JAEA-Review 2016-024 DOI:10.11484/jaea-review-2016-024



## 平成 27 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 FY2015 (April 1, 2015 – March 31, 2016)

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

KEVIEN

January 2017

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, 2017

#### 平成 27 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

#### (2016年9月21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いる。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 27 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 FY2015 (April 1, 2015 – March 31, 2016)

#### 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 21, 2016)

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 FY2015, 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 FY2015, 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	
2.	原子力機構	<b>構</b> の大型計算機システム環境4
	2.1 大型	2計算機システムの更新4
	2.1.1	計算需要4
	2.2 平原	戈 27 年度のシステム構成
	2.2.1	旧システムの構成5
	2.2.2	新システムの構成6
3.	平成 27 年	度における計算機利用実績8
	3.1 シス	ステム稼働率・利用率
	3.2 大型	型計算機システムの組織別利用実績9
4.	大型計算樹	幾システムの利用支援12
	4.1 計算	<sup>〔</sup> 機利用における支援13
	4.1.1	利用相談13
	4.1.2	プログラム開発整備13
	4.1.3	プログラム最適化チューニング16
	4.2 計算	章機利用技術の向上に向けた教育(講習会・セミナー)19
5.	大型計算構	幾システム利用による研究成果20
	5.1 安全	と研究・防災支援部門 安全研究センター20
	5.1.1	航空機モニタリングにおける地上からのガンマ線フラックス計算結果の比較20
	5.1.2	水素静的触媒式再結合器(PAR)の作動を伴う大規模空間内数値流体解析22
	5.1.3	OpenFOAM による二相流ジェットの検討解析25
	5.2 核不	「拡散・核セキュリティ総合支援センター27
	5.2.1	モンテカルロコードを用いた遅発ガンマ線分光法のためのデータベースの開
		発とシステム評価
	5.3 核鬲	融合研究開発部門 那珂核融合研究所31
	5.3.1	外部磁場による Locked Mode 能動制御の MHD シミュレーション
	5.3.2	JT-60Uにおける慣性力を通じたプラズマ回転の熱輸送への影響34
	5.3.3	汎用型充填体内粒子識別コードの開発整備
	5.3.4	ITER/TBM ポートセルの遮蔽解析

5.3.5	ITER マイクロフィションチャンバーの詳細設計のための核解析	42
5.3.6	ITER 用周辺トムソン散乱計測装置の集光光学システムの遮蔽設計のための相	亥
	解析	45
5.3.7	日本が調達する ITER 計測機器の詳細設計のための核解析	48
5.4 核	融合研究開発部門 六ヶ所核融合研究所	51
5.4.1	周辺/内部輸送障壁の形成/崩壊モデルの確度向上のための乱流輸送シミュレー	-
	ション研究に向けた数値コードの ICE X における性能調査	51
5.4.2	高エネルギー粒子・MHD 連結モデルに基づくトカマクプラズマの電磁流体不	F
	安定性の線形安定性解析手法の開発	54
5.4.3	トカマク周辺 MHD 安定性の抑制・小振幅化に向けた理論・シミュレーション	/
	研究	57
5.4.4	拡張された運動論的 MHD モデルに基づく RWM 安定性の数値解析	59
5.5 原	子力科学研究部門 J-PARC センター	61
5.5.1	高エネルギー中性子対応ボナー検出器の検出器応答計算	61
5.5.2	ADS ターゲット実験施設の溶融鉛ビスマスターゲット流動解析	63
馬口 百	ユカ利受研究如明 百乙カテラルゼー甘般連携センター	<u>cc</u>
5.0 床		00 
5.0.1	口形配書的の示案の不準動シミュレーション	00
5.7 原	〔子力科学研究部門 原子力科学研究所	69
5.7.1	FCA 燃料貯蔵庫における核燃料輸送物及び収納容器混在時の臨界性評価	69
5.7.2	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	72
5.7.3	加速器 BNCT 施設の遮蔽設計計算	73
5.8 原	子力科学研究部門 原子力基礎工学研究センター	75
5.8.1	PHITS ユーザー入力支援ソフトウェア PHACE の開発	75
5.8.2	PHITS 出力ファイルの統合機能の開発	78
5.8.3	PHITS の阻止能計算モデル ATIMA の高速化	81
5.8.4	PHITS の高速化及び省メモリ化	84
5.8.5	環境放射性核種からの外部被ばく線量換算係数の評価	86
5.8.6	汎用核共鳴蛍光散乱モデルの開発	89
5.8.7	福島第一原子力発電所から放出された放射性物質の北半球規模の移行挙動解	
	析	92
5.8.8	局所域高分解能大気拡散予測モデルの開発に向けて	94

5.8.9	FNDI 法を用いた燃料デブリ計測に関する解析	97
5.8.10	X線分光法と計算科学によるセシウムの評価	99
5.8.11	過酷事象を含めた原子炉多相熱流動解析手法の開発(1)	102
5.8.12	過酷事象を含めた原子炉多相熱流動解析手法の開発(2)	105
5.8.13	燃料溶融解析コード POPCORN の並列化	108
5.8.14	界面追跡法に基づく混相流解析手法開発	110
5.8.15	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	114
5.8.16	合金化と組織制御のための原子・電子シミュレーション	117
5.8.17	CIELO プロジェクトにおいて再評価された <sup>235</sup> U 核データに対する FCA	
	XXVII-1 炉心におけるナトリウムボイド反応度価値実験を用いたベンチマー	-
	クテスト	120
5.9 原子	~力科学研究部門 高温ガス炉水素・熱利用研究センター	123
5.9.1	FORNAX-A の応用	123
5.9.2	商用高温ガス炉の黒鉛構造物に含まれる不純物の燃焼特性と臨界性の研究	126
5.9.3	FLUENT:福島原発汚染水処理関連の解析	129
5.10 原子	ムカ科学研究部門 先端基礎研究センター	131
5.10.1	大規模殻模型計算による軽い中性子過剰核のベータ崩壊の記述	131
5.10.2	中性子散乱データの3次元画像化プログラム「Neudift」の機能拡張	134
5.10.3	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	136
5.11 原子	个力科学研究部門 高崎量子応用研究所	139
5.11.1	炭素線治療におけるビーム上ガス領域検出手法のシミュレーション	139
5.11.2	超小型サイクロトロンの放射化量に関する計算	141
5.12 原子	ムカ科学研究部門 量子ビーム応用研究センター	144
5.12.1	磁区構造形成シミュレーションプログラム	144
5.13 原子	ムカ科学研究部門 量子ビーム応用研究センター	146
5.13.1	積算線量計を用いた樹木内放射能簡易測定技術の開発	146
5.13.2	大型生体高分子の構造、ダイナミクス解析のためのシミュレーション技術の	開
	発とその実行	148
5.13.3	放射線影響に対処する大型生体高分子の機能発現メカニズム解析	151
5.13.4	スポーク空洞製作のための設計計算	154
5.13.5	フェムト秒レーザーパルス列により生じる回転励起準位の解析	157

5.13.6	レーザーによる固体へのダメージ及び加工過程解明のための第一原理シミュ	1.00
		160
5.13.7	薄膜ターケットを用いたレーサーイオン加速ンミュレーション	163
5.13.8		166
5.13.9	EUV 波長領域自田電子レーサーバルスの高密度気体試料伝搬の数値計算	168
5.13.10	第一原理分子動力学法に基ついた化学反応のシミュレーション	171
5.13.11	放射線による DNA 損傷の埋論的研究	173
5.14 高速	東炉研究開発部門 次世代高速炉サイクル研究開発センター	175
5.14.1	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	175
5.14.2	高速炉ガス巻込み現象を解析できる高精度気液二相流数値解析コードの開発	
	と検証	178
5.14.3	高速炉大型燃料集合体内流動解析	181
5.14.4	先進ループ型ナトリウム冷却高速炉の高温側1次主冷却系統合解析	184
5.14.5	連続エネルギーモンテカルロコード MVP を使用した高速炉金属燃料炉心の	亥
	特性の解析	187
5.14.6	次世代ナトリウム冷却高速炉コールドレグ配管を模擬した 1/7 縮尺トリプル	/
	エルボ配管流れ実験の数値シミュレーション	189
5.15 高速	東炉研究開発部門 もんじゅ運営計画・研究開発センター	191
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	191
5.16 敦貧	貿事業本部 敦賀連携推進センター	194
5.16.1	SPLICE コードによるレーザー溶断挙動の解析	194
5.17 バッ	ックエンド研究開発部門 地層処分研究開発推進部	197
5.17.1	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	$\supset$
	高速化・並列化(平成 27 年度)	197
5.18 福島	島研究開発部門 福島環境安全センター	199
5.18.1	Uncontaminated Effect:放射性セシウムが沈着していない領域が存在する	2
	とによる線量低減効果	199
5.19 シン	ステム計算科学センター	202
5.19.1	福島第一原子力発電所港湾内の流動場シミュレーション	202
5.19.2	転位と溶質元素の第一原理計算	205

	5.19.3	自己無撞着場によるトポロジカル超伝導体の核磁気緩和率計算	207
	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	209
	5.19.5	スパコンで予測する環境中空間線量率分布	212
	5.19.6	第一原理計算による原子力材料劣化機構の研究	215
	5.19.7	高温水中の有機反応に関する第一原理シミュレーション	217
	5.19.8	原子・分子シミュレーションによる核燃料の物性評価	219
	5.19.9	原子力分野における機能材料開発に資するマルチスケール・マルチフィジッ	ック
		スシミュレーションの基盤構築	221
	5.19.10	照射材料の微細構造発達シミュレーションのための第一原理計算	225
	5.19.11	電子状態計算による有機低分子のセシウム吸着サイト全探索	227
	5.19.12	核融合プラズマ閉じ込め特性の水素同位体効果	230
	5.19.13	電子温度勾配駆動乱流における自己組織化のプラズマパラメータ依存性	233
	5.19.14	組立構造物シミュレーション結果の分散並列可視化	236
	5.19.15	原子力プラントのための3次元仮想振動台の構築	239
	5.19.16	電子熱輸送および粒子輸送における非捕捉電子の影響	242
	5.19.17	多次元伝達関数による多変量ボリュームレンダリング	245
	5.19.18	圧縮対角格納形式の適用による多相流体コードの高速化	248
	5.19.19	原子力施設の耐震シミュレーション結果の可視化のための商用可視化ソフ	F
		ウェアの調査	251
6.	おわりに		254
付	録		255
著者	皆名別 論	文索引	257

## Contents

1.	Intro	oduct	ion	.1	
2.	Supe	ercon	nputer System of JAEA	.4	
	2.1	Ren	newal of Supercomputer System of JAEA	.4	
	2.1	.1	Demand for Computational Resource	.4	
	2.2	Cor	figuration of Supercomputer System in FY2015	.5	
	2.2	.1	Configuration of Old Supercomputer System	.5	
	2.2	.2	Configuration of New Supercomputer System	.6	
3.	Com	pute	r Usage Records in FY2015	.8	
	3.1	Ava	ilability and Utilization Rate	.8	
	3.2	Sec	tor Computer Time	.9	
4.	User	Sup	port of Supercomputer System of JAEA	2	
	4.1	Sup	oport for the Use of Supercomputer System of JAEA	.3	
	4.1	.1	Help Desk	.3	
	4.1	.2	Program Development and Maintenance	.3	
	4.1	.3	Program Optimization Tuning	6	
	4.2	Tra	ining for Computer Usage Techniques (Tutorials, Seminars)	9	
5.	Research and Development Activity by using Supercomputer System of JAEA20				
	5.1	Sec	tor of Nuclear Safety Research and Emergency Preparedness		
		Nuc	clear Safety Research Center	20	
	5.1	.1	Comparison between Calculated Results of Gamma Ray Flux in Airborne		
			Radiation Monitoring	20	
	5.1	.2	CFD Analysis in Large Volume with Activation of PAR (Passive		
			Autocatalytic Recombiner) for Hydrogen	22	
	5.1	.3	Numerical Analyses and Investigations of Two-Phase Flow Jet by using		
			OpenFOAM	25	
	5.2	Inte	egrated Support Center for Nuclear Nonproliferation and Nuclear Security2	27	
	5.2	.1	Database Development and System Evaluation using Monte Carlo Codes		
			for Delayed Gamma Ray Spectroscopy	27	

5.3	Sec	ctor of Fusion Research and Development
	Na	ka Fusion Institute
5.3	8.1	MHD Simulation of Locked Mode and Its Active Stabilization Scheme by External Field Effects
5.3	8.2	Effects of Plasma Rotation on Heat Transport Via Inertial Forces in JT-60U
5.3	8.3	Development of Reassembly System for Pebble Bed Structure
5.3	8.4	Shielding Analysis of ITER/TBM Port Cell
5.3	8.5	Neutronic Analysis for Detailed Design of the ITER Micro Fission Chamber System
5.3	8.6	Neutronic Analysis for Radiation Shield of the Collection Optics of ITER Edge Thomson Scattering System
5.3	8.7	Neutronic Analysis for Detail Design of Diagnostics Procured by Japan48
5.4	Sec	ctor of Fusion Research and Development
	Rol	xkasho Fusion Institute
5.4	.1	Benchmark of Turbulence Codes for Simulation Study of ITB / ETB
		Formation / Collapse for Improvement of Turbulent Transport Models on ICE X
5.4	ł.2	Development of Linear Stability Analysis Code for Magnetohydrodynamic Instabilities in Tokamak Plasmas using Energetic Particle + MHD Hybrid Model
5.4	1.3	Simulation Study of MHD Stability at Tokamak Edge Pedestal for
		Suppression/Mitigating Edge Localized Modes
5.4	1.4	Numerical Analysis of RWM Stability Based on Extended Kinetic MHD Model
5.5	Sec	etor of Nuclear Science Research
	J-F	ARC Center
5.5	5.1	Response Function Calculation of Bonner Detector for High Energy
		Neutron61
5.5	5.2	Simulation of LBE Flow in the TEF-T LBE Spallation Target63
5.6	Sec	etor of Nuclear Science Research
	Nu	clear Engineering Research Collaboration Center
5.6	3.1	Simulation of Hydrogen Gas Behavior in Circular Piping

#### JAEA-Review 2016-024

5.7	Sec	tor of Nuclear Science Research
	Nu	clear Science Research Institute69
5.7	.1	Evaluation of Criticality in FCA Fuel Storage at Mixed Transport
		Container and Storage Container
5.7	.2	Analysis of Neutron Flux Distribution Required for Evaluating Radioactive
		Inventory in Decommissioning of JRR-4
5.7	.3	Shielding Design of Accelerator-Based BNCT Facility at INMRC73
5.8	Sec	tor of Nuclear Science Research
	Nu	clear Science and Engineering Center75
5.8	8.1	Development of PHITS Graphical User Interface: PHACE75
5.8	3.2	Development of Function for Integrating Tally Results of PHITS78
5.8	8.3	Acceleration of Stopping Power Calculation ATIMA in PHITS
5.8	8.4	Reduction of Computational Time and Memory Size of PHITS
5.8	8.5	Evaluation of Dose-conversion Coefficients for External Exposure to
		Radionuclides Distributed in Environments
5.8	8.6	Development of Generalized Nuclear Resonance Fluorescence
5.8	8.7	Long-range Atmospheric Dispersion Simulation of Airborne Radionuclide
		from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Station92
5.8	8.8	Towards Development of a Local-scale High-resolution Atmospheric
		Dispersion Prediction Model
5.8	8.9	Analysis for Measuring Fuel Debris with the FNDI Method97
5.8	8.10	Evaluation on Cs in Soils using X-ray Spectroscopy and DFT Calculation99
5.8	8.11	Development of a Thermal-Hydraulic Multi-Phase Analysis Method in
		Nuclear Reactors including Severe Accident Event Conditions (1)102
5.8	3.12	Development of a Thermal-Hydraulic Multi-Phase Analysis Method in
		Nuclear Reactors including Severe Accident Event Conditions (2)105
5.8	3.13	Parallelization of the POPCORN Code for Fuel Melting108
5.8	8.14	Development of Multiphase Flow Analysis Method Based on Interface
		Tracking Method
5.8	3.15	Development of Unsteady Thermal Hydraulic Simulation Method Inside a
		Reactor Core
5.8	8.16	Atomic and Electronic Modeling for Alloying and Defect Textures
5.8	3.17	Benchmark Tests of Newly-evaluated Data of <sup>235</sup> U for CIELO Project using
		Sodium-void Reactivity Worth Measured in FCA XXVII-1 Assembly

5.9	Sec	ctor of Nuclear Science Research	
	НТ	GR Hydrogen and Heat Application Research Center1	23
5.9	9.1	Application of FORNAX-A1	23
5.9	9.2	Investigation on Burn-up Characteristics and Criticality Effect of	
		Impurities in the Graphite Structure of a Commercial-scale HTGR1	26
5.9	9.3	FLUENT : Analysis Relevant to Contaminated Water Treatment System of	
		Fukushima Daiichi NPS1	.29
5.10	Sec	ctor of Nuclear Science Research	
	Adv	vanced Science Research Center1	31
5.	10.1	β Decay of Light Neutron-rich Nuclei Described with Large-scale	
		Shell-model Calculations1	31
5.	10.2	Extension of 3D Visualization Program "Neudift"1	34
5.	10.3	Research for Ground state and Excitation Dynamics in Low-dimensional	
		Strongly Correlated Systems1	.36
5.11	Sec	etor of Nuclear Science Research	
	Tal	xasaki Advanced Radiation Research Institute1	.39
5.	11.1	Simulation of Gas-region Detection Across a Beam for Carbon Therapy1	39
5.	11.2	Calculation for Amount of Radioactivity in Compact Cyclotron1	41
5.12	Sec	ctor of Nuclear Science Research	
	Qu	antum Beam Science Center1	.44
5.	12.1	Simulation Program for Magnetic Domain Structure Formation1	44
5.13	Sec	ctor of Nuclear Science Research	
	Qu	antum Beam Science Center1	46
5.	13.1	Development of a Simple Technique to Measure Radioactivity in a Tree	
		using Integrating Dosimeters1	46
5.	13.2	Development of Large Scale-molecular Simulation Method for Analyzing	
		DNA Dynamics in Nucleus and its Application1	48
5.	13.3	Analysis of Functional Expression Mechanism of Large Bio-molecules	
		which Deal with Radiation Effects1	51
5.	13.4	Design Calculation for Fabrication of Spoke Cavity1	54
5.	13.5	Analysis on Rotational Excited States Induced by Femtosecond Laser Pulse	
<b>.</b>	19.0	Train	.57
э.	13.6	rirst-principle Calculation for the Laser Damage and Laser Processing I	.60

5.1	3.7	Simulation Study of Laser Ion Acceleration using Foil Targets163
5.1	3.8	Development of a Detailed Calculation of the Delbruck Scattering166
5.1	3.9	Simulations of the Propagation of EUV Free-electron Laser Pulses
		Through Dense Gas Samples
5.1	3.10	First Principles Molecular Dynamics Simulations of Chemical Reactions 171
5.1	3.11	Simulation Study for DNA Damage due to Radiation173
5.14	Sec	tor of Fast Reactor Research and Development
	Adv	vanced Fast Reactor Cycle System Research and Development Center175
5.1	4.1	Advancement of a Computer Program for Sodium-Water Reaction
		Phenomena in a Steam Generator of Fast Reactors
5.1	4.2	Development and Validation of High-precision Numerical Simulation Code
		for Evaluation of Gas Entrainment in Fast Reactor
5.1	4.3	Numerical Simulation of Flow Field in a Large Fuel Assembly of Fast
		Reactor
5.1	4.4	Integrated Numerical Analysis of Unsteady Phenomena in Upper Plenum
		and Hot-leg Piping System of Advanced Loop-type SFR
5.1	4.5	Calculation of Core Characteristics for Metal Fuel Fast Reactor with the
		Continuous Energy Monte-Carlo Code, MVP
5.1	4.6	Numerical Simulation of Triple Elbow Pipe Flow Experiments Simulating
		Cold-leg Piping in an Advanced Sodium-cooled Fast Reactor
5.15	Sec	tor of Fast Reactor Research and Development
	Moi	nju Project Management and Engineering Center
5.1	5.1	Simulations of the In-service Inspection of FBR SG Tubes using Eddy
		Currents
5.16	Tsu	ruga Head Office
	Tsu	ruga Center for International and Regional Collaboration194
5.1	6.1	Numerical Analysis of Laser Cutting Process with the SPLICE Code194
5.17	Sec	tor of Decommissioning and Radioactive Waste Management
	Geo	logical Disposal Research and Development Department197
5.1	7.1	Acceleration and Parallelization of the Computer Program (Dtransu $3D$ $\cdot$
		EL) for Analyzing 3D Saturated-unsaturated Groundwater Flow and
		Advection-dispersion Model (FY2015)

#### JAEA-Review 2016-024

5.18	Sec	tor of Fukushima Research and Development
	Ful	xushima Environmental Safety Center199
5.	18.1	Uncontaminated Effect: Dose Reduction Effect due to Existence of
		Uncontaminated Area
5.19	Cer	nter for Computational Science & e-Systems
5.	19.1	Fluid Simulation inside the Harbor in Fukushima Daiichi Nuclear Power
		Station
5.	19.2	First-Principles Calculations of the Interaction between Dislocations and
		Solute Atoms
5.	19.3	Nuclear Magnetic Relaxation Rate in Topological Superconductors207
5.	19.4	Numerical Simulation of Radioactive Materials in the Environment209
5.	19.5	Using Supercomputers to Predict Air Dose Rates in the Environment212
5.	19.6	First-principles Study on the Degradation of Nuclear Materials215
5.	19.7	Ab Initio Simulations of Organic Reactions in Hot Water217
5.	19.8	Atomic Simulations of Physical Properties for Nuclear Fuel219
5.	19.9	Construction of Foundation of Multiscale and Multiphysics Simulations for
		Functional Materials in the Field of Atomic Energy Research221
5.	19.10	First Principles Calculations for Microstructural Evolution of Irradiated
		Materials
5.	19.11	A Two-step Structural Search with Semiempirical Methods: An Application
		to Detecting Cesium Binding Cites227
5.	19.12	Hydrogen Isotope Effects on the Confinement of Fusion Plasmas230
5.	19.13	Impact of Plasma Parameter on Self-organization of Electron Temperature
		Gradient Driven Turbulence
5.	19.14	Parallel Visualization for Distributed Simulation Result of Structure
		Assembly
5.	19.15	R&D of 3D Vibration Simulator for Entire Nuclear Plant Facility239
5.	19.16	Effects of Passing Electrons on Electron Heat and Particle Transport242
5.	19.17	Multivariate Volume Rendering using Multidimensional Transfer Function245
5.	19.18	Acceleration of a Multiphase Fluid Code by the Application of Compression
		Diagonal Storage Format
5.	19.19	Research for a Commercial Software to Visualize Seismic Simulation
		Results of Nuclear Plant251

6.	Conclusion	254
Ap	pendices	255
Au	thor Name Index	.257

## 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 27 年度に原子力機構の発表した査読付論文の総数は 1,170 件であった。このうち計算科学技 術を利用した論文は 237 件(20.3%)である。全論文に対する計算機利用成果の割合は、この 10 年間約 20%で推移しており、原子力機構の研究成果に対する計算科学技術の貢献度の高さを如実 に示している。



図 1.1 計算科学技術による研究成果創出貢献度 [平成 18~27 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 組織別計算科学技術による研究成果創出貢献度 [平成 18 年度~27 年度]

システムの利用者が多い 5 組織(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)の研究成果創出貢 献度を図 1.2 に示す。特に原子力基礎工学研究センター、高速炉研究開発部門において、計算科 学技術を活用した論文の割合が高い。

本報告は、原子力機構における平成 27 年度の大型計算機利用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更新とその構成概要を、3 章に大型計算機システムの利用 状況を、4 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

#### 2.1 大型計算機システムの更新

平成 22 年 2 月末に導入した大型計算機システム(旧システム)は、大規模シミュレーション計 算処理を行うための大規模並列演算部(200TFLOPS)を中核とし、国の施策である次世代スー パーコンピュータ(京)を積極的に活用するためのアプリケーション開発処理部(12TFLOPS) 及び大規模 SMP コード処理部(2TFLOPS)と合わせ、総理論演算性能は 214TFLOPS を有した システムである。運用開始以来、大型計算機利用委員会への大口課題申請において、毎年 1.5 倍 を超える利用課題申請があるなど、原子力機構がかかえる膨大な計算需要を賄うにはその規模(性 能)が大きく不足していた。コアの利用状況は 90%を超える極めて高い利用率で推移しており、 課題申請クラス(4,096 並列: 24 時間実行)のジョブ実行待ち時間(月平均)も 4~5 日待ちに 増加するなど、処理能力の限界に達していた。

この計算機資源不足を改善し、原子力機構の計算需要に応えるため、旧システムのリースアップを機に新たな大型計算機システム(新システム)を導入することとした。

#### 2.1.1 計算需要

導入するスーパーコンピュータの規模(性能)を適正に評価するため、平成24年4月、 原子力機構の全課室を対象に、計算需要調査 を実施した(図2.1)。その結果、平成26年 度(導入初年度)で約2.0 PFLOPS(現有の 約10倍)、平成28年度で約5 PFLOPS、平 成30年度で約11 PFLOPSの計算需要がある ことが分かった。

スーパーコンピュータを取り巻く技術革新 (性能向上)は著しく、半導体の微細化、CPU のマルチコア化やメモリ等のコモディティ化 が進み、その価格性能比は4年で10倍向上し ている。このような動向から、平成26年度に 調達可能な規模(性能)は2~3PFLOPS程 度と予測した。

一方、原子力発電所の停止に伴う電気料金 の高騰を受け、整備予算に含まれる維持管理 費(電気料金)が逼迫し、平成26年度に必要



図 2.1 原子力機構の計算需要動向

な規模(性能)の導入が危惧された。そこで、維持管理費(電気料金)の圧縮を念頭に、スーパ ーコンピュータの消費電力に係る仕様要件(調達仕様書及び性能評価基準書)を策定し、よりコ ストパフォーマンスの高い新システムへ更新することとした。

#### 2.2 平成27年度のシステム構成

平成 27 年度は、平成 26 年 7 月に縮小した旧システム(200TFLOPS → 72TFLOPS)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)を平成 27 年 12 月まで確保し、導入過渡期においても総理論演算性能 (約 200TFLOPS)を維持した。新システムは、平成 27 年 7 月から 2 ヶ月間で付帯設備作業(電 気設備、空調設備)を完了し、システム本体の搬入(9 月上旬)、システム構築作業(9 月下旬、 10 月)を経て、当初の予定どおり平成 27 年 11 月 25 日から運用を開始した。

#### 2.2.1 旧システムの構成

縮小後の旧システムの構成を図 2.2 に示す。旧システムは、大規模並列演算部を中核とし、3 つの処理部(ISV アプリ処理部、可視化処理部、会話処理部)で構成され、システム全体として 総理論演算性能 72TFLOPS の性能を有している。各ノードには、インテル Xeon プロセッサ(4 コア)を2プロセッサ、主記憶 24GB(可視化処理部は 48GB)を搭載している。また、ノード 間通信機構は、InfiniBand QDR の片方向 8GB/s(2ポート接続)の帯域を有している。ストレ ージは、大容量な磁気ディスク装置(970TB)に構築した共有ファイルシステムに、不慮のデー タ消失に備えるためのテープバックアップ装置(1PB)を備えている。



図 2.2 旧システムの構成

#### 2.2.2 新システムの構成

新システムの構成を図 2.3 に示す。新システムは、旧システム同様、中核となる大規模並列演 算部、3 つの処理部(ISV アプリ処理部、可視化処理部、ログイン処理部)で構成され、システ ム全体として総理論演算性能 2,421TFLOPS(旧システムの約 12 倍)の性能を有し、消費電力効 率 2.4GFLOPS/ワット(旧システムの約 1/12)の省電力性能を実現している。各ノードには、イ ンテル Xeon プロセッサ(12 コア)を2プロセッサ、主記憶 64GB(ISV アプリ処理部、可視化 処理部は 256GB)を搭載している。また、ノード間通信機構は、InfiniBand FDRの片方向 13.6GB/s(2 ポート接続)の帯域を有している。ストレージは、大容量かつ高速な磁気ディスク 装置(3.5PB)に構築した並列分散ファイルシステムに、不慮のデータ消失に備えるためのテー プバックアップ装置(1PB)を備えている。

大規模並列演算部(2,409TFLOPS)において、Linpack性能試験を実施し、1,929TFLOPS
(実行効率 80%)の性能を得た。この性能は「TOP500 Supercomputer Sites」(平成 27 年 11 月発表)において、国内 5 位、世界 34 位を記録した。新旧の大規模並列演算部の性能比較を表 2.1 に示す。



図 2.3 新システムの構成

表 2.1 大規模並列演算部の性能比較(主な仕様
--------------------------

	旧システム <sup>※1</sup> 大規模並列演算部 BX900	新システム 大規模並列演算部 ICE X	性能等の 向上率 (倍)
タイプ	スカラ	スカラ	
総演算性能 (TFLOPS)	200	2,409	12.0
コア数	17,072	60,240	3.5
ノード数	2,134	2,510	1.2
CPU	Xeon X5570 4 コア/CPU	Xeon E5-2680 v3 12 コア/CPU	3.0
演算性能/コア (GFLOPS)	11.7	40.0	3.4
メ <del>モ</del> リ (GB/ノード)	24	64	2.6
総主記憶容量 (TB)	50.0	156.8	3.1
ノード間 通信性能	片方向 8GB/s (全二重)	片方向 13.6GB/s (全二重)	1.7
OS	Rad Hat Enterprise Linux 5	SUSE Linux Enterprise Server 11 SP3	
コンパイラ	Fortran C/C++	Fortran C/C++	
Gflops/W <sup>%2</sup>	0.2	2.4	12.0

平成28年3月末現在

※1 平成 22 年 3 月 1 日~平成 26 年 6 月までの性能

※2 消費電力1ワット当たりの理論演算処理性能1Gflops

## 3. 平成 27 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

旧システムの 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、4 月~10 月の稼働率 98%を達成した。残りの 2%はシステム臨時保守作業(5 月、6 月)、構内全域停電(7 月)、新システムの更新に係る電源設備作業(8 月)による運転停止である(図 3.1:青の折れ線 グラフ)。また、平均コア利用率は 90%の高率を維持した(図 3.1:青の棒グラフ、詳細な利用実 績は付録 A に示す)。新システムの導入過渡期用として確保した東京大学スーパーコンピュータ システム(130TFlops 分の利用権:FX10 システム)も有効に活用された(4 月~12 月の利用率は 94%)。



図 3.1 BX900 及び ICE X の稼働率・利用率(年間)

新システムの ICE X は、平成 27 年 11 月 25 日の運用開始から平成 28 年 3 月末まで、利用者 プログラムの移行や運用パラメータ調整を行うための試用期間とした。ハードウェアの初期不良 による大きなトラブルの発生はなく順調に稼働し、11 月~3 月の稼働率 100%を達成した(図 3.1: 緑の折れ線グラフ)。月間のコア利用率は、運用当初(11 月 25 日~30 日間)で 70%を超え、4 ヶ 月目には約 90%に到達し、順調に利用されている(図 3.1:緑の棒グラフ、詳細な利用実績は付 録 A に示す)。

#### 3.2 大型計算機システムの組織別利用実績

平成 27 年度の BX900 (FX10 及び ICE X 含む)の利用者数は 432 名である (システムの運 用要員を除く)。組織別利用者数においては、核融合研究開発部門、原子力基礎工学研究センター、 システム計算科学センターの 3 つの組織で大きな割合を占めている (図 3.2)。



図 3.2 BX900 (FX10 及び ICE X 含む)の組織別利用者数

BX900 (FX10 及び ICE X 含む)の利用コア時間は、4 月からの累積で23,089 万コア時間が 利用された。分野別では、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)。特に、総利用コア時間の41.7%(昨年度比:+7.4 ポイント)が量子ビ ームに関連する計算で利用された。

東日本大震災以降、原子力機構の優先課題である福島第一原子力発電所事故への対応として、 BX900(FX10及びICEX含む)を利用して環境回復に向けた技術開発等を行う利用者も多く、 環境中の放射性物質の挙動や炉心内構造物の溶融挙動などの事故解析などが行われ成果をあげた。 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。

#### JAEA-Review 2016-024



図 3.3 BX900 (FX10 及び ICE X 含む)の分野別コア時間利用実績

A J.I 土な DAJ00 (IAI0 及びIOLA 百亿) て利用した個面後無に体気利心	表 3.1	主な BX900	(FX10及び ICE X	含む)	を利用し	た福島復興に係る対応	(1/2)
--	-------	----------	---------------	-----	------	------------	-------

項	計算内容	組織	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	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 応用研究センター	$\begin{array}{c} \text{CPMD} \\ 512 \end{array}$	1,072.7	5.13.10 項
2	環境中の放射性物質の挙動 に関する数値シミュレーシ ョン	システム計算科学 センター	VASP 128	416.8	5.19.4 項
3	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 工学研究センター	TPFIT 2,048	119.8	5.8.14 項

項	計算内容	組織	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
4	過酷時及び定常時における 炉心内非定常熱流動事象評 価解析手法の開発	原子力基礎 工学研究センター	JUPITER 900	116.3	5.8.15 項
5	環境放射性核種からの外部 被ばく線量換算係数の評価	原子力基礎 工学研究センター	PHITS 432	60.7	5.8.5 項
6	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 工学研究センター	VASP 256	20.8	5.8.10 項
7	大気拡散予測コードによる 評価	原子力基礎 工学研究センター	WSPEEDI 226	8.6	5.8.7 項
8	福島原発汚染水処理関連の 解析	福島 研究開発部門	FLUENT 4	1.6	5.9.1 項
9	ージョン ーション	システム計算科学 センター	PHITS 32	1.6	5.19.5 項
10	航空機モニタリングの地形 効果補正技術の開発	安全研究センター	PHITS 256	1.0	5.1.1 項

表 3.1 主な BX900 (FX10 及び ICE X 含む) を利用した福島復興に係る対応 (2/2)

## 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が欠かせない。 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いる。利用者の多くはプログラミングの専門家ではないため、プログラム自 体の開発や改良が利用者任せになると、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 27 年度の利用相談は、年間 910 件(月平均:約76 件)寄せられ、そのうち約 64%が大型 計算機システム(BX900:280 件、ICE X:302 件)、約 11%が可視化(可視化相談・技術支援: 79 件、可視化ソフトウェアのインストール支援:21 件)の利用に関するものである。平成 27 年 11 月末から新システムの運用が開始されたため、大型計算機システムの相談件数は、昨年度の約 1.6 倍(216 件増)であった(詳細は付録 B に示す)。

#### 4.1.2 プログラム開発整備

プログラム開発整備は、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などの新規プログラムの作成 及び、既存プログラムの整備・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。このため、データの可視化に対するプログラム開発整備も利用支援の重要な構成要 素の一つである。

プログラム開発整備は、毎年原子力機構内に募集をしており、平成27年度は9件、作業工数と して54人月の申込があり、希望された作業工数は割り当て可能な作業工数(48人月)の約1.13 倍であった。申請者から提出された作業申請書の記載及びヒアリングにより作業内容の確認を行 い、表4.1に示す選定要件に基づき、ソフトウェア開発整備作業を採択・実施した。

選定要件	選定件数
原子力機構内で共通に使用されるプログラム (P1)	5 件
大型計算機利用委員会にて承認された課題で使用するプログラム (P2)	3件
大規模データの可視化処理を行なうプログラム (P3)	1件
福島支援等、緊急対応が必要なプログラム (P4)	_

表 4.1 プログラム開発整備における選定要件と選定件数

平成 27 年度の主な作業について表 4.2 に示す。ユーザ数が 2,000 名を超える PHITS コードの 入力支援ソフトウェア (PHACE)の開発や、伝熱管破損時に生じる Na-水反応及び圧縮性多成 分多相流現象を評価する数値解析コード (SERAPHIM)の収束性改善などを行った。また、可視 化のプログラム開発に関しては、中性子散乱データの画像化プログラム (Neudift ver.2) が 3 次 元トモグラフィーを作成できるようプログラムの機能拡張を実施した。

表 4.2 🗳	平成 27 年度ソフ	トウェ	ア開発整備作業	(1/3)
---------	------------	-----	---------	-------

項	作業件名 (選定要件)	作業概要 及び 結果	関連する 成果報告
1	PHITS ユーザ入力 支援ソフトウェア の開発 (P1)	ユーザ数2,000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。Windows版 PHACE (初期版)として、入力されたデ ータ項目を関連した階層構造によるツリーとして表示するグ ラフィカルユーザインタフェイスを有し、PHITS のインプ ットデータの入力補助、編集する機能を開発した。これによ り、PHITS 使用時に必要となる入力ファイルの作成が初心 者でも容易に作成できる見通しが得られた。	5.8.1 項
2	複数の PHITS 出力 ファイルの統合機 能の作成 (P1)	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(ヒストリー数)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、12 種類のタリーについ て、複数の出力結果ファイルを一つに統合してヒストリ数の 大きな結果を得る機能や、複数の計算結果に任意の重み付け をして加重平均を計算する機能を開発した。これにより、 PHITS ユーザの利便性は格段に向上し、少ない計算資源で 解析評価作業が効率よく実施できる見通しが得られた。	5.8.2 項
3	高速炉蒸気発生器 熱流動現象の評価 手法開発 (P2)	<ul> <li>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たため、平成 26 年度に開発した緩和 係数の制御方法(初期値、上限値、下限値等の設定を含む) に対し、以下の最適化・機能拡張を実施。</li> <li>① 緩和係数の最適化(初期値、上限値、下限値、乗率の組 み合わせ及び乗率変更判断率)</li> <li>② 振動検知機能による緩和係数の制御方法(変更タイミン グまで係数を固定し、変更タイミングの条件を満足する と緩和係数最大値と最小値を変更)</li> <li>これにより、より広範囲な時間帯(反応ジェットが成長する 100ms まで)に対して収束性が約 1.5 倍の改善効果が得ら れ、高速炉蒸気発生器の実機解析評価作業を効率的に実施す ることが可能となった。</li> </ul>	5.14.1 項

	表 4.2	平成 27 年度ソフ	トウェ	ア開発整備作業	(2/3)
--	-------	------------	-----	---------	-------

項	作業件名 (選定要件)	作業概要 及び 結果	関連する 成果報告
4	中性子散乱データ	コンピュータ断層撮影(CT)で使用する計算手法を応用し	5.10.2 項
	の3次元画像化プ	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	
	ログラムの機能拡	化を実現するアプリケーション(Neudift)の開発を支援。平	
	張 (P3)	成 26 年度に開発した Neudift ver.2 に対し、以下の機能拡張	
		を実施。	
		① 生成画像と計測データとの整合性の検証	
		② 3次元トモグラフィー生成機能の追加	
		③ 機構外提供用パッケージの作成	
		これにより、中性子散乱データの読み込みから3次元トモグ	
		ラフィー生成を一貫して行えるようになり、利用者への利便	
		性が高い Neudift の機構外提供が可能となった。	
5	過酷事象を含めた	シビアアクシデントによる過酷事象を含めた炉心内熱流動挙	5.8.11 項
	原子炉多相熱解析	動を評価できる多相流解析手法確立のため、汎用流体解析コ	5.8.12 項
	手法の開発 I,Ⅱ	ード FLUENT、流体解析コード FrontFlow/Red 及び詳細二	
	(P2)	相流解析コードTPFITを使用し、以下の3つのモデル作成と	
		評価解析を実施。	
		<ol> <li>燃料集合体内冷却材流路の燃料棒表面での冷却材沸騰現</li> </ol>	
		象を模擬した体系(RPI 沸騰モデル、CHF 沸騰モデル)	
		② 炉心サブチャンネル内の気泡の変動挙動を模擬した体系	
		(四角柱流路、円柱流路)	
		③ スペーサ付き燃料集合体内のサブチャンネルを擬した体	
		系(羽根の有無、羽根の角度 15°,30°)	
		これにより、①燃料棒表面での冷却材のサブクール沸騰現象	
		の再現、②鉛直方向に周期境界を設定した条件で気泡の合体	
		や分裂に関する挙動の再現、③羽根の角度が 30 度の条件が	
		最も高い熱伝導率を定量的に評価が可能となった。これらの	
		解析手法は過酷事象を含めた軽水炉の熱流動安全評価に適用	
		できる見通しを得られた。	
6	汎用型充填体内粒	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	5.3.3 項
	子識別コードの開	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	
	発整備(P1)	ため、汎用流体解析コード(ANSYS、FLUENT、	
		Frontfrow/red) に必要な4種類の格子生成サポートプログラ	
		ムの開発を実施。これにより、実験から得られた微小球の位	
		置を3次元的に再構築し、充填体内流体中物質輸送の統合シ	
		ミュレーションの実施が可能となった。	

表 4.2 平成 27 年度ソフトウェア開発整備作業 (3/3)

項	作業件名 (選定要件)	作業概要 及び 結果	関連する 成果報告
7	磁性体における微	磁性体の物理的性質を解明するため、磁性体における微視的	5.12.1 項
	視的磁化過程シミ	磁化過程のシミュレーションプログラムの開発を支援。以下	
	ュレーションプロ	の磁化の動的過程を記述する 2 つのモデル作成と評価解析を	
	グラムの作成(P1)	実施。	
		<ol> <li>ランダウ=リフシッツ方程式モデル</li> </ol>	
		② ギンツブルク=ランダウ方程式モデル	
		これにより、乱れを含む磁性体における磁化が動的に行われ	
		ていく過程を明らかにして、磁性体における構造と機能に関	
		する基礎的な知見が得られるようになった。	

#### 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、毎年原子力機構内の募集に加え、大型 計算機利用委員会にて承認された課題で利用する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27年度は8件、作業工数として44人 月の申込があり、希望された作業工数は割り当て可能な作業工数(27人月)の約1.6倍であった。 申請者から提出された作業申請書の記載及びヒアリングにより作業内容の確認を行い、表4.3に 示す選定要件に基づき、プログラム最適化チューニング作業を採択・実施した。

選定要件	選定件数
大型計算機利用委員会にて承認された課題で使用するプログラム (T1)	3件
解析の大規模化等、大規模利用(大規模並列化)が必要なプログラム(T2)	—
原子力機構内で共通に使用されるプログラム(T3)	4件
福島支援等、緊急対応が必要なプログラム (T4)	_
東京大学 FX10 の利用が必要なプログラム (T5)	1件

表 4.3 プログラム最適化チューニングにおける選定要件と選定件数

平成 27 年度の主な作業について表 4.4 に示す。「3 次元多相多成分熱流動解析コード (JUPITER)」及び「熱流動解析コード (POPCORN)」のスレッド並列化では、それぞれ約 7 倍及び約 3 倍の速度向上を得た。また、「多次元ナトリウムー水反応解析プログラム (SERAPHIM)」などプログラムの実行性能の改善(処理時間の短縮)に対する調査・分析、「粒 子・重粒子輸送解析コード (PHITS2)」のメモリ使用量の効率化(最大約 60%減)を実施した。 これら 3 コードの平成 28 年度における使用コア時間(4月現在の予定)は、合計で約 5,400 万時 間(新システム全体の約 1 割)を見込んでおり、最適化チューニングによる計算資源の有効活用 の効果は大きい。

項	プログラム名 (選定要件)	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	3 次元多相多成分熱流	PETSc ソルバー以外のスレ	オリジナル版(PETSc ソル	5.8.15 項
	動解析コード	ッド並列化	バーのスレッド 1 並列)に	
	JUPITER (T1)	① 並列化対象のループ	対して、以下の速度向上を	
		(73 個)の OpenMP	達成。	
		化		
		② CCSE ソルバーの組み	<スレッド版>	
		込み及び性能分析	<ul> <li>24 スレッド: 6.9 倍</li> </ul>	
2	多成分流動解析コード	MPI 並列化	オリジナル版(スレッド 8	5.8.13 項
	POPCORN (T1)	① 並列化対象のサブルー	並列)に対して、以下の速	
		チン(40 個)のプロセ	度向上を達成。	
		ス並列化		
		② プロセスあたりのメモ	<mpi 版=""></mpi>	
		リ使用量の削減	<ul> <li>64 並列: 2.8 倍</li> </ul>	
3	粒子・重粒子輸送解析	メモリ資源の効率化	オリジナル版(サンプル問	5.8.4 項
	コード	<ol> <li>配列の調査</li> </ol>	題 12 ケース) に対して、メ	
	PHITS2 (T3)	② サブルーチン(140 個)	モリ使用量が平均 18%、最	
		の動的割付け配列への	大 57%削減を達成。	
		変更		
4	粒子・重イオン輸送計	阻止能計算モデル (ATIMA)	オリジナル版 (1 並列) に対	5.8.3 項
	算コード	の高速化チューニング	して、以下の速度向上を達	
	PHITS (T3)	① データベース化	成。	
		② SIMD 化の指示行追加		
			<mpi 版=""></mpi>	
			<ul> <li>1並列:48倍</li> </ul>	

表 4.4 平成 27 年度高速化·並列化作業 (1/2)

	表 4.4	平成 27 年度高速化	• 並列化作業	(2/2)
--	-------	-------------	---------	-------

項	プログラム名 (選定要件)	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
5	3 次元飽和・不飽和浸	解析規模の拡大、MPI 並列	オリジナル版 (8 並列版:行	5.17.1 項
	透流-移流分散解析プ	化	列解法部分)に対して、以	
	ログラム	<ol> <li>行列要素のオーダリン</li> </ol>	下の速度向上を達成。	
	Dtransu3D· EL (T3)	グ変更(CM 法の適用)		
		② 高コストルーチンの行		
		列解法部分のプロセス	<mpi 版=""></mpi>	
		並列化	<ul> <li>44 並列:34 倍</li> </ul>	
6	多次元ナトリウムー水	実行性能の改善	オリジナル版 (最大 189 並	5.14.1 項
	反応解析コード	<ol> <li>並列処理ための解析対</li> </ol>	列版)に対して、以下の高	
	SERAPHIM (T4)	象の分割方法の調査・	速化案を提案。	
		分析		
		<ol> <li>2 袖通信方法の検討</li> </ol>	<ul> <li>袖通信方法の改良(隣</li> </ul>	
			同志のプロセス間→複	
			数プロセスからの送受	
			信)	
			<ul> <li>・ 最大並列数の改善</li> </ul>	
			(20,910 並列)によるロ	
			ーインバランスの緩和	
7	燃料集合体熱流動解析	実行性能の改善	オリジナル版(逐次版)に	5.14.3 項
	コード	① ホットスポットの調	対して、以下の高速化案を	
	ASFRE (T3)	査・分析	提案。	
		② キャッシュの効率化		
		③ ループ・アンローリン	<ul> <li>多次元配列の構成変更</li> </ul>	
		グの試行	<ul> <li>除算の削減</li> </ul>	
			・ 重複する計算の集約	

### 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 27 年度の講習会は、新システムの利用講習会、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 (初級レベル:1回、中級レベル:6回)、延ベ 189 名が参加した (表 4.5)。実習による講習会も企画し、実機を使って確実な技術習得を指向している。なお、平成 28 年度には、新スーパーコンピュータシステムにおけるプログラム最適化技術(並列化・高速化)の教育(上級レベル)を予定している。

項	技術レベル	開催日時	開催場所	内容	形式	参加者
1	利用方法 初級	平成 27 年 11 月 11 日	先端基礎 センター 大会議室	新スーパーコンピュータシステム 利用講習会	講義	95名
2	ISV ソフト 中級	平成 27 年 6 月 24 日	情報交流棟 講習会室	Fluent 混相流特別セミナー	講義	14名
3	ISV ソフト 中級	平成 27 年 10月 22,23 日	情報交流棟 講習会室	STAR-CD、STAR-CCM+ 基礎技術セミナー	講義 実習	16名
4	ISV ソフト 中級	平成 27 年 11 月 19,20 日	情報交流棟 講習会室	Fluent GAMBIT の移行セミナー	講義 実習	24 名
5	ISV ソフト 中級	平成 27 年 12 月 10,11 日	情報交流棟 講習会室	ANSYS Workbench 実習講座	講義 実習	21 名
6	可視化 中級	平成 27 年 9 月 15 日	情報交流棟 講習会室	AVS/Express 講習会 (Ver8.3 新機能紹介を含む)	講義 実習	10名
7	可視化 中級	平成 28 年 3月4日	情報交流棟 講習会室	並列化版 AVS/ExpressPCE 講習会	講義 実習	9名

表 4.5 平成 27 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 航空機モニタリングにおける地上からのガンマ線フラックス計算結果の比較 Comparison between Calculated Results of Gamma Ray Flux in Airborne Radiation Monitoring

石崎 梓

放射線安全・防災研究グループ

#### (1) 利用目的:

2011 年に発生した福島第一原子力発電所事故以降、環境中に放出された放射性物質分布や空 間線量率の迅速かつ広域な把握のため、航空機モニタリングが実施されてきた。航空機モニタリ ングでは、航空機に搭載された放射線検出器で測定された係数率を解析し、地上の空間線量率や 汚染密度に換算している。しかし、航空機直下の地形は平坦であるという仮定のもと解析が実施 されているため、複雑な地形の場合の誤差が課題となっている。そこで、換算精度向上のため、 地表面の形状を加味した新しい解析方法の開発が行われている。新しい解析方法では、地表を 1m~5m 程度のメッシュに区切り、各メッシュに線源を配置し、これらの線源から航空機飛行位 置におけるガンマ線フラックスを計算することにより、地形によるガンマ線フラックスの変動を 補正する。ガンマ線フラックスの計算を正確に行うためには、方法として、モンテカルロシミュ レーションが挙げられるが、航空機モニタリングの測定ポイント数 2km×2km のエリアで約 2500 点程度あり、非常に膨大である。そのため、計算時間を考えると、モンテカルロシミュレ

はない。そこで、計算時間 短縮のため、解析的な方法 を用いた手法を採用するに 至った。ここで、解析的な 計算結果がモンテカルロシ ミュレーションの結果を比 較し、計算の妥当性を検証 する必要がある。そのため、 (a) 航空機の高度を変化さ せた場合、(b) 線源が土壌 中のある深さに分布してい

ーションの利用は現実的で



図1 計算条件地形
る場合、(c) V字の谷地形の角度と航空機の高度を変化させた場合の3種類(図1)の条件に対して、662keV ガンマ線のフラックスを PHITS2 と解析的な手法で計算し、結果を比較する。

## (2) 利用内容·結果:

図2に(a) 航空機の高度を変化させた場合、(b) 線源が土壌中に分布している場合、(c) 谷地形 の角度・飛行高度を変化させた場合それぞれの PHITS2 による計算結果と解析的計算による結 果を比較する。いずれの条件においても、解析的計算による結果が PHITS2 による計算結果と 同様の結果であった。よって、本検証にて用いた解析的計算方法は PHITS2 と同様の計算結果 が得られることが示された。



図 2 PHITS2 と解析的計算による結果の比較: (a) 航空機の高度を変化させた場合、(b) 線源 が土壌中に分布している場合(c) 谷地形の角度・飛行高度を変化させた場合

## (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:

今後はさらに数値標高モデルを用いて、さらに複雑な地形について検証を行う予定である。

# 5.1.2 水素静的触媒式再結合器 (PAR) の作動を伴う大規模空間内数値流体解析 CFD 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:

シビアアクシデント時に水蒸気とジルコニウムの化学反応等により発生し、爆燃・爆轟を引き 起こす原因となる水素は、放射性物質の閉じ込め機能を有する格納容器の健全性に対する脅威と なる。その水素リスクを低減する対策の一つとして、触媒による水素再結合器である PAR (Passive Autocatalytic Recombiner)が挙げられる。本研究では数値流体力学(CFD: Computational Fluid Dynamics)コードを用いた PAR の有効性を評価する手法の整備を目指 し、大規模空間内に設置した PAR の性能評価実験について解析を行った。

## (2) 利用内容·結果:

#### a) 解析の概要

オープンソースの CFD コード OpenFOAM ( Open Source Field Operation and Manipulation)を大型並列計算機 ICE X上で 実行した。ソルバーは化学反応を伴う熱流体解 析に適した reactingFoam をベースに、PAR を 模擬するための改良を加えた。解析対象となる 実験は、OECD/NEA-THAI 計画の PAR 性能評 価実験(HR5)である。実験は図1に示す高さ 9.2m、直径 3.2m、内容積 60m<sup>3</sup>のステンレス 鋼で作られた容器が用いられた。容器内部には AREVA 社の PAR が内部シリンダーの側面に 設置されており、PAR 出入口で水素流量が測定 され、再結合速度が求められる。HR5 実験では 酸素の体積分率が 21%、水素が 0%の状態から、 水素を注入していき PAR の性能が評価された。

解析に使用したメッシュを図2に示す。図3 及び図4に示すリングフィードラインから水素



図1 THAI 実験容器

0.24g/s(0~10分)、0.48g/s(10~34.7分)で注入し、34.7分以降は注入を停止した。PARの 触媒は図5に示すようにダクト内部に存在する。再結合速度は触媒に入る水素、酸素の体積分率 と圧力からAREVA社のPAR相関式から計算した。乱流モデルにはk-ωSSTを使用し、実験 容器内面の境界条件は断熱、およびノンスリップとした。その他の初期条件は表1に示すとおり





表1	初期条件

圧力 [bar]	温度 [℃]	$O_2$ [vol %]	$ m H_2$ [vol %]	H <sub>2</sub> O [vol %]	$N_2$ [vol %]
2.934	32	21	0	0	79

## b) 解析結果

図 6 に示す測定点における体積分率を比較した。水素が注入され PAR の作動条件を満たすと 再結合速度が上昇していく(図 7)。流入のない O<sub>2</sub>は再結合により減少し続ける(図 8)。水素の 注入が止まる 34.7 分以降は反応速度が徐々に減り、図 9 に示すように容器内の水素濃度が減少 していく。1200 秒時の温度分布(図 10)が示すように水素と酸素の触媒領域での再結合により、 温度が上昇し、図 11 に示すように上向きの流れが発生する。





図 8 O2 体積分率





図 10 温度分布(1200 秒)



## (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、計算を行った実験ケースでは良好な結果が得られており、本解析手法が PAR 実験を再 現できることがわかった。引き続き条件の異なる実験についても同様の解析を実施し、予測精度 の向上を図る予定である。

## 5.1.3 OpenFOAM による二相流ジェットの検討解析

# Numerical Analyses and Investigations of Two-Phase Flow Jet by using OpenFOAM

岡垣 百合亜 熱水力安全研究グループ

## (1) 利用目的:

原子炉内の多次元的な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。本研究では、CFD を用いて、サプレッションチャンバー内で生じるプールスクラビ ング現象の気液二相流挙動を詳細に解析するための解析手法の検討を行った。解析は、界面を詳 細に計算でき、相関式が不要などの利点を持つ VOF(Volume of Fluid)法を用いているが、格 子数が界面の解像に直結するため、非常に多くの格子を必要とし、大規模かつ長時間の計算とな ることが多い。従って、大型計算機の利用が必須である。

## (2) 利用内容·結果:

オープンソース CFD コード OpenFOAM の VOF 法ソルバ interFoam を用いた三次元流動解 析を行った。乱流モデルは使用しなかった。

#### 1. interFoam による気液二相流解析の大規模計算

数値解析の精度に最も影響を及ぼすと考えられる格子依存性の調査、及び界面を圧縮し、数値 拡散を抑制する界面圧縮パラメータ $C_{\alpha}$ の感度解析を実施した。解析体系を Fig.1 に示す。静止し ている水中に空気を 10m/s で注入する。計算格子は六面体格子とし、総格子数は、27万、65万、 171万、405万、960万の5ケースとした。格子は、格子サイズが極力均等となるように、ノズ ル付近の配置を工夫している。10秒における界面形状(VOF 値 0.5等値面図)を Fig.2 に示す。 注目する領域の気泡径に応じて格子分割数を決める必要があるが、格子依存性の影響が大きく、 特に気泡上昇領域における違いが顕著に現れた。また、 $C_{\alpha}$ を上昇させることにより、格子数増と 類似した特徴が現れることもわかっており、今後、実験結果との定量的比較による妥当性評価を 行う。

#### 2. 液液二相におけるジェット形成解析

プールスクラビング実験で発生するジェットの検証解析を行うため、Scheele らによる実験[1] を対象とした予備解析を実施した。解析体系を Fig.3 に示す。実験と同様の条件において、円形 ノズルから水中へヘプタンを 0.1~1.0m/s で注入する。計算格子は六面体格子とし、総格子数は 約 2,200 万である。ノズル出口付近のジェットの界面形状(VOF 値 0.5 等値面図)を Fig.4 に示 す。実験では、約 0.9m/s 以降において、ヘプタンのジェット崩壊による噴霧化が生じるとされ ているが、解析では再現できていないことが明らかとなった。今後、ノズル内に格子を与え、ノ ズル周辺に細かいメッシュを集中させることで改善を図る予定である。

## [1] G. F. Scheele and B. J. Meister, AIChE Journal, Vol. 14, No. 1 (1968).







Fig.3 解析体系



Fig.2 界面形状 (10 秒) 左から、格子数 27 万、65 万、171 万、405 万、960 万



Fig.4 ノズル出口付近の界面形状(10秒)
 左から、ヘプタン平均注入流速
 0.1m/s、0.3m/s、0.5m/s、0.7m/s、1.0m/s

. . . .

- (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:

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

# 5.2 核不拡散・核セキュリティ総合支援センター Integrated Support Center for Nuclear Nonproliferation and Nuclear Security

## 5.2.1 モンテカルロコードを用いた遅発ガンマ線分光法のためのデータベースの開発とシ ステム評価

Database Development and System Evaluation using Monte Carlo Codes for Delayed Gamma Ray Spectroscopy

Douglas Chase Rodriguez、瀬谷 道夫、小泉 光生、高峰 潤、Fabiana Rossi 技術開発推進室

## (1) 利用目的:

The work performed on the PRIMERGY BX900 and SGI ICE X clusters focuses on processing MCNP6 and Geant4 codes to help develop a Monte Carlo code for fission yield improvements and non-destructive assay analysis.

## (2) 利用内容·結果:

Delayed gamma-ray spectroscopy (DGS) is a potentially useful non-destructive assay (NDA) technique to determine fissionable nuclear material (FNM) composition ratios. This is extremely important for nuclear safeguards verification of the declared information by determining if small amounts of nuclear material are missing. In order to effectively use this technique, however, nuclear data needs to be improved when it comes to fission product (FP) yield distributions. Data is currently being collected at the Plutonium Conversion Development Facility (PCDF) and the European Union's Joint Research Centers in Ispra, Italy (ITU) and Geel, Belgium (IRMM). The data collected will be used to improve fission yield (FY) measurements for uranium, plutonium, and MOX samples.

The DGS technique works by correlating the measured gamma rays from FP chains to the original fissionable nuclide. The FY is different for both the energy of the irradiating neutron, through the fission cross-section, and the atomic number and atomic mass of the fissionable nuclide (see Figure 1). The physics behind this process is that neutrons of some energy, from 0-keV for spontaneous fission (SF) to 14-MeV from a deuterium-tritium generator, induce fission on a sample of FNM. The FP then decay according to their half-life and along their decay branching ratios. The FP daughters then decay, extending this decay chain into the delayed timeframe (>  $\sim$ 1 ns) in proportions to the original FY. Gamma rays (DG) are produced during the decay of each FP chain proportional to the quantity decaying,

their half-life, and the gamma-ray branching ratio and can be detected and analyzed for the original FY production.



Figure 1. The thermal neutron induced fission yield distribution of the listed nuclides. Note that U-235 is more prominent around fission product masses of 90, whereas the Pu isotopes are more prominent around 105.

For NDA, multiple fissionable nuclides are expected to contribute to the gamma-ray spectrum in proportions relative to their quantity. Because of this, the DG spectrum must be deconvloved in order to determine the composition of the original FNM participating in the spectrum. In order to determine better FY that can then be used for improved NDA, well-calibrated samples must be measured in similar ways of irradiation and deconvolution of the spectrum.

To do this, an inverse Monte Carlo (IMC) analysis method is being developed to analyze the data collected at the PCDF, ITU, and IRMM. This method works by producing a Monte Carlo (MC) generated DG spectrum that can be compared to the measured data by performing a least-squares minimization (LSM) fit. The MC inputs would then be adjusted and processed and then another LSM fit is performed. After many fits are performed for multiple compositions a maximum-likelihood comparison is made and the most-probable composition can be declared. For an NDA measurement, the FY and other elements contributing to generate the DG spectrum would be held as fixed distributions while the sample composition would vary in the MC to produce a result. For FY improvement, the composition is known so is held fixed in the MC while the FY distribution is varied for the LSM fits.

To develop a preliminary database for the IMC, and the MC used for this method, MCNP6 and Geant4 are used based on their particular strengths of computation. MCNP was developed to model neutron interactions for criticality determination. As such it is being used for this IMC project to determine the expected neutron interactions that occur within FNM based on the unique and variable neutron sources that are being used (e.g. moderated D-T generator of PUNITA at ITU, Pu-nitrate and MOX SF neutrons, etc.). MCNP6 is also being used to model systems that are being developed for this study of an optimum thermal-neutron flux (see Figure 2). Geant4 was developed to model detector physics for high-precision high-energy physics experiments. As such, this program is being used to model the gamma-ray spectra expected to be observed within the detectors (see Figure 3).



Figure 2. The left image shows a model of an ideal graphite (blue) and high-density polyethylene (HDPE) neutron (yellow) moderator that will be used for active neutron interrogation. The <sup>252</sup>Cf neutron source is located in the middle of the HDPE circle. The MOX sample that will use this would be placed in the inner magenta area in front of the right-hand HDPE back-reflector. The right image shows a comparison of the neutron rates entering the sample space under various configurations of the HDPE back-reflector and placement of the sample: black – no reflector and 5 cm back; red – HDPE reflector and 5 cm back; blue – HDPE reflector and 0 cm back (as pictured).



Figure 3. The Geant4 result of the fraction of detected gamma rays compared to the emitted gamma rays from a nearby mono-energetic source. This only shows the multiples of 500-keV inputs up through 8-MeV, though all 8000 1-keV energies were generated.

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Douglas Chase RODRIGUEZ, Jun TAKAMINE, Mitsuo KOIZUMI, and Michio SEYA, "Utilizing Delayed Gamma Rays for Fissionable Material Measurement in NDA", ESARDA 37<sup>th</sup> Annual Meeting, pp. 831-837, 2015.
- 2) D.C. RODRIGUEZ, J. TAKAMINE, M. KOIZUMI, and M. SEYA, "Preliminary Delayed Gamma-Ray Spectroscopy for Non-Destructive Analysis of Fissionable Material," INMM 56<sup>th</sup> Annual Meeting, 2015.
- 3) D.C. RODRIGUEZ, J. HAYSE, M. KOIZUMI, W. MONDELAERS, B. PEDERSEN, P. SCHILLEBEECKX, M. SEYA, J. TAKAMINE, "Active Neutron NDA Techniques for Nuclear Non-proliferation Applications (3) Development of Delayed Gamma-ray Spectroscopy Preliminary Monte Carlo Studies", INMM Japan Chapter 36<sup>th</sup> Annual Meeting, 2015.

## (4) 今後の利用予定:

Future work will consist of generating additional MCNP6 models for detector development and neutron flux evaluations of real systems for inclusion into the IMC Monte Carlo. Additionally, the IMC Monte Carlo is almost complete and many simulations will be required to evaluate the statistical and systematic effects of the IMC analysis of the MC generated DG spectra.

# 5.3 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

5.3.1 外部磁場による Locked Mode 能動制御の MHD シミュレーション MHD Simulation of Locked Mode and Its Active Stabilization Scheme by External Field Effects

井上 静雄

先進プラズマモデリンググループ (平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

## (1) 利用目的:

核融合プラズマ装置において、制作過程で生じるコイルの軸対称性の僅かな破れにより生ずる 誤差磁場はある閾値を超えると、装置内部の磁気島との相互作用を介し核融合プラズマを崩壊 (ディスラプション)へと導く。よってその性質の理解と対策は急務であるが、現在建設中の JT-60SA や ITER では実験的な経験則に基づいて設計がなされており、モデリングによるプラ ズマ崩壊を生ずる磁気島の閾値を予測する事は未だ成されていない。本研究では、特に建設中の ITER・JT-60SA などに代表される大型で超高温のトカマクプラズマにおいて、誤差磁場により 生ずるモードロッキングの予測・及びその能動的回避を行う為に、高磁気レイノルズ数下で装置 形状を考慮した計算が可能な磁気流体シミュレーションコード AEOLUS-IT の開発を行い、 ITER の早期実現に貢献する。

## (2) 利用内容 結果:

磁気島と外部磁場との相互作用により生ずるプラズマ崩壊を ITER・JT・60SA 等の実装置で予 測する為には、実スケールで実形状性を考慮した計算を行わなければならない。実スケールは電 磁流体シミュレーションにおいて、磁気レイノルズ数(S)が高い事を示し、実形状は磁気座標 系に基づく事を意味する。JT・60SA や ITER における磁気レイノルズ数は *S*=10<sup>9・10</sup>となるが、 このような高 S 下で、磁気座標系に基づく計算は困難であった。また、大型トカマクにおいては 装置サイズに比べて、イオンの旋回半径が非常に小さくなる為、乱流により生ずる粘性を除けば、 非常に粘性が小さくなる。高磁気レイノルズ数・低粘性は、言い換えれば、散逸が非常に小さい 状態を意味し、低散逸下で高磁気レイノルズ下特有の微細構造をシミュレーションしようとする と、数値的に不安定になりやすい。

このような課題に対し、本研究では磁気流体シミュレーションコード AEOLUS に対して、以下の座標変換を施した。第一に、高磁気レイノルズ数下特有の微細構造を解像する為に、電流が局在化する有理面近傍にメッシュを集積化した。集積化は座標変換により行わないことも可能であるが、その場合、差分の計算精度が保証されない。よって本研究では座標変換により集積化を

行った。第二に、磁気座標系においては、r=0が特異点となり、そのままでは境界条件を 定める事ができない為、 $r^3$ の依存性をもつ座標を採用する事で元座標の特異点において  $\frac{1}{r^2\sigma}=0$ が常に満たされるような座標系を採用した。ここでfは任意の変数である。

このような座標変換を施すことにより 5 keV の JT-60SA と同程度のパラメタである $S=10^8$ ま での磁気レイノルズ数で磁気座標系に基づく計算に成功した。図 1 は  $S=10^8$ 下における回転磁 場による磁気島のモードロッキングの Locked/Release の周波数依存性を示したものであり、高 周波数帯では、回転磁場がプラズマ自身により遮蔽され、その依存性が  $\omega^{2/5}$ である事が明らか になった。これは、高 S 下では磁気散逸領域のアスペクト比が $\sqrt{S}$  に比例し薄くなる事から、誤 差磁場に対する磁気島の応答は粘性によって支配されている事を意味する。また、粘性により遮 蔽されない程度の周波数帯の回転磁場を用いる事で磁気島の成長を抑えられることも示され、高 S 下の誤差磁場の能動制御の指針が得られ始めている。



図1 高磁気レイノルズ下(S=10<sup>8</sup>)における誤差磁場により補足された磁気島を解放する為に 必要な回転磁場強度の周波数依存性

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

## 学会参加

- 井上静雄、白石淳也、井手俊介、松永剛、諫山明彦、武智学、"外部磁場による Locked Mode 能動制御の MHD シミュレーション"、第 32 回プラズマ核融合学会 年会、名古屋大学、2015 年 11 月 24-27 日.
- 2) S. Inoue, J. Shiraishi, S. Ide, G, Matsunaga, A. Isayama, M. Takechi, "MHD simulation of locked mode and its active stabilization scheme by external field effects", Joint Meeting of US-Japan MHD Workshop and ITPA MHD Disruption and Control Topical Group, NIFS, 3/8, 2016.

- 3) 井上静雄、白石淳也、井手俊介、松永剛、諫山明彦、武智学、"磁気レイノルズ数に対する 磁気島の Mode locking の振る舞い"、日本物理学会 第71回年次大会、3/19、2016.
- 4) 井上静雄、白石淳也、松永剛、武智学、諫山明彦、井手俊介、"高磁気レイノルズ数下における誤差磁場に捕捉された磁気島の回転磁場による能動制御"、第11回核融合エネルギー連合講演会、九州大学、2016年7月14日、14P102.
- 5) Shizuo Inoue, Junya Shiraishi, Go Matsunaga, Manabu Takechi, Akihiko Isayama, Shunsuke Ide, "Active control/stabilization of locked mode in tokamaks at high magnetic Reynolds number", 26th IAEA Fusion Energy Conference, Kyoto, 17-22 October 2016, TH/P1-13.
- 6) Shizuo Inoue, Junya Shiraishi, Go Matsunaga, Manabu Takechi, Akihiko Isayama, Shunsuke Ide, "Nonlinear MHD simulation of active control of locked modes", 21st Workshop on MHD Stability Control A US-Japan Workshop, 7-9 Nov 2016 (Invited).

## Proceedings (会議録)

7) S. Inoue, J. Shiraishi, G. Matsunaga, M. Takechi, A. Isayama, S. Ide, "Active control/stabilization of locked mode in tokamaks at high magnetic Reynolds number", in Proceedings of the 26th Fusion Energy Conference, TH/P1-13 (2016).

## (4) 今後の利用予定:

単一流体近似によるモデル化は、磁気島の成長にとって重要な電子・イオンの運動論的ダイナ ミクスを自己無頓着に含まない欠点がある。特に磁気島の成長を生ずる磁場の繋ぎかわり(磁気 リコネクション)は電子のダイナミクスにより生ずる為、現象を自己無撞着に再現するには電子 スケールまで解く必要がある。 よって本年度は、流体シミュレーションにおいて自己無頓着に 表現する事が不可能な運動論的効果を、電子・イオンの運動を自己無頓着に解く事が可能な電磁 粒子シミュレーションコードにより検証し、昨年度得た磁気流体シミュレーションによる結果と 相互検証することで、結果の妥当性を検証や、その理解を補強することを目指す。JT・60SAのパ ラメタを用い粒子シミュレーションに必要な計算資源を試算すると、 $2 \times 10^{19}$  [m<sup>-3</sup>]の低密度放電 時において、 $\omega_{pe}/\omega_{ce}$ ~5、一次元あたり 10000 個のグリッドが必要になり、トカマクの三次元計 算を行う為には少なくとも $10^{14}$ 個の粒子を扱わなければならず研究に着手することが難しかっ た。そこで本研究では、粒子のダイナミクスをトロイダル方向にモード展開する計算手法を適用 し、 $10^{10\cdot11}$ 個程度の粒子数に抑え、ICEXにおいて計算を行い、磁気島成長過程の理論的解明と 流体コードへのフィードバックを目指す。

また、磁気島成長の素過程である磁気リコネクションは、繋ぎ変わる磁場と直交する成分の磁 場(縦磁場)によりその性質が変化する。これまでに、縦磁場が無い場合、イオン・電子加速機 構が明らかにされ、粒子の効果的加速により生ずる早い磁気リコネクションに対する物理描像を 得ている。これにより、トカマクプラズマ等の縦磁場存在下における磁気リコネクションの物理 機構解明の土台が整った為、今年度前半の短期的な課題として、縦磁場存在下において、物理描 像の共通点や相違点を明らかにし、基礎的な縦磁場下の磁気リコネクションの理解を構築する予 定である。

# 5.3.2 JT-60U における慣性力を通じたプラズマ回転の熱輸送への影響 Effects of Plasma Rotation on Heat Transport Via Inertial Forces in JT-60U

成田 絵美

先進プラズマモデリンググループ

(平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

## (1) 利用目的:

トカマク型核融合プラズマにおいて、プラズマの回転分布はエネルギー閉じ込めと MHD 安定 性の観点から重要視され、これまで多くの研究がなされてきた。エネルギー閉じ込めへの寄与に ついて、その研究のほとんどは、回転から生じる小半径方向の電場(径電場)の勾配が乱流輸送 を抑制する効果によって、実験での回転と閉じ込め性能の関係を説明している。特にプラズマ周 辺部に関しては、径電場の乱流輸送への影響を考慮することで、数値計算で実験を再現する手法 が確立している。しかしながら、プラズマ中心部などでは緩やかな径電場の勾配がしばしば観測 され、このような場合では径電場の勾配による乱流輸送の抑制効果は小さいと考えられるため、 回転によりエネルギー閉じ込めの性能が改善された実験結果を説明することができない。

本研究では大型核融合実験装置 JT-60U で行われた実験のうち、プラズマ中心部で径電場の勾 配が急峻ではない次の 2 つの実験に着目した。1 つ目は緩やかな内部輸送障壁(ITB)が温度分 布に形成された実験である。この ITB プラズマでは、プラズマの回転方向がプラズマ電流と同 じである順方向回転時に、電子の熱輸送の抑制によって閉じ込め性能が改善することが報告され ている。2 つ目は ITB を持たない標準的な H-mode プラズマの実験であり、この H-mode プラ ズマでは回転のプラズマ中心部への寄与は観測されていない。これらの実験の閉じ込め性能は乱 流輸送に左右されている。そこで乱流輸送の特性を理解し、回転が閉じ込め性能に影響を与える 物理機構を明らかにするために、ジャイロ運動論コード GKW [A. G. Peeters *et al.*, Comput. Phys. Commun. 180, 2650 (2009)] を用いた乱流輸送解析を行った。GKW に限らずジャイロ運 動論コードは高並列計算が不可欠であるため、大型計算機 ICE X による計算が必要となった。

## (2) 利用内容·結果:

(1)で述べた 2 種のプラズマでは、中性粒子ビームの入射方向によってプラズマの回転方向を 順方向と逆方向に変えている。このときの回転速度 V<sub>0</sub>の小半径方向分布を図 1(a)と(b)の左上図 に示す。これらのプラズマ回転に由来する慣性力が乱流輸送を駆動する不安定性に及ぼす影響を 調べた。ここで用いる GKW コードは回転座標系においてジャイロ運動論方程式を解くことによ って慣性力を考慮することが可能となっている。本計算では Miller 平衡モデルを通じて磁場の 形状を考慮している。また、3 粒子種(電子・主イオン・不純物イオン)についての方程式を解 き、衝突と電磁揺動の効果を含めた計算を行っている。

図1にプラズマの回転速度  $V_{\phi}$ と角速度 $\Omega$ の勾配  $\Omega'=-d\Omega/d\rho$ に対する不安定性の線形成長率  $\gamma$ の依存性を評価した結果を示す。ここでITBとH-modeプラズマのそれぞれにおいて、 $V_{\phi}$ と $\Omega'$ 以外の変数は固定されている。また、角速度は  $\Omega=-d\Phi/d\Psi$ で定義され、 $\Phi$ は静電ポテンシャル、 $\Psi$ 

はポロイダル磁束、 $\rho$ は規格化小半径である。 $\Omega$ の定義からわかるように、 $\Omega'$ は  $V_{\phi}$ の勾配に準 じて変化する。図1の×の位置に示すように、図1(a)の ITB プラズマでは順・逆方向回転共に $\Omega'<0$ となるために、順方向回転時の方が低い $\gamma$ を持つことがわかる。実験では順方向回転時の方で輸 送が抑えられ、閉じ込め性能が改善されているため、この数値計算の結果は定性的に実験での観 測と一致するものである。一方、H-mode プラズマでは  $V_{\phi}$ と共に $\Omega'$  符号も変化するために、回 転方向によらず、同等の $\gamma$ が得られている。実験ではプラズマ中心部において、回転の輸送に対 する寄与は観測されていないため、H-mode プラズマについても定性的に一致する結果となっ た。以上から  $V_{\phi}$ の大きさと勾配の関係が ITB と H-mode プラズマの相違の要因になることが示 唆された。



図 1 (a) ITB プラズマの $\rho$  = 0.45 における波数  $k_{\theta}\rho_{s}$  = 0.57 と(b) H-mode プラズマの $\rho$  = 0.5 における  $k_{\theta}\rho_{s}$  = 0.50 での $\gamma$ の  $V_{\phi}$ と $\Omega$ ' に対する依存と、 $V_{\phi}$ の $\rho$ 方向分布 (左上図)。

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 学会発表

- 1) 成田絵美、本多充、林伸彦、浦野創、吉田麻衣子、井手俊介、「JT-60U におけるトロイダ ル回転方向に関連した熱輸送変化の物理機構」、プラズマ・核融合学会第 32 回年会、2015 年 11 月 24-27 日、名古屋大学.
- 2) 成田絵美、本多充、吉田麻衣子、林伸彦、浦野創、井手俊介、「JT-60U におけるトロイダル 回転が熱輸送に与える影響の ジャイロ運動論コードを用いた解析」、日本物理学会第71回 年次大会、2016年3月19-22日、東北学院大学.

#### (4) 今後の利用予定:

平成 27 年度は数値計算と実験との比較を定性的に行ってきたが、平成 28 年度は定量的な比較も行い、実験で観測されているプラズマ回転の輸送に対する影響の説明を行う。加えて、解析対象とする放電を増やすことで、より広いパラメータ領域において結果の検証を行う予定である。

## 5.3.3 汎用型充填体内粒子識別コードの開発整備

## Development of Reassembly System for Pebble Bed Structure

関 洋治

ブランケット工学研究グループ

(平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

## (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、数値シミュレーションの再現性確認のために、充填体内流動実験と 直接比較を実施することも重要である。そのためには、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。これを実現するためには、流体可視化実験での充填 配置をそのまま取り出して、数値シミュレーション上のソリッドとして再構築(数値化)するこ とが必要である。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 キャンした動画から、数値計算用のデータとして変換可能なコード開発を実施し、さらには様々 な容器および様々な充填体粒子径に対応する事が可能である汎用性のあるコード開発を目指し 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。



図1 汎用型充填体内粒子識別コードの開発整備における体系図

## (2) 利用内容·結果:

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。また、 流体可視化実験の画像をスキャンし個別に粒子を判別し充填体をデジタル化するコードも開発 した。今回の開発では、動画の取り出し、粒子の判別、粒子モデルの再構築、計算格子の作成、 三次元流体計算の一連の解析を矩形容器のみならず、円筒容器でも実施可能な汎用型充填体内粒 子識別コードを開発した。

図1に当該システムのフローを示す。充填体内粒子識別プログラムでは、ユーザーインターフ エースから粒子の中心点を抽出し、充填配置をデジタル的に再構築することが可能である。さら には、仮想的な粒子を配置することも可能で有り、図2(a)で示すような様々な充填筐体(x,y,z = 50 mm×28 mm×400 mm)に粒子(直径1 mm)をデジタル上で充填後、加振することで実 現象に近い充填率を得ることが可能とした。また、矩形容器だけでなく、円筒容器で充填するこ とが可能となり、より汎用性の高いシステムとすることに成功した(図2(b))。また、流体計算 では、粒子間の狭窄の空隙には、大きく歪んだ計算格子が作成されるため、ランダムに充填する と計算が発散しやすくなる。そこで、本システムでは、図2(c)で示すような Fillet を隣接する粒 子間に設けることによって、この問題を解決し、流体計算の発散を抑制した。



図2 各種容器及び充填方法



(a)矩形容器-面心立方格子最密充填

(b)矩形容器-ランダム充填 (d

図3 各種容器及び充填方法における速度ベクトル[m/s]

矩形容器に粒子を充填させ、流体可視化試験を実施したところ、壁近傍で充填体中央よりも速 い流れが確認された。これは、壁近傍の空隙が他よりも多きことに起因する。そこで、本コード で模擬粒子を充填させ、流体計算を実施した。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。矩形容器に理想的な配置で粒子を 充填したケース(図 3(a))では、容器壁面に生じるより大きな空隙で、流速が大きくなることを 確認した。さらに、矩形容器に粒子をランダム充填したより実現象に近いケース(図 3(b))でも、 容器壁面に間欠的ではあるが、流速が大きい部分を再現できおり、本システムが実現象と整合す ることを示した。さらに、円筒容器(直径 10 mm)にも模擬粒子(3mm)を充填させ、充填体 内部の 3 次元流体解析を実施した(図 3(c))。矩形容器と異なり、壁近傍の空隙と中心付近の空 隙の違いが少ないため、壁近傍の粘性が抗力を有する部分以外は、大きな流速ベクトルが存在す ることを確認した。

本コード開発により、微小球充填構造の様相や微小球充填体内の流体および濃度を把握する強 力な予測ツールの精度を実証可能とした。汎用性が高い本コードは、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:

本コード開発により実機試験体に合わせるための計算対象を用いて、Verification&Validation を実施することが可能となった。これにより、充填体内流体中物質輸送の統合シミュレーショ ン・システムの構築が完了した。

<sup>(</sup>c)円筒容器-ランダム充填

## 5.3.4 ITER/TBM ポートセルの遮蔽解析

## Shielding Analysis of ITER/TBM Port Cell

佐藤 聡

核融合中性子工学研究グループ

(平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

#### (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)システムの遮蔽解析 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 冷却水中に生成される<sup>16</sup>N 及び<sup>17</sup>N の生成量を計算した。生 体遮蔽体外側のポートセルにおいて、冷却水中に生成された<sup>16</sup>N から発生する崩壊ガンマ線及び <sup>17</sup>N から発生する中性子によるポートセル内の電子機器の吸収線量を、簡易モデルを用いて MCNP 解析を行った。また、<sup>17</sup>N から発生する中性子により、ポートセル内の冷却水配管が放 射化され、崩壊ガンマ線が発生する。ポートセル内の冷却水配管の放射化による崩壊ガンマ線輸 送計算を行い、ポートセル内の運転停止後の実効線量率等を計算した。計算モデルを図 1~3 に 示す。図 1 は TBM システムを組み込んだ ITER 全体モデル、図 2 及び図 3 はポートセルの簡易 モデルを示す。図 4 及び 5 に <sup>16</sup>N から発生する崩壊ガンマ線によるポートセル内の電子機器(シ リコン)の吸収線量分布を示す。吸収線量は非常に高い値であり、今後は、吸収線量を低減させ ることが課題である。



図1 TBM システムを組み込んだ ITER 全体モデルの MCNP 形状入力データ(水平断面図)

#### JAEA-Review 2016-024



図2 ポートセルの MCNP 形状入力データ(垂直断面図)



図3 ポートセルの MCNP 形状入力データ(水平断面図)



図4 <sup>16</sup>Nからの崩壊ガンマ線によるポートセル内の電子機器の吸収線量(垂直断面図)

#### JAEA-Review 2016-024



図5 <sup>16</sup>Nからの崩壊ガンマ線によるポートセル内の電子機器の吸収線量(水平断面図)

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

## (4) 今後の利用予定:

継続して ITER の TBM システム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。

## 5.3.5 ITER マイクロフィションチャンバーの詳細設計のための核解析

Neutronic Analysis for Detailed Design of the ITER Micro Fission Chamber System

石川 正男

計測開発グループ

(平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

#### (1) 利用目的:

国際熱核融合実験炉(ITER)の開発計画において、原子力機構は日本国内機関(JADA)として、各種計測装置(マイクロフィッションチェンバー、ポロイダル偏光計、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)の調達を進めている。このうち、ITERの中性子束モニタとしてプラズマからの全中性子発生量を測定するマイクロフィッションチェンバー計測装置(以下「MFC」という。)は、検出器や信号ケーブルを恒久的に高放射線環境下の真空容器内に設置するため、それらの機器のITER 運転中のダメージを評価する必要がある。この評価を行うためには非常に複雑な解析モデルを使用する必要があるため、高精度の評価を行うためには大型計算機を用いた解析が必要であった。

## (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 目的とする計測装置であり、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を通して真空容器外に取り出され

される具空導入端子を通して具空容器外に取り出され る。高速中性子の割合が高い中性子束環境下にある検 出器や信号ケーブル等の真空容器内機器は、高速中性 子による原子のはじき出し効果によるダメージを受け るが、これらの機器は真空容器内に恒久的に設置され るため、ITER の全運転期間中健全性を保つことが必 要である。



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

このため、本研究では ITER の全運転期間に渡る真空 容器内機器のダメージの程度を把握するために、機器を 構成している材料の大型計算機を利用した核解析を実 施することにより、原子のはじき出し数(以下「dpa, (displacement per atom)」という。)を評価した。

# 真空容器内機器の高速中性子によるダメージ評価 2.1 解析コード及び解析条件

本解析では、真空容器内機器に到達する中性子スペクトルを評価するため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。



図 3 MCNP 用 ITER トカマク モデル (C-lite モデル)

表1 MFC 検出器の主要材質

主な材料	主要機能
SUS316L	機器の真空壁
	及び構造材
Cu	電気伝導体
${ m SiO}_2$	電気絶縁材料
$Al_2O_3$	電気絶縁構造材料

dpaの評価を行う MFC 検出器に使用されている主要 材質を表 1 に示す。MCNP では計算された中性子スペ

クトルの元で、指定したセルにある材質が置かれた時の dpa を計算することが出来る。具体的 に dpa は以下の式で計算される。

## dpa=0.8\*o/(2Ed)

ここで、Ed は弾き出しに必要なエネルギー、oは中性子束に対する弾き出し反応断面式である。 本解析では、MFC 検出器を図 3 に示すような球状のセルで模擬し、それぞれの材質のダメージ を個々に評価することで、MFC 検出器の dpa を評価した。

## 2.2 計算結果

表 2 に MCNP の計算された反応断面積  $\sigma$ を示す。大型計算機を使用したことで計算スピード が上がり、表 2 に示すように計算誤差の目安となる f.s.d.はいずれも 1%を下回っており、高い精 度の評価ができている。

Material	Displacement (MeV/s/cc)	f.s.d.
SS316l	7.73E+11	0.0067
${ m SiO}_2$	1.37E+12	0.0067
Cu	9.47E+11	0.0062
Al <sup>2</sup> O <sup>3</sup>	1.39E+12	0.0066

表 2 MCNP 計算結果

Material	Displacement (MeV/s/cc)	0.8/(2*Ed) =1E+4 correction	Input Density (atom/cc)	dpa/s	168e+7s (0.533y)
SS316L	7.73E+11	7.73E+15	8.59E+22	9.00E-08	1.513
$SiO_2$	1.37E+12	1.37E+16	3.00E+24	6.86E-09	0.115
Copper	9.47E+11	9.47E+15	8.49E+22	1.12E-07	1.876
Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	1.39E+12	1.39E+16	1.19E+23	1.17E-07	1.973

表 3 ITER 運転完了時の dpa

次に ITER 運転終了時の dpa を評価した。表 2 に必要な補正をすることで、ITER 運転終了時の 積算 dpa が評価できる。この評価に当たっては、はじき出しに必要とされるエネルギーEd は 全て 40eV (4E-4MeV) と仮定した。表 3 に核材質ごとの運転シナリオ完了時の dpa を示す。評 価の結果、dpa は、絶縁体として用いている SiO<sub>2</sub>を除いては約 1.5~2.0 程度であることがわか った。

続いて、信号ケーブルに関する dpa の評価も上記と同様に実施した。その結果、ITER の全運 転期間終了後の dpa は MFC 検出器と同等であるとの結果が得られた。

#### 3.まとめ

本研究では MFC 真空容器内機器の ITER 運転中のダメージを調べるために、その目安となる dpa を大型計算機を用いてを評価した。その結果、絶縁体として用いている SiO<sub>2</sub> を除いては約 1.5~2.0 程度であることがわかった。これまで dpa が 2.0 程度であれば MFC 検出器の動作に影 響を与えないことが報告されており、今回の結果から MFC 検出器は ITER の運転中に健全性を 維持できることが示唆される。本結果は、平成 28 年度に実施される予定の MFC 真空容器内機 器の最終設計レビューにて報告される予定である。

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 石川他、「Development of the In-vessel Components of ITER Microfission Chamber System for Fusion Power Measurements in ITER」 25th International TOKI conference、 3rd - 6th, Nov. 2015, Gifu, Japan.

## (4) 今後の利用予定:

平成 28 年度は、MFC だけでなく他の各計測装置の予備設計レビュー及び最終設計レビュー 立て続けに実施され、それに向けたより高精度な核解析が必要となる。特に、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評価は重要であり、その中でもポートセル領域の評価 が重要な解析項目に位置付けられている。このため、これらの評価を各計測装置担当者や ITER 機構の核解析担当者とも協力しながら、精度の高い解析を実施していく予定である。

# 5.3.6 ITER 用周辺トムソン散乱計測装置の集光光学システムの遮蔽設計のための核解析 Neutronic Analysis for Radiation Shield of the Collection Optics of ITER Edge Thomson Scattering System

谷塚 英一

計測開発グループ

(平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

## (1) 利用目的:

ITER 計画において、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。平成 26 年度は、この遮蔽性能について、計測ポート周 辺のみを簡易的に模擬したモデルを用いた核解析によって評価した。平成 27 年度は、ITER 炉 心全体の構造について新しい設計を反映したモデルを使用し、最新の機械設計による周辺トムソ ン散乱計測装置について遮蔽性能を評価するため、インタースペースと呼ばれる保守空間におけ る ITER の運転停止約 12 日後の線量率について、BX900 および ICE X 大型計算機による並列 計算を行った。また、同時に、計測のためのミラーを保護するためのシャッター装置について、 熱解析に必要な核発熱量について計算を行った。

#### (2) 利用内容·結果:

## 1. はじめに

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(図 1)。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る。集光光学システムでは、計測していない時にミラーを保護する目 的でシャッター装置を設置しているが、シャッターが、プラズマからの中性子と周辺構造物から のガンマ線によって発熱し、破損する恐れがあるため、シャッターの冷却システムの設計の目安 としての核発熱量を評価する必要がある。また、レーザー入射システムと集光光学システムは、 それぞれプラズマからインタースペースと呼ばれる保守空間への貫通孔を必要としており、これ らの貫通孔からインタースペースに到達する中性子とガンマ線により、周辺の構造物が放射化さ れ、運転停止後約 2 週間後(10<sup>6</sup>秒後)の保守・点検期間における人の立ち入りを困難にする恐 れがある。ITER の設計では、インタースペースにおける 1 つの計測設置による停止後線量率の 増加分は 15 µSv/h 以下と定められており、ETS の設計ではこの設計目標値を満足する必要があ る。

そこで、シャッターの冷却システムの設計のための熱解析に必要な入熱条件を得るため、

1) シャッターの核発熱について計算を行った。計測時のシャッターが開いた状態での核発熱 も合わせて計算した。 また、レーザー入射系と集光光学系の貫通孔による停止後線量率の増加分を評価するため、 2) インタースペースの停止後線量率について、計算を行った。



図1 周辺トムソン散乱計測装置の概要

図2 解析モデル(断面図)

2. 解析モデル

 C-lite Version 2(図 2): 計測ポート以外の構造物を含む ITER 炉心のトロイダル方向 40 度を模擬したモデル
 計算コード: MCNP V5

計算コード: MCNP V5中性子発生分布: 中性子発生分布:ITERの出力 500 MW 運転で想定される中性<br/>子発生量分布を想定し、核発熱を計算した。また、停止後線量<br/>の評価には、SA2 シナリオと呼ばれる、ITER での 20 年の運<br/>転を想定した中性子フルーエンスを用いた。

#### 3. シャッターの核発熱計算結果

シャッターの核発熱の計算結果について図3に示す。ここで、シャッターの材質は、ステンレス鋼(密度7.93 g/cm<sup>3</sup>)である。計算の結果、シャッターの核発熱は、シャッターが閉じた状態で、プラズマからの中性子を直接受けるブレード部分で最大4.4×10<sup>-1</sup> W/cm<sup>3</sup>となった。また、シャッターを開けた状態での核発熱は、最大で1.5×10<sup>-1</sup> W/cm<sup>3</sup>となった。これらの解析結果は、 冷却システムの設計のための熱解析の入熱条件として利用した。

#### 4. インタースペースの停止後線量率計算結果

インタースペースの停止後線量率の計算結果について、図 4 に示す。ここで、計測用第 1 壁 (DFW) と計測遮蔽物 (DSM) の組成は、DFW がステンレス鋼 80%と水 20%で、DSM がス テンレス鋼 75 %と水 25 %である。計算の結果、評価領域の停止後線量率に対する ETS の寄与 量は 6 µSv/h となり、設計目標値を満足していることが確認できた。



(a) シャッター閉
 (b) シャッター開
 図 3 シャッター装置の核発熱



ETSの寄与量:6µSv/h

図 4 計測ポートの停止後線量率分布とインタースペースの 停止後線量率への ETS の寄与量

## 5. まとめ

平成 27 年度は、前年度までに実施した構造設計を反映し、ポート内機器の支持構造物等を含め、より現実に近いモデルによる核解析を行った。モンテカルロ法を用いた複雑なモデルによる 核解析は、通常、非常に多くの計算時間を必要とするが、BX900 および ICE X 大型計算機によ る並列計算を行う事で、ETS のシャッター装置の核発熱とインタースペースの停止後線量率の 計算を終えることが出来た。また、それにより、シャッター装置の熱解析に必要な入熱条件を明 らかにし、インタースペースの停止後線量率が設計目標値を満足してい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):

なし

## (4) 今後の利用予定:

なし

# 5.3.7 日本が調達する ITER 計測機器の詳細設計のための核解析 Neutronic Analysis for Detail Design of Diagnostics Procured by Japan

嶋田 恭彦

計測開発グループ

(平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

#### (1) 利用目的:

日本が調達を進める ITER の計測装置につい て、装置の保護や人手による保守の観点から、核 解析による放射線(中性子線とガンマ線)遮蔽性 能の評価は必須である。日本が調達する各計測装 置のうち、光学機器は高温・高磁場・高放射線状 態となる炉心プラズマ近傍の計測ポートと呼ば れる遮蔽体の内部や後部に設置される(図 1)。 しかし、ITER の運転中にプラズマを光学的に計 測するためには、遮蔽体に貫通孔を開けて光学ミ ラーを設置する必要があり、この貫通孔が放射線 の通り道となって光学ミラーが放射線に晒され ることになる。その結果、ミラーが核発熱で変形 し、計測精度を劣化させる恐れがある。

また、貫通孔を通過した放射線は、各ポート奥 の保守空間(インタースペース)に達して空間内 上部ポート インター スペース 計測ポート オンター スペース ポート スペース 水平ポート チョー

図1 ITERの断面図とポート位置

の構造物を放射化し、保守期間中の人の立ち入りを困難にする恐れがある。そのため、本研究で は、中性子・光子輸送計算コード MCNP を用いた核解析によって遮蔽性能の評価を行った。こ れにより、貫通孔を通過する放射線を低減するために、適切な迷路構造(貫通孔の折り曲げ構造) を有した光学システムの設計の指針を与えることを目的とする。その結果、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を達成する事が可能となる。

#### (2) 利用内容·結果:

本研究では、ITERの計測装置(周辺トムソン散乱計測装置、ポロイダル偏光計測装置、IRサ ーモグラフィー)について、1)計測装置の健全性の維持、2)インタースペースでの放射線量の 低減の観点から、各計測装置の光学ミラーの核発熱量とインタースペースの停止後線量率(ITER の運転停止約 12 日(10<sup>6</sup>秒)後の線量率)の評価を行った。光学ミラーの核発熱量の計算は、 冷却システムの設計の目安となることを目的とし、冷却の無い状態を想定して計算した。また、 停止後線量率についてはポートごとにインタースペースの評価領域(図 3.4 と図 3.5)における 設計目標値(計測装置の設置による増加分が、上部ポートで 20 µSv/h 以下、水平ポートで 15 µSv/h以下)を満足することを目指して、計算結果を基に遮蔽設計の改良を行った。ここでは、 ポロイダル偏光計測装置について行った核解析結果の一部について紹介する。計算には、モンテ カルロ中性子・光子輸送計算コード MCNP5 を使用し、断面積ライブラリーには核融合計算用 に用意された FENDL-2.1 を使用した。

#### 1) 光学ミラーの核発熱量評価

ポロイダル偏光計測装置は、プラズマの長時間維持・高性能化を目指した運転のために必要な 内部磁場構造を測定する重要な計測装置であり、プラズマを通過したレーザー光の偏光状態の変 化を測定する。図 3.1 は本装置の設置位置を示している。上部ポートプラグと水平ポートプラグ 内には、レーザーを伝搬させるための光学ミラーを設置する。これらの光学ミラーの核発熱量に ついて計算を行った結果、光学ミラーの核発熱量は上部ポートのミラーで最大 0.91 W/cm<sup>3</sup>(図 3.2)、水平ポートのミラーで最大 0.04 W/cm<sup>3</sup>(図 3.3) となった。これらの結果は、ミラーの詳 細設計への設計条件として用いられた。



図 3.1 ポロイダル偏光計測システムの設置位置



図 3.2 上部ポートの光学ミラーの 核発熱 (W/cm<sup>3</sup>)



図 3.3 水平ポートの光学ミラーの 核発熱(W/cm<sup>3</sup>)

## 2) インタースペースの停止後線量率評価

また、インタースペース内の評価領域における停止後線量率の増加量について計算を行った結 果、上部ポートで 57 μSv/h 及び水平ポートで 3000 μSv/h となり、設計目標値を上回った。 そこで、遮蔽性能を改善するため、貫通孔の径を可能な限り小さくすること、遮蔽物を追加す ること及びレーザー光路の変更を検討した(図 3.4、図 3.5)。その結果、上部ポート評価領域の 停止後線量率を 9 µSv/h に、水平ポートの停止後線量率を 15 µSv/h にそれぞれ減少させること に成功し、設計目標値を満足した。



図 3.4 上部ポートインタースペースの停止後線量率の低減



図 3.5 水平ポートインタースペースの停止後線量率の低減

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) M. Ishikawa, T. Shimada, et al., "Recent Progress on Neutronic Analysis, for Detail Design of Diagnostics Procured by JADA", 10th ITER Neutronics Meeting (ITER Organization, France, 30th June 3rd July, 2015).
- 2) 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、名古屋大学、24pC01、(2015 年 11 月).

## (4) 今後の利用予定:

本研究では、ITER 計画において日本が調達する3つの計測装置について核解析を行った。その結果、それぞれの計測装置について、光学ミラーの冷却設計に必要な核発熱量を明らかにした。 また、ポロイダル偏光計測装置について、停止後線量率の計算結果を基に放射線に対する遮蔽性 能を改善させ、計測精度を維持しつつ設計目標値を満足する遮蔽設計を達成できた。

平成 28 年度は、日本が調達予定のその他の計測装置についても同様の核解析を行っていく予 定である。

# 5.4 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

## 5.4.1 周辺/内部輸送障壁の形成/崩壊モデルの確度向上のための乱流輸送シミュレー ション研究に向けた数値コードの ICE X における性能調査

Benchmark of Turbulence Codes for Simulation Study of ITB / ETB Formation / Collapse for Improvement of Turbulent Transport Models on ICE X

瀬戸 春樹

プラズマ理論シミュレーショングループ

(平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

## (1) 利用目的:

プラズマ境界近傍に周辺輸送障壁(ETB)が形成され、炉心の閉じ込め性能が改善する高閉じ 込めモード放電は ITER や原型炉の標準運転モードである。しかしながら、ETB 形成の理論研 究としては径電場やプラズマ回転のシアがプラズマ乱流を抑制して輸送障壁が形成されるモデ ル等が提案されているが、実験を定量的に説明出来るモデルの確立には至っていない。また、プ ラズマ内部に内部輸送障壁(ITB)が形成される ITB 放電は高い閉じ込め性能と自発電流割合を 同時に達成できるため、原型炉に要求される高閉じ込め性能・高自発電流割合の運転の実現には ITB と ETB を重畳した放電による運転が不可欠である。しかしながら、ITB 形成の理論研究に おいても形成条件の解明や輸送モデルの確立には至っていない。

本課題では、トカマクプラズマ中の乱流を記述する簡約化磁気流体力学方程式に径電場シアを 駆動する径方向の釣合いを導入した輸送障壁形成/崩壊モデルを用いた大規模シミュレーション により、輸送障壁形成/崩壊を精度よく再現可能な乱流輸送モデルを開発するための物理的指針 を得ることを目的としている。ここで、ETB の形成/崩壊の大規模計算には周辺乱流コード BOUT++、ITB の形成/崩壊の大規模計算にはコア乱流コード R5F を用いる。

ETB 形成/崩壊シミュレーションに用いる BOUT++コードは米国ローレンスリバモア国立研 究所と英国ヨーク大学が中心となって開発が行われている周辺プラズマ MHD/乱流シミュレー ションフレームワーク(実空間3次元の初期値問題)であり、ファイル入出力や空間離散化手法 等を提供するシステムモジュール群と個別の物理モデルを記述する物理モジュールから構成さ れる。そこで、本研究では BOUT++コード上で動作する物理モジュールとして ETB 形成/崩壊 の数値計算コード(BOUT++LH コード)の開発を行っている。

一方、ITB 形成/崩壊シミュレーションに用いる R5F コードは原子力機構で開発されたコアプ ラズマの乱流を記述する流体コードである。R5F コードでは線形部はクランクニコルソン法に より、非線形部は予測修正子法により時間積分される。空間離散化は円柱座標(**r**、θ、z)にお いて、r 方向は実空間 2 次精度の差分により、(θ、z) 成分に関しては線形項はスペクトル法に よりフーリエ空間(m、n)で、非線形項は擬スペクトル法により実空間で評価される。

BOUT++LH コードと R5F コードは国際核融合エネルギー研究センターが管理する HELIOS 計算機上で開発が行われているが、同計算機は平成 28 年 12 月に運用停止となる。そのため、 平成 27 年度は平成 28 年度の ICE X の大型計算機利用課題申請に必要となる BOUT++LH コー ドと R5F コードの ICE X における性能調査を行った。

### (2)利用内容·結果:

#### 1) BOUT++LH コードの ICE X における性能評価

表1はBOUT++LHコードの並列化効率、実行性能、実行効率、使用メモリ量の並列数依存性 を整理したものである。並列化効率に関しては78%程度と良好な結果が得られている一方、実行 効率に関しては2%弱と大型計算機課題申請における実行効率の評価得点の上限点(5%)を大き く下回った。これは、1)BOUT++コードは任意の物理モデルを解析対象にした流体シミュレーシ ョンフレームワークであるため、システム内部の計算、通信、I/O処理等に関してはコード汎用 性を損なわない範囲において最適化がなされている、2)FFTWにICEXへ最適化された版では なくHELIOS計算機で動作確認が完了している汎用版を利用していることが一因と考えられる。

コア数	経過時間(秒)	並列化効率(%)	実行性能(GFLOPS)	実行効率(%)	メモリ量(GB)
512	709.79	100.00	384.44	1.88	35.97
1024	381.64	92.99	801.65	1.96	57.78
2048	226.90	78.21	1611.81	1.97	51.85

表1 BOUT++コードの ICE X における並列化効率、実行性能、実行効率、使用メモリ量

#### 2) R5F コードの ICE X における性能評価

表2はR5Fコードの並列化効率、実行性能、実行効率、使用メモリ量の並列数依存性を整理したものである。現在のR5Fコードの実装では1ノードに24プロセスを割り当てると1プロセスあたりのメモリ帯域幅が不足して計算速度が低下することが判明したため、1プロセスあたりのメモリ量の確保・メモリアクセスの高速化の観点から、1ノードあたり24コアを確保した上で8プロセス並列にて計算を行っている。並列化性能の調査における「コア数」を基に各コードに許可される最大並列数(確保出来る CPU 数)が決定されると判断して、表2には実際のプロセス並列数ではなく計算時の占有コア数を表に記載した。そのため、MPI並列数で評価した実行効率は表2の値を3倍したものに相当し、256並列に対して約1.5%である。

表 2: R5F コードの ICE X における並列化効率、実行性能、実行効率、使用メモリ量

コア数	経過時間(秒)	並列化効率(%)	実行性能(GFLOPS)	実行効率(%)	メモリ量(GB)
192	72.72	100.00	45.76	0.60	35.55
384	41.37	87.89	86.17	0.56	30.82
768	26.84	67.73	150.36	0.49	25.99

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 口頭発表

- H. Seto and M. Yagi, Flux-driven turbulence simulation of L-H transition, 2015 BOUT++ mini-workshop, LLNL, Livermore, USA, 2015-12-19, https://bout.llnl.gov/content/assets/docs/workshops/2015/Bout++\_agenda\_December2015 -v4.pdf, Day3: Session 3.
- 瀬戸春樹, 矢木雅敏, X.Q. Xu, 熱源駆動型乱流輸送モデルによる L/H 遷移シミュレーション研究, 日本物理学会第 71 回年次大会, 東北学院大学 和泉キャンパス, 仙台市, 2016-03-19, http://w4.gakkai-web.net/jps\_search/2016sp/data/html/program02.html, 19 日目 AD 会場 8 番目(19pAD-8).

#### (4) 今後の利用予定:

平成28年度大型計算機課題申請時当初の計画では割当計算資源の9割程度をBOUT++LHコ ードによるETB輸送障壁形成/崩壊シミュレーションに利用する計画であった。BOUT++コード はプラズマ揺動を記述する時間1次元実空間3次元の4次元データの集合をプロセス毎にバイナ リファイルに出力した上で、IDLやPythonで記述された後処理スクリプトで解析を行うコード 設計となっている。しかしながら、ICEXではPython言語による後処理スクリプト動作環境の 構築に必要となる多数のパッケージの導入にpip等のパッケージ管理システムが利用出来ない ことが判明したため、各パッケージを手動で導入する必要が生じた。

さらに、原子力機構の核融合部門が量子科学技術研究開発機構に移管した平成 28 年度からは ICE X へのアクセスを SSL-VPN 経由で行う必要が有り ICE X に接続中は外部ネットワークと の接続が遮断されるため、上記の Python 環境構築の際はパッケージのダウンロード、ICE X へ の導入・動作検証毎に外部ネットワークと SSL-VPN ネットワークの切り替えが必要になるた め、BOUT++LH コードの出力データの解析環境構築に想定以上の時間を要している。

ETB 輸送障壁形成/崩壊シミュレーションでは揺動の非線形飽和、ETB 形成/崩壊に至る大量の時系列データを扱う必要が有るため出力データをローカル端末にダウンロードして解析を行うことは現実的ではない。そのため、ICE X 上の解析環境構築の進捗によっては出力データ量が少ない線形計算によるパラメータサーベイを中心に行い、ローカル端末で解析を行う等の計画の変更を検討する。

平成 28 年度の R5F コードの ICE X の利用に関しては、年度前半は ICE におけるハイブリッド並列に基づく最適化、高分解のシミュレーションの可能性を検討し、年度後半に ITB 形成シミュレーションのプロフダクトランを行う予定である。

5.4.2 高エネルギー粒子・MHD 連結モデルに基づくトカマクプラズマの電磁流体不安定 性の線形安定性解析手法の開発

Development of Linear Stability Analysis Code for Magnetohydrodynamic Instabilities in Tokamak Plasmas using Energetic Particle + MHD Hybrid Model

松山 顕之

プラズマ理論シミュレーショングループ (平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

#### (1) 利用目的:

トカマクプラズマを対象とした線形安定性の数値解析は高性能放電を実現するための運転領 域や制御手法の開発において重要な役割を果たしている。プラズマ理論シミュレーショングルー プでは拡張 MHD 安定性解析コード MINERVA を開発しており、トカマク放電を模擬した実形 状の平衡解を入力として、長波長の電流駆動型モードから短波長の圧力駆動型モードまで幅広い レンジの線形不安定性の同定に適用できる。特にプラズマ中のトロイダル回転やポロイダル回転 を含めた系に適用できるという点が世界的にもユニークなコードである。一方、理論研究と実験 解析により、核融合プラズマ中に存在する高エネルギー粒子(イオンや電子)と波の相互作用に より、不安定モードの特性が変化したり、高エネルギー粒子をトリガーとする新たな不安定性が 発生することが知られている。ITER をはじめとする核燃焼プラズマにおいては、炉心プラズマ は核融合反応によって生じるアルファ粒子の自己加熱によって維持されるため、高エネルギー粒 子の効果を考慮した安定性解析手法の高度化は、JT-60SA をはじめとする将来の実験解析に有用 であり、ITER を目指す上で重要な研究開発課題である。

以上のような背景から、MINERVA を用いた高エネルギー粒子駆動モードの解析を目的として 新たに高エネルギー粒子の分布関数の時間発展を評価するためのモジュール DKPRES を開発 した。DKPRES コードは分布関数の評価に粒子法を採用しており、高い空間解像度を得るため には数 100 万-数億個オーダーの粒子を追跡する必要がある。このため、大型計算機を用いた並 列計算が不可欠である。

## (2) 利用内容·結果:

DKPRES コードは、MINERVA コードが与える摂動電磁場を考慮してトカマク装置中の高エ ネルギー粒子軌道を多数個解析し、電磁場が粒子の分布関数に与える影響を評価する。結果は、 圧力擾乱の形で評価され、その情報を MINERVA コードに戻して再度、流体計算を行うことで 高エネルギー粒子によって駆動される不安定性を取り扱うことができる。DKPRES コードでは 実形状のトカマク平衡を考慮可能で、この種の解析でしばしば用いられる粒子軌道に関する簡約 化も行っていないため、有限軌道幅効果や波による粒子捕捉などの高次の運動論的効果を考慮す ることも可能であり、MINERVA コードの特徴(回転プラズマへの適用、非理想 MHD 効果等) と併せて、従来のコードに比べ、幅広い物理研究への応用が期待できる。

今年度、大型計算機の使用にあたり、MINERVA および DKPRES コードの ICEX への移植作 業を実施した。表1および表2に並列化性能・実行性能の調査結果を示す。MINERVAは線形 化された電磁流体方程式を固有値問題もしくは初期値問題として解くことができ、トカマク装置 を記述する空間座標のうち、径方向は高次精度有限要素法、ポロイダル方向・トロイダル方向は フーリエ展開を用いて離散化されている。径方向は MPI によって領域分割されており、時間発 展を解くために使われる後退差分法の計算に必要な線形行列解法には Scalapack を用いている。 流体型のコードであるため、メモリバンド幅への要求が高く、帯行列解法の並列数は径方向のメ ッシュ数で制限されている。上記の理由から、表1の結果では高並列数で効率が低下する性質が あるものの、高空間解像度を要求する短波長のバルーニング不安定性のテスト計算に対し、1152 コアで並列化効率は 62.2%で 5%以上の実行性能が確保されていることが確認された。表 2 は DKPRES の性能調査結果である。DKPRES コードでは粒子分割による並列化を採用しており、 電磁場中の粒子軌道追跡は各 PE で独立に計算することができる。また、現在のバージョンでは 集団通信を必要とする衝突計算も行っていないため、速度空間モーメントから圧力擾乱を評価す るステップ以外ではほぼ通信を行わない設計となっている。他方、有理面付近の微細な電磁場構 造をとらえるためには 106-107 オーダーの十分多くの粒子を使用する必要がある。表 2 には 1200 コアから 4800 コアまでの性能測定結果を示す。粒子法の性質から期待されるとおり、4800 コ ア程度まで 90%程度の並列化効率と 5%以上の実行性能が維持されていることが確認できた。な お、MINERVA および DKPRES とも Intel MKL や LAPACK 等の標準的な数値計算ライブラリ しか使用していないため、ICEX への移植に当たっての問題はほとんど生じなかった。

次に MINERVA+DKPRES による物理計算の例を示す。ここでは MINERVA+DKPRES の連 結計算の検証のため、国際トカマク物理活動(ITPA)におけるトロイダルアルフヴェン固有モ ード(TAE)のベンチマーク結果の再現を試みた。ベンチマーク計算を実施したところ、トロイ ダルモード 6 の TAE に関して妥当な成長率および固有関数が得られることが確認できた。図 1 に TAE 成長率の高速粒子のエネルギー(T<sub>h</sub>)依存性の比較を示す。図中、赤色および青色の線 が MINERVA+DKPRES による計算結果であり、2 本の曲線は粒子が系外に損失したときの処理 の違い(境界処理)を表している。コードによって採用している物理モデルや境界処理の違いに より 20%程度の幅があるが、その範囲で MINERVA+DKPRES の計算結果は他のコードと良好 な一致を示している。但し、 $T_b$ =300 keV 以下の領域で成長率が他のコードに比べ、過小評価に なる傾向が見られており物理モデルとアルゴリズムの両面から原因の調査を行っている。

コア数	並列化効率(%)	実行性能 (GFLOPS)	実効効率(%)	メモリ(GB)
288	100	874	7.59	700.7
576	83.7	1572	6.82	785.2
1152	62.2	2597	5.63	1070.8

表1 並列化性能・実行性能の調査結果(MINERVA: バルーニングモード)

コア数	並列化効率(%)	実行性能 (GFLOPS)	実効効率(%)	メモリ(GB)
1200	100	2950.7	6.15	144.32
2400	97.3	5743.7	5.98	272.42
4800	93.1	10990	5.72	532.57





図1 MINERVA+DKPRES で評価されたトロイダルモード数6のトロイダルアルフヴェン固有 モードのベンチマーク結果(縦軸:成長率、横軸:高速粒子のエネルギー)。2本の曲線 (re-fill 1/re-fill 2)は粒子が系外に損失したときの処理の違いを表している。

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

## (4) 今後の利用予定:

MINERVA+DKPRES を用いて、JT-60U で観測されている低周波の高エネルギー粒子壁モード(EWM)の解析を行う。低周波のモードであるため、十分な周波数解像度を得るためには長時間の計算が必要であり、予備計算では粒子数 10<sup>7-108</sup> 程度の高い空間解像度が必要であることが分かっている。平成 28 年度前半は物理解析に先行してアルゴリズムの高度化を進めて計算の効率化を図ったのち、平成 28 年度後半に EWM を対象とした JT-60U 平衡を用いた大規模計算を実施する予定である。
# 5.4.3 トカマク周辺 MHD 安定性の抑制・小振幅化に向けた理論・シミュレーション研究 Simulation Study of MHD Stability at Tokamak Edge Pedestal for Suppression/Mitigating Edge Localized Modes

相羽 信行

プラズマ理論シミュレーショングループ

(平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

#### (1) 利用目的:

将来の ITER や核融合発電炉において、効率よくエネルギーを核融合反応から得るためのプラ ズマとして、プラズマ表面近傍に断熱層が形成されてプラズマ圧力分布に台座構造(ペデスタル) が現れる"高閉じ込め運転モード(Hモード)"が有力であるとされており、ITER や原型炉に おける標準運転モードとして想定されている。この Hモード運転では、エッジローカライズモ ード(ELM)と呼ばれる表面付近が間欠的に崩壊する現象がしばしば観測される。ITER等の大 型反応炉ではこの ELM による熱・粒子放出量の絶対量が多くなるため、ダイバータ板等への熱 負荷の増大が懸念されている。そのため、ELM 現象によってスクレイプオフ層(SOL)に放出 される熱・粒子量を減少させる(ELM を抑制・小振幅化する)方法を確立することは、現在の 炉心プラズマ研究開発における最大の課題の1つとなっている。

ELM に関する近年の実験解析では、国外の大・中型トカマク装置において誤差磁場印加による ELM 抑制や、原子力機構で実験が行われていた JT-60U 装置においてプラズマ回転を制御することによる ELM 小振幅化などが報告されている。これらの手法による ELM 制御に関する物理機構の解明は現時点では十分とは言えず、誤差磁場印加による ELM 抑制や回転による ELM 小振幅化が ITER 等において実現できるかの検討は十分とは言えない状況にある。

本研究はこのような問題を解決するために、特にプラズマ回転による ELM 小振幅化に着目し、 同現象の物理機構の解明を目的としている。そのために、ELM 安定性に対するプラズマ回転、 および従来の数値計算では無視されていた物理効果の影響を理論・数値的に明らかにする。これ により、ITER や原型炉において回転制御による ELM 小振幅化が可能になるために必要な条件 の同定、および同条件を満たす運転手法の確立を目指す。

### (2) 利用内容 結果:

今年度は、小振幅 ELM の原因と考えられる短波長バルーニングモードの安定性に対する、プ ラズマ回転の影響およびイオン反磁性ドリフト効果と呼ばれる非理想効果を正確に評価するた めのモデル開発を行った。また、このモデルに基づいて ELM の数値安定性解析を行うために、 MINERVA-DI コードを開発した。

コード開発後には、これを用いてトカマクプラズマにおけるバルーニングモード、および ELM の安定性に対する回転・イオン反磁性ドリフト効果が与える影響を定性的・定量的に評価した。 従来ではこれらの MHD 不安定性の波長が短くなると、イオン反磁性ドリフト効果の影響によっ て安定化されるという理解がされていた。しかし、今回の解析により、このような安定化効果は プラズマ回転を考慮することによって大 幅に低減することが明らかになった。

このような回転の影響は、JT-60U 装置 における ELM 発生条件(ペデスタルの圧 力勾配)に大きな影響を与えており、回転 を考慮しない場合には実験的に観測され た ELM 発生条件と数値解析による同条件 では 40%ほどのずれが生じたが、回転を考 慮することで 10%程度にまでずれを抑え ることができた(図 1 参照)。これらの成 果は、モデル開発・バルーニングモード安 定性の解析結果については論文誌

(Plasma Physics and Controlled Fusion 誌)に掲載済み、またJT-60U 装置の解析 を含む ELM 安定性の解析結果については 国際ワークショップにおいて発表される とともに、論文誌 (Nuclear Fusion 誌) に投稿済みである。



図1 JT-60Uの ELM 安定性図。赤い(青い) 領域は回転有(なし)の場合に ELM が不 安定な領域。回転を考慮することで、ELM が不安定な領域が実験的に観測された運 転点に大きく近づくことがわかる。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 投稿論文

1) N. Aiba, "Impact of ion diamagnetic drift on ideal ballooning mode stability in rotating tokamak plasmas", Plasma Phys. Control. Fusion 58, (2016) 045020 (13p).

#### 国際発表

2) N. Aiba, M. Honda, K. Kamiya, "Impact of ion diamagnetic drift effect on MHD stability at edge pedestal of rotating tokamaks", 15<sup>th</sup> International workshop on H-mode and transport barrier physics, Garching, Germany 19-21 October 2015.

# (4) 今後の利用予定:

これまでの研究成果で開発したモデル・コードを用いて JT-60U 以外の装置における ELM 安 定性解析を行い、今回明らかにした"プラズマ回転とイオン反磁性ドリフト"の両効果が ELM 現象に与える影響に関する定量評価を進める。これにより、ITER や原型炉における ELM 小振 幅化にプラズマ回転が利用できるかを検討するための指針を得る。

また、現時点では無視している複数の物理効果についても、運転条件次第ではその影響が無視 できないことが明らかになってきていることから、それらの物理効果を考慮した解析を実現する ためのモデル・コード開発を引き続き行う。

# 5.4.4 拡張された運動論的 MHD モデルに基づく RWM 安定性の数値解析 Numerical Analysis of RWM Stability Based on Extended Kinetic MHD Model

白石 淳也

先進プラズマモデリンググループ

(平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

# (1) 利用目的:

JT-60SA に代表される高性能トカマク装置では、高ベータ・プラズマを長時間閉じ込めること を目指している。抵抗性壁モード(RWM: Resistive Wall Mode)と呼ばれる不安定性により到 達可能なベータ値が制限されため、RWM の制御あるいは安定化が必要不可欠である。そのため、 プラズマのトロイダル回転による RWM 安定化が注目を集めている。トロイダル回転による RWM 安定化メカニズムの解明に向けて、運動論的 MHD モデルに基づいた解析が世界各国で進 められている。本研究では、運動論的 MHD モデルに、トロイダル回転の効果を自己無撞着に導 入した。本モデルを、トカマクにおける RWM 解析コード MINERVA/RWMaC に実装した。本 コードを用いて、様々なトロイダル回転分布に対して RWM 安定性解析を行うことで、新しいモ デルと従来のモデルの違いを明らかにした。十分な数のトロイダル回転分布に対する計算が必要 であるため、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) 運動論的 MHD モデルの拡張

運動論的 MHD モデルは、巨視的な MHD モード(例えば RWM)と、微視的な粒子運動の相 互作用を記述する。そのなかでも、トロイダル回転に伴うドップラーシフトの効果を受けた MHD モードの周波数と、粒子の周期運動の周波数が共鳴することによりやりとりされるエネルギーが MHD 安定性を決定する。このエネルギーのやりとりを  $\delta$  W<sub>K</sub>と書く。 $\delta$  W<sub>K</sub>は、線形化された圧 カテンソルに関する二次形式で表現され、本質的には、粒子運動を記述するラグランジアンと平 衡の分布関数により特徴づけられる。従来のモデルでは、ラグランジアン及び平衡の分布関数は トロイダル回転がない場合のものを用いてきた。本研究では、トロイダル回転がある場合、ラグ ランジアンに慣性力(コリオリカ及び遠心力)の効果が導入されること、及び平衡の分布関数が 修正をうけることに着目した。これにより従来のモデルでは見落とされてきた、付加的な  $\delta$  W<sub>K</sub> 項が存在することを明らかにした。拡張されたモデルにより、より精密に RWM 安定性解析を行 うことができる。

### 2) 拡張されたモデルの MINERVA/RWMaC への実装

拡張されたモデルに基づいて RWM 安定性解析を行うために、拡張された  $\delta$  W<sub>K</sub> 項を計算する モジュールを開発した。このモジュールは、MHD 固有モードの構造が与えられたときに、平衡 分布を用いて、ラグランジアンや粒子運動に関する各周波数を計算し、粒子のピッチ角及びエネ ルギーに対して積分を行い、  $\delta$  W<sub>K</sub> 項を計算する。本モジュールを、MINERVA/RWMaC [1]へ 実装した。ここで MINERVA は、トカマク配位において、線形化された MHD 方程式を初期値 問題あるいは固有値問題として解くコードである。また、RWMaC は、プラズマの外側にある真 空や抵抗性壁のマックスウェル方程式を解くコードである。以上により、拡張されたモデルに基づいた RWM 安定性解析が可能となった。

### 3) 拡張されたモデルに基づいた RWM 安定性解析

MINERVA/RWMaC を用いて、拡張されたモデルに基づいて RWM 安定性解析を行った。 $\delta$ W<sub>K</sub> 項の影響を数値的に調べるために、JT-60 の実験結果に基づく平衡データを用いた。RWM 安定性に対する回転の効果を解析するために、モードの振幅が最も大きくなる位置における回転 及び回転シアを変化させ、RWM 安定性解析を行った。図1は、回転及び回転シアを変化させた ときの RWM 成長率を、従来モデル及び拡張されたモデルに基づいて計算した結果である。

図1より、回転が20krad/sより大きい領域において、従来モデルと拡張されたモデルでは、 RWM 安定性が大きく異なることが明らかになった。従来モデルでは安定な領域が広がるととも に、不安定な領域におけるRWM 成長率が小さくなっている。これは、拡張されたモデルでは、 付加的なδWK項によりRWM が安定化されることを示している。



拡張されたモデルにより計算した結果

- J. Shiraishi, N. Aiba, N. Miyato, and M. Yagi, "Effects of Centrifugal Modification of Magnetohydrodynamic Equilibrium on Resistive Wall Mode Stability", Nuclear Fusion 5, p.083008 (2014).
- [2] J. Shiraishi, N. Miyato, and G. Matsunaga, "Flow-Induced New Channels of Energy Exchange in Multi-Scale Plasma Dynamics – Revisiting Perturbative Hybrid Kinetic-MHD Theory", Scientific Reports 6, p.25644 (2016).

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

# 論文

1) J. Shiraishi, N. Miyato, and G. Matsunaga, "Flow-Induced New Channels of Energy Exchange in Multi-Scale Plasma Dynamics – Revisiting Perturbative Hybrid Kinetic-MHD Theory", Scientific Reports 6, p.25644 (2016).

# (4) 今後の利用予定:

今回開発したδW<sub>K</sub>を計算するモジュールは並列化を行っていないため、並列化を行い計算時間の短縮を目指す。さらに、本研究で構築したモデルは、バルクプラズマだけでなく、高エネルギー 粒子にも適用可能であるため、JT-60SAにおける高エネルギー粒子の効果の数値解析を行う。

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

# 5.5.1 高エネルギー中性子対応ボナー検出器の検出器応答計算 Response Function Calculation of Bonner Detector for High Energy Neutron

増川 史洋、延原 文祥\*1 放射線安全セクション、\*1 東京ニュークリア・サービス

## (1) 利用目的:

大強度陽子加速器施設(J-PARC)において、運転中に発生する高エネルギー中性子線は線量 に対する寄与が非常に大きい。通常の線量管理は、一定のスペクトルを仮定してカウントを線量 に換算するため、施設や場所に依存する高エネルギー中性子スペクトルを把握し、仮定したスペ クトルと齟齬の無いことを確認することは、安全評価上重要な課題である。

高エネルギー中性子スペクトルの測定には、反跳陽子スペクトロメータによる方法と、多減速 材付検出器(ボナー検出器)による方法とがあるが、本研究では、前者よりも高計数率場に有利 と考えられるボナー検出器の応答関数を、PHITS コードを用いて検討した。

#### (2)利用内容·結果:

ボナー検出器は、検出器の周囲の減速材(通常はポリエチレン)で中性子を熱化させて検出し、 異なる減速材厚さで熱化・検出される中性子数が変わることを利用して、アンフォールディング により中性子スペクトルを求める。しかしながら 1MeV 以上の中性子に対しては水素の断面積 が急激に小さくなるため、高エネルギーの中性子を検出するために、高エネルギーの中性子と重 い原子核との(n,Xn)反応等を利用して中性子の増倍を図る。

本研究では、従来用いられてきた鉛の他、タングステンについて高エネルギー中性子に対して 適用した場合の検出器応答を検討する。また、タングステン自体は高硬度・高融点の物質である ため単体での外殻製作はコスト高が予想されるため、タングステン粉末とポリエチレンの混合物 を想定した物質(以下、「樹脂タングステン」と記す。)についても検討した。

計算した体系は、中心に 5cm φ の球形検出器を配して、検出器単体、10cm φ、20cm φ、30cm φ のポリエチレン減速材で覆ったもの、20cm φ のポリエチレン減速材の外側に、1)1.5cm 厚の鉛、 2) 1.5cm 厚の鉛+5cm 厚ポリエチレン、3) 1cm 厚のタングステン、4)1cm 厚のタングステン+ 5cm 厚ポリエチレン、5)2.5cm 厚の樹脂タングステン、を配したものであり、これらに単色エネ ルギーの中性子ビームを平行に照射する。中性子エネルギーの範囲は熱中性子~3GeV の範囲で、 PHITS コードにより中心に置いた検出器の応答を計算した。

中心に置く検出器を<sup>3</sup>He比例計数管とした場合の、計算結果をグラフに示す。

裸の検出器は、熱外中性子に対する応答がエネルギーに対して急激に低下しているが、ポリエ チレン減速材を配し、厚くしていくことにより、数 MeV 程度のエネルギーまでは改善が見られ る。しかしながら、数十~数百 MeV での応答の落ち込みには、改善が見られない。

対して 20cm φ のポリエチレンに鉛やタングステンの外殻を配したものは、いずれも 10MeV 以上の中性子に対する応答が 1 桁程度改善されている。また、鉛による中性子吸収は比較的小さ いため、MeV 領域以下の応答に対して、鉛の有無の影響はあまり見られないが、タングステン を配した場合は、タングステンの吸収によりポリエチレンのみの場合よりも MeV 領域以下の応 答が低下する。また、タングステンのみを配した場合には、keV 以下で共鳴吸収の影響が見られ る。

樹脂タングステンを配した場合には、10MeV以上の高速中性子に偏った応答となっている。 アンフォールディングを行ううえでは、応答関数の形状の差の大きい方が望ましいので、鉛よ りもタングステンを用いた方が、アンフォールディングに適していることが期待される。



図 様々な減速材を被せた球形 5cm  $\phi$ <sup>3</sup>He 検出器の応答関数

## (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:

ボナー検出器用の減速体を整備し、中性子線量の測定に供する計画である。

# 5.5.2 ADS ターゲット実験施設の溶融鉛ビスマスターゲット流動解析 Simulation of LBE Flow in the TEF-T LBE Spallation Target

Tao WAN Target Technology Development Section

# (1) 利用目的:

JAEA has proposed an accelerator-driven system (ADS) for nuclear waste transmutation. The ADS Target Test Facility (TEF-T) will be constructed within the framework of J-PARC, in which a Lead-Bismuth Eutectic (LBE) spallation target will be installed and LBE will be the coolant as well. A key issue for the target head design is to optimize the LBE flow so that the target vessel can withstand thermal and mechanical loads as well as sorts of damages.

This research is focused on to reduce the stagnant region in the LBE flow channel, so that the temperature and generated thermal stress on target vessel will be decreased, and the safety margin of target vessel can be improved. The accurate calculation of LBE flow requires large memory. To carry out the design for the LBE spallation target more accurately and efficiently, the use of super computer to perform the calculation is necessary.

#### (2)利用内容·結果:

#### 1) Original design of target head

Figure 1 shows the schematic drawing of the original design of target head. The design has a Beam Window (BW), which is connected to a coaxially arranged annular flow channel between the outside vessel (here after named LBE vessel) and the inner tube. An irradiation sample holder was installed at the front of inner tube. The rectification lattice with the square apertures is installed at the front-end of the sample holder. The LBE flows through the annular channel to BW, and the returned flow passes the square apertures to cool the BW and irradiation samples. One slit of 2 mm in width is arranged along each side of the rectification lattice, and LBE flows through the slits to cool the side wall of the sample holder.



Fig. 1 Schematic drawing of original design of TEF-T LBE spallation target head

Figure 2 shows the velocity vector and velocity contour of LBE flowing for the original target head design. There was a "dead-flow" region in the LBE beside the center of BW. Also

there are some stagnant regions exist in the upstream area in inner tube. Temperature in these stagnant regions might be very high, so it is necessary to reduce these stagnant regions or at least move it away from the center of BW to reduce the stress concentration.



Fig. 2 Velocity vector and velocity contour of LBE flowing for the original design

### 2) Optimized design of target head up to now

Figure 3 shows the schematic drawing of modification of target head to reduce the stagnant region. Two types of modifications were made: (a) to reduce the stagnant region in the inner tube, two additional slits were added at each side of the rectification lattice to flow the LBE into the inner tube; (b) to reduce/move the stagnant region at the center of BW, double un-parallel plate-type flow guides were added between the LBE vessel and the inner tube to destroy the symmetric configuration of target. The angle of flow-guides with Y-axis is 45°, and the flow guides were set vertical to the tangent direction of the inner tube surface. As a result of the modifications, the stagnant region in the inner tube was almost eliminated and the stagnant region at the center of BW was obviously moved away from its original position with a distance of approximately 10 mm (Fig. 4).



(a) Add flow slits

(b) Add un-parallel flow guides

Fig. 3 Schematic drawing of two types of modification of the target head



Fig. 4 Velocity vector and velocity contour of LBE flowing for the optimized design

# 3) Comparison of temperature and thermal stress distribution on the BW

To verify the effects of the design, the structural analyses were carried out by LS-DYNA. The maximum temperature on the BW of optimized design is approximately 32 °C lower than that of the original design (Fig. 5). As a result of the decrease of maximum temperature for the optimized design, the maximum thermal stress that generated on the BW was reduced to approximately 148 MPa, which is approximately 23 MPa smaller than that of original design (Fig. 6). The maximum stress point was shifted away from the center of BW as well.

The results confirmed that the optimized design up to now is favorable to release the stress concentration at the center point of BW, and consequently the safety margin of TEF-T LBE spallation target has been improved [1].



 Tao Wan, Haronari Obayashi, Toshinobu Sasa, "Numerical Study on LBE Flow Behavior of the TEF-T LBE Spallation Target at JAEA", Proceedings of NUTHOS-11, N11P0102 (2016).

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- Tao Wan, Haronari Obayashi, Toshinobu Sasa, "Numerical study on LBE flow behavior of the TEF-T LBE spallation target at JAEA", Proceedings of NUTHOS-11, N11P0102 (2016).
- 2) Tao Wan, Haronari Obayashi, Toshinobu Sasa, "Study on optimization of target head design for the TEF-T LBE spallation target", Proceedings of TCADS-3 (2016).

# (4) 今後の利用予定:

In the future, detailed design for the LBE spallation target head will be continuously carried out. Moreover, not only the model of the target head, but also detailed model of the whole target will be built to investigate the LBE flow. In addition, effects of mesh and turbulence models on LBE flow will be studied by the super computer as well.

# 5.6 原子力科学研究部門 原子力エネルギー基盤連携センター Sector of Nuclear Science Research Nuclear Engineering Research Collaboration Center

# 5.6.1 円形配管内の水素ガス挙動シミュレーション Simulation of Hydrogen Gas Behavior in Circular Piping

#### 上地 優

水素安全技術高度化特別グループ

### (1) 利用目的:

水素は非常に密度が小さいうえに拡散しやすく、着火性の高い物質である。浜岡原子力発電所 1号機での配管破断事故では、配管内に蓄積した水素が、配管内の圧力変動及び配管内に付着し た貴金属の触媒作用により着火したと推定されている。一方、水素は燃焼しても温室効果ガスを 排出せず、水蒸気のみを排出することから、クリーンなエネルギー源として社会への普及が期待 されている。水素の利用先として、燃料電池車用の水素ステーションや定置式燃料電池がある。 これらに水素を供給する場合、専用の配管を用いて集中供給する手法が検討されているが、初期 の水素充填やメンテナンス時などに水素をパージする際に、空気中の酸素と混合して爆発範囲に 達する可能性がある。このため、配管内の水素ガスの挙動を把握することは、水素を取り扱う上 で重要である。

本研究では、実験との比較検証及び実験が困難な大規模な水素供給配管内での水素ガスの挙動 を把握するため、汎用流体解析コード ANSYS FLUENT を用いた解析を ICE X により行った。

#### (2)利用内容·結果:

解析モデル及び解析条件を図1及び表1に示す。解析モデルは、水平管から垂直に立ち上がり、 その後再び水平に分岐する箇所を3か所設けた構造とした。モデル内部の初期ガスは空気とし、 導入するガスの流速は0.3 m/s、温度は20℃である。また、ある時点においてガス種及び開放端 を変更し、合計4つの境界条件(STEP1~4)にて解析した。境界条件の変更は、図1に示す濃 度判定位置において供給ガス濃度が100%に達した時点で行った。

図 2~4 に各 STEP、各時点における濃度分布解析結果を示す。STEP1 では、開口端近傍が窒素に置換した 75 秒経過後において、開口①及び②の水平管方向への窒素の侵入がほとんどないことを示している(図 2)。その後、開口部及び供給ガスを水素に変えた STEP2 では、開口端近傍が水素に置換したとき(207.5 秒後)の結果から、水平管への水素導入に伴い、浮力及び分子拡散によって分岐の垂直上方へ水素が侵入することが確認できる(図 3)。STEP3 では、開始後間もなく水素 4%以上、酸素 5%以上の爆発濃度となる領域が発生することがわかる。(図 4)。以上のように、水素は密度が小さうえに拡散しやすいという性質から特異な流動挙動を示すことを明らかにした。特にベント作業や配管内の置換作業など水素と酸素の混合が生じる場合は、その挙動を考慮に入れた対策を講じることが安全上極めて重要である。



図1 解析モデル

## 表1 解析条件及び境界条件

model		境界条件		
コード	FLUENT Ver16.2	下流側	大気間	開放条件
物性	密度:理想気体 粘度:混合ガス物性 拡散係数:動力学的理論	配管壁面	断熱。	/すべり無
		配管板厚	考慮し	ない
	加限床奴、幼刀于的生品			
流動モデル	層流	各ステップ条件	供給ガス	開放端
時間刻み	1e-2[s]	STEP1	窒素	3
移流項補間	二次風上差分	STEP2	水素	$\bigcirc$
時間積分法	二次陰解法	STEP3	水素	2
		STEP4	水素	(3)



図2 窒素濃度分布解析結果(STEP1、初期状態及び75秒経過後の結果)



図3 水素濃度分布解析結果(STEP2、水素供給開始時の状態及び207.5 秒経過後の結果)



図 4 濃度分布解析結果(STEP3、開放部変更から 10 秒後及び 20 秒後の結果)

# (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:

本研究で確立した配管内挙動の解析手法を基に、水素供給配管破損時の漏えい挙動に加え、原 子力分野における廃棄物保管時の水素挙動についても大型計算機を用いて解析を行い、水素に係 わる安全性の向上に寄与していく。

# 5.7 原子力科学研究部門 原子力科学研究所 Sector of Nuclear Science Research Nuclear Science Research Institute

# 5.7.1 FCA 燃料貯蔵庫における核燃料輸送物及び収納容器混在時の臨界性評価 Evaluation of Criticality in FCA Fuel Storage at Mixed Transport Container and Storage Container

江口 悠太 臨界技術第2課

## (1) 利用目的:

高速炉臨界実験装置 (FCA) における作業要領策定に伴う安全確認の一環として、作業時 FCA 燃料貯蔵庫に仮置きされる核燃料輸送物(以下、輸送物という。)と、貯蔵中の燃料収納容器が 混在した場合の臨界性評価を、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-3.2 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:

図1に示すように、燃料を収納した輸送物をモデル化し、それらをFCAの燃料貯蔵庫及び収納棚を模擬した図2の解析モデルに配列した。計算条件として、輸送物に収納されている燃料及び収納棚の燃料の組み合わせを表1のように設定し、軽水雰囲気中の水密度をパラメータ(0.0~1.0g/cm<sup>3</sup>)として解析を実行した。保守性の確保に当たって、条件設定に際して下記のように設定した。

- ・濃縮度及び Pu 富化度は現行許可上の値よりも 2%程度高く設定した。
- ・輸送物及び収納棚の燃料の総量は、実際の量よりも約1.5~2倍程度大きく設定した。
- ・収納棚の構造材や輸送物の吸収材等、臨界性を下げる方向(非保守側)に寄与する物質は全て 無いものとしてモデルを作成した。
- ・輸送物の外径、貯蔵庫の寸法は、実際よりも小さく作成し、輸送物はエリア内で充填率が最大 になるように配列した。それに伴い配列数も実際より多くなった。
- ・燃料形状は、各燃料間の相関の観点から球状にはせず、実際の燃料形状を模擬した。

計算結果を図 3、図 4 に示す。FCA 燃料貯蔵庫内で考え得る如何なる燃料配列及び組み合わ せの場合でも、通常時~水没時において、臨界安全の判断基準である 0.95 を下回っていること が確認された。高濃縮ウラン輸送物とプルトニウム輸送物では、輸送物当たりの収納量及び収納 形状が異なるので keff を直接比較することはできないが、いずれのケースにおいても、収納棚の 収納燃料が天然ウランブロックの時に keff が最大となった。体系全体の Fissile 量は収納棚燃料 が高濃縮ウランやプルトニウムの場合よりも少ないが、中性子反射に寄与する <sup>238</sup>U 量が多いこ とで、特に水密度が小さい(各燃料間の相関が大きい)領域でのkeff上昇効果が見られたものと 考えられる。



図1 仮置きされる輸送物と収納燃料の解析モデル



図2 解析体系(正面図、平面図共に全体の形状は省略している)

解析条件 No.	輸送物内燃料	貯蔵庫内収納容器燃料
1	高濃縮ウラン	高濃縮ウラン
2	高濃縮ウラン	天然ウラン
3	高濃縮ウラン	プルトニウム
4	プルトニウム	高濃縮ウラン
5	プルトニウム	天然ウラン
6	プルトニウム	プルトニウム

表1 解析条件







図4 プルトニウム輸送物の計算結果

(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:

本評価に係る計算は全て終了したが、臨界計算、遮蔽計算等、原子炉施設に係る安全性評価に 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、今後も原子炉施設の安全評価等で利 用する可能性は大きい。

# 5.7.2 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認可申請書を作成することとなった。廃止措置計画認可申請書では、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 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1に No.1 プールの中性子束分布結果を示す。





また、得られた中性子束分布、運転実績、ORIGEN-S 等を用いて放射化放射性物質を評価した後、廃止措置計画認可申請書を作成し、同申請書を平成 27 年 12 月に規制行政庁に申請した。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) <u>Yasuhiro ISHIKURO</u>, Nobuhiko HIRANE and Tomoaki KATO, Decommissioning plan of JRR-4, 8th International Symposium on Materials Testing Reactors (ISMTR-8) (2015).

# (4) 今後の利用予定:

当面の業務は終了したが、必要があれば再度解析を行う予定である。

# 5.7.3 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:

2011 年、内閣府により、国際競争力のある産業の育成を目的として、つくば市を中心とした「つくば国際戦略総合特区」(以下「つくば特区」)が選定された。つくば特区における4研究開発テーマの1つが、「次世代がん治療(BNCT)の開発実用化」である。本研究を実施するため、 筑波大学を中心に日本原子力研究開発機構(JAEA)、高エネルギー加速器研究機構(KEK)、北海道大学、茨城県との研究開発連携プロジェクトチームが 2012 年に発足した。(ホウ素中性子 捕捉療法の研究開発・実用化に関する協力合意書の締結)

がん治療装置は、主に加速器、中性子発生装置及び治療計画システムから構成される。加速器 としては、リニアックを用い、大強度陽子加速器施設(J-PARC)の技術を応用し、主に KEK が開発している。中性子発生装置は、中性子を発生するベリリウム標的、発生した中性子を医療 用に調整するモデレータ、そして中性子を病巣に集中するためのコリメータ等からなる。JAEA は、KEK、筑波大学等と協力し、この中性子発生装置の設計・製作を実施している。今年度の 遮蔽設計解析として、加速器 BNCT 装置で使用しているカドミニウムの最適化を行った。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:

加速器 BNCT 装置から発生する中性子ビームは熱外中性子が主体的である。このため減速過 程で発生した熱中性子を吸収するために厚さ 2mm のカドミニウムを用いている。加速器 BNCT 装置のビーム孔に設置したコリメータを交換するために作業者がこのカドミニウム材に近づく ため、カドミニウムの残留放射能による作業者の被ばくが懸念されている。このため、カドミニ ウム以外の材料に関する検討及びカドミニウム形状の最適化を計算解析にて行った。図1にカド ミニウム以外の材料を用いた場合のビーム孔付近における中性子スペクトル解析結果の一例を 示す。カドミニウムの中性子スペクトルに対して、濃縮 <sup>6</sup>LiF を使用すると熱外中性子束が減り、 天然 <sup>7</sup>LiF を使用すると熱中性子束が増える傾向が見られる。一方、カドミニウムの厚さを 2mm から 1mm に変更してもそれほど中性子スペクトルの変化は見られない。図2にカドミニウムを 120cm×120cm×2mm から 40cm×40cm×1mm 及び 30cm×30cm×1mm に変更したときのビ ーム孔付近における中性子スペクトル計算結果を示す。カドミニウムの寸法を 40cm×40cm× 1mm にした結果では、熱中性子束が約 45%増加し、熱外中性子束が 4%増強する傾向が見られ た。また、カドミニウムの体積は約 0.056 倍になるためカドミニウムからの残留放射能もその割 合だけ小さくなる。以上より、このカドミニウム形状を採用することにより、熱外中性子ビーム 強度を増強させつつ、カドミニウムからの残留放射能を小さくすることができるため、ビーム孔 付近で作業する従事者の被ばく線量を大幅に低減させることが可能である。



図1 カドミニウム以外を用いたときのビーム孔付近の中性子スペクトル



図2 カドミニウム形状を変化させたときのビーム孔付近の中性子スペクトル

# (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:

今後も加速器 BNCT 装置の詳細設計を行うために大型計算機システムを活用する予定である。

# 5.8 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

# 5.8.1 PHITS ユーザー入力支援ソフトウェア PHACE の開発 Development of PHITS Graphical User Interface: PHACE

岩元 洋介 放射線挙動解析研究グループ

# (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 2,000 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 年度に、PHACE の基本的な枠組みを検討し、データ入力インタフェイスの基礎を作 成した。平成 27 年度は、実際に PHACE を用いて PHITS の入力ファイルを作成することを目 的として、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 (phits/lecture/basic/lec01/input/lec01-end.inp)を用いて、 PHACE の動作確認を行った。PHACE は Windows、Macintosh、Linux の計算機のオペレーテ ィングシステム (OS) 上で利用できるようにすることを最終的な目標とするが、平成 27 年度は、 平成 26 年度と同様に、多くのユーザーが利用する Windows 上で動作するアプリケーションの 開発を行った。開発及び動作条件は下記のとおりとした。 ①動作環境(OS) Microsoft Windows 7 以降
 ②ハードウェア Microsoft Windows 搭載 PC
 ③開発言語 C++
 ④開発環境(ソフトウェア) Microsoft Visual Studio 2010

今回作成した PHACE のデータ入力インタ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。

- 🍯	lec01-end.phc - PHACE	- 🗆 🗙
: ファイル(F) 編集(E) 表示(V) イ.	ンプット(1) へしブ(H)	
: 🗋 💕 🔙   🐒 🖻 🛍   🏟 🎯		
インプットビュー ユ ×		
🖹 •   📸 • 📸 📑 • 🗶   😭	インブット項目: 出力の単位	更新
e lec01-end.inp-1	パラメータ出力: unit	
	設定値: 1	~
■ 11 11 11 11 11 11 11 11 11 11 11 11 11	コメント: # unit is [1/cm^2/source]	
	11744-2151	
● ◎ バッチ	19767 992.	
□ 2 入射粒子の定義		
	インブット項目:出力データのx軸	更新
□-22 物質の定義 □ 核種の容度	パラメータ出力: axis	
□-122 色の割り当て	設定値: xz	<b>v</b>
1 物質名と色名	コメント: # axis of output	
□-2 回の定義 □ 面番号の定義	11744-2151	
□ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □	12707 252	
□ セル番号の定義		
■ Marking track length タリー	インブット項目: 出力ファイル名	更新
e in the state of	パラメータ出力: file	
tana yang yang yang yang yang yang yang y	設定值: track_xz.out	
III-120 Z朝 III-120 Z III-120 Z III	コメント: # file name of output for the above axis	
□ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □ □	d^1/7≠\$\=\$\a^1/2	
●●□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□□	15707 7221	
gsnowの定義 。 。 epsファイルの出力		
_────────────────────────────────────	出力	μ×
	項目:新しいヴルーブを'bach'に変更しました。 項目:新しいヴルーブを'「vチ'に変更しました。	
	項目:1/いチのヒストリー数を挿入しました	
<b>ビルドビュー</b>		
レディ		CAP NUM SCRL

図 1. PHACE のデータ入力インタフェイスの表示ウインドウ

	名称	機能または表示内容
1	メインフレーム	PHACEのウインドウ上に表示される全GUIを定
		義する概念上のウインドウ。
2	インプットビュー	PHITS インプットの各データの登録、編集、表示
		を行う。登録されたデータをツリー表示する。
3	インプットデータ編集ビュー	PHITS インプットデータの編集ボックスをタイ
		リング表示するウインドウ。
4	各種情報出力ウインドウ	インプットビューおよびビルドビュー等からのメ
		ッセージを表示するウインドウ。

表 1. データ入力インタフェイスに示される部位

図1の①部の「メインフレーム」にて、入力ファイルの新規作成、選択、セーブ、PHACEフ ァイルから PHITS 入力ファイルへの変換等を行う。図1の②部の「インプットビュー」におい て、PHITS のセクション情報の登録、表示を行う。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「インプットデータ編集ビュー」に追加され、設定値、コメント等を入力できる。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「各種情報出力ウインドウ」に、インプットビューおよびビルドビュー等からの メッセージが表示される。

今回作成した PHACE が PHITS の入力ファイルを正しく出力し、この入力を用いた PHITS の計算が正常に動作することを確認した。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

### (4) 今後の利用予定:

今後も PHACE の機能の拡充を進める予定である。具体的には、①計算体系の物質を定義する [material]セクション、体系の面を定義する[surface]セクション、体系の領域を定義する[cell] セクション、体系の二次元表示の際の物質の色を定義する[mat name color] セクションの入力 補助機能の追加、②PHACE 上から PHITS を実行できる機能の追加を行う予定である。機能拡 充後に、同様の手法で Mac、Linux 上での PHACE の開発を開始する。

## 5.8.2 PHITS 出力ファイルの統合機能の開発

# Development of Function for Integrating Tally Results of PHITS

橋本 慎太郎 放射線挙動解析研究グループ

#### (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 を解析可能な汎用のモンテカルロ計算コードである。モンテカルロ計算の統計誤差はその試行回 数(放射線輸送計算においては発生させる粒子数)に応じて減少するため、求める計算精度によ っては高い計算コストが必要となる場合がある。しかし、我々がもつ計算機の資源は有限である ため、効率的な計算手法の開発が重要となる。例えば、線源が複数の場所にあるシミュレーショ ンを行う場合は、各位置に線源を配置した計算を個別に実行した後で、それらの結果を任意の重 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、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は、スーパ ーコンピュータなどの大規模な計算システムが利用できないユーザーに対しては非常に有用で ある。

そこで、我々は原子力機構の大型計算機 BX900 や ICEX を利用し、複数の計算結果を統合す る機能(sumtally 機能)の開発を行ってきた。平成 26 年度は、輸送された粒子の飛跡長を求め る[t-track]タリーと物質に付与する線量を求める[t-deposit]タリーに対して、sumtally 機能の開 発を行った。(ここで、タリーとは仮想的な検出器の意であり、PHITS には求めたい物理量に応 じて様々なタリーが用意されている。)引き続き、平成 27 年度は、sumtally 機能の拡張を図り、 [t-dchain]以外の全てのタリーで本機能が利用できるよう開発を行い、平成 27 年 12 月に公開さ れた PHITS のバージョン 2.82 に組み込んだ。これらの開発により、PHITS で求めることがで きる様々な物理量を効率的に求めることができるようになった。なお、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:

新しい sumtally 機能には、複数の結果に任意の重み付けをして加重平均を求める方法と、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方法の2つのオプションがある。用途に応じてそれらを選択することで、計算コストを大幅に減少させることができる。本機能を利用する場合は、足し合わせたい複数のタリー結果をメッシュ幅等の条件を同じにして求めた後、PHITSのインプットファイルに sumtally サブセクションを加えて PHITS を実行する。

加重平均を求める方法を選択することにより、複数の発生位置に強度が違う線源が存在するような放射線場の計算を効率良く実行できるようになる。例えば各線源の強度を変更する度に、従来の PHITS ではシミュレーションを再度実行する必要があり、照射条件を比較する分析を行うためには多くの計算コストが必要であった。しかし、本機能を利用する場合は、一度各線源の結果を計算すれば良く、各々の結果を任意に重み付けして足し合わせることで様々な照射条件の比較が容易となる。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(図 a)と、zの正の方向から同じ粒子を照射させた場合の結果(図 b)を、加 重平均の計算機能により2:1の比率で足し合わせた結果(図 c)である。図 cを見ると、2つの 線量分布を2:1の比で加重平均した結果、2つの分布が重なっている領域[·1cm<x<1cm]で線量 が一番高くなっていることや、領域[1cm<x<3cm]の線量の方が領域[·3cm<x<-1cm]より高くなっ 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。なお、図 a と b の結果は、 カーマ近似を用いて[t-heat]タリーにより求めた。PHITS には物質に付与する線量を計算するタ リーとして[t-heat]と[t-deposit]の2種類のタリーがあり、前者はカーマ近似による線量評価が 可能である。カーマ近似は光子の輸送に伴って発生する2次電子による線量を光子の軌道上に付 与するという近似であり、飛程の長い2次電子が発生しない数 MeV 程度の光子の輸送計算時に 有効となる。この近似では2次電子の輸送を省略するため、短時間で高い精度の計算結果を得る ことができる。今年度開発した[t-heat]の sumtally機能により、カーマ近似が有効となる低エネ ルギー光子による線量計算を、[t-deposit]を用いた場合より効率的に行うことが可能となった。



図 1 Sumtally 機能により、[t-heat]タリーで求めた 2 つの線量分布(図 a と図 b)を 2:1 の比率で加重平均した結果(図 c)

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方法を選択することで、手動で 並列計算を行うことができる。すなわち、同じ計算体系のシミュレーションを複数台の PC にお いて実行し、それらの結果を足し合わせることで、クラスター計算機のような多数の CPU コア を用いた計算環境を得ることが可能となる。ただし、この手動並列計算を行う際は、モンテカル ロ計算による合理的な結果を得るため、各端末の計算を別の乱数により実行させる必要がある。 図 2 に、4MeV の光子が 10cm の水ファントムを通過した場合のエネルギー分布を示す。この結 果は任意の面を通過する粒子フルエンスを評価できる[t-cross]タリーにより求めた。図 a は試行 回数を1万とした場合の結果の一例であり、これと同様に乱数のみを変更して同じ試行回数の計 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図bである。すな わち、総試行回数が10万(=1万×10)の場合の計算結果を得たことになり、当然ながら sumtally 機能を使用せずに総試行回数を10万とした結果と一致する。図には0.1MeV から10MeV の範 囲を示しており、モンテカルロ法における統計誤差を誤差棒で示している。図 a を見ると、線源 である4MeV の近くの結果は誤差が小さい一方、1MeV 以下の領域では誤差が大きく、1万の試 行回数では不十分であることがわかる。試行回数を10倍した図bを見ると、0.1MeV 近傍の結 果も誤差が小さくなっており、十分な精度をもっていることがわかる。このように、本機能を用 いて、例えば10台のPCを使って計算した10回分の結果を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可能となる。



図2 4MeVの光子が10cmの水ファントムを通過した際の光子のエネルギー分布。誤差棒を用いて統計誤差を示した。図aは試行回数が1万の場合の結果で、図bは sumtally機能を用いて求めた10万回の試行回数の結果。

開発した sumtally 機能の拡張により、BX900 や ICEX をはじめとする様々なコンピュータで PHITS コードの利便性が大きく向上した。拡張した本機能は PHITS のバージョン 2.82 に組み 込まれ利用が開始されている。平成 27 年度の国内における PHITS の新規ユーザー数は 487 名 (その内、原子力機構外のユーザー数は 460 名)である。近年では大型計算機やワークステーシ ョンの他にノート PC などでも本コードを使用するユーザーが増加しているが、本機能はこれら のユーザーが PHITS を用いて研究を進める際に有効となる。

#### (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:

残留放射能を評価するためのタリーである[t-dchain]にも sumtally 機能が使用できるよう拡張し、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。

# 5.8.3 PHITS の阻止能計算モデル ATIMA の高速化

#### Acceleration of Stopping Power Calculation ATIMA in PHITS

古田 琢哉

放射線挙動解析研究グループ

### (1) 利用目的:

粒子・重イオン輸送計算コード PHITS は、任意の三次元体系中の様々な放射線の挙動を計算 する汎用のモンテカルロシミュレーションコードである。モンテカルロ計算であるため、計算さ れる物理量は統計誤差を含み、モンテカルロ計算の試行回数を増やすことで、その精度を高める ことができる。体系や計算する物理量等の問題設定によって必要とされる計算時間は異なるが、 高い統計精度を求める計算では、通常のパソコンを用いて、数週間程度の膨大な計算量が必要と される。このため、PHITS には並列計算の仕組み(MPI によるメモリ分散並列処理および OpenMP によるメモリ共有並列処理)が組み込まれており、大型計算機を用いた並列計算で、 計算時間の短縮が可能である。

本研究では、PHITS に内包される阻止能計算モデル ATIMA (Atomic Interaction with Matter)のアルゴリズムを改良することで、PHITS シミュレーションの高速化の実現を目指す。 但し、ここで行う改良では既存の PHITS に含まれる並列処理と互換性を持ち、効率良く並列計 算が行えるアルゴリズムを採用すべきである。そこで、原子力機構の大型計算機 (ICE-X) を利 用し、並列処理の動作および効率の確認を行いつつ、ATIMA のアルゴリズムを改良した。本改 良は、スーパーコンピュータ利用に係るプログラミング支援作業の一環として実施した成果であ る。

#### (2) 利用内容·結果:

荷電粒子の物質中での輸送計算には阻止能計算が必要であり、この計算モデルとして、PHITS には SPAR (Stopping Power And Range) および ATIMA が内包されている。SPAR と ATIMA は共にベーテ・ブロッホ式を基本方程式とする計算モデルだが、SPAR よりも ATIMA のほうが より洗練されたモデルになっており、精度が高いことが知られている。しかし、従来の PHITS では ATIMA を使用した場合の計算時間が SPAR を使用した場合と比較して数十倍以上かかる場 合があり、阻止能計算モデルに精度が少し落ちる SPAR を標準として採用してきた。

従来の PHITS のアルゴリズムでは、輸送計算の途中で新たな荷電粒子が発生した場合や別の 物質へと荷電粒子が到達する度に、毎回 ATIMA による阻止能計算を実行し、荷電粒子の飛程を 求めていた。阻止能計算は計算負荷が高いため、頻繁に ATIMA による阻止能計算を行う従来の アルゴリズムでは、非常に長い計算時間を要していた。これに対して、PHITS に組み込まれた SPAR のアルゴリズムでは、最初にシミュレーションに関係し得る広いエネルギー範囲で阻止能 計算を実行し、荷電粒子の飛程をデータベース化する。輸送計算の途中で、荷電粒子の飛程が必 要な場合は、データベースを参照することで、計算負荷の高い阻止能計算の呼び出し回数を減ら している。このアルゴリズムの違いが従来の PHITS シミュレーションで ATIMA を採用した場合と SPAR を採用した場合の計算時間の差の原因である。

そこで、本研究では荷電粒子の飛程をデータベースとして記憶しておくアルゴリズムを PHITS 内の ATIMA に導入することで、ATIMA を使用する PHITS シミュレーションの高速化 を図った。ATIMA では、SPAR とは違い荷電粒子・マテリアルの組み毎に違う飛程データが必 要とされるため、輸送計算の途中で初めて現れた荷電粒子・マテリアルの組みに対し、ATIMA の阻止能計算を実行して荷電粒子の飛程データベースを作成し、次回の同じ組みの呼び出しでは データベースを参照するようにコード化した。

データベース化を組み込んだ PHITS シミュレーションの動作確認とデータベース化による高 速化の効果を検証するため、テスト計算を実施した。1 cm の空気の層の後ろに水を配置した簡 易体系を構築し、10 MeV の陽子線と 10 MeV/u の炭素線を交互に打ち込むシミュレーションを 実行した。比較的低エネルギーの粒子を入射するため、ほとんど核反応は起きず、粒子は空気を 通過して水に到達して、その内部で止まる。このテスト計算では、輸送粒子の切り替えや別物質 への到達により、従来のアルゴリズムでは ATIMA の呼び出しが頻発する。表1に、テスト計算 で 50,000 粒子(陽子線と炭素線の合計)の輸送を行った場合の実行時間をアルゴリズムの改良 前後で示す。比較のため、同様の計算で SPAR を用いた場合の実行時間も示した。ATIMA のデ ータベース化によるアルゴリズム改良の結果、従来と比較して 200 倍以上に高速化され、SPAR を用いた場合とほぼ同程度の実行時間となることが分かった。

	ATIMA		CDAD
阻止能計算モデル	改良前	改良後	SPAR
実行時間(sec)	692.70	3.20	3.02

表1 阻止能計算モデルを変更して、テスト計算を実行した場合に要する実行時間の比較

本研究で導入した ATIMA のアルゴリズム改良は、並列計算では物理メモリを有効に活用する ため、OpenMP の並列スレッド間でデータベースを共有するようにコード化した。メモリ競合 を防ぐ排他制御をスレッド間のデータベース作成の際に施したため、多スレッドの並列計算での 性能検証を実施した。図1は、OpenMP の並列処理を有効化してテスト計算(10,000,000 粒子) を実行した際の並列スレッド数に対する実行時間の変化を示している。並列スレッド数が増加す ると、実行時間が単調に減少する様子が見られ、スレッド間の排他処理オーバヘッドによる高速 化の頭落ちは見られない。



図1 並列スレッド数を増やした場合のテスト計算に要する実行時間の変化

本研究の成果により、PHITS に含まれる ATIMA に、荷電粒子の飛程をデータベース化する アルゴリズムを追加することで、精度の高い ATIMA を用いた PHITS シミュレーションが、 SPAR を用いた場合とほぼ同程度の計算時間で実行可能となった。また、データベース化のアル ゴリズムは、既存の PHITS に含まれる並列処理の性能を損なうことが無いように導入したため、 ICE-X をはじめとする大型計算機を用いた効率の良い並列計算が、改良後の ATIMA を用いた PHITS シミュレーションでも可能である。本研究の成果は、計算時間を犠牲にすることなく粒 子・重イオン輸送計算の肝である阻止能計算の精度向上を可能にするもので、国内外で約 2000 名の全ての PHITS ユーザーに有益な成果である。

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 Tatsuhiko Sato, Koji Niita, Yosuke Iwamoto, Shintaro Hashimoto, Tatsuhiko Ogawa, Takuya Furuta, Shin-ichiro Abe, Takeshi Kai, Norihiro Matsuda, Keisuke Okumura, Tetsuya Kai, Hiroshi Iwase and Lembit Sihver, Recent Improvements of the PHITS Code, 13th International Conference on Radiation Shielding (ICRS-13), Paris, Oct. 3-6, 2016.

#### (4) 今後の利用予定:

本研究の成果により、精度の高い阻止能計算モデルである ATIMA を用いた PHITS シミュレ ーションが現実的な計算時間で可能になった。今後、遮蔽設計、放射線防護、医学物理等の様々 な状況でシミュレーションを実行し、実験データと比較することで、SPAR を用いた PHITS シ ミュレーションに比べて、再現性がどの程度良くなるのか検証を行っていきたい。

# 5.8.4 PHITS の高速化及び省メモリ化

# Reduction of Computational Time and Memory Size of PHITS

佐藤 達彦

放射線挙動解析研究グループ

## (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の一部がメモリ共有型(スレッド) 並列に対応できていなかった。また、EGS5 で使用する各物質の断面積データが静的メモリに割 り当てられていたため、静的メモリの使用制限から EGS5 を使った場合に指定できる物質数が 限定されていた。そこで、本開発では、原子力機構の大型計算機を利用し、PHITS に含まれる EGS5 関連サブルーチンをスレッド並列に完全に対応させるとともに、EGS5 で利用する断面積 データを動的メモリに割り当てるように改良した。これらの改良は、原子力コードの高速化作業 の一環として実施した成果である。

#### (2)利用内容·結果:

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。本年度は、昨年度までに分類できていな かった一部の変数を共有型と分散型に弁別することにより、EGS5 部分のスレッド並列化を完成 させた。また、EGS5 で利用する断面積データが格納された全ての配列を抽出し、それらを動的 メモリに割り当てるように変更した。この改良により、実際の定義物質数に合わせてメモリを確 保することが可能となり、大型計算機で実行した会計情報から得られる使用メモリ量で評価した ところ、改良前と比べて最大で約 57%使用メモリを減少できることが分かった。また、従来は EGS5 を使用した場合に利用可能な物質数が 80 に制限されていたが、この改良により、コンピ ューターに搭載したメモリの許す範囲で物質を定義することが可能となった。これらの成果は、 PHITS 最新版に組み込まれ、version2.82 として平成 27 年 12 月に公開された。

これらの成果により、PHITS が更に高速化及び省メモリ化され、大型計算機をはじめとする 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 28 年 3 月末までの国内 PHITS ユーザー数の変化を示す。平成 27 年度の新規ユーザ ー数は 487 名(うち、機構内ユーザーは 27 名)であり、平成 27 年度に機構外提供されたプロ グラムのおおよそ 8 割が PHITS であった(http://ccse-intra.jaea.go.jp/library/teikyou\_h27/ index.html)。また、PHITS は数多くの研究論文に引用されており、平成 27 年 1 月~12 月にお ける被引用回数は 63 であった(Web of Science 調べ)。



図1 平成22年(2010年)から平成28年(2016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):

- 1) T. Ogawa, S. Hashimoto, T.Sato, Development of general nuclear resonance fluorescence model, J. Nucl. Sci. Technol. 53;11, pp.1766-1773 (2011).
- 2) T. Ogawa, T. Sato, S. Hashimoto, D. Satoh, S. Tsuda, and K. Niita, Energy-dependent fragmentation cross sections of relativistic 12C, Phys. Rev. C 92, 024614 (2015).
- 3) S. Abe, T. Sato, Soft error rate analysis based on multiple sensitive volume model using PHITS, J. Nucl. Sci. Technol. 53:.3, pp.451-458 (2016).
- 4) Tatsuhiko Sato, Koji Niita, Yosuke Iwamoto, Shintaro Hashimoto, Tatsuhiko Ogawa, Takuya Furuta, Shin-ichiro Abe, Takeshi Kai, Norihiro Matsuda, Keisuke Okumura, Tetsuya Kai, Hiroshi Iwase and Lembit Sihver, Recent Improvements of the PHITS Code, 13th International Conference on Radiation Shielding (ICRS-13), Paris, Oct. 3-6, 2016.

# (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。

# 5.8.5 環境放射性核種からの外部被ばく線量換算係数の評価

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

佐藤 大樹

放射線挙動解析研究グループ

#### (1)利用目的:

環境中に分布した放射性核種による外部被ばく線量の推定には、放射性核種の放射能濃度など の測定可能な物理量から線量に換算する係数(線量換算係数)が利用される。福島第一原発事故 後の環境における線量評価でも、空間の線量を表す周辺線量当量や線量規制値を与える実効線量 への換算係数が整備されてきた。しかし、原子力規制委員会により、住民の外部被ばく線量は個 人の線量を表す個人線量当量により管理する方針が示された。よって、現在の福島で問題となっ ている土壌に分布した放射性セシウムに対する個人線量当量への換算係数が必要となり、このデ ータを整備・公開すること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、この線量換算係数の評 価を進めている。広大な環境を模擬した計算体系において、多様な被ばく条件に対応した長時間 かつ大規模な放射線輸送シミュレーションのためには、大型計算機システムによる並列計算環境 が不可欠である。

#### (2) 利用内容·結果:

平成 24 年度から平成 26 年度にかけて、土壌、大気、水中に分布した放射性核種の放射能濃 度から実効線量を求める線量換算係数を計算し、そのデータベースを構築した。平成 27 年度は、 これまでに培った技術をもとに、土壌に分布した放射性セシウムの放射能濃度から公衆を代表す る各年齢(新生児、1 歳、5 歳、10 歳、15 歳および成人)の個人線量当量の推定に利用できる 線量換算係数の整備を実施した。

計算は、ICE X の 432 並列により実施した。半無限の環境を模擬するため半径 500m、高さ 500m の円筒形の計算体系を構築し、底面の厚さ 1m の領域を土壌、残りの領域を大気で満たし た。線源となる放射性セシウム(<sup>134</sup>Cs および <sup>137</sup>Cs)は、特定の土壌の深さ(0.0、0.5、2.5、5.0、10.0 および 50.0g/cm<sup>2</sup>)に平板状に一様分布させた。表 1 に計算で使用した <sup>134</sup>Cs および <sup>137</sup>Cs の 1 回の壊変から放出される光子のエネルギーと放出率を示す。ここで、<sup>137</sup>Cs のデータは 放射平衡にある <sup>137m</sup>Ba の壊変から放出される光子を含む。また、計算体系のサイズは、これら 光子の平均エネルギーにおける大気に対する平均自由行程の約 5 倍に相当する。線源から放出さ れた光子の環境中の伝播は、光子用の原子データライブラリ MCPLIB04 を利用して PHITS で 計算し、土壌表面近傍における放射線場を決定した。求めた放射線場は、6 つの深さに <sup>134</sup>Cs と <sup>137</sup>Cs がそれぞれ分布しているため、合計で 12 ケースである。線源が深くなるほど土壌による遮

蔽効果により地上での放射線場の統計精度は悪化する。十分な統計精度の放射線場を得るために、深さ 0.0g/cm<sup>2</sup> と 50.0g/cm<sup>2</sup>の線源に対してそれぞれコア当たり約 30 時間と 300 時間を 要した。

計算した放射線場中に、新生児、1歳、5歳、10歳、15歳および成人男女の身体を模擬した 計算用模型(ファントム)を配置し、各ファントムの胸部中心の表面から 1cm 離れた位置に個 人線量当量を評価する領域(1cm×1cm×0.1cm)を設けた。年齢別の個人線量当量は、この領域 において空気カーマを計算し、その値に個人線量当量への校正定数を乗じて導出した。この際、 12の環境放射線場に対して12種類のファントムを配置したため、合計で144ケースの計算とな った。各ケースにおけるコア当たりの計算時間は約10時間であった。

図1に土壌に分布した<sup>134</sup>Cs および<sup>137</sup>Cs の放射能濃度から男女平均した年齢別の個人線量当 量への換算係数を示す。年齢が小さくなるほど個人線量当量が大きくなることが分かる。新生児 と成人との差は最大で約40%であった。これは、年齢が小さいほど胸部前方に設置した個人線 量当量の評価領域が線源である土壌に近くなり、より強い放射線場に晒されるためである。また、 土壌の放射性セシウムの分布が深くなるに連れて、地上で受ける個人線量当量の値も小さくなる ことを示した。これは、土壌による遮蔽効果により、線源から放出された光子の数とエネルギー が減衰するためである。さらに、前年度までに解析した実効線量および周辺線量当量との比較か ら、個人線量当量は実効線量に近い値を与え、周辺線量当量を超えないことが分かった。このこ とは、土壌に分布した放射性セシウムによる外部被ばくにおいて個人線量当量は実効線量の適切 な指標として利用できること、およびサーベイメータ等による周辺線量当量の測定値は個人線量 当量を保守的に見積もることを示している。

ICE X の演算能力を利用した大規模シミュレーションにより、環境中での多様な被ばく条件に 対する個人線量当量の解析が可能となり、周辺線量当量および実効線量との相関も明らかにする ことができた。得られた成果は、福島での住民の帰還の際の被ばく線量の予測に役立つ。

放射性核種	半減期(年)	エネルギー(MeV)	壊変当たりの放出率
$^{134}\mathrm{Cs}$	2.0648	0.563	0.084
		0.569	0.154
		0.605	0.976
		0.796	0.855
		0.802	0.087
		1.365	0.030
$^{137}\mathrm{Cs}$	30.1671	0.622	0.851

表1 <sup>134</sup>Cs および <sup>137</sup>Cs の壊変により放出される光子のエネルギーと放出率



図 1 土壌に一様平板分布した<sup>134</sup>Cs(上)および<sup>137</sup>Cs(下) の放射能濃度から個人線量当量への換算係数

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 口頭発表

1) 佐藤大樹、古田琢哉、高橋史明、W. E. Bolch, C. Lee, "土壌に分布した放射性セシウムによ る外部被ばくに対する個人線量当量のシミュレーション研究",日本原子力学会2016年秋の 大会,2016.

#### (4) 今後の利用予定:

国際放射線防護委員会(ICRP)の開発した小児に対する標準ファントムが近日中に公開される。我々はこのファントムを用いて、環境中に分布した放射性核種による小児に対する実効線量を評価し、ICRPに線量換算係数のデータを提供する計画である。このためには、これまでの計算と同様に大型計算機の持つ大規模演算能力が必須となる。よって、今後も継続して大型計算機システムの利用を行いたい。

## 5.8.6 汎用核共鳴蛍光散乱モデルの開発

# Development of Generalized Nuclear Resonance Fluorescence

小川 達彦

放射線挙動解析研究グループ

## (1) 利用目的:

近年核物質の探知や計量の精度を飛躍的に向上させる現象として、核蛍光共鳴散乱(NRF) が注目されている。X線や中性子を使った従来の核物質探知は、同位体の特定に難があったが、 NRF を応用することで劣化ウランと濃縮ウランの識別などができる可能性がある。しかしなが ら、NRF に必要となる単色ガンマ線源装置の開発や測定理論の研究は進んでいる一方、NRF に 伴う放射線挙動を再現できるシミュレータは未だ整備されていない。

本研究では、汎用放射線輸送計算コード PHITS に NRF を汎用的に再現できるモデルを実装 し、その性能を検証した。NRF は数 eV の共鳴範囲では数 b の高い断面積をもつが、共鳴範囲 を外れると断面積がほぼ 0 になることから、実体系でシミュレーションするには多数のイベント を計算することで統計精度を上げる必要がある。そのため当モデルの動作テストのために大型計 算機を用いた。

#### (2)利用内容·結果:

#### 1) NRF モデルの構築

NRF は、標的原子核にその束縛準位エネルギーとほぼ同じエネルギーの光子が入射した場合 に、標的原子核が光子を吸収し励起される現象である。さらにその吸収の後、一般的には光子を 放出して脱励起を起こす。その過程を再現するため、図1のようなアルゴリズムを組んだ。



図1 NRFモデルのアルゴリズムチャート

束縛準位を持つ Li-6 以上に重い原子核すべてを汎用的に扱える NRF モデルを開発するため に、図1の左側に記した通り評価済み核構造データファイル (ENSDF) と、核分裂性の核種に 関する文献値より準位のデータベースを作成した。右側は光子の吸収・再放出に係る物理過程を 再現しており、稀にガンマ線放出の最中にアイソマーができることや、再放出されるガンマ線に は角度分布があることもモデルの描像の中に含まれている。

まずこのモデルの動作テストのため、U-238 に対してガンマ線吸収断面積と、再放出されるガンマ線の角度分布を計算させた。それぞれの様子を図 2,3 に示す。



図2 本研究で開発した NRF モデルにより計算した U-238の NRF 反応断面積



(a) 無偏光光子入射の場合のθ分布
 (b) 偏光光子入射の場合のθφ分布
 図3 本研究で開発した NRF モデルにより計算した放出ガンマ線の角度分布

図2に示したように、本モデルでは吸収ピークのドップラー広がりも考慮している。

#### 2) NRF モデルの応用

NRF の応用が最も強く期待されている核物質探知技術に関して、本研究のモデルが検知技術 を再現できるかどうか試みた。核物質探知技術を模擬するため図4のような体系を作成した。タ ーゲットは、<sup>Nat</sup>Feのケースに入った U-238 もしくは U-235 である。その結果、図4の橙色で 示した検出器の位置では、鉄ケース中のウランの質量数によって図5のように異なるエネルギー スペクトルが得られた。



図4 核物質探知技術に対する NRF モデルの適用試験を行った体系



図5 検出器位置で得られた光子スペクトル。(b)は(a)のグラフの一部を拡大したもの。

(b)の右側のデータポイントのように、NRF を用いて U-235 があることを検知することは可能 であり、本研究で開発したモデルはその再現をするだけの性能を発揮す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):

- 1) <u>T. Ogawa</u>, S. Hashimoto, T. Sato, Development of general nuclear resonance fluorescence model, J. Nucl. Sci. Technol., 53, 11, 1766-1773, (2016).
- 2) <u>T. Ogawa</u>, T. Sato, S. Hashimoto, D. Satoh, and S. Tsuda J. Energy-dependent fragmentation cross sections of relativistic 12C. Phys. Rev. C, 92, 024614 (2015).
- 3) T. Ogawa, T. Sato, S. Hashimoto, D. Satoh, and S. Tsuda J. Energy-dependent fragmentation cross sections of relativistic <sup>12</sup>C. Phys. Rev. C, 92, 024614 (2015).
- T. Ogawa, T. Sato, S. Hashimoto, K. Niita, Analysis of angular distribution of fragments in relativistic heavy-ion collisions by quantum molecular dynamics, Nucleus-nucleus 2015, Italy, (2015).
- 5) T. Ogawa, S. Hashimoto, T. Sato, K. Niita, Application of JAERI quantum molecular dynamics model for collisions of heavy nuclei, Compound Nuclear Reactions \*15, Japan, (2015).

# (4) 今後の利用予定:

昨年度開発した JQMD-2.0 はアルゴリズムに無駄な計算ステップが多いうえに、鉛やウラン などの重い核を扱う上で合理的でない計算処理が行われていることから、その最適化のための計 算に利用を検討している。

# 5.8.7 福島第一原子力発電所から放出された放射性物質の北半球規模の移行挙動解析 Long-range Atmospheric Dispersion Simulation of Airborne Radionuclide from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Station

古野 朗子、永井 晴康 環境動態研究グループ

# (1) 利用目的:

福島第一原子力発電所の事故で大気中に放出された放射性物質の移行挙動や放出量について は、福島第一原子力発電所を含む数百~1000km 領域においては徐々に明らかになってきてい る。原子力機構をはじめとするいくつかのグループは、近距離シミュレーションと国内モニタリ ングデータを利用した放出量推定を実施した。原子力機構の最新の推定放出量と WSPEEDI-II を用いたシミュレーションでは、国内モニタリングデータとよい整合性を示した。一方、この放 出量を半球規模シミュレーションに適用すると、特に欧州大陸で過小評価傾向となる。欧州の研 究チームが提唱した半球規模シミュレーションと CTBT の測定データを利用した推定放出量を 初期条件とすると、近距離では過大評価傾向である一方、欧州地域ではよい一致を示す。両者の グループにより提唱された放出量は、放出率、放出時間ともに差異があり、統一的な見解を得る に至っていない。本研究では、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を大規模 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を実施し、放出源情報につい ても検討することを目的としている。本稿では、第一段階として、沈着過程を考慮する必要のな い希ガス(<sup>133</sup>Xe)について検討した結果を示す。

#### (2) 利用内容·結果:

過去の研究で提唱されている<sup>133</sup>Xe の推定放出量には、(1)炉内解析による推定放出量(文献1: JNES)、(2)大気拡散逆解析および CTBT の測定データによる推定放出量(文献2:Stohl)、(3) 新たに追加された環境測定データにより改訂された推定放出量(文献3:Saunier)がある。各 放出量は、各号機の炉心溶融時に大きな放出量上昇を仮定している点で共通しているものの、タ イミングや放出継続時間、3月16日以降の放出の有無および放出量等に関して差異がある。そ こで、本研究では新たに(4)各号機炉心溶融後最初の圧力低下(ベント)時全量放出および<sup>133</sup>I 壊変分全量放出を仮定した放出量(TEST)を設定し、上記4ケースの放出量について実施した シミュレーションと CTBT 測定データとの比較により妥当性を検証した。CTBT の測定値とし ては、解析領域(北半球)内に存在する9地点のうち、高崎を除いた8地点(米国4地点、欧州 2地点、ロシア1地点、中国1地点)のデータを用いた。高崎観測所では、3月15日に測定能 力限界を数桁超える量の希ガスの流入があり、メモリー効果のため19日ごろまでデータ精度が 低く、定量評価には利用できないため、今回は考慮しなかった。

計算値と測定値を統計量で比較した結果を表1に示す。Bias は過大もしくは過小評価の傾向 を示す統計量であり、

$$Bias = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} (\log(cal_i) - \log(obs_i))$$

で計算される。プラスの値であれば計算が過大評価、マイナスであれば過小評価傾向を示し、
であればどちらの傾向 もないことを示す。FMT は時間的重なりの度合い を示す指標、FA2・FA5・ FA10はそれぞれ、測定値 の1/2以上2倍以下、1/5 以上5倍以下、1/10以上

表 1	CTBT 測定データ	ટ	:計算結果の統計量による比	譀

	Bias	FMT	FA2	FA5	FA10
JNES	-0.40	0.76	0.24	0.56	0.65
Stohl	0.30	0.76	0.39	0.65	0.71
Saunier	-0.16	0.76	0.42	0.62	0.68
TEST	-0.25	0.76	0.38	0.62	0.67

10 倍以下で計算できた割合を示す。FMT と FA は1 に近いほど測定との整合性が高い。

表1に示す通り、どの推定放出量を用いて計算した場合でも、FA5以内で計算できた割合が6 割前後と、比較的良好な結果を示した。3月15日の2号機からの放出率を比較的少なく見積もった JNES で計算した場合はやや過小評価、逆に3月14日~15日の放出率を多く見積もった Stohl はやや過大評価の傾向となった。

2 号機からの放出については各機関の推定にばらつきがあり、統一的な見解が見られていない ため、TEST ケースでの「ベント時全量放出」に関し、ベントの開始時刻および継続時間につい てのパラメータ解析を実施した。その結果、現在得られる測定データの範囲内では、放出開始時 刻および放出継続時間の差はシミュレーション結果に本質的な差を与えないことが確認され(統 計量は省略)、厳密な特定には至らなかった。<sup>133</sup>Xe インベントリ全量放出および<sup>133</sup>I からの崩壊 分全量放出の仮定が妥当であると考えられる。

- ※文献 1: Hoshi H, and Hirano M, Severe accident analyses of Fukushima-Daiichi Units 1 to 3. Side event by Government of Japan at 56th IAEA General Conference, Vienna, 17 September 2012. Nuclear Regulation Authority, available from http://www.nsr.go.jp/archive/nisa/english/files/P-4.pdf, 2012.
  - 文献 2: Stohl A, Seibert P, Wotawa G, et al. Xenon-133 and ceasium-137 releases into the atmosphere from the Fukushima Dai-ichi nuclear power plant: determination of the source term, atmospheric dispersion, and deposition, Atmospheric Chemistry and Physics 2012; 12: 2313-2343.
  - 文献 3: Saunier O, Mathieu A, Didier D, et al. An inverse modeling method to assess the source term of the Fukushima Nuclear Plant accident using gamma dose rate observations, Atmospheric Chemistry and Physics 2013; 13: 11403-11421.

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 古野朗子、永井晴康、"福島第一原子力発電所から放出された<sup>133</sup>Xeの北半球規模の移行挙 動解析"、日本原子力学会 2016 年春の年会、2016 年 3 月、仙台市.

### (4) 今後の利用予定:

現在は、降雨沈着の影響のある<sup>137</sup>Cs について同様の解析を進めている。なお、WSPEEDI-II は粒子拡散モデルであり、半球規模シミュレーションには多くの計算コストを要したが、当グル ープでは現在差分型拡散モデルの開発も進めており、将来的には低コストで拡散解析を実施でき るようになる予定である。

### 5.8.8 局所域高分解能大気拡散予測モデルの開発に向けて

# Towards Development of a Local-scale High-resolution Atmospheric Dispersion Prediction Model

中山 浩成 環境動態研究グループ

### (1)利用目的:

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) に基づく局所域大気拡散予測モデルの開発を行ってい る。この LES 乱流モデルは、計算格子より大きいスケールの渦を直接解析し、計算格子スケー ル以下(Sub-Grid Scale: SGS)の普遍的な構造を有する小さい渦スケールをモデル化するもの である。これまで、報告者は、主に熱的影響のない中立条件を仮定して SGS モデル定数を一定 値とした標準スマゴリンスキーモデル (Smagorinsky、1963) [1] を用いていた。しかしながら、 実際の大気の状態は、各種建築構造物や局所的地形の起伏といった機械的に発生する乱流影響に 加え、日射による熱的な擾乱の影響も受ける。例えば、日中は、地表面が加熱されて浮力が生じ、 大きな対流混合運動が起きる。この運動は大気境界層全体を満たすほどの大きな渦により活発に 行われる。一方、夜間では地表面が冷却され、鉛直方向の空気の運動が抑制されるために渦スケ ールも小さくなり、地面から安定した層が形成される。したがって、LES モデルで実際の大気 の状態をより忠実に再現していくためには、各種スケールの渦運動を大気の熱的状態に応じて的 確に捉えられるように SGS モデルを高度化する必要がある。そのため、SGS モデル定数を動的 に評価できるダイナミックスマゴリンスキーモデル(Germano et al.、1991)[2]を導入した。 今回は、理想化した大気安定成層流を対象に数値計算を行い、SGS モデルのパフォーマンスを 調べた。

### (2) 利用内容·結果:

計算条件について、まず、流れ方向に地衡風 8m/s を与え、地表面を一定の冷却率 0.25K/h で 冷やし、安定成層の境界層乱流を作り出す。水平方向、高さ方向ともに 400m の計算領域を設け、 計算格子数は各方向に対し 32 個とした。計算格子スケールは、水平方向、鉛直方向ともに 12.5m である。計算タイムステップは 0.2s、全計算時間は 9 時間とし、統計的にほぼ定常状態となる最 後の 1 時間を解析に用いた。SGS モデルは、標準 SGS モデルと動的 SGS モデルの 2 つを用い た。以上の計算条件に基づき、Beare et al. (2006)ら[3]の数値実験結果と比較検証を行った。 図 1、2 は、(a)標準 SGS モデル、(b)動的 SGS モデルにより得られた各時刻の瞬間風速場・温度 場を示している。図 3、4 は平均風速・平均温度の鉛直分布を表し、黒線は Beare らの結果であ る。これらの結果より、標準 SGS モデルに基づく LES では、上空に形成される強い風速帯や高 さ方向に異なる温度分布パターンの形成など、Beare et al. (2006)らの結果を定性的に再現でき なかった。このことは、標準モデルの現実気象条件への適用性に限界があることを意味する。一 方、動的 SGS モデルでは、そういった傾向を捉えることができており、気象条件を考慮できる SGS モデルであることを示唆したものと言える。 (a)標準 SGS モデル



3時間後	6時間後	9時間後	268K 262K
(b)動的 SGS モデル 3時間後	<b>6時間後</b>	9時間後	

図2 瞬間温度場



- [1] Smagorinsky (1963): General circulation experiments with the primitive equations, Monthly Weather Review, 91, 3, 99-164.
- [2] Germano, Piomelli, Moin, Cabot (1991): A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model, Physics of Fluids, 7, 1760-1765.
- [3] Beare, Macvean, Holtslag, Cuxart, Golaz, Jimenez, Khairoutdinov, Kosovic, Lewellen, Lund, Mccabe, Moene, Noh, Raasch, Sullivan (2006): An intercomparison of large eddy simulations of the stable boundary layer, Boundary-layer meteorology, 118, 247-272.

### (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:

現実の気象条件は、日中での地表面の加熱、および、夜間での地表面の冷却により日変化が生 じる。そのため、地面に接する空気の流れも日変化の影響を受け、大気の状態は常に変化する。 従来、局所域の大気乱流の数値モデリング研究は、地表面温度が変化しない一定の気象場を対象 に行われていた。しかしながら、実際の気象状況をより忠実に考慮できる数値モデルにするため には、地表面の温度を変化させて、日変化に応じた大気の乱流構造が再現できているかどうか調 べる必要がある。今後は、観測データを計算入力条件として用い、連続的に変化する実際の気象 場を対象にした数値計算の実行および検証を行、モデルの高度化を進めていく予定である。

### 5.8.9 FNDI 法を用いた燃料デブリ計測に関する解析

### Analysis for Measuring Fuel Debris with the FNDI Method

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廃棄物に高速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 MVP コード等のモンテカルロコードを用いている。現在、FNDI 法装置を 用いた燃料デブリ計測装置の研究開発を進めており、その中で大型計算機を用いた計算を実施し ている。FNDI 法では、廃棄物に照射した中性子が誘発する核分裂中性子数は少ないが、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、及び計算条件が多様であるため、FNDI 法での計算には多くの時間を要する。この FNDI 法を用いた燃料デブリ計測のためのシミュレー ション解析に並列計算が実施可能な大型計算機を利用する。

### (2) 利用内容·結果:

FNDI 法を用いた燃料デブリ計測装置案を図1に示す。装置の外寸は、外径 80 cm、高さ140 cm であり、中性子検出器を 16 本使用している。燃料デブリを収納する容器については、実際 の容器寸法は未決定であるため、外径 23 cm、高さ 450 cm の容器を仮定した。本装置案を用い たシミュレーション結果例を図2に示す。シミュレーションには、MVP コード及びJENDL4.0 を使用した。このデブリ組成は燃料部、構造材部及び水が均質に混ざり合ったものとしている(中 性子吸収材であるホウ素は入っていない)。Cm-244 の自発核分裂中性子を考慮した場合と考慮 しない場合を計算した。また、実際の Cm-244 の自発核分裂中性子を考慮して計算を実施した。 図2に示すようにCm-244の自発核分裂中性子によってバックグラウンドが大きく上昇している が、核分裂中性子成分が明確に表れていることから核分裂性核種量を求めることが可能である。 燃料デブリは多様な組成が考えられ、FNDI 法を用いた計測では対応できない組成も考えられ る。中性子吸収材(ホウ素)をデブリ組成に混入させた場合のシミュレーション結果例を図3に 示す。図のように、ある程度の量のホウ素がデブリに含まれると、測定データから核分裂中性子 成分を求めることが難しくなることがわかった。今後、様々な組成に対するシミュレーションを 実施することにより、FNDI 法を用いたデブリ計測手法の適用性検討を進めていく予定である。 それに併せて、より幅広いデブリ組成に対応可能となる装置の改良についても検討を進めてい く。

#### JAEA-Review 2016-024



図1 FNDI法を用いた燃料デブリ計測装置案



- 図 2 FNDI 法を用いた燃料デブリ計測の図 3 Fシミュレーション結果例 1シ
  - 図3 FNDI法を用いた燃料デブリ計測の シミュレーション結果例2
- (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:

様々な燃料デブリ組成に対する適用性を調べるために、今後も大型計算機を用いた解析を進め ていく。

### 5.8.10 X線分光法と計算科学によるセシウムの評価

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

鈴木 知史 性能高度化技術開発グループ

### (1) 利用目的:

福島第一原子力発電所の廃止措置にあたっては、原子炉内外の核分裂生成物(FP)の放出状況に関する知見を得る必要があり、シビアアクシデント(SA)時の環境への FP 放出・移行挙動評価手法の高度化が求められている。これにあたっては、炉内環境にある FP(特に、セシウム(Cs)やヨウ素(I))の化学形を特定し、FPの化学挙動を解明する必要がある。

また、福島第一原子力発電所の事故では、大量の FP が放出され、大きな問題となっている。 このような FP の中でも半減期が 30 年となる Cs137 に関しては、土壌中等からの除去や、Cs137 を含む土壌等の減容化が求められている。これらの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 Cs は、主として粘土鉱物に吸着していると考えられるが、そ の詳細は明らかとなっていない。そこで本共同研究では、Cs の局所構造や結合状態を解明する ことで、Cs の吸着挙動の評価を行うこととしている。

このようにして、近年、Cs の評価が進められてきており、単純なアルカリ金属として扱えな いことが示されている。例えば、他のアルカリ金属やアルカリ土類金属に比べて Cs のイオン半 径が大きいため、幾何的な配置の影響が大きく、有限温度では必ずしも理論的な最安定な構造に ならないことが示唆されている。また、他のアルカリ金属やアルカリ土類金属に比べて O 2p と Cs 5p がエネルギー的に近く、さらに、非占有軌道の Cs 5d のエネルギーが低いため、共有結合 性を示している。このような Cs の特性に留意して評価を進める必要がある。

本課題では、第一原理計算による計算を実施し、炉内環境における Cs の化学形や粘土鉱物中 Cs 局所構造と結合状態の詳細を評価することで、Cs の炉内の放出・移行挙動や粘土鉱物への吸 着挙動を明らかにすることを目的とする。

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、および、Cs の放出・移行挙動を詳細に解明することができる。これにより、 粘土鉱物中の Cs の吸着挙動や Cs の放出・移行挙動の予測手法が確立されるため、福島第一原 子力発電所の廃止措置に対して有効な情報を提供することが可能となるとともに、効果的な除染 や廃棄物の減容に資することが出来る。

### (2) 利用内容·結果:

### ① Cs の粘土鉱物への吸着挙動

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 が評価されている。その一環として粘土鉱 物中のCsとOの結合状態について評価した。

図1は粘土鉱物中のCsとOの状態密度である。この図より、Cs 5pはO 2pと相互作用しているが示されている。さらに詳細に評価するため、この領域の電子密度を図2に示す。この図よりCsとOの間に節は見られず、結合軌道的な相互作用をしている。さらにこの共有結合的な挙動要因を明らかにするため、各種アルカリ金属やアルカリ土類金属の原子軌道を図3に示す。この図より、Csの5軌道は他のアルカリ金属やアルカリ土類金属の価電子帯のp軌道と比べて、エネルギー的に浅い。このことから酸素の2p軌道との相互作用が大きくなると考えられる。

#### ② Cs の炉内の放出・移行挙動

1F 事故解析から類推される温度や雰囲気等での Cs の化学吸着挙動に関する事象及び炉内状 況の把握には十分ではないため、メカニズムを解明した上でモデル化する必要がある。Cs は構 造材の表面で Si と Cs-Si-O 系の化合物を形成して吸着することが報告されている[1]。しかしな がら、これらの化合物には種々の組成があり、各々特性が異なるため、化学吸着プロセスにおい て生成する確からしい化合物を特定することは重要である。そこで、第一原理計算により、 Cs-Si-O 化合物の構造安定性を評価した。SA 時を模して構造材料のステンレス鋼 (SS) に関し て Cs 化合物を蒸発させて表面状態を評価したところ、表面には Cs (1 価) と Si (4 価) が共存 する相が形成され、かつ、組成比が 1:2 であることが報告されている[1]。そこで、種々の 1 価と 4 価の陽イオンからなる複合酸化物構造の調査結果に基づいて、Cs-Si-O 化合物の初期構造を設 定した。さらに、Si 酸化物の構造に基づいた仮想構造を初期構造として設定した。このように 設定した初期構造に基づき構造最適化を実施した。また、各構造系では、SiO<sub>2</sub> との共存を想定し て Cs と Si の組成比が 1:2 になるようにし、各系のエネルギーを計算した。その結果、図 4 に示 す初期構造が仮想構造である Cs<sub>2</sub>Si<sub>4</sub>O<sub>9</sub> の化合物からなる系が最も安定である結果が得られた。

[1] Elrick, R.M. et al., Reaction between some cesium-iodine compounds and the reactor materials 304 stainless steel, Inconel 600 and silver, NUREG/CR-3197 Vol.1,1984.



図1 粘土鉱物中のCsとOの状態密度



### 図2 粘土鉱物の価電子の電子密度



図 3 アルカリ金属とアルカリ土類の 価電子の p 軌道のエネルギー



図4 Cs<sub>2</sub>Si<sub>4</sub>O<sub>9</sub>の最安定構造

### (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 23-1652 (2015).

### 学会発表

2) <u>鈴木知史</u>, 逢坂正彦, 岡根哲夫, "シビアアクシデント時における Cs の構造材への化学吸 着挙動評価 (3) 第一原理計算による Cs-Si-O 化合物の相安定性評価", 日本原子力学会 2015 年秋の大会, 静岡 (2015).

### (4) 今後の利用予定:

ステンレス鋼表面に生じる Cs と Si を含む化合物として Cs-Si-O 系化合物として、Cs-Si-Fe-O 系化合物が考えられるので、この相安定性を評価して Cs-Si-O 系酸化物と比較する。ここで、一 部の Cs-Si-O 系酸化物では結晶構造が不明であるため、結晶構造を明らかにする。また、Cs-Si-O 系化合物や Cs-Si-Fe-O 系化合物のラマン分光の測定が進められているため、理論計算による解 析を行う。さらに、Cs-Si-O 系化合物や Cs-Si-Fe-O 系化合物の熱力学データが不足しているた め、第一原理分子動力学法等で有限温度の自由エネルギーを計算する。

### 5.8.11 過酷事象を含めた原子炉多相熱流動解析手法の開発(1)

### Development of a Thermal-Hydraulic Multi-Phase Analysis Method in Nuclear Reactors including Severe Accident Event Conditions (1)

高瀬 和之、永武 拓

軽水炉熱流動技術特別グループ

### (1) 利用目的:

東京電力(株)福島第一原子力発電所2号機(1F2)では、制御電源が喪失後も原子炉隔離時 冷却系(RCIC)は作動し続け、地震発生から70時間以上にわたって炉心に注水が行われたと 考えられる。制御電源の喪失にもかかわらず、RCICによる注水が継続された要因については未 だ明らかになっていないが、原子炉水位の補正結果などから、原子炉水位の上昇に伴い、設計で は蒸気によって駆動されるRCICタービンが、蒸気に水が混入した二相流によって駆動されたこ とが MAAP等の解析によって推測されている。しかしながら、設計と異なる二相流状態で駆動 された場合のタービンの性能など、未解明な課題が多く、実験的な研究が検討されている。本研 究は、実験研究を行うに当たり、実験装置や計測器の仕様を検討するための一環として、タービ ン内の水と蒸気の挙動を解析的に評価したものである。はじめに、タービン内速度分布とボイド 率分布の予測結果を確認した。

### (2) 利用内容·結果:

### 1) 解析の概要

図1に示す RCIC タービンの形状を簡略模擬した2次元解析体系を図2に示す。水はタービンの円周方向に8か所存在する注入ノズルから回転部分に流入し、出口配管から流出する。 主な解析条件は次のとおりである。

- ・作動流体は蒸気と水
  - 蒸気 6.0[MPa]の飽和温度での物性値を使用
  - 物性値は一定
    - 蒸気:密度 30.83 [kg/m<sup>3</sup>] 、粘性係数 1.851e-5 [kg/m/s]
      - 水:密度 758.15 [kg/m<sup>3</sup>] 、粘性係数 9.525e<sup>-5</sup> [kg/m/s]
- ・境界条件
  - 注入ノズル数は8個で、それぞれ速度流入境界
  - 配管の出口は流出境界
  - 壁は no-slip 境界
- ・注入ノズルからの初期流速は 5.6 [m/s]
  - 体積流量 31.6[m³/h]が 0.014[m]角のノズルから噴出すると仮定して算出
- ・回転数は3600rpm(時計回り方向の回転)
- ・乱流モデルは Realizable k- ε モデルを使用し、壁関数を適用



図1 RCIC タービンの形状



図2 2次元解析体系

### 2) 解析の結果

図3にタービン内部の速度分布を示す。タービン外周部に一様な流速分布を示す領域が見られる。また、内側には流速の早い領域が存在することがわかる。図4はボイド率の分布である。遠 心力によって外周部に水が蓄積されることが確認できる。

#### JAEA-Review 2016-024



### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 高瀬 和之、他 4 名、福島第一原子力発電所 2 号機 RCIC 二相流挙動基礎実験の必要性について、日本原子力学会 2016 年春の年会、2C23、2016.

### (4) 今後の利用予定:

平成 28 年度も引き続きプログラム開発を進め、シビアアクシデントによる過酷事象を含めた 軽水炉過渡時の熱流動安全性を予測評価できる解析手法の確立に目途をつける。

### 5.8.12 過酷事象を含めた原子炉多相熱流動解析手法の開発(2)

### Development of a Thermal-Hydraulic Multi-Phase Analysis Method in Nuclear Reactors including Severe Accident Event Conditions (2)

高瀬 和之、永武 拓

軽水炉熱流動技術特別グループ

### (1) 利用目的:

東京電力(株)福島第一原子力発電所2号機(1F2)では、制御電源が喪失後も原子炉隔離時 冷却系(RCIC)は作動し続け、地震発生から70時間以上にわたって炉心に注水が行われたと 考えられる。制御電源の喪失にもかかわらず、RCICによる注水が継続された要因については未 だ明らかになっていないが、原子炉水位の補正結果などから、原子炉水位の上昇に伴い、設計で は蒸気によって駆動されるRCICタービンが、蒸気に水が混入した二相流によって駆動されたこ とが MAAP等の解析によって推測されている。しかながら、設計と異なる二相流状態で駆動さ れた場合のタービンの性能など、未解明な課題が多く、実験的な研究が検討されている。本研究 は、実験研究を行うに当たり、実験装置や計測器の仕様を検討するための一環として、タービン 内の水と蒸気の挙動を解析的に評価したものである。

「過酷事象を含めた原子炉多相熱流動解析手法の開発(1)」では、RCIC タービンを簡略模 擬した回転機械の体系で二相流の計算ができることを確認した。また、試計算を行って、蒸気で 満たされている RCIC タービン内に水が侵入した場合の水と蒸気の挙動を数値的に検討し、二相 流挙動を特徴づけるパラメータである速度分布とボイド率分布を明らかにした。本報では、RCIC タービンが停止した理由について検討するために引き続き実施した解析の結果について述べる。

### (2) 利用内容·結果:

### 1) 解析の結果

図1にタービンにかかるトルクの時間推移を示す。トルク値は常に正の値を示しているため、 回転を止める方向に力がかかっていることがわかる。

図 2 にタービンにかかる力の時間推移を示す。小さい周期変動のほかに大きな変動をしてお り、今後継続計算を行うと大きな周期性が見られる可能性がある。小さい変動の周期は 4.5e-4 秒となっており、回転翼 (ブレード)が1ピッチ隣の位置に移動する時間とほぼ一致する。また、 X 方向には、回転中心(0点位置)を挟んで力がプラス正方向と負方向に周期的に働いているが、 Y 方向には力は常に正方向に作用している。

図3にタービンブレード1枚の面上の平均圧力値の推移を示す。ブレードの表裏の平均圧力を 差し引き、回転を妨げる方向に圧力がかかる場合に正値になる。変動の周期は2.0e-3秒となっ ており、ブレードがノズルを通過してから次のノズルに到達するまでの時間に一致する。ノズル を通過するタイミングのみ圧力は負値を示すが、それ以外の位置では正値であり、36枚のブレ ードの合計は正値になるため、全体としては回転を妨げるトルクが働いている。







(1) X 方向



(2) Y 方向図 2 タービンに作用する力の推移



図3 タービンブレード1枚にかかる平均圧力

### 2) まとめ

- ・トルクは領域内の水が増えていくと大きくなっていく傾向にあるため、取りうるトルク最大値 を見るには継続して計算を行い、見極める必要がある。
- ・出口配管とタービン回転部との接続部に発生する比較的大きな圧力がトルク、力、ブレード面上の平均圧力結果に影響している。このため、実際の状況においても同等な圧力分布になっていたかについては十分検討すべきである。
- ・タービンにかかる力は、X方向はわずかに振動し、Y方向は正方向に押されることが分かった。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 高瀬 和之、他 4 名、福島第一原子力発電所 2 号機 RCIC 二相流挙動基礎実験の必要性について、日本原子力学会 2016 年春の年会、2C23、2016.

### (4) 今後の利用予定:

平成 28 年度も引き続きプログラム開発を進め、シビアアクシデントによる過酷事象を含めた 軽水炉過渡時の熱流動安全性を予測評価できる解析手法の確立に目途をつける。

### 5.8.13 燃料溶融解析コード POPCORN の並列化

### Parallelization of the POPCORN Code for Fuel Melting

永武 拓 熱流動技術開発グループ

### (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 による並列化を行った。

### (2) 利用内容·結果:

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。昨年度は、温度スイッチ(陽解法)、圧力スイッチ(陽解法)、相 変化スイッチを有効とした場合について、MPI を用いたプロセス並列化を行い、32 並列実行で 4.3 倍の高速化を達成した。本年度は昨年度以外の計算ルーチンや陰解法に関する部分、さらに 機能拡張により追加された組成変化解析や弾性体解析の機能についての並列化を行った。

高速化の確認計算として、共晶をシミュレートするサンプル sosei、及び弾性体をシミュレートするサンプル ohryoku を用いて性能検証を行った。プロセス並列実行、OpenMP によるスレッド並列を交えたハイブリッド実行について並列化効率の比較を行った。

図1にサンプル sosei を用いた、並列数を変えた場合のサンプルの実行時間を示す。並列化前の8並列実行は、1プロセス/8スレッド並列実行の結果である。またハイブリッド実行は、8 並列までは1プロセス/8スレッド実行、8並列以上は多プロセス/8スレッド実行の結果である。プロセス並列の並列化効率は、8並列の場合は74%、64並列の場合は35%である。高並列の場合に実行効率が下がる原因は、並列度が上がるに従って個々のプロセスの計算時間が減る一方、通信時間や入出力時間は一定程度かかり、また集約演算の通信負荷が高くなって実行時間を押し上げるためである。

図2にサンプル ohryoku を用いた実行時間を示す。ハイブリッドの場合に、並列数が4から8 に増えるに従って実行時間の減少が鈍化する。これは、1から8並列まではプロセス当りのスレ ッド数が増加するが、サブルーチン renum2(近傍粒子検索の高速化のため、粒子を空間上のバ ケットと呼ばれるメッシュ内に配置するルーチン)内にスレッド並列化が困難なため逐次実行し ているループがあり、このために性能の伸びが抑えられるからである。16 並列以上はプロセス 数が増えるため、プロセス並列の効果によってこの因子が徐々に見えなくなって行く。

組成変化解析や弾性体解析を初めとした解析機能の並列化および並列化効率の確認計算を実施し、並列化により効率良く計算の高速化が行えることを確認した。今後は固体移動計算などについても並列化の検討を進めていく予定である。



図1 サンプル sosei の実行時間



図 2 サンプル ohryoku の実行時間

(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。

### 5.8.14 界面追跡法に基づく混相流解析手法開発

### Development of Multiphase Flow Analysis Method Based on Interface Tracking Method

吉田 啓之、鈴木 貴行、焦 利芳、堀口 直樹、加藤 由幹、上澤 伸一郎、作花 拓 熱流動技術開発グループ

### (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、大型計算機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。さらに、福島第 一原子力発電所事故を受け、燃料溶融挙動に対する溶融燃料落下挙動評価等への適用も行った。 平成 27 年度は、原子炉内熱流動挙動評価に関する研究、フィルタードベントにおける除染性能 評価手法開発に関する研究、溶融燃料落下挙動評価手法開発に関する研究を実施した。

### (2) 利用内容·結果:

#### 1. 原子炉内熱流動挙動評価に関する研究

多数の気泡が形成する二相流挙動に関する評価として、正方形流路内の二相流挙動を模擬した 解析を実施した。解析は、Matos らによる実験を模擬した。実験では、一辺 34 mm、長さ 1.5 m の正方形流路を鉛直に配置し、下部から水を流入させるとともに、中心部の気泡生成ノズルを用 いて空気を注入することで、多数の気泡(直径 3~5mm)を形成させた条件となっており、断面 内のボイド率分布が計測されている。この実験を模擬した解析体系を構築し解析を行った結果を 図 1 に示す。図 1(a)は実験結果、(b)は解析結果によるボイド率分布である。解析時間が短いこ とによる影響は見られるものの、解析結果は実験で得られた、流路のコーナー部に気泡が集まる 傾向を再現していることが分かる。図 2 に、直径 12mmの燃料棒を 4 本配置することで形成し た模擬燃料集合体内二相流挙動に、TPFITを適用した結果の一例である。多数の気泡が流路内 に形成されること、流心部から注入された気泡が、次第に周辺部へと広がっていくことが分かる。 本解析に対しては、現在、同一形状を有する試験装置によるデータ取得を行っており、結果の妥 当性についてさらに検討を行う予定である。

#### 2. フィルタードベントにおける除染性能評価手法開発に関する研究

フィルタードベントにおける除染性能評価手法開発の、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3 に解析結果の一例を示す。左図は TPFIT による詳細な三次元解析結果である。領域サイズの影響などがあるが、入口流速が66 m/s を超える二相流に対して TPFIT が適用可能であること、除染性能に重要なベンチュリースクラ バー内の圧力分布が解析により再現できることが分かる。右図は詳細解析結果を参考として実施 した、ACE-3D コードの一次元コンポーネントによる解析結果である。流路が狭くなる喉部にお いて、解析結果と実験結果との差異が見られる。これは流れの三次元性の影響や、使用した流動 モデルの予測精度の問題と考えられる。



(a) 実験結果(b) 解析結果図1 管内気泡形状の実験と解析結果との比較



図2 燃料集合体内二相流举動解析結果



図3 解析による圧力分布

### JAEA-Review 2016-024



図4 界面形状の時系列変化

### 3. 溶融燃料落下挙動評価手法開発に関する研究

複雑構造物を有する体系と構造物が無い条件での溶融燃料落下挙動を実施した。解析結果の一 例として、溶融燃料模擬物質の界面形状を構造物有りの場合(Case1)と構造物無しの場合 (Case2)を比較して図4に示す。水中に射出された模擬溶融物はジェット状に進入し、その後、 界面が不安定となり、微粒化を起こす。ジェットブレイクアップ現象はCase1,2ともに見られる が、構造物有りの場合ではジェットブレイクアップ長さは周期的に変動していることが確認でき る。それに対して、構造物無しの場合では、ジェットの崩壊が顕著にみられ、ジェットブレイク アップ長さがCase1と比較して短くなる傾向が確認できる。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

### 査読付論文発表

- T. Suzuki, et al., "Development of Numerical Simulation for Jet Breakup Behavior in Complicated Structure of BWR Lower Plenum (6) Influence of the Simulant Molten Fuel Properties on Jet Breakup Phenomenon in Multi-Channels", 23rd International Conference on Nuclear Engineering, ICONE23-1549, Chiba, Japan, May, 2015.
- 2) N. Horiguchi, et al., "Numerical Simulation of Self-Priming Phenomena in Venturi Scrubber by Two-Phase Flow Simulation Code TPFIT", Proc. of 23rd International Conference on Nuclear Engineering, ICONE23-1803, Chiba, Japan, May, 2015.
- 3) Y. Kato, et al., "Development of Prediction Technology of Two-Phase Flow Dynamics under Earthquake Acceleration (16) Experimental and Numerical Study of Pressure Fluctuation Effects on Bubble Motion", Proc. of 23rd International Conference on Nuclear Engineering, ICONE23-1852, Chiba, Japan, May. 2015.

### 査読なし論文発表

- 4) H. Yoshida, et al, "Numerical simulation of two-phase flow behavior in venturi scrubber by interface tracking method" Japan-U.S. seminar on two-phase flow dynamics, 10 Pages, (2015).
- 5) 焦、他、「二相流解析コード TPFIT の垂直矩形形管における空気と水二相流に対する検証」、 第 20 回動力・エネルギー技術シンポジウム講演論文集 (2015).
- 6) 堀口、他、「ベンチュリースクラバー内部二相流動に対する数値解析コード TPFIT の適用 性の検討、第20回動力・エネルギー技術シンポジウム講演論文集 (2015).
- 7) 作花、他、「流路内に設置した模擬スペーサ周りの気泡流挙動とボイド率分布に関する実験 と解析」、日本機械学会 2015 年度年次大会講演論文集(DVD-ROM)、(2015).

### 口頭発表

- 8) 吉田、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; (11) 詳細解析結果に基づくジェットブレイクアップ長さの検討」、日本原子力学会 2015 年秋の大会、C38、静岡大学.
- 9) 加藤、他、「地震加速度付加時の気液二相流の詳細予測技術高度化に関する研究;(29)水平 方向加振に対する水平管内単一気泡の応答特性」、日本原子力学会 2015 年秋の大会、C49、 静岡大学.
- 10) T. Sakka, et al, "Experimental and analytical studies on bubbly flow dynamics in a circular duct under low void fraction condition" 7th international symposium on process tomography", (2015).

### 招待講演

11) 吉田、「数値シミュレーション」、混相流レクチャーシリーズ 40 気液二相流入門、2015 年 5 月 27 日(主催:日本混相流学会).

### (4) 今後の利用予定:

これまで、熱流動技術開発グループでは、様々な条件において、界面追跡法に基づく混相流解 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、大規模 解析の実施のために大型計算機の利用を進める予定である。

### 5.8.15 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 Inside a Reactor Core

山下 晋、永武 拓、劉 維、柴田 光彦、高瀬 和之 熱流動技術開発グループ

### (1) 利用目的:

福島原発事故対応として、今後の燃料取り出しに向けての最優先課題である「溶融燃料の容器 底部における現在位置や炉内構造物の損傷程度」(「東京電力(株)福島第一原子力発電所 1~4 号 機の廃止措置等に向けた中長期ロードマップ」について)の評価を可能にすることを目的として、 溶融した燃料が周囲の構造物を溶かしながら圧力容器底部に落下して蓄積する挙動を定量的に 評価できる機構論的熱流動解析手法を開発し、燃料取り出しに必要な情報の解析的取得の実現を 目指した解析手法開発を行っている。本課題では、三次元多相多成分熱流動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 し、過酷事故時において不確かさの大きい炉内溶融物の機構論的な移行挙動予測を可能にするこ とを目的とする。

### (2) 利用内容·結果:

#### 炉心内溶融物移行挙動解析コード JUPITER の開発・高速化

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、熱流動技術開発グループでは、 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。JUPITER は、非圧縮性流体 解析手法をベースとし、多相・多成分流体を扱うことができる。固体の表現には埋め込み境界法 を用いることにより、直交格子系においても複雑な形状を容易に表現できる。また、相変化モデ ルとして温度回復法を用い、固体の溶融・凝固を取り扱うことが可能である。過酷事故解析に必 要な機能としてこれまでに、酸化反応熱モデル、輻射伝熱モデル、異種金属界面での共晶溶融物 形成モデル等組込を実施し、現在その検証作業を行っている。本報告では、上記モデル導入の他 に実施した JUPITER の高速化並びに実機炉内構造物中での溶融物移行挙動予備解析結果につ いて述べる。

### 1) JUPITER 高速化

原子炉は大規模な構造物であり、その中にある炉内構成材は非常に複雑な形状をしている。故 にそのような体系での過酷事故時炉内溶融物移行挙動を表現するためには大規模並列計算が必 要不可欠であり、現在それに向けた高速化を実施している。今年度は、システム計算科学センタ ーが開発した反復解法"CCSE"をJUPITERに導入し、高温溶融物流動挙動問題による性能評価 をICE Xにて行った。表1に従来用いていた PETScと今回導入した CCSEとの性能比較結果 を示す。表1より、PETScでは2億6千万格子規模の問題で、並列化効率及び実行効率の低下 が顕著であり、メモリ使用量も大幅に増加していることが分かる。一方、新ソルバでは 30 億格 子規模の問題で約1万コアまでの並列数でも強スケーリングを達成でき、メモリ使用量の増加量 は、比較的小さいことが分かった。これにより、従来手法より大幅に並列性能が向上したことで、 より大規模または詳細な現象を短時間に解析できるようになり、過酷事故時の溶融物移行挙動現 象把握に大きく貢献できる見通しを得た。今後は、大規模計算時に性能低下への寄与が大きくな る各種数値計算スキームに対して、高効率な手法の採用や開発を実施していく予定である。

コア数	経過時間	並列化効率	実行性能	実行効率	メモリ量
	(s)	(%)	(GFLOPS)	(%)	(GB)
1024	12851	100	904.79	2.2	1734
2048	8801	73.0	1320.9	1.6	2928
4096	6214	51.7	1869.7	1.1	5317

表1A 従来ソルバ (PETSc) での性能評価結果 (2億6千万格子)

表1B 新ソルバ (CCSE) での性能評価結果 (30 億格子)

コア数	経過時間 (s)	並列化効率 (%)	実行性能 (GFLOPS)	実行効率 (%)	メモリ <u>量</u> (GB)
2592	33244	100	1758	1.7	2100
5184	16676	99.7	3535	1.7	2200
10368	8345	99.6	7034	1.7	2300

#### 2) 実機形状構造物内溶融物移行挙動予備解析

平成 27 年度では、今まで炉内構造物を大幅に簡略模擬した体系のみしか対応していなかった 構造物形状に対して、3 次元 CAD データを JUPITER の入力データとして変換することにより、 使用することが可能になった。これにより、ほぼ実機と同等な構造物を有する計算体系で溶融物 移行挙動解析が可能となり、構造物の形状精度に因る不確かさを低減することができた。以下、 実機形状入力データを用いた炉心内溶融物移行挙動予備解析結果を示す。

図1(左)は、公開特許等を基に3次元 CAD で作図した体系である。その右上にある実機写 真と比べてもほぼ同等な形状であることが分かる。予備解析に当たり、計算負荷軽減のため図1 (右)にあるように燃料集合体の4分の1の領域に対して溶融物移行挙動解析を行った。図2 は、4分の1の領域中における溶融物の移行挙動解析結果である。構造物内部における流動を見 やすくするために斜め方向にカットした領域のみ可視化している。図より、一定の発熱量を有す る燃料棒が上部から徐々に溶融し燃料支持金具内へ流入していく様子が分かる。燃料支持金具内 の溶融物は一部オリフィス近傍の傾斜部分で凝固を伴いながらオリフィスから流出し下方へ流 下していく。オリフィス近傍の傾斜部分で凝固した溶融物は凝固点が燃料支持金具の融点より高 いため、凝固物から燃料支持金具への熱伝導により燃料支持金具が溶融しその部分が破損する過 程を再現し得ることを確認した。この結果は、現象論的に溶融物の移行経路が変化しうることを 示唆するものであり、シビアアクシデント解析コードの移行挙動モデルの高精度化に資することが できると考えられる。今後は、初期条件や境界条件等をより実際に近い条件として解析を実施する。



図1 3次元 CAD 形状データとその計算対象領域



図 2 実機体系内溶融物移行挙動解析結果

### (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 melt relocation behavior in nuclear reactors: validation of applicability for actual core support structures", Proc. ICONE24, 2016. (CD-ROM).
- 2) 山下 他 4 名, "JUPITER コードによる過酷時炉内構造物内の溶融物移行挙動に関する数値 的検討", 第 28 回計算力学講演論文集, 横浜, 10 月(2015).

### (4) 今後の利用予定:

今年度実施した実機構造物領域より更に拡大した体系において、溶融物移行挙動パラメータ解析を実施する。V&Vの一環として模擬炉心下部構造物中の溶融物移行挙動試験解析等を通じて、 JUPITERの妥当性評価を行う予定である。また、燃料デブリの空冷評価解析手法の開発を行い、 気中での燃料デブリの熱伝達係数や自然対流場が冷却に及ぼす影響等を評価する予定である。

### 5.8.16 合金化と組織制御のための原子・電子シミュレーション

### Atomic and Electronic Modeling for Alloying and Defect Textures

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:

構造材料の機能向上に一般に加工による組織制御や添加元素による合金化が用いられるが、加 工によって導入される欠陥組織や合金元素の役割を直接的に理解することは困難である。本研究 では、欠陥組織として、He バブルなどの原子力材料特有の欠陥や近年の強加工によって得られ る超微細粒材料における微細粒を対象として、原子シミュレーションを用いて機械特性への影響 を明らかにすることを目的とする。また、合金元素の影響はこれまで熱力学的特性が精力的に行 われてきた一方、機械特性との関係を理解する方法はなされていない。そこで、周期系の転位の 弾性解と第一原理計算を連携した枠組みを構築し、転位運動に与える影響から塑性変形を評価す ることを目的として検討を行った。

高い安全性を有する高温ガス炉の実用化に資するため、高温ガス炉用ガスタービンへの核分裂 生成物沈着量低減手法に関する研究を開始した。本研究では、高温ガス炉の実用化に向けた安全 性確保のため、ガスタービンを構成する Ni 基合金に核生成物である Ag の付着、浸透を抑制す ることを目的としている。

### (2) 利用内容·結果:

① 照射欠陥の発展挙動として電子照射下での格子間原子集合体の 1D 運動挙動と数密度を実験的に定量評価し、得られた 1D 運動挙動のモデル化により格子間原子集合体の成長過程に及ぼす
 1D 運動の影響を評価した。機械特性予測の単純な例として、転位運動の障害物に対して従来の強化機構に加えて圧力が重要であることを示した(論文⑤)。

② 多結晶材料は粒界を通じた転位の移動によって塑性変形が進行する。これらを結晶学的、力 学的に記述する新しい理論として、図 1(a)に示すように塑性変形の伝播を最大せん断応力に基づ く *M*値(式(1))と負荷方向の Schmid 因子を合わせた *L*値(式(2))を提案した。

$$M = \max_{\alpha=112} \{ \boldsymbol{\tau}_{B}^{\alpha} / \boldsymbol{\tau}_{A}^{P} \} = \max_{\alpha=112} \{ (\boldsymbol{L}_{A}^{P} \cdot \boldsymbol{L}_{B}^{\alpha}) (\boldsymbol{g}_{A}^{P} \cdot \boldsymbol{g}_{B}^{\alpha}) \} \boldsymbol{b}_{r} .$$
(1)

$$L' = \max_{\alpha = 1, 12} \left[ w_1 (SF)_{A, \max}^{P} (\boldsymbol{L}_{A}^{P} \cdot \boldsymbol{L}_{B}^{\alpha}) (\boldsymbol{g}_{A}^{P} \cdot \boldsymbol{g}_{B}^{\alpha}) + w_2 (SF)_{B}^{\alpha} \right]$$
  
= 
$$\max_{\alpha = 1, 12} \left[ w_1 \times (\boldsymbol{e}^{def} \cdot \boldsymbol{n}_{A}^{P}) (\boldsymbol{e}^{def} \cdot \boldsymbol{g}_{A}^{P}) \times (\boldsymbol{L}_{A}^{P} \cdot \boldsymbol{L}_{B}^{\alpha}) (\boldsymbol{g}_{A}^{P} \cdot \boldsymbol{g}_{B}^{\alpha}) + w_2 \times (\boldsymbol{e}^{def} \cdot \boldsymbol{n}_{B}^{\alpha}) (\boldsymbol{e}^{def} \cdot \boldsymbol{g}_{B}^{\alpha}) \right].$$
(2)

そして、図 1(b)に示すように粒界を2個含む双結晶モデルの大規模原子シミュレーションによって、モデルの正当性を検証した(論文①、④)。

③ 昨年度の成果に関連して、転位芯構造解析の手法の提案を行い体心立方、六方晶合金へ適用 した。現在、原子力構造材料として α 鉄とジルコニウム、軽量材料としてチタンとマグネシウム を対象とした成果が得られた(論文③、解説記事)。 ④ これまでの知見から、高温ガスタービンにおいて付着した Ag 原子が Ni 基合金内部に深く浸透することが得られている。Ni 中で Ag が拡散しやすいという特徴に起因することが予測される。そこで、核生成物である Ag について、第一原理計算により Ni 中の他の不純物との結合機に対する電子状態からの拡散予測を行った結果、d 軌道が閉殻の Ag では他の合金元素と結合を生じにくく、合金化による拡散抑制が期待できないことを示唆した。



図1 (a)双結晶の結晶方位関係と(b)原子シミュレーションによる転位挙動

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

### 論文(査読付き)

- 1) <u>T. Tsuru</u>, Y. Shibutani and T. Hirouchi, "A predictive model for transferability of plastic deformation through grain boundaries", AIP Advances, 6 (2016), 015004.
- 2) H. Somekawa, M. Yamaguchi, Y. Osawa, A. Singh, M. Itakura, <u>T. Tsuru</u> and T. Mukai, "Material design for magnesium alloys with high deformability", Philos. Mag., 95 (2015), 869-885.
- 3) <u>T. Tsuru</u> and D. C. Chrzan, "Effect of Solute Atoms on Dislocation Motion: An Electronic Structure Perspective", Scientific Reports, 5-8793 (2015), 1-8.
- 4) <u>T. Tsuru</u>. Y. Aoyagi, Y. Kaji and T. Shimokawa, "Heterogeneous plastic deformation and Bauschinger effect in ultrafine-grained metals: Atomistic simulations", Model. Simul. Mater. Sci. Eng., 24 (2016), 035010.
- <u>Y. Abe</u>, <u>T. Tsuru</u>, S. Shi, N. Oono, S. Ukai, "Effect of the dilation caused by helium bubbles on edge dislocation motion in α-iron: molecular dynamics simulation", J. Nucl. Sci. & Technol. 53-10 (2016), 1528-1534.
- 6) (解説記事,査読無し)都留智仁,「チタンの劇的な酸素固溶強化の起源~材料欠陥の直接観察と計算科学~」,サイエンス誌に載った日本人研究者,2016年3月.
- 7) (Review, 査読無し) <u>Y. Abe</u>, "Towards the Improvement of the Evaluation Accuracy of the Long-Term Integrity of Nuclear Reactors A Model Development of the Microstructural Evolution under Neutron Irradiation—", JAEA R&D Review 2014, 52 (2015).

### プロシーディング (査読付き)

8) <u>T. Tsuru</u>, Y. Aoyagi, Y. Kaji and T. Shimokawa, "Atomistic simulation of yield and plastic deformation in bulk nanostructured metals", Proceedings of ICONE-23, (2015) 23-1582.

### 受賞

9) 平成 27 年度 理事長表彰 研究開発功績賞、マルチスケール計算材料科学グループ(代表: 都留智仁), 2015 年 10 月.

### 基調・招待・依頼講演

- 10) (招待講演) <u>都留智仁</u>,「組織制御・合金化による力学特性評価のための原子・電子シミュレ ーション」, 第3回プラストンに基づく変形現象研究会, 2015年4月15日, 東京大学.
- 11) (依頼講演) <u>都留智仁</u>,「原子シミュレーションによる組織制御と合金化に対する力学特性評価手法の検討」,第1回 CMRI 研究会,平成 27 年 6 月 23 日,東北大学.
- 12) (Invited) <u>T. Tsuru</u>, Y. Aoyagi, Y. Kaji and T. Shimokawa, The 2nd International Workshop on Bulk Nanostructured Metals, Aug. 3-5 (2015), Kyoto University.
- (Invited) <u>T. Tsuru</u>, "Effect of solute atoms on dislocation core structure and motion in HCP metals", 4th ESISM Workshop -Fundamental Issues of Structural Materials-, Jun. 13-14 (2016), Kyoto University.

### 国際・国内会議

- 14) <u>T. Tsuru</u>, et al., "Tension/compression anisotropy in yield stress and Bauschinger effect in ultrafine-grained metals", 12th International Conference on the Mechanical Behavior of Materials (ICM12), May 10-14, 2015, Karlsruhe, Germany.
- 15) <u>T. Tsuru</u>, et al., "Atomistic simulation of yield and plastic deformation in bulk nanostructured metals", 23rd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE 23), May 17-21, 2015, Makuhari, Chiba, Japan.
- 16) D. C. Chrzan and <u>T. Tsuru</u>, "Effect of solute atoms on dislocation motion in Mg: An electronic structure perspective", 2016 TMS Annual Meeting & Exhibition, Feb. 14-18, 2016, Nashville, Tennessee, USA.
- 17) A. S. Winter, D. C. Chrzan and <u>T. Tsuru</u>, "First Principles Investigation of Dislocations in BCC Lithium-Magnesium Alloys", 2016 MRS Spring Meeting & Exhibit, Mar. 28-Apr. 1, 2016, Phoenix, Arizona, USA.
- 18) <u>都留智仁</u>, D.C. Chrzan, 「合金元素による機械特性改善のための転位芯構造解析」, 第 20 回分子動力学シンポジウム, 2015 年 5 月 22 日, 山形大学.

### (4) 今後の利用予定:

大規模分子動力学シミュレーションにより3次元多結晶における積層欠陥の影響を検討する。 また、第一原理計算を用いた転位・双晶の解析、および高温ガスタービンにおける粒界拡散の特 性を検討する。

### 5.8.17 CIELO プロジェクトにおいて再評価された<sup>235</sup>U 核データに対する FCA XXVII-1 炉心におけるナトリウムボイド反応度価値実験を用いたベンチマークテスト

Benchmark Tests of Newly-evaluated Data of <sup>235</sup>U for CIELO Project using Sodium-void Reactivity Worth Measured in FCA XXVII-1 Assembly

> 福島 昌宏 核変換システム開発グループ

### (1) 利用目的:

国際評価済み核データライブラリーを開発するための新しいプロジェクトである CIELO (Collaborative International Evacuated Library Organization)において再評価された U-235 の核データに対して、高速炉臨界実験装置(FCA)の実験データを用いた積分評価を実施した。 本積分評価において、U-235の1keV付近の捕獲断面積に感度を有するFCA XXVII-1炉心のナ トリウムボイド反応度価値に関する実験データを利用した。本解析には、実験体系の幾何形状を 詳細に模擬することが可能な連続エネルギーモンテカルロ法を用いた。なお、積分評価において 統計精度の良い解析結果を得るために、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:

CIELO プロジェクトは、OECD/NEA における核データ評価に関する国際協力の枠組みで、 日本、米国、欧州の核データ関係者が主となって世界共通の核データライブラリーの構築を目指 すというものである。同プロジェクトでは、現在、H-1、O-16、Fe-56、U-235、U-238、Pu-239 の主要な 6 核種の再評価が先行して進められている。今回対象とした U-235 の再評価(以下、

O4BRC2 と呼ぶ)では、主に keV
付近までの共鳴パラメータが修 正 されている。そこで、
ENDF/B-VII.1 を参照として
O4BRC2 の比較を行った。また、
JENDL-4.0 への反映の観点から、O4BRC2 の共鳴パラメータのみを JENDL-4.0 へ取り込んだ一時的なファイル(以下、
J40O4 と呼ぶ)を用意して、
JENDL-4.0 と J40O4 の比較を行った。U-235 捕獲断面積の比較を、図1に示す。



今回の積分評価で用いたナトリウムボイド反応度価値測定が実施された FCA XXVII-1 炉心を 図2に示す。ナトリウムボイド反応度価値は、金属ウラン及びナトリウムで構成される炉心中央 部の試験領域に対して軸方向の高さを変えた3つのケース(表1)について測定された。いずれ のケースも1keV付近の235Uの捕獲断面積に大きな感度を有する。解析は、連続エネルギーモ ンテカルロコード MVPを用いて、実験体系の幾何形状を詳細に模擬した。ナトリウムボイド反 応度価値の解析値は、試験領域にナトリウムを装荷した場合及び試験領域をボイド状態とした場 合の体系の実効増倍率をそれぞれ求め、それらの差から評価した。反応度価値の統計誤差が測定 誤差と同程度とするように、大規模並列計算機 BX900により、総ヒストリー数を20億となる 膨大な計算を実施した。



図 2 FCA XXVII-1 炉心の概要(RZ モデル)

表	1	試験領域
1	т	的人民学

C	Height of test zone	Equivalent radius of	Equivalent radius of
Case	$(Z_t \times 2)$ [cm]	test zone [cm]	core zone (r <sub>c</sub> ) [cm]
Case-1	$5.08 \times 2$	9.34	31.30
Case-2	$10.16 \times 2$	9.34	31.45
Case-3	$15.24 \times 2$	9.34	31.45

ベンチマークテストの結果として、ナトリウムボイド反応度価値の解析値と実験値の比(C/E値)を表2に示す。表2(a)で示されるように、ENDF/B-VII.1における大幅な過小評価が、O4BRC2

で大きく改善されていることが分かった。また、表 2(b)で示されるように、JENDL-4.0 での過 大評価が、新しい共鳴パラメータを考慮した J40O4 で改善されていることが分かった。別途実 施した感度解析により、これらの核データによる差異は主に <sup>235</sup>U の 1keV 付近の捕獲断面積に 起因していることを確認した。これらの積分評価により、U-235 の共鳴パラメータに関する今回 の CIELO での再評価が妥当であることを示した。

表 2 FCA XXVII-1 炉心におけるナトリウムボイド反応度に関する C/E 値

0		C/E
Case	ENDF/B-VII.1	O4BRC2
Case-1	$0.635 \pm 0.049^{*1} \pm 0.032^{*2}$	$0.992 \pm 0.050^{*1} \pm 0.050^{*2}$
Case-2	$0.673  {\pm} 0.025^{*1}  {\pm} 0.025^{*2}$	$0.933 \pm 0.025^{*1} \pm 0.035^{*2}$
Case-3	$0.765  {\pm} 0.016^{*1}  {\pm} 0.050^{*2}$	$0.930 \pm 0.016^{*1} \pm 0.061^{*2}$

(a) O4BRC2 及び ENDF/B-VII.1 の比較

### (b) J40O4 と JENDL-4.0 の比較

Casa		C/E
Case	JENDL-4.0	J40O4
Case-1	$1.199 \pm 0.049^{*1} \pm 0.060^{*2}$	$1.117 \pm 0.050^{*1} \pm 0.056^{*2}$
Case-2	$1.157 \pm 0.025^{*1} \pm 0.043^{*2}$	$1.054 \pm 0.025^{*1} \pm 0.040^{*2}$
Case-3	$1.130 \pm 0.016^{*1} \pm 0.074^{*2}$	$1.098 \pm 0.016^{\star_1} \pm 0.072^{\star_2}$

\*1 Due to MC statistical errors. \*2 Due to Experimental uncertainties.

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 M. Fukushima, Y. Kitamura, K. Yokoyama, O. Iwamoto, Y. Nagaya, L. C. Leal, "Benchmark tests of newly-evaluated data of <sup>235</sup>U for CIELO project using integral experiments of uranium-fueled FCA assemblies", Proceedings of International Conference on the Physics of Reactors; Unifying Theory and Experiments in the 21st Century (PHYSOR 2016) (USB Flash Drive), pp. 605-619, (2016).

### (4) 今後の利用予定:

今後も、FCA 積分実験を活用して、CIELO プロジェクトを通して国際評価済み核データライ ブラリー開発等の国際協力に貢献していく予定である。

## 5.9 原子力科学研究部門 高温ガス炉水素・熱利用研究センター Sector of Nuclear Science Research HTGR Hydrogen and Heat Application Research Center

### 5.9.1 FORNAX-A の応用 Application of FORNAX-A

相原 純、植田 祥平、西原 哲夫 小型高温ガス炉研究開発ディビジョン

### (1) 利用目的:

FORNAX-A は、ピン・イン・ブロック型の高温ガス炉燃料要素(円筒型)からの核分裂生 成物(FP)放出量を計算するための計算コードであり、取り扱い可能な計算条件には様々な制 限がある。そこで、ユーザーがプログラムに軽微な変更を施すことによって FORNAX-A の計 算条件の制限を緩和できるようにした。

### (2) 利用内容·結果:

1) 拡散係数の取扱、2) 燃料要素の形状、3) 燃料要素中の被覆燃料粒子(CFP)の温度分布の3種類の制限の緩和について、計算条件を設定し、プログラムの変更、動作確認までを行った。

1) 本来の FORNAX-A においては、各領域における FP の拡散係数は、入力データである1 組 の頻度因子及び活性化エネルギーのセット、及び入力データである温度履歴から計算される が、頻度因子と活性化エネルギーの一部または全部をプログラム内で設定または計算すること により、頻度因子及び活性化エネルギーの温度依存性等を取り扱うことが可能である。

2) 本来の FORNAX-A は、ピン・イン・ブロック型、即ち円柱形状または円筒形状の燃料要素(燃料棒)を対象とした計算コードであるが、コントロールボリューム法を適用していることから、軽微な変更により球状の燃料要素(ペブル燃料)を取り扱うことが可能である。

なお、FORNAX-A においては黒鉛スリーブ外表面(燃料要素外表面)/冷却材における境 界条件としては、下記(a)(b)のどちらかを選択する。

(a) 燃料要素外表面において FP 濃度は0

(b) 燃料要素の外表面において FP 濃度が0 ではない

上記(b)を選択した場合、プログラム内で燃料要素外表面/冷却材境界における物質伝達係数

が計算され、境界における FP 濃度の計算に用いられる。FORNAX-A におけるこの計算方法 は円環状の冷却材流路に対応している。上記の軽微な変更によりペブル燃料を取り使う場合に は、燃料要素外表面/冷却材境界条件としては(b)を選択することは理論的に適切ではない。

3) 本来の FORNAX-A においては、計算時間節約のため計算点1点(燃料コンパクトを輪切 りにした領域) について CFP の温度は均一であるとしているが、以下のようにして CFP の 温度の燃料コンパクト中における径方向温度分布を取り扱うことが可能である。ただし、下記 ③で述べるように境界条件が限られる。

- ① 燃料コンパクト(または燃料部)の要素を、径方向にいくつかの領域 R1, R2, …,Rm に分割する。(個々の燃料要素をそれぞれ1つの領域としても良い)
- ② 領域 Rk (1≤k≤m) 以外の燃料要素体系における FP 生成を 0 に書き換えるよう、本 来の FORNAX-A のプログラムに変更を施したプログラム(以下、FORNAX-Ak とする) を作成する。(m 個の FORNAX-Ak を作成する)
- ③ CFP の温度として領域 Rk(1≤k≤m)における温度(例:領域 Rk の内外面温度の平均値) を指定した入力データファイル(以下、INDATk とする)を作成する。(m 個の INDATk を作成する)

燃料要素外表面における境界条件としては下記(a)(b)のいずれかを選択する。 すべての INDATk において同じ境界条件を選択すること。ただし、ペブルベッド燃料に ついての計算を行う場合には(a)のみ選択すること

- (a) 燃料要素外表面において FP 濃度 = 0
- (b)「燃料要素の外表面において FP 濃度が 0 ではない」のうち「Hernian 型」(円柱ま たは円筒状燃料要素の場合のみ)
- ④ INDATk (1≤k≤m) を入力データファイルとして FORNAX-Ak (1≤k≤m) により計算を行う。計算された核種 i の燃料要素体系における燃料要素中における位置(燃料要素中心からの距離)rc [cm]、時刻 t [s]における核種 i の濃度を Cci,k(r c,t) [µ mol/cm<sup>3</sup>] (1 ≤k≤m) とする。
- ⑤ 計算により求められる Cci(r c,t) = Σ Cci,k(r c,t) [μ mol/cm<sup>3</sup>]が、燃料要素中における位置(燃料要素中心からの距離) rc [cm]、時刻 t [s]における核種 i の濃度燃料要素体系における濃度である。

1)、2)、3) のいずれにおいても、タイムステップn(=時刻 126230400 [s]) における核種 の濃度分布を、タイムステップn及びn-1(時刻 126230370 [s])を用いて、要素mの中央 点における核種の濃度と要素ごとに比較した結果、よく一致した。従って、体系における核種 の濃度分布は時刻 126230400 [s](事故時)において基礎式を満たしていると判定し、以下のように結論付けた。

- ① 本来の FORNAX-A は、FP の拡散係数は、入力データである 1 組の頻度因子及び活性 化エネルギーのセット、及び入力データである温度履歴から計算されるが、プログラム の軽微な変更により、頻度因子 and/or 活性化エネルギーの温度依存性等を取り扱うこと が可能である。
- ② 本来の FORNAX-A は、ピン・イン・ブロック型、即ち円柱形状または円筒形状の燃料 要素(燃料棒)を対象とした計算コードであるが、プログラムの軽微な変更により、球状の 燃料要素を取り扱うことが可能である。
- ③ 本来の FORNAX-A は、計算時間節約のため計算点 1 点について CFP の温度は均一で あるとしているが、プログラムの軽微な変更により、燃料要素中における CFP の温度分 布を取り扱うことが可能である。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 相原 純、植田 祥平、西原 哲夫、FORNAX-A の応用、JAEA-Technology 2015-040,2016,32p.

### (4) 今後の利用予定:

従来の計算に加え、今回確認できたプログラムの変更により計算の幅や精度を上げ、様々な 核種、元素に対し、通常時・事故時の両方について計算を行い、FORNAX-A とは基礎式の異 なる「HTFP コード(事故時の燃料からの FP 放出量計算コード)」で用いるための因子(被 覆燃料粒子からの放出定数)を評価する。

### 5.9.2 商用高温ガス炉の黒鉛構造物に含まれる不純物の燃焼特性と臨界性の研究 Investigation on Burn-up Characteristics and Criticality Effect of Impurities in the Graphite Structure of a Commercial-scale HTGR

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、原子炉から取出した高温の熱を水素製造やヘリウムガスタービン発電に利用す ることができる。このうち、ヘリウムガスタービン発電は、発電効率が高く、その簡素かつコン パクトなシステムにより、発電容量あたりの建設費を軽水炉より安くすることが可能である。発 電原価は、資本費、運転費、燃料費からなり、建設されたプラントの減価償却が主要な資本費、 建設費に比例する性質を持つ運転費が安価になるため、全体として軽水炉よりも安価な発電原価 が実現できる\*。(Fig.1) 一方、燃料費は軽水炉と同等であり、これは、黒鉛部材費を含む製造

コストの占める割合の大きさが一因とな っている。炉内の黒鉛材料としては、純度 が高く高価な IG-110 と純度が低く安価な IG-11 があり、臨界性等の観点から IG-110 の使用が検討されてきたが、経済性の悪化 が懸念されていた。そのため、本研究では、 黒鉛材料に含まれる不純物の量の違いが 高温ガス炉の臨界性及び燃焼特性に及ぼ す影響を明らかにし、安価な IG-11 の利 用拡大の可能性を検討する。

### (2) 利用内容•結果:

本研究では、燃焼解析コード ORIGEN のライブラリ作成及び炉心解析に必要な 臨界計算にモンテカルロ法に基づく中性 子輸送コード MVP を利用した。MVP の 計算負荷は大きく全炉心計算は難しいが、 大型計算機 ICE X の計算能力により実施 が可能となった。

解析は商用高温ガス炉として設計が行われた GTHTR300 を対象とする。









GTHTR300 は臨界性等の観点から炉内の黒鉛ブロックに IG-110 を用いている。一方、経済性の観点から、炉心特性に影響が少ない内側反射体の中心部及び、交換頻度の高い燃料ブロックには IG-11 を用いている。詳細を Fig.2 に示す。従来の設計手法では、黒鉛中の不純物は反応度価

値を等価とする天然ホウ素の量、すなわち、ホウ素当量で表わされる不純物に対し、非燃焼の天 然ホウ素を与えることにより炉心計算において、その負の反応度価値を考慮していた。さらなる 高精度化のためには、可燃性毒物として炉心に装荷されているホウ素と同様に、不純物の負の反 応度価値も炉心燃焼と共に減少する炉心計算を行うべきである。このような観点から、不純物の 燃焼による反応度価値の変化を確認し、炉心解析に対する適用法を検討した。黒鉛材料中には不 純物として、Li、B、Na、Mg、Al、Ca、K、Ti、V、Cr、Fe、Mn、Co、Ni、Cu、Zn が含ま れる。これらの核種の中性子との反応を考慮し、反応度価値を保存するように天然ホウ素重量に 換算したものがホウ素当量である。厳密に言えば、ホウ素当量は使用する中性子場に依存するの で、本研究では、不純物が存在する中性子場を考慮して評価を行った。また、一般的に考慮され る中性子吸収反応の他に、(n,2n)反応なども考慮するために、高速炉燃料管理などで用いられる、 等価フィッサイル値を反応度価値評価の尺度として利用した。以下に、その定義を示す。

 $y = v\sigma_{f} - \left(\sigma_{(n,\gamma)} + \sigma_{(n,\gamma)_{e}} + \sigma_{(n,\alpha)} + \sigma_{(n,p)} - \sigma_{(n,2n)} - \sigma_{(n,2n)_{e}} - 2\sigma_{(n,3n)}\right)$ (1)

(1)式の評価には ORIGEN コードで扱えるすべての核種反応を考慮している。これは、ホウ素 当量を正確に評価するためには、多くの中性子反応断面積が必要となり、多くの不純物の核種、 さらに核変換され多様化した核種に対し評価する必要があったためである。このような用途には ORIGEN コードが適している。しかし、ORIGEN コードはエネルギー1 群断縮約面積の使用を 前提とし、同じ熱中性子炉でも軽水炉と高温ガス炉ではスペクトルが異なるため、1 群断面積は 代表的な 1/v 特性を持つ核種に対し、値が倍程度異なる。また、高温ガス炉評価に適したライブ ラリが存在しなかったため、高温ガス炉用断面積ライブラリを作成し使用することとした。この 場合、1000 核種程度の核種に対応する ORIGEN コードの断面積をすべて整備することは容易 ではなく、通常は特性が類似した炉心の既存の ORIGEN ライブラリをベースに、重要もしくは 置換可能な核種のみに、対象の炉心の特性(中性子スペクトル、背景断面積)を反映した断面積 を作成し置換する方法がとられる。その際、放射化物に関しては、積極的に置換されないことが 多い。しかし、今回は、放射化物が評価対象になること、ベースに用いる軽水炉ライブラリの断 面積に比べ、代表的な1/v特性核種に対し、高温ガス炉の断面積が倍程度であることを考えると、 放射化物に対しては、すべての核種が置換する必要があった。そのため、一つの評価済核データ では対応しきれないところ、炉心設計にも用いた評価済核データ JENDL-4.0 の他に JEFF-3.1.2、 JENDL/A-96、JEFF-3.1/A、TENDL-2011 を用い、放射化物のすべての核種に 対して断面積を置換することに成功した。ORIGEN コードと MVP コードにより評価した燃料 ブロックと側部反射体の中性子束により、それぞれの不純物を燃焼させた場合とホウ素当量相当 のホウ素を燃焼させた場合のホウ素当量の変化を調べた。結果を Fig.3 に示す。不純物の燃焼は ホウ素のみで代用させても十分な精度が得られることが分かった。これは、多くの核種を直接扱 えない、炉心計算コードに対してもホウ素で代用することにより、不純物の臨界性の燃焼変化を 評価できることを示している。そこで、不純物の核種毎の反応度価値を調査したところ、ホウ素 単体によるものが支配的であり、ホウ素当量が 1%程度に低減するまでは、他の核種の影響が表 れない特性によるものである。なお、この 1%程度(IG-11 のホウ素当量が 3ppm 程度であるの で、0.03ppm)のホウ素当量を炉内の黒鉛構造物添加した際の反応度価値が 0.01%Δk/kk'以下で 無視できることを確認している。

次に、黒鉛不純物に対しては、ホウ素で 代用した不純物を各領域のブロックで燃焼 させた全炉心燃焼解析により、臨界性への 影響を確認した。解析ケースとしては、① 従来の設計通り、不純物は非燃焼物質とし て扱うが、炉内は IG-11 のみのケース、② IG-110 を併用した従来設計のケース③ IG-11 のみであるが不純物の燃焼効果を考 慮したケースを対象とした。Table1 の結果 からわかるように、従来の不純物を非燃焼 物質として扱ったケース同士(①と②)で



Fig.3 ホウ素当量の燃焼変化

は、高純度黒鉛 IG-110 を併用した効果により、サイクル長にして 28 日程度伸びている。一方 で、不純物の燃焼効果を考慮すると IG-11 のみの炉心であっても(③)、サイクル長は減るどこ ろか、従来設計よりもさらに 20 日程度伸びている。このことは、反射体領域のみではなく、燃 料領域の不純物も燃焼末期を迎える前に十分に燃え尽き、不純物が臨界性の妨げにならないこと を示している。このように、燃焼特性の観点からは IG-11 炉心の成立性について有望であるとの 結果を得られたが、今後の設計における材料の選定においては、安全性等も考慮して総合的な判 断を行うことが重要である。

### Table1 GTHTR300 のサイクル長と燃焼度\*

	①IG-11 炉心 (不純物燃焼未考慮)	②従来設計 (不純物燃焼未考慮)	③ <b>IG-11</b> 炉心 (不純物燃焼考慮)
サイクル長(日)	602	630	650
燃焼度(GWd/t)	103.0	107.8	111.2

\*評価コード、核データ等の違いにより、これまでの公表値とは若干異なる。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

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, 61p.

### (4) 今後の利用予定:

高温ガス炉は、安全性の高い原子炉として注目されており、実用化に向けての期待が高い。今後は、高温ガス炉の実用化に向けて、その性能を確認するため、フロントエンドからバックエンドまでをも含む包括的な評価を行っていきたい。その過程で多くの計算機資源が必要となることが想定され、大型計算機 ICE X の計算能力に期待する。
#### 5.9.3 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 熱利用システム設計グループ

#### (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の安全研究 の一環として、使用済み吸着塔の長期保管時の水素ガスの滞留防止対策の妥当性評価が求められ ている。図1は、FLUENTを用いて、吸着塔内での水素濃度分布を3次元流動解析した結果で ある。対策を適切に実施するためには、発生する水素がどのように流動するかの知見が必要であ り、そのためのツールとして CFD を有効活用する研究を進めている。そこで、コードの解析手 法、物理モデルについての解析精度への影響等を整理するため、九州大学で実験・数値解析が進 められている建屋実験室モデル(以下、Hallway モデル)を対象に、感度解析を行った。本解析 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

吸着塔内の水素挙動解析においては、浮力や密度変化による微小な駆動力により、吸着塔付属 の開放配管から空気が吸着塔内に流入するとともに、現行の水素対策として設置されたベント管 プラグの開口部から水素ガスが流出することで水素濃度が低減される様子がみられたことから、 このような部分開放空間で漏洩した水素ガスの挙動における CFD の適合性を検討した。

図2に Hallway モデルの概要を示す。Hallway モデルは、2.9x0.74x1.22[m]の直方体形状の 室であり、床面の一部から水素が一定流量で流入する.また天井部(以下, Roof Vent)及び側 面(以下, Door Vent)の一部に長方形の穴が開いており、外気との交換が行われる。一定流量 (57L/min)の水素流入に対して, Roof Vent 及び Door Vent から自由に外気との交換が行われ る条件について解析を行った。

#### 2) 解析結果

図3に4つの計測点における水素濃度を実験値と計算値(FLUENT)にて比較した結果を示 す。水素が浮力によって上昇して、天井付近に滞留した後、roof vent から排出される様子や、 下部から流入した水素の浮力によって、大気開放されている door vent からは比較的速い外部流 が換気流として流入し、室内を循環する流れがみられた。この流れ場から得られる計測点①~④ の水素の体積分率は計算値と実験結果で概ね一致していることを確認できた。

なお、本成果に加え、SARRY 吸着塔内の温度解析等においても、システム計算科学センターの多大な支援を頂いた。紙面を借りて感謝する。



図1 KURION 吸着塔の概観と吸着塔内水素濃度分布



図 2 Hallway モデルの概要

図3 水素濃度の継時変化

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 寺田敦彦他、"水素拡散燃焼影響評価のための設計支援システムの整備"、日本機械学会鹿児 島講演会,2013.
- 2) 寺田敦彦、"部分開放空間における水素漏洩シミュレーション"、日本機械学会茨城講演 会,2015.

#### (4) 今後の利用予定:

平成28年度は、実規模のSARRY 試験体加熱試験に係る予備検討を行う予定である。

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 28 年度においても利 用を継続したい。

# 5.10 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

5.10.1 大規模殻模型計算による軽い中性子過剰核のベータ崩壊の記述

β Decay of Light Neutron-rich Nuclei Described with Large-scale Shell-model Calculations

宇都野 穣 重元素核科学研究グループ

#### (1) 利用目的:

中性子過剰核のベータ崩壊は核構造データのうち最も基本的なものの一つであり、放射性核種 の半減期や遅発中性子放出など原子力分野においても極めて重要な役割を果たしている。原子核 物理の観点から言えば、中性子過剰核のベータ崩壊は、ガモフテラー遷移によって支配され、個々 の原子核のスピン・アイソスピン応答によって特徴づけられる。従来、ベータ崩壊、特に半減期 や遅発中性子放出確率の系統的な理論計算は主に大局的理論や乱雑位相近似によってなされて きたが、これらの計算では原子核を構成する核子間の相関を完全には取り入れることができない ために、非常に良い精度で半減期や遅発中性子放出確率を再現するには至っていない。

原子核殻模型計算は、低励起状態を支配する配位を完全に取り入れた計算であるため、適切な 有効相互作用を用いることによって低励起状態の性質を非常によく記述することが知られてい る。これまでは、多数の終状態が寄与する半減期計算や遅発中性子放出確率計算にはほとんど適 用されてこなかったが、大型計算機の能力の向上に伴ってこのような計算が可能になってきた。 本研究では、ベータ崩壊の半減期や遅発中性子放出確率に対する大規模殻模型計算の適用能力を 軽い中性子過剰核において調べ、核データの観点からより重要である中重核への足がかりとなる ことを目指す。

#### (2) 利用内容·結果:

利用者らは、以前、中性子数 28 領域の中性子過剰核の構造をよく記述する殻模型相互作用で ある SDPF-MU 相互作用(Y. Utsuno et al., Phys. Rev. C 86, 051301(R) (2012); Phys. Rev. Lett. 114, 032501 (2015))を構築しており、本研究はその研究をベータ崩壊の記述へと発展させたも のである。SDPF-MU 相互作用は、sd-pf 殻をバレンス殻とした殻模型相互作用であり、陽子数 13 から 20 まで、中性子数 20 以上の中性子過剰核を記述することが可能である。これまでの研 究では基底状態近傍の正常パリティ状態が主な対象であり、sd 殻から pf 殻への励起配位を取り 入れない比較的小規模な計算で済んできたため、主に PC クラスターによって計算が行われた。 本研究では、ベータ崩壊の終状態が異常パリティ状態となるため、sd 殻から pf 殻へ核子が1個 励起した状態を計算しなくてはならない。これは、正常パリティ状態の数十倍の計算時間が必要 となる。さらに、本研究では最終的には100核種近くの中性子過剰核の系統性を調べることにな ることに加え、多体波動関数の数も以前の研究よりも多く必要となるため、大型計算機の利用な しには現実的な計算が不可能である。

設模型計算は、共同研究者が開発した KSHELL コードを用いて行った。KSHELL コードは、 OpenMP+MPI ハイブリッド並列計算を行うことが可能であり、BX900 や SGI ICE X を効率良 く利用することが可能である。半減期や遅発中性子放出確率を計算するためには原理的には全て の励起状態を求める必要があるが、ここではガモフテラー強度関数(半減期や遅発中性子放出確 率に必要となるガモフテラー遷移のエネルギー分布関数)をランチョス強度関数法を用いて計算 することによって半減期や遅発中性子放出確率を計算した。それによって実用的には十分な精度 の結果が得られることが確かめられている。

今年度は陽子・中性子ともに偶数である、偶偶核の半減期および遅発中性子放出確率を計算した。偶偶核の基底状態のスピン・パリティは例外なく 0+であることが知られているため、ガモフテラー遷移によって遷移する状態は 1+ に限られる。したがって、終状態のスピン・パリティの不定性がないため、実験値との比較によってガモフテラー遷移の分布が理論的に正しく記述できているかが判別できる。図1に、シリコン(陽子数14)、イオウ(陽子数16)、アルゴン(陽子数18)同位体について半減期の実験値と本研究の計算値を比較した。半減期の実験値が本研

究の大規模殻模型計算によって非 常によく再現されていることがわ かる。遅発中性子放出はかなり中性 子過剰な原子核でのみ観測されて おり、今回計算した範囲では、44S、 <sup>50</sup>Ar の 2 核種で測定されている。 その放出確率は、理論的には励起エ ネルギーが中性子分離エネルギー よりも高い状態へのベータ崩壊の 分岐比として与えられる。したがっ て、ガモフテラー遷移強度関数のエ ネルギー分布に敏感な量であり、理 論に対するより厳しいテストを与 える。44S については、遅発中性子 放出確率の実験値が 18(3)%に対し 計算値が 16%、50Ar については実 験値が 35(10)%に対し計算値が 43%と、両者とも実験値を非常によ く再現することに成功した。



図1 シリコン(Si)、イオウ(S)、アルゴン(Ar)同
位体に対する半減期(縦軸)。横軸は中性子数を
表す。実験値が丸印、本研究の計算値が実線。

原子核物理の観点からは、ガモフテラー強度関数に興味が持たれる。一般に、中性子数が増え ると 10 MeV 以上の高励起領域に巨大ガモフテラー共鳴と呼ばれるピークが発達することが知 られている。本研究の計算でもその様子が確かめられたが、それに加え、励起エネルギーが 5 MeV 以下の低励起領域にも小さなピークが出現することがわかった。このピークはガモフテラー遷移 強度としてはそれほど大きくないが、Q 値が大きくなるために半減期や遅発中性子放出確率に対 する影響は大きい。実験的にはこのピークの存在は確認されていないが、半減期や遅発中性子放 出確率に対する実験値との良い一致から、間接的にこのピークの存在が示されているとも考えら れる。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 学会等発表

- 1) Y. Utsuno, S. Yoshida, N. Shimizu, and T. Otsuka, "Shell model calculations for Gamow-Teller strength function in the neutron-rich sd-pf shell region", 27th ASRC International Workshop "Nuclear Fission and Exotic Nuclei", Tokai (Dec. 1-2, 2015).
- 2) 宇都野穣、吉田聡太、清水則孝、大塚孝治、「軽い中性子過剰核の半減期と遅発中性子放出 確率の計算」、日本原子力学会2016年春の年会、仙台(2016年3月26-28日).

#### (4) 今後の利用予定:

奇核、奇奇核からのベータ崩壊の計算を完了させ、本研究で採用した模型が適用可能な全ての 原子核の半減期と遅発中性子放出確率を計算し、実験値や他の理論模型と比較する。第一禁止遷 移の影響も調べる。また、原子核物理における新しい知見を得るため、例えば陽子・中性子間相 互作用の影響を調べるなど、ガモフテラー強度関数に対する考察を深める。

# 5.10.2 中性子散乱データの 3 次元画像化プログラム「Neudift」の機能拡張 Extension of 3D Visualization Program "Neudift"

社本 真一、伊巻 正+1

ナノスケール構造機能材料科学グループ 先端基礎研究センター

+1 情報システム管理室 システム計算科学センター

#### (1)利用目的:

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次元画像化を実現するこ とを目的とする。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。本ソフトウェアは、多様な散乱データの中から特定領 域の散乱強度を取り出すことで、その値をピクセル値とした画像化を行う。今回の機能拡張では、 連続スキャンデータからの2次元画像の生成アルゴリズムの検証とトモグラフィー作成機能の 実装を行うことで、より実用的なものとする。

#### (2) 利用内容·結果:

これまで、現在、世界最強度のパルス中性子強度を誇る J-PARC の中でも最も強度の強い BL21 の NOVA を用いてテスト実験を行ってきた。これまで、10cm 角程度の試料についてプロトンカ レント 205・280kW の出力時に 4 日で 3×3mm<sup>2</sup>の角度 10 度ごとに非連続で測定したものを画像 化することに成功した。今後、出力が 1MW と 4 倍に増大すること、さらにイベントレコーディ ングを利用した効率約 4 倍の高速スキャン法で、合計 16 倍の高効率化が期待できる。具体的に は 1×1 mm<sup>2</sup>のより細い中性子ビームでの画像化が可能になると思われる。この高解像度化には 強い散乱強度領域で画像化する必要ある。そうすると実際に画像化できる中性子の波長領域は、 パルス中性子散乱の特徴から波長の長い狭い領域となる。波長が長いことから、試料での吸収も 大きくなってしまう。しかし高解像度化にはこれらの領域を利用することが画像化には必要であ るために予想以上に吸収補正が高解像度化には重要であることがわかってきた。このことから、 これまでに試料を均一と仮定した簡単なものではあるが吸収補正をプログラム中で行えるよう にしてきた。

中性子散乱データは、結晶内の面間隔d値での中性子散乱強度からなっている。試料を縦横に 掃引した各 x,y 点での2次元のデータを用いて、各d値での2次元画像を本ソフトウェアにより 作成する。この過程でバックグラウンドを差し引いており、使いやすいソフトウェアになってい る。さらに試料を θ回転させ、各点で2次元画像を撮ることで、3次元トモグラフィーを実現で きる。ここでは散乱波数 Q および散乱強度では倍精度実数を、2次元画像では100×100の画素 を想定している。これを各 θ回転角(100回を想定)で画像化し、フォルダに自動的にまとめて いる。3次元トモグラフィーもこのソフトウェア内で可能となった。これにより100×100×100 の3次元画像化するソフトウェアとなっている。ちなみにこのサイズは J-PARC/MLF 用の専用 ゴニオでスキャンできる体積10×10×10cm<sup>3</sup>に対応させてある。 今回は、上述のイベントレコーディングを利用した連続スキャンデータからの2次元画像の生 成アルゴリズムの検証を行うと共に、トモグラフィー作成機能の実装を行うことで、本ソフト単 体を、よりユーザーフレンドリーな使いやすいものとすることを試みた。

イベントレコーディングを利用した連続スキャンデータからの 2 次元画像の生成アルゴリズ ムの検証には、データの読み込みで、ピクセルマトリックス座標への変換機能を新たに拡張する などしてきたが、図1に示すように、残念ながら試料台のゴニオ軸を+-に動かすとバックラッ シュが生じ、そのためにスキャン時間から測定位置を推定することができなくなり、画像化を実 現できなかった。今後、一方向にのみスキャンすることで、この高速スキャン法を実現できるも のと思われる。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 論文(査読無)

 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, "Neutron diffraction imaging at NOVA (J-PARC), HRPD, RESA, and TNRF (JRR-3)", JAEA-Conf-2015-002, 3.9.3, pp.503-509. (ICANS XXI proceedings), DOI:10.11484/jaea-conf-2015-002

#### (4) 今後の利用予定:

機能拡張したプログラム"Neudift"を機構外に提供することで、プログラムの普及を図りたい。 また無償で提供し多数の外部ユーザが利用することにより、そのフィードバックを通じて、より 良いものへと改良されることが期待される。



図 1 左右に連続スキャンしたデータをスキャン時間のみから位置を求めて画像化したネパール 産アンモナイトノジュールの2次元散乱強度画像。ゴニオ軸の左右のバックラッシュによ り、1cm ほどと大きく位置がずれている。

#### 5.10.3 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 スピン・エネルギー変換材料科学研究グループ

#### (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:

対象物質として着目した LiCuVO4 は、2 マグノン束縛状態がボーズ凝縮した「スピン液晶」 が実現する候補物質として注目されている。本研究では、これまで知見が乏しかった励起ダイナ ミクスを解明するために、磁気励起スペクトルを解析した。前年度までの計算で全体的な特徴を 捉えていたが、システムサイズが小さい(32 サイト)ため、分解能が低いこと、有限サイズ効 果で精度が悪くなること、などの問題点があり、実験との精密な比較には不十分だった。今年度 はシステムサイズを大きく(128 サイト)して解析を進めて、実験との比較にも耐えうる分解能 と精度の高い計算結果を得るに至った。図1は、スペクトル強度のカラープロットである。強度 ピークのエネルギー位置を見ると、磁場平行成分はゼロエネルギーピークを持つのに対して、磁 場垂直成分はマグノン対の束縛エネルギーに相当する有限のエネルギーギャップが開くことが 分かる。このギャップの波数位置は、磁場の増加とともにシフトしていき、飽和磁場では古典的 な螺旋磁気構造のピッチアングルと一致する。これらの特徴は、非弾性中性子散乱実験により検 証可能であり、スピン液晶を探索するための道標として大きな役割を果たすと期待される。

さらに、新たに輸送特性の研究を展開する準備として、低次元量子スピン模型のスピン伝導度 および熱伝導度を解析するための数値計算プログラムを開発した。ベンチマークとして、単純な 一次元量子スピン模型のスピン伝導度および熱伝導度の解析を行い、過去の研究結果を再現する ことを確認した。

また、新たな擬1次元フラストレート量子スピン系として、フラストレートスピン梯子系の磁気的な性質を調べた。この系は、反強磁性的ジグザグスピン鎖2本に対し、反強磁性的な鎖間相互作用を入れた模型に対応する。現在、この候補物質であるBiCu<sub>2</sub>PO<sub>6</sub>において、多数の磁気相

転移が観測されたことにより、この磁場誘起相に関心が集まっている。この多段磁気相転移は、 ジグザグ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ない現象であるため、 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と言える。しかしながら、この機構は未 だ明らかになっていない。

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における磁化過程の理論的解 析を行い、複数の磁気相転移と磁化プラトーを見つけた。このうちの幾つかの相転移は、 BiCu2PO6のパラメータ領域に位置するため、すでに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。さらに、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。また、密度行列繰り込み群法を用いて行った数値的解析を元 にして、この物理が擬スピン変換により理解できることを示した。

この擬スピン変換は、磁化が有限になる磁場領域で、よく機能する。そこで、これまでの研究 の発展として、この擬スピン変換と数値計算を用いて、得られた磁場相の解析を詳細に行った。 特に、1/2 プラトー近傍には、ギャップレスな擬スピンベクトルカイラル相が出現した。この相 においては、スピン流を表す物理量が自発的に対称性を破って秩序化する。すなわち、BiCu2PO6 に磁場を印加した際、出現するギャップレス相では、スピン伝導度や熱伝導度に、低温のピーク が現れると期待できる。今後、この現象を利用して、スピン流や熱流の磁場による制御が可能に なると期待される。



図1 動的密度行列繰り込み群により計算されたスピン液晶での磁気励起スペクトル

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 学術論文

- <u>T. Sugimoto</u>, <u>M. Mori</u>, T. Tohyama, and S. Maekawa, "Lifshitz Transition Induced by Magnetic Field for Frustrated Two-Leg Spin-Ladder System", JPS Conf. Proc. 8, 034005 (2015).
- 2) <u>T. Sugimoto, M. Mori</u>, T. Tohyama, and S. Maekawa, "Quasi-spin correlations in a frustrated quantum spin ladder", Phys. Procedia **75**, 861 (2015).
- 3) <u>H. Onishi</u>, "Magnetic Excitations of Spin Nematic State in Frustrated Ferromagnetic Chain", J. Phys. Soc. Jpn. **84**, 083702 (2015). [JPSJ Papers of Editors' Choice]

- 4) H. Suzuki, K. Zhao, G. Shibata, Y. Takahashi, S. Sakamoto, K. Yoshimatsu, B. J. Chen, H. Kumigashira, F.-H. Chang, H.-J. Lin, D. J. Huang, C. T. Chen, <u>B. Gu</u>, S. Maekawa, Y. J. Uemura, C. Q. Jin, and A. Fujimori, "Photoemission and x-ray absorption studies of the isostructural to Fe-based superconductors diluted magnetic semiconductor Ba<sub>1-x</sub>K<sub>x</sub>(Zn<sub>1-y</sub>Mn<sub>y</sub>)<sub>2</sub>As<sub>2</sub>", Phys. Rev. B **91**, 140401(R) (2015).
- 5) T. Tohyama, K. Tsutsui, <u>M. Mori</u>, S. Sota, and S. Yunoki, "Enhanced Charge Excitations in Electron-Doped Cuprates by Resonant Inelastic X-Ray Scattering", Phys. Rev. B **92**, 014515 (2015).
- 6) <u>T. Sugimoto, M. Mori</u>, T. Tohyama, and S. Maekawa, "Magnetization Plateaux by Reconstructed Quasi-spinons in a Frustrated Two-Leg Spin Ladder under a Magnetic Field", Phys. Rev. B **92**, 125114 (2015).
- 7) H. Suzuki, G. Q. Zhao, K. Zhao, B. J. Chen, M. Horio, K. Koshiishi, J. Xu, M. Kobayashi, M. Minohara, E. Sakai, K. Horiba, H. Kumigashira, <u>B. Gu</u>, S. Maekawa, Y. J. Uemura, C. Q. Jin, and A. Fujimori, "Fermi surfaces and p-d hybridization in the diluted magnetic semiconductor Ba<sub>1-x</sub>K<sub>x</sub>(Zn<sub>1-y</sub>Mn<sub>y</sub>)<sub>2</sub>As<sub>2</sub> studied by soft x-ray angle-resolved photoemission spectroscopy", Phys. Rev. B **92**, 235120 (2015).
- 8) H. J. Zhang, S. Yamamoto, <u>B. Gu</u>, H. Li, M. Maekawa, Y. Fukaya, and A. Kawasuso, "Charge-to-Spin Conversion and Spin Diffusion in Bi/Ag Bilayers Observed by Spin-Polarized Positron Beam", Phys. Rev. Lett. **114**, 166602 (2015).
- Y. Niimi, M. Kimata, Y. Omori, <u>B. Gu</u>, T. Ziman, S. Maekawa, A. Fert, and Y. Otani, "Strong Suppression of the Spin Hall Effect in the Spin Glass State", Phys. Rev. Lett. 115, 196602 (2015).
- <u>Z. Xu, B. Gu, M. Mori</u>, T. Ziman, and S. Maekawa, "What determines the sign of the spin Hall effects in Cu alloys doped with 5d elements?", J. Magn. Magn. Mater. **400**, 184 (2016).

#### プレス発表

11)新見康洋,木俣基,大森康智,顧波,ティモシーザイマン,前川禎通,アルバートフェルト, 大谷義近,「スピン流を用いて磁気のゆらぎを高感度に検出することに成功-スピン流を用い た高感度磁気センサへの道-」(2015年11月6日).

#### 新聞報道

- 12) 「スピン液晶が異方的なスピンダイナミクス提示」(論文[3]の紹介記事)科学新聞(2015 年9月4日付).
- 13) 「原子力機構、「スピン液晶」の特性解明-磁性材料開発に一役」(論文[3]の紹介記事)日刊 工業新聞(2016年1月15日付).

#### (4) 今後の利用予定:

スピン液晶の励起ダイナミクスに関する研究の発展として、これまで調べてきた磁気励起スペ クトルに加えて、スピン液晶の多体スピン相関を直接反映すると考えられるスピン四極子励起ス ペクトルの解析を行う。また新たな展開として、今回開発したスピン伝導度および熱伝導度の数 値計算プログラムを適用し、相互作用パラメータを変えた場合のスピン伝導の挙動を系統的に解 析して、励起ダイナミクスと輸送特性の関係を明らかにする。

# 5.11 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

# 5.11.1 炭素線治療におけるビーム上ガス領域検出手法のシミュレーション Simulation of Gas-region Detection Across a Beam for Carbon Therapy

山口 充孝、長尾 悠人 ビーム技術開発課、照射施設管理課 (平成 28 年 4 月より量子科学技術研究開発機構)

#### (1) 利用目的:

粒子線治療において、ビーム軌道上にガス領域が発生した場合、ブラッグピークがシフトするこ とにより誤照射が発生する可能性がある。ガス領域の発生を照射中に検出することができれば、そ の影響を軽減する対策を講じることが可能となる。今回、炭素線治療における二次電子制動輻射の 計測によるガス領域検出の実現可能性をモンテカルロシミュレーションにより評価した。

#### (2) 利用内容·結果:

シミュレーションはモンテカルロ計算コード PHITS を用いて実施した。図1に幾何学的配置 の模式図を示す。290MeV/u の入射エネルギーを持つ炭素12ビームを、中心に円柱形の空気空 洞(半径2.5mm、長さ10mm)を持つ円柱形アクリルターゲット(半径50mm、長さ100mm) に、ビーム軸がターゲット及び空気空洞の回転中心軸と一致するよう入射した。放出される光子



図1 (左)シミュレーションにおける幾何学的配置。ビーム軸を含む平面により2分割 し、片方の領域を示した。(右)幾何学配置のビーム軸を含む平面における断面図。

を測定するために、マルチスリ ット型コリメータ(鉛製)と検 出器(テルル化カドミウム (CdTe)製)からなるガンマ カメラを、アクリルターゲット を囲むように配置した。検出器 はビーム軸方向の長さが2 mm の素子を39個、ビーム軸

方向に並べたものから成る。コ リメータは、幅1mm、厚さ25

mmのスリットを、ビーム軸方

向に 2 mm ピッチで 39 個持

ち、各スリット中心のビーム軸

方向の位置は、対応する検出素

子の重心位置と一致させた。ビ

ーム軸における空間分解能は

なお、計算時間短縮のため、ビ

ーム軸に対し回転対称となる ような幾何学的配置を採用し

半値全幅で 3.3 mm となる。



図2 縦軸は63-68 keVのエネルギー付与イベントの収量。横軸は空洞の重心を原点とした場合のビーム軸 方向のスリット位置。黒丸及び赤丸はそれぞれ、空 洞がある場合と無い場合の結果。誤差棒はポアソン 分布における不確かさ(±σ)。2本の緑の線は空 洞の両端を表す。

た。炭素イオンは 9.6×107 個入射し、検出素子におけるエネルギー付与を記録した。また、空 洞が無い場合の幾何学的配置についても、同様のシミュレーションを実施した。

63-68 keV のエネルギー付与イベントの収量を図2にまとめた。空気空洞ありとなしで結果を 比較すると、空洞ありの結果では、空洞の存在する範囲において、収量の減少が観測された。こ の結果は、マルチスリット型ガンマカメラを用いて低エネルギー光子測定による空気空洞検出が 実現可能であることを示唆している。以上の結果を、2016 年の応用物理学会春季講演会におい て発表した<sup>1)</sup>。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 山口充孝、長尾悠人、菅井裕之、酒井真理、河地有木、佐藤隆博、神谷富裕、藤巻秀、荒川 和夫、鳴海一雅、「低エネルギー光子測定による治療用炭素ビーム軌道上の空洞検出のシミ ュレーションによる評価」、第63回応用物理学会春季講演会(2016年3月)ロ頭発表、講 演番号 22a-W833-10(講演予稿集 p. 02-116).

#### (4) 今後の利用予定:

本手法の陽子線治療への応用の可能性を、モンテカルロシミュレーションを通して調査する予 定である。

#### 5.11.2 超小型サイクロトロンの放射化量に関する計算

#### Calculation for Amount of Radioactivity in Compact Cyclotron

佐藤 隆博、寺川 貴樹\*1 放射線高度利用施設部 ビーム技術開発課 (平成28年4月より量子科学技術研究開発機構) \*1 東北大学 大学院 工学研究科 量子エネルギー工学専攻

#### (1) 利用目的:

PIXE (Particle Induced X-ray Emission) 分析のために、3.0 MeV の H イオンビームを生成 する加速器として 10 年間以上運用されてきた超小型サイクロトロンの廃止が予定されている。 平成 24 年度の法令改正により、核子当たりの最大加速エネルギーが 2.5 MeV 以上のイオン加速 器は、放射線発生装置による放射化物の管理対象となった。放射線発生装置から取り外された放 射化物は、廃棄する場合は保管廃棄施設に保管後、許可廃棄業者に廃棄を委託される。また、他 の放射線発生装置の使用施設で再使用する場合でも、その放射化物は放射化物保管設備に保管後 に譲渡される。いずれの場合でも、その放射化物に含まれる放射性核種および数量を評価する必 要がある。そこで、放射化物の量を検討するために、BX900 及び PHITS (Particle and Heavy Ion Transport code System) Ver. 2.80 [1]を用いて計算を行った。

#### (2)利用内容·結果:

図1に廃止が予定されている超小型サイクロトロンの外観の写真を示す。また、その仕様を表 1に示す。



図1 PIXE 分析用超小型サイクロトロンの外観

 T. Sato et al., Particle and Heavy Ion Transport Code System PHITS, Version 2.52, J. Nucl. Sci. Technol. 50:9, 913-923 (2013). H イオンビームは電磁石ポール間 の加速領域で中心から螺旋状の軌道 を描き、その過程で主に純銅製のデフ レクター電極等に衝突することで、放 射化物が生成されると考えられる。そ こで、効率的な計算を行うために、コ ンクリート上に設置された 2 つの軟 鉄製ポール間に純銅製のターゲット を設置したシンプルな計算体系を設 定し、3 MeV の H イオンビームは全 て、このターゲットに衝突する条件と した。また、純銅、軟鉄、コンクリー トの成分はそれぞれ表 2 のように設 定した。

ピ−ム	加速粒子		Hイオン	Heイオン
	エネルギー		3.0 MeV	3.0 MeV
	出力電流		10 µ A	5 µ A
形状	ポール直径		φ0.39	
	電磁石幅×厚さ		0.9 × 0.65 m	
	電磁石重量		2 ton	
	共振器長さ		1.5 m	
	ポール半径		195 mm	
	セクター数		4	
	セクター角	山	32°	
電磁石		谷	58°	
	ポールギャップ・	山	22 mm	
		谷	52 mm	
	平均磁場		1.7 Tesla	
	ビーム取出し半径		147 mm	
高周波	ディー		2 -ディー	
	角度		52°	
	周波数		51.7 MHz	
電力仕様	電磁コイル		12 kVA	
	FRシステム		5 kVA	
	その他		7 kVA	
	計		24 kVA	

#### 表1 超小型サイクロトロンの仕様

表2 純銅、軟鉄、コンクリートの成分

材料	成分 [重量%]	密度
純銅	Cu: 100.0	8.94 g/cm <sup>3</sup>
軟鉄	C: 0.02, Si: 0.03, Mn: 0.30, P: 0.03, S: 0.03, Cu: 0.25, Ni: 0.15, Cr: 0.15, 他は Fe	$7.87 \text{ g/cm}^3$
コンクリート	H: 2.2100, C: 0.2484, O: 57.4930, Na: 1.5208, Mg: 0.1266, Al: 1.9953, SI: 30.4627, K: 1.0045, Ca: 4.2951, Fe: 0.6435	$2.30 \mathrm{~g/cm^3}$

PHITS の計算上のカットオフエネルギー(emin)と核データ利用の上限エネルギー(dmax) は、PHITS に同梱されている「recommendation/NuclearReaction/NuclearReaction.inp」に倣 い、表 3のように設定した。

表 3 emin と dmax の設定値 [MeV]

emin	中性子	$1.0 \times 10^{-10}$
	電子、陽電子	0.1
	光子	$1.0 \times 10^{-3}$
dmax	中性子	20.0
	電子、陽子、光子	$1.0 \times 10^{3}$

エネルギー3.0 MeV、ビーム径 2 mm の H イオンビーム 1.0653 × 10<sup>10</sup> 個を、厚さ 1 mm の ターゲットに照射する条件で計算し、生成された放射性同位体を表 4 に示す。

構造材名	生成された放射性同位体 [× (1 ± 1.33 × 10 <sup>-4</sup> ) source <sup>-1</sup> ]	
ターゲット(純銅)	Cu-64: $1.88 \times 10^{-10}$ , Zn-65: $8.17 \times 10^{-7}$	
ポール(軟鉄)	P-32: $1.88 \times 10^{-10}$ , Cr-51: $1.88 \times 10^{-10}$ , Mn-56: $1.41 \times 10^{-8}$ , Ni-59: $2.63 \times 10^{-9}$ , Ni-63: $1.88 \times 10^{-10}$ , Ni-65: $9.37 \times 10^{-11}$ , Cu-64: $8.54 \times 10^{-9}$ , Cu-66: $2.35 \times 10^{-9}$	
コンクリート	Na-24: $3.56 \times 10^{-9}$ , Al-28: $1.79 \times 10^{-9}$ , Si-31: $7.51 \times 10^{-10}$ , K-42: $2.82 \times 10^{-10}$ , Ca-41: $5.91 \times 10^{-9}$ , Ca-45: $9.39 \times 10^{-11}$ , Fe-55: $2.82 \times 10^{-10}$	

表 4 PHITS による計算で生成された放射性同位体

#### (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:

3.0 MeVのHイオンビームが純銅電極に照射されることによって、僅かな量ではあるが、超 小型サイクロトロンの主要な構造材中に様々な放射性同位体が生成されることがわかった。今 後、この超小型サイクロトロンの運転ログなどを参照することによって実稼動時間を割り出すと ともに、ビーム引き出しまでのプロファイルなどを考慮し、実際の放射化物量を計算する。さら に、BF3計数管やNE213中性子スペクトロメータによって実測された中性子量との比較を行う。 また、超小型サイクロトロンの放射化物対象と考えられるデフレクター電極とマグネティックチ ャンネルの装置は、一時的に他の放射線発生装置を有する施設に一時的に譲渡し、保管されるこ とが予定されており、その手続き上に必要な生成放射性核種の種類と数量を最終的に評価するた めに本成果を活用する。

# 5.12 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

#### 5.12.1 磁区構造形成シミュレーションプログラム

Simulation Program for Magnetic Domain Structure Formation

横田 光史 多重自由度相関研究グループ

#### (1) 利用目的:

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 ら盛んに研究されてきた。磁性体に厚みがある3次元的な場合は、実験的に内部の磁化分布を調 べることが困難なこともあり、実際の磁区構造はほとんど調べられていない。それらを補うため にも、シミュレーションを用いた研究の重要性が大きい。また、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。この影響を交換相互作用にランダムネスがある系 として取り入れた3次元系では、計算量が膨大になるために、以前に作成したプログラム (MADONA)の並列化を行い、大幅な計算時間の短縮を達成した。

さらに、局所磁化を表すスピン変数のベクトル性を取り入れたハイゼンベルグ模型を用いたラ ンダウ=リフシッツ方程式を用いたシミュレーションを行うことで、微視的磁化過程を詳細に調 べることができる。そのためのプログラムの作成を行っている。

#### (2) 利用内容•結果:

磁性体における磁区構造形成については、薄膜に対して、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 かかるため、並列化することによって、計算時間が大幅に短縮できた。

磁性体に厚みがある3次元的な場合については、xy方向周期境界条件、z方向自由境界条件の 系において、表面と内部の磁区構造を調べた。厚みおよびランダムネスによる磁区パターンの変 化などをシミュレーションによって求めた。図1にランダムネスがない場合の厚みによる磁区構 造の変化を示す。厚みを増していくと、パターンが大きくなることがわかる。

図2に交換相互作用のランダムネスによるパターンの変化を示す。系の厚みは33である。ラ ンダムネスが大きくなると、内部と表面でパターンに相違が出てくることが見て取れる。

また、ハイゼンベルグ模型を用いた2次元磁区構造の例を図3に示す。枝分かれを伴うストラ イプ的なパターンが見られる。



図1 磁区構造形成における厚みの影響(左から厚み3,9,33)





図 3 ハイゼンベルグ模型を用いた 2 次元磁区構造の例

(厚みは 33、δはランダムネスの大きさ )

図 2 磁区構造形成におけるランダムネスの影響

- (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
- 1) 横田光史、「薄膜における磁区パターン形成に対する厚みの影響」、日本物理学会 2015 年秋 季大会.
- 2) 横田光史、「薄膜における磁区パターン形成に対する厚みの影響 II」、日本物理学会第71回 年次大会.
- (4) 今後の利用予定:

より厚みのある系において出現が期待される、パターンの表面に向かっての枝分かれ現象など を調べていきたい。

また、微視的磁化過程を詳細に調べるためのハイゼンベルグ模型を用いたランダウ=リフシッ ツ方程式を用いたシミュレーションを3次元系に拡張し、プログラムを並列化するなどして、大 型計算機システムの利用を継続していきたい。

# 5.13 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 積算線量計を用いた樹木内放射能簡易測定技術の開発 Development of a Simple Technique to Measure Radioactivity in a Tree using Integrating Dosimeters

栗田 圭輔植物 RI イメージング研究グループ(平成 28 年 4 月より量子科学技術研究開発機構)

#### (1) 利用目的:

福島第一原子力発電所の事故により多量の放射性物質が放出され、広範囲の土地が汚染され た。汚染された地域のうち森林が占める割合は非常に高いが、除染が困難であることや、人口が 少ないことから、住宅近傍の森林を除き除染は行われていない。森林は平地よりも多くの放射性 物質を沈着しており、また沈着した放射性物質を接続する河川などへと流出させる可能性がある ことから、森林における放射性物質の移行や循環を把握し、予測することは非常に重要である。 しかしながら、従来の手法では測定に多くの労力が必要であることや侵襲的であることから、広 範囲の長期観測には不向きであった。このため新たな測定技術の開発が望まれており、我々は市 販の積算線量計を用いた簡易測定技術を開発している。

積算線量計の計測結果から樹体内の放射能を見積もるには、樹体内における放射線の散乱や減 衰を把握しておくことが必要である。実際に樹木を測定する際、放射線が樹体内で散乱し、エネ ルギーを落とすことで、検出器がカウントする低エネルギー放射線成分が増え、樹木の無い場合 に比べ計測値が上昇することが予測される。そこで、モンテカルロシミュレーションにより、放 射線の散乱や減衰などを考慮に入れた計算を行い、線量率への影響を確認する。

#### (2) 利用内容·結果:

積算線量計は千代田テクノル製の D-シャトルを用いる。この線量計は、内部にある Si 半導体 検出器に対し 60 keV 以上のエネルギーを付与した放射線の数をカウントする。さらに、あらか じめ測定された校正曲線を用いて、計数率(count/h)を線量率(µSv/h)へと変換し、デジタル 表示する。今回は、線量計の周囲物質による放射線の散乱・吸収が、線量計の示す線量率へ及ぼ す影響を、PHITS コードを用いたモンテカルロシミュレーションによって評価した。

シミュレーションは、大型計算機 BX900 を用いて行った。原点から 662 keV の光子を放射状 に発生させ、これを <sup>137</sup>Cs 点線源とし、線源から 10 cm 離れた箇所に Si の検出器を設置した。 検出器の大きさは 3 mm×2.5 mm×0.5 mm とし、実際に用いる積算線量計の検出器と近い構造 にした。線源と検出器との間には、空気もしくはスギの生木を設置し、それぞれの場合において、 検出器に入射した光子が検出器に付与したエネルギーの分布をシミュレーションした。シミュレ ーション結果から、検出器に対し 60 keV 以上のエネルギーを付与した放射線の計数率(count/h) を求め、D-シャトルの校正曲線により線量率(µSv/h) へと変換した。

線源と検出器との間に木を配置した場合と空気で満たした場合との線量率を比較したところ、 木を配置した際の線量率に比べ、空気で満たした際の線量率は77%程度であった。また、検出 器に付与したエネルギーの分布において、木を配置した場合は低エネルギー領域のカウント数が 増加していた。以上のことから、光子が木により散乱された影響により、低エネルギー領域のカ ウント数が増え、線量率が増加することがわかった。

今後は点線源を用いたシミュレーションと実験との比較を行い、実験結果をシミュレーション で模擬できるようにする。さらに樹木内で線源が分布を持つ場合や、検出器の最適な配置、計測 時間などを、シミュレーションをベースに調査していく。

#### (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:

樹木に入射する光子のエネルギー分布を PHITS シミュレーションにより把握する。またこれ まで、点線源を樹木の中に設置しシミュレーションを行っていたが、線源が樹木の中に一様に拡 がっている場合や、分布を持つ場合についてもシミュレーションを行い、検出器の応答の変化を 調査する予定である。

### 5.13.2 大型生体高分子の構造、ダイナミクス解析のためのシミュレーション技術の開発 とその実行

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

河野 秀俊、池部 仁善分子シミュレーション研究グループ(平成 28 年 4 月より量子科学技術研究開発機構)

#### (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。そこで、シミュレーション計算によって、化学 修飾の有無によってテールの構造分布がどのよう に変わるか調べ、核内での DNA 構造ダイナミクス を探ることが本研究の目的である。



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。

#### (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 H3 の N 末端テール部分の構造分布が翻 訳後化学修飾のアセチル化によってどう変わるかを調べた (図 2)。結果、アセチル化を入れる につて、DNA がより大きくヒストンコアから剥がれること、テール部分がコンパクトな構造に なること、2 次構造含有率が上がることなどが分かった。また、様々な解析から、化学修飾のコ ンテキスト、つまり、化学修飾が入る位置に依存して DNA の構造分布に違いが生じることが示 唆された。これらの結果は、化学修飾の量と位置によって、遺伝子発現が絶妙に制御されている ことを示唆している。



図 2 アセチル化あり、なしでの DNA の空間占有率のちがい(左)。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)。さらに、アセチル化を導入(右)すると、DNA はより大きく剥がれる。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 招待講演

- 1) Ikebe J, Li Z, Sakuraba S, Ishida H, Kono H. Role of histone variant and histone tails within the nucleosome and the impact of H3 tail acetylation studied using enhanced sampling simulation. 4th International Symposium of the Mathematics on Chromatin Live Dynamics Hiroshima(Japan)2015/12.
- 2) Kono H. Impact on nucleosome dynamics via histone variants and post-translational modifications. スパコン「京」がひらく科学と社会; Supercomputational Life Science 2015 (SCLS 2015); HPCI 戦略プログラム分野 1 成果報告会; 東京 2015/10.
- Kono H, Ikebe J, Sakuraba S, Ishida H. Dynamics of nucleosomes and impact of acetylation. International Symposium on Chromatin Structure, Dynamics, and Function; Awaji(Japan)2015/08.

#### 論文

- 4) Ikebe J, Sakuraba, S. and Kono, H. H3 histone tail conformation within the nucleosome and the impact of K14 acetylation studied using enhanced sampling simulation PLoS Comp. Biol. 2016;12(3):e1004788. DOI: 10.1371/journal.pcbi.1004788.
- 5) Ikebe J, Umezawa K, Higo J. Enhanced sampling simulations to construct free-energy landscape of protein-partner substrate interaction. Biophysical Reviews. 2015/12:1-18. DOI: 10.1007/s12551-015-0189-z.
- 6) Kono H, Shirayama K, Arimura Y, Tachiwana H, Kurumizaka H. Two Arginine Residues Suppress the Flexibility of Nucleosomal DNA in the Canonical Nucleosome Core. PLoS ONE. 2015;10(3):e0120635. DOI: 10.1371/journal.pone.0120635.

#### 受賞

7) 池部、第2回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会ベストポスター賞

#### 外部発表

- Kono H, Ikebe J, Sakuraba S, Ishida H. Impact of histone variant and post-translational modification on nucleosome. Biophysical Society 60th Annual Meeting Los Angeles (U. S. A.) 2016/02.
- 池部仁善. 天然変性蛋白質の構造探索に適したシミュレーション手法 Adaptive Lambda Square Dynamics(ALSD) 法の基礎と応用. 第4回天然変性蛋白質計算科学セミナー; 御 殿場(日本) 2016/01.
- 10) Ikebe J, Sakuraba S, Kono H. Conformational sampling of an acetylated histone tail with Adaptive Lambda Square Dynamics simulation. スパコン「京」がひらく科学と社会; Supercomputational Life Science 2015 (SCLS 2015); HPCI 戦略プログラム分野1 成果報告会; 東京 2015/10.
- 11) Ikebe J, Sakuraba S, Kono H. Conformational sampling of an acetylated histone tail with Adaptive Lambda Square Dynamics simulation. 第2回「京」を中核とする HPCI システム利用研究課題成果報告会; 東京 2015/10.
- 12) Ikebe J, Sakuraba S, Kono H. How does an acetylation affect the conformation of H3 histone tail? 第 53 回日本生物物理学会年会; 金沢(日本) 2015/09.
- 13) Tachiwana H, Arimura Y, Matsumoto R, Takizawa Y, Hori T, Matsumoto A, et al. Analyses of Structure and Dynamics with Model Chromatin. International Symposium on Chromatin Structure, Dynamics, and Function; Awaji (Japan) 2015/08.
- 14) Ikebe J, Sakuraba S, Kono H. International Symposium on Chromatin Structure, Dynamics, and Function. International Symposium on Chromatin Structure, Dynamics, and Function; Awaji (Japan) 2015/08.

#### (4) 今後の利用予定:

今後は、引き続き、ALSD 法を用いてアセチル化される場所やアセチル化の数がもたらす影響 を調べ、アセチル化の位置依存性及び数依存性を明らかにする。最終的には、これらの変化がヌ クレオソームの凝集した構造体(クロマチン構造)に与える影響を調べることで、核内 DNA 動 態と遺伝子発現制御や細胞分化の仕組みを明らかにしていく予定である。

#### 5.13.3 放射線影響に対処する大型生体高分子の機能発現メカニズム解析

Analysis of Functional Expression Mechanism of Large Bio-molecules which Deal with Radiation Effects

> 石田 恒、松本 淳 分子シミュレーション研究グループ (平成 28 年 4 月より量子科学技術研究開発機構)

#### (1) 利用目的:

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

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 MutS、DNA ポリメラーゼη、および DNA の転写、組み換え、複製、損傷に関わるヌクレオソーム(図 1、2)を対象に、放射線影響に対 処する大型生体高分子の機能発現メカニズムを解析する。



- 図1 放射線影響下において、ヌクレオ ソーム、DNA ポリメラーゼη、 MutS は DNA の複製、修復、転 写に中心的な働きをする。 MutS は損傷 DNA を認識して修 復誘導反応を行う。修復できなか った損傷については、DNA ポリ メラーゼηが DNA 複製修復を担 う。
- 図 2 損傷 DNA を認識して損傷 DNA 修復反応を誘導するタンパク質 MutS2 量体 (損傷部位を認識する MutS はリボン モデル、もう一つの ATP が結合する MutS はチューブモデルで表示)と損傷 DNA (黒)との複合体。 MutS は6つのドメイン (DNA 認識部 位(赤)、コネクション部位(緑)、コア 部位(黄)、クランプ部位(青)、ATP 結合部位(紫)、Helix-turn-Helix 部位 (シアン)をもつ。

#### (2) 利用内容·結果:

 昨年度、JAEA プログラムとして登録された SCUBA を BX900 から ICE-X に移植し、MPI 通信の最適化、OpenMP によるスレッド並列化などを進めることで、計算速度を 20%程度向上 できた。(BX900 と比べて 2、3 倍の性能向上)を達成した。SCUBA は、スーパーコンピュー タ BX900、FX1、ICE X(原子力機構)、FX10(東大)、京(理研)において高い計算性能を達 成した(並列化効率:ストロングスケール 50%以上(512 プロセッサ使用時)、ウイークスケー ル 99%以上(32,768 プロセッサ使用時))。

これにより、約1,000万原子系からなる大規模系でも自由エネルギーなどの物理量を精度良く 求めることが可能となり、実験だけでは得られない分子レベルの情報、通常のシミュレーション だけでは得られない大きな時間・空間スケールの情報を同時に得られるようになった。



図3 ATP 結合なし(左)、ATP 結合あり(右)における MutS の運動状態。ATP 結合なしでは、 MutS には多くの運動ドメイン(色分けされている部分。矢印はそれぞれの運動ドメイン の相対運動の回転軸を示す。)があるのに対し、ATP 結合ありでは、ATP 結合部位での構 造安定化がおこり、ATP 結合部位まわりの運動ドメイン(緑色)が大きくなっている。

2) MutSには、損傷 DNA(または正常 DNA)が結合する DNA 結合部位と、DNA 修復反応 を制御する ATP 結合部位がある(図 2)。実験的には、DNA 結合部位に損傷 DNA、正常 DNA が結合する 2 パターンと、ATP 結合部位に ATP が結合、ATP が非結合の 2 パターンの組み合わ せで、それぞれ異なる生体反応状態を示す。そこで、これらの 4 つの状態の分子動力学シミュレ ーションを実施した。構造揺らぎの大きさ、方向を解析したところ、ATP が結合すると ATP 結 合部位近傍の構造の柔らかさが減少する一方(図 3)、DNA の運動が大きくなることがわかった。 また、損傷(正常)DNA が結合すると結合自由エネルギーが有利(不利)になることがわかった。 また、損傷(正常)DNA が結合すると結合自由エネルギーが有利(不利)になることがわかった。 また、損傷を見つけると安定な結合状態となり ATP の結合を待つことが予測でき た。そして、損傷 DNA を認識した MutS に ATP が結合すると、MutS の運動が変化すること がわかった。この運動変化が、次の DNA 修復ステップを引き起こすと考えられる。更に、MutS の運動変化を引き起こす要因として、損傷 DNA や ATP などの外部要因だけではなく、外部要 因に対応して構造を変化させる MutS の内部要因を特定することができた。以上、実験的には観 測が困難な運動状態を分子動力学シミュレーションにより原子レベルで理解することができた。 本結果は、損傷 DNA 修復反応ステップを原子レベルで理解できることを示した。

3) DNA ポリメラーゼ η (図 1) は、紫外線損傷などの 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。昨年度は、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 が抗癌剤を含む DNA 上をらせん状に移 動する過程を観測することに成功した。現在、移動過程において DNA ポリメラーゼ η 機能発現 に重要な部位を特定するための解析をしている。色素性乾皮症の要因や抗癌剤作用メカニズムを 分子論的に解明できると期待される。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 論文

1) <u>Ishida, H. and Matsumoto, A.</u>, Mechanism for verification of mismatched and homoduplex DNAs by nucleotides-bound MutS analyzed by molecular dynamics simulations ,PROTEINS: Structure, Function and Bioinformatics 84, 1287-1303 (2016).

#### 国内学会

- 2) **Ishida, H**., Analysis of tRNA translocation through the ribosome by a hybrid-simulation using an MD simulation and electron microscopy density maps, 第 53 回日本生物物理学 会年会(平成 27 年 9 月、金沢)招待講演.
- 3) <u>Matsumoto, A.</u>, 2D hybrid analysis: An approach to build 3D atomic model from 2D EM image, 第 53 回日本生物物理学会年会(平成 27 年 9 月、金沢)招待講演.
- 4) <u>松本 淳</u>, 高木 淳一,岩崎 憲治: 2D ハイブリッド法による 2D 電顕画像からの 3D 原子モデ ル構築, 日本顕微鏡学会第 71 回学術講演会, (平成 27 年 5 月、京都).

#### (4) 今後の利用予定:

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

#### 5.13.4 スポーク空洞製作のための設計計算

Design Calculation for Fabrication of Spoke Cavity

沢村 勝

ガンマ線核種分析研究グループ

(平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

(1)利用目的:

我々はエネルギー回収型リニアック(ERL)とレーザーを組み合わせたレーザーコンプトン散 乱(LCS) X/γ線光源の開発を行っている。LSC-γ線を用いた核共鳴蛍光を使えば核燃料を非 破壊で検査することが可能で、核保障措置および核セキュリティーに応用することができる。 LCS-X線はナノ構造の解析や、創薬、医療診断・治療への応用が期待される。

LCS 光源のために図1(左)のようなスポーク空洞の開発を行っている。スポーク空洞は空洞 間隔を短くできることや、マイクロフォニックスによる空洞周波数の変動も小さいこと、セル間 のカップリングが強く電界分布調整が容易なことなどLCS用のERL加速器として用いる場合に 利点が大きい。

空洞形状の最適化を行い、製作のための検討を行っている。スポーク空洞は図1(右)のよう にいくつかの部品で構成されている。このうち、ハープスポークとエンドプレートは金型による プレス成型で製作することになっている。プレス成型での加工工程や組み上げた時の空洞の強度 計算などを大型計算機の3次元構造解析コード「ABAQUS」を用いて行った。



図1 スポーク空洞の概観(左)と分解図(右)

#### (2)利用内容·結果:

1) 強度計算

スポーク空洞内部を真空に引くと、外力が加わり空洞が変形する。このとき塑性変形が起きる ほどの応力がかかると、空洞に永久ひずみが生じ、真空引きの度に変形を蓄積していくことにな る。図2(左)に空洞外面に1気圧の外力が加わったときの応力分布を示す。灰色の部分は応力 が大きく、塑性変形を生じる部分である。スポークの付根部分とエンドプレート付近の応力が大 きくなっている。

サポートとしてエンドプレートには、図2(右)のような円周リブと放射状リブを、スポークの根元部分には、タンクに沿ったサポート板を取り付ける。形状パラメータを変えた計算を行い、 最適な形状を求めた。サポートを取り付けた後のスポーク空洞の応力分布を図2(中)に示す。 ほぼ全域で塑性変形を起こさない応力分布になっている。



- 図 2 スポーク空洞の応力分布 (左) サポートなし (中) サポートあり (右) エンド プレートの円周リブと放射状リブ
- 2) プレス成型シミュレーション

ハーフスポークの形状は複雑であるため、1組の金型の1工程で成型加工を行うとひずみが大 きくなりすぎて割れの恐れがある。そこで図3のように成型加工を3工程に分けて行う。

- ダイ入れ子が上がった状態で、インナーパンチのみが降下し、ダイ入れ子とインナーパン チとでシートを成型し、縦方向に曲げていく。
- ② シートを挟んだ状態で、ダイ入れ子とインナーパンチが一緒に降下し、ダイでシートを成型し、周方向に曲げていく。
- ③ アウターパンチが降下し、ハーフスポークの端部を成型していく。



図3 ハーフスポークのプレス成型のシミュレーションで用いた各部品の動き

この工程により成型されるシートのひずみ分布を計算し、ひずみの大きさや場所を求めた。シ ートの板厚を変えた時のひずみ分布を図 4 に示す。シートが厚くなるほど最大ひずみ量が減少 し、この加工による割れ等は回避できると考えられる。



図 4 シート厚を変えた時のひずみ分布の変化 (左) 2.0mm (中) 2.2mm (右) 2.4mm

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 論文 国内・国際学会プロシーディングス

- 1) R. Hajima, M. Sawamura, T. Kubo, T. Saeki, E. Cenni, Y. Iwashita, H. Tongu," DEVELOPMENT OF SUPERCONDUCTING SPOKE CAVITIES FOR LASER COMPTON SCATTERED X-RAY SOURCES", Proceedings of IPAC2015, Richmond, VA, USA, pp.2902-2904 (2015).
- 2) 沢村 勝, 羽島良一, 西森信行, 永井良治, 岩下芳久, 頓宮拓, 久保毅幸, 佐伯学行, "ERL 超伝導スポーク空洞製作の現状", Proceedings of the 12th Annual Meeting of Particle Accelerator Society of Japan, August 5-7, 2015, Tsuruga, Japan, pp.583-586 (2015).
- 3) M. Sawamura, R. Hajima, T. Kubo, T. Saeki, Y. Iwashita, H. Tongu, H. Hokonohara, E. Cenni, "DESIGN AND DEVELOPMENT OF SUPERCONDUCTING SPOKE CAVITY FOR COMPACT PHOTON SOURCE", Proceedings of SRF2015, Whistler, BC, Canada, pp.1196-1199 (2015).

#### (4) 今後の利用予定:

ハーフスポークのプレス加工を行い、実際のプレス形状を計算と比較するとともに、金型形状 の修正が必要な場合は、修正を行った金型形状についてプレス成型シミュレーションの計算を大 型計算機を利用して行う予定である。

#### 5.13.5 フェムト秒レーザーパルス列により生じる回転励起準位の解析

Analysis on Rotational Excited States Induced by Femtosecond Laser Pulse Train

吉田 芙美子

レーザー量子制御研究グループ

(平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

#### (1)利用目的:

放射性廃棄物内に含まれる Cs 放射性同位元素(<sup>135</sup>Cs 等)を、安定核種である <sup>133</sup>Cs から高 純度・高効率で分離回収するために、レーザー技術を利用した同位体分離の研究が進められてい る。同位体選択的回転準位の励起には、分子の回転周期に合わせたパルス列を照射し、周期に合 った特定の同位体のみを選択励起させる。この原理を実証するため、本グループでは軽元素を使 って実証実験を進めてきた。本研究では、8 連のパルス列を窒素分子に照射して分子を配向させ、 回転励起された分子集団からの分光信号を取得した。 8 連パルスで分子を照射すると回転コヒ ーレンス状態が生じるが、この回転コヒーレンスの時間発展が信号強度に影響することがわか り、計算シミュレーションによる解析が必要となった。時間発展の計算には、経路積分による反 応経路の追跡が必須である。経路はパルス数が増えるに従い指数関数的に増加するため、計算時 間の短縮を計るために大型計算機が必要となった。

#### (2) 利用内容·結果:

回転準位分布の測定は、振動励起を利用した時間分解のラマン散乱分光 (Coherent Anti Stokes Raman Scattering: CARS) と偏光分光法 (Raman Induced Kerr Effect Spectroscopy: RIKES) を利用している。図1に、実験のパルス照射のタイミングと対応する分子のエネルギー準位を示す。

パルス間隔を<sup>14,14</sup>N<sub>2</sub>分子の回転周期(8,38 ps)に合わせた 8 連のフェムト秒パルス(800 nm, 50 fs)を照射して分子の回転励起を生じさせた後、CARS および RIKES によって回転準位の 分布を測定する。この時得られる信号強度は高次の分極に比例し、信号強度を解析するには経 路の追跡が必要となる。1 回のパルス電場で 2 回の反応が起こると仮定すると、8 連パルス後に は 3<sup>1</sup>6 個の経路に分岐する。この経路積分を計算するために、図 2 に示す多分木構造によるモ デル化を行った。このモデルを基本に開発したアルゴリズムでは、経路の場合分けが不要となり、 さらに、多分木構造の深さ方向をパラメータとすることで任意の次数に拡張することができるよ うになった。また、本来すべての経路は並列に進行するため、大型計算機のもつ並列化の強みを 最大限に生かすことができた。

図3に RIKES の計算結果を実験結果とともに示す。パルス強度や偏光方向をパラメータとし、 実験をほぼ再現する結果が得られた。この解析により、分子内部の回転励起状態が得られ、8連 パルス列により、回転準位が高励起側へ移動していることが明らかとなった。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

#### (4) 今後の利用予定:

今回開発したプログラムを応用・改良して、CARS 信号の解析や予測シミュレーションを行うため、今後も大型計算機を利用する予定である。



図1 パルス列照射のタイミングと分子内部で生じるコヒーレント状態の変化。1回のパルス電場 との相互作用で、分子の回転状態は、3つの状態(ΔJ=0, +2, -2)に分岐する。終状 態に至るまでに、3<sup>16</sup>個の経路が存在する。



図2 8連パルス列で生じる分子内部の時間発展。クラス(構造体)で状態|J, M>を表現、多分 木構造を作って電場との相互作用をモデル化する。



図3 RIKES の実験結果と計算シミュレーションの比較。シミュレーションにより、8 連パルス 照射後の分子内部の回転状態の推移と分布が明らかとなった。 5.13.6 レーザーによる固体へのダメージ及び加工過程解明のための第一原理シミュレ ーション

First-principle Calculation for the Laser Damage and Laser Processing

乙部 智仁、矢花 一浩

高強度場物質制御研究グループ

(平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

#### (1) 利用目的:

第一原理電子ダイナミクスシミュレーションと電磁場シミュレーションによる固体表面レー ザー励起過程と加工過程の解析を行い、レーザー特性と加工効率の関連を明らかにする。また当 該手法と分子動力学計算を融合させるための基礎データの蓄積を行う。

#### (2) 利用内容·結果:

図1にSi表面の電子励起確率のレーザー波長依存性の結果を示した。この結果から電子励起 の深さ方向の特徴が波長により大きく変わることを明らかにした。この結果からフェムト秒超短 パルスレーザーによる加工閾値及び加工深さが大きく変わることが分かった。また加工深さは表 面プラズマ層の厚みと波長の差から生まれることが明らかとなった。



図1 Siのレーザーによる電子励起確率とエネルギー吸収量の表面からの深さ依存性。 レーザーの波長により特性が大きく変わっている。

図2には53 nmの薄膜ダイアモンドに強い中赤外パルスレーザーを照射し、その途中の光学 応答特性を、中心振動数 6eV のアト秒パルスで計測する過渡吸収実験を数値的に行った結果で ある。得られた結果は光学特性変化が励起レーザーの電場に即時応答せず、大きな位相シフトを 伴っていることを示している。これまでに CW レーザー場中での光学応答特性変化をバルクを 想定した計算から明らかとしてきた。今回の結果はその結果と定性的に一致するものである。 CW レーザーに対する理論は Floquet 理論に立脚しており、超短パルスレーザーによる励起とは 一般に比較できないとされているが、本結果は同様の現象が超短パルスレーザー中でも起きてお り、また薄膜であれば位相整合条件も問題にならないことを明らかとした。この結果はレーザー 照射中の物質の変調だけでなく、超高速物性制御及び光スイッチ開発のための重要な知見を与え るものである。



図2 ダイアモンド薄膜のレーザーによる光学特性変化シミュレーション。 上から励起レーザーの電場の時間発展、観測光の透過光スペクトル、 反射光、吸収量の変化を示した。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 原著論文

- 1) 'Non-thermal effects on femtosecond laser ablation of polymers extracted from the oscillation of time-resolved reflectivity' Appli. Phys. Lett. 106, 221605 (2015).
- 2) 'Time-dependent density functional theory of high-intensity short-pulse laser irradiation on insulators' Phys. Rev. B 92, 205413(2015).
- 3) 'Dynamics of spallation during femtosecond laser ablation studied by time-resolved reflectivity with double pump pulses' Appli. Phys. Lett. 108, 11102(2016).
- 4) 'Femtosecond time-resolved dynamical Franz-Keldysh effect'.Phys. Rev. B 93, 045124 (2016).

#### 国際会議 招待講演

- 5) 'Femtosecond time-resolved dynamical Franz-Keldysh effect' EMN meeting on optoelectronics 2016.
- 6) 'First-principle calculation for laser-matter interaction' PIERS 2016 Shanghai Focus/Special session (予定).

#### 国際会議 講演

7) 'Time-resolved dynamical Franz-Keldysh effect' The European Conference on Lasers and Electro-Optics 2016.

#### (4) 今後の利用予定:

- 固体からの高次高調波発生とそれによるアト秒パルス生成過程の解明
- 光学物性制御のレーザーパラメータ依存性及び一般的理論の構築
- 超高速時間-角度分解光電子分光(Tr-ARPES)実現に向けた理論シミュレーション

#### 5.13.7 薄膜ターゲットを用いたレーザーイオン加速シミュレーション

Simulation Study of Laser Ion Acceleration using Foil Targets

守田 利昌

レーザー駆動粒子線研究グループ

(平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

#### (1) 利用目的:

レーザーイオン加速では、現象が起こっている空間の小ささと時間の短さのため、実験だけで 現象を理解し各種検討を行なうのは困難である。よって、コンピューターシミュレーションを用 いて現象の解明と検討を行なうことが重要となる。本年度は、現象をより正確に示すことが出来 る3次元計算を広い空間領域を定義して実施した。シミュレーション手法には PIC 法を用いた。 ここでは、本年度実施したシミュレーション結果の内、次に示す a,b の2 ケースを示す。

#### (a) J-KAREN を用いて行なわれた実験の3次元シミュレーション

実験でのイオン加速過程における現象を詳細に示し、その理解を深める。また、コンピュータ ー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。

#### (b) J-KAREN-PをH2O薄膜ターゲットに照射した時の3次元シミュレーション

新レーザーシステムである J-KAREN-P を、効率的に高エネルギーを生成すると考えられる H<sub>2</sub>O 薄膜ターゲットに照射した場合の結果を示す。適切な条件を用いることで、十分に高エネ ルギーな陽子が J-KAREN-P で得られることを示す。

#### (2) 利用内容·結果:

#### (a) J-KAREN 実験の解析(0.8 µ m アルミ薄膜ターゲット)

計算条件は、実験時の条件であり、J-KAREN レーザー(出力=196 TW、強度=2×10<sup>21</sup> W/cm<sup>2</sup>、 エネルギー=7.5 J) を 0.8µm 厚のアルミ薄膜に 45°入射である。このとき非常に薄い鉄の層 がターゲット表面に付着している。計算における空間分割は 5300×4000×2000 であり、用いた 粒子数は 9×10<sup>10</sup> 個である。結果を図 1 に示す。3D 表示において、レーザーは z 方向に半分切 り取った状態で表示されている。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。2D 表示では奥域方向中心位置(z=0) での断面図である。 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傾いている。計 算で得られた陽子エネルギー=38 MeV、鉄イオンエネルギー=13 MeV/u であり、実験での測定 値はそれぞれ 40 MeV、16 MeV/u であった。シミュレーション結果は、実験値と良く一致した。 さらに、実験でのイオン加速過程における現象を詳細に示すことで現象の理解を深めた。

#### (b) J-KAREN-PをH<sub>2</sub>O薄膜ターゲットに照射

高エネルギー陽子を得るためには、ターゲットに CH<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O 等の水素を多く含む物質を用いる 方が有利であることを、昨年度までの研究で示した。そこで、より高エネルギーな陽子生成を目 指し、ターゲットに H<sub>2</sub>O 薄膜を用いた場合の検討を実施した。レーザーには新レーザーシステ ムである J-KAREN-P(出力=783 TW、強度=1×10<sup>22</sup> W/cm<sup>2</sup>、エネルギー=25 J)を用いた。 レーザーは垂直入射とした。ターゲット厚は 0.1  $\mu$  m である。計算における空間分割は 5300× 3456×3456 であり、用いた粒子数は 2×10<sup>10</sup> 個である。計算結果を図 2 に示す。レーザー、粒 子分布共に、断面を表示するため z=0 の面で半分切り取った状態が表示されている。計算で得ら れたレーザー照射後の陽子(水素イオン)と酸素イオンの分布を示している。陽子はそのエネル ギー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。このとき、得られ た陽子エネルギー=163 MeV、酸素イオンエネルギー=58 MeV/u であった。J-KAREN-P でエ ネルギー ≈ 200 MeV の陽子生成が可能であることを示した。

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、その加速 過程における現象を詳細に示し理解を深めた。さらに、J-KAREN-Pと H<sub>2</sub>O 薄膜ターゲットで 十分高エネルギーな陽子が得られることを示した。レーザー入射角を最適化すること、ディスク 形状のターゲットを採用すること等の最適化で、さらに高エネルギーな陽子ビームが得られると 考えられる。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 発表

1) 守田利昌、" PIC simulation of ion acceleration with a 0.8µm aluminum foil "、第 16 回光 量子科学研究シンポジウム、2015 年 10 月 15-16 日、原子力機構 関西光科学研究所.

#### 論文

2) 守田利昌,小倉浩一, A. Pirozhkov, 西内満美子、神門正城、近藤公伯、"アルミ薄膜を用い たレーザーイオン加速実験の PIC シミュレーション"、Proceedings of the 16th Symposium on Advanced Photon Research, October 15-16, 2015, JAEA-Conf. 2016-001.

#### (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。PIC シミュレーションは 2D 計算で実施される場合も多いが、現象をより正確に解明し、生成イオンのエネルギーを正しく評価するには、3D 計算が必要である。2D 計算に比べ、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、ターゲットが激しいクーロン爆発を起こした方が高エネルギーイオンが得られるが、それはイオンが広い 空間に分布することを意味する。そのため、計算においてより大きな空間領域を必要とし、高い 計算能力を有する計算機が必要となる。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。



図1 J-KAREN 実験解析(0.8µm アルミ薄膜ターゲット)



図 2 J-KAREN-P を H<sub>2</sub>O 薄膜ターゲットに照射

# 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 (平成 28 年 4 月より量子科学技術研究開発機構)

#### (1)利用目的:

The scattering of  $\gamma$ -rays from the Coulomb field of a nucleus involves four coherently added processes. One of them involves the polarization of vacuum from virtual electron-positron pairs generated in the scattering and is one of the few nonlinear quantum electrodynamical processes, which has been experimentally measured. Tables of the calculations of this scattering, Delbrück scattering, exist. However, since the existing data is not detailed enough for future high precision experiments using polarized photons, we are developing a code to calculate Delbrück scattering. Our goal is to find photon scattering angles and energies where the Delbrück scattering is dominant via detailed calculations.

#### (2) 利用内容·結果:

A  $\gamma$ -ray can be elastically scattered by the Coulomb field of the nucleus of the atom due to the formation of virtual electron-positron (e<sup>-</sup>-e<sup>+</sup>) pairs from the vacuum, Delbrück scattering [1]. However, other scattering processes can coherently contribute to the scattering making the isolated measurement of the vacuum contribution difficult [2]. The Delbrück differential scattering cross-section calculated via quantum electrodynamics is given by [1]:

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

where subscripts ++/+- refer to the initial and final polarization of a photon having circular polarization which upon scattering stays the same or flips, respectively, Z is the nuclear charge of the element,  $\alpha$  is the fine structure constant,  $r_e$  is the classical electron radius, and

 $d\Omega$  is the solid angle. The imaginary and real parts of the amplitudes +++ are [1]:

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

and

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

where

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

with notation described in [1] and its references. The imaginary and real integrals are three and four dimensional, respectively. We have integrated them using the Monte Carlo integration subroutine, VEGAS, from the CUBA library of routines [3,4]. Since the integrands have regions of numerical instability, the setting of cut-offs and transformation of coordinates are necessary [1]. We are continuing to test the code by comparing it with previously published results [5]. Figure 1 shows preliminary results using the ICE X computer for the differential cross section calculated for a 2.09 MeV y-ray, which flips polarization after scattering. It can be seen that our calculations are close to the published values.



Fig.1 Differential cross section versus angle of a 2.09 MeV  $\gamma$ -ray, which flips polarization upon scattering. The large blue triangles are from published data [5] and the dots of different colors are our new calculations.

- [1] B. De Tollis and L. Luminari, Il Nuovo Cimento 81, 633 (1984).
- [2] M. Schumacher, Radiation Physics and Chemistry 56, 101 (1999).
- [3] T. Hahn, Computer Physics Communications 176, 712 (2007).
- [4] http://www.feynarts.de/cuba/
- [5] 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):

N/A

#### (4) 今後の利用予定:

It is our plan to finish comparing our calculation of Delbrück scattering with published results. Once agreement is established we will find the regimes where the Delbrück scattering is the dominant contribution to the  $\gamma$ -ray scattering via detailed calculations.

# 5.13.9 EUV 波長領域自由電子レーザーパルスの高密度気体試料伝搬の数値計算 Simulations of the Propagation of EUV Free-electron Laser Pulses Through Dense Gas Samples

James R HARRIES

コヒーレントX線利用研究グループ (平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

#### (1) 利用目的:

The propagation of laser pulses near-resonant to an atomic transition through media is often treated using some or all of the following approximations:

- a) the two-level approximation
- b) the rotating-wave approximation
- c) the slowly-varying envelope approximation
- d) the single-atom approximation

These are variously more or less valid depending on laser intensity, wavelength, atomic system, and atomic number density. The aim of this work is to model and understand recent experimental work [1–3] using the EUV free-electron laser SCSS (operated by RIKEN at SPring-8). The high laser intensity (~  $10^{13}$  W cm<sup>-2</sup>) leads to a breakdown of a), and the partial coherence inherent to the laser pulses which arise from spontaneous emission means that b) and c) cannot be applied when studying the excitation process. At low atomic number densities, the only approximation remaining is d), however this also breaks down due to the length of the interaction region at increasing number density.

#### (2) 利用内容·結果:

To model the interaction of ultrafast laser pulses with an atomic system at the intensities used in the experiments a semi-classical technique can be used. Maxwell's equations are used for the laser field, and the Schrödinger, Bloch, or Liouville equations follow the evolution of the atomic level populations and coherences. An



Figure 1 Levels in atomic helium

elegant approach is given by Marskar and Österberg [4]. While not computationally intensive for short pulses at visible wavelengths (for example a 10 fs pulse at 800 nm consists of 4 optical cycles), at the  $\sim 50$  nm wavelengths of interest here 10 fs covers 56 optical cycles, increasing computational size, since typically many steps per wavelength must be taken to reach convergence.

#### JAEA-Review 2016-024

The experiments considered used 30 fs long,  $\sim 10 \ \mu$ J pulses at central wavelengths of 53.7 nm and 52.2 nm, near-resonant to the 1s1s (ground state) to 1s3p and 1s4p excited state transition in neutral helium (see figure 1). The initial aim was to study whether any levels other than the 1s3p and 1s4p states can be excited by the laser pulse. Figure 2 shows the results of an example (single-atom approximation) simulation using one simulated realisation of a partially-coherent laser pulse. The atoms are initially in the ground state, and during the pulse Rabi cycling begins between the ground state and the resonantly-coupled 1s4p state. Further cycling occurs between 1s4p and other dipole-coupled states. As the intensity drops towards the end of the pulse most of the population remains in 1s1s or 1s4p, but some is trapped in other states due to the partial coherence of the pulse.



Figure 2 Example simulation. The upper two plots show the evolution of the atomic state populations on linear (left) and logarithmic (right) scales during the passage of a partially-coherent pulse, the intensity of which is shown in the centre-left plot. This particular pulse contains around 3 modes, and the characteristically 'spiky' wavelength distribution is shown at centre-right. The electric-field over a short time range is shown in the lowest plot. Full simulations used a timestep of 8 as.

While the simulation of figure 2 only included levels up to a principle quantum number of 5, for convergence it was found necessary to include all singlet and triplet levels up to n=9, for a total of 161 levels. This leads to a 161 x 161 Hamiltonian matrix, and a  $161^2 \times 161^2$  Liouville operator. Sparse matrix techniques simplify computation, but a single simulation at a timestep of 8 as took around 3 hours on a single core of ICE X. To model the experiment it is necessary to perform simulations for an ensemble of partially-coherent pulses at a range of intensities and wavelengths, and simulations were run in parallel using up to 432 cores.

- [1] Nagasono M et al 2011 Phys. Rev. Lett. 107 193603.
- [2] Nakajima K et al 2015 J. Phys. Soc. Jpn. 84 54301.
- [3] Harries J R et al 2015 J. Phys. BAt. Mol. Opt. Phys. 48 105002.
- [4] Marskar R et al 2011 Opt. Express 19 16784–96.

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 「Multiple-wavelength superfluorescence in helium following FEL excitation: ultrafast experiments and simulations」、原子衝突学会第 40 回年会、首都大学東京(東京都八王子 市)、2015 年 9 月.
- 2) 「 Multiple-wavelength superfluorescence/superradiance in helium following free-electron laser excitation」, 15th International Conference on X-ray Lasers 2016 (奈 良県奈良市)、2016 年 5 月.

#### (4) 今後の利用予定:

The simulations described above have been used to interpret the experiments of references [1–3], and a manuscript is in preparation.

These simulations used the single-atom approximation (d), which do not take into account absorption of the field. To accurately model the experimental conditions, it is necessary to propagate the field through the atomic medium. This entails calculating the atomic response at a point in space, and then using the resulting polarization to update the electric field, which is then used to update the neighbouring atomic systems. This is computationally difficult in three-dimensions, but feasible in one dimension (the propagation direction of the laser pulse). Further, at each timestep the atomic density matrices evolve independently, allowing for efficient parallelization. Such a problem is ideally suited to ICE X.

A further advantage of these full simulations is that not only the atomic populations following the excitation are known, but also the coherences.

Test simulations have shown that these simulations are possible for 50 nm wavelength pulses and 20 atomic levels. Parallel simulations are planned using ICE X during H28, in preparation for future experiments using the SACLA X-ray free-electron laser.

# 5.13.10 第一原理分子動力学法に基づいた化学反応のシミュレーション

First Principles Molecular Dynamics Simulations of Chemical Reactions

池田 隆司

量子シミュレーション研究グループ

(平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

#### (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27年度は、福島支援の一環として、除 去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、粘土 鉱物におけるセシウムの吸着状態の解明研究を集中的に行った。粘土鉱物におけるアルカリ金属 イオンの吸着状態を第一原理分子動力学に基づいたメタダイナミクスを用いて系統的に調べる ことにより放射性セシウムが吸着しやすい粘土鉱物の組成の特徴を特定し、粘土鉱物層間におけ るセシウムイオンの吸着機構を原子・分子レベルで解明した。

#### (2) 利用内容·結果:

飯舘村で採取した土壌粒子をイメージングプレートとHRTEMを用いて観察することにより、 放射性セシウムは一部の風化黒雲母に凝集していることが東大グループにより報告されている。 また、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



図1 第一原理に基づいたメタダイナミクスシミュレーションにより求めた2:1型3八面体粘 土鉱物の層間でのアルカリ金属イオンの吸着状態を表す自由エネルギー面の等高線図。

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の脱水が速やかに進行することが示唆されて いる。これらの実験結果は、福島の土壌では放射性セシウムは従来示唆されていた粘土鉱物のほ つれた端ではなく、一部の粘土鉱物微粒子の層間に凝集していることを強く示唆している。

そこで、3種類の典型的な2:1型粘土鉱物におけるアルカリ金属イオンの吸着状態を第一原理 に基づいたメタダイナミクスシミュレーションにより系統的に調べた。図1に層間でのアルカリ 金属イオンの吸着状態を記述するために集団変数として採用した配位数で張られた2次元空間 での自由エネルギー面を示す。この計算結果は、バーミキュライト等が属す2:1型3八面体粘 土鉱物においてセシウムイオンの内圏錯体が選択的に形成されることを示している。また、電子 状態の詳細な解析からこのセシウムイオンで見られた強い粘土層への親和性は4面体シートの 同形置換により著しく増大したルイス塩基性をもつ底面酸素サイトによってセシウムイオンが 選択的に認識されるためであることがわかった。これらの結果をまとめてJ. Phys. Chem. A 誌 に発表した。本研究の成果は、共同研究者によって粘土鉱物から放射性セシウムをより効率的に 脱離させる独自手法の開発に繋がった。

#### (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に基づいたシミュレーションによる 粘土鉱物におけるアル カリ金属イオンの吸着状態」、日本物理学会 2015 年秋季大会 9 月 16-19 日/吹田市.
- 2) <u>池田隆司</u>、「風化黒雲母における層間水とカチオンの第一原理分子動力学研究」、日本物理学 会第71回年次大会3月19-22日/仙台市.

#### 原著論文

- <u>T. Ikeda</u>, S. Suzuki, and T. Yaita, "Characterization of Adsorbed Alkali Metal Ions in 2:1 Type Clay Minerals from First-Principles Metadynamics", J. Phys. Chem. A 119, 8369-8375 (2015).
- 4) <u>T. Ikeda</u> and M. Boero, "Role of van der Waals corrections in first principles simulations of alkali metal ions in aqueous solutions", J. Chem. Phys. **143**, 194510 (2015).
- 5) R. Motokawa, T. Kobayashi, H. Endo, <u>T. Ikeda</u>, T. Yaita, S. Suzuki, H. Narita, K. Akutsu, and W. T. Heller, "Small-angle neutron scattering study of specific interaction and coordination structure formed by mono-acetyl substituted dibenzo-20-crown-6-ether and cesium ions", accepted in J. Nucl. Sci. Technol., DOI: 10.1080/00223131.2015.1102100.

#### 解説等

6) <u>池田隆司</u>、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**, 345-350 (2015).

#### (4) 今後の利用予定:

量研機構において第一原理分子動力学法に基づいた材料解析手法の開発を実施する。

#### 5.13.11 放射線による DNA 損傷の理論的研究

#### Simulation Study for DNA Damage due to Radiation

森林 健悟

難修復性 DNA 損傷解析研究グループ

(平成28年4月より量子科学技術研究開発機構)

#### (1) 利用目的:

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つながるので、シミュレーションで陽子線と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。

イオンビームが細胞に照射されたときのトラック構造シミュレーションの研究を行っている。 イオンビームの衝突電離で生成する水分子イオン(H<sub>2</sub>O+)が形成する電場の影響を考慮し、二 次電子の運動を記述するシミュレーションコードを開発した。その結果、イオンビームの衝突電 離断面積が大きいとき、多くの二次電子がイオンビームの軌道付近に束縛され、集団的運動して いることを明らかにした。さらに、クラスターDNA 損傷の解析、及び、重粒子線がん治療の治



図1 動径線量と炭素イオン線(3 MeV/u,8 MeV/u)の軌道からの距離との関係。二次電子の角度 分布に対して等方分布のもの(○)、最新の実験データを取り入れたもの(◆)を用いた。

療計画で重要な動径線量(重粒子線の軌道からの距離を関数としての線量の値)のシミュレーションモデルを開発し、軌道付近に束縛された二次電子の動径線量への影響を解明した。H27 年度は、モデルをさらに、現実の状況に近づけるため、(i)二次電子の放出角度分布の最新の実験 データをコードに導入し、(ii)内殻電離、オージュー電子、分子の振動・回転励起をモデルに取り入れることに成功した。

図1に動径線量と炭素イオン線(3 MeV/u, 8 MeV/u)の軌道からの距離との関係を示す。こ の図には、二次電子の角度分布を等方的に取り扱ったものと最新の実験データを取り入れたもの の2種類のシミュレーションを行った。最新の二次電子放出角度分布実験データを取り入れるこ とにより、シミュレーションモデルを現実の状況に近づけることに成功し、動径線量が今までの シミュレーション結果に比べ、最大 30%程度小さくなることがわかった。このことは重粒子線 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。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 論文

- 1) K.Moribayashi, Development of the radial dose distribution function relevant to the treatment planning system for heavy particle cancer therapy', Phys. Scr. **90** 054013 (2015).
- K.Moribayashi, 'Simulation study of radial dose due to the irradiation of a swift heavy ion aiming to advance the treatment planning system for heavy particle cancer therapy: the effect of emission angles of secondary electrons', Nucl. Instru. Methods Phys. Res. B, 365 592 – 595 (2015).
- K. Moribayashi, 'Effect of recombination between a molecular ion and an electron on radial dose in the irradiation of a heavy ion', Applied Physics Research, 8, 138 - 148 (2016).

#### 学会発表

- 4) K.Moribayashi, A Simulation study of radial dose due to the irradiation of a swift heavy ion aiming to advance the treatment planning system for heavy particle cancer therapy', 9th International Symposium on Swift Heavy Ions in Matter (SHIM 2015)、 ダルムシュダット、ドイツ、2015 年 5 月 (ポスター発表).
- 5) 森林健悟、「重粒子線照射での二次電子と放出角度の関係」、日本物理学会 2015 年秋季大会、関西大(吹田市) 2015 年 9 月.
- 6) 森林健悟、「重イオンビームの動径線量のシミュレーション研究:内殻電離の影響」、日本物 理学会第71回年次大会、東北学院大(仙台市)2016年3月.

#### (4) 今後の利用予定:

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。また、動径線量シミュレーションの適用範囲の拡張を目指してブ ラッグピーク付近の動径線量シミュレーションモデルを開発する。

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

内堀 昭寛、渡部 晃、柳沢 秀樹 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妥当性確認を進めている。

平成 27 年度は、前年度から継続して SG 実機条件を模擬した液体 Na 中水蒸気噴出実験を SERAPHIM コードで解析し、実機条件に対する適用性を確認すること、これらの解析結果に基 づいて従来試験で確認されている伝熱管ウェステージ現象の特性について知見を得ることを目 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いる。これ まで並列計算を実施する際、SERAPHIM で用いている領域分割方法によりメッシュ分割数に応 じて使用可能コア数が制限されていたが、計算高速化のため使用可能コア数を増大する方策検討 を実施した。

#### (2) 利用内容·結果:

SG 実機条件のもとで伝熱管破損時における液体 Na 中への水蒸気噴出を模擬した試験(複数の体系、条件が存在)を対象に解析を実施した。本試験は、実機と同じ伝熱管群を配置した反応容器を液体 Na で満たし、伝熱管のうち1本に設けた注水孔(模擬破損孔)より高圧・高温の水蒸気を液体 Na 中へ噴出させたものである。液体 Na、水蒸気の温度・圧力条件は実機と同等で

ある。図1に解析体系の一例を示す。本解析で は、直径10mmの注水孔における水蒸気圧力 を14.23MPa、水蒸気温度を387.81℃、Na圧 力を0.2MPa、初期Na温度を460℃と設定し た。図2に、解析で得られた、注水孔中心と交 差する垂直断面内の気相温度、気相流速、水蒸 気体積率、水酸化ナトリウム(NaOH)質量濃 度の分布を表示している。気相温度に着目する と、注水孔近傍では未反応水蒸気が存在するた め周囲より温度が低く、その周辺で化学反応に より高温領域が形成されていることが分かる。 注水口からある程度離れた左上方の領域に高 温領域が形成されている傾向は試験結果と一 致する。気相流速の分布からは、不足膨張が発



図1 解析体系(メッシュ)

生し、噴出口近傍で超音速領域が生じていることが分かる。また、注水孔近傍には水蒸気が存在 するが、その周辺では化学反応により NaOH が存在していることが分かる。以上のように、伝 熱管群が存在する体系において化学反応を伴う流動により形成される温度場を良好に再現可能 であるとの見通しを得た。さらに、水蒸気条件の異なる試験や伝熱管配置の異なる試験に対する 解析も合わせて実施し、水蒸気条件や伝熱管群がウェステージ環境に及ぼす影響について知見を 整理するための基本情報を得た。

上記の適用性確認に加え、計算高速化の一環として、並列計算時の使用可能コア数を増大させ るための方策を検討した。使用可能コア数増大のためには、あるプロセスの通信先プロセスを複 数化することが主な変更となり、それに必要な様々なプログラミング方策を今年度は定めた。本 方策の組み込みにより使用可能コア数を大幅に増大することができるだけでなく、1プロセス当 たりのセル数が減少するためロードバランスを改善できる可能性がある。



図2 解析結果

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 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.
- 2) 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.
- S. Jang, T. Takata, A. Yamaguchi, A. Uchibori, A. Kurihara and H. Ohshima, "Numerical Quantification of Self-wastage Phenomena in Sodium-cooled Fast Reactor", The 16th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-16), 2015.
- 4) 小島早織, 内堀昭寛, 高田孝, 大野修司, 福田武司, 山口彰, "流体・構造の熱的連成を考慮 した高速炉蒸気発生器伝熱管のセルフウェステージ現象に関する研究", 日本原子力学会 2016 年春の年会.
- 5) 張承賢,山口彰,内堀昭寛,高田孝,大野修司,大島宏之, "ナトリウム-水反応に起因する セルフウェステージ現象に対する要因別影響度評価",日本原子力学会 2016 年春の年会.
- 6) A. Uchibori and H. Ohshima, "Applicability of a mechanistic numerical method for sodium-water reaction phenomena in steam generators of sodium-cooled fast reactors", Mechanical Engineering Journal, Vol.3, 2016.
- 7) A. Uchibori, A. Watanabe, T. Takata, S. Ohno and H. Ohshima, "Development of Unstructured Mesh-based Numerical Method for Sodium-water Reaction Phenomenon in Steam Generators of Sodium-cooled Fast Reactors", CFD4NRS-6, 2016.

# (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、今年度定 めた高速化方策に基づき高速化プログラミングを進める。

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

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

> 伊藤 啓、河村 拓己 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手法の整備を行っている。本研究では、 高速炉ガス巻込み現象を数値解析によって評価することを目指し、非構造格子系における高精度 気液二相流数値解析コード(NERGAL: <u>NumERical Gas Entrainment AnaLysis</u>)の開発・整 備を行った<sup>1)</sup>。

#### (2) 利用内容·結果:

本研究では、高速炉ガス巻込み現象に対する 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 及び ICE X にて実施した。高 速炉上部プレナムにおけるガス巻込みは、自由液面液位やディッププレート(D/P)間隙、配管 群を横切る周方向流れが複雑に影響しあって発生する。そのため、液位や流速などの影響をパラ メータサーベイし、ガス巻込み発生挙動に対する定性的、定量的な評価を進めている。1/1.8 縮 尺モデル試験において定格運転条件ではガス巻込みは発生しなかったが、低液位(液位比 0.56)、 入口流速 5 倍、D/P 間隙流速 4 倍とした条件で、ガス巻込みが発生することが確認されている。 平成 25 年度に、ガス巻込みが発生した試験条件を対象とした数値解析評価を実施しており、発 生位置や巻込み形態などガス巻込み挙動を NERGAL コードが良好に再現できることを確認して いる。

本年度の解析条件を Table1 に示す。ガス巻込み発生に対する周方向流速の影響を調査するため、入口流速(周方向流速)を実機流速の7倍(ガス巻込み試験条件の1.4倍)とした計算を実施した。D/P 間隙の流速は平成25年度の解析と同じ条件(実機流速の約4倍)である。

Fig.2 に解析体系内の流線(10 秒間の時間平均)を示す。ただし、図中(a)は平成 25 年度の実施結果(入口流速は実機流速の5倍)、図中(b)は本年度の実施結果であり、流線の色は流速の大きさを示す。体系内では、入口(右奥)から配管群を周方向に横切って内側と R/V 側の二手に分れて出口(左)へ向かう流れが生じており、局所的には、配管群や R/V の下部において D/P 間隙の吸込みによる下降流が発生している。平成 25 年度の解析結果では、R/V に沿う流れは H/L を過ぎて減衰・拡散し、C/L2-H/L 間において複雑な流れ場を形成しているが、今年度の結果では、流速が増加したことで H/L を過ぎた後の流れの減衰が抑制され、C/L2 から出口方向へ向かう流れが増加している。Fig.3 に、瞬時の自由液面形状(VOF 値 0.5 等数値面)を示す。液面上

には流れが構造物を横切る際に発生した波や C/L1 内側後流渦によるくぼみ渦が発生しているも のの、現時点までの解析時間内(物理時間で48.8秒)にガス巻込みは生じなかった。これは、 周方向流速増加によってガス巻込み発生が抑制された結果であると考えられるが、試験における ガス巻込みの発生頻度(10分間に数回程度)に比べて解析時間が短いことから、解析を継続す ることにより、周方向流速がガス巻込みの発生挙動に与える影響について評価を進める。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) Kei Ito, Yasuo Koizumi, Hiroyuki Ohshima, Takumi Kawamura, "Physics-basis simulation of bubble pinch-off", Mechanical Engineering Journal, Vol. 3, No. 3, p.15-006712016, 2016.

#### (4) 今後の利用予定:

高速炉上部プレナム自由液面からのガス巻込み現象評価を進めるため、より詳細な解析格子を 用いた数値解析や、液位や境界流速などのパラメータを変化させた際の数値解析を引き続き実施 する。



Fig.1 1/1.8 縮尺液面部分モデル水流動試験装置

Table1 解析条件							
	定格条件	ガス巻き条件	解析条件				
	(試験)	(試験、平成25年度解析)	(今年度)				
液位	815 mm	455  mm	$\leftarrow$				
入口流速	実機流速一致条件	実機流速の約5倍	実機流速の約7倍				
	(0.0365  m/s)	(0.1852  m/s)	(0.2593  m/s, - 様)				
D/P 間隙流速	実機流速一致条件	実機流速の約4倍	$\leftarrow$				

671 LF A 11



Fig.3 瞬時の自由液面形状 (VOF 値 0.5 等数値面)

## 5.14.3 高速炉大型燃料集合体内流動解析

## Numerical Simulation of Flow Field in a Large Fuel Assembly of Fast Reactor

菊地 紀宏 流動・系統解析グループ

#### (1) 利用目的:

安全性を強化したナトリウム冷却高速炉システムの概念構築に向けて、シビアアクシデント対 策として、炉心溶融時遷移過程において早期に溶融燃料を排出させるため、燃料集合体内に内部 ダクトを有する燃料集合体の採用が検討されている。この燃料集合体の設計成立性を確認するた めには、様々な運転状態における流動場・温度場を評価しなければならないが、ワイヤスペーサ を有する複雑な流路構造、さらにはナトリウムを作動流体とした実験では詳細なデータを取得す ることは困難である。このため、高速炉計算工学技術開発部では、昨今の計算機処理能力を背景 に、燃料集合体変形・熱流動解析シミュレーションシステムの構築を行っている。本件は、この シミュレーションシステムを構成する局所詳細解析コード SPIRAL を用いて、内部ダクト型集 合体への適用解析を実施し、その流動特性を確認することを目的とする。

#### (2) 利用内容·結果:

SPIRAL コードは、燃料ピンやその周りにらせん状に巻かれたワイヤスペーサ等の存在により 複雑となる高速炉燃料集合体内の形状を正確に取り扱うため、形状模擬性に優れた有限要素法を 採用するとともに、運動量保存、エネルギー保存式のそれぞれに対する複数の乱流モデルを選 択・適用できるという特長を有する。これまでに様々な基本検証を実施し、その妥当性を確認し

てきている。平成27年度は内部ダク ト型燃料集合体への適用解析を実施 した。

図1に解析体系を示す。解析対象 は内部ダクト型255本燃料ピン集合 体であり、発達した流れ場を再現す るため、周期境界を利用し、ワイヤ 1巻きピッチ長を解析領域に設定し た。集合体仕様値はP/D=1.10、H/D =19.23 (燃料ピン径D、燃料ピン配 列ピッチP、ワイヤ巻き付けピッチ H)である。要素総数は約345万要 素であり、水平断面あたりでは約7.2 万要素となる。数値計算安定化手法 としてSUPG法を、乱流モデルとし



図1 解析体系(255本ピン集合体)と燃料ピン

て SPIRAL コードオリジナルの Hybrid 型 k- $\epsilon$  モデルをそれぞれ採用した。作動流体はナトリウ ムであり、集合体流入流速  $w_{mean} = 5.05$ m/s、等価直径  $D_{eq} = 3.33$ mm から算出されるレイノルズ 数は Re = 52,000 程度となる。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。

解析結果の一例として、図 2、図 3 に主流方向の集合体内平均流速で規格化した、最外層サブ チャンネル (ラッパ管と最外周ピン間の領域)における主流方向流速とラッパ管に沿った水平方 向流速の分布を示す。比較の対象として、正六角管型 271 本燃料ピン集合体の結果を併せてプロ ットした。図示した断面の中心から 3 時方向を 0°として反時計回りを正とすると、主流方向流 速のピークは  $\varphi$ =300°付近で、水平方向流速のピークは  $\varphi$ =120°付近で、それぞれ発生している。 また、内部ダクトの存在する側の  $\varphi$ =0°~120°を除けば、主流方向流速または水平方向流速の分 布は概ね一致しており、内部ダクトの影響は限定的である。



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

以上の解析結果が示すように、試験でのデータ取得が困難な実規模燃料集合体における様々な 流動特性を SPIRAL コードによる詳細解析によって確認した。

なお、本作業と並行して、より簡易的な評価手法であるサブチャンネル解析コード ASFRE を 用いて様々なパラメータ解析を高速で行うため、コードのさらなる高速化について調査検討も実 施した。その結果、最適化オプション AVX2 およびサブルーチンの自動インライン展開が有効で あることを確認するとともに、ホットスポット分析により、多次元配列の構成に起因するキャッ シュミスの多いルーチンを特定し、配列構成の変更が有効となることを示した。また、行列解法 部に対しループ・アンローリングを試行して計算効率が改善することを確認した。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 菊地紀宏、今井康友、大島宏之、田中正暁、「高速炉燃料集合体内詳細熱流動解析手法の開 発(12)」、日本原子力学会 2015 年春の年会 (2015).
- 2) H. Ohshima and Y. Imai, "Development of thermal-hydraulic analysis program for wire-wrapped fuel pin bundle of sodium-cooled fast reactor", ICONE-23 (2015).

#### (4) 今後の利用予定:

SPIRAL コードの妥当性を確認するため、種々の燃料集合体模擬試験データを用いた検証解析 を継続する。また、実機適用解析として、内部ダクト型集合体の熱流動特性評価解析、集合体局 所閉塞事象評価解析等の大規模解析を実施する予定である。

ASFRE コードについては、今回の高速化検討の結果を受けて、配列構成変更、除算の削減や 重複する計算の集約などのソース改修による高速化(計算効率化)を実施していく予定である。

#### 5.14.4 先進ループ型ナトリウム冷却高速炉の高温側1次主冷却系統合解析

Integrated Numerical Analysis of Unsteady Phenomena in Upper Plenum and Hot-leg Piping System of Advanced Loop-type SFR

> 高屋 茂 流動・系統解析グループ

#### (1) 利用目的:

先進ループ型ナトリウム冷却型高速炉の炉上部プレナムと主冷却系ホットレグ(HL)配管を 統合した高温側一次主冷却系統合解析評価法を整備している。本評価法の開発により、冷却材で あるナトリウムが、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や入口部で発 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等の 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 報の提供が可能となることを目的としている。

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おり、これまでに、流動励起振動評価の観点 で整備してきた 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 27 年度は、平成 26 年度に開始した統合解析モデル(解析メッシュ)を用いた非定常流 動解析を継続し、過渡データを蓄積すると共に HL 配管部の流速分布や圧力変動 PSD の分析を 実施した。加えて、流動励起振動解析評価に向けた構造解析モデル整備の一環として、HL 配管 部の固有値解析を実施し、既往知見との比較によりモデルの妥当性を評価した。

#### (2) 利用内容•結果:

#### ① 統合解析モデルを用いた非定常流動解析

平成 26 年度から継続して、図 1(a)(b)の総メッシュ数約 1,100 万のフルセクタモデルを使用し て非定常流動解析を実施した。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。乱流モデルはレイノルズ応力モデルを使用した。

図2に、HL配管部ショートエルボ入口の3.5D(D:HL配管直径約1.24m)上流断面の時間平均二次流れを示す。ここで、時間平均値は5.002~20秒までのデータ(データ数1,500)から算出した。他の断面についても同様に時間平均二次流れを可視化した結果、実機炉上部プレナム部の1/11縮尺体系にて実施された水試験結果と概ね同様の傾向が確認された。

図3にショートエルボ下流における瞬時の合成流速分布を示す。ショートエルボ出口近傍にお ける剥離とそれに伴う逆流が確認できる。ショートエルボ下流の流況については、過去に、1/3 縮尺ショートエルボ単体水試験により、整流、旋回流、偏流の各入口流速条件の影響が検討され ており、偏流の影響が支配的であるとの知見が得られている。ただし、偏流条件の試験結果につ いては、偏流だけでなく乱れの影響もあることに注意が必要である。今回の解析では、炉上部プ レナム部と HL 配管を接合した統合解析モデルを用いることにより、旋回流と偏流が重畳した複 雑な入口流速条件におけるショートエルボ下流の流況を評価することができる。解析から算出し た時間平均軸方向流速分布と、1/3 縮尺ショートエルボ単体水試験の結果と比較したところ、特 に偏流条件の結果と良く一致することがわかった。これは、旋回流と偏流の相互作用が小さいこ とを示唆しており、偏流に着目することの重要性が改めて確認された。

#### ② HL 配管部の固有値解析

HL 配管部とその外管部のモデル化に加え、HL 配管内部の流体もモデル化し、固有値解析を 実施した。図4に解析に使用した総メッシュ数約42,320の解析メッシュを示す。構造材は図4(a) に示すシェル要素、流体は図4(b)に示す六面体要素にて開発した。構造材は550℃の改良 9Cr-1Mo 鋼とし、板厚を15.9mmと設定した。流体は550℃のナトリウムとした。さらに、図5 に示した領域に対し、外管部の流体付加質量を考慮するため、外管が除した体積分の質量を等分 布で付加した。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。

以上のような条件で固有値解析を実施し、応力評価上重要となるビーム変形モードについて類 似体系による既往解析結果と比較した。その結果、流体付加質量の設定や配管径等の条件が類似 解析と厳密には一致していないことから、固有振動数に若干の差異があるが、変形形態に関して は概ね一致する傾向であることを確認することができた。



(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) S. Takaya, M. Tanaka, T. Fujisaki "Development of Integrated Numerical Analysis Model for Unsteady Phenomena in Upper Plenum and Hot-leg Piping System of Japan Sodium-cooled Fast Reactor", ASME 2015 PVP, PVP2015-45248, July 19-23, Boston, Massachusetts, USA (2015).

#### (4) 今後の利用予定:

統合解析モデルの過渡解析データの分析に資するため、入口境界に偏流条件を付加した HL 配 管部単体での非定常流動解析を実施する。これに加えて、過去の 1/3 縮尺ショートエルボ水試験 解析で課題となっていた配管表面圧力変動 PSD の再現性向上のため、種々の条件にて非定常流 動解析を実施する予定である。

また、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。

# 5.14.5 連続エネルギーモンテカルロコード MVP を使用した高速炉金属燃料炉心の核特 性の解析

Calculation of Core Characteristics for Metal Fuel Fast Reactor with the Continuous Energy Monte-Carlo Code, MVP

大釜 和也、菰田 宏、曽我 彰、丸山 修平 炉心挙動解析グループ

#### (1) 利用目的:

高速炉の炉心の安全性に係る研究の一環として、炉心核設計手法の検証、および、その不確か さの定量評価を実施している。炉心核設計で用いている決定論的手法の参照解として、確率論的 手法に基づく評価が必要であり、本解析に大型計算機システムを利用する。

## (2) 利用内容•結果:

燃料集合体内の燃料ピンやダクト及び制御棒集合体内の吸収体ピン等を忠実に模擬した体系 を構築し、連続エネルギーモンテカルロコード(MVP)を使用して実効増倍率及び径方向出力 分布(核分裂反応率)の解析を実施した。評価は平衡初期の炉心を対象とした。図1に炉心配置 及び出力分布評価対象集合体を、図2にMVPコードでの解析体系の一例を示す。この解析によ り得られた結果を参照解として、現行の核設計手法による計算結果との比較を行った結果、これ らの結果が良く一致しており、金属燃料炉心に対する核設計手法の妥当性を確認することが出来 た。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

今後、学会発表等を通じてこれらの結果を随時発信していく予定である。

# (4) 今後の利用予定:

高速炉の炉心の設計手法の改良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特性評価を実施していく予定である。

#### JAEA-Review 2016-024



図1 金属燃料炉心の炉心配置および出力分布評価対象集合体



図2 MVP での計算モデルの例

5.14.6 次世代ナトリウム冷却高速炉コールドレグ配管を模擬した 1/7 縮尺トリプルエルボ 配管流れ実験の数値シミュレーション

Numerical Simulation of Triple Elbow Pipe Flow Experiments Simulating Cold-leg Piping in an Advanced Sodium-cooled Fast Reactor

山野 秀将、和田 明\*1

設計・規格基準室、\*1 NESI

#### (1)利用目的:

次世代ナトリウム冷却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。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・解析研究を進めてきた<sup>(1)</sup>。実機コールドレグ配管は3段エルボで構成されており、複雑な 流れになると考えられるため、1/7 縮尺試験体を用いた3段エルボ配管実験を実施し、その実験 データを対象に U-RANS 手法を用いて非定常解析を実施した。これまで単一エルボ体系を対象 に構築した解析手法の3段エルボ体系への適用性確認、3段エルボ配管内の非定常流動特性の把 握、2段~3段エルボ間距離の影響を確認した。

この解析研究を実施するためには、詳細なメッシュを用いて長時間の非定常流動解析を実施する必要があり、大規模並列計算機の利用が必要不可欠である。

#### (2) 利用内容·結果:

本解析では、汎用熱流体解析コード STAR-CD Ver.4.12 を用いて、レイノルズ応力モデルによる U-RANS 解析を実施した。図1に解析体系とメッシュ分割図を示す。



(a) T032-1,T060-1,T100-1 (2<sup>nd</sup>-3<sup>rd</sup> 間距離 6.4D)(b) T100-2 (2<sup>nd</sup>-3<sup>rd</sup> 間距離 5D)図 1 解析体系とメッシュ分割図

レイノルズ数の影響と2段~3段エルボ間距離の影響を確認するため、2段~3段エルボ間距離を 6.4D と 5D(配管径を D とする)で比較した。タイムステップ 0.1ms、入口条件を流速実験近似式(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。

Case	Re 数	メッシュ数	質量流量(kg/s)	流速(m/s)	2 <sup>nd-3rd</sup> エルボ間距離
T032-1	$3.2\! imes\!10^5$	579,360	19.1	1.53	6.4D
T060-1	$6.0 imes10^5$	579,360	35.8	2.87	6.4D
T100-1	$1.0 imes10^6$	579,360	59.8	4.80	$6.4\mathrm{D}$
T100-2	$1.0 \!  imes \! 10^{6}$	552,160	59.8	4.80	$5.0\mathrm{D}$

表1 解析ケース

トリプルエルボ体系の Re 数 100 万条件の 1/7 縮尺試験解析を行った結果、Re 数 100 万条件 の解析結果を時間平均した流況は、試験結果の流速分布が再現できることを確認できた。異なる レイノルズ数でも模擬できることを確認した。トリプルエルボ体系において、第2エルボと第3 エルボは距離(約 6.4D)があるため、第3エルボが第1エルボ及び第2エルボ下流の流況に与 える影響は小さいことを確認することができた。図2に流れ方向無次元流速と2次元乱流エネル ギーを示す。計算結果は試験結果とよく合致しており解析は妥当である。また、これは第2エル ボ出口に生じた旋回流が、ほとんど減衰せずに第3エルボ入口まで維持されることが大規模非定 常解析により明らかになった。



図2 流れ方向無次元流速と2次元乱流エネルギー

#### 参考文献

(1) H. Yamano, et al., Nucl. Technol., 170, pp.159-169 (2010).

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 H. Yamano, M. Tanaka, S. Ebara, H. Hashizume, "U-RANS Simulation of Triple Elbow Flow with a 1/7 Scale Experimental Loop Simulating Cold-Leg Piping of an Advanced Loop-Type Sodium-Cooled Fast Reactor," Proceedings of the 27th International Symposium on Transport Phenomena (ISTP27), Honolulu, USA (Sep. 20-23, 2016) ISTP27-061.

#### (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 FBR 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 3D-FEM (three dimensional finite element) simulations with experimental measurements for multi-coil EC (eddy current) systems for FBR SG tubes in presence and absence of sodium. Also it aims to confirm the application of the multi-frequency algorithms to multi-coil ECT systems when using 3D FEM simulations for FBR SG tubes with and without sodium. Validation with experimental data where applied in 2015 only for multi-frequency algorithm for single bobbin-type coils.

#### (2) 利用内容·結果:

Using an in-house JAEA developed and continuously optimized FEM code, it was simulated the In-Service Inspection (ISI) of steam generator (SG) tubes of FBR (Fast Breeder Reactor) using eddy currents technique (ECT). The code was optimized and parallelized to work with coupled OpenMP-MPI techniques, with up to 1024 cores in parallel simulations. In case of FBR SG tubes, it has to be taken into account the electrical conductivity of sodium that adheres to outer SG tubes surfaces and can fill partially outer tube defects (OD) volume.

3D numerical simulations were confirmed with experimental measurements for a multi-coil ECT sensor configuration (Fig. 2) at single inspection EC frequencies. ODs are located near tube support plates (SP) and they can be or not partially filled with sodium after sodium is drained (Fig. 1). Validation of 3D FEM simulations with experimental data is shown for the case of no sodium (Fig 3a) or when defect is filled with sodium (Fig 3b).



Fig. 1. Partial defect; sodium fills OD



Fig. 2. Multi-coil ECT : prototype vs model



Fig. 3. Defect near SP : a) no sodium;

b) defect filled with sodium



Fig. 4. SP model

Fig. 5. C-scan of the simulated multi-coil ECT signal



Fig. 6. Optimization of WMF for defects near tube SP

Therefore, multi-coil ECT system performance was validated using both experimental measurements and 3D-FEM simulations. A developed windows multi-frequency algorithm (WMF) was improved to be applied to FBR SG tubes when using multi-coil ECT signal. The model of tube SP is shown in Fig. 4 while Fig.5 shows 3D simulations of defects near tubes SP.

The optimization of WMF (window size =7 mm), using 3D FEM simulations show in Fig.6 that optimum defect position validation can be obtain even when defect is filled with sodium. Using 3D-FEM simulations it was confirmed that WMF algorithm is stable against noise from sodium filing the defects volume from 0% to 100% when applied to SG tubes of FBR. Large S/N ratio could be found for detection of both groove OD20%tw and partial OD30%tw when located under tube SP, even for large sensors lift-off noise, confirming WMF stability.

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

In 2015, 5 papers were presented at international conferences and 4 papers were already accepted to be published in conference proceedings and after referee reports.

- 1) D. Garcia Rodriguez, <u>O. Mihalache</u>, T. Yamamoto, W. Cheng, "Validation of an EMAT Code based on a Two-Dimensional FEM Coupled Electromechanical Formulation", Conference proceedings of 11th NDE, Jeju, Korea, May, 2015.
- 2) Toshihiko Yamaguchi, <u>Ovidiu Mihalache</u>, Masashi Ueda, "A Study of Multi-coils ECT System for SG Tubes of FBR using 3D FEM Simulations and Experimental Measurements", International Symposium of Electromagnetics and Mechanics, Kobe, Japan, Sept 2015 (to appear in International Journal of Applied Electromagnetism and Mechanics 2016).
- 3) <u>Ovidiu Mihalache</u>, Toshihiko Yamaguchi, Takuma Shirahama, Masashi Ueda, "Multi-Frequency ECT for Sodium Drained SG Tubes of FBR using 3D Finite Element Simulations", International Symposium of Electromagnetics and Mechanics, Kobe, Japan, Sept 2015 (to appear in International Journal of Applied Electromagnetism and Mechanics 2016).
- 4) <u>Ovidiu Mihalache</u>, Toshihiko Yamaguchi, Masashi Ueda, "Multi-Frequency ECT for a Multi-Coils System using 3D FEM Simulations of FBR SG Tubes Covered by Sodium", Electromagnetic Nondestructive Evaluation,(XIX), Vol 41, pp. 9-17, IOS Press, 2016.
- 5) Takuma Shirahama <u>Ovidiu Mihalache</u>, Toshihiko Yamaguchi, Masashi Ueda, "Experimental Validation of Multi-Frequency ECT Algorithms Using Bobbin Coils For FBR SG Tubes", The 20th International Workshop on Electromagnetic Non-Destructive Evaluation, Sendai, Japan, Sept, 2015.

# (4) 今後の利用予定:

In the next years, numerical simulations will be extended to larger FEM models with 1/1 scale, similar as in a real FBR, including a very large support structures with many helical SG tubes (25~36 or more) and inner and outer shell of the cylindrical vessel that contains the SG tubes. The model will try to assess feasibility of ISI for SG tube using ECT for tubes far and near to inner/outer shell of cylindrical vessel.

## 5.16 敦賀事業本部 敦賀連携推進センター

# **Tsuruga Head Office**

Tsuruga Center for International and Regional Collaboration

## 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 敦賀連携推進センター レーザー共同研究所

#### (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、溶融凝固体(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~10<sup>5</sup>)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 析を行って乱流特性を評価した。

## (2) 利用内容·結果:

#### ① 流速過渡特性

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 2 3 次元解析結果のベクトル図 (A 位置:Y=5mm, XZ 平面)



図 3 観測点における流速 W の時間変動 (X=17.5mm, Y=5mm, Z=38.5mm)



#### ② 乱流特性

図4は、3次元解析から得られた流速データを用い、式(1)により算出した乱流運動エネルギー の局所瞬時空間分布を示したものであり、切断対象物エッジから剥離した噴流渦が高乱流運動エ ネルギー塊となって下流側に移動する様子が確認できる。

乱流運動エネルギー  $k(m^2/s^2) = 1/2 \times \{ (U[t] - \overline{U})^2 + (V[t] - \overline{V})^2 + (W[t] - \overline{W})^2 \} \cdots (1)$ 

この渦塊の移動周期を確認するために、切断対象物側面(X=17.5mm 位置)に沿った乱流運動 エネルギーの軸方向分布を評価した。図5に見られる通り、乱流運動エネルギーのピークは概ね 13.5mm( $\overline{L}$ )毎に現れ、これを同位置での軸方向流速20m/s(W)を用いると移動周期は約750Hz となり、非常に大きな乱流場となっていると判断できる。ここで、乱流特性距離を $\overline{L}$ として乱流 動粘性係数vtを式(2)から計算し(C $\mu$ =0.09)、分子論からの動粘性係数v1との比率を評価すると、

乱流動粘性係数 v<sub>t</sub> (m<sup>2</sup>/s) = Cµ×k<sup>1/2</sup>×L …(2) 5,000 倍程度の値を取ることが分かる(図6参照)。



図 5 乱流運動エネルギーの軸方向分布 (時間:1950ms,位置:Y=5mm, X=17.5mm)



図6 乱流動粘性係数と分子動粘性係数の 比率の軸方向分布(時間:1950ms, 位置:Y=5mm, X=17.5mm)

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 論文

- 村松壽晴、レーザーコーティング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、 RIST News、No. 60、p.22-27(2016年1月).
- 2) 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、 第1回日本機械学会イノベーション講演会講演要旨集(2015年11月).
- 3) 村松壽晴、デジタルモックアップ装置を用いた鉄鋼材料レーザー加工プロセスのフロントロ ーディング、第84回レーザ加工学会講演論文集(2016年1月).

#### 学会

4) 村松壽晴、レーザーコーティング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、多元技術融合プロセス研究会(2015 年 11 月).

#### (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 地層処分研究開発推進部 Sector of Decommissioning and Radioactive Waste Management Geological Disposal Research and Development Department

5.17.1 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 27 年度)

Acceleration and Parallelization of the Computer Program (Dtransu3D•EL) for Analyzing 3D Saturated-unsaturated Groundwater Flow and Advection-dispersion Model (FY2015)

> 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精緻に再現、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27年度は、3次元飽和・不飽和浸透流-移流分散解析プログラム(Dtransu3D・EL)中の高計算負荷サブルーチンについて、行列要素のオーダーリング変更と行列解放部分の並列化を行うとともに、省メモリ化・最大並列数評価機能の作成を行った。

#### (2) 利用内容·結果:

解析プログラム(Dtransu3D・EL)を高速化するために、本年度は主として、①行列要素の オーダーリング変更、②行列解法部分の MPI 並列化、③作業用配列の省メモリ化、④最大並列 数評価機能の作成の4項目を実施した。主な結果を以下に示す。

#### ① 行列要素のオーダーリング変更

昨年度に試行した2種類のオーダーリング変更法(Cuthill–McKee(CM)法、Reverse Cuthill– McKee(RCM)法)では、いずれもバンド幅の大幅な縮小ができたものの、RCM法を精査した所、 約10%の接点で数%以内の相対誤差が認められた。今年度、CM法について、同様の検討を行っ た結果、オーダーリング前後の値は最小桁の直前桁で一致(例題モデル1)および完全一致(例 題モデル2)し、CM法の有用性を確認することができた。

#### ② 行列解法部分の MPI 並列化

計算負荷の大きいサブルーチン (SOLPCG) の行列解法部分に対して、プロセス間の袖通信処

理の追加と行列計算部 分の処理分割を行った。 その結果、最大並列数を 昨年度の8から39(例 題モデル1)と44(例題 モデル2)に拡張するこ とが可能となった。例題 モデル1を対象とした計 算結果から、並列数32 までは、並列数の増加に 応じて実行時間が短縮 するの、それ以上の並列 数では、減少傾向が頭打



図1 例題モデル1を対象とした実行時間と並列化数との関係

ちとなり、高速化の効果が望めないことが明らかとなった。この理由としては、並列数 32 を境 に、通信時間の増加が顕著となり、計算時間の減少による効果が相殺されていることが考えられる。

#### ③ 作業用配列の省メモリ化

作業用の2次元配列の中に、計算に寄与していない空き領域があることから、配列を1次元化 するとともに、空き領域を取り除く処理を行った。省メモリ化前後のメモリ使用量を比較すると、 例題モデル1の結果では、ほとんど有意な差は無かったものの、例題モデル2の結果では、平均 して約1/3程度の削減効果を得ることができた。効果が認められた例題モデル2では、例題1に 比べて配列定義に使われた要素数と行列数が有意に大きく、本機能は大規模問題に特に有用と考 えられる。

#### ④ 最大並列数評価機能の作成

実行可能な並列数の上限値を評価するために、並列数1から順に、設定した並列数と矛盾の無い計算領域が確保されているかどうかを判別する命令文をプログラムに加えた。その結果、例題 モデル1では、並列数39、例題モデル2では並列数44が実行可能な最大値であることが明らか となった。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

#### (4) 今後の利用予定:

浸透流解析の並列化が完了したことを受けて、今後は、移流-分散方程式解法部サブルーチン の並列化を図る。また、既存の地下水流動解析モデルを用いて、本プログラムの実行性に関する 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 福島環境安全センター Sector of Fukushima Research and Development Fukushima Environmental Safety Center

# 5.18.1 Uncontaminated Effect: 放射性セシウムが沈着していない領域が存在することに よる線量低減効果 Uncontaminated Effect: Dose Reduction Effect due to Existence of

**Uncontaminated Area** 

松田 規宏

福島環境安全センター 環境動態研究グループ

#### (1) 利用目的:

現代人の生活は居住環境を中心としており、家屋は一日のうちで最も多くの時間を過ごす空間 となっている。福島第一原子力発電所の事故により環境中に放出された放射性物質に由来する年 間被ばく線量の算出(環境省)[1]においては、屋外の空間線量率から屋内の空間線量率を簡易 的に推定するため、木造家屋による線量低減係数(0.4)が用いられている。この係数には、国 際原子力機関 IAEA の報告書[2]を引用して「遮へい効果」との説明が付されている。

実用的な係数である家屋による線量低減係数の特徴を把握するため、粒子・重イオン輸送計算 コード PHITS を用いたシミュレーションを実施した。本件は、事故に由来する放射性セシウム の崩壊に伴って放出されるガンマ線の任意の場所での空間線量率を評価するもので、広い範囲に 一様に分布し、かつ、移行により土壌中にも分布した放射性物質からのガンマ線による寄与を精 度よく評価するためには、大型計算機による支援が必要であった。

- [1] 除染情報プラザ http://josen-plaza.env.go.jp/decontamination/qa\_01.html 参照 追加被ばく線量年間1ミリシーベルトの考え方 http://www.env.go.jp/press/file\_view.php?serial=18437&hou\_id=14327
- [2] Generic procedures for assessment and response during a radiological emergency, IAEA-TECDOC-1162.

#### (2) 利用内容·結果:

日本の家屋は欧州と比べて木造家屋の割合が大きく、その遮へい効果は、欧州の石造り、レン ガ造りの家屋と比べて小さい。そのため、木造家屋の材料である木材の遮へい効果だけで、屋外 の空間線量率が屋内では6割も減少することは常識的に考えにくかった。また、福島県での家屋 周りにおける除染の経験から、福島第一原子力発電所の事故に由来する放射性セシウムは雨どい や側溝に集積することが指摘されていた。大気中に放出された事故由来の放射性セシウムが土壌 や、家屋の場合は屋根や壁に湿性沈着し、ウェザリングにより移行する過程を考えると、そもそ も、家屋の建っている直下の土壌に沈着することは物理的に考えにくく、家屋の屋根や壁に沈着 した放射性セシウムは、土壌と比べて早く移行することが知られている。つまり、当初、屋根や 壁に沈着した放射性セシウムはウェザリングにより移行し、移行の途中で、雨どいや側溝に溜ま った土などの放射性セシウムを吸着しやすい物質に吸着され、集積したものと考えられる。した がって、屋根等に沈着した放射性セシウムからのガンマ線による屋内の空間線量率への寄与は別 で考えるにしても、家屋の直下にはその大きさの分だけ放射性セシウムが沈着していない領域が 存在するため、屋内の空間線量率は屋外と比べて大きく低減しているように見える。この効果を 「Uncontaminated effect」と名付けた。効果の特徴を明らかにするため、セシウム 137 が沈着 していない領域(その半径は、3、5 及び 10 m の 3 種類を仮定)と、沈着している領域(セシ ウム 137 の崩壊に伴って放出される 662 keV のガンマ線の平均自由行程を考慮し、その大きさ は、セシウム 137 が沈着していない領域を中心とした半径 1 km に設定した。)の境界付近にお ける空間線量率の空間分布を計算した。計算体系を図 1 に示す。(ここでは、その他の計算条件 は省略する。[3] 参照)



図1 計算体系

横軸をセシウム 137 が沈着していない領域の中心からの距離、縦軸を地面から1 m の高さにお ける空間線量率(μSv/h)としたときの計算結果を図2に示す。

この結果から、セシウム 137 が沈着していない領域の中心(体系中心からの距離:0m)での空間線量率は、その領域の大きさに応じて低減することがわかる。これは、事故により広い範囲に 一様に分布した放射性セシウムのうち、任意の場所での空間線量率は、その大半が、その場所の 周辺数mの範囲からの寄与であることを示している。Uncontaminated effect により、屋内の 空間線量率(ここでは、体系中心からの距離が0mでの空間線量率とする。)は、屋外の空間線 量率(ここでは、仮に、体系中心からの距離が20mでの空間線量率:約2µSv/hとする。)と 比べ、その領域の大きさに応じて最大で35~65%に低減することがわかった。また、この効果 の特徴として、放射性セシウムが沈着していない領域と、沈着している領域の境界において空間 線量率は急激に変化し、その低減効果の範囲は、境界を越えて広がっていることがわかった。

さらに、地面からの高さを  $0.1 \text{ m} \sim 5.0 \text{ m}$  まで変化させたときの空間線量率 ( $\mu$ Sv/h) について も評価し(ここでは、計算条件及び計算結果は省略する。[3] 参照)、Uncontaminated effect は、 空間線量率を評価する地面からの高さに応じて、空間線量率の低減に係るその効果が弱まること がわかった。屋内の1階の空間線量率よりも2階の方が高くなることは、屋根等に沈着した放射
性セシウムからの寄与以外にも、この効果によることがわかった。

実用的な係数である家屋による線量低減係数の特徴を把握するため、PHITS を用いたシミュ レーションを実施し、Uncontaminated effect による空間線量率の低減効果の特徴を明らかにし た。この効果は、遮へい効果があまり期待できない木造家屋の屋内の空間線量率を低減する主要 因になり得ることがわかった。この効果による空間線量率の低減は場所により大きく変動するた め、屋内であっても、2階より1階、屋外に面した壁側より家屋の中心に近い側の方が、空間線 量率の低減効果は大きくなることを示していた。



図2 地面から1mの高さにおける空間線量率の分布

[3] N. Matsuda, S. Mikami, T. Sato, K. Saito, "Measurements of air dose rates in and around houses in the Fukushima Prefecture in Japan after the Fukushima accident", Journal of Environmental Radioactivity, DOI: 10.1016/j.jenvrad.2016.03.012.

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) N. Matsuda, S. Mikami, T. Sato, K. Saito, "Measurements of air dose rates in and around houses in the Fukushima Prefecture in Japan after the Fukushima accident", Journal of Environmental Radioactivity, DOI: 10.1016/j.jenvrad.2016.03.012.

#### (4) 今後の利用予定:

福島第一原子力発電所の事故により環境中に放出された放射性物質に由来する空間線量率を 評価する場合、線源を広い範囲に一様に、かつ、移行により土壌中にも分布させる必要があるた め、大型計算機による支援は必須であり、今後も利用を予定している。

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

# 5.19.1 福島第一原子力発電所港湾内の流動場シミュレーション Fluid Simulation Inside the Harbor in Fukushima Daiichi Nuclear Power Station

山田 進 シミュレーション技術開発室

#### (1) 利用目的:

2011年3月に発生した福島第一原子力発電所(1F)の事故により、原子力建屋に流れ込んだ 地下水が放射性物質により汚染された後、その一部が港湾内へと流れ込み港湾外へと流出してい る。このような状況の下、原子力機構内の研究者らにより「1F 廃炉対策タスクフォース(旧称: 汚染水タスクフォース)」が組織され、科学的見地から汚染水の有するリスク等の評価を行って きた。本研究では、そのタスクフォース活動の一環として、大型計算機システムを利用したシミ ュレーションにより汚染水の港湾内でのリスク評価を目標とする。

27年度は、2次元の数値流体シミュレーションコードを用い、港湾内の海水流動及び核種の拡 散過程を評価し、その結果を本タスクフォースで報告すると同時に、経済産業省・資源エネルギ 一庁や東京電力株式会社(現、東京電力ホールディングス株式会社)にも報告した他、原子力学 会にて発表した<sup>1),2)</sup>。

#### (2) 利用内容·結果:

平成 27 年度は、1F の港湾内の流動場シミュレーションを実施した。具体的には、港湾内の汚 染水対策のための施工を考慮し、港湾内に流入した汚染水の流動および核種の拡散過程を 2 次元 シミュレーションで評価した。対象とするモデルは図 1 に示す 2014 年 7 月頃の対策を考慮した 港湾である。境界条件として、港湾口と北防波堤付近の境界において 12 時間 25 分周期で潮位 が変動し、港湾西側中央付近および 4 号機前からは地下水の流入を想定している。また、4 号機 前の地下水にトリチウムが含まれていると仮定し、開渠部口にシルトフェンスがない場合、直線 的に設置した場合と潮位に合わせて移動させる場合(図 2 参照)の 3 ケースをシミュレーション し、トリチウム濃度が観測されていた 10 地点における濃度の比較結果を図 3 に示す。

観測トリチウムの濃度は、開渠部内と外にある観測点の濃度差は大きいが、シルトフェンスが ない場合や、直線的に設置した場合では、そのような濃度分布を再現することができない。その 一方、シルトフェンスを潮位に合わせて移動させた場合には、開渠部内外で濃度差が現れ、トリ チウムの濃度分布を再現することができた。これは、シルトフェンスを直線的に設置した場合、 フェンス両側の水位を合わせるため、多くの海水がフェンスを通過する一方、潮位に合わせてシ ルトフェンスを移動させた場合は、シルトフェンスによって囲まれる開渠部内の海水の体積が潮 位に合わせて変化することで、シルトフェンスを通過する海水の量が減るためである。この結果 から、1F 港湾の流動及び拡散のシミュレーションにおいては、シルトフェンスの振る舞いを適 切に考慮することが重要であると結論づけられた。

これらの得られた結果は、タスクフォースで報告すると共に、経済産業省・資源エネルギー庁 および東京電力株式会社(現、東京電力ホールディングス株式会社)にも報告した他、原子力学 会で発表した<sup>1),2)</sup>。



図1 対策を考慮した港湾モデルおよび境界条件(2014年7月頃の対策)



図2 潮位によって移動するシルトフェンスの模式図。潮位が高くなると開渠 部の内側に張り出し、潮位が低くなると開渠部の外側に張り出している。 また、シルトフェンスの位置に抵抗係数を与え、流速を遅くさせている。



図 3 港湾内のトリチウムの観測値とシミュレーションによる計算値。シルト フェンスの移動を考慮することで、開渠部内外の濃度差をシミュレーシ ョンで再現できることが確認できる。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 山田進、町田昌彦、渡辺将久、「福島第一原子力発電所港湾内海水環境解析:(2)港湾内シ ミュレーション解析」、日本原子力学会 2015 年秋の大会.
- 2) 山田進、町田昌彦、渡辺将久、「福島第一原子力発電所港湾内海水環境評価:(2)3次元シミ ュレーションによる港湾内流動解析」、日本原子力学会 2016 年春の年会.

# (4) 今後の利用予定:

港湾内のセシウムの濃度分布はトリチウムの濃度分布と異なっており、セシウムの振る舞いを シミュレーションし、その評価を行う予定。また、シミュレーションモデルを3次元化すること でより詳細な港湾内の流動場解析の実現を目指す。

#### 5.19.2 転位と溶質元素の第一原理計算

# First-Principles Calculations of the Interaction between Dislocations and Solute Atoms

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、添加元素による塑性の変化の最も典型的な例である鉄中の炭素と転位の相互 作用を原子スケールで明らかにするものである。このテーマは 50 年以上も前にコットレルらに より本質的な描像が確立されたが、より定量的な情報はモデル化に必須の数値でありながら原子 スケール以下の大きさの観測が必要なため未だ得られていない。第一原理計算でこれらの値を評 価することで初めて実験結果を原子スケールのモデルに基づいて解釈することが可能となる。

#### (2) 利用内容·結果:

最近になって炭素と転位の相互作用 を電子顕微鏡で直接観察するような興 味深い研究がなされるようになってき た。そのため、本年度は実験との比較 が容易であり、かつ鉄に含まれる添加 元素として工学的に最も重要である炭 素に着目することとした。炭素は鉄の 中で格子の間に入り込んだ侵入型元素 として存在しており、周囲の鉄原子を 押し開いてエネルギーを高くするた め、格子の隙間が大きい部分があれば そこに入り込んでエネルギーを下げ る。鉄の塑性変形の際に現れる、刃状 転位と呼ばれる図1に示すように余分 な原子列が途中で途切れているような 配置では、転位の上側の原子が通常よ り開いており、ここに侵入型元素が入 り込んで転位とエネルギー的に結合



図1 第一原理計算によって得られた、鉄の刃状転位 に炭素が析出した状態。黒と赤い丸はそれぞれ 鉄と炭素の原子を表し、白い丸は境界で位置を 固定した鉄原子を示す。青い線は原子列を示し、 中央に余分な三列の原子列が途中で途切れる点 として転位が存在している。

し、塑性変形にはより強い応力が必要となる。これが鋼の強度が純鉄より高くなることの基本メ カニズムである。しかし実際にどの程度のエネルギーで結合するか、また最大で何個程度の炭素 原子が転位に結合するかといった定量的な評価については原子スケールの情報が必要となるた め長らく不明であった。本課題ではこの点を解決すべく、転位と炭素の大規模な第一原理計算を 行い、この2点を初めて明らかにした。

- (1) 刃状転位と炭素の結合エネルギーは 0.7eV である。
- (2) 転位には最大で単位セルあたり7個の炭素原子が結合できる。

エネルギーに関して、0.7eVの結合は炭素との結合がより弱いと思われていた、らせん転位の 値とほぼ同じであり、意外な結果であった。これは鋼の強化機構において従来は刃状転位のみ考 察すればよいとされていたことに反する結果であり、また最近の実験において高温で炭素とらせ ん転位の強い結合が原因と考えられる現象が見つかっている事実を原子スケールの知見から説 明することが可能となった。

最大の炭素の個数に関しては、従来は転位の上側の広い領域で平面的に炭素が結合できると考え られていたが、図1に示すように実際は転位と同じ面にある場所に直線的に炭素が結合すること が分かった。これにより炭素による強化をモデル化する場合には従来と異なるモデル化が必要に なると判明した。これらの二点は第一原理計算で初めて明らかになった事実である。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 講演

1) Mitsuhiro Itakura, Hideo Kaburaki, Masatake Yamaguchi, Tomohito Tsuru, "Novel Cross-Slip Behavior of the Pyramidal Screw Dislocations in Mg", MRS 2015 Fall Meeting (Dec 3, 2015, Boston, USA).

#### 論文

- 2) M Itakura, H Kaburaki, M Yamaguchi, T Tsuru, "Atomistic study on the cross-slip process of a screw< a> dislocation in magnesium", Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering 23 (6), 065002 (2015).
- M Yamaguchi, K Ebihara, M Itakura, "Multiscale thermodynamic analysis on hydrogen-induced intergranular cracking in an alloy steel with segregated solutes", Corrosion Reviews 33 (6), 547-557 (2015).
- 4) Mitsuhiro Itakura, Hideo Kaburaki, Masatake Yamaguchi, Tomohito Tsuru, "Novel Cross-Slip Behavior of the Pyramidal Screw Dislocations in Magnesium", Phys. Rev. Lett. 116, 225501 (2016).

# (4) 今後の利用予定:

鉄や鋼に含まれる溶質元素の塑性への影響は、炭素の濃度により大きく変化することが知られ ている。今後は銅やシリコンなど実用鋼に含まれる置換型溶質元素と転位の相互作用、また炭素 原子がある場合の炭素・溶質元素・転位の複合的相互作用について第一原理計算で明らかにして いく。

# 5.19.3 自己無撞着場によるトポロジカル超伝導体の核磁気緩和率計算 Nuclear Magnetic Relaxation Rate in Topological Superconductors

 永井
 佑紀

 シミュレーション技術開発室

#### (1) 利用目的:

第一原理計算を用いたシミュレーションは、原子力分野及び産業界の研究開発に必須な手段で あり、高速なシミュレーションコードの開発は、今後の研究開発力を左右する重要事項に当たる。 特に、格子欠陥や不純物等の物性への影響等の現実的な課題を調べるためには、実空間での大規 模シミュレーション技術開発が有効であることが知られている。そこで、本課題では、電子密度 等を自己無撞着に安定かつ高速に計算する大規模シミュレーション技術の開発を目的とする。具 体的には、様々な自己無撞着場(電子密度場、電荷密度場、スピン密度場、超伝導異常密度場) を超並列に高速に計算する技術を開発し、近年機能材料として着目しているトポロジカル超伝導 体や鉄系高温超伝導体の物性値シミュレーションを実施する。上記シミュレーションの実現によ り、J-PARCやSPring-8 で行われる実験と比較し、超伝導発現機構を明らかにする一方、より高 い転移温度を持つ超伝導体の開発への足がかりとする一方、超高磁場を発生させる電磁石としての 利用や、使い勝手の良い電気伝導材料等への応用等に資するシミュレーションを実現させる。

#### (2) 利用内容·結果:

自己無撞着場を用い、トポロジカル超伝導体における核磁気緩和率の温度依存性を調べる超並 列計算コードを開発した。開発した並列計算コードにより、第一原理計算によって得られたトポ ロジカル超伝導体 CuxBi2Se3 における核磁気緩和率の温度依存性を自己無撞着に計算すること ができた。そして、トポロジカル超伝導体の核磁気緩和率が超伝導転移温度直下で今までの超伝 導体とは全く異なる非自明な温度依存性を示すことを明らかにした(図 1)。その結果、合成さ れた超伝導体がトポロジカル超伝導体であるかどうかを調べる新しい有力な手法を提案できる ことが判明したため、本研究に関する研究成果は Physical Review Bの Rapid communication に採択された。

また、BX900で開発してきた自己無撞着場を用いた計算コードをより CPU コア数の多い ICE X で利用可能な形にコードを整備することも行った。そして、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 法によるコードを ICE X 用に整備して用いた。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。



(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

# 論文(査読付き)4本

- Y. Nagai, H. Nakamura, M. Machida, and K. Kuroki, "First-principle study of antimony doping effects on the iron-based superconductor CaFe(Sb<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub>)<sub>2</sub>", J. Phys. Soc. Jpn. 84, (2015) pp. 093702-1-4.
- 2) A. Shitade and Y. Nagai, "Orbital angular momentum in a nonchiral topological superconductor", Phys. Rev. B, 92, (2015) pp.024502-1-7.
- 3) Y. Nagai, Y. Ota and M. Machida, "Inverse coherence effects in nuclear magnetic relaxation rates as a sign of topological superconductivity", Phys. Rev. B, 92 (2015) pp. 180502(R)-1-5.
- 4) Y. Ota, Y. Nagai and M. Machida, "Theory of low-energy behaviors in topological s-wave pairing superconductors", Physica C 518, (2015) pp. 5-9.

#### 国際会議2件

- 5) Y. Nagai, "Quasiparticle excitations in a nodal topological superconductor; Application to superconducting topological insulator CuxBi2Se3", VORTEX 2015 (2015 年 5 月)
- 6) Y. Nagai "Quasiparticle excitations in a three-dimensional nodal topological superconductor", 11th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (M2S 2015) (2015 年 8 月).

その他、国内会議発表件数4件.

#### (4) 今後の利用予定:

これまで BX900 用に開発してきたコードを ICE X 用に整備し最適化を行う。その際、より多数の CPU コアによる超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、引き続き自己無撞着場を安定にかつ高速に解き物性値を理論シミュレーションできる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 Materials in the Environment

奥村 雅彦、中村 博樹、町田 昌彦 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。その中で、放射性セシウムは半減期が長 い上に、土壌に吸着して化学的に安定化し、土壌表層に留まることが知られている。住民の早期 帰還を目的として行われている政府による大規模除染は、居住地の線量低下に有効であることが 示されており、最近では遂に住民の帰還が始まっている。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の解明、予測も、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の理解に取り組んでいる。放射性 セシウムは、環境中ではイオンとして振る舞い、主に粘土鉱物に吸着していることが知られてい るが、その吸着機構及び有効な脱離法はまだわかっていない。本室では、その存在形態及び吸着 様式から、放射性セシウムと粘土鉱物の相互作用を理解するためには、原子レベルのモデリング が必要であると考え、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 27 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。また、除染による廃棄土壌は、仮置き場から中間貯 蔵施設に運搬される予定が立てられているが、中間貯蔵施設に於いて、高濃度放射性セシウムを含 む廃棄土壌の長期保管のためには、施設外に漏洩しないための安全性評価が必要であると考えられ る。これまでの研究で、粘土鉱物は長期に渡り放射性セシウムを保持することがわかっている が、放射線によって粘土鉱物が損傷、脆化する可能性は評価されてこなかった。そこで、 我 々 は、放射性セシウム吸着現象の粘土鉱物構造依存性と放射線による粘土鉱物の脆化について、第 一原理計算を用いて評価する事を具体的目標とした。

本研究により、放射性セシウムがどの粘土鉱物に吸着しやすいかが明らかになれば、福島土壌 における放射性セシウム吸着現象についての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脱離技術 開発工程の大幅な加速が期待できる。また、放射線による粘土鉱物の脆化についての知見は、中 間貯蔵施設における高濃度セシウムを含む粘土鉱物の長期保管の安全性評価への貢献が期待できる。

#### (2) 利用内容·結果:

#### 1. 放射性セシウム吸着現象の粘土鉱物の構造依存性

本研究では、放射性セシウム吸着現象の粘土鉱物の構造依存性に関する研究を行い、以下を明らかにした。

# 1.1.5 種類の粘土鉱物(パイロフィライト、白雲母、金雲母、セラドナイト、マルガライト)の 基板表面におけるセシウム吸着自由エネルギー(分子動力学、図1)

・粘土鉱物の持つ電荷の大きさが大きいほど吸着しやすい(図2)

・同じ層電荷を持つ粘土鉱物でも、ミクロな構造の違いが吸着のしやすさに影響を与える。



#### 1.2. パイロフィライトのエッジ構造の解明(密度汎関数法)

放射性セシウムを吸着しやすいと考えられている 2:1 層状ケイ酸塩のエッジの中で、最も基礎 的な構造をとると考えられているパイロフィライトのエッジ構造を明らかにした。特に、エッジ 構造内部の水素結合ネットワークがエッジ構造を決定づける大きな要因であることを突き止め た。

#### 2. 放射線による粘土鉱物の脆化(第一原理分子動力学)

本研究では、粘土鉱物に取り込まれた放射性セシウムがβ崩壊を起こし、放出されたβ線(図 3)が粘土鉱物の構造を破壊する可能性について、福島土壌において最もセシウムを吸着してい る粘土鉱物の一つと考えらえているバーミキュライトを対象として評価した。その結果、粘土鉱 物の構造が一部壊れる可能性があることがわかった(図 4)。現在、この構造変化が粘土鉱物の セシウム吸着能にどのように影響を及ぼすかを調査中である。





図 4 放射線により構造が崩れた バーミキュライト(茶色:Mg)

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

# 論文

- 1) M. Sassi, K.M. Rosso, M. Okumura, and M. Machida, "Radiation-Damage Resistance in Phyllosilicate Minerals From First Principles and Implications for Radiocesium and Strontium Retention in Soils", Clays and Clay Minerals 64, 108-114 (2016).
- 2) S. Kerisit, M. Okumura, K.M. Rosso, and M. Machida, "Molecular Simulation of Cesium Adsorption at the Basal Surface of Phyllosilicate Minerals", accepted for publication in Clays and Clay Minerals, Special Issue, DOI:10.1346/CCMN.2016.0640405.

# 国際会議発表

- 3) M. Okumura, H. Nakamura, and M. Machida, "Density Functional Studies for Cesium Adsorption to Micaceous Clay Minerals: Low and High Density Situations", Goldschmidt Conference 2015, Prague, Check Republic, August 16-21, 2015.
- 4) M. Okumura, H. Nakamura, M. Machida, M. Sassi, and K.M. Rosso, "Adsorption properties of cesium to micaceous clay minerals: Molecular modeling using density functional theory calculations", Pacifichem 2015, Hawaii, United States of America, December 15-20, 2015.

# (4) 今後の利用予定:

これまでの研究により、粘土鉱物によるセシウム吸着の一般的性質がかなり明らかになってき ており、今後は実際の福島の土壌に特化した吸着特性に焦点を当てていく予定である。その際、 より現実的な系が対象となるため、新しく導入された ICE X を十分に活用する予定である。

# 5.19.5 スパコンで予測する環境中空間線量率分布

Using Supercomputers to Predict Air Dose Rates in the Environment

Alex Malins シミュレーション技術開発室

### (1) 利用目的:

Gamma-rays from <sup>134</sup>Cs & <sup>137</sup>Cs mean radiation levels in parts of Fukushima Prefecture are higher than before March 2011. The radiation level at a location is quantified by the air dose rate at 1 m above the ground surface. The dose rate depends on the amount and distribution of <sup>134</sup>Cs & <sup>137</sup>Cs within the environment around the location.

The purpose of this study was to use supercomputers to model dose rates and understand the factors that determine them. With this understanding it is possible to interpret the changes seen in dose rates in Fukushima Prefecture over time, predict how they might evolve in future, and evaluate remediation strategies to reduce contamination levels.

# (2)利用内容·結果:



Fig. 1: (a) Calculations for how dose rates are affected by mountainous land. θ is the slope angle in a simple conical geometry. (b)&(c) Determining how <sup>134</sup>Cs & <sup>137</sup>Cs from cylindrical volumes of soil contribute to the dose rate.

We first constructed simple models of radiocesium contaminated land in the Particle and Heavy Ion Transport System (PHITS) code. The code models the paths of gamma-rays emitted by <sup>134</sup>Cs & <sup>137</sup>Cs to calculate the air dose rate. We considered both how land topography and contamination spread horizontally affect dose rates (Fig. 1). Topography only has a relatively minor effect on dose rates even under conservative assumptions. However, the results indicated that heterogeneous distributions of <sup>134</sup>Cs & <sup>137</sup>Cs both horizontally and with depth in the ground needed to be accounted for in the simulations to correctly calculate dose rates.

We next developed a flexible tool to calculate dose rates, where heterogeneous spatial and depth distributions could be modelled. The tool works by dividing the ground up into 10 million separate blocks of soil. The amount of <sup>134</sup>Cs & <sup>137</sup>Cs can be set individually within each block. Conversion factors relate the activity in each block to the total dose rate (Fig. 2).



**Fig. 2:** (a) Tool developed to calculate dose rates. (b) Conversion factors relating <sup>134</sup>Cs & <sup>137</sup>Cs activities within soil blocks and the dose rate.

We tested the tool using soil activity and dose rate measurements at ~80 locations in Fukushima Prefecture, including rice paddies, fields and parks. The tool was shown to give realistic predictions for the actual dose rates. Using the tool we could explain that reductions in dose rates over the past years in Fukushima Prefecture occurred mainly because of radioactive decay and weathering of radiocesium deeper into soil.

Typhoon storms cause soil to be eroded and transported through rivers, carrying radiocesium with it. We coupled the dose rate tool to sediment transport models to determine the effect this redistribution has on dose rates (Fig. 3). The results indicate that dose rates reduce slightly in most areas as there is a net reduction in the radiocesium inventory over typhoon storms. The results highlight river channels, flood plains and dam reservoirs as areas where radiocesium inventories and dose rates can increase. These results can help inform future decisions for remediation work.



**Fig. 3:** Calculations for the change in air dose rate over 2011 Typhoon Roke due to the redistribution of <sup>134</sup>Cs & <sup>137</sup>Cs by soil erosion and through rivers.

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

# Journal articles and international conference proceedings

- 1) A. Malins, M. Okumura, M. Machida, K. Saito, "Topographic Effects on Ambient Dose Equivalent Rates from Radiocesium Fallout", Proceedings of Mathematics and Computations, Supercomputing in Nuclear Applications and Monte Carlo International Conference, M&C+SNA+MC 2015, 4, pp.2499-2510 (2015).
- 2) A. Malins, M. Okumura, M. Machida, H. Takemiya, K. Saito, "Fields of View for Environmental Radioactivity", Proceedings of the 2015 International Symposium on Radiological Issues for Fukushima's Revitalized Future, (2015).
- 3) A. Malins, H. Kurikami, S. Nakama, T. Saito, M. Okumura, M. Machida, A. Kitamura, "Evaluation of ambient dose equivalent rates influenced by vertical and horizontal distribution of radioactive cesium in soil in Fukushima Prefecture", Journal of Environmental Radioactivity, 151, pp.38-49 (2016).

# Talks

- 4) A. Malins、佐久間一幸、操上広志、町田昌彦、北村哲浩、「福島県東部の河川流域における 土砂流送と空間線量率の変化」、第62回年会 日本地球化学会、2015年9月17日、横浜 国立大学.
- 5) A. Malins, K. Sakuma, T. Nakanishi, S. Yamada, H. Kurikami, M. Machida, A. Kitamura, "Modelling evolution of air dose rates in rivers basins in Fukushima Prefecture affected by sediment-sorbed radiocesium redistribution", 2015 AGU Fall Meeting, 14<sup>th</sup> December 2015, San Francisco, USA.

# (4) 今後の利用予定:

We are now examining the effect of 2015 Typhoon Etau on dose rates around the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant. Typhoon Etau is the largest typhoon to have occurred in the area since the accident in March 2011. We are also analyzing how much dose rates reduce under different remediation strategies, such as topsoil removal or soil tillage. The study will consider the effects of the amount of soil remediated (area and depth) and the effect of radiocesium weathering into the ground in the years after the accident.

# 5.19.6 第一原理計算による原子力材料劣化機構の研究

## First-principles Study on the Degradation of Nuclear Materials

山口 正剛 シミュレーション技術開発室

#### (1) 利用目的:

#### 《鉄鋼材料の水素脆性メカニズム解明》

原子炉材料の応力腐食割れは未解明の問題であり、水素脆化の可能性も検討されている。 高強度鋼の粒界水素脆性メカニズムについて、モバイル水素による粒界の原子間凝集エネル ギー低下が微視亀裂進展に伴う転位の活動を抑制し、マクロな破壊靭性を低下させるメカニ ズムを当研究で提唱し、その詳細を明らかにしてきた。その一環として不純物偏析による脆 化効果と水素による脆化効果が加算的に働くことを仮定してきたが、平成27年度はその加算 効果が正しいかどうかを検証した。これによって、平成26年度までに得られた成果をより確 かなものとできた。

#### (2) 利用内容·結果:

Ni-Cr 鋼には炭素偏析が約 0.3 カバレッジほ どあることがわかっているため、1/4 カバレッ ジの炭素偏析をさせた鉄粒界においた場合の H 偏析の計算、及び、図 1 のように、Sb,Sn, P 不純物偏析と H 偏析を同時に設定した計算を 行った。そして、(Sb, Sn, P) などの不純物元 素と水素(H)の脆化効果が加算的に作用する



 図1 鉄粒界面において、不純物元素で あるアンチモン(Sb)と水素(H)
 を同時に配置した様子

ことを検証した。隣接する Sb-H 間には反発が働くことがある程度わかっており、その上で、 Sb 偏析があるときに最大でどれだけ H が偏析できるか?等を明らかにした。



図2 粒界偏析した水素による偏析エネルギーの計算結果。(a) 偏析元素なし、(b) P 偏析、(c) Sn 偏析、(d) Sb 偏析。被覆率は 0.5。左の縦軸は赤の線で表される複数の水素原子の偏析エネル ギーの和を表し、右の縦軸は緑の線で表される水素原子1個あたりの偏析エネルギーを表す。

図2は、赤い線が粒界偏析した水素原子の偏析エネルギーを水素原子数に対してプロットした もの、緑の線はその微分で水素原子が1個新たに偏析するときの偏析エネルギーの増加分を示し ている。最も左側の不純物元素(Sb, Sn, P)の偏析がない場合(a)に比べて、被覆率0.5のP偏析(b)、Sn偏析(c)、Sb偏析(d)がある場合には水素偏析量が半減し、偏析によるエネルギー利得が減少していることが分かる。このことから、定性的には予想されていたように、粒界における不純物元素の偏析は、水素原子の偏析を抑制す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):

#### 招待・依頼講演(H27年度)

- 1) (招待講演)山口正剛「鉄鋼の水素誘起粒界破壊におけるマルチスケール熱力学解析」日本材 料学会腐食防食部門委員会第 306 回例会、2015/09/29 (大阪).
- 2) (基調講演)山口正剛、海老原健一、板倉充洋、「金属材料の水素脆化」日本金属学会 2015 年秋期講演大会「金属間化合物の新たな可能性」シンポジウム、2015/09/16-18(九大伊都).
- 3) (招待講演)山口正剛、「モバイル水素による鉄鋼の粒界水素脆性:第一原理計算」第 25 回 日本 MRS 年次大会、2015/12/7-9(横浜).

#### 論文出版(H27年度)

- 4) (查読有論文) Masatake Yamaguchi, Kenichi Ebihara, Mitsuhiro Itakura, Multiscale thermodynamic analysis on hydrogen-induced intergranular cracking in an alloy steel with segregated solutes, Corrosion Review 33(2015)547-557.
- 5) (査読有) 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.
- 6) (查読有論文) Takayuki Hase, Tatsuya Ohtagaki, Masatake Yamaguchi, Naoko Ikeo, Toshiji Mukai, Effect of aluminum or zinc solute addition on enhancing impact fracture toughness in Mg-Ca alloys, Acta Materialia 104(2016)283-294.
- 7) (査読無会議資料集)山口正剛、鉄鋼の水素誘起粒界破壊におけるマルチスケール熱力学解 析、日本材料学会腐食防食部門委員会資料、Vol. 54, No. 306, Part.5, p.19-29.

#### 主著講演(H27年度)

- 8) 山口正剛、海老原健一、板倉充洋、鉄鋼の粒界水素脆性に対する偏析元素の影響:第一原理 計算、日本鉄鋼協会 2015 年秋季講演大会「水素脆化の基本要因、解析と評価」シンポジウ ム、2015/09/16-18(九大伊都).
- 9) (予定)山口正剛、海老原健一、板倉充洋、鉄鋼の粒界水素脆性に対する偏析元素の影響:第 一原理計算 II、日本鉄鋼協会 2016 年春季講演大会「水素脆化の基本要因、解析と評価」シ ンポジウム、2016/03/23-25(東京理科大葛飾).

#### (4) 今後の利用予定:

引き続き鉄鋼水素脆性メカニズム解明のため、偏析元素と水素の相互作用を加味した上での水 素による粒界凝集エネルギー低下を第一原理から計算し、その結果を元にした解析を進める。

# 5.19.7 高温水中の有機反応に関する第一原理シミュレーション

# Ab Initio Simulations of Organic Reactions in Hot Water

志賀 基之

シミュレーション技術開発室

#### (1) 利用目的:

近年、反応場としての高温水の活用は原子力分野やグリーンケミストリー分野において盛んに 議論されている。その基礎的な知見として高温の水や重水が果たす役割の解明が理論・計算化学 に期待されている。そこで、本研究ではその典型例として、多価アルコール変換の第一原理シミ ュレーションを行った。

#### (2) 利用内容·結果:

高温炭酸水を使ったバイオマス由来の多価アルコール変換で知られる 2,5-ヘキサンジオール 脱水反応(図1)を取り上げ、三つの異なる第一原理シミュレーションによって反応機構を明ら かにした。すなわち、ストリング法によって反応座標を抽出し、メタダイナミクス法によって自 由エネルギー地形を計算した。自作のコード PIMD を用いたほか、汎用コードである CPMD を用いて、原子力機構の大型計算機上にて超並列計算を行った。

計算の結果、反応は SN2 経路を最も嗜好し、その自由エネルギー障壁は 36 kcal/mol と推定 される。高温水中における反応速度や立体選択性の保持に関して実験結果と矛盾しないことが 確認された。また、プロトン化、結合交換、脱プロトン化からなる反応全体が、安定な中間体の ない単一のプロセスとして進行することが分かった。この際、効率的なプロトンリレーを補助す る上で、周囲の水の水素結合ネットワークが反応の開始時と終了時に重要な役割を担っているこ とが明らかになった。



図1 立体選択性的な2,5・ヘキサンジオール脱水反応

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 学会発表

志賀基之、"拡張アンサンブル法による生体分子の高次構造と機能の解明"、第6回 CMSI 研究会(HPCI 戦略プログラム分野2最終報告会)(2015/12/8)、東大本郷キャンパス(口頭発表).

- 2) M. Shiga, S. Ruiz-Barragán, "A Theoretical Study of Green Organic Reaction in Water", 分子シミュレーション討論会, (2015/12/2), 新潟朱鷺メッセ(口頭発表).
- 3) S. Ruiz-Barragán, K. Ishimura, M. Shiga, "Hierarchical Parallelization of Ab Initio Simulations: Integration of SMASH and PIMD", 5th International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics Toward Exascale Computing, (2015/11/26), University of Tokyo, Hongo (招待講演).
- 4) M. Shiga, M. Masia, "QM/MM Molecular Dynamics of Diffusive Open Boundary Systems", The 18th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, (2015/11/10), University of Tokyo, Kashiwa (ポスター発表).
- 5) 志賀基之, セルジオルイスバラガン, 石村和也: "第一原理分子動力学計算の階層的並列化", 分子科学討論会, (2015/9/18), 東京工業大学大岡山キャンパス(ロ頭発表).
- 6) M. Shiga, S. Ruiz-Barragán, J. Ribas-Ariño, "Metadynamics of polyalcohol dehydration in water", 分子科学討論会, (2015/9/19), 東京工業大学大岡山キャンパス(口頭発表).
- 7) 志賀基之, "分子系におけるレアイベントの概念・理論・応用計算", 第1回 津田沼 RBK フ ォーラム:分子科学におけるレアイベント, (2015/7/11), 千葉工業大学津田沼キャンパス(招 待講演).
- 8) M. Shiga, S. Ruiz-Barragán, J. Ribas-Ariño, "A Theoretical Study on the Reaction Mechanism of Polyalcohol Dehydration in Water", 第 31 回化学反応討論会, 札幌 (2015/6/3) (口頭発表).

#### 学術論文

- 9) Y. Ota, S. Ruiz-Barragan, M. Machida, M. Shiga, Chem. Phys. Lett., 648, 119-123 (2016). "A screened automated structural search with semiempirical methods".
- 10) S. Ruiz-Barragan, K. Ishimura, M. Shiga, Chem. Phys. Lett., 646, 130-135 (2016). "On the hierarchical parallelization of ab initio simulations".

#### (4) 今後の利用予定:

今後は、上記の計算を継続すると同時に、反応の動的トラジェクトリ解析を進める。結果を論 文としてまとめ、物理化学分野の国際誌に投稿するつもりである。

# 5.19.8 原子・分子シミュレーションによる核燃料の物性評価

Atomic Simulations of Physical Properties for Nuclear Fuel

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。今回は酸化物燃料の成分として期待されている二酸化ト リウムを扱った。

この研究における目標は、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、核燃料開発や過酷事故時の燃料挙動の解析に 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、熱物性を評 価するための第一原理分子動力学計算を行なった。

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、炉内で想定されるような極限環境での物性実験はそう簡単 に行なうことができない。そのため、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。そのような 状況を受けて、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た。今年度は、 核燃料物質の中でも二酸化トリウムに注目し、その融点近くでの高温挙動を、第一原理分子動力 学を用いて解析することを目的とした。

#### (2) 利用内容·結果:

二酸化トリウムは次世代の燃料の有力な候補であるにも関わらず、その物性データについては 二酸化ウランなどと比べて十分に理解されているとは言いがたい。特に 2000K を超える高温領 域では物性データが十分でない。そこで、第一原理分子動力学法を用いて、二酸化トリウムの融 点近くでの高温挙動を解析した。

二酸化トリウムのスーパーセル(原子数 328 個)に対して、第一原理分子動力学を用いて平衡 状態での熱力学量を温度 300K から 4000K の間で評価した。エンタルピーの計算結果を図 1 に 示した。計算結果は測定値から評価された文献値をよく再現している。また、図に見られるよう に 3000K 付近で不連続な変化が見られる。これは Bredig 転移と呼ばれる現象と一致しており、 これが酸素の超イオン伝導によるものであることを計算結果の解析から明らかにした。この成果 は、論文として発表された(成果リストの文献 2)。



図1 二酸化トリウムのエンタルピー。点が計算結果で、線は文献値。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 論文発表

- 1) Hiroki Nakamura, Masahiko Machida, and Masato Kato, "First-Principles Calculation of Phonon and Schottky Heat Capacities of Plutonium Dioxide", J. Phys. Soc. Jpn. 84, 053602 (2015).
- 2) Hiroki Nakamura, Masahiko Machida, "High-temperature properties of thorium dioxide: A first-principles molecular dynamics study", J. Nucl. Mater. 478, 56 (2016).

#### 口頭発表 (国際会議)

3) Hiroki Nakamura, Masahiko Machida, "Numerical Calculations for Heat Capacity of Actinide Dioxides," The 23rd International Conference on Nuclear Engineering, 千葉, May. 17-21, 2015.

#### 口頭発表 (国内会議)

- 4) 中村博樹、町田昌彦、「第一原理分子動力学による二酸化アクチニドの高温挙動の解析」、日本原子力学会 2015 年 秋の大会、2015 年 9 月、静岡.
- 5) 中村博樹、町田昌彦、「第一原理計算による二酸化アクチニドの熱伝導率評価」、日本原子力 学会 2016 年 春の年会、2016 年 3 月、仙台.

# (4) 今後の利用予定:

今後はこれまでに開発した第一原理計算手法を用いて、熱伝導率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、機能材料物質に関する研究も行なう予定である。 5.19.9 原子カ分野における機能材料開発に資するマルチスケール・マルチフィジックス シミュレーションの基盤構築

> Construction of Foundation of Multiscale and Multiphysics Simulations for Functional Materials in the Field of Atomic Energy Research

町田 昌彦、山田 進、永井 佑紀、中村 博樹、小林 恵太、太田 幸宏、志賀 基之 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原子力分野における機能材料の研究開発を、計算科学を用いてより効率的 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とも 連携し)を選定し、解決に資するシミュレーション手法とコードを開発する一方、実課題解決に も直接取り組み、材料開発に資する学術的知見を得る。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。各具体的課題に対する目的、意義の詳細は 以下の通りである。

#### 1) 超高精度並列物性評価(自己無撞着場を用いる)コードの作成

第一原理計算を用いたシミュレーションは原子力分野及び産業界の研究開発において必須な 手段となっており、高速なシミュレーションコードの開発は今後の研究開発力を左右する重要事 項に当たる。特に、格子欠陥や不純物等の物性への影響等の現実的な課題を調べるためには、実 空間での大規模シミュレーション技術が有効であることが知られており、本課題では電子密度等 を自己無撞着に安定かつ高速に計算する上記大規模シミュレーション技術の開発を目標とする。 具体的には、様々な自己無撞着場(電子密度場、電荷密度場、スピン密度場、超伝導異常密度場) を超並列に高速に計算する技術を開発し、近年機能材料として着目されているトポロジカル超伝 導体や鉄系高温超伝導体の物性値シミュレーションを実課題として実施する。上記シミュレーシ ョンの実現により J-PARC や SPring-8 で行われる実験と比較し、超伝導発現機構等を明らかに する一方、より高い転移温度を持つ超伝導体の開発への足がかりとする。また、超高磁場を発生 させる電磁石としての利用や、使い勝手のよい電気伝導材料等への応用等に資するシミュレーシ ョンも実施する。

#### 2) 量子シミュレーションコードの大規模並列化と超伝導及び磁性材料の機能発現機構の解明

物質の性質を理解し予測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の手法を開発することが鍵となる。本課題ではこの普遍的な基本的 問題に対し、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

(DMRG)法や量子問題全般において重要な役割を果たす固有値計算法に着目する。DMRG法 に関しては、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する。その一 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。また、固有値計算法に関しては、計算機の規模の拡大に伴い問題サイズが増加 するが、サイズの増加に伴って計算精度の低下が引き起こることが知られている。この問題点を 克服するため、高速に計算できる高精度の計算方法を採用することで、高精度計算を高速に実行 することを目指した。

#### 3) 層状超伝導材料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

機能材料の研究開発に資する計算手法開発の一環として、テラヘルツ帯電磁波の高出力連続発 振を可能にする層状超伝導材料について、そのデバイス特性評価を達成する計算コードを開発す ることを目標とする。当該材料については多くの実験的知見は得られているが、その発振機構は 完全に理解されているとは言い難い。この課題を解決することは、デバイス特性の系統的予測に 繋がり、高品質材料およびデバイス開発の礎になると期待される。問題解決を困難にする原因と しては、(1)材料内の光の空間スケールと真空中のそれの間に大きなギャップが存在すること(イ ンピーダンス不整合)、(2)発振特性に超伝導ダイナミックスだけでなく熱輸送が寄与し、熱的タ イムスケールと超伝導タイムスケールの大きなギャップが存在することが挙げられる。そこで、 昨年度までに開発された計算コードを発展させ、空間および時間領域について、大きく異なるス ケールを扱うための超並列マルチスケール計算手法を開発し、実験状況に限りなく近い設定での シミュレーション達成を目指す。得られる成果は層状超伝導材料のテラヘルツ発振デバイスに関 する特性を明らかにし、その優位性を顕在化させることにつながるだけでなく、熱輸送が重要に なる他の超伝導デバイス(放射線検出器など)への応用も期待される。

#### 4) 三重水素水溶液系の第一原理分子動力学計算

東京電力(株)福島第一原子力発電所の事故後、放射性三重水素水(トリチウム水)の与える 環境影響が懸念されており、安全性・経済性の観点からは、可能な限り除去すべきと考えられる が、有効な手段が存在していない。そこで本研究課題では、トリチウム水の選択的除去を目標と して新たな分離方法の開発に資するため、その鍵となる基礎研究課題として、トリチウム水の物 性を評価する計算科学研究を行う。三重水素水は、水素同位体である三重水素(トリチウム)を 含む水であり、拡散係数や比熱などの熱物性において、軽水(通常の水)とは異なっているもの と考えられるが、詳細な実験データがなく、様々な状況での挙動を高精度に予測するのが困難で ある。そこで、本課題では超並列計算機を用いて、三重水素水の第一原理分子動力学シミュレー ションを行い、その熱物性を解析するとともに、水素結合構造などの微視的性質を解明すること を目的とする。

#### (2) 利用内容·結果:

#### 1) 超高精度超並列物性評価(自己無撞着場を用いる)コードの作成

自己無撞着場を用い、トポロジカル超伝導体における核磁気緩和率の温度依存性を調べる超並 列計算コードを開発した。本コードを用いて、トポロジカル超伝導体の核磁気緩和率が超伝導転 移温度直下で今までの超伝導体とは全く異なる非自明な温度依存性を示すことを明らかにした。 その結果、合成された超伝導体がトポロジカル超伝導体であるかどうかを調べる新しい有力な手 法を提案できることが判明したため、本研究に関する研究成果は Physical Review B の Rapid communication に採択されている。

# 2) 量子シミュレーションコードの大規模並列化と超伝導及び磁性材料の機能発現機構の解明

並列化された DMRG コードを用いて、ダイアモンド鎖模型に対する解析を行った。この系で は電子相関の影響により、1/3 フィリングにおいて金属・絶縁体転移が引き起こされることを示 した。更に 1/3 フィリング近傍において超伝導相関関数が発達することを予言する等、新しいタ イプの超伝導実現の可能性を明らかにした。尚、高精度の固有値計算を実現するため、コードを Bailey のアルゴリズムを用いて 4 倍精度化し、さらに、大規模計算機を想定した並列化を実施 した。これによって、高精度計算が可能になると共に、数千コアでの並列計算においても並列化 の効果を得ることが可能となった。この結果は他の分野のシミュレーションにも適用できる汎用 的成果であり、大規模並列計算機の計算資源の有効利用に資する成果である。

# 3) 層状超伝導材料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

これまでに開発された計算コードを発展させ、空間および時間領域について、大きく異なるスケールを扱うための超並列マルチスケール計算手法の開発を行った。その際、新しく導入されるスーパーコンピュータ SGI ICE X への最適化を目指すためのコード整備を完了した。

# 4) 三重水素水溶液系の第一原理分子動力学計算

東京電力(株)福島第一原子力発電所の事故後、放射性三重水素水(トリチウム水)の与える 環境影響が懸念されており、安全性の観点から可能な限り除去すべきであるが、有効な手段が存 在していない現状がある。そこで本研究では、トリチウム水の選択的除去を目標として新たな分 離方法の開発を目標とし、その鍵となる機能材料を見いだすための基礎物性の知見を得るためト リチウム水の物性を評価する計算科学研究を実施した。三重水素水は、水素同位体である三重水 素(トリチウム)を含む水であり、拡散係数や比熱などの熱物性において、軽水(通常の水)と は異なっているものと考えられるが、詳細な実験データがない。そこで、本年度は、超並列計算 機を用いて、三重水素水の第一原理分子動力学シミュレーションを行い、その熱物性を解析する とともに、水素結合構造などの微視的性質を解明した。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 論文(査読付き)

- 1) <u>Susumu Yamada</u>, Akihiro Kitamura, Hiroshi Kurikami, and, <u>Masahiko Machida</u>, *"High performance simulation for sediment transport on rivers on Fukushima area: Parallelization of 2D river simulation code Nays2D"*, Proc. of M&C+SNA+MC 2015, CD-ROM, 2015.
- 2) <u>Susumu Yamada</u>, Toshiyuki Imamura, <u>Masahiko Machida</u>, *"High Performance Eigenvalue Solver in Exact Diagonalization Method for Hubbard model on CUDA GPU"*, Parallel Computing: On the Road to Exascale, IOS Press, 361-369 (2016).
- 3) Tomohiro Honda, Yusuke Minoshima, Yuki Yokoi, Toshiyuki Takayanagi and <u>Motoyuki</u> <u>Shiga</u>, "Semiclassical dynamics of electron attachment to guanine-cytocine base pair", Chem. Phys. Lett. 625, 174-178 (2015).
- 4) <u>Motoyuki Shiga</u> and Marco Masia, "Quasi-boundary based on Exchange Symmetry Theory for Multilevel Simulations" *Mol. Simul.* 41, 827-831 (2015).
- 5) Sergi Ruiz-Barragan, Kazuya Ishimura and Motoyuki Shiga, "On the hierarchical

parallelization of ab initio simulations", Chem. Phys. Lett. 646,130-135 (2016).

- 6) A. Shitade and <u>Y. Nagai</u>, "Orbital angular momentum in a nonchiral topological superconductor", Phys. Rev. B,92, 024502 (2015).
- 7) <u>Y. Nagai, Y. Ota</u> and <u>M. Machida</u>, "Inverse coherence effects in nuclear magnetic relaxation rates as a sign of topological superconductivity", Phys. Rev. B,92, 180502(R) (2015).
- 8) <u>Y. Nagai</u>, H. Nakamura, <u>M. Machida</u>, and K. Kuroki, "First-principle study of antimony doping effects on the iron-based superconductor CaFe(Sb<sub>x</sub>As<sub>1-x</sub>)<sub>2</sub>", J. Phys. Soc. Jpn. 84, 093702 (2015).
- 9) <u>Y. Ota, Y. Nagai</u> and <u>M. Machida</u>, "Theory of low-energy behaviors in topological s-wave pairing superconductors", Physica C 518,5 (2015).
- N. Murai, T. Fukuda, T. Kobayashi, M. Nakajima, H. Uchiyama, D.Ishikawa, S. Tsutsui, <u>H. Nakamura</u>, <u>M. Machida</u>, S. Miyasaka, S. Tajima, and A. Q. R. Baron,"Effect of magnetism on lattice dynamics in SrFe2As2 using high-resolution inelastic x-ray scattering", Phys. Rev. B 93, 020301(R) (2015).
- 11) K Ikeuchi, Y Kobayashi, K Suzuki, M Itoh, R Kajimoto, P Bourges, A D Christianson, <u>H</u> <u>Nakamura, M Machida</u> and M Sato, "Phonons of Fe-based superconductor Ca10Pt4As8(Fe1-x Pt x As)10", J. Phys.: Condens. Matter, 2015, 27, 465701.
- 12) <u>Masahiko Machida, Hiroki Nakamura</u>, Sriram Srinivasan, Adri Van Duin, "Comparative Molecular Simulation Studies of Oxidation Reactions and Hydrogen Release for Zirconium Metals and Silicon Carbide under Severe Accident Conditions", Proceedings of 23rd International Conference on Nuclear Engineering(ICONE-23) (DVD-ROM), 2015.
- 13) <u>Y. Nagai and H. Nakamura</u>, "Multi-band Eilenberger theory of superconductivity: Systematic low-energy projection", J. Phys. Soc. Jpn. 85, 074707 (2016).
- 14) A. Shitade and <u>Y. Nagai</u>, "Orbital angular momentum in a topological superconductor with high Chern number", Phys. Rev. B 93, 174517 (2016).

#### 招待講演

- 15) Sergi Ruiz-Barragan, K. Ishimura, M. Shiga, "TBA", 5th International Workshop on Massively Parallel Programming Now in Quantum Chemistry and Physics - Toward Exascale Computing, (2015/11/26), University of Tokyo, Hongo (招待講演).
- 16) 志賀基之、"分子系におけるレアイベントの概念・理論・応用計算", 第1回 津田沼 RBK フ ォーラム:分子科学におけるレアイベント, (2015/7/11), 千葉工業大学津田沼キャンパス (招待講演).

#### (4) 今後の利用予定:

平成28年度は、以下の項目の研究を実施する予定である。

- ① 三重水素の蒸発熱等の評価と水の構造における量子論に基づく同位体効果の研究
- ② 量子シミュレータとして強相関電子系の基底状態及び励起状態を計算するコードの研究開発
   ③ 超伝導を初めとする有用な機能発現を予測可能とするシミュレーションコードの研究開発

# 5.19.10 照射材料の微細構造発達シミュレーションのための第一原理計算

#### First Principles Calculations for Microstructural Evolution of Irradiated Materials

鈴土知明シミュレーション技術開発室

#### (1) 利用目的:

様々な原子力構造材料において脆化・スウェリング等のいわゆる材料劣化が問題となる。この ような構造材料劣化のメカニズムは非常に複雑で、第一原理計算、分子動力学、キネティックモ ンテカルロ法、速度論方程式などを有機的にリンクさせたマルチスケールモデリング手法によっ て行うのが有効とされている。

申請者らはこれまで、このような複数の手法を最適な組み合わせで用いて、構造材料の劣化の モデリングを長年行ってきた。しかしながら、予測モデリング研究はまだ十分とは言えない。そ の大きな原因の一つが、照射や熱時効によって生じる原子レベルの素課程がこれまでの実験研究 や計算科学研究によって正確に理解されていないことが挙げられる。

本課題では、現行の軽水炉や次世代炉で使用される構造材料で起こる原子論的変化の素課程で 材料劣化に影響を与えるものに注目し、第一原理による精度の高いモデリングを行うことによ り、メソレベル手法による脆化モデリングの基礎データを得ることを目的とする。

#### (2) 利用内容·結果:

軽水炉圧力容器のオーバーレイクラッディング用鋳造ス テンレス鋼ではフェライト部において熱時効により Cr が スピノーダル分解を起こす。スピノーダル分解が起きると 転位と Cr 相が反発する (図 1) ため延性が低下し脆化を引 き起こすことが知られており 475℃で最も脆化するため 475℃脆性とも呼ばれている。これまで実験観察によって、 スピノーダル分解の統計的パラメータが硬化度に比例する ことが示されてきたが、我々はこの現象をはじめて分子動 力学を用いて原子レベルで再現することに成功した。

金属材料の粒界に He が集まると強度が低下することが 知られているが、He が粒界で平面的に分布するのではなく 凝集する場合には粒界バブルができて粒界強度が変わるこ とが指摘されていた。照射耐性の強く原子力材料として使



 図1 FeCr 合金でスピノーダル 分解が起きると刃状転位
 と Cr 相が反発するため、
 材料は変形しにくくなる。

用されることが多い bcc 遷移金属のなかでは、Fe においてはそのような傾向にあることが指摘 されていた。今回すべての bcc 金属(V, Cr, Nb, Mo, Ta, W)について同様の解析を行った。そ の結果、He のクラスター化は Fe 特有の現象であることがわかり、Fe 以外の金属では粒界に沿 って平面的に He が分布し粒界バブルが形成されにくいことがわかった。

現行軽水炉圧力容器鋼の脆化に関して、NiSiMn クラスター形成から相変化することにより転 位の介在物となるという説が有力である。よってその相変化を精度良く予測することが重要とな る。最近、東北大学金属材料研究所では、NiSiMn クラスターが G 相に相転移する前段階に Si の半数が Fe で置き換わった中間状態が まず形成されて、その後純粋な G 相が 形成されるという新しい仮説を出した が、その理論的な証拠がなかった。そ こで上記の中間状態が理論的に安定に 存在できることを第一原理計算で明ら かにした。図 2 はそこで用いたスーパ ーセルである。

核融合炉ではタングステン材が有望 なプラズマ対向材料として注目されて いるが、タングステン中のレニウムや オスミウムが照射誘起析出して硬化の 原因となることが知られている。これ



図 2 第一原理計算に用いたスーパーセル: (a) G 相,
 (b) t Si の半数が Fe で置き換わった中間状態.
 図では、緑、青、紫、黄色の球がそれぞれ Ni, Si,
 Fe and Mn 原子を表している。

までの解析から、タングステン内でレニウムやオスミウムの格子間原子はタングステン原子とペ アを作りながら3次元運動することがわかっていたが、新たに運動学的なモデリングを行うこと により溶質原子の拡散係数を求めた。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) K. Nordlund, A.E. Sand, F. Granberg, S.J. Zinkle, R. Stoller, R.S. Averbeck, <u>T. Suzudo</u>, 他 6 名, "Primary radiation damage in materials", NEA/NSC/DOC 9 (2015).
- 2) T. Suzudo, M. Yamaguchi, "Simulation of He embrittlement at grain boundaries in bcc transition metals", J. Nucl. Mater. 465 (2015) pp.695-701.
- 3) T. Suzudo, Y. Nagai, A. Caro, D. Schwen, "Hardening in thermally-aged Fe-Cr binary alloys: Statistical parameters of atomistic configuration", Acta Materialia 89 (2015) pp.116-122.
- 4) T. Suzudo, M. Yamaguchi, A. Hasegawa, "Migration of rhenium and osmium interstitials in tungsten", J. Nucl. Mater. 467 (2015) pp.418-423.
- 5) Y. Matsukawa, T. Takeuchi, Y. Kakubo, T. Suzudo, H. Watanabe, H. Abe, T. Toyama, Y. Nagai, "Two-step nucleation of G-phase in ferrite", Acta Materialia 116 (2016) pp.104-113.
- 6) T. Suzudo, A. Hasegawa, "Suppression of radiation-induced point defects by rhenium and osmium interstitials in tungsten", Scientific Reports 6 (2016) pp.36738.

#### (4) 今後の利用予定:

平成28年度は、タングステン材の溶質元素に関する第一原理計算を継続して行っていき、どのようなタングステン合金が核融合プラズマ対向材料として最適かを探索していく。また鉄鋼材の不純物挙動に関する第一原理計算を継続して行っていき、圧力容器の照射・熱時効による脆化 予測に必要なデータの取得を行う。また、転位と介在物との相互作用を1千万原子数を超える大 規模な分子動力学シミュレーションで行っていき、実験で得られる硬さ測定に計算機がどこまで 肉薄できるかを調査する。

# 5.19.11 電子状態計算による有機低分子のセシウム吸着サイト全探索

A Two-step Structural Search with Semiempirical Methods: An Application to Detecting Cesium Binding Cites

太田 幸宏シミュレーション技術開発室

#### (1) 利用目的:

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、機能材料探索およびデバイス 開発に資するシミュレーション研究を行っている。平成27年度は、(i)前年度(平成26年度) までに開発した銅酸化物高温超伝導体固有ジョセフソン接合における電磁波発振コードの拡張、 (ii)電子状態計算を利用した材料・低分子における放射性セシウム吸着サイト探索、の2課題に 取り組んだ。この中で、課題(i)については、デバイスにおける熱伝導の寄与を取り入れる等、計 算モデルの大幅な改変が要求されたため、計算コード整備に集中した。課題(ii)については、福 島原発事故関連の研究課題として実施された。本稿では、その成果を中心に報告する。

福島第一原子力発電所の事故以降、原子力機構では福島の環境回復に向け、様々な研究開発が 実施されている。当室では、電子状態計算に基づき、事故由来放射性セシウムの高効率・易減容 な除染法の確立に貢献する基盤研究を実施している。特に、粘土鉱物に代表される無機化合物に おいて、そのセシウム吸脱着機構に関する原子・分子レベルの研究は進められ、多くの知見が得 られている。一方、土壌有機物あるいは森林生産物(樹木、キノコ等)と関わる有機化合物にお いて、そのセシウム吸脱着機構は、原子・分子レベルでは十分に検討されていなかった。こうし た有機化合物は、放射性セシウムの森林長期動態の理解と深く関わる。また、森林生産物を通し て住民の日常生活・経済活動へも影響を与え得る。そこで、多様な有機化合物を対象とし、その セシウム吸脱着機構を明らかにする計算手法構築を目的とした。特に、土壌および森林有機物に おけるセシウム吸脱着を調べる上での大きな課題であったセシウム吸着サイトの網羅的な探索 を可能にすべく、化学反応経路探索に基づく手法を提案した(図 1)。

#### (2) 利用内容•結果:

系統的な化学反応経路探索は多彩な応用に繋がるため、その実装に向け様々な計算手法が研究 されている。その中で、Global reaction route mapping (GRRM) [1,2] は自動探索手法として注 目を集め、多くの事例に適用されている。

本研究で対象とする有機化合物は、中・大規模分子系と見なされる。すなわち、反応経路自動 探索の低コスト化・効率化は重要な課題となる。そこで、two-step structural search による吸 着サイトの網羅的探索法を提案した。 すなわち、(a) 半経験的分子軌道法 MOPAC [3,4] と GRRM を組み合わせて低レベル計算による自動探索を実行し、(b) 得られた吸着サイト候補をよ り高レベルな計算手法で再最適化する。こうして、網羅的かつ高精度な吸着サイト探索が可能と なる。本研究において、大型計算機(BX900)が利用されたのはステップ(b)についてである。 計算コードは Gaussian 09 [5]であり、ノード内 8 プロセス並列で実行された。

適用事例として、樹皮の主成分であるセルロース (C<sub>6</sub>H<sub>10</sub>O<sub>5</sub>)n に関する結果を説明する。モノ マー (n=1) とダイマー (n=2) におけるカチオンの吸着サイト全探索を実施した。ステップ(a) において、分子のエネルギー及び勾配は PM6 レベルで計算された。カチオン吸着サイト探索を 反応経路探索へ対応させるため、MC-AFIR 法が採用された。すなわち、分子およびカチオンを reactant とみなし、それらの間に反応誘起のための人工力が付与され、product として分子・カ チオンの複合体が生成される。全探索では、初期構造はランダムに生成された。探索終了の基準 を、同一反応経路が見つけ出される回数で指定した。MOPAC による探索後、ステップ(b)とし て、得られた構造を初期構造とし密度汎関数法 (B3LYP/LanL2DZ) による再最適化が行われた。 結果、カチオンが水酸基およびエーテル結合由来の O により挟まれた構造が安定構造の候補と なり、さらに密度汎関数法 (B3LYP/LanL2DZ) による再最適化により、こうした構造が最安定 構造であることが最終的に確認された (図 2)。こうして、低レベル計算の MOPAC を用いて段 階的定構造を絞り込むことで、密度汎関数法 (あるいは、ab initio 法) を直接用いるよりも計算 効率が良くなることが期待される。

- [1] S. Maeda et al., see http://grrm.chem.tohoku.ac.jp/GRRM (11 Apr. 2014).
- [2] S. Maeda, K. Ohno, K. Morokuma, Phys. Chem. Chem. Phys., 15, 3683 (2013).
- [3] MOPAC2012, J, J. P. Stewart, Stewart Computational Chemistry, Version 15.180L.
- [4] J. D. C. Maia et al., J. Chem. Theory Comput. 8, 3072-3081 (2012).
- [5] M.J. Frisch et al., Gaussian 09, Revision C.01, Gaussian, Inc., Wallingford, CT, 2010.

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 原著論文

1) Yukihiro Ota, Sergi Ruiz-Barragan, Masahiko Machida, and Motoyuki Shiga, "A screened automated structural search with semiempirical methods," Chemical Physics Letters 648 (2016) pp.119-123.

#### 学会発表

- 2) 太田幸宏, S. Ruiz-Barragan, 町田昌彦, 志賀基之, 「半経験的分子軌道法を利用した有機分 子におけるイオン吸着サイトの全探索」第 29 回分子シミュレーション討論会(新潟, 2015 年 11 月).
- 太田幸宏, S. Ruiz-Barragan,町田昌彦,志賀基之,「半経験論分子軌道法を利用した反応経路自動探索ツールの開発」化学反応経路探索のニューフロンティア 2015 (SRPS 2015)(東京, 2015 年9月).

# (4) 今後の利用予定:

今後の利用予定はない。



図1 提案手法の概念図



図2 セルロース (モノマー) におけるカチオン吸着サイト全探索結果

# 5.19.12 核融合プラズマ閉じ込め特性の水素同位体効果

# Hydrogen Isotope Effects on the Confinement of Fusion Plasmas

井戸村 泰宏 高度計算機技術開発室

#### (1) 利用目的:

これまでの JT-60 実験において、炉心プラズマの閉じ込め性能の水素同位体質量依存性が観測 されており、重水素プラズマは水素プラズマに比べて大幅に閉じ込め性能が改善することがわか っている。このプラズマ乱流の同位体効果は重水素と三重水素を燃料として核燃焼プラズマ実験 を行う ITER の性能予測を行う上で、非常に重要な問題になっている。しかしながら、同位体効 果は、長年、理論的に未解明の問題となってきた。輸送障壁のない標準的なプラズマの場合には 閉じ込め性能の指標を示すエネルギー閉じ込め時間 (プラズマが保持するエネルギーが散逸する 特性時間)のスケーリングとして、 $\tau_{\rm E}$ ~M<sup>1.67</sup> $\rho^{*.1.85}$ ~M<sup>0.75</sup>という依存性が得られている。ここで、 M はイオンの規格化質量、 $\rho^*= \rho_i/a$ はプラズマ半径 a で規格化したイオン軌道半径  $\rho_i$ ~M<sup>0.5</sup>を示 す。このスケーリングによると、同じ磁場、温度の水素プラズマ (M=1)と重水素プラズマ (M=2) では閉じ込め時間の比率が  $\tau_{\rm ED}/\tau_{\rm EH}$ ~1.7 となり、三重水素プラズマ (M=3)では更なる閉じ込め 性能の向上が予測される。一方、古典的な局所拡散理論では、実験的に観測される乱流相関長  $\Delta r \sim \rho_i$ 、乱流相関時間  $\Delta t \sim c_s/a$  を用いてランダムウォークを仮定することにより  $\tau_{\rm GB}$ ~M $\rho^{*.3}$ ~M<sup>0.5</sup> という閉じ込め時間が導かれ、実験データのスケーリングとは逆に水素プラズマが最も閉じ込め 性能が良いという同位体依存性が導かれる。ここで、 $c_s$ は音速を示す。

この課題に関して、最近の第一原理プラズマ乱流シミュレーションでようやく部分的な理解が 得られつつある。局所拡散理論と実験データのスケーリングの比は TE/TGB~M<sup>0.67</sup>0\*1.15 となり、実 験と理論の乖離はプラズマ半径(装置サイズ)に対する粒子軌道(乱流相関長)の比であるρ\* にほぼ比例する。このことは、ランダムウォークによる局所拡散では説明できない非局所輸送現 象が存在し、乱流輸送特性が装置サイズに依存することを示唆している。実際に、「京」でイオ ン乱流の装置サイズ依存性を調べた数値実験では、高温の炉心プラズマから低温の周辺プラズマ へ雪崩的に熱流束が伝搬することで非局所輸送現象が発生し、イオン乱流の閉じ込め時間に関し て tion/tGB~ρ\*というスケーリングが得られることがわかった[Idomura-Nakata, Phys. Plasmas 2014]。この知見に加えて M<sup>0.67</sup> という同位体質量依存性を説明するために電子乱流(捕捉電子 モード乱流)を含む乱流計算を実施する。これまで、GT5D では電子については断熱的応答を仮 定するイオン乱流のみの数値実験が行われてきた。この計算モデルを ρi および cs で規格化する と方程式系は M に陽に依存せず ρ\*依存性しか現れないため、同位体質量効果を説明することが 難しかったが、電子乱流を含めた計算モデルを採用することで、電子とイオンの質量比が新たな 規格化定数となり M 依存性を陽に含む数値実験が可能になる。しかしながら、高速電子を含む シミュレーションは従来のイオン乱流のみの数値実験の約 10 倍の計算コストになるため、 BX900 では数値実験を実施することが難しかった。そこで、平成27 年度に導入した ICEX を活 用して、電子乱流を含む数値実験を実現し、同位体効果の理論的解明を目指す。

#### (2) 利用内容·結果:

#### ① 電子乱流を含む数値実験における乱流輸送特性評価

昨年度までに、GT5D に多種粒子衝突項や線形計算用の運動論的電子モデルの実装を行い、イ オン-電子系の衝突性輸送理論の検証や電子乱流(捕捉電子モード)の線形解析の検証を行って きた。これに加えて、今年度は非線形計算用のハイブリッド電子モデルを新たに開発し、非線形 乱流計算においてその妥当性を検証した。

電子軌道はトーラス外側の弱磁場領域に捕捉される捕捉電子とトーラスを周回する通過電子 に分類される。捕捉電子は解析対象の捕捉電子モードを励起するのに対し、通過電子は解析対象 外の高周波ノイズを励起するため、捕捉電子のみを計算するモデルが望ましい。一方、衝突性輸 送の計算においては、捕捉電子と通過電子の相互作用を厳密に取り扱う必要がある。非線形乱流 計算ではこの2つの要求を両立するために、ジャイロ運動論方程式系において乱流場を決定する ポアソン方程式の非軸対称成分では捕捉電子応答を用い、それ以外の部分では捕捉電子と通過電 子の両方を計算するハイブリッド電子モデルを構築した。

この運動論的電子モデルを用いてイオン温度勾配駆動乱流の数値実験を実施し、計算結果の数 値的な収束性や基礎的な保存則の検証を実施した。ここで、計算結果の数値的な収束性の検証を 加速するために、昨年度に開発した格子解像度の適応制御機能を活用した。また、従来の断熱的 電子モデルとの計算結果の比較から、運動論的電子がもたらす基礎的な乱流輸送特性として、以 下の知見が得られた。

- 1) 粒子輸送の無い断熱的電子モデルの場合には、乱流場のレイノルズ応力によって駆動される帯状流が主要な乱流飽和機構だったのに対し、運動論的電子モデルの場合には、モード共鳴面において共鳴条件を満たす通過電子の局所的な粒子輸送によって波状(階段状)の密度分布が形成され、これによって生成される微視的な電場によるシア流が新たな乱流飽和機構を与える。
- 2) トロイダル角運動量保存則において、トロイダル電場と密度揺動の位相差によって決まる トロイダル電場応力の寄与が運動論的電子モデルでは大きく変化し、運動量の乱流輸送に よって形成されるプラズマ回転分布の符号が断熱的電子モデルの場合と比べて反転する。
- 3) イオン温度分布に関しては、どちらの電子モデルもほぼ同じ温度勾配を与えるが、電子温度分布に関しては運動論的電子モデルで密度分布と同様の波状の分布が形成される。

#### ② 閉じ込めスケーリングの同位体効果の研究

JT-60 実験で観測された同位体依存性の理解を目指して水素プラズマと重水素プラズマの数 値実験を実施した。まず、従来の断熱的電子モデルの数値実験からイオン乱流のエネルギー閉じ 込め時間を評価し、 $\tau_{GT5D}$ ~ $M^{1.05}\rho^{*-2.29}$ ~ $M^{0.095}$ というスケーリングを得た。前述の実験的なスケー リング  $\tau_{E}$ ~ $M^{1.67}\rho^{*-1.85}$ ~ $M^{0.75}$ と比較すると、理論的に予測されたとおり、 $\rho^*$ 依存性はある程度再 現できているが、M 依存性が弱いことがわかった。この M 依存性の問題を解決するために、新 スパコン上で運動論的電子モデルを用いた数値実験を実施した(図 1)。この数値実験では、従 来の断熱的電子モデルの計算との比較を行うために、サイクロンケースと呼ばれるベンチマーク 用プラズマパラメータでイオン系のみを加熱する条件を用いた。しかしながら、この数値実験条 件ではイオン乱流が支配的と なり、M 依存性に敏感な電子 乱流の影響が小さくなったた め、エネルギー閉じ込め時間 のスケーリングは断熱的電子 モデルとほぼ同様の傾向を示 し、実験的に観測されている M 依存性を再現することはで きなかった。このことから、 M 依存性を再現するには実験 と同様に電子系の加熱も含む 条件で数値実験を実施する必 要があることがわかった。



図1 運動論的電子モデルを用いて実施した同じ装置サイズ の(a)重水素プラズマと(b)水素プラズマの数値実験で 観測したトーラス断面上の乱流場の静電ポテンシャル

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

# 論文

- 1) Y. Idomura, "Saturation mechanism of decaying ion temperature gradient driven turbulence with kinetic electrons", Plasma Fusion Res. 11, 2403006 (2016).
- 2) Y. Idomura, "A new hybrid kinetic electron model for full-f gyrokinetic simulations", J. Comput. Phys. 313, 511-531 (2016).

# 国際会議

- 3) Y. Idomura, "Full-f gyrokinetic simulation including kinetic electrons", 15th H-mode workshop, 19-21 October 2015, Garching, Germany (poster).
- 4) Y. Idomura, "Saturation mechanism of ion temperature gradient driven trapped electron mode turbulence", 25th International Toki Conference (ITC-25), 3-6 November 2015, Toki, Japan (poster).
- 5) Y. Idomura, "Full-f gyrokinetic simulations at the Exa-scale", US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on Innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing, 20-21 August 2015, Nagoya, Japan (oral).
- Y. Idomura, "Testing momentum transport theories on full-f gyrokinetic simulations", 15th Transport and Confinement Topical Group Meeting, 22-23 October 2015, Garching, Germany (oral).

# (4) 今後の利用予定:

今年度に実施した数値実験の結果、サイクロンケースでイオン加熱のみを与えた場合には、同 位体質量依存性を再現できないことがわかった。同位体質量効果を含めて同位体効果を完全に再 現するには、電子加熱を含め、加熱分布等についても実験条件で解析を行う必要があるため、今 後は、実験条件を用いた数値実験を実施し、同位体効果の検証を進める。

# 5.19.13 電子温度勾配駆動乱流における自己組織化のプラズマパラメータ依存性

# Impact of Plasma Parameter on Self-organization of Electron Temperature Gradient Driven Turbulence

河合 智賀\*1,+1、井戸村 泰宏+1 +1 高度計算機技術開発室、\*1 東京大学新領域創成科学研究科

#### (1) 利用目的:

電子温度勾配駆動(ETG) 乱流は電子温度勾配によって駆動される電子軌道半径スケール (~0.1mm)の微視的な電子乱流であり、核融合プラズマにおける電子熱輸送の主要な要因の一 つと考えられている。ETG 乱流は、特に、イオン軌道半径スケール(~5mm)の乱流が、強い E×Bシア流によって安定化されていると考えられる輸送障壁、あるいは、低アスペクト比の球 状トーラス実験における電子熱輸送を説明する機構として注目されているが、ストリーマや帯状 流といった多彩な乱流構造を示すことからプラズマ乱流理論の観点からも注目されている。

安全係数と呼ばれる磁力線のピッチがプラズマ半径方向に単調に増大する正磁気シア磁場領 域においては、トーラス幾何効果がもたらすモード結合によってストリーマとよばれるプラズマ 半径方向に伸びた渦構造が形成され、熱輸送が増大する。一方、反転磁気シアトカマクにおける 安全係数の極小領域等、磁力線のピッチがほぼ一定となるゼロ磁気シア領域では、トーラス幾何 効果によるモード結合が弱まり、単一ヘリシティのスラブ配位に近い乱流構造が形成される。こ のようなスラブ ETG 乱流では、しばしば磁気面、あるいは、プラズマ等圧面に沿った帯状流が 形成される。帯状流、および、それを形成する径電場の向きは微視的なスケールで空間的に反転 したシア流となっており、シア流による乱流渦の剪断効果が乱流輸送を抑制する。

これまで、ETG 乱流における帯状流の生成機構はポンプ波によって駆動される変調不安定性 やストリーマの渦構造に沿ったプラズマ半径方向シア流に起因する Kelvin-Helmholtz (K-H) 不安定性が議論されてきた。一方、このような 2 次的不安定性とは別の観点から帯状流の生成・ 飽和を記述する機構として、準 2 次元的な ETG 乱流の自己組織化現象が示された[Idomura, Phys. Plasmas 2006]。この自己組織化現象は Hasegawa-Mima (H-M) 方程式によって記述さ れるが、数学的には惑星大気の Rossby 波乱流を記述する Charney 方程式と同じ問題となって おり、惑星大気の帯状流、あるいは、ジェットと共通の機構をもつ。

2次元乱流はエネルギーとエンストロフィーという2つの保存則をもち、その非線形ダイナミ クスはエネルギー逆カスケードとエンストロフィー準カスケードを伴う双方向カスケードによ って特徴づけられ、微視的な乱流から大きな流れ構造を形成する。一方、プラズマや惑星大気の ような回転流体ではドリフト波、あるいは、Rossby 波という分散を伴う線形波が存在し、相対 的に非線形効果が弱まる長波長領域では、線形波の分散がエネルギー逆カスケードによる構造形 成を阻害する。この2つの競合する効果がバランスする境界波数は Rhines スケールと呼ばれ、 自己組織化によって形成される構造の特徴的スケールを与える。本研究では Rhines スケールの プラズマパラメータ依存性に着目し、密度勾配や温度勾配といった巨視的なプラズマパラメータ の違いによる乱流構造の変化を第一原理プラズマ乱流シミュレーションによって調べる。

#### (2) 利用内容·結果:

本研究ではジャイロ運動論モデルに基づくプラズマ乱流コード G5D [Idomura et al., J. Comput. Phys. 2007] を用いてシングルヘリシティのスラブ配位における電子プラズマの第一 原理乱流計算を実施し、減衰乱流や ETG 乱流の乱流構造を観測した。まず、プラズマ乱流の自 己組織化現象の存在を確認するために、温度勾配の無い線形安定な電子プラズマにランダムな初 期ノイズを与えて乱流カスケードによる自己組織化過程を観察する減衰乱流シミュレーション を実施した。H-M 方程式において線形項と非線形項をバランスさせると、Rhines スケールは k。  $\propto L_n \cdot L^2 U \cdot L^2$ というスケーリングを与える。ここで、 $L_n = |n/\nabla n|$ は線形項、あるいは、反磁性プ ラズマ回転の大きさを特徴づける密度 n の勾配特性長を示し、U は非線形項の大きさを特徴づけ る乱流場の二乗平均速度を示す。このスケーリングを検証するために密度勾配パラメータの異な る複数の減衰乱流シミュレーションを実施し、その緩和状態において観測された帯状流の波数か ら Rhines スケールと同様の Ln 依存性を確認した(図1参照)。



図1 減衰電子乱流シミュレーションで観測した帯状流の 密度勾配依存性と Rhines スケール

次に温度勾配を与えて ETG 乱流シミュレーションを実施した。減衰乱流シミュレーションとの大きな違いは、減衰乱流では乱流場のエネルギーが短波長領域にランダムな初期条件で設定されるのに対し、ETG 乱流では Landau 共鳴等の運動論的効果によって不安定化する ETG モードによって無撞着にエネルギー注入が記述されることである。このため、温度勾配パラメータによる U の変化、あるいは、ETG モードの不安定波数と Rhines スケールの関係等が重要な検討項目となる。図 2 に示すように、ETG 乱流では温度勾配パラメータの違いによって、乱流構造が大きく変化することがわかった。温度勾配が小さい場合には ETG 乱流が弱く、U が小さいため

Rhines スケールと ETG モードの不安定領域が比較的近く、等圧面に沿った帯状流を伴う非等方 な乱流構造が形成された。一方、温度勾配が大きい場合には ETG 乱流が強く、U が大きくなる ため Rhines スケールが長波長領域にシフトする。このため、ETG モードの不安定領域付近では 等方的な乱流構造が卓越し、乱流輸送が増大する。ここで、図 2 の(a)と(b)では ETG モードの成 長率の比は約 5 倍となり、準線形理論による評価では同程度の輸送係数の増加が見込まれるのに 対し、観測された乱流輸送係数の比は約 20 倍となっており、乱流輸送係数を決める機構として 非線形の自己組織化現象による乱流構造形成が大きな役割を果すことがわかった。



図 2 2種類の温度勾配パラメータ(a)L<sub>T</sub>=L<sub>n</sub>/2.85、(b)L<sub>T</sub>=L<sub>n</sub>/5 における ETG 乱流の構造。
 (a)では帯状流が卓越し、乱流輸送係数が(b)の約 1/20 に抑制される。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 学会発表

- 1) 河合智賀、井戸村泰宏、前山伸也、小川雄一、"電子乱流スペクトルのジャイロ運動論的シ ミュレーション"、日本物理学会 2015 年秋季大会、2015 年 9 月 16~19 日、大阪(oral).
- 2) 河合智賀、井戸村泰宏、前山伸也、小川雄一、"電子乱流スペクトルのジャイロ運動論的シ ミュレーション"、第32回プラズマ・核融合学会、2015年11月24~27日、名古屋(poster).

#### (4) 今後の利用予定:

本研究により ETG 乱流の乱流構造が巨視的なプラズマパラメータによって大きく変化し、そ れがプラズマ閉じ込め特性を左右することが明らかになった。今回は H-M 方程式に比較的近い 解析対象としてスラブ配位の ETG 乱流における自己組織化現象のシミュレーション研究を実施 したが、今後の課題としてトロイダル配位の ETG 乱流やイオン系乱流における乱流構造や流れ の形成機構に関するシミュレーション研究を進める。

# 5.19.14 組立構造物シミュレーション結果の分散並列可視化

# Parallel Visualization for Distributed Simulation Result of Structure Assembly

郭 智宏 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。

これらの研究開発により、複雑かつ大規模な原子力施設構造の振動シミュレーションを実現す るための大規模並列シミュレーションは可能となった。一方、このような詳細解析を実施するこ とで、膨大な量の解析結果データが分散的に出力される。これらの解析結果データの量は非常に 大きくなるため、過大な処理時間やメモリの使用量を必要とし、可視化処理自体が困難になる場 合がある。

今般、今後ますます大規模な振動シミュレーションが実施されることを鑑み、組立構造解析コ ード FIESTA のポスト処理ツールとして、ICE X 環境において並列汎用可視化ツール・ AVS/Express\_PCE (Parallel Cluster Edition、以下 PCE と称する)を利用した分散並列可視 化アプリケーションを開発した。開発したアプリケーションの実構造物への適用実験として、機 構内の高温工学試験研究炉 (HTTR)機器構造モデルを用いた数値実験を実施したので、ここに 報告する。

#### (2) 利用内容·結果:

今回対象とする HTTR 機器構造は、圧力容器、主冷却設備と補助冷却設備から構成される。 それぞれ個別に三次元要素を用いてモデル化され、合計1億2千万自由度を超える巨大な有限要 素モデルとなっている。さらに、地震波に対する構造応答を正確に捉えるために、本研究では時 間刻み0.01 秒で500 ステップの計算を実施し、合計2TB程度の解析結果データが分散並列出力 されている。このような大規模分散並列データは、これまでは処理能力の制限により、一体化し た可視化を効率的に実施することが困難であった。今回可視化対象とするHTTR機器構造の可 視化情報を表1に示す。

分散(並列)数	モデル規模(DOF)	STEP 数	Data 容量(TB)	評価物理量
1621	120,000,000	500	2	変位・加速度・応力

表1 HTTR モデルの可視化情報
昨年 11 月に導入された SGI ICE X 並列計算機の可視化処理部は、4 ノードで 96 コアの並列 処理を可能とし、総メモリは 1 TB であり、処理性能が飛躍的に向上した(詳細記載は省略し、 関連マニュアルに参照)。また、可視化処理部にインストールされている PCE は各処理ノードが 持つ部分領域のみを可視化し、最終的に可視化結果のみを制御ノード上で表示することによっ て、並列計算で出力された大規模データの可視化処理を、高い精度を保ったまま実現できる。

### 1) 可視化ツールの構成

ICE X の可視化環境下で HTTR 機器構造モデル規模の出力データを可視化するためのアプリ ケーションの開発項目は、下記の通りである。

- PCE 入力ファイル生成ツール FIESTA は解析結果として、部品毎、時間毎に UCD フォーマットのバイナリ(dat)フ ァイルを出力する。このファイルは Express\_PCE が認識できないため、PCE のファイ ル命名法に従い、領域毎の INP ファイルを作るスクリプトツールを開発した。時間軸の ファイルは、領域毎の INP ファイルに含まれる。
- ② 可視化処理アプリケーション
   図1は、選択した物理量のコンター図を表示するために開発した PCE アプリケーションである。
- ③ バッチ処理シナリオ生成ツール 自動化を図るため、②のアプリケーションをバッチ的に行う。バッチ処理シナリオを時 間軸に対して自動生成するためのツールを作成した。
- ④ 動画生成ツール

標準 AVS/Express において、③のバッチ処理で得られた静止画像を動画に生成するツールを作成した。



図1 分散並列可視化アプリケーション

### 2) 可視化結果

1)で開発した可視化アプリケーションを用いて、HTTR 機器構造モデルを ICE X 可視化処理 部の 96 コア(4ノード使用)を用いて並列処理した結果を、図2に示す。



図 2 HTTR 機器構造可視化結果

本研究開発により、1億自由度を超える非常に大規模な時系列解析結果データの分散並列可視 化が効率的に実現可能となり、今後ますます大規模化すると予想される振動シミュレーション結 果の可視化に対応可能なツールの基本機能の整備を完了した。

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 郭智宏、崔炳賢、西田明美、中島憲宏、「原子力施設の耐震評価のための組立構造解析結果 の分散並列可視化」、日本原子力学会 2016 年秋の大会(9月 7-9日, 2016, 久留米).
- 2) 郭智宏、西田明美、崔炳賢、中島憲宏、「大規模分散データの前処理による並列可視化の高 速化」、日本可視化情報全国講演会 日立 2016 (10月 8-9日, 2016, 日立).

### (4) 今後の利用予定:

組立構造解析コード FEISTA のポスト処理機能として、今回開発した分散並列可視化アプリ ケーションは最も基本的な機能を実装している。今後、より利用しやすく汎用性を高めるため、 要素物理量の表示や断面表示等々の機能追加を行う予定としている。

## 5.19.15 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。

本研究の目的は、整備している解析機能を用いて原子力施設の挙動解析を実施し、観測記録と の比較を通して、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。

### (2) 利用内容·結果:

2011年3月11日に発生した東北地方太平洋沖地震時の地震波を入力とした応答解析を建設部 と協力してすすめ、モデルプラントの3次元詳細モデルによる本震1波と余震2波の計3波の 解析を実施し、解析結果と観測記録の卓越振動数の比較を行った。

具体的には、計算対象のモデルプラントとして図1に示す機構内施設を設定し、3次元モデル を構築した。建屋下部から上部への増幅率をフーリエ振幅比により比較することとし、地震観測 記録と3次元詳細モデルの解析結果の比較を行った。機構内施設の地震観測位置概略を図2に示 す。

フーリエ振幅比は観測記録位置の加速度(観測記録および解析結果)を用いるものとし、以下 のように計算するものとする。

- ・建屋南位置:B3Fの応答に対する B1F、1F、2Fの応答比(UT05/UT02、UT07/UT02、 UT08/UT02)
- ・建屋北位置: B3F の応答に対する 1F の応答比(UT06/UT01)
- ・内部コンクリート:格納容器内下部の応答に対する上部の応答比(UT10/UT09)

なお、フィルターは Parzen window の low pass filter (バンド幅 0.4Hz)を用いた。

建屋南位置、および、内部コンクリートのフーリエ振幅比(UT08/UT02、UT10/UT09)を図 3に示す。観測記録のフーリエ振幅比は、本震および余震2波ともに同様の傾向を示しているこ とから、今回の地震時の建屋応答は、地震動にほとんど依存しない結果であったことを確認でき る。 主要機器が格納されている内部コンクリートにおいては、構造形状が比較的単純であることも あり、観測記録と解析結果はよく整合した結果となっている。減衰を調整することでもっと整合 性が向上することが期待される。一方、建屋南位置においては、傾向は似ているものの、7 Hz 近傍において観測記録と解析結果の卓越振動数に差異があることを確認できる。差異の原因は建 屋構造または建屋と地盤の相互作用にかかわる箇所のモデル化に起因することが推測されるた め、現在、7 Hz 近傍の卓越モードについて調査中である。

建屋全体の地震応答は、地震動特性、および、建屋と地盤の相互作用特性でほぼ決定される。 本解析結果も、時刻歴応答の比較では地震観測記録との良好な整合を確認している。しかしなが ら、モデル化技術の高度化のためには、入力に依存しない妥当性確認方法が必要である。今回試 したフーリエ振幅比などの分析方法では、地震動に依存しない、モデルそのものの妥当性をより 高感度に分析できる。今回の結果を踏まえ、今後も継続して解析結果の分析を実施し、結果の妥 当性を確認していく予定である。



図1 建屋3次元詳細モデルの例



図2 地震観測記録位置概略



## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- Akemi Nishida, Sayaka Igarashi, Shigehiro Sakamoto, Yasuo Uchiyama, Yu Yamamoto, Ken Muramatsu and Tsuyoshi Takada, "Hazard-Consistent Ground Motions Generated with a Stochastic Fault-Rupture Model", Nuclear Engineering and Design 295 (2015) pp.875–886.
- 2) Akemi Nishida, N. Nakajima, Y. Kawakami, K. Iigaki, K. Sawa, "Seismic response simulation of HTTR building against 2011 Tohoku Earthquake", the 23nd International Conference on Nuclear Engineering (ICONE23), (Makuhari, Japan, May 17-21, 2015).
- 3) 西田明美、五十嵐さやか、坂本成弘、村松健、高田毅士、"原子力施設の地震リスク評価手 法の高度化のための原子力施設建屋・機器の地震応答解析"、JCOSSAR 2015 論文集 (2015.10).

### (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、本中期計画の目標である耐震評価用3次元 モデルの構築手法の整備をすすめる。これまでに、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し た。今後は、抽出したモデル化因子それぞれの影響度を詳細に検討していく予定である。

## 5.19.16 電子熱輸送および粒子輸送における非捕捉電子の影響

Effects of Passing Electrons on Electron Heat and Particle Transport

朝比 祐一 高度計算機技術開発室

### (1) 利用目的:

核融合炉においては、プラズマ中で生じる電磁的な揺らぎが引き起こす乱流により、閉じ込め 性能が決定する。そのため、プラズマ乱流によるエネルギーや粒子の閉じ込め特性の理解が主要 な研究課題となっている。核融合炉実現においては、第一義的に高温のイオンの高い閉じ込めを 達成することが求められるため、イオンスケールの乱流によるイオン熱輸送現象に関する研究が 精力的になされてきた。プラズマ乱流を第一原理に基づき記述するモデルとしてジャイロ運動論 モデルが用いられるが、イオンスケールの乱流に着目してジャイロ運動論に基づくシミュレーシ ョンを行う場合、電子は断熱的に振る舞うとする電子断熱近似と呼ばれる近似がしばしば用いら れてきた。この仮定は、イオンスケール乱流の磁力線平行方向の位相速度 ω<sub>r</sub>/k<sub>l</sub>が電子の移動速度 である熱速度 v<sub>te</sub>と比べ十分に小さいという想定に基づく。ここで、ωrはイオンスケールの乱流 を駆動する微視的不安定性の周波数を特徴付ける反磁性ドリフト周波数、kuは磁力線平行方向の 波数である。一般に、トーラスプラズマ中では磁場の強弱によって、磁力線平行方向の移動速度 の遅い電子が捕捉されることが知られる(以下捕捉電子)。これら捕捉電子については、速度が 十分に速いという仮定が成り立たず、非断熱的な影響が無視できない。一方、磁力線平行方向の 移動速度が速い非捕捉電子については、この仮定は妥当と考えられる。しかしながら、プラズマ 中には、有理面と呼ばれる、k」が0に漸近する磁気面が存在し、このような磁気面上では非捕捉 電子に関してもω<sub>r</sub>/k<sub>l</sub><<v<sub>te</sub>の仮定が成立しないと考えられる。この場合、非捕捉電子に対しても、 非断熱応答すなわち運動論的効果が重要となり、電子熱輸送、粒子輸送への寄与が無視できない ことが先行研究によって指摘されている。本課題では、局所的ジャイロ運動論的シミュレーショ ンコードを用い、非捕捉電子の非断熱応答による電子熱輸送、粒子輸送への影響およびその機構 を調べることを目的とする。

### (2) 利用内容·結果:

本課題では、局所的ジャイロ運動論的シミュレーションコードである GKV コードによって、 電子モデルとして運動論的モデルと、ハイブリッドモデルの二つを用い、電子熱輸送および粒子 輸送における非捕捉電子の影響を調べた。ここで、運動論的モデルでは、捕捉電子、非捕捉電子 共に運動論的な応答を仮定するのに対し、ハイブリッドモデルでは、捕捉電子についてのみ運動 論的な応答を仮定し、非捕捉電子については断熱応答を仮定する。ただし、ハイブリッドモデル のジャイロ運動論的方程式は非捕捉電子についても計算し、捕捉電子、非捕捉電子間の衝突過程 や非捕捉電子の乱流場に対する受動的な応答による輸送過程は計算した。非捕捉電子は k<sub>ll</sub>=0 の 磁気面においては電子共鳴により半径方向に微細構造を形成するが、この共鳴構造自体が輸送への影響を及ぼすのか、非捕捉電子の運動論的な応答が輸送への影響を及ぼすのかは明らかでない。そこで、運動論的モデルについては、場の方程式について近似を用いないモデルに加え、磁力線垂直方向のモード構造  $k_1^{-1}$ がイオンラーマ半径  $\rho_{ti}$ より長波長  $k_1\rho_{ti}$ <1 と近似して場の方程式から短波長成分を除去するモデルも開発し比較を行う。以下、近似なしの運動論的電子をFLR-KE モデル、長波長近似を用いた運動論的電子モデルを LW-KE モデル、ハイブリッドモデルを FLR-HY モデルと呼ぶ。

図1は、イオンