 ヒストンテールの構造を ALSD 法によって求 め、アセチル化の量と構造変化の関係を調べる予定である。また、近年、新たに見つかったヒス トンバリアントを持つヌクレオソームについて分子動力学計算を行い、カノニカルヒストンとバ リアントの動態の違いを明らかにする予定である。 5.13.4 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

(1) 利用目的:

生体高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。本年度は、紫外線などの放射線により 癌化の危険性を伴う DNA 遺伝情報の異常 を認識し修復反応を行う生体機能修復関連 タンパク質群である DNA ポリメラーゼ η 、 MutS (図 1 参照)を対象に、生体機能修復 関連タンパク質の異常分子認識機構を解析 した。

DNA ポリメラーゼ n は、紫外線損傷であ るシクロブタン型ピリミジン2量体(CPD) などのDNA損傷を乗り越えてDNAを複製 するタンパク質であり、その機能不全は発 がん性の色素性乾皮症を引き起こす。本研 究では、分子動力学シミュレーションを用 いて、DNA ポリメラーゼ η が CPD や抗癌 剤を含む DNA を乗り越えて DNA 上を移動 する過程を観測し、移動過程の自由エネル ギー地形を探り、(DNA ポリメラーゼ_nの 内側と結合した損傷 DNA のダイナミクス を全範囲(並進5Å、回転40度、図2参照) にわたり観測し、) DNA ポリメラーゼ n 機 能発現に重要な部位を特定することを目的 とする。最終的には、色素性乾皮症の要因 や抗癌剤作用メカニズムを分子論的に解明 し、DNA ポリメラーゼηの損傷乗り越え修 復メカニズムを明らかにする。

石田 恒、松本 淳 分子シミュレーション研究グループ



 図1 MutSは損傷 DNA を認識して修復誘導反応を行う。DNA ポリメラーゼηは DNA 損傷を乗り越えて DNA を複製する。



図 2 DNA ポリメラーゼ (チューブモデル、灰
 色) と損傷 DNA (チューブモデル、黒色)
 との複合体。DNA の損傷部位(CPD:チミン2量体)は球体モデル (黒または茶色)
 で表示。DNA ポリメラーゼが CPD を乗り越えながら DNA を複製する過程 (始状態の CPD が終状態の CPD まで移動する過程)

(2) 利用内容•結果:

(a) 分子動力学シミュレーションプログラム SCUBA の高度化:

SCUBA の時間更新アルゴリズムの相互作用計算ルーチンを高速化することにより、計算速度 が1.5倍以上になった。さらに大規模系自由エネルギー計算法(ABMD法)において取り扱 える反応座標をこれまでの1次元(並進)から2次元(並進・回転)に拡張した。これにより、 DNA ポリメラーゼηと結合した損傷 DNA の並進、回転の自由エネルギー計算を高速に実行で きるようになった。

(b) プログラム・マニュアル整備:

SCUBAを機構外利用できるようにプログラムを整備し、幅広い利用者に向けたマニュアルを 整備した。(プログラム言語:Fortran90, Open MPI, Open MP、プログラム行数:6万8千、 内コメント文行数:5千、マニュアル:2百ページ)。今後、外部ユーザーに SCUBA が利用さ れることにより、生命科学のシミュレーション分野における生体超分子機能解析への貢献が期待 される。

(c) DNA 構造変化解析手法の開発:

DNA を構成する塩基、および塩基対の構造を解析する手法を開発し、SCUBA に搭載した。 これにより MutS タンパク質や DNA ポリメラーゼ η が認識する DNA 損傷部位の異常な構造変 化を解析できるようになった。

(d) DNA ポリメラーゼ η の運動解析:

2 次元 ABMD 自由エネルギー計算を用いることにより、DNA ポリメラーゼ η が DNA 損傷を 乗り越える様子を観測することに成功した(図3参照)。自由エネルギー地形を解析したところ、 DNA ポリメラーゼ η 内の損傷 DNA がらせん的に移動することがわかった。



図3 観測された損傷 DNA のらせん的な運動

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文

1) <u>Ishida, H. and Matsumoto, A.</u>, Free-energy landscape of reverse tRNA translocation through the ribosome analyzed by electron microscopy density maps and molecular dynamics simulations, PLOS ONE, (2014), 9, e101951.

- 2) <u>Ishida, H.</u>, Essential function of the N-termini tails of the proteasome for the gating mechanism revealed by molecular dynamics simulations, Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics, (2014), 82, 1985-1999.
- 3) Tsukasaki Y., Miyazaki N., <u>Matsumoto A.</u>, Nagae S., Yonemura S., Tanoue T., Iwasaki K., and Takeichi M., Giant cadherins Fat and Dachsous self-fold to organize properly spaced intercellular junctions., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 111: 16011-16016. (2014).

国際学会

- 4) <u>Ishida, H.</u>, Model of hybrid-proteasome for the efficient hydrolysis of substrates analyzed using molecular dynamics simulations, The 18th International Biophysics Congress, Brisbane, Australia (2014).
- 5) <u>Ishida, H.</u>, Free-energy landscapes of the translocation of a substrate in four proteasome activator complexes analyzed using molecular dynamics simulations, The 59th Annual Meeting of Biophysical Society, Baltimore, U.S.A. (2015).

国内学会

- 6) <u>Ishida, H. and Matsumoto</u>, A., Model of reverse tRNA translocation through the ribosome analyzed by electron microscopy density maps and molecular dynamics simulations, 第 52 回日本生物物理学会年会(平成 26 年 9 月、札幌).
- 7) Kono, H., Sakuraba, S. and <u>Ishida, H.</u>, Free energy profile of nucleosomal DNA unwrapping, 第52回日本生物物理学会年会(平成26年9月、札幌).
- 8) <u>Matsumoto, A.</u>, Takagi, J., and Iwasaki, K., 2D hybrid analysis: A new approach to build 3D atomic model from 2D EM image., 第 52 回日本生物物理学会年会(平成 26 年 9 月、札幌).
- 9) <u>Matsumoto, A.</u>, Takagi, J., and Iwasaki, K., Atomic model building from low resolution electron microscopy images., 第 14 回日本蛋白質科学会年会(平成 26 年 6 月、横浜) 招待 講演.

(4) 今後の利用予定:

SCUBAの更なる高度化を進め、大規模分子動力学シミュレーションによる生体高分子の機能 発現解析を継続する。

5.13.5 Dynamic Stark 効果による同位体選択的光解離の量子制御

Quantum Control of Isotope-selective Photodissociation based on Dynamic Stark Effect

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、dipole 極限における非共鳴 dynamic Stark 効果(DSE)に基づく新しい量子制 御法を提案し、アルカリハライド分子の同位体分離に応用する。アルカリハライド分子の基底及 び第一励起∑状態ポテンシャルエネルギー曲線(PEC)は、一方がイオン結合性で他方が共有結 合性であり、途中で交差する。交差点における PEC 間の波束の遷移確率は(diabatic 状態を考 えた場合)、diabatic coupling に強く依存する。これまでの理論研究により、diabatic coupling は核間距離依存性が非常に大きいことが予測されていることから、DSE により交差点を移動さ せることで遷移確率を変化させることが可能となる。本研究では、この効果を利用した量子制御 法を新たに提案し、ヨウ化セシウム(CsI)分子を例として同位体選択的光解離の理論計算を試み る。本計算では、波束の長時間発展を計算する必要があり、大規模並列計算機の利用が不可欠である。

(2)利用内容·結果:

CsI 分子の PEC には過去に高精度 ab initio 法により計算したもの用い、diabatization は 双 極子モーメント行列を対角化するユニタリー変換により行った。 図 1 に CsI 分子の diabatic PEC と双極子モーメントを示す。制御レーザー場 $\epsilon(t)$ にはシングルサイクルの THz 光:

 $\varepsilon(t) = Es(t)\sin(2\pi t/T) \tag{1}$

 $s(t) = \sin^2\left(\pi t \,/\, T\right) \tag{2}$

を用いた。ここで、Eはピーク強度、Tは全パルス時間、s(t)は envelope 関数である。ここでは、 レーザー照射前に既に同位体分子(¹³³CsI と ¹³⁵CsI)が逆向きに配向しており、レーザー場の偏 光方向と分子軸は平行であると仮定する。レーザー場s(t)存在下での波束の時間発展は行列形式 の Schrödinger 方程式

$$i\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{\Psi} = \mathbf{H}\boldsymbol{\Psi}$$
(3)

に従う。ここで、 $\psi = t(\psi_1(t) \psi_2(t))$ であり、 $\psi_1(t)$ 、 $\psi_2(t)$ はそれぞれ波束の diabatic PEC V_{11} 、 V_{22} 上の成分である。Hamiltonian 行列は

$$\mathbf{H} = \mathbf{T} + \mathbf{V} = \begin{pmatrix} T_1 & 0\\ 0 & T_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_{11} & V_{12}\\ V_{21} & V_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_1 & 0\\ 0 & T_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_{11} - \mu_{11}\varepsilon(t) & V_{12}\\ V_{21} & V_{22} - \mu_{22}\varepsilon(t) \end{pmatrix}$$
(4)

で与えられる。すなわち、定義により dipole coupling はゼロであり、二つの diabatic PEC 間の 遷移は diabatic coupling のみにより起こる。波束の時間発展計算は split-operator 法により行 う:

$$\Psi(t + \Delta t) = \exp(-i\mathbf{V}\Delta t/2)\exp(-i\mathbf{T}\Delta t)\exp(-i\mathbf{V}\Delta t/2)\Psi(t) + O(\Delta t^{3})$$
(5)

ここでは、Broeckhove らによる diabatic PEC を直接用いる方法を用いた。時間発展の初期状態として、 V_{11} の振動基底状態の波動関数を V_{22} 上にそのまま置いたものを採用した。

図 2 に V_{11} および V_{22} 上の核間距離 35 bohr における cumulative flux および用いたパルス波形(T= 82682 a.u. (2 ps), E= 5.0×10⁻³ a.u.)を示す。同位体分子の逆向き配向のため、DSE による基底状態 PEC のシフト方向も逆向きとなる。その結果、¹³³CsI が V_{22} 上で直ちに解離する一方で ¹³⁵CsI がポテンシャル井戸に閉じ込められる状況が一時的に見られ、同位体分子間で解離に要する時間差が生じる。今回のケースでは、図のように時間差が 2 ピコ秒程度となり、時間的な wave packet の分離が達成されたといえる。



図 1 CsI 分子の(a) diabatic PEC (V₁₁ と V₂₂)と diabatic coupling (V₁₂); (b)diabatic 双極子 モーメント



図 2 (a)¹³³CsI(青)と¹³⁵CsI(赤)のポテ ンシャル V₁₁, V₂₂上の累積流束 J₁, J₂;(b)パルスパラメータが T= 82682 a.u. (2 ps), A=5.0 x 10⁻³ a.u.である ときの THz パルスの波形.後半の 2 ps は field free である。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 黒崎 譲,赤木 浩,横山 啓一,"Dynamic Stark 効果による同位体選択的光解離の量子制御",第 8回分子科学討論会(2014年9月,東広島).
- 2) Y. Kurosaki, H. Akagi, and K. Yokoyama, "Dynamic discrimination of oriented molecules controlled with the nonresonant dynamic Stark effect induced by a single-cycle THz pulse", Phys. Rev. A 90, 043407 (2014) (9 pages).

(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。

5.13.6 高強度レーザーによる pump-probe 実験に向けた数値計算

Numerical Simulation for the Pump-probe Experiment by 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:

目的

レーザー励起されたSiO2のVUVプローブによる光学特性の解析と励起電子の分布状態の解明。

意義

固体電子の制御に向けて、今中期では電子状態の光による観測を目指してきた。そのための光 源開発と同時並行で進めてきた第一原理電子ダイナミクスシミュレーションを統合することで、 励起電子の生成過程と最終的な電子励起状態の解明する手法的基盤を構築した。

(2) 利用内容·結果:

実験から図1のような Pump-Probe 反射率の時間依存性が得られることが確認できた。これ に対して図2のような第一原理シミュレーションを、強度を変えて行いパルス中での励起電子数 変化を明らかとし、当該実験が電子励起密度を反映していることを確認することができた。また、 Maxwell 方程式と第一原理計算を融合した計算から、図3のように励起電子は深さ10~100nm 付近までの浅い領域でのみ分布しており、実験はプラズマ薄膜の物性を観測していることが明ら かとなった。

当該実験の研究者から、高コストな第一原理シミュレーションに移る前の予備的な解析的計算 がしたいとの要請があった。そこで簡単な2バンドモデルでの電子励起確率と励起に於ける光子 数、電子-空孔対のブロッホ空間での分布が計算できる解析的式を導出した。この解析的式と第 一原理シミュレーションを比較することで励起確率のレーザー強度依存性はある程度信用でき るが、電子-空孔対のバンド上での分布は参考程度のものでしかないことが分かった(図4)。こ のことから実験手法を発展させ、電子状態をより詳細に調べられるようになる程、第一原理シミ ュレーションとの比較が必要であることが分かった。



図1 (左図)近赤外光 Pump-VUV 光 Probe による周波数分解反射率の時間変化。実測値と数 値処理した後のもの。(右図) Probe に利用した VUV 光の強度、位相、反射率の時間変化 の定型的例。



図 2 SiO2 のレーザーによる電子励起の第一原理計算。(a)外部電場(青破線)と分極を入れた 内部電場(赤)。(b) 励起電子数の時間変化。(c) 電子によるエネルギー吸収量の時間変化。



図 3 SiO2 表面に様々な強度のレーザーを照射した際のエネルギー分布図。横軸は表面からの 距離であり、縦軸は電子によるエネルギー吸収量である。



図 4 SiO2 をレーザー励起した時の電子-空孔のブリルアン空間での角度分布。横軸は偏光方向 からの角度、縦軸はモデル計算による電子励起確率(右軸)と第一原理計算による励起電 子数(左軸)。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

講演

- 1) 「時間依存動的 Franz-Keldysh 効果測定の理論及び第一原理計算」応用物理学会秋季学術 講演会 分科内招待講演.
- 2) 「レーザー加工における初期過程の第一原理的解析」応用物理学会秋季学術講演会.
- 3) 「THz 電場誘起ゼナートンネリングがもたらす発光現象」応用物理学会秋季学術講演会.
- 4) 「時間分解反射率の振動から探る高分子のフェムト秒レーザーアブレーション」日本物理学 会 秋季大会.
- 5) 「レーザーによる固体電子励起過程のための Keldysh 理論の再構築」応用物理学会春季学術講演会.
- 6) 「第一原理計算によるレーザー損傷閾値及び深さ解析」応用物理学会春季学術講演会.
- 7) 「時間分解反射率の振動から探る高分子のフェムト秒レーザーアブレーションにおける非 熱効果の研究」応用物理学会春季学術講演会.
- 8) 「フェムト秒時間分解動的 Franz-Keldysh 効果」秋季物理学会.
- 9) 「THz 光電場による動的フランツケルディシュ効果の時間分解測定」秋季物理学会.
- 10) 「Time-Resolved Observation of Dynamical Franz-Keldysh Effect under Coherent Multi-Cycle Terahertz Pulses」応用物理学会秋季学術講演会.
- 11) 「電子と光の第一原理計算」光量子科学研究センターセミナー.

(4) 今後の利用予定:

- 1. Siのレーザー加工の初期過程としての励起過程シミュレーションの波長依存性。
- 2. レーザー加工分子動力学計算に向けた有限温度ポテンシャル作成。
- 3. 2015 年度に開発した解析的理論を第一原理計算と比較し、信頼性を詳細に調べる。またこ れを利用した簡易型電子・光相互作用プログラムを作成することでレーザー加工シミュレー ションの計算量を低減させたパッケージを提案する。

5.13.7 レーザーを用いたプロトン生成の PIC シミュレーション

PIC Simulation of Proton Acceleration by a Laser Pulse

守田 利昌

レーザー駆動粒子線研究グループ

(1) 利用目的:

レーザーによる陽子発生において、効率的に高エネルギー陽子を生成するための条件をシミュ 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。昨年度までの研究で はディスク(円盤)ターゲットを使用したが、本年度は実機製作の観点からフォイル(薄膜)タ ーゲットを用いた研究を行なった。そして、次の各検討を実施した。

a. J-KAREN を用いて行なわれた実験のシミュレーションを実施

b. 次期レーザー(J-KAREN-P)を用いた場合の解析(ターゲットはaと同じ)

c. J-KAREN-Pを用い、ターゲット厚を薄くした場合の解析

ターゲット形状は全てフォイル(薄膜)である。aは、実験におけるイオン加速過程を計算で 詳細に示すことにより、実験結果の理解を深めるとともに、シミュレーション結果と実験結果の 比較を通じ、その精度の検証を行なうことが目的である。bにおいては、現在、関西光科学研究 所に構築中の新レーザーシステム(J-KAREN-P)を用い、同様の実験を行なった場合のシミュ レーションによる予測結果を示す。cでは、より高エネルギーな陽子が得られるように、ターゲ ット厚を薄くした場合の解析を行ない、J-KAREN-Pとアルミのフォイルターゲットで生成可能 と考えられる陽子のエネルギーを示す。シミュレーション手法には、PIC 法を用いた。ここで は、各ケースの2次元解析の結果を示す。

(2) 利用内容•結果:

a. J-KAREN 実験の解析

計算条件は、実験で用いられた条件である。それは、 J-KAREN レーザー(出力=196TW、強度=2×10²¹W/cm²、 エネルギー=7.5J)を 0.8µm 厚アルミフォイルに 45°入射 である(図1)。このとき非常に薄い鉄の層がアルミターゲッ トの表面に付着している。図2は、計算で得られたレーザー 照射後のアルミイオン、陽子(水素イオン)、鉄イオンの分布 を示している。陽子はそのエネルギー値で色分けされており、 赤い部分は高エネルギーであることを示している。その部分



図1 初期状態

の陽子の進行方向は、ターゲット垂直方向からレーザー進行方向に 12° 傾いている。計算で得 られた陽子エネルギー=73MeV、鉄イオンエネルギー=24MeV であり、実験での測定値はそれぞ れ 40MeV、16MeV であった。従来の計算結果から、2D 計算でのイオンエネルギーは、3D 計 算の約 1.5 倍程度になることが分かっている。よって、3D 計算では陽子エネルギー =73/1.5=49MeV、鉄イオンエネルギー =24/1.5=16MeVと推定され、実験値と 良く一致する。図 3 は、レーザー照射 後のアルミ薄膜の様子を示している。赤 色部分は比較的に高い密度を保ってい る部分である。レーザー照射部分におい ても、初期密度に近い密度のアルミが存 在していることが分かる。



図 2 J-KAREN 実験解析 図 3 アルミ薄膜の様子 (a ケース)

b. J-KAREN-P を用いた場合

新 レーザーシステムである J-KAREN-P(出力=783TW、強度=1 ×10²²W/cm²、エネルギー=25J)を使 用した場合の計算を行なった。他の条件 は、a ケースと同じである。図4はレー ザー照射後の各イオンの分布を示して いる。a ケースに比べ各イオンは、より 広い空間に分布し、そのエネルギー値は 高くなっている。また生成陽子の進行方 向の角度も大きくなっている。このと き、計算で得られた陽子エネルギー





=156MeV である。a ケースの結果(実験値/計算値)から、実験では 156×40/73=85MeV の陽 子が得られると予測される。図 5 はレーザー照射後のアルミ薄膜の様子を示している。a ケース の結果(図 3)に比べ、レーザー照射部分でのアルミ密度は低く、初期密度に近い値を保ってい る部分(赤色部分)が無いことが分かる。

c. ターゲット厚を薄くした場合

より高エネルギーな陽子を得る目的 でターゲット厚を薄くし、0.025µm厚 とした。また、鉄の層はなくした。他の 条件は b ケースと同じである。このと き計算で得られた陽子のエネルギーは、 256MeV である。ターゲット厚を薄く することで、生成陽子のエネルギーは、 b ケースから 100MeV 増加している。 図 6 にレーザー照射後の各イオンの分 布を示す。各イオンは他のケースに比べ



図 6 膜厚を薄くした結果 図 7 アルミ薄膜の様子 (c ケース)

空間広がりが大きくなっている。また陽子の生成方向角度も増加している。図7はアルミ薄膜の 様子を示している。レーザー照射部分のアルミは吹き飛ばされていることが分かる。ここで用い たターゲットは、極めて薄く実際にそれを作成することは困難であると考えられるが、本ケース ではターゲットの条件を変えることで、得られる生成陽子のエネルギーが大きく増加することを 示すために実施した。また、本ケースは、最適なターゲットを採用することで、J-KAREN-Pを 用い 200MeV 級の陽子を得ることが可能であることを示している。

本研究により、PIC シミュレーションで良好な解が得られることが分かった。また、実験解析 を実施し、その加速過程における現象を詳細に示し理解した。また、新レーザーシステム (J-KAREN-P) と従来のターゲットを用いた場合の予測結果と、J-KAREN-P とアルミのター ゲットで得られると考えられる陽子エネルギーの値を示した。本年度においては、実験で用いら れた条件としたためアルミのターゲットとした。しかし、高エネルギー陽子を得るためには、昨 年度の研究で示したように、ターゲットに CH₂, H₂O 等の水素を多く含む物質を用いる方が有利 である。これらのターゲットでは、c ケースよりさらに高エネルギーな陽子ビームが得られる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

発表

1) T. Morita, "Proton and carbon layer formation of a CH2 target in laser ion acceleration", 第 15 回光量子科学研究シンポジウム, 2014 年 11 月 13-14 日、関西光科学研究所.

論文

2) T. Morita," Approach towards quasi-monoenergetic laser ion acceleration with doped target", Physics of Plasmas 21, 053104 (2014).

(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研究を進め る。今年度は 2D 計算の結果を示したが、2D 計算では生成イオンのエネルギーが高くなる。よ って、3D 計算での検討を実施する必要がある。3D 計算では次元が増えることにより、空間領域 と用いる粒子数が著しく増加する。それにともない、必要とする計算機資源は増大し、高い計算 能力を有する大型計算機が必要となる。また、ターゲットには CH₂, H₂O 等から成るフォイルを 用いた検討も実施する予定である。これらの物質では、ターゲットが激しいクーロン爆発を起こ し広い空間に分布する。そのため、より大きな空間領域を必要とする現象の解析となり、高い計 算能力を有する計算機が必要である。また、多くの計算時間も必要となって来る。よって、今後 も大型計算機を用いて大規模計算を実施して行く予定である。

5.13.8 デルブリュック散乱の精密な計算開発

Development of a Detailed Calculation of the Delbruck Scattering

James Koga レーザー電子加速研究グループ

(1) 利用目的:

The polarization of vacuum due to the formation of virtual electron-positron pairs generated in the scattering of γ -rays from the Coulomb field of a nucleus is a fundamental nonlinear quantum electrodynamical process. The theoretical calculations of this scattering, Delbrück scattering, exist in tabular form. Since the data is not detailed enough for comparison with future high precision experiments with polarized photons, we have begun to develop our own code to calculate Delbrück scattering. Since the scattering of γ -rays from the Coulomb field of a nucleus involves four coherently added processes, which include Delbrück scattering as one, it is our goal to find regimes in photon scattering angle and energy where the Delbrück scattering is dominant using our detailed calculations.

(2) 利用内容•結果:

Figure 1 shows an image of the scattering of a γ -ray by an atom. The γ -ray can be scattered by the Coulomb field of the nucleus of the atom due to the formation of virtual electron-positron (e⁻-e⁺) pairs from the vacuum along with other scattering processes [1]. The scattering cross-section can be calculated via quantum electrodynamics. The resulting differential cross section is [1]:

g. 1 Scattering of a γ-ray by an atom partially due to virtual e⁻-e⁺ pairs.

$$d\sigma_{++} = (Z\alpha)^4 r_0^2 \left| a_{++} \right|^2 d\Omega$$

where the subscripts ++/+- refer to the initial and final polarization of the photon having circular polarization which remains unchanged or flips, respectively, Z is the charge of the nucleus, α is the fine structure constant, r_0 is the classical electron radius, and $d\Omega$ is the

solid angle. The amplitudes $a_{_{++}}$ have both imaginary and real parts which are [1]:

$$\operatorname{Im}_{\substack{a_{++}\\+-}}(d,p) = \frac{1}{\pi p} \int_{1}^{k^{2}/4} dy \int_{x_{-}}^{x^{+}} dx \int_{0}^{b(y)} dz A_{\pm}(x,y,z;d,p)$$

and

$$\operatorname{Re}_{\substack{++\\+-}} a_{\pm}(d,p) = C_{\pm}(d) + \frac{2p^2}{\pi} P \int_{\alpha(d)}^{\infty} \frac{dp'}{p'} \frac{D_{\pm}(p',d)}{p'^2 - p^2}$$

with

$$D_{\pm}(d,p) = \frac{1}{\pi p} \int_{1}^{k^{2}/4} dy \int_{x_{-}}^{x^{+}} dx \int_{0}^{b(y)} dz \, \varepsilon(\bar{l}) A_{\pm}(x,y,z;d,p)$$

where the notation is described in [1] and the references cited within it. It can be seen that the real and imaginary parts are integrals of three and four dimensions, respectively. They can be integrated using Monte Carlo techniques from the library of CUBA routines, which are parallelized [2,3]. The difficulty with these integrals is that there are regions where the integrands are numerically unstable requiring the setting of cut-offs and transformation of coordinates [1]. We have begun developing the code and are in the processing of testing it by comparing with previously published results [4].

- [1] B. De Tollis and L. Luminari, Il Nuovo Cimento 81, 633 (1984).
- [2] T. Hahn, Computer Physics Communications 176, 712 (2007).
- [3] "Cuba a library for multidimensional numerical integration", http://www.feynarts.de/cuba/
- [4] H. Falkenberg, A. Hünger, P. Rullhusen, M. Schumacher, A. Milstein, and K. Mork, Atomic Data and Nuclear Data Tables 50, 1 (1992).

(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:

It is our plan to finish the detailed calculation of Delbrück scattering and find the regimes where the Delbrück scattering has the dominant contribution to the γ -ray scattering. The described method of integration will be compared with published results. We will investigate other integral representations.

5.13.9 物質における構造形成シミュレーションプログラム

Simulation Program for Structure Formation in Materials

横田 光史

多重自由度相関研究グループ

(1) 利用目的:

物質における構造形成は、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。構造形成過程の詳細は複 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、形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。

磁性体における磁区構造形成は、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、磁性体における構造の乱れの影響を把握すること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困難なので、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。しかし、3次元系では、計算量が膨大になるために、今までに作成したプログラム (MADONA)の並列化が必要となる。

また、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 とを指摘し、2次元において調べてきた。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た。

(2) 利用内容·結果:

薄膜磁性体における磁区構造形成については、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。磁区パターンの他、磁化分布、ヒステリシス曲線、構造因 子などを調べた。交換相互作用にランダムネスを導入したモデルは、計算時間が多くかかり、今 までは、2次元周期境界条件の系で 64x64 のサイズを扱うのが現実的に限界であった。プログラ ム (MADONA)を並列化することにより、計算時間が大幅に短縮でき、128x128の系であって も容易に計算可能となった。図1にランダムネスによる磁区パターンの変化を示す。



図1 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)

3次元系で、xy方向周期境界条件、z方向自由境界条件の系は、表面と内部の磁区構造を調べるのに使うことができる。今までは、計算時間の制約で 32×32×5 程度の大きさの系しか扱うことができなかったが、プログラムの並列化によって 32×32×65 程度の系を容易に扱うことができるようになった。磁区パターンの例を図2に示す。



図 2 磁性体の厚みが Lz=65 の場合の磁区構造(δ=0.5)

また、3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2流体モデルとそれを近似して得られる3次元に拡張したバーガーズ類似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た。図3に3次元ネットワーク構造の例を示す。



図3 2流体モデル(上)とバーガーズ類似方程式(下)におけるネットワークパターン。 右の図は断面図。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 横田光史、「物質における 3 次元ネットワーク構造生成」、日本物理学会第 70 回年次大会 (2015.3)(東京).
- 2) T. Yokota, "Effects of exchange randomness on two-dimensional magnetic domain pattern formation", Journal of Magnetism and Magnetic Materials 385, pp.119-123 (2015).

(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るが、プログラムを並列化したことによって、より 大きな系での計算が可能となった。厚みを大きくしていったときの定性的な変化を調べていくな どするために、大型計算機システムの利用を継続していきたい。

5.13.10 中性子散乱データの 3 次元画像化プログラムの機能拡張 Extension of 3D Visualization Program for Neutron Diffraction Data

社本 真一、伊巻 正+1、大下 英敏*1、中谷 健+2、樹神 克明+3、大友 季哉*1

強相関超分子研究グループ 量子ビーム応用研究センター

+1 情報システム管理室 システム計算科学センター

*1 高エネルギー加速器研究機構

+2 J-PARC センター

+3 ナノ構造制御研究グループ 量子ビーム応用研究センター

(1) 利用目的:

量子ビーム応用研究部門量子ビーム応用研究センター強相関超分子研究グループでは、量子 ビームを用いた様々な技術開発を行っており、その一部として中性子回折を用いたトモグラフィ ーの開発及び整備を進めてきた。本件開発では、コンピュータ断層撮影(CT)法を応用して、 中性子散乱データの3次元画像化を世界で初めて実現することを目標とした。これにより、軽元 素を含む構造、磁気モーメント、3次元的な磁区などの新しい構造情報の3次元画像化が可能と なる。

(2) 利用内容·結果:

中性子散乱データの画像化プログラム Neudift ver.1 の機能拡張を行い、イベントレコーディ ングにより、連続スキャンで取得した散乱強度を分割したデータに対応するとともに新たなアル ゴリズムによるデータ補正や計測試料の中性子線吸収に対応した画像のピクセル値の補正とい った種々の補正機能や計測データのビットマップ画像出力機能などの追加を行った。さらに、機 能拡張を行った Neudift ver.2 を使用し3次元トモグラフィーによる CT 画像を作成した。対象 計算機は、BX900 であり、OS は Linux である。

その結果、中性子散乱データの画像化プログラム Neudift ver.1 の機能拡張にともない、イベ ントレコーディングによる連続スキャンで取得した中性子散乱データに対応できるようになっ た。これによりデータのデータ取得効率は約4倍弱に上昇した。また、新たなアルゴリズムによ るデータ補正処理プログラムをプラグインとして開発し追加した。測定例を以下に示す。図1の ようなテスト試料を製作し、予め図2のように中性子ラジオグラフィーによる画像をJRR-3に て取得した。このテスト試料を用いて、J-PARC センターの NOVA(BL21)にて専用ゴニオを設 置して測定を行った。15度づつ回転させ、得られた2次元画像からトモグラフィー(ソフト: NIPPON)により3D 画像化した結果、図3に示すような画像が得られた。これは吸収補正のな い画像である。これに比べて、簡単な吸収補正を行った後には図4のように左右で像をより均一 に表示できるようになった。但し、この試料では吸収が大きく、まだ完全な画像とはなっていない。今後計測試料の中性子線吸収を考慮した画像のピクセル値を補正する処理やビットマップ画像ファイルの出力機能などを追加し、これにより CT 画像の再計算の精度が向上させていきたい。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

国際会議ポスター発表

 "Neutron diffraction imaging at NOVA (J-PARC), HRPD, RESA, and TNRF (JRR-3)", Shin-ichi Shamoto, Tadashi Imaki, Hidetoshi Oshita, Takeshi Nakatani, Katsuaki Kodama, Naokatsu Kaneko, Hiroshi Suzuki, Hiroshi Iikura, Atsushi Moriai, Masahito Matsubayashi, Naoki Igawa, Kenji Yamaguchi, Kensaku Sakamoto, Kentaro Suzuya, Toshiya Otomo, ICANS XXI (DAA-PO3) 29 Sep - 3 Oct 2014 Mito, Ibaraki, Japan (Ibaraki Prefectural Culture Center).

国際会議プロシーディングス発表

2) "2D Neutron Diffraction Imaging on an Ammonite", Shin-ichi Shamoto, Katsuaki Kodama, Tadashi Imaki, Takeshi Nakatani, Hidetoshi Oshita, Naokatsu Kaneko, Kenji Masuko, Kensaku Sakamoto, Kenji Yamaguchi, Kentaro Suzuya, Toshiya Otomo, JPS Conf. Proc. 1, 014011 (2014) Proceedings of the 12th Asia Pacific Physics Conference, 10.7566/JPSCP.1.014011

(4) 今後の利用予定:

散乱イメージングで精度の高い画像が得られるようになってきたので、今後も改良を進めつ つ、NOVA@J-PARC/MLF での世界最高の中性子散乱強度を利用して、化石などで学術的にも意 味のある研究を専門家との共同研究として一緒に行っていきたい。





- 図 1 散乱イメージング用テスト試料。SUS430円盤を銅ブロックが覆う構造を持つ[2]。
- 図 2 散乱イメージング用テスト試料 の TNRF@JRR-3 での 3D-CT 画 像[2]。

JAEA-Review 2015-028



図3 吸収補正前の中性子散乱データによる 3D-CT 画像。下部の円盤はテスト試料固定用のアルミ台の一部。



図 4 吸収補正後の中性子散乱データによる 3D-CT 画像。

5.14 高速炉研究開発部門 次世代高速炉サイクル研究開発センター Sector of Fast Reactor Research and Development Advanced Fast Reactor Cycle System Research and Development Center

5.14.1 燃料集合体熱流動詳細解析コード SPIRAL の開発整備 Development of Numerical Simulation Code SPIRAL for Thermal Hydraulic Analysis in Fast Reactor Fuel Assemblies

堂田 哲広、菊地 紀宏+1、今井 康友+1 システム統合グループ、+1 流動・系統解析グループ

(1) 利用目的:

高速炉の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、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 することが安全性強化の観点からも必須となっている。そこで、高速炉計算工学技術開発部では 燃料集合体熱流動詳細解析コード SPIRAL の整備を進めており、基本体系およびピンバンドル 体系での既往試験等を対象とした検証解析を実施している。本報では、燃料集合体設計において 重要なパラメータとなる集合体中心部と外周部との通過流量比率(周辺流れ効果係数)を算出す るために必要な集合体内の速度場に着目し、比較的小規模の燃料集合体体系(37 本ピン)から 大規模体系(169 本ピン)までの規模の異なる既往水流動試験を対象として SPIRAL による解 析を実施して、集合体規模に違いによる速度場への影響を把握することと、SPIRAL による得ら れる集合体内流速分布の妥当性を確認することを目的とした。

(2)利用内容·結果:

SPIRAL 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している^[1]。現在、基本検証および妥当性 確認を進めているところであり^[2]、平成 26 年度は集合体規模による流動特性の影響を評価する ため、169 本/91 本/37 本ピン燃料集合体を対象とした解析を実施した。

図1に代表例として37本ピン燃料集合体解析体系を示す。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、P/D=1.21、H/D=47.23)を有する169本/91本/37本ピン燃料集合体で ある。要素総数は集合体規模に応じて約40万から約10万要素であり、水平断面あたりではそ れぞれ約5万から約1万要素となる。境界条件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。作動流体はナトリウムであり、集合体流入流速 w_{in} =6.68m/s、等価直径 D_{eq} =3.22mm から算出されるレイノルズ数は Re=75,000 程度となる。 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 モデルをそれぞれ採用した。

図2および図3に、解析結果の一例として最外層サブチャンネルにおける主流方向流速および 水平方向流速の周方向分布をそれぞれ示す。図2に示す主流方向流速の分布形状に着目すると、 小規模体系(37本)の分布は他の体系に比べて差異が生じている。また、流速のピーク位置は 集合体規模によらず一致しており、ワイヤ位相 φ=0°に対して、主流方向流速は φ=270°付近で、 水平方向流速は φ=120°付近で、それぞれ流速のピークが発生する。ただし、主流方向平均流速 の絶対値は、集合体の大規模化に伴い、ピーク値が上昇する傾向がある。図3に示す水平方向平 均流速の周方向分布については、集合体規模によらず、ピーク値は同レベルの値となる結果が得 られた。

また、解析結果を用いて周辺流れ効果係数を評価すると、169本/91本/37本ピン燃料集合体それぞれ、1.147/1.196/1.297となり、集合体の大規模化に伴い、周辺流れ効果係数が減少することが分かった。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 大島宏之、今井康友、「高速炉燃料集合体熱流動解析手法の開発と適用」、日本機械学会 2010 年度年次大会講演論文集、Vol. III、名古屋、2010、pp. 153-154.
- H. Ohshima, Y. Imai, "Development of Thermal-hydraulic Analysis Program for Wire-wrapped Fuel Pin Bundle of Sodium-cooled Fast Reactor", Proc. of ICONE-23, Chiba, 2015, ICONE23-1988. (DVD-ROM)
- 3) 檜山智之、西村正弘、上出英樹、大島宏之、長澤一嘉、今井康友、「高速炉燃料集合体内ワ イヤラッパピン周りの PIV 詳細速度場」、日本機械学会 2014 年度茨城講演会講演論文集、 日立、2014、pp. 201-202.
- 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", Proc. of ICONE-20, Anaheim, 2012, ICONE20-POWER2012-54404. (DVD-ROM)

(4) 今後の利用予定:

今後、種々の模擬燃料集合体試験による試験解析を継続的に実施して、SPIRALの検証および 妥当性確認を深める予定である。尚、今年度は、集合体体系としては3本ピンと非常に小さな体 系であるが、3本ピンバンドル水流動試験で得られた PIV(粒子画像計測法)による速度計測結 果^[3,4]との比較により、SPIRALの検証を別途行った。さらに、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等の大規模解析を実施する予定である。また、SPIRALで 得られた解析結果は、別途整備を進めている燃料集合体サブチャンネル解析コード ASFRE の高 度化作業において活用していく。

JAEA-Review 2015-028



図1 解析体系(37本ピン燃料集合体)



図2 最外層サブチャンネルにおける主流方向流速の分布



図3 最外層サブチャンネルにおける水平方向流速の分布

5.14.2 燃料集合体熱流動詳細解析コード SPIRAL による3本ピン模擬燃料集合体水流 動試験解析

Numerical Analysis of 3-pin Bundle Water Model Test using Single-phase Thermal-hydraulic Analysis Code in An Irregular Rod Array Layout (SPIRAL)

菊地 紀宏、今井 康友

高速炉計算工学技術開発部 流動・系統解析グループ

(1)利用目的:

高速炉の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、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 することが安全性強化の観点からも必須となっている。そこで、高速炉計算工学技術開発部では 燃料集合体熱流動詳細解析コード SPIRAL の整備を進めており、基本体系およびピンバンドル 体系での既往試験等を対象とした検証解析を実施している。これまで、ワイヤスペーサ型燃料集 合体内の詳細な速度分布の取得は困難であったが、屈折率調整法と PIV(粒子画像計測法)を用 いた3本ピン模擬燃料集合体水流動試験(3本ピン水試験)において、詳細な速度分布データを 取得することができた。平成26年度は、SPIRALの集合体内速度場の再現性に関する妥当性確 認と、燃料ピンまわりの流動現象の物理的特性について把握することを目的として、3本ピン水 試験を対象とした検証解析を実施した。

(2)利用内容·結果:

SPIRAL 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 している^[1]。現在、基本検証および妥当性確認を すすめているところであり^[2]、平成26年度は3本 ピン水試験^[3,4]を対象とした解析を実施して、ワイ ヤスペーサ型燃料集合体内の燃料ピンまわりの速 度場の再現性に関する妥当性確認を行うととも に、燃料ピン周りの局所的な流動現象について調 べた。

図1に3本ピン水試験の試験体の一部を示す。 試験体は、ワイヤスペーサによって影響を受ける



図1 試験体系(3本模擬燃料集合体)

燃料集合体内の燃料ピンで囲まれる狭い流路(サブチャンネル)内の流速分布を詳細に調べるため、計測性の観点から最も単純な体系である 3 本の模擬燃料ピンで構成される体系となっている。作動流体と同じ屈折率となる樹脂材料で模擬燃料ピンを製作して屈折率の調整を図った上で、粒子画像計測法(PIV: Particle Image Velocimetry)により速度場を計測した。作動流体である水は最下部の流入口から多孔板によって整流され一定流速で模擬燃料ピンに対し平行に

流入する。図 2 に解析体系および計測位置を示す。ワイヤスペーサ 2 巻きピッチ体系(上流 1 巻き分の区間に周期境界を適用して流れを発達させ、下流 1 巻き分の区間で得られる解析結果を 実験結果と比較する)とする本解析手法の妥当性を確認するため、試験体と同体系の4巻きピッ チ体系で試験体入口(z/H=0.0)に一様流速を与えた解析を実施して計測開始位置(z/H=2.0)で の流れの状態を比較した。4 巻きピッチ体系の解析において計測開始位置(z/H=2.0)で流れは 発達しており、周期境界条件を用いた本解析モデルの適用性を確認した。なお、壁境界条件は Non-Slip 条件を課した上で壁関数を適用した。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 モデルをそれぞれ採用した [1.2]。



図2 解析体系(2巻き体系および4巻き体系)およびメッシュ水平断面図



(a)

(b)

図 3 PIV による計測結果と SPIRAL 解析結果との(a)軸方向流速および
 (b)横方向流速の水平方向分布の比較(z/H=2.60、y=11mm)

図 3(a)および(b)に SPIRAL による解析結果と試験結果の比較の一例として、z/H=2.60、 y=11mm における軸方向流速 V_w/V_mおよび横方向流速 V_x/V_mの比較をそれぞれ示す。なお、そ れぞれの流速は軸方向平均流速 V_mで規格化しており、誤差棒によって各計測点での流速の変動 強度を示した。図 3(a)の軸方向流速分布において、·x 側(図中左側)の領域では流動抵抗となる ワイヤスペーサがないためほぼ一定流速となっているのに対し、+x 側(図中右側)の領域では ワイヤスペーサが存在することによって急激に流速が低下している。一方、図 3(b)の横方向流速 分布では、ワイヤスペーサの効果によって模擬燃料ピンまわりに生じる旋回流の影響で x=0 付 近では高流速となるが、+x 側ではワイヤスペーサが存在することによって流れが阻害されて流 速が低下している。PIV による測定結果との比較から、SPIRAL による解析結果は水平方向分布 の傾向を誤差棒の範囲内で良く再現していることがわかる。その他の計測位置においても同様の 結果が得られた。これらのことから、SPIRAL コードはワイヤスペーサ型燃料集合体内の燃料ピ ンまわりの流動場評価に適用できることを確認した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 大島宏之、今井康友、「高速炉燃料集合体熱流動解析手法の開発と適用」、日本機械学会 2010 年度年次大会講演論文集、Vol. III、名古屋、2010、pp. 153-154.
- 2) H. Ohshima, Y. Imai, "Development of Thermal-hydraulic Analysis Program for Wire-wrapped Fuel Pin Bundle of Sodium-cooled Fast Reactor", Proc. of ICONE-23, Chiba, 2015, ICONE23-1988. (DVD-ROM)
- 3) 檜山智之、西村正弘、上出英樹、大島宏之、長澤一嘉、今井康友、「高速炉燃料集合体内ワ イヤラッパピン周りの PIV 詳細速度場」、日本機械学会 2014 年度茨城講演会講演論文集、 日立、2014、pp. 201-202.
- 4) 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", Proc. of ICONE-20, Anaheim, 2012, ICONE20-POWER2012-54404. (DVD-ROM)

(4) 今後の利用予定:

今後、ナトリウムを作動流体とする 37 本ピンバンドル体系での集合体試験(PLANDTL 試験 装置)を対象とした熱流動解析を実施して集合体内温度場の再現性に関して妥当性を確認する 他、複数の模擬燃料集合体試験を対象に試験解析を実施して、SPIRAL の検証を深める予定であ る。さらに、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等の大規模解 析を実施する予定である。また、SPIRAL で得られた解析結果は、別途整備を進めている燃料集 合体サブチャンネル解析コード ASFRE の高度化作業において活用していく。

5.14.3 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検証

V&V of Integrated Numerical Analysis Model for Unsteady Phenomena in Upper Plenum and Hot-leg Piping System of JSFR

田中 正暁、高屋 茂 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、既往検討において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た 統合解析モデルを開発し、整備してきた。

平成26年度は、これまでに開発した2つの統合解析モデル(解析メッシュ)を用いて非定常 流動解析を実施した後、それらの解析結果を比較して適正な解析メッシュを選定した。選定され た解析メッシュによる非定常流動解析から得られた圧力変動データを用いて HL 配管の構造解 析(時刻歴応答解析)を実施し、構造解析モデルの検討を実施した。さらに、解析コードの検証 の一環として格子収束性評価プログラムの整備を実施した。

(2) 利用内容•結果:

①解析メッシュの選定

メッシュ数の異なる 2 つの解析メッシュを用いて非定常流動解析を実施した。1 つは図 1(a)(b) の総メッシュ数約 1,100 万のフルセクタモデル(詳細メッシュ)である。もう一方は、詳細メッ シュの HL 配管部円断面を径方向に 20 メッシュから 16 メッシュまで合計 8 メッシュ分削減し、 さらに HL 配管壁面近傍の不連続面の一部を解消した総メッシュ数約 900 万のモデルである(粗 メッシュ)。ただし、壁第一格子幅は両メッシュ共通である。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 Um 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。使用した CFD コードは STAR-CD Ver.4.12 である。上記の条件で 5.0 秒 までの過渡計算を実施した。

代表的な時間における瞬時の合成流速分布を図 2(a)(b)に示す。図 2(a)の詳細メッシュの結果

の方が逆流領域が広い結果となっていることが分かる。ショートエルボ出ロ近傍における、時間 平均軸方向流速分布を別途算出したところ、図2と同様の傾向が確認され詳細メッシュは HL 配 管単体の既往知見とも概ね整合していることが確認された。ただし、現状では過渡解析データの 蓄積が必ずしも十分であるとは言い難い。そのため、今後さらにデータを蓄積して検証していく 必要がある。

②HL 配管の構造解析

HL 配管部とその外管部をモデル化し、①の非定常流動解析から得られた 3.0 秒分(データ数 3,000)の圧力変動データを用いて構造解析(時刻歴応答解析)を実施した。解析には図 3 に示 す総メッシュ数約 63,000 の解析メッシュを使用した。メッシュはシェル要素にて開発し、板厚 は 15.9mm とした。構造材は 550℃での改良 9Cr-1Mo 鋼とした。拘束条件に関しては、HL 配 管部出口と外管部の上端の節点に対して完全拘束条件を設定した。使用した構造解析コードは Abaqus Ver.6.13 である。

図4に瞬時のミーゼス応力の分布図を示す。ベルマウス部及びショートエルボ部下流の腹側で 比較的高い応力が発生していることが確認できる。他の時間点での瞬時値も別途確認したとこ ろ、概ね同様の傾向を示している。HL 配管単体の既往知見から、ショートエルボの横腹部に対 して高い応力が発生することが懸念されているが、本解析結果からはそのような応力は確認され なかった。その一因として、HL 配管出口と外管の上端の節点に完全拘束条件を設定したことが 考えられる。今後、適正な拘束条件を検討して解析を実施していくことが必要となる。

③GCI 評価プログラムの整備

解析コードの検証(V&V: Verification & Validation)においては、解析結果の不確かさを定 量的に評価することが必要となっている。そこで、平成26年度ソフトウェア開発整備作業とし て、格子収束性(GCI: Grid Convergence Index)評価について、ASMEガイドラインで提案 されている評価手法をはじめとする複数の既存手法に加え、著者らが構築した修正手法((3)-2)) を、一つのプログラムとして整備、構築した。これにより、GCI評価に関する一連の作業効率が 飛躍的に向上した。



(a)外観図(b)内部の配管配置図図1非定常流動解析のメッシュ配置図(総メッシュ数約1,100万)



(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 田中、高屋、藤崎、「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」、 日本機械学会 2014 茨城講演会、日立市、2014、(CD-ROM)(2014 年 9 月).
- 2) M. Tanaka, "Application of Grid Convergence Index Estimation for Uncertainty Quantification in V&V of Multidimensional Thermal-Hydraulic Simulation", ASME 2015 V&V Symposium, VVS2015-8037, May 13-15, Las Vegas, Nevada, USA (2015).

(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非定常流動解析を 継続し、過渡解析データを蓄積すると共に詳細な分析を実施していく。加えて、構造解析モデル の整備を実施し、HL 配管の流動励起振動解析評価に向け、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。

5.14.4 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 流動・系統解析グループ

(1)利用目的:

流動・系統解析グループでは、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数値解析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直接解析できる手法の構築を目指し、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: <u>NumER</u>ical <u>Gas Entrainment AnaLysis</u>)の開発・ 整備を行った¹⁾。

(2) 利用内容·結果:

本研究では、高速炉上部プレナム部におけるガス巻込み現象評価に対する 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) にて実施している。

高速炉上部プレナムにおけるガス巻込み現象は、自由液面液位やディッププレート(D/P)間隙流速、配管群を横切る流速などの影響を受けるため、NERGAL コードの検証の一環として、液位や流速を対象としたパラメータサーベイにより、ガス巻込み発生挙動について定性的・定量的な評価を進めている。本件で実施する解析条件を Table1 に示す。試験において定格条件ではガス巻込みは発生せず、低液位、入口流速 5 倍と D/P 間隙流速 4 倍とした条件でガス巻込みが発生している。それらの条件下での数値解析は昨年度までに実施済みであり、ガス巻込み発生位置などの傾向を再現できることを確認している。本件ではパラメータサーベイとして D/P 間隙流速を 1.5 倍(実機流速の約 6 倍)とした条件で数値解析を実施し、D/P 間隙流速の影響について検討を行う。なお、入口条件及び液位はガス巻込み条件と同様である。

Fig.2 に、解析体系内の時間平均流線を示す。図中(a)は実機流速の約4倍(ガス巻込み条件)、 (b)は約6倍(本件)の計算結果について、10秒間を時間平均した流れ場を流線で可視化ものであ り、流線の色は流速の大きさを表す。D/P 間隙流速が増加したことにより、配管群内側を通って 出口部に至る流量が減少している。また、配管群とR/Vの間の流れに関して、H/L 周辺で D/P 間 隙の下降流速が増加したことによって H/L 後方の流れ場が変化し、顕著な渦流れが発生している。 Fig.3 に、ガス巻込み発生位置を示す。図中(a)は実機流速の約4倍(ガス巻込み条件)、(b)は約6 倍(本件)の計算結果である。ガス巻込み発生は、VOF 値0.99の等数値面を目安に目視で観察 し、気相が液面から明らかに巻込まれた場合のみガス巻込みと判定、表示の赤点はD/P まで到達 した気泡、黄の点は液中に巻込まれたが再浮上した気泡の液面での巻き込み位置である。また、 観察時間は(a)が70秒間、(b)が40秒間である。(a)では、C/L1-H/L間、H/L-R/V間で多くのガス 巻込みが発生しているが、(b)ではH/L-R/V間の後方側に集中する傾向が見られる。H/L後方-R/V 間におけるガス巻込みは、H/L-R/Vを通過した水平流れがH/L壁面からの剥離渦を形成し、その 渦がD/P間隙への下降流速と干渉することによって誘起されるため、H/LやR/VのD/P間隙流 速が増大したことによって液面近傍への下降流速の干渉が強まり、H/L-R/V間の後方におけるガ ス巻込み発生頻度が増加したと考えられる。一方、C/L1-H/L間では、D/P間隙流速の増加によっ てC/L1からH/L側への流れがH/L下方へと潜り込む傾向が強くなり、H/L前方の液面近傍の流 れが減衰するため、液面における渦の発生が抑制されて発生頻度が減少したと考えられる。

以上の結果から、D/P 間隙流速が増大すると出口流量が減少することで横流れが減衰し、H/L 後方の R/V 側に顕著な渦流れが現れ、H/L 後方 R/V 側でガス巻込みの発生傾頻度が増加すること が分かった。高速炉上部プレナム内の流れ場は複雑であるため、主流(横流れ)と間隙流速の相 互作用について正確に解析し、ガス巻込みを誘起する渦の発生位置を精度良く評価することが重 要である。

Table 1 解析条件

	定格条件(試験)	ガス巻き条件 (試験、前回)	解析条件(今回)
液位	815 mm	$455 \mathrm{~mm}$	←
入口流速	実機流速一致条件 (0.0365 m/s)	実機流速の約 5 倍 (0.1852 m/s)	← (0.1852 m/s,一様)
D/P 間隙流速	実機流速一致条件	実機流速の約4倍	実機流速の約6倍



Fig.1 1/1.8 縮尺液面部分モデル水流動試験装置

JAEA-Review 2015-028



(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) K. Ito, T. Kunugi, S. Ohno, H. Kamide, H. Ohshima, "A high-precision calculation methods for interface normal and curvature on an unstructured grid", Journal of Computational Physics, Vol. 273, pp. 38-53, 2014.

(4) 今後の利用予定:

高精度数値解析手法を用いたガス巻込み現象評価の妥当性検討を進めるため、さらに広範囲の パラメータ領域において解析を行い、試験において観察されたガス巻込み挙動との比較を行うこ とを予定している。

5.14.5 高速炉蒸気発生器内ナトリウム-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、菊地 晋

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。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 26 年度は、 実機条件を模擬した液体 Na 中水蒸気噴出試験を SERAPHIM コードで解析し、実機条件に対す る適用性確認を目的とした。また、解析評価を効率的に進める上で計算の高速化が重要な課題と なっており、平成 26 年度はその一環として収束計算の反復回数低減を目的とした性能調査と計 算方法の改良を行った。SERAPHIM コードでは従来構造格子を用いてきたが、伝熱管等に対す る形状模擬性向上のため非構造格子化を完了しており、平成 26 年度は非構造格子化コードの調 査と高速化方策の策定まで実施した。

(2) 利用内容·結果:

解析で対象とした試験は、液体 Na で満たされた円筒容器を 120 度ずつ 3 つのセクタに仕切り 板で分割するとともに各セクタ内に複数の伝熱管を配置し、円筒容器中心に最も近い伝熱管の中 央から外側へ向かう方向に水平に高圧高温水蒸気を噴出させたものである。いずれのセクタ(ケ ース)でも実機 SG の温度・圧力条件が模擬されている。試験装置を模擬した解析体系及び解析 メッシュを図 1 のように設定した。メッシュ数削減のため、解析では 1 セクタの 1/2 領域を対象 とした。解析領域には内部構造物として注水管、ターゲット管、及びこれらを支持するバッフル 板が体系の上部と下部に存在する。解析領域は最初液体 Na で満たされ、注水管中央に設けた円 孔に相当する注水孔より水蒸気が水平方向に噴出する。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。

代表的なケースとして、水蒸気圧力 14.77MPa、水蒸気温度 387.81℃、注水孔径 5.8mm にお

ける解析結果を図2に示す。50ms間で平均した水平断面内の気相温度、気相流速、液滴速度の 分布を表示している。気相温度については、いずれのケースも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。注水孔正面のターゲット管周辺から後流側において Na と水の化学反応による高温領域が形成されている。高温化した気相は容器内壁に到達し、さらに 容器内壁に沿って周方向に分布する。気相流速の分布より、噴出孔前方には不足膨張領域が形成 され、超音速の状態となっていることが分かる。解析結果からターゲット管周辺の温度、流速、 液滴速度等を評価した結果、ウェステージの要因となるこれらのパラメータが高い場所と試験に おいてウェステージ率の高い場所が一致し、SERAPHIM コードはウェステージ環境を評価可能 であることを確認した。温度分布についても良好な再現性があるとの見通しを得ている。

上記の適用性確認に加え、計算高速化の一環として、速度及び圧力の収束計算の反復回数低減 を目的とした調査と計算方法の改良を行った。まず、毎時刻ステップでの反復計算回数を調査し た後、反復計算回数が多い時刻ステップを数点選び、解の残差の推移を調査した。その結果、反 復計算の進行とともに解が振動しているため収束しにくい状態となっていることが分かった。収 束性に影響を及ぼす緩和係数を変更した結果、残差の振動を防止でき、反復計算回数を大幅に低 減できることを確認した。以上の検討から、緩和係数の初期値や、反復計算中に緩和係数を変更 する方法を最適化することで解の収束性を向上できる見通しを得た。

SERAPHIM コードでは従来構造格子を用いてきたが、伝熱管等に対する形状模擬性向上のため非構造格子化を施した SERAPHIM コードを今後活用する予定である。非構造格子版コードの妥当性確認等は今後進めるが、同コードの現状性能を調査するとともに、高速化方策を検討した。 性能調査の結果、構造格子版コードに比べてメモリアクセスに関わるコストが増大していること が分かった。その原因特定とメモリアクセス効率の改善を主な高速化方策案とした。






図 2 解析結果(水蒸気圧力 14.77MPa、水蒸気温度 387.81℃、注水孔径 5.8mm)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 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.
- 2) 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 (37)機構論 的解析手法の実規模条件に対する適用性検証",日本原子力学会 2014 年秋の大会, 2014.
- 3) A. Uchibori and H. Ohshima, "Development of a Wastage Environment Evaluation Model for a Sodium-Water Reaction Analysis Code SERAPHIM", The 9th Korea-Japan Symposium on Nuclear Thermal Hydraulics and Safety (NTHAS9), N9P0050, 2014.
- 4) A. Uchibori and H. Ohshima, "Development of a Mechanistic Analysis Method for a Sodium-Water Reaction Analysis", 11th International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE2015), 2015.
- 5) A. Uchibori and H. Ohshima, "Applicability of a Mechanistic Numerical Method for Sodium-water Reaction Phenomena in Steam Generators of Sodium-cooled Fast Reactors", The 23rd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE23), 2015.
- 6) A. Uchibori and H. Ohshima, "Development of a Mechanistic Evaluation Method for Wastage Environment under Sodium-water Reaction Accident", The 16th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-16), 2015.

(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解析を実施し、妥当性確認実績を充実させる。また、収束性向 上のための緩和係数制御方法の最適化やメモリアクセス効率の改善を進める。

5.14.6 連続エネルギーモンテカルロコード MVP を用いた FBR 炉心の出力分布

Analysis of FBR Core Power Distribution by Continuous Energy Monte-carlo Code MVP

丸山 修平、菰田 宏、曽我 彰 炉心挙動解析グループ

(1)利用目的:

高速炉の核設計手法の検証・妥当性確認及び不確かさ評価の一環として、750MWe クラスの ナトリウム冷却高速炉を対象にモンテカルロ法と決定論的手法の双方で出力分布評価を行い、核 設計手法の検証を行った。モンテカルロ法による出力分布評価は、MVP コードにより算出され る着目箇所の核分裂反応率を評価することにより行ったが、十分な統計精度を得るためには数十 億ものヒストリ数が必要であることが判明した。そのため、大型計算機システム BX900 を利用 した。

(2) 利用内容·結果:

体系によって評価精度に相違がある可能性があるため、以下の 1)~3)の 3 ケースについてそれ ぞれ評価を行った。MVP における評価体系のモデル化の例を図 1 に示す。

- 1) 内部ダクトなし集合体で構成される炉心体系
- 2) 内部ダクト付き集合体で構成される炉心体系
- 3) 内部ダクト付き集合体で構成される炉心体系で、かつ出力歪の大きい体系

出力分布評価は、核分裂反応率を炉心軸方向の一部もしくは全部に積分した値を全炉心核分裂 反応率で規格化した値を評価することにより行った。ケース 1), 2)については、図 2 に示す Line1, 2 上の集合体を評価対象とし、ケース 3)については Line 1~4 上の集合体を評価対象とした。

評価結果の概要を以下に記す。内部ダクトがない対称な集合体で構成される体系でも、内部ダクトを有する非対称な集合体の体系でも、また中性子束や出力の分布が大きく歪んだ体系においても、モンテカルロ法による評価値と決定論的手法の評価値の相違は大きく変わるものではなく、炉心領域に対する出力分布の評価の不確かさは±3%程度で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):

1) 丸山,杉野,大木,"次世代高速炉の核設計における解析手法の詳細化の検討(3)-出力分 布評価手法の検証-,"日本原子力学会 2015 年秋の大会,静岡,2015 年 9月.

(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り、次年度以降も大型計算機システムの利用 が必要不可欠である。



図1 MVP コードにおける燃料集合体及び炉心部のモデル化の例 (ケース3))



◎:ケース3)における非対称引抜制御棒

図2 出力分布の評価対象とした燃料集合体位置

5.14.7 FCA VIII-2 燃料スランピング実験による SIMMER-III 及び SIMMER-IV の検証 Validation of SIMMER-III and SIMMER-IV with FCA VIII-2 Fuel Slumping Experiments

石田 真也、高橋 一彦、水野 正弘 炉心安全評価技術開発グループ

(1)利用目的:

高速炉の安全性を考える上で、炉心損傷事故(以下、「CDA」)を想定し、再臨界の可能性を 検討することは非常に重要である。CDA 時の再臨界を検討する際には、図1に示すような大規 模な損傷炉心物質の移動や再配置に伴う核的な挙動を適切に評価する必要がある。高速炉の CDA で生じる複雑な物理現象について総合的なシミュレーションを実施するため、高速炉の核 熱流動安全解析コード SIMMER-III 及び SIMMER-IV の開発が進められている。SIMMER-III 及び SIMMER-IV の信頼性向上のためには、損傷炉心の核的挙動に関する評価手法の検証が必 要である。そこで、日本原子力研究所の高速臨界集合体施設(以下、「FCA」)で1979年に実施 された FCA VIII-2 臨界集合体での燃料スランピング実験を対象とした解析を実施し、損傷炉心 の核的挙動に関して SIMMER-III 及び SIMMER-IV による評価手法の妥当性を検証する。

SIMMER-III 及び SIMMER-IV の核計算では、多群中性子輸送方程式を有限差分化する解法 (決定論的輸送計算手法)が採用されている。つまり本計算手法は、本来は連続的である空間や エネルギーに対してメッシュやエネルギー群等の離散化による近似を導入した計算となってい る。一方、連続エネルギー粒子輸送モンテカルロ計算ではそのような近似を用いていないため、 これらの結果を比較することにより、SIMMER-III 及び SIMMER-IV による解析結果の信頼性 を示すことができる。しかしながら、連続エネルギー粒子輸送モンテカルロ計算には多大な計算 時間並びに計算資源が必要となるため、大型並列計算機の利用が不可欠である。

(2) 利用内容•結果:

SIMMER-III 及び SIMMER-IV の検証に用いる FCA VIII-2 の実験体系の炉心断面図を図 2 に示す。FCA は板状の燃料(ウラン、プルトニウム)と模擬物質(ナトリウム、ステンレス等) を装填した燃料引き出しを格子管集合体に装荷して組み立てられている。FCA VIII-2 集合体は、 高速増殖原型炉「もんじゅ」の内側炉心を模擬した試験領域(Test region)が駆動燃料領域 (Driver)とブランケット領域(Blanket)に囲まれた形状となっており、実験では試験領域内 の中心 3×3 の引出しにおいて燃料の崩落・分散等により炉心物質が密に詰まる現象(燃料スラ ンピング)を想定している。具体的には図 3 に示す通り、基準状態(A0 ケース)から上部の燃 料が崩落して下部の領域に炉心燃料が密に詰まる(Compacted fuel)現象(A1、A2、A3 ケー ス)と、中心部の燃料が上下に分散する現象(S ケース)を想定し、実験では上記の現象によっ て生じた反応度変化が測定されている。

SIMMER-IIIは2次元体系、SIMMER-IVは3次元体系での解析に対応しており、SIMMER-IV で用いる3次元体系は実験体系と同様に格子状の体系を用い、SIMMER-III解析で用いる2次 元体系は各領域の質量と体積が保持されるように円筒化した。

検証方法としては、SIMMER-IV での解析で用いた3次元体系を用いて連続エネルギー粒子輸送モンテカルロによる解析を実施し、SIMMER-III 及び SIMMER-IV の解析結果との比較を行った。この連続エネルギー粒子輸送モンテカルロ計算には原子力機構の大型並列計算機にて 32CPU を使用して実行した。

実験及び各解析における反応度変化を図4に示す。連続エネルギー粒子輸送モンテカルロ計算 との比較を行ったところ、SIMMER-III 及び SIMMER-IV との差は十分小さかった。これは SIMMER-III 及び SIMMER-IV ではメッシュやエネルギー群等の近似に起因する解析誤差の十 分小さい解析を行うことができたということである。実験結果と比較しても SIMMER-III 及び SIMMER-IV 共に十分な精度で実験を再現できており、SIMMER-III 及び SIMMER-IV は燃料 スランピングのような大規模な燃料移動に関する解析において信頼性の高い解析結果を得るこ とを確認できた。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 石田 真也, 水野 正弘, SIMMER-III 及び SIMMER-IV による FCA VIII-2 燃料スランピ ング実験解析, JAEA-Research 2015-002, 2015, 47p.

(4) 今後の利用予定:

輸送理論を用いた決定論的手法による反応度変化の最確値は、決定論的手法及び多群粒子輸送 モンテカルロ計算による解析結果を用いてメッシュ補正とエネルギー群補正を行うことで評価 している。そのため、実機解析における本評価方法を用いた最確値の評価に先立ち、本評価方法 の妥当性を確認する必要がある。上記の妥当性確認に用いる連続エネルギー及び多群粒子輸送モ ンテカルロ計算を実施するため、今後も引き続き大型並列計算機を使用する予定である。



図1 CDAによる炉心物質移動の模式図





図3 燃料スランピング領域の燃料移動パターン



図4 実験及び各解析のA0ケースからの反応度変化の比較

5.14.8 JSFR ホットレグ配管を模擬したシングルエルボ配管流れ実験の U-RANS シミュ レーション

U-RANS Simulation of Single Elbow Pipe Flow Experiments Simulating JSFR Hot-leg Piping

> 山野 秀将、和田 明^{*1} 設計・規格基準室、*1 NESI

(1)利用目的:

ナトリウム冷却大型高速炉の国際標準安全設計クライテリア構築に資するため、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 する必要がある。この高速炉の設計概念は、従来に比べ薄肉構造の1次系配管は大口径化、冷却 材の高流速化といった特性を持つため、高レイノルズ数条件(Re>107)の流動場となる(1)。ま た、配管はショートエルボ(配管直径と同じ曲率)を採用している。このような冷却系配管を設 計する上で、流体の乱れに起因する流力振動が懸念されるため、配管の健全性を確認するための 試験・解析研究を進めている(2)。この解析研究を行うためには、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:

本研究は、ホットレグ配管を 1/10 縮尺で模擬した水流動試験を対象として、レイノルズ応力 モデルを用いた U-RANS 解析を実施し、JSFR ホットレグ配管を模擬したシングルショートエ ルボ配管を有する 1/10 および 1/3 縮尺の水実験を通じて検証し数値解析手法の適用性について 検討を行った。また、ホットレグ配管出ロ側には中間熱交換器(IHX)が接続されているため、 その影響について解析的に検討した。



解析には、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。タイムステップ 0.1ms、入口条 件を 1/10 縮尺は流速実験近似式 (乱流強度 5%)、1/3 縮尺は流速整 流(乱流強度 5%)として解析を行 った。表1に解析ケースを示す。

図2の(1)~(3)に1/10 縮尺の解析 と実験のエルボ下流の速度分布を、

表1 解析ケース

Case	縮尺	Re 数	IHX 上部 プレナム	出口 配管長	メッシュ 数
1	1/10	$3.2\! imes\!10^5$	無	16D	293,580
2-1	1/3	$3.7\! imes\!10^6$	無	8.8D	305,172
2a-1	1/3	$3.7\! imes\!10^6$	有	8.8D	660,924
2a-2	1/3	$3.7\! imes\!10^6$	有	7.1D	637,992
2a-3	1/3	$3.7 imes 10^6$	有	4D	595,656

(4)~(6)に 1/3 縮尺の解析と実験結果を示す。1/10 縮尺と 1/3 縮尺の双方ともエルボ下流流速分 布がよく合致し、異なるレイノルズ数で模擬できることを確認した。1/3 縮尺の流速分布では、 配管出口における IHX プレナムの有無の影響を比較した結果、影響が見られない。また、流力 振動評価上重要なエルボ下流の圧力変動パワースペクトル密度を比較しても影響がない。したが って、配管出口側の影響はないことが大規模非定常解析により明らかになった。



参考文献

- (1) S. Kotake, et al., Development of advanced loop-type fast reactor in Japan, Nucl. Technol., 170, pp.133-147 (2010).
- (2) H. Yamano, et al., Technological feasibility of two-loop cooling system in JSFR, Nucl. Technol., 170, pp.159-169 (2010).

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) H. Yamano, U-RANS simulaiton of single elbow pipe flow experiments simulating JSFR hot-leg piping, ASME-JSME-KSME Joint Fluids Engineering Conference 2015, (July 26-31, 2015) AJK2015-03510.

(4) 今後の利用予定:

当初の目的を達成したため、本件に係わる今後の利用予定はない。

5.15 高速炉研究開発部門 もんじゅ運営計画・研究開発センター Sector of Fast Reactor Research and Development Monju Project Management and Engineering Center

5.15.1 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 Moniu and ISER SG Tubes using

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 during Pre-In-Service (PSI), ISI of Monju SG tubes to confirm detectability of defects under support plates, or in the U-bend area covered by sodium layers.

(2) 利用内容·結果:

3D numerical simulations of In-Service Inspection (ISI) of steam generator (SG) tubes of Monju FBR using eddy currents (ECT), are performed using an in-house JAEA developed and optimized parallel FEM code, using up to 1024 CPUs and a coupled OpenMP -MPI parallel technique. Numerical simulations of SG tube support plate aim to accurate model variation of their signal when defects are located near it. Due to sodium adherence to external SG tube surface, the ECT effect of sodium, partially filling the defects has to be evaluated in specific cases of Monju SG tubes, where various tube geometries (helical, straight) are encountered.

It was found out that 3D simulations of large scale FEM models with up to 6 millions 2^{nd} order tetrahedrons of ECT signals for helical SG tubes, with sodium deposits, can give spurious solutions, when parallel sparse iterative solvers are employed, where the solution at each step

is update from the previous step, as shown in Fig. 1 in the "Old FEM result". This could be corrected with a refined step size and with an additional increase of precision in the iterative solver parameter, thus eliminating the artificial signal, and proving the accuracy of results.



Fig.1 Simulation of helical SP signal using ECT

3D FEM code simulated the ECT signal from the 10-pair multi-coils ECT system in two cases: no defect near SG tube SP (Fig.2-I-II) and outer tube defect groove spanned full circumferential with depth 20% tube wall thickness. C-scan experimental measurements of the ECT signal using the multi-coils detect reliable the outer tube defect signature (Fig.2-III) when compared with a free-defect area, that correspond to a SP signal only. Validations of 3D numerical simulations were performed at various sodium percentages filling the defects volume, confirming the performance of multi-coils ECT system. Because of the broken circumferential symmetry of the SG helical tubes and SPs, the complex ECT signal signature can be easily deciphered and validated after using 3D FEM numerical simulations as shown in Fig.2-III.

3D numerical simulations also enabled evaluation of maximum noise resulting from filling of SG tube defects with sodium, as shown in Fig.3. By evaluating the ECT signal at various ECT frequencies, specific variants of multi-frequency algorithms can be found, checked and optimized for specific FBR tubes configurations, in order to enhance the detection of defects near SG tubes supports, even when sodium is present on the external SG tubes surface.



Fig.2 I) View of the SP helical tube; II) FE mesh model; III) C-scan of the tube surface using multi-coil ECT system. 3D FEM simulations (a-b) against experimental measurements (c-d). Defect is located near SP (b,d) vs. SP signal (a,c)



Fig.3 Maximum variation in the defect signal (real component), next to SP when sodium fills outer tube defect volume (150Hz frequency): outer tube defect 20%tw filled up to 100%

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Ovidiu MIHALACHE, Toshihiko YAMAGUCHI and Masashi UEDA, "Validation of Multifrequency ECT Algorithms for Helical SG tubes of FBR",. Electromagnetic Nondestructive Evaluation. (XVII), Vol 39, pp. 109-119, IOS Press, 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), Vol 39, pp. 144-154, IOS Press, 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 Electromagnetism and Mechanics, Vol 45, pp. 543-549,2014.
- 4) Toshihiko YAMAGUCHI, Ovidiu MIHALACHE, Masashi UEDA, "A Study of Multi-coils ECT for SG Tubes of FBR using 3D FEM Simulations and Experimental Measurements " The 17th International Symposium On Applied Electromagnetics and Mechanics (ISEM 2015), Kobe, September 2015.
- 5) Ovidiu MIHALACHE, Toshihiko YAMAGUCHI, Masashi UEDA, "Multi-Frequency ECT for Sodium Drained SG Tubes of FBR using 3D Finite Element Simulations "The 17th International Symposium On Applied Electromagnetics and Mechanics (ISEM 2015), Kobe, September 2015.

(4) 今後の利用予定:

Future work will continue to simulate 3D geometries of helical SG tubes to validate multi-frequency (MF) and window-multi frequency algorithms with numerical simulated ECT of sodium signal for multi-coil ECT system for Monju SG tubes and application of similar approach technology to the next JSFR SG tubes. Further improvements of In-Service Inspection of FBR SG tubes will be closely related to the understanding of various sources of noise as, using 3D FEM simulations, : internal SG tube diameter variations correlated with ECT probes lift-off, variations of SG tube electromagnetic properties and their effect on the stability of MF algorithms.

5.16 敦賀事業本部 Tsuruga Head Office

5.16.1 SPLICE コードによるレーザー溶断挙動の解析

Numerical Analysis of Laser Cutting Process 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:

原子炉廃止措置では、環境負荷(高レベル放射性廃棄物量)低減、プラント解体工期短縮、狭 隘部切断技術開発などが開発目標と据えられ、これらは切断技術に対して、溶融凝固(ドロス) の低減、作業効率の向上、微細切断性の向上などとともに、技術の標準化が要求される。

レーザー光はその性質上、高出力、高出力密度、ファイバー伝送による遠隔操作性などを備え、 レーザー照射条件の適切化などが達成されれば、上記の要求を一挙に解決できるポテンシャルを 持つ。しかしながら、その条件の適切化において対象とすべきは相変化を含む多相伝熱流動現象、 相間での熱的機械的相互作用などのマルチスケール複合物理過程であり、実験的アプローチある いは計算科学的アプローチのみでの達成は困難を極めると予想される。そのため、計算科学と高 精度実験を相補的に利用することによって、発生する複合物理過程の制御を通じてレーザー溶断 技術の標準化を図る必要がある。

レーザー溶断では、レーザー光の照射により対象物を溶融し、これをアシストガス噴流により 適切に排出すること(溶融金属-ガス間機械的相互作用)が求められる。このアシストガス噴流 は、レーザー加工ヘッドノズル下流域で高乱流条件(Re~105)としての挙動(定常不規則性、 3次元性、間欠性など)が現れ、これら特性の適切な把握と制御がレーザー溶断性能を大きく左 右すると考えられる。このアシストガス噴流の評価は、これまで開発を進めて来たレーザー加工 プロセス計算科学シミュレーションコード SPLICE によって、ワークステーションを用いて 2 次元体系により評価してきたが、実際の現象である3次元挙動を評価するためには、3次元モデ ルを用いた大規模解析を行う必要がある。本研究では、SPLICE コードを超並列スーパーコンピ ュータ(PRIMERGY BX900、200TFLOPS)にインストールし、アシストガス噴流挙動の3次 元解析を行って3次元噴流挙動を評価した。

(2)利用内容·結果:

①3次元解析について

3次元解析に用いた数値解析モデルを図1に示す。解析では図中の境界条件の下でアシストガスを噴射して流動場の過渡挙動を評価する。図2は、解析開始2秒後における瞬時速度ベクトルの分布であり、アシストガス噴流が振動していることが分かる。図中の赤丸印は、噴流が大きく

振動している空間位置であり、以下ではこの座標(X=17.5mm, Y=5mm, Z=38.5mm)を観測点 として過渡挙動についての検討を加える。図3は、同観測点の流速W(Z方向流速)の時間変化 であり、アシストガス噴流が時間的に不規則に振動していることが分かる。また、流速 Wの値 は負の値(下降流)を多くの時間帯で取るものの、間欠的に正の値(上昇流)を取ることが分か る。これは、切断対象物エッジで剥離した噴流渦塊が間欠的に下流方向に移動することに起因し ている。



図4 2次元解析結果のベクトル図

②2次元解析との比較

図4は、過去に実施した2次元解析において、①の3次元解析と同じ条件でアシストガスを噴 射して、約1秒間のシミュレーションを実施した場合の、解析開始1秒後における瞬時速度ベク

トルの分布を示したものであり、3 次元解析の結果と比較して、アシストガス噴流の流れが安定 していることが分かる。図 5 は、0.5 秒~1 秒の間の流速 W の変動範囲を最大値と最小値につい て比較したものであり、3 次元解析の結果は2 次元解析に比べて極めて大きなものとなっている。 図 6 は、図 2, 4 の赤点印の観測箇所での流速 W の時間変動について比較したものであり、2 次 元解析結果の流速 W は概ね一定の値で推移していることが分かる。これは、切断対象物エッジ で剥離した噴流渦塊が、移動することなく同じ場所に留まることに起因しており、3 次元解析結 果との大きな違いとして挙げられる。





図5 流速Wの変動幅

図6 観測点における流速Wの時間変動

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 村松壽晴、山田知典、羽成敏秀、武部俊彦、Nguyen,P、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(II)」JAEA-Research 2014-018 (2014 年).
- 村松壽晴、吉氏崇浩、「レーザー加工プロセスの計算科学シミュレーションと加工条件の導出」、日本機械学会第1回イノベーション講演会(iJSME2015)、No. 0004 (2015).
- 3) 村松壽晴、「レーザー加工プロセスと計算科学シミュレーションおよび SPring-8 放射光 X 線による評価」、光産業技術振興協会第4回多元技術融合光プロセス研究会 (2015).
- 4) 村松壽晴、「レーザー加工時の計算科学シミュレーションと加工条件の導出」、CAE 計算環 境研究会 (2015).
- 5) 村松壽晴、「計算科学シミュレーションンコードを用いたレーザー加工プロセスの高度化研 究」、日本加速器学会(2015).

(4) 今後の利用予定:

レーザー溶断解析を3次元体系で実施し、実験結果と比較・検討を行う。

5.17 バックエンド研究開発部門

Sector of Decommissioning and Radioactive Waste Management

5.17.1 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(平成 26 年度) Acceleration and Parallelization of the Computer Program (Dtransu3D・EL) for Analyzing 3D Saturated-unsaturated Groundwater Flow and Advection-dispersion Model (FY2014)

天野 健治、鶴岡 卓哉+1、清水 大志+1地層処分研究開発推進部 地質環境研究統合課、+1 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地層処分技術に関する研究開発においては、地層処分システムを構成する 人工バリアや天然バリア内での地下水や物質の動きを正確に再現、予測することが安全評価の信 頼性を確保する上で重要である。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が残されている。

平成 26 年度は、昨年度から開始した 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 並列化に向けた作業として、要素分割と簡易並列化、計算負荷の高 い行列要素のオーダーリング変更などの検討を行った。

(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 METIS による要素分割、②行列要素とベクトル要素計算部分の並列化、行列解法部分の並列化 ③行列要素のオーダーリング変更の3項目を実施した。主な結果を以下に示す。

① METIS による要素分割

有限要素法の並列化に有効と考えられる領域分割法として、数値解析の分野で広く用いられて いる METIS (Karypis and Kumar, 1995)を用いた検討を行った。ここでは、全接点数約 11 万、全セル数約 20 万のサンプル問題に対して、2 つの分割方法(プロセス間の負荷バランスを 取る方法とエッジカット数の縮小を図る方法)を適用し、それぞれについて 64 分割まで問題無 く機能することを確認した。また、通信量に関して、分割方法間の顕著な差は認められなかった。

② 行列要素とベクトル要素計算部分の並列化、行列解法部分の並列化

コスト分析によって特定された計算負荷の最も大きいサブルーチン(ELM3I)とその下位の

ルーチンに対して、簡 易的並列化を実施し た。その結果、並列数 8 の場合、並列化前の 実行時間が 7344.7 秒 であったのに対し、 2614.4 秒(2つの分割 方法の平均値)と約3 倍の速度改善が確認で きた (図 1)。一方、並 列数の増加に伴い、通 信処理時間も増加して おり、8 並列より大き い場合は並列化効率が 劣化する可能性が明ら かとなった。



図1 大コスト負荷サブルーチン (ELM3I)の簡易並列化結果 (プ ロセス間の負荷バランスを取る方法とエッジカット数の縮 小を図る方法から得た値の平均値)

また、計算負荷第2位の行列解法ルーチン(SOLPCG)に対しても、上記 ELM3Iと同様の簡 易的並列化を行い、並列数8で約5倍の速度短縮が図られている。

③ 行列要素のオーダーリング変更

高並列化に伴う行列解法における行列のバンド幅の増大が並列化効率を劣化させることから、 行列要素のオーダーリングを変更する手法として Cuthill–McKee 法 (Cuthill and McKee, 1969) および Reverse Cuthill–McKee 法 (George and Liu, 1981) を適用し、バンド幅の縮小 を試みた。その結果、改良前の最小バンド幅 (5812) が 5~6、最大バンド幅 (17412) が 5609 と大幅に縮小することができた。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

会議発表

1) Amano, K. : "Recent Scientific and Technological Advances of Site Evolutional Modelling in the Japanese URL's Programme: NA Input", 14th Natural Analogue Working Group Workshop, Olukiluoto, Finland, 2015.

(4) 今後の利用予定:

原子力機構の大型計算機を用いて、高並列化に向けたオーダーリングの適用性の確認ならびに 3次元移流-分散方程式の解法に向けたプログラムの改良を図る。また、深地層の研究施設(瑞 浪・幌延)における地下水流動解析や安全評価手法の高度化といった地層処分技術に関する研究 開発全般への活用を視野に、具体的な方策の検討を関連部署と連携して行っていく予定である。

5.18 福島研究開発部門

Sector of Fukushima Research and Development

5.18.1 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 廃棄物処理・処分技術開発グループ

(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(Cs)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と酸素を発生する。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 Cs 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。 解析格子数は最高 800 万とし、解析精度を確保するようにした。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については、基礎工学研究センターで運転データか ら吸着解析コードにより求めた Cs の吸着量と塔内分布(軸方向)から算出した新データを、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新データを用い、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、塔内の Cs 吸着分布を考慮した場合も、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) Iso Yamagishi, et al.," Characterization and storage of radioactive zeolite waste ", J Nucl Sci Technol. 2014;51;1044-1053.
- 技術研究組合 国際廃炉研究開発機構(IRID)、固体廃棄物の処理・処分に係る研究開発 (2014年5月29日廃炉・汚染水対策チーム会合/事務局会議(第6回)報告資料.

(4) 今後の利用予定:

平成27年度は、空気置換現象のメカニズムの検証を行う予定である。

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 27 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



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

5.19.1 原子・分子シミュレーションによる核燃料及び機能材料の物性評価

Atomic Simulations of Physical Properties for Nuclear Fuel 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い、機能材料としては、吸着剤として主にゼオライトを扱った。

① 核燃料物質

本テーマの目的は、MOX 燃料の構成物質である酸化アクチノイドを始めとするアクチノイド 化合物の物性を第一原理計算により評価し、核燃料開発に貢献することである。前年度まで行な われてきた研究を継続する形で、本研究では、MOX 燃料について、比熱などの熱物性の計算を 行なった。

二酸化アクチノイドはその取り扱い上の制限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。さらに、高速炉内で想定されるような極限環境での物性実験はほと んど不可能である。そのため、高速炉内での燃料挙動を評価するには、そのような環境下で物性 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。そこで、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比熱を計算することに成功し、さらに適切な近似を用いること で他のアクチノイド酸化物の比熱の評価も行なった。今年度は、複数のアクチノイドを含む MOX 燃料の熱物性評価を行い、核燃料開発に直接的に貢献可能な成果を得ることを目的とした。

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。福島第一原発 の事故によって生じた汚染水などの除染に関して、ゼオライトは、Cs や Sr の吸着剤として使わ れており、特定のイオンに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選択性を評価する手法を用い、Sr の吸着性能 を様々なゼオライトで評価した。この成果は新規吸着剤開発へ貢献するものと期待される。

(2)利用内容·結果:

① 核燃料物質

昨年度までに行った二酸化アクチノイドの比熱を求める手法を用いて、MOX 燃料 (U_{0.75}Pu_{0.25}O₂)の比熱を評価した。この手法では格子比熱に対しては準調和振動子近似を、シ ョットキー比熱に対しては結晶場理論を用いて評価している。準調和振動子近似は実際に MOX の結晶構造を構築し、計算した。また、ショットキー比熱は U と Pu 原子のそれぞれのショット キー比熱を求め、それらは混合することで計算している。この方法を用いて、図1にあるように 十分な精度で実験を再現することに成功した。



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用い、いくつかのゼオライトに おける Sr 選択性を評価した。図2に示したのは2種類のゼオライト(モルデナイト、ゼオライ ト A)における Ca と Sr のイオン交換等温曲線である。この結果と直接に比較できる実験デー タは存在しないものの、この曲線から得られるイオン交換の選択性は実験で知られているものを よく再現している。今回の手法の開発によって、イオン選択性の評価を通じて、高性能吸着剤の 開発への貢献が期待できる。



図2 Ca⇔Srのイオン交換等温曲線

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文発表

- 1) H. Nakamura, M. Okumura, and M. Machida, "Monte Carlo simulation studies of cation selectivity in ion exchange of zeolites," RSC Adv., vol. 4, no. 95, pp. 52757–52761, 2014.
- 2) Hiroki Nakamura, Masahiko Machida, Masato Kato, "First-Principles Calculation of Phonon and Schottky Heat Capacities of Plutonium Dioxide", J. Phys. Soc. Jpn., vol. 84, 053602, 2015.

口頭発表・国際会議

 Hiroki Nakamura, Masahiko Machida, "A First-Principles Study on Heat Capacity of Actinide Dioxides," NuMat 2014: The Nuclear materials Conference, Clearwater, USA, Oct. 27-30, 2014.

口頭発表・国内会議

- 4) 中村博樹、奥村雅彦、町田昌彦、「3D-RISM 法を用いたゼオライトの Cs 吸着性能の評価」、 原子力学会 2014 年 秋の大会、2014 年 9 月、京都.
- 5) 中村博樹、奥村雅彦、小林恵太、町田昌彦、「モンテカルロシミュレーションによる吸着剤 の Sr 選択性の評価」、原子力学会 2015 年 春の年会、2015 年 3 月、日立.

(4) 今後の利用予定:

核燃料物質に関しては、より高温での熱物性の評価を可能とするシミュレーションを行う予定 である。また、吸着物質はこれまでに開発した手法を応用して、より多くのイオンや物質に適用 していく。

5.19.2 2 次元河川シミュレーションコードによる大柿ダム内の浮遊砂の振る舞いの調査 Evaluation of Behavior for Suspended Sediment in Ogaki Dam using 2D River Simulation Code

山田 進

並列計算法開発グループ

(1) 利用目的:

本研究は、福島第一原子力発電所(1F)の事故により放出された放射性物質(主にセシウム) の環境中での長期的な振る舞いを調査することを目的としている。セシウムはシルトや粘土とい った小さい粒径の土砂に吸着しやすいことが知られており、1Fから放出され地上に降下したセ シウムの多くはそのまま移動するのではなく、土砂に吸着したまま一緒に移動すると考えられて いる。そのため、土砂の移動を調査することで、セシウムの移動を予測することができる。また、 土砂は洪水時のように流速の早い状態の時に移動し、ダムや貯水池に流れ込み流速が遅くなると 堆積することが知られている。ダムや貯水池に貯められた水は飲料水や農業用水に用いられるた め、帰還住民にとって重要な問題であることから、ダム内のセシウムの振る舞いを知ることは重 要なことであることがわかる。

そこで、平成26年度は、1Fの北西約16kmに位置する大柿ダムを対象に、洪水時に流入した 浮遊砂のダム内での振る舞いを計算機シミュレーションを用いて調査した。

(2)利用内容•結果:

平成 26 年度はダムの水 位を変化させたときのダム 内に流入したシルトと粘土 の振る舞いについて調査し た。今回のシミュレーショ ンでは、北海道大学の清水 表1 シミュレーションに利用した流量および浮遊砂量

	経過時間(時間)		
		0 — 40	40 -
流量(m [*] /秒)		35	2
流入浮遊砂量	シルト(粒径:0.01mm)	63.8	0
(ton/時)	粘土(粒径:0.001mm)	42.9	0

教授が開発した 2 次元河川シミュレーションコードである Nays2D を並列化し、さらに必要な 機能も追加した並列コードを利用した。また、今回のシミュレーションで利用した流量や浮遊砂 量は表1に示す年平均の値を利用した(1 年間に平均的に起こる洪水の総合計時間が 40 時間、 洪水時の流量が 35 m³/秒)。この時、ダムの水位を 130m と 155mに設定した際に、ダム内に流 入した土砂の振る舞い(ダム内に堆積、ダム内に浮遊、ダムを通過する量)を図1に示す。

この結果から、シルト、粘土ともダムの水位を高くすることで、ダム内に多く堆積することが わかる。特に、粘土は水位を 25m 上昇させるとダム内により多くの量が堆積し、ダムを通過す る量が3分の1程度に減少することが確認できる。つまり、この計算結果はダムの水位を高くす ることで粒径の小さい土砂に吸着したセシウムをダム内に多く閉じ込められる可能性があるこ とを示している。ただし、ダムの水位の調整は様々な状況を考慮して決定するため、常に水位を 高くすることは現実的ではないことに注意が必要である。



(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Susumu Yamada, Mitsuhiro Itakura, Masahiko Okumura, Masahiko Machida, and Akihiro Kitamura, Numerical Studies of Radioactive Sediment Deposition on Reservoirs in Fukushima Coastal Area, EGU2014, Vienna (Austria), 2014 年 4 月 29 日.
- 2) 山田進、板倉充洋、奥村雅彦、町田昌彦、2次元河川シミュレーションによる大柿ダム内の 放射性物質が付着した土砂の移動予測、(2014年9月8日 日本原子力学会秋の年会、京都 大学)
- 3) Susumu Yamada, Akihiro Kitamura, Hiroshi Kurikami, Masaaki Yamaguchi, Alex Malins, Masahiko Machida, "Sediment transport and accumulation in the Ogaki Dam of eastern Fukushima", Environmental Research Letters, Vol. 10, 014013. http://iopscience.iop.org/1748-9326/10/1/014013.

(4) 今後の利用予定:

現状の並列シミュレーションコードでは、問題サイズにもよるが 100 コアを超える並列計算で は並列計算の効果が得られない。そのため、更なる並列チューニングを行い高並列計算でも優れ た並列性能を実現できるコードに改良していく予定である。また、他のダムや河川に対してもシ ミュレーションを行い、計算科学の分野から福島の環境回復に貢献することを目指していく。

5.19.3 非従来型超伝導体の不純物耐性の理論解析

Theoretical Analysis About Impurity Effects in Unconventional Superconductors

永井 佑紀 シミュレーション技術開発室

(1)利用目的:

高性能な超伝導体の開発は、エネルギー機能材料研究の主要課題の一つであり、計算科学手法 が未だに十分に確立しておらず、多くの理論及び計算上の課題が残されている分野である。本課 題では、最近発見されたが、未だに超伝導機構が解明されていない鉄系超伝導体及びトポロジカ ル超伝導体の超伝導状態における物性観測データ等をシミュレーション可能とし、その発現要因 を解明するコードの開発を目標としている。そして、不純物や欠陥が導入された場合に、超伝導 転移温度や超伝導特性がどのように変化するかをシミュレーションによって評価できれば、より 応用に適した物質の選定や、より高効率なデバイス設計の指針を得る事ができる。そのため、本 年度は、超伝導転移温度計算のための超並列計算コードを開発する。特に、トポロジカル絶縁体 Bi2Ses に銅を導入し化学ポテンシャルを変化させて得られる超伝導体 CuxBi2Ses がエキゾチッ クな物性を持つトポロジカル超伝導体と呼ばれる非従来型超伝導体である可能性が指摘されて おり、この超伝導体の不純物耐性が銅の導入

量によってどう異なるかについて調べる。

(2)利用内容·結果:

トポロジカル超伝導体に不純物や欠陥が 導入された場合の超伝導転移温度の減少の 度合いを評価するために、超伝導平均場ギャ ップ方程式と不純物自己エネルギーを自己 無撞着 T 行列近似を用いて自己無撞着に数 値的に解いた。その際、実際の超伝導体のエ ネルギースケールである meV スケールにも 対応するために波数空間の分割によるコー ドの大規模並列化を施した。また、実際に不 純物が導入された場合の超伝導の壊れ方を みるために、実空間強束縛模型に超伝導秩序 変数を平均場として導入した際に用いる Bogoliubov-de Gennes 方程式を実空間で解 き、その固有値固有ベクトルを調べた。固有 値固有ベクトルの計算には、これまでの年度 で開発した BX900 用超並列チェビシェフ多 項式コードと Sakurai-Sugiura 法によるコ



図 1 超伝導秩序変数の温度依存性。上下図と もにトポロジカル超伝導相であるが磁場 の変化によって不純物導入による超伝導 転移温度減少の度合いが変化している。

ードを用いた。開発したどのコードにおいても、今までの超伝導体ではほとんど考慮に入れられ てこなかったスピン軌道相互作用の効果を取り入れ、大規模並列計算可能な形で開発を行った。 今年度対象とした系は、三次元トポロジカル超伝導体候補物質 Cu_xBi₂Se₃と、半導体超伝導体接 合二次元界面での磁場中ラシュバ型スピン軌道相互作用を持つs波超伝導体である。

トポロジカル超伝導体候補物質である CuxBi2Se3 に関しては、トポロジカル超伝導の非磁性不 純物耐性が、銅のドープ量に強く依存するという結果を得た。さらに、Bi2Se3 の有効モデルが Massive Dirac ハミルトニアンで記述される事と不純物耐性が密接に関連している事を突き止 め、固体中の相対論的粒子の速度を銅のドープによってコントロールすることで、超伝導体の不 純物耐性をコントロールすることができる事を明らかにした。これは、エキゾチックな物性を持 ち不純物や欠陥に強い非従来型超伝導をこの系で実現できる事を示唆している。また、スピン軌 道相互作用の強い二次元界面超伝導体においては、磁場によって非磁性不純物耐性を調べた。こ の系はある強さ以上の磁場でトポロジカル超伝導相になることが知られており、トポロジカル超 伝導はp波超伝導という不純物に弱い超伝導であると考えられていたが、我々の研究によって、 トポロジカル超伝導体であるにも関わらず不純物に強い超伝導が二次元界面系で実現されうる ことが明らかとなった。図1は二次元界面系における超伝導秩序変数の温度依存性である。トポ ロジカル超伝導相にも関わらず不純物に強い磁場領域があることがわかる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文(査読付き)14本 第一著者10本

- <u>Y. Nagai</u>, "Non-fragile superconductivity with nodes in the superconducting topological insulator Cu_xBi₂Se₃: Zeeman orbital field and non-magnetic impurities", Phys. Rev. B 91, pp. 060502(R)-1 060502(R)-5 (2015).
- <u>Y. Nagai</u>, Y. Ota, and M. Machida, "Topological s-wave pairing superconductivity with spatial inhomogeneity: Mid-gap-state appearance and robustness of superconductivity", J. Phys. Soc. Jpn. 84, pp. 034711-1, 034711-8 (2015).
- 3) <u>Y. Nagai</u>, H. Nakamura, and M. Machida, "Surface states around a vortex in topological superconductors: Intersection of a surface and a vortex", J. Phys. Soc. Jpn. 84, pp. 033703-1 033703-4 (2015).
- 4) S. Yoshizawa, H. Kim, T. Kawakami, <u>Y. Nagai</u>, T. Nakayama, X. Hu, Y. Hasegawa, and T. Uchihashi, "Imaging Josephson vortices on the surface superconductor Si(111)-(√7 x√3)-In using a scanning tunneling microscope", Phys. Rev. Lett. **113**, pp. 247004-1,247004-5 (2014), 'Editors' Suggestion' 'Featured in Physics'.
- <u>Y. Nagai</u>, Y. Ota, and M. Machida, "Impurity effects in a two-dimensional topological superconductor: A link of Tc-robustness with a topological number", J. Phys. Soc. Jpn. 83, pp. 094722-1, 094722-5 (2014).
- 6) <u>Y. Nagai</u>, Y. Ota, and M. Machida, "Nonmagnetic impurity effects in a three-dimensional topological superconductor: From p- to s-wave behaviors", Phys. Rev. B **89**, pp. 214506-1,214506-6 (2014).
- 7) <u>Y. Nagai</u>, "Field-angle-dependent Low-energy Excitations around a Vortex in the Superconducting Topological Insulator $Cu_xBi_2Se_3$ ", J. Phys. Soc. Jpn. 83 p. 063705 (2014).

- 8) <u>Y. Nagai</u>, H. Nakamura, and M. Machida, "Quasiclassical Treatment and Odd-parity/Triplet Correspondence in Topological Superconductors", J. Phys. Soc. Jpn. **83** pp. 053705-1,053705-4 (2014).
- 9) <u>Y. Nagai</u>, H. Nakamura, and M. Machida, "Spin-polarized Majorana Bound States around a Vortex in Topological Superconductors ", J. Phys. Soc. Jpn. **83**, pp. 064703-1,064703-7 (2014). **'Papers of Editors' Choice'.**
- 10) T. Kawakami, <u>Y. Nagai</u>, S. Yoshizawa, H. Kim, Y. Hasegawa, T. Nakayama, T. Uchihashi and X. Hu, "Excitation spectrum of Josephson vortices on surface superconductor", J. Phys.: Conf. Ser. **568**, p. 022022 (2014).
- 11) Y. Higashi, <u>Y. Nagai</u>, T. Yoshida and Y. Yanase, "Vortex Core Structure in Multilayered Rashba Superconductors", J. Phys.: Conf. Ser. **568**, 022018 (2014).
- 12) <u>Y. Nagai</u>, Y. Ota and M. Machida, "Robustness against non-magnetic impurities in topological superconductors", J. Phys.: Conf. Ser. **568**, p. 022030 (2014).
- 13) <u>Y. Nagai</u>, H. Nakamura, and M. Machida, "Inhomogeneity Effects in Topological Superconductors", Proc. Int. Conf. Strongly Correlated Electron Systems (SCES2013), JPS Conf. Proc. **3**, p.015013 (2014).
- 14) Y. Higashi, <u>Y. Nagai</u>, and N. Hayashi, "Impurity Effect on the Local Density of States around a Vortex in Noncentrosymmetric Superconductors", Proc. Int. Conf. Strongly Correlated Electron Systems (SCES2013), JPS Conf. Proc. **3**, p.015003 (2014).

招待講演 1件

15) <u>Y. Nagai</u>, H. Nakamura, and M. Machida, "Spin-polarized majorana quasiparticle bound states in topological superconductors", The 25th International Symposium on Superconductivity (ISS2014).

受賞 3件

- 16) 論文賞「Papers of Editors' Choice」, Journal of the Physical Society of Japan 編集委員会、 対象論文「Y. Nagai et al., " Spin-polarized Majorana Bound States around a Vortex in Topological Superconductors ", J. Phys. Soc. Jpn. **83**, 064703」.
- 17) 永井佑紀、第9回日本物理学会若手奨励賞(領域6)受賞 「準古典 Eilenberger 理論による非従来型超伝導体の理論的研究」.
- 18) 論文賞「Editors' Suggestion」および' Featured in Physics'、対象論文「S. Yoshizawa, H. Kim, T. Kawakami, <u>Y. Nagai</u>, T. Nakayama, X. Hu, Y. Hasegawa, and T. Uchihashi, "Imaging Josephson vortices on the surface superconductor Si(111)-(√7 x√3)-In using a scanning tunneling microscope", Phys. Rev. Lett. **113**, 247004-1,247004-5].

(4) 今後の利用予定:

BX900 の入れ替えにより、異なるスーパーコンピュータが導入されることになるが、現在の シミュレーションコードがそのまま実行できるとは限らない。そのため、新しい計算機でのコー ドの最適化を行い、BX900 で行った以上の多数 CPU コアによる超大並列計算にも耐えられるよ うにアルゴリズムを見直す。そして、引き続き非従来型超伝導体の物性値の理論シミュレーショ ン用コードの開発を行う予定である。

5.19.4 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 Nuclides in an Environment

奥村 雅彦

シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

2011 年 3 月 11 日に起きた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、 更に土壌に吸着し、化学的に安定化し土壌表層に留まる。そのため、長期に渡り放射線レベルは 下がらず、広域的避難の最大の要因となっており、早期の除染が求められている。しかし、除染 による除去土壌は膨大な量になると予想され、その貯蔵のための中間貯蔵施設や最終処分場の設 置が大きな問題となっている。また、今後、地表に沈着した放射性セシウムを含む土壌は雨など により、環境中を移行していくと予想され、放射性セシウムの環境動態を明らかにする事も、今 後の大きな課題である。これらの課題について、政府やその研究機関に対し、迅速な対応と共に 着実な研究開発とその成果が求められている。こうした背景の下、システム計算科学センター・ シミュレーション技術開発室では、上記の社会的要請に応えるべく、除染により発生する大量の 除去土壌からセシウム脱離や土壌に吸着した放射性セシウムの自然環境中での動的挙動を理解 するためには、セシウムの土壌への原子レベルでの吸着様態を理解することが先決と考え、第一 原理計算を用いた粘土鉱物の研究に着手した。その際、得られる知見は、上記問題の解決のため だけでなく、将来に渡って貴重な科学的知見になるものと考え、大型計算機を利用し、できる限 りの検証(例として計算の規模依存性を調べる等の検証)を行うことで、より確かな知見を得る こととした。このような方針の下、平成26年度は、より現実的な環境下での粘土鉱物へのセシ ウム吸着を評価し、実際の環境に近い状態における吸着エネルギーの評価や、吸着機構の解明な どを目的とした。

特に、最近、上記「Cs 脱離機構解明と脱離法の解明」プロジェクトの実験チームによって、 次のようなことが明らかになって来た。土壌に吸着された放射性セシウムは、メートルレベルの スケールで見るとほぼ一様に散らばって土壌に吸着されているように見え、セシウム濃度は低い と考えられていた。しかし、最新の実験結果によると、マイクロメートルレベルのスケールでは、 特定の粘土鉱物に集中して放射性セシウムが吸着している一方で、ほとんど吸着していないもの があり、一概に一様にセシウム濃度が低いとは言えない事がわかってきた(図 1)。さらに、そ の集中して放射性セシウムが吸着している粘土鉱物に関する最新の実験によって、セシウム濃度 が高い場合、粘土鉱物の層間にランダムに吸着するのではなく、ある特定の層に集中してセシウ ムが吸着する事が分かった(図 2)。このように、実験によって福島土壌の特徴的な振る舞いが 分かって来た一方で、これらの特徴的な吸着のメカニズムは謎のままであった。そこで、我々は、 これらの実験結果に注目し、吸着機構を第一原理計算によって解き明かす事を具体的目標とし た。 本研究により吸着機構が解明されれば、その吸脱着に関係する物理化学の知見の絞り込みが可 能となり、特徴的知見を活かした除去土壌の減容化技術開発が可能となるだけでなく、その知見 を基に効果的脱離技術開発工程の大幅な加速が期待できる。



図1 福島土壌における放射性セシウム 吸着の様子



図 2 粘土鉱物における放射性セシウム 吸着の様子

(2)利用内容·結果:

本研究では、3種類の粘土鉱物(白雲母、金雲母、鉄雲母)を対象として、粘土鉱物にセシウ ムが連続的に吸着する際のエネルギー変化について密度汎関数法を用いて調べ(図 3)、以下を 明らかにした。

1. 一度セシウムが吸着するとよりセシウムを吸着しやすいという傾向があることが分かった。

2. 粘土鉱物にランダムに吸着するよりも、一つの層に吸着する方がエネルギー的に安定であることを示した。

3. さらに、この性質は粘土鉱物にあらかじめ含まれているカリウムイオンと吸着するセシウムのイオン半径の違いに起因する事を、吸着の様子をシンプルに表すモデル(図4)を作る事により明らかにした。



図3 セシウムの吸着エネルギー



図4 吸着の様子を簡易的に示すモデル

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文

1) M. Okumura, H. Nakamura, and M. Machida, "Energetics of atomic level serial ion exchange for cesium in micaceous clay minerals", Clay Science Vol.18 No.3, 53 (2014).

解説

2) 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」、原子力学会誌「アトモス」2014 年 6 月号、20 (2014).

学会発表

3) 奥村雅彦、中村博樹、町田昌彦,「数値シミュレーション手法による粘土鉱物の固液分配係 数の評価」、日本原子力学会 2014 年秋の大会、京都大学、2014 年 9 月 9 日.

国際会議発表

- 4) M. Okumura, H. Nakamura, and M. Machida, "First-principles studies of cesium adsorption to frayed edge sites of micaceous clay minerals", 248th ACS National Meeting & Exposition, San Francisco, August 10-14, 2014.
- 5) M. Okumura, H. Nakamura, M. Machida, and S. Kerisit, "Adsorption Properties of Cesium Ions to Micaceous Clay Minerals", 249th ACS National Meeting & Exposition, Denver, March 22-26, 2015.

(4) 今後の利用予定:

これまでは、環境中における水の影響を受けにくい部分を評価してきたが、今後はより現実的 な状況におけるセシウム吸脱着のシミュレーションを行うために、水分子の影響を取り入れる予 定である。具体的には、第一原理分子動力学法と古典分子動力学法を用いてその影響を評価する 予定である。これにより、これまで近似していた水分子の影響を受ける吸着プロセスを詳細に評 価する事が可能になり、セシウムの吸脱着プロセス全体を把握する事が可能になる。また、第一 原理分子動力学法の計算結果を参考にして古典分子動力学法で用いる力場を作成し、粘土鉱物全 体の大規模シミュレーションも視野に入れ、研究を進めていく予定である。

5.19.5 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 Mechanism of Degradation for 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にも貢献する。

(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(Fig.1)。



不純物(Sb, Sn, P)偏析の脆化効果(Ni-Cr鋼)を水素の脆化効果に置き換えて計算

Fig.1 鉄鋼の水素脆性における、限界応力拡大係数と固溶水素濃度の関係。

【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 た。その「キンク変形」メカニズムが謎であるため、科研費新学術領域におけるプロジェクト研 究が行われている。最近、一軸圧縮下にある LPSO 構造において、圧縮方向の転位移動障壁で あるパイエルスエネルギーが顕著に下がり、それが原因でパイエルス応力が大きく低下し転位が 非常に動きやすくなるという現象を、第一原理計算から発見した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

主著論文

- 1) (査読付き論文) Multiscale Thermodynamic Analysis on Fracture Toughness Loss Induced by Solute Segregation in Steel, Masatake Yamaguchi, Jun Kameda, Philosophical Magazine, 94(2014)2131-2149.
- 2) (依頼原稿)「最近の研究から:鉄鋼材料の粒界破壊におけるマルチスケール熱力学解析」、 山口正剛、日本金属学会会報まてりあ3月号.

共著論文

3) (査読付き論文) H. Somekawa, M. Yamaguchi, Y. Osawa, A. Singh, M. Itakura, T. Tsuru, T. Mukai, "Materials design for magnesium alloys with high deformability" Phil. Mag. 95, 869-885 (2015).

招待・依頼講演

- (招待講演) M. Yamaguchi, J. Kameda, "Multiscale Analysis of Hydrogen-Induced Intergranular Cracking in Medium Strength Alloys Steel with Segregated Solute" Workshop on Deformation, Damage and Life Prediction of Structural Materials, 2014/06/23-24 NIMS, Tsukuba, Japan.
- 5) (招待講演)山口正剛「粒界破壊のマルチスケールモデリング」 原子力学会材料部会夏期 セミナー(蔵王) 2014/08/05.
- 6) (基調講演)山口正剛、板倉充洋、志賀基之、蕪木英雄、「LPSO 構造の一般化積層欠陥エ ネルギー」、2015/03/19 日本金属学会 講演大会(東大駒場).
- 7) (招待講演)山口正剛、「粒界破壊における破壊力学試験と第一原理計算の接点」原子力学 会材料部会シンポジウム、2015/03/21、(茨大日立キャンパス).

主著講演

- 8) Masatake Yamaguchi, Jun Kameda, "Multiscale Analysis of Hydrogen-Induced Intergranular Cracking in Medium Strength Alloys Steel with Segregated Solute" International Workshop on the Environmental Damage in Structural Materials Under Static/Cyclic Loads at Ambient Temperatures 2014/06/15-20 (Bergamo, Italy).
- 9) 山口正剛、亀田純、海老原健一、板倉充洋、「モバイル水素効果による低速微視き裂進展」 日本鉄鋼協会 水素脆化の解析と評価フォーラム、2014/09/25 名古屋大学.

(4) 今後の利用予定:

引き続き、材料劣化メカニズム解明に取り組む。モバイル水素効果による水素誘起粒界破壊に 対する偏析元素の影響などについて調べる。

5.19.6 超伝導及び磁性における多軌道効果

Multi-orbital Effect for Magnetism 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。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 子気体において多軌道効果が引き起こす新規な物性の探索を行った。計算手法としては密度行列 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。計算手法として低次元量子系の基底状態を正確に求めることが可能となる密度行列 繰り込み群(DMRG)を用いた。本年度は p 軌道中の冷却フェルミ原子気体における空間変調 をもつ超伝導状態、多軌道 SU(2)フェルミ原子気体における不純物誘起反強磁性に関する解析を 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における空間変調をもつ超伝導状態

有限磁化が存在する場合での超伝導相関関数の振る舞いを解析した(図1上段)。相互作用が 小さい場合には、超伝導状態は磁化率により特徴づけられる空間変調を持つ。相互作用が大きい 場合には、空間変調の周期は磁化率と関係なくπに固定されることになる。このπに固定された 超伝導状態はηペアリング状態と呼ばれるものであり、多軌道効果により出現しうることを明ら かにした。

・2 軌道 SU(2)フェルミ原子気体における不純物誘起反強磁性状態

原子の超微細構造を利用することにより、2 軌道 SU(N)対称性を持つフェルミ原子気体を実現 することが可能である。今回は 2 軌道 SU(2)フェルミ原子気体に対するランダムポテンシャルの 効果を解析した。ハーフフィリング (n=2) ではこの系は非磁性体であるが、ホールをドープす ることにより反強磁性秩序が発達していくことを明らかにした (図 1 下段)。また、ランダムポ テンシャルと多軌道効果により軌道秩序なども発達しうることを明らかにした。



図1 上段: (a)-(c) p 軌道を持つフェルミ原子気体における超伝導相関関数(赤線、青線)。
 (d)超伝導相関関数絶対値の log-log plot。下段: (b) 2 軌道 SU(2)フェルミ原子気体における磁気相関関数。(c)ストリング秩序変数。(b2),(c2)は絶対値の log-log plot である。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 小林恵太,太田幸宏,山田進,町田昌彦,"準周期ポテンシャル中の2軌道 SU(N)冷却フェル ミ原子気体における秩序状態",研究会 量子多体系研究の新しい潮流,京都大学,2014年12 月.
- 2) 小林恵太,山田進,奥村雅彦,町田昌彦,"準周期ポテンシャル中の2軌道 SU(N)冷却フェル ミ原子気体に対する DMRG 解析,日本物理学会第70年次大会,早稲田大学,2015年3月.

(4) 今後の利用予定:

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。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 27 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。

5.19.7 銅酸化物高温超伝導体固有ジョセフソン接合列におけるテラヘルツ発振シミュレ ーション

Multi-scale Simulations of Teraherz Radiations from Intrinsic Josephson Junction Arrays

 太田 幸宏

 シミュレーション技術開発室

(1)利用目的:

機能材料および機能デバイスとして銅酸化物超伝導体は大きな期待と注目を集めており、その 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の発振源であり、いわゆるテラヘルツ ギャップを埋める候補として注目を集めている。固有ジョセフソン接合列は、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 バイスであり、多重超伝導層間の協同現象が豊かな物理を誘起する。

平成 25 年度に、Koyama ら(PRB、2009 及び SUST、2011)が提案した理論手法に基づく 計算コードを開発、そして同コードを並列化し、空間 3 次元マルチスケールシミュレーションを 実施する基盤を構築した。すなわち、対象デバイスに含まれる複数の(大きく異なった)空間ス ケール (c 軸方向侵入長 λ c=10² μ m、ジョセフソン侵入長 λ J~1 μ m、デバイスの厚み d~10⁻³ μ m、電磁場伝播の空間スケール 10² μ m)において自由度を曖昧さのなく記述する計算手法が 確立されたことを意味する。この成果を受け、本年度は、現実のデバイスを想定したシミュレー ションの実行を目指す。着目した問題設定は、(1)c 軸方向の有限サイズ効果、(2) 超伝導臨界電 流密度の面内空間に関する非一様性、の2点に集約される。この設定に基づき、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および機構解明を目指す。

(2)利用内容·結果:

計算手法は次のようにまとめられる。接合列ダイナミックスを記述するサイン・ゴルドン方程 式、電磁場伝播を記述するマックスウェル方程式を連立させ、有限差分時間領域法により固有ジ ョセフソン接合列の時間発展をシミュレートする。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 を設定する。 超伝導内および真空領域はファラデーの法則に基づき、滑らかに接続される。この自然な接続条 件により、発振機構と関わるインピーダンス不整合の問題を曖昧さのない方法を議論することが 可能となる。

シミュレーションの設定は以下の通りである。空間スケールは λc で規格化される。また時間 スケールはジョセフソンプラズマ角振動数 ωp で規格化される。全空間サイズは 1.2 × 1.2 × 1.2 であり、超伝導体の空間サイズは 0.5× 0.5 × 0.02 である。超伝導接合数 N は 20、30、 40、50、100 と変化させる。こうして発振機構と接合数の相関を議論することができる。空間微 小増分は dx = dy =0.02、dz=0.01 である。時間ステッ プの微小増分は dt =0.002 である。全時間ステップは 200000 ステップに設定する。超伝導接合間には層間 相互作用が存在し、電気的結合定数は 0.1 に、磁気的 結合定数は 10000 に設定する。これは典型的なデバイ スにおける物性値を反映している。デバイスの散逸

(電気抵抗)を特徴づけるパラメーターは 0.05、素子の誘電率は 10 (cgs ガウス単位系)とする。シミュレーションでは主として電圧領域 6Vp~14Vp に着目する(ここで Vp は ωp で定まる電圧値)。デバイスの幾何構造から定まる空洞共振器共鳴条件から、この電圧領域に強い発振ピークが期待される。今回のシミュレ



図1 電流電圧特性(接合数 N=20)

ーションでは固有ジョセフソン接合の電流電圧特性における低バイアス電流領域に注目したも のであり、これは Ozyuzer ら (Science, 2007) よるテラヘルツ発振を観測した実験状況に相当する。 図1に接合数 N=20 における電流電圧特性の結果を示す (横軸:電圧、縦軸:電流)。シミュレー ションでは高電流側から徐々に電流を下げることで電流電圧特性が得られる。点線はオームの法 則から定まる電流電圧直線であり、その勾配は接合の抵抗と関わる。その抵抗値から電圧状態に ある接合数を評価することができる。すなわちより内側のブランチほど電圧状態にある接合数は 少なくなる (図1では M で、電圧状態接合数を示す)。この図から、電流を下げてゆくと、接合 列にある電圧状態接合数は減少することがみてとれる。特に、電圧 6 Vp 近傍でブランチ間に細 かい遷移を見てとれる。この電圧値になる状況で、電圧状態接合数は本来の接合数のおよそ 90% 程度になることが、他の接合数の場合でも確認される。図2に接合数 N=50 における電流電圧お よび発振特性を示す (横軸: 電圧、左縦軸: 電流、右縦軸: 発振強度)。主要な発振ピークは z 軸 方向であり、その電圧値は 6 Vp 近傍にある。こうして、多重ブランチ間遷移と発振の間に強い 相関をみてとれる。図3 に接合数 N ごとに発振のメインピークをまとめたものを示す。すなわ ち、強い発振は接合数 N=50 から顕著となることが示される。さらに、dipole アンテナ的な



図2 電流電圧および発振特性(接合数 N=50)。左は x 軸方向、右は z 軸方向の発振特性。

発振ピークは N=100 ではじめて確認された。このように強い発振を実現する機構には固有接合 列の接合数が関与することがシミュレーションにより確認された。こうしてシミュレーションに より、本質的に多重接合である銅酸化物がテラヘルツ発振デバイスとして優位であることが示さ れた。こうして本コードは実際の銅酸化物によるテラヘルツ発振デバイスのシミュレーションに 適用できるものと考えられる。一連の成果は国際会議 THz-plasma2014 で招待講演として発表 された。



図3 発振ピークの接合数依存性

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

口頭発表

- 1) "3 次元マルチスケールシミュレーションによるテラヘルツ発振特性の解析",太田幸宏、町 田昌彦、小山富男、松本秀樹、"日本物理学会 2014 年秋季大会"、2014 年 9 月、中京大学.
- 2) "Numerical simulations of terahertz emission from intrinsic Josephson junctions with variation of the number of junctions", Yukihiro Ota, Masahiko Machida, Tomio Koyama, and Hideki Matsumoto, "9th International Symposium on intrinsic Josephson Effects and THz Plasma Oscillations in High-Tc Superconductors (THz-plasma 2014)", Dec. 2014, Kyoto, Japan.
- 3) "固有ジョセフソン接合系におけるテラヘルツ発振の接合数依存マルチスケールシミュレーション",太田幸宏、町田昌彦、"非線形現象の数値シミュレーションと解析 2015"、2015 年3月、北海道大学.

(4) 今後の利用予定:

最近の実験における高バイアス領域で、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のシミュレーション手法を作る。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。
5.19.8 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機能材料の開発を計算科学によって、より効率的に実施するた めの研究手法を開発することであり、複数の実課題(物性科学や材料工学分野における)を選定 し、解決に資するシミュレーションコードを開発する一方、課題解決にも直接取り組み、材料開 発に資する学術的知見を得ることである。また、それと同時に研究手段としてのシミュレーショ ン基盤を整備することも目標とする。各課題に対する目的・意義は以下の通りである。

① 多自由度超伝導体の物性値のシミュレーションコードの開発

高性能な超伝導体の開発は、エネルギー機能材料研究の主要課題の一つであり、計算科学手法 が未だに十分に確立しておらず、多くの理論及び計算上の課題が残されている分野である。本課 題では、最近発見されたが、未だに超伝導発現機構が解明されていない鉄系超伝導体及びトポロ ジカル超伝導体の超伝導状態における物性観測データ等をシミュレーション可能とするコード の開発と、超伝導発現要因を解明するコードの開発を目標に据えた。特に、不純物や欠陥が導入 された場合に、超伝導転移温度や超伝導特性がどのように変化するかをシミュレーションにより 評価することができれば、応用の際の工学的設計が可能となり、より適した物質の選定や、より 高効率なデバイス設計の指針が得られる。

② 層状超伝導材料を利用した超伝導デバイスの大規模マルチスケールシミュレーションコードの開発

高強度で集光性の高いテラヘルツ光源の開発は、様々な研究及び産業分野が必要としている共 通の研究開発課題であり、層状超伝導材料、特に銅酸化物超伝導体からのテラヘルツ波の発振は 発振原理がユニークであると同時に超伝導故の様々な有利な特性を有することから、強度等を向 上させるためのシミュレーション研究の進展に期待が集まっている。本課題では、上記目標(強 度向上)を達成するため、3次元空間電磁場解析を含めた大規模動的シミュレーションコードを 開発し、実験状況に則した接合構造等の性質を反映させ、テラヘルツ電磁場発振特性の系統的な 解析・予測を達成することで、デバイス設計の指針につなげることを目標とする。

③ 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

物質の性質を予測し、理解する上で困難な理論的課題は、物性を決定づけている電子を記述す る理論が多体問題であることに起因する。多体問題では、電子間の相関をできうる限り正確に計 算可能な理論やシミュレーション手法を開発することが鍵となるが、本課題ではこの普遍的な基 本的課題に対し、相関の強い電子系の正確な取扱いを可能として提案された密度行列繰り込み群 法に着目し、その計算手法が未だ一次元や少数多体系という特殊な系に限定されているという現 状の制限を打破するため、大規模シミュレーションコードを開発することを目標とした。一方、 開発コードを適用する物性科学上の実課題としては、多軌道、多成分性を取り入れる等の拡張を 行うことにより、強い相関を有する電子系で発現する超伝導や磁性等のメカニズム解明を目指す こととした。

(2)利用内容·結果:

① 多自由度超伝導体の物性値のシミュレーションコードの開発

トポロジカル超伝導体に不純物や欠陥が導入された時の超伝導転移温度の減少の度合いを調 べる超並列計算コードを開発した。このコードを用いて、トポロジカル超伝導体が銅酸化物高温 超伝導体等の非従来型超伝導体と比べて不純物耐性が強いことを明らかにし、特に、どの物質パ ラメータがその不純物耐性を決定しているのかを特定することができた。また、超伝導体の物性 値を調べるための手法開発が評価され、当室の永井が第9回日本物理学会若手奨励賞(領域 6) 受賞した。そして、関連する研究が評価され、Journal of the Physical Society of Japan 編集委 員会が選ぶ論文賞「Papers of Editors' Choice」を受賞し、科学新聞 2 面(2014 年 6 月 20 日)" に掲載された。さらに、走査型トンネル顕微鏡測定を用いた表面超伝導体の観測に対して超伝導 電子状態シミュレーションを行った結果が Physical Review Letters に掲載され、'Editors' Suggestion'および 'Featured in Physics'に選ばれた。

② 層状超伝導材料を利用した超伝導デバイスの大規模マルチスケールシミュレーションコードの開発

銅酸化物超伝導体からなる固有ジョセフソン接合について、動的シミュレーションコードを開 発した。特に、大規模な3次元空間電磁場解析を効率よく達成する並列計算コードを開発した。 あわせて、単体チューニングも実施し、超伝導層数を1000程度(実際のサンプルに相当)まで可 変とした。真空電磁場と接合内電磁場とのスムーズな接続モデルを取り入れ、従来型のシミュレ ーションから大きく現実的な状況に対応できるようにした。このコードにより、テラヘルツ発振 の超伝導層数依存性を解析し、基本モードに相当する発振強度が接合数の二乗に比例する示唆を 得た。また、発振の付随現象として電流電圧特性における複数ブランチ間の遷移を再現し、実験 とのよい対応をみた。本成果は国際会議 THz-PLASMA2014 において招待講演に選定され、同 会議で注目を集めた。

③ 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

多軌道模型に対する並列化された DMRG コードの開発を行った。このコードを用いて多軌道 を持つ中性フェルミ原子気体に対する解析を行った。結果として、多軌道の効果により特異な空 間変調を持つ超伝導状態が実現し得ることを示した。また、ハルデン絶縁体相、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。本研究に関する研究成果は Physical Review A, 89, 023625, (2014)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) Y. Nagai, "Robust superconductivity with nodes in the superconducting topological insulator CuxBi2Se3: Zeeman orbital field and nonmagnetic impurities", Phys. Rev. B 91, 060502(R)-1,5 (2015), DOI: 10.1103/PhysRevB.91.060502.
- Y. Nagai. Y. Ota, and M. Machida, "Topological s-Wave Pairing Superconductivity with Spatial Inhomogeneity: Midgap-State Appearance and Robustness of Superconductivity", J. Phys. Soc. Jpn. 84, 034711-1,-5 (2015), DOI:10.7566/JPSJ.84.034711.
- 3) Y. Nagai, H. Nakamura, and M. Machida, "Surface States around a Vortex in Topological Superconductors: Intersection of a Surface and a Vortex", J. Phys. Soc. Jpn. 84, 033703-1,-4 (2015), DOI:10.7566/JPSJ.84.033703
- 4) S. Yoshizawa, H. Kim, T. Kawakami, Y. Nagai, T. Nakayama, X. Hu, Y. Hasegawa, and T. Uchihashi, "Imaging Josephson vortices on the surface superconductor Si(111)-(√7 x√3)-In using a scanning tunneling microscope", Phys. Rev. Lett. 113, 247004-1,247004-5, DOI: 10.1103/PhysRevLett.113.247004'Editors' Suggestion' 'Featured in Physics'.
- 5) Y. Nagai, Y. Ota, and M. Machida, "Impurity effects in a two-dimensional topological superconductor: A link of Tc-robustness with a topological number", J. Phys. Soc. Jpn. 83, 094722-1, 094722-5 DOI: 10.7566/JPSJ.83.094722.
- 6) Y. Nagai, Y. Ota, and M. Machida, "Nonmagnetic impurity effects in a three-dimensional topological superconductor: From p- to s-wave behaviors", Phys. Rev. B 89, 214506-1,214506-6 (2014) DOI: 10.1103/PhysRevB.89.214506.
- 7) Y. Nagai, "Field-angle-dependent Low-energy Excitations around a Vortex in the Superconducting Topological Insulator CuxBi2Se3", J. Phys. Soc. Jpn. 83 063705 (2014).
- 8) Y. Nagai, H. Nakamura, and M. Machida, "Quasiclassical Treatment and Odd-parity/Triplet Correspondence in Topological Superconductors", J. Phys. Soc. Jpn. 83 053705-1, 053705-4 (2014) DOI: 10.7566/JPSJ.83.053705.
- 9) Y. Nagai, H. Nakamura, and M. Machida, "Spin-polarized Majorana Bound States around a Vortex in Topological Superconductors ", J. Phys. Soc. Jpn. 83, 064703-1, 064703-7 (2014). DOI: 10.7566/JPSJ.83.064703 'Papers of Editors' Choice'.
- 10) T. Kawakami, Y. Nagai, S. Yoshizawa, H. Kim, Y. Hasegawa, T. Nakayama, T. Uchihashi and X. Hu, "Excitation spectrum of Josephson vortices on surface superconductor", J. Phys.: Conf. Ser. 568, 022022 (2014), DOI:10.1088/1742-6596/568/2/022022.
- 11) Y. Higashi, Y. Nagai, T. Yoshida and Y. Yanase, "Vortex Core Structure in Multilayered Rashba Superconductors", J. Phys.: Conf. Ser. 568, 022018 (2014), DOI: 10.1088/1742-6596/568/2/022018.
- 12) Y. Nagai, Y. Ota and M. Machida, "Robustness against non-magnetic impurities in topological superconductors", J. Phys.: Conf. Ser. 568, 022030 (2014), DOI: 10.1088/1742-6596/568/2/022030.
- 13) Y. Nagai, H. Nakamura, and M. Machida, "Inhomogeneity Effects in Topological Superconductors", Proc. Int. Conf. Strongly Correlated Electron Systems (SCES2013), JPS Conf. Proc. 3, 015013 (2014), DOI: 10.7566/JPSCP.3.015013.
- 14) Y. Higashi, Y. Nagai, and N. Hayashi, "Impurity Effect on the Local Density of States

around a Vortex in Noncentrosymmetric Superconductors", Proc. Int. Conf. Strongly Correlated Electron Systems (SCES2013), JPS Conf. Proc. 3, 015003 (2014), DOI: 10.7566/JPSCP.3.015003.

- 15) 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, 427-436, 2014. DOI: 10.3233/978-1-61499-381-0-427.
- 16) Susumu Yamada, Akihiro Kitamura, Hiroshi Kurimkami, Masaaki Yamaguchi, Alex Malins, Masahiko Machida, "Sediment transport and accumulation in the Ogaki Dam of eastern Fukushima", Environmental Research Letters, 10, 014013 , 2015. DOI:10.1088/1748-9326/10/1/014013.
- 17) Keita Kobayashi, Yukihiro Ota, Masahiko Okumura, Susumu Yamada, and Masahiko Machida, "Quantum phases in degenerate-p-orbital attractive one-dimensional fermionic optical lattices", Phys. Rev. A 89, 023625-1,023625-6 (2014), DOI: 10.1103/PhysRevA.89.023625.

招待講演

- 18) Y. Nagai, H. Nakamura, and M. Machida, "Spin-polarized majorana quasiparticle bound states in topological superconductors", The 25th International Symposium on Superconductivity (ISS2014).
- 19) Y. Ota, M. Machida, T. Koyama, and H. Matsumoto, "Numerical simulations of terahertz emission from intrinsic Josephson junctions with variation of the number of junctions", The 9th International Symposium on Intrinsic Josephson Effects and THz Plasma Oscillations in High-Tc Superconductors (THz-PLASMA 2014) (Kyoto, 2014).

受賞

- 20) 論文賞「Papers of Editors' Choice」, Journal of the Physical Society of Japan 編集委員会、 対象論文「Y. Nagai et al., " Spin-polarized Majorana Bound States around a Vortex in Topological Superconductors ", J. Phys. Soc. Jpn. 83, 064703」.
- 21) 永井佑紀、第9回日本物理学会若手奨励賞(領域6)受賞 「準古典 Eilenberger 理論による非従来型超伝導体の理論的研究」.
- 22) 米国物理学会刊行誌 Physical Review Letters「Editors' Suggestion」および'Featured in Physics'、対象論文「S. Yoshizawa, H. Kim, T. Kawakami, Y. Nagai, T. Nakayama, X. Hu, Y. Hasegawa, and T. Uchihashi, "Imaging Josephson vortices on the surface superconductor Si(111)-(√7 x√3)-In using a scanning tunneling microscope", Phys. Rev. Lett. 113, 247004-1,247004-5」.

(4) 今後の利用予定:

今後も、原子力分野にて有用な可能性のある機能材料開発を目指して、物性材料研究開発を進 めて行く。その際、シミュレーションコードを開発する同時に大規模化も進め、原子力機構が有 するスーパーコンピュータシステムを利用することで研究開発活動を円滑に進め、研究成果を迅 速に創出することを目指す。

5.19.9 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:

不純物元素が塑性に与える影響はあらゆる構造材料においてその強度と破壊強度を決定する 重要な要素であり、中性子照射による原子力材料の脆化をモデル化する場合にも鍵となる部分と 言える。我々はこれを第一原理計算により精度よく求める手法を開発・整備している。本課題は その手法を応用しこれまで対象としていた鉄から対象を広げ、燃料被覆管を構成するジルコニウ ム合金に代表されるような六方晶金属へ応用するものである。このテーマはそれ自体が産業界の 注目を浴びているものであるが、さらには研究の結果得られた六方晶金属で特に有効な手法に関 する知見をジルコニウムの解析に適用することが期待できる。

(2)利用内容•結果:

本年度は六方晶金属でのみ特徴的に見られる、非最密な原子面における滑りを解析対象とした。一般的な金属では原子が最密充填になっている原子面が多数あり、それらは平滑であるため に原子面の滑りが容易で、どの方向から圧縮しても滑る面があるために等方的に変形することが 可能である。一方で六方晶金属においては最密充填な原子面は一つしかなく、この原子面の滑り を誘起するような特定の方向からの圧縮においてのみ変形するため変形が困難である(図 1)。 最近の実験において、六方晶金属の変形では錐面と呼ばれる非最密な原子面が活発に滑っている ことが観測されており、加工性能を向上させるにはこの錐面滑りをいかに室温で活性化させるか が鍵になることが分かってきたが、この滑り現象を引き起こす転位の性質はその複雑な幾何学的 性質から全く判明していなかった。そこで本年度はこの錐面滑りを担う転位の構造と、その生成、 移動プロセスを解明することを目標として解析を行った。第一原理計算による解析の結果、錐面 上の転位線は平面的に拡張しているが、拡張面が折れ曲がって異なる錐面へと移動できることが 新たに判明した。これはこれまでの転位の常識に反する、六方晶金属特有の非常に特異な性質で ある。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

招待・基調講演

1) First-principles calculation of screw dislocation core in bcc iron Mitsuhiro Itakura,Hideo Kaburaki, Masatake Yamaguchi The 4th International Symposium on Steel Science (Nov 6, 2014, Kyoto, Japan).

2) マグネシウム<c+a>らせん転位の第一原理計算、板倉 充洋、山口 正剛、蕪木 英雄、都留 智 仁、日本金属学会 2014 年秋季講演大会(9月 26日、名古屋大学).

講演

3) Morphology of Pyramidal Screw Dislocations in Mg, Mitsuhiro Itakura, Hideo Kaburaki, Masatake Yamaguchi, Tomohito Tsuru, MRS 2014 Fall Meeting (Dec 3, 2014, Boston, USA).

共著論文

4) H. Somekawa, M. Yamaguchi, Y. Osawa, A. Singh, M. Itakura, T. Tsuru, T. Mukai, "Materials design for magnesium alloys with high deformability" Phil. Mag. 95 (2015): 869-885.

(4) 今後の利用予定:

これまでに得られた知見および計算の方法論を元に、原子炉圧力容器で脆化の原因となる銅や シリコンなどの元素と転位の相互作用、および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。



図1 (左)面心立方金属における4種類の最密充填滑り面 (右)六方晶金属における一種類の最密充填滑り面と六種類の非最密充填滑り面

5.19.10 bcc 遷移金属の低温における He 脆化傾向

He Embrittlement Tendency of BCC Transition Metals at Low Temperatures

鈴土知明シミュレーション技術開発室

(1)利用目的:

bcc 金属は fcc と比較して照射耐性が良好で、将来の核融合炉材料や次世代炉での応用が期待 されている。しかしながら、低温における照射脆性が問題となっており、その脆化の原因の一つ とされるのが粒界での He 偏析である。He はもともと金属に含まれていたものではないが、中 性子照射による核変換反応の一つである α 崩壊によって生じたものが金属内に蓄積されたもの である。He 原子は金属原子とは反発しあうため、比較的広い空間が存在する粒界や転位に偏析 する。He が粒界に面上に偏析すると、その粒界の強度が低下することがわかっている。

本研究では、異なった7種類のbcc遷移金属(V, Nb, Ta, Fe, Cr, Mo, W)において、Heの発生、拡散、粒界への偏析、粒界強度の低下を計算モデルによって予測し、どの金属が粒界強度低下の影響を最も大きく受けるかを明らかにする。

(2)利用内容·結果:

第一原理計算コード VASP を利用して、各金属中の格子定数とその結晶中での He の拡散の困難さの指標である移動エネルギーを求めた。結果を表1に示す。これらの結果によって、各金属で、任意の温度における He の拡散係数を求めることができる。

元素名	格子定数(Å)	移動エネルギー(eV)
V	3.003	0.10
Nb	3.320	0.08
Та	3.309	0.09
Fe	2.832	0.04
Cr	2.835	0.07
Mo	3.147	0.05
W	3.169	0.056

表1 第一原理計算によって得られた各金属結晶の格子定数と移動エネルギー

また、粒界に蓄積された He 量と粒界強度の関係は、粒界強度の指標の一つである粒界凝集エ ネルギーによって評価できる。Σ3(111)粒界に He 含ませた体系を第一原理計算することにより、 この凝集エネルギーを計算した。図1にその結果を示す。これにより任意の He 量に対して粒界 強度の計算が可能となった。



図1 粒界凝集エネルギー $2\gamma_{int}$ と粒界面での He 面密度 $c_g(\infty)$ の関係

以上の計算結果を利用して、将来建設が計画されている ITER 炉の第一壁条件下に1年間さら した場合の粒界強度低下を評価した。結果を図2に示す。



図2 ITER 第一壁条件での 23(111) 粒界の粒界凝集エネルギー

図からわかるように、すべての金属において低温で He によって粒界強度が弱くなることがわ かった。しかしながら、He 脆化が発生する温度やその程度は金属によってかなりばらつきがあ り、Fe、Cr、および Mo などについては He 脆化の影響を相対的に強くうけることがわかった。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- T. Suzudo, M. Yamaguchi, A. Hasegawa, "Stability and mobility of rhenium and osmium in tungsten: first principles study", Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 22 (2014) p. 075006.
- 2) T. Suzudo, Y. 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) p.085013.
- 3) K. Ebihara, T. Suzudo, M. Yamaguchi, Y. Nishiyama,"Introduction of vacancy drag effect to first-principles-based rate theory model for irradiation-induced grain-boundary phosphorus segregation", Journal of Nuclear Materials 440(1-3) (2013) p.627.
- 4) T. Suzudo, T. Tsuru, M. Yamaguchi, H. Kaburaki, "An atomistic modeling of He bubble stability at grain boundaries in alpha-Fe", Journal of Nuclear Materials 442, (2013) p.S655.
- 5) T. Suzudo, M. Yamaguchi, A. Hasegawa, "Migration of rhenium and osmium interstitials in tungsten", ICTP-IAEA Conference on Models and Data for Plasma-Material Interaction in Fusion Devices, Trieste, Italy, November 2014. (Invited)
- 6) 鈴土, 永井、"スピノーダル分解による Fe-Cr 系の硬化 -分子動力学法による解析"、東北大 学金研ワークショップ 仙台 (2014).
- T. Suzudo, Y. Nagai, D. Schwen, A. Caro, "Hardening in thermally-aged Fe-Cr binary alloys: Statistical parameters of atomistic configuration", Acta Materialia, 89 (2015) p.116.

(4) 今後の利用予定:

核融合炉のプラズマ対向材料として注目されているタングステン合金について、最適な溶質元素を探索するための基礎データとして、タングステン中の様々な金属原子の安定性や移動性を第 一原理計算によって評価する。

また、圧力容器鋼やステンレス鋼の脆化の原因とされる転位と溶質元素の相互作用を分子動力 学によって解析する。

5.19.11 GT5D コードの高度化

Development of GT5D Code

井戸村 泰宏、三木 一弘 高度計算機技術開発室

(1)利用目的:

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、京一般利用課題や IFERC プロジェク ト等における核融合プラズマ研究で使用されている第一原理プラズマ乱流コード GT5D の物理 モデルや計算モデルを高度化するために BX900 システムを利用した。

(2)利用内容·結果:

① 格子解像度の適応制御アルゴリズムの開発

GT5D コードによる数値実験では、プラズマ分布や乱流輸送の統計的状態が定常状態に収束す るまで特徴的な分布緩和時間(エネルギー閉じ込め時間)に及ぶ長時間スケールの数値実験を行 うことが必要となる。このような定常状態に至る時間発展は、特に ITER のような大型装置の計 算において膨大な計算コストを必要とするが、初期条件から定常状態に至る過渡的発展段階の乱 流データはそれほど重要でない場合が多い。この問題を解決するために、初期条件から乱流が発 展するまでの過渡的状態の計算に低い格子解像度の計算を適用し、プラズマ分布が定常状態に発 展してから物理的に要求される格子解像度まで格子解像度を段階的に精細化するような格子解 像度の適応制御機能を開発した。本機能を適用した数値実験を実施したところ、低解像度計算で 初期条件の温度分布が緩和し準定常状態に近い温度分布が短時間で得られることを確認した。し かしながら、低解像度計算の飽和状態から高解像度計算に移行するとより微細な乱流構造が励起 されて輸送レベルが変化し、温度分布が再びゆっくりと変化するため、定常状態に至るまで再び 長時間の計算が必要になることがわかった。以上の結果から、格子解像度の適応制御機能の効果 は限定的であることがわかった。

② GT5D における運動論的電子モデルの開発

GT5D コードでは電子に断熱近似を仮定し、イオンのみを運動論モデルで取り扱う計算モデル を採用し、これまでイオン系乱流におけるイオン熱輸送の研究を重点的に進めてきた。しかしな がら、核燃焼プラズマを対象として電子熱輸送や粒子輸送を含む包括的な数値実験を実現する上 で運動論的電子モデルの開発が必要となっているが、イオンの運動論モデルをそのまま電子に適 用するとイオンと電子の質量比の平方根だけ異なる熱速度を反映して計算コストが二桁程度増 大してしまう。この問題を解決するために、本研究ではトーラス外側の弱磁場側に捕捉される捕 提電子と磁力線に沿ってトーラスを周回する通過電子のうち、低周波の電子系乱流を励起する捕 提電子のみを運動論モデルで取り扱い、高速な通過電子を断熱応答で近似するハイブリッド電子 モデルを新たに開発することによって、比較的低い計算コストで電子の運動論的な応答を計算す ることに成功した。さらに、イオンと電子の衝突相互作用を昨年度に開発した異種粒子衝突演算 子によって実装することにより、イオン・電子系の衝突性輸送理論を高精度に再現した。以上の 開発によって GT5D コードによる電子系乱流の数値実験に必要な物理モデルの拡張を完了した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文

- 1) "Progress of full-f gyrokinetic simulation toward reactor relevant numerical experiments", Y. Idomura, M. Nakata, and S. Jolliet, Plasma Fusion Res. 9, 3503028 (2014).
- 2) "Exploring phase space turbulence in magnetic fusion plasmas", T.-H. Watanabe, Y. Idomura, S. Maeyama, M. Nakata, H. Sugama, M. Nunami, and A. Ishizawa, Journal of Physics: Conference Series 510, 012045 (2014).
- 3) "Finite-orbit-width effects on energetic-particle-induced geodesic acoustic mode", K. Miki and Y. Idomura, Plasma and Fusion Research, 10, 3403068(2015).

会議

- 4) "Interactions between neoclassical effects and turbulence in toroidal momentum transport, and comparison between flux driven and gradient driven simulations", Y. Idomura, 19th Joint EU-US Transport Task Force Meeting, September 8-11, 2014, Culham, UK (invited).
- 5) "Extreme scale fusion plasma simulations for ITER", Y. Idomura, Extreme Performance Computational Science French-Japanese Conference, 14 April 2014, Tokyo, Japan (oral).
- 6) "Extreme scale fusion plasma simulations for ITER", Y. Idomura, 2014 Smoky Mountains Computational Sciences and Engineering Conference and U.S./Japan Exascale Applications Workshop, 5-6 September, Gatlinburg, USA (oral).
- 7) "Isotope effects in ion temperature gradient driven turbulence", Y. Idomura, PLASMA Conference 2014, 18-21 November 2014, Niigata, Japan (oral).
- 8) "イオン温度勾配駆動乱流の装置サイズ・加熱パワー・同位体依存性"、井戸村泰宏、平成 26 年度閉じ込め・輸送研究会「高自律燃焼プラズマ中の輸送の理解に向けたトロイダルプ ラズマにおける閉じ込め・輸送の体系的研究」、2014 年 7 月 17 日~18 日、土岐(invited).

(4) 今後の利用予定:

今年度に開発したハイブリッド電子モデル、異種粒子衝突モデルを含むイオン・電子系の GT5D コードが完成したが、電子系の取り扱いによって従来のイオン系乱流に比べて一桁高い計 算コストが必要となっている。今後は「京」や機構新スパコン等のペタスケール計算機を活用し て電子系乱流の数値実験を実施し、粒子輸送、電子熱輸送等の解析を進める。

5.19.12 遠隔可視化システム PBVR の開発

Development of Remote Visualization System PBVR

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得られる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、処理時間の観点で非現実的な ものとなった。そこで、豊富な計算資源を持つ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可視化を行うクライアント/サーバ型可視化が重要視され ている。

しかし多くの商用可視化ソフトで採用されているクライアント/サーバ型可視化は、データの 大規模化に比例したポリゴン数の爆発と描画処理速度の低下により、視点の変更や時系列データ 探索、可視化パラメータの調整といった対話的処理が困難という問題がある。またデータサイズ の増大だけでなく、数値シミュレーションが高度化・複雑化することによって、解析に必要な変 量の数も増加している。しかし従来的なボリュームレンダリングは1変量のスカラー場しか可視 化できない。そこで多変量向けの汎用可視化機能が必要とされている。

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 クライアント/サーバ型可視化システムは、データ転送量の少ない、対話的な可視化が可能な可 視化システムである。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 子を生成す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という特徴が ある。この性質を利用して PBVR の処理過程をクライアントとサーバに分解し、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を開発 している。

昨年度は BX900 をサーバとして利用し、処理負荷の高いモンテカルロ計算で実行される粒子 生成の、超並列処理による高速化を行った。そして並列読み込みと動的負荷分散の効果により 1000 並列程度のストロングスケーリングを達成した。

本年度はクライアント/サーバ間における通信の枠組みと多変量可視化に適用可能な GUI の 開発を行い、BX900 を始めとする様々なスーパーコンピュータで大規模シミュレーションを行 うユーザに広く利用してもらうことを目的としてオープンソースコードとして公開した。このシ ステムは機構 Web ページ (http://ccse.jaea.go.jp/ja/download/software.html) からダウンロー ドし誰でも利用することができる。

(2)利用内容·結果:

開発した遠隔可視化システム PBVR はクロスプラットフォームで動作し、サーバで生成した 粒子データを逐次クライアントに転送することで自由な視点移動や時系列アニメーション、可視 化パラメータの調整が対話的に可能になる。サーバプログラムは BX900 の他にも京コンピュー タや FX10 等のスーパーコンピュータに対応している。クライアントプログラムは Win/Mac/Linux 環境の PC に対応しており、最大 60 [frame/sec]の描画速度を実現できる。これ らの環境は任意の組み合わせで ssh トンネルを経由したソケット通信で接続される。またクライ アント/サーバ型の対話処理だけでなく、サーバプログラムのバッチ処理やクライアントのスタ ンドアロン処理を動作環境に合わせて選択することができる。

加えて PBVR は高度な伝達関数設計機能を実装しており、ボリュームレンダリングだけでな く、等値面、断面、そして多変量データ解析にも対応している。従来のボリュームレンダリング では一種類の物理値(一変量)に対して伝達関数(色と不透明度の関数)を指定することで描画 の制御を行っていた。この技術を拡張した多次元伝達関数は、1次元伝達関数を演算子によって 合成することで、多変量間の相関の抽出やサーフェスの重畳を論理的に指定することが可能であ る。この GUI の使用例を図1に示す。GT5D (Gyrokinetic Toroidal 5 Dimensional Eulerian code)によるプラズマ乱流シミュレーションの結果データに対して、右上の伝達関数エディタに より磁場ポテンシャル・静電ポテンシャル・密度揺動の三変量に関する描画を制御し、左上のス クリーンに可視化結果を表示している。このように多次元伝達関数はユーザが観察すべき場所や 物理値の組み合わせを考慮した可視化が可能である。



図1 遠隔可視化システム PBVR の GUI

表1に商用可視化ソフト Ensight のクライアント・サーバモードによるボリュームレンダリ ングとの比較結果を示す。実験には GT5D データを使用し、実験環境として BX900 (XeonX5570、48 コア)と、帯域幅~3.4MB/s のイーサネットで接続されたクライアント PC (XeonE5+QuadroK5000)を用いた。画像が表示されるまでの時間(合計)について、PBVR は Ensight の約30倍高速で、描画速度はインタラクティブフレームレートを達成できた。また クライアント使用メモリについても PBVR が小さく、効率的な可視化システムだということが 確認された。

	PBVR	Ensight
フィルタ処理 [s/step]	0.7	-
画像生成処理 [s/step]	51.4	2072
データ転送 [s/step]	75.7	3073
合計 [s/step]	127.8	3873
描画速度 [frame/s]	60.0	2.7
クライアントメモリ使用量 [MB]	257	900

表1 全体性能の比較

(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(中村)浩子、今村俊幸、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」、システム制御情報学会論文誌、第28巻、第 5号、pp.221-227、2015年.
- 2) Takuma Kawamura, Yasuhiro Idomura, Hiroko Miyamura, Hiroshi Takemiya, Naohisa Sakamoto, Koji Koyamada, "Remote Visualization System based on Particle Based Volume Rendering", Proc. of SPIE-IS&T Electronic Imaging, Visualization and Data Analysis (VDA2015), San Francisco USA, February 8-12, 2015.

口頭発表

- 3) 河村拓馬、井戸村泰宏、宮村(中村)浩子、武宮博、"粒子ベースボリュームレンダリング を用いた大規模複雑流体データの遠隔可視化"、第26回 CCSE ワークショップ、(柏、日本、 2015年2月26日).
- 4) 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 を利用したマルチフィジックスデータ向け可視化のための高速な粒子生成手法"、日本原子 力学会 2015 年春の年会(日立、日本、2015年3月).

受賞

5) 日本原子力学会計算科学技術部会 部会奨励賞:河村拓馬,宮村(中村)浩子,井戸村泰宏, 今村俊幸、武宮博,「粒子ベースボリュームレンダリングによる京における大規模計算デー タの遠隔可視化」,原子力学会2014年秋の大会(京都、日本、2014年9月8-10日).

(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。

5.19.13 原子カプラントのための3次元仮想振動台の構築

R&D of 3D Vibration Simulator for Entire Nuclear Plant Facility

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、想定を超える規模の地震に対する解析機能を整備し、原子力施設全体の挙動 解析を実現することにより、原子力施設の耐震性評価に対する3次元仮想振動台の解析機能の有 用性を示すことにある。これにより、平成26年度計画「開発した弾塑性解析技術とデータ可視 化技術を用いて、新基準地震動レベルの入力を用いた原子力施設全体の弾塑性解析を行う」の達 成に資する。

(2)利用内容·結果:

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、観測記録や従来手法による計算結果との比較を実施。従来法では再現できなかった 観測記録の卓越振動数の再現に成功した。また、開発した弾塑性解析機能を用いて主要設備を含 む施設全体の挙動解析を実施し、施設全体規模での耐震解析を可能とした。作成したモデルや結 果は機構内施設の健全性評価の妥当性確認に活用されている。これらの成果により年度計画を達 成に導いた。

具体的には、

・計算対象として図1に示す機構内施設を設定し、地盤を含む3次元モデルを構築した。地震観 測記録と従来法、および、3次元モデルの結果を比較したところ、従来法では再現が困難な卓越 振動数を3次元モデルによりとらえることに成功した。3者の比較図を図2に示す。

・一方、膨大な時間を要する施設全体規模の弾塑性解析に対しては、2 段階解析手法を適用する こととし、全体弾性解析の結果に基づき、塑性化が予想される領域を部位単位で抽出し、弾塑性 解析を実施した。配管支持構造物、圧力容器部品等を対象に2 段階解析手法を適用した。圧力容 器配管部への適用例を図3に示す。全体弾塑性解析結果と比較したところ、2~3%の誤差の範囲 内で双方の結果が一致することを確認した。この2 段階解析手法を機構内施設に適用し、施設全 体の挙動解析を実施した。設備の一部が弾塑性化するレベルの入力波を作成し、解析を行った。 全体弾性解析により図4 に示すような複数箇所の塑性化領域を確認し、塑性化領域を対象に2 段階解析手法を適用することで、弾塑性解析を完了した。図5 に建屋および圧力容器の解析結果 を示す。







これらの成果により、平成26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:

 N. Nakajima, A. Nishida, Y. Kawakami, T. Okada, O. Tsuruta, K. Sawa, K. Iigaki, "Structural Analysis for Assembly by Integrating Parts," Proceedings of the 2014 22nd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE22), (Prague, Czech Republic, July 7-11, 2014).

口頭発表・講演等:

- 2) 西田明美、組立構造解析手法にもとづく原子力プラントの耐震シミュレーション(依頼講 演)、第58回構造力学コロキウム(大阪、日本、2014/10/3).
- 3) 中島憲宏、西田明美、川上義明、鶴田理、鈴木喜雄、「組立構造解析を用いた時刻歴応答解析」、原子力学会 2014 年秋の大会(京都、日本、2014 年 9 月 8-10 日).
- 4) 西田明美、高田毅士、村松健、「リスクマネジメント基盤技術としての地震リスク評価の信頼度向上に関する研究、(その8)建屋・地盤の感度検討」、原子力学会2014年秋の大会(京都、日本、2014年9月8-10日).
- 5) Akemi Nishida, Tsuyoshi Takada, Itoi Tatsuya, Osamu Furuya and Ken Muramatsu, "Study on Next Generation Seismic PRA Methodology, Part II: Quantifying Effects of Epistemic Uncertainty on Fragility Assessment," Probabilistic Safety Assessment and Management PSAM 12, (Honolulu, USA, June 22-27, 2014).

(4) 今後の利用予定:

原子力施設の耐震評価手法の高度化に資するため、耐震評価用3次元モデルの構築手法の整備 に着手する。まずは、モデル化因子が解析結果に与える影響を評価するための感度解析を実施し、 耐震評価を高精度化する上で重要となるモデル化因子を抽出する予定である。

5.19.14 観測地震波を用いた機器の地震応答解析

Seismic Response Analysis of Components using the Observed Seismic Waves

川上 義明、平方 淳子 高度計算機技術開発室

(1) 利用目的:

本解析の大目的は、HPCI 戦略プログラム 次世代ものづくり分野 4 課題 5 「原子力施設等の 大型プラントの次世代耐震シミュレーションに関する研究開発」に資するため、大型プラントの ものづくりで必要とされる、実験では不可能な詳細かつ一体的な耐震シミュレーション技術(丸 ごとシミュレーション技術)を研究開発し、開発した技術の機能確認と動作検証及び具体事例へ の適用実験を行うことにある。具体的には、本課題におけるプロダクションランの実施と大規模 プラントの高精度評価システムの研究開発のために、原子力機構で開発した構造物の有限要素解 析用ソフトウェア FIESTA を用いて並列処理による耐震計算を実施し、解析結果の妥当性を検 証する。

(2)利用内容•結果:

プラント等で用いられている立軸ポンプ構造情報をもとに立軸ポンプの3次元FEMモデルを 構築し、モデルの検証のための固有値解析、および、地震応答解析を実施した。地震応答解析の ための入力波は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とし、得られた 計算結果と市販ソフトウェアを用いた計算結果との比較検証を実施した。本年度は、ポンプのケ ーシング部を対象として比較検証を実施し、異なる解析コード間における計算結果の誤差評価を 実施し、誤差が非常に小さくほぼ同等の結果が得られていることを確認した。なお、本解析に用 いたモデル構築のための構造情報は、秘密保持契約を締結したうえで産業界より提供いただいた ものである。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

査読付き論文

1) Norihiro Nakajima, Akemi Nishida, Yoshiaki Kawakami, Tatsuo Okada, Osamu Tsuruta, Kazuhiro Sawa, and Kazuhiko Iigaki, Structural Analysis for Assembly by Integrating Parts, Proceedings of the 2014 22nd International Conference on Nuclear Engineering, ICONE22, Prague, Czech Republic, ICONE22 2014-30251, July 7-11, 2014.

 中島 憲宏,西田 明美,川上 義明,鈴木 喜雄,設計計算モデリングの動的支援技法,日本 機械学会第24回設計工学・システム部門講演会論文集,2420, pp.1-8, 2014.

講演・論文

- 3) 中島 憲宏,西田明美,川上義明,鶴田理,鈴木 喜雄,組立構造解析を用いた時刻歴応答 解析,日本原子力学会2014年度秋の年会,100183,2014.
- 4) 中島 憲宏, 西田 明美, 川上 義明, 岡田 達夫, 鶴田 理, 沢 和弘, 飯垣 和彦, 大型プラン トの次世代耐震シミュレーション, ターボ機械, 42(5), p.332 - 338, 2014.
- 5) 中島 憲宏, 西田 明美, 川上 義明, 鈴木 喜雄, 構造解析解の確かさ推定, 日本原子力学会 2014 年度春の年会, 100547, 2015.

プレス発表

6) スーパーコンピューター「京」で「骨組構造物」の健全性を分析 一組立構造解析により国 内外の耐震性の高いインフラ整備に貢献—, 2015.02.06

(4) 今後の利用予定:

今後、ポンプのケーシング部に機能部品を加えたポンプ全体の3次元詳細モデルを構築し、地 震応答解析を実施することで、同様の解析結果妥当性検証のためのデータを取得する予定であ る。

5.19.15 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。

システム計算科学センターでは、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 列処理化を行ってきた。並列処理化によって大規模シミュレーションを実行可能となったが、長 時間の大規模シミュレーションを実現するには単体性能の向上が不可欠である。今回は、ハード ウェアを意識した最適化を実施することで単体性能の向上を図る。具体的には、BX900 に搭載 されている Nehalem アーキテクチャ CPU の SSE 命令を使用して SIMD 演算を実装する。

(2)利用内容·結果:

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では計算量が多い行列ベクトル積を 計算する必要がある。行列ベクトル積を SIMD 演算で処理することで単体性能の向上を図る。

行列ベクトル積を SIMD 処理するためにはコンパイラが SSE 命令を出力するようにプログラ ムを書く必要がある。BX900 で利用できるインテルコンパイラには SSE 命令の生成を促すため の組み込み関数が用意されている。プログラムを組み込み関数で書き換えることで行列ベクトル 積の SIMD 処理を行う。

行列ベクトル積プログラムを組み込み関数によって書き換えたことで全命令数に対する SSE 命令の割合が 5.23%から 42.21%に向上した。全命令に対する SSE 命令の割合が向上したことで 行列ベクトル積が SIMD 演算で処理されるようになり、処理時間が 11.49 秒から 10.45 秒に短縮され単体性能が向上した。

(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:

平成 26 年度に行った作業は BX900 に搭載されている Nehalem アーキテクチャのプロセッサ に最適化されている。平成 27 年に導入予定のスーパーコンピュータシステムに搭載されるプロ セッサのアーキテクチャに対応した最適化を行う。

5.19.16 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 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こと を目的に、原子力施設の耐震シミュレーションの研究開発を行っている。

具体的には、安全かつ効率的な原子力施設の耐震性評価の高度化に向けて、機器の詳細な挙動 を把握するために、地盤・建屋・機器(簡易モデル)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(詳細モデル)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を構築するとともに、 シミュレーションにおけるモデル化に含まれる不確かさの定量評価を行い、不確かさの低減を図 る。原子力施設として、高温工学試験研究炉(HTTR)を対象としている。

(2)利用内容·結果:

地盤・建屋・機器統合構造シミュレーション(以降、①)では、地盤と建屋にはソリッド要素と シェル要素を用い、機器にはビーム要素を用いて、これらを一体のモデルとしたシミュレーショ ンを実施している。部品→機器組立構造シミュレーション(以降、②)では、各部品をソリッド 要素で作成し、多点拘束法の自由度消去法と呼ばれる方法を用いて各部品を接合することでシミ ュレーションを実施している。部品分割は、材料物性、メッシュ生成可能な形状の制約、BX900 のコアあたりのメモリ量制限等により決定されている。第一期中期計画では、②のシミュレーシ ョンにおいて、入力地震動の値を機器に直接負荷していたが、①のシミュレーションの解放基盤 面に入力地震動を与え、シミュレーション結果から機器支持部の変位情報を取得して、②のシミ ュレーションの機器支持部に負荷することでより実際の機器の挙動に近づけることを考えた。こ のフレームワークの実現と、モデル化に含まれる不確かさの低減に向け、これまでに、以下の成 果を得た。

・①と②のシミュレーションの結果を比較し、②のシミュレーションモデルを改善することで、より一致する結果を得ることができた。モデルの改善として、機器支持部部品のモデル化の修正、各部品のメッシュの修正を行った。機器支持部部品のモデル化の修正については、支持部部品をソリッド要素とバネ要素でモデル化した場合とソリッド要素のみでモデル化した場合を比較し、後者の方がより一致することを確認した。各部品のメッシュの修正については、部品間の接合が正しく認識されていない場所が存在することにより、過大な変位が出ていることを確認し、正しく認識されるようメッシュを修正した。このため、部品の接合状態をリスト化するツールを開発し、本来接合すべき部品同士が接合しているか否かをチェ

ックすることで、修正できたかどうかを確認した。

- ・本シミュレーションで用いている部品同士を接合する方法(多点拘束法の自由度消去法)では、接合する部品間で主従(master-slave)関係が存在するが、この関係を正しく設定しないと、部品間の接合面における応力が過大になるとともに、ASME V&V 20等で採用されている GCI (Grid Convergence Index)法により評価される不確かさも大きくなる場合があることを定量的に示した。本シミュレーションでは、複数の部品が複雑に接合されるが、全ての接合面における主従関係(以降、組立順序)が正しく設定される必要がある。そのため、この組立順序を自動的に最適化するツールを開発し、本ツールを適用する前後の結果を比較することにより、結果が改善されることを確認した。
- 機器支持部の動的弾塑性シミュレーションを実施し、GCI法を用いて変位や荷重に関する不確かさを評価するとともに、実験結果と比較することで、シミュレーションコードの弾塑性機能の検証と妥当性確認を行った。
- ・ 上記により得られた知見を用いて、BX900のメモリサイズの範囲内で計算可能なシミュレーションとして、基準地震動を入力地震動とし、圧力容器と主冷却設備(それぞれ 984 部品、635 部品で構成)の動的弾性シミュレーションを実施し、各部品における地震動 t=0~17 秒の間の相当応力の最大値が降伏応力をどの程度下回るかを定量的に求めた。
- BX900のメモリサイズの範囲内で計算可能なシミュレーションとして、基準地震動の3倍を入力地震動とした、一次加圧水冷却器の動的弾塑性シミュレーションを実施し、動的弾性シミュレーションの結果と比較することで、塑性の効果を評価した。弾塑性の場合、弾性の場合よりもメモリを要するため、シミュレーションの対象機器を小さくした。1024部品で構成しており、1部品あたり4コア分のメモリを要したため4096並列で計算を行った。基準地震動を3倍にした場合、弾性シミュレーションでは降伏応力を上回る相当応力を持つ部品がいくつか見られた。一方、弾塑性シミュレーションでは、これら降伏応力を上回る部品において、塑性効果により応力の増加が抑制され、降伏応力と同程度までしか増加しない。動的弾性シミュレーションは、Δt=0.01で実施しているが、動的弾塑性シミュレーションは、Δt=0.01で実施している。これまで実施してきたシミュレーションモデルの改善や組立順序の設定を、適切に実施してきたことにより、動的弾塑性シミュレーションにおいて、解が収束するようになり、これらの結果を得ることができた。
- メッシュサイズを小さくした場合にシミュレーション結果がどのように収束するかを調べ、 不確かさを評価する一助とするため、BX900のメモリサイズの範囲内で計算可能なシミュレ ーションとして、一次加圧水冷却器を対象に、これまで用いてきたメッシュをそのまま用い た動的弾性シミュレーション(メッシュ数1倍のケース)と、1次元方向にメッシュ数をそ れぞれ2倍(メッシュサイズをそれぞれ1/2倍)することで全体のメッシュ数を8倍にした 動的弾性シミュレーション(メッシュ数8倍のケース)を実施した。その結果、メッシュサ イズを小さくした場合においても、各部品における相当応力の最大値が降伏応力を超えない ことを確認した。

これらの成果により、地盤・建屋・機器(簡易モデル)統合構造シミュレーションの結果から荷 重情報を取得し、その情報を入力として、部品から機器(詳細モデル)の組立構造シミュレーシ ョンを行うことで、機器の挙動解析を行えることを確認することができ、これを以ってフレーム ワークの構築を完了した。また、シミュレーションにおけるモデル化に含まれる不確かさの定量 評価として、組立順序に起因するものが応力の不確かさを大きくする場合があることを明らかに し、これを低減する手法を見出した。

本研究は、大洗研究開発センター高温工学試験研究炉部の支援を受けております。ここに、感謝の意を表します。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文

- 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) Norihiro Nakajima, Akemi Nishida, Yoshiaki Kawakami, Yoshio Suzuki, Keisuke Matsukawa, Masami Oshima and Hisao Izuchi, "Time Domain Response Analysis for Assembly by Integrating Components," SMiRT23 (Manchester, UK, 10-14 August 2015).

口頭発表

- 3) 鈴木 喜雄, JAEA 課題 5 メンバ, 「原子力施設における計測データ」計算科学セミナー(千葉、日本、2014 年 6 月 30 日).
- 4) 鈴木 喜雄, JAEA 課題 5 メンバ,「原子力施設における計測データ(2)」計算科学セミナー(千葉、日本、2014 年 8 月 7 日).
- 5) 宮村(中村) 浩子、河村 拓馬、鈴木 喜雄、井戸村 泰宏、武宮 博、「大規模科学的データ 解析のための情報可視化」、日本機械学会 第27回計算力学講演会(CMD2014)(盛岡、 日本、2014年11月22日~24日).
- 6) 鈴木 喜雄,「原子力施設の耐震シミュレーションの V&V に向けた観測データの取り扱い」 HPCI 戦略プログラム分野 4 次世代ものづくり統合ワークショップ(東京、日本、2015 年 3 月 11 日).
- 7) 鈴木 喜雄,川上 義明,中島 憲宏,「原子力施設の耐震シミュレーションの V&V に向けた 観測データの取り扱い」 日本原子力学会 2015 年春の年会(日立、日本、2015 年 3 月 20 日~22 日).
- 8) 中島 憲宏, 西田 明美, 川上 義明, 鈴木 喜雄, 「構造解析解の確かさ推定」 日本原子力学 会 2015 年春の年会(日立、日本、2015 年 3 月 20 日~22 日).

(4) 今後の利用予定:

平成 27 年度は、第3期中期計画の達成に向け、原子力施設の振動挙動のシミュレーションの 検証と妥当性確認に関する技術開発を行う。このため引き続きスパコンを利用していく必要があ る。

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状況が続 いている。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きた。平成27年3 月にはその開札が行われ、日本SGI(株)の提案した総理論演算性能が約2,400TFLOPS(現シ ステムの約12倍)のクラスターシステムの導入が決定した。平成27年11月からの運用開始を 予定している。

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26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 27 年 9 月

編集ワーキンググループ

リーダー:清水 大志スタッフ: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			FX10 [*]	
	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)	バッチ 処理 件数	コア 時間 (h)
4月	13,960	5,117	11,162,923	500	123	723,441		
5月	11,231	5,178	11,718,227	467	87	839,687		
6月	15,532	4,806	11,326,269	270	82	368,318	363	818,911
7月	7,668	2,642	2,153,310				1,571	1,375,497
8月	8,275	3,717	4,020,850				1,122	2,041,060
9月	9,019	3,890	3,811,341				2,020	2,677,800
10 月	12,621	4,475	3,787,274				1,923	1,750,587
11 月	9,684	4,190	3,880,050				1,467	3,556,827
12 月	10,966	4,801	3,974,346				2,505	5,972,333
1月	12,245	4,310	3,744,236				2,493	6,473,842
2月	10,139	4,049	3,847,529				2,359	4,031,864
3月	9,46	4,301	4,259,537				1,849	4,063,169
合計	130,805	51,476	67,685,892	1,237	292	1,931,446	17,672	32,761,890

表 A.1 平成 26 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

※東京大学スーパーコンピュータシステム

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	27	4	1	0	5	7	13	57
5月	39	1	0	0	8	3	10	61
6月	30	2	9	0	8	9	8	66
7月	26	0	5	0	10	6	14	61
8月	25	0	0	0	3	3	14	45
9月	20	0	2	0	4	0	12	38
10 月	27	0	4	0	6	0	14	51
11 月	29	0	4	0	8	2	4	47
12 月	29	0	1	2	4	4	9	49
1月	28	1	0	0	0	3	21	53
2 月	43	0	6	0	3	2	18	72
3月	41	0	2	0	3	2	11	59
合計	364	8	34	2	62	41	148	659

表 B.1 平成 26 年度利用相談件数(可視化を除く)

表 B.2 平成 26 年度可視化相談件数

1.	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(75件)		
2	PC 版 MicroAVS インストール支援(30 件)		
3	PC 版 AVS/Express インストール支援(5 件)		

2. 可視化ツール提供等

- ① 大規模データ対応 AVS→EnSight データ変換ツールの作成
- ② Micro AVS 用フィルタツール(対数化機能等)の作成

著者名別 論文索引

A-Z

Gu,Bo118
James, Koga143
Mihalache, Ovidiu ·····173
Xu,Zhuo

あ

安部	諭
阿部	陽介
天野	健治179

い

池田	隆司126	기
池部	仁善129	奥
石川	正男36	기
石黒	裕大	Z
石﨑	梓	
石田	真也168	
石田	恒132	
板倉	充洋	J
伊藤	啓160	ŶĒ
伊藤	崇芳	ŶĒ
井戸村	す 泰宏	
伊奈	拓也	
稲村	泰弘	索
今井	康友151, 154	束
伊巻	正148	束
岩瀬	広	
岩元	大樹60	
岩元	洋介	具

	う
内堀	昭寛
	え
江口	悠太

お

大泉	昭人
大下	英敏
太田	幸宏
大友	季哉148
大西	弘明118
小川	達彦
奥村	雅彦
小田	哲三
乙部	智仁137

か

川上	義明
河村	拓馬
河村	拓己160

き

菊池	圭一
菊地	晋
菊地	紀宏

	<
黒崎	譲135



た

高瀬	和之
高橋	一彦168
高橋	幸司34
高屋	茂157
竹内	正樹
田近	和雄60,76
田中	正暁

高瀬	和之
高橋	一彦
高橋	幸司······34
高屋	茂157
竹内	正樹
武田	和雄60,76
田中	正暁157

L

ح

河野

樹神

後藤

小林

小林

米田 菰田

作花 櫻井

櫻庭

佐竹 佐藤

佐藤

佐藤 佐藤 秀俊……129

克明………148

恵太………196

孝徳………62

宏……166

拓………104

信一……109

さ

篠原	孝司
柴田	光彦104
嶋田	恭彦
清水	大志179
社本	真一148
焦 利	」芳

す

杉本	貴則118
鈴木	貴行
鈴木	知史
鈴木	喜雄
鈴土	知明

っ

τ

寺田	敦彦	181
----	----	-----

と

堂田	哲広
栃尾	大輔

都留

鶴岡

み

三木	一乱	210
水野	正弘	168

む

村松	壽晴	76
1 1 1 1 1 1 1 1	H4 (1) T	• •

Ł

森	道康
守田	利昌140
森林	健悟123

ф

谷塚	英一
山口	正剛194
山口	充孝
山下	晋
山田	進
山田	武
山野	秀将

よ

横田	光史
横山	啓一62
吉氏	崇浩
吉田	啓之

わ

和田	明
渡辺	正

な

永井	晴康67
永井	佑紀188
長尾	悠人121
永武	拓
中谷	健148
中村	剛実
中村	秀夫
中村	博樹183
中山	浩成65

に

仁井田	1 浩二	76
西田	明美	15

は

橋本	慎太郎	6, 79
1164 . 1		0, .0

ひ

平方	淳子	 ·····218
1 / 2		

ş

深谷	裕司114
福島	昌宏
古野	朗子

ま

町田	昌彦
松田	規宏
松本	淳132
丸山	修平166

This is a blank page.

表 1. SI 基本単位				
II 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	А		
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. 基本単位を用いて表されるSI組立単位の例				
_{知立} SI 組立単位	SI 組立単位			
和立里 名称	記号			
面 積 平方メートル	m ²			
体 積 立方メートル	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	ν 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	\mathcal{N} 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 キログラム毎立方メート	ル kg/m ³			
輝 度 カンデラ毎平方メート	ν 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 concentration) は臨床化学の分野では物質濃度				

(substance concentration)ともよばれる。
 (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 組立単位			
組立量	名称	記号	他のSI単位による	SI基本単位による
		10.0	表し方	表し方
平 面 角	ラジアン ^(b)	rad	1 ^(b)	m/m
立 体 角	ステラジアン ^(b)	$sr^{(c)}$	1 ^(b)	m^2/m^2
周 波 数	ヘルツ ^(d)	Hz		s ⁻¹
力	ニュートン	Ν		m kg s ⁻²
E 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, 放射束	ワット	W	J/s	m ² kg s ⁻³
電荷,電気量	クーロン	С		s A
電位差(電圧),起電力	ボルト	V	W/A	$m^2 kg s^{-3} A^{-1}$
静電容量	ファラド	F	C/V	$m^{-2} kg^{-1} s^4 A^2$
電気抵抗	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	$m^{-2} kg^{-1} s^3 A^2$
磁東	ウエーバ	Wb	Vs	$m^2 kg s^2 A^{-1}$
磁 束 密 度	テスラ	Т	Wb/m ²	$kg s^{-2} A^{-1}$
インダクタンス	ヘンリー	Н	Wb/A	$m^2 kg s^{-2} A^{-2}$
セルシウス温度	セルシウス度 ^(e)	°C		K
光東	ルーメン	lm	cd sr ^(c)	cd
照度	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,	ガレイ	Gy	J/kg	m ² e ⁻²
カーマ	, , , , , , , , , , , , , , , , , , ,	Gy	ong	
線量当量,周辺線量当量,	2 ((g)	Su	I/lrg	2 -2
方向性線量当量,個人線量当量		30	o/kg	III S
酸素活性	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。
 (c)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。
 (d)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。
 (e)セン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
 (d)ペルジ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。
 (e)センシウス度はケルビンの特別な名称で、1、通道を表すために使用される。で本シウス度とケルビンの
 (f)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勧告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

	SI 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	コ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 s A
表 面 電 荷	「クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ² s A
電 束 密 度 , 電 気 変 位	クーロン毎平方メートル	C/m ²	$m^2 s A$
誘 電 卒	コァラド毎メートル	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 s A
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
酵素活性濃度	カタール毎立方メートル	kat/m ³	$m^{-3} s^{-1} mol$

表 5. SI 接頭語					
乗数	名称	記号	乗数	名称	記号
10^{24}	э 9	Y	10 ⁻¹	デシ	d
10^{21}	ゼタ	Z	10 ⁻²	センチ	с
10^{18}	エクサ	Е	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	М	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=60 s		
時	h	1 h =60 min=3600 s		
日	d	1 d=24 h=86 400 s		
度	•	1°=(π/180) rad		
分	,	1'=(1/60)°=(π/10 800) rad		
秒	"	1"=(1/60)'=(π/648 000) rad		
ヘクタール	ha	1 ha=1 hm ² =10 ⁴ m ²		
リットル	L, 1	1 L=1 l=1 dm ³ =10 ³ cm ³ =10 ⁻³ m ³		
トン	t	$1 t=10^3 kg$		

表7. SIに属さないが、SIと併用される単位で、SI単位で

表される数値が実験的に得られるもの				
名称	記号	SI 単位で表される数値		
電子ボルト	eV	1 eV=1.602 176 53(14)×10 ⁻¹⁹ J		
ダルトン	Da	1 Da=1.660 538 86(28)×10 ^{·27} kg		
統一原子質量単位	u	1 u=1 Da		
天 文 単 位	ua	1 ua=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=100 kPa=10 ⁵ Pa
水銀柱ミリメートル	mmHg	1 mmHg≈133.322Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1nm=100pm=10 ⁻¹⁰ m
海 里	М	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	の単位しの教徒的な問題は
ベル	В	31単位との数値的な関係は、 対数量の定義に依存。
デシベル	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	$1 \text{ St} = 1 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1} = 10^{-4} \text{m}^2 \text{ s}^{-1}$	
スチルブ	$^{\mathrm{sb}}$	$1 \text{ sb} = 1 \text{ cd cm}^{-2} = 10^4 \text{ cd m}^{-2}$	
フォト	ph	1 ph=1cd sr cm ⁻² =10 ⁴ lx	
ガ ル	Gal	1 Gal =1cm s ⁻² =10 ⁻² ms ⁻²	
マクスウエル	Mx	$1 \text{ Mx} = 1 \text{ G cm}^2 = 10^{-8} \text{Wb}$	
ガウス	G	$1 \text{ G} = 1 \text{Mx cm}^{-2} = 10^{-4} \text{T}$	
エルステッド ^(a)	Oe	1 Oe ≙ (10 ³ /4 π)A m ⁻¹	
(a) 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						
	4	名利	5		記号	SI 単位で表される数値
キ	ユ		IJ	-	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq
$\scriptstyle u$	\sim	ŀ	ゲ	\sim	R	$1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{C/kg}$
ラ				ĸ	rad	1 rad=1cGy=10 ⁻² Gy
$\scriptstyle u$				ム	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv
ガ		$\boldsymbol{\mathcal{V}}$		7	γ	$1 \gamma = 1 \text{ nT} = 10^{-9} \text{T}$
フ	T.		N	Ξ		1フェルミ=1 fm=10 ⁻¹⁵ m
メー	ートル	/系	カラゞ	ット		1 メートル系カラット= 0.2 g = 2×10 ⁻⁴ kg
ŀ				N	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標	準	大	気	圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
力			IJ	-	cal	1 cal=4.1858J(「15℃」カロリー), 4.1868J (「IT」カロリー), 4.184J(「熱化学」カロリー)
3	ク			~	ц	$1 \mu = 1 \mu m = 10^{-6} m$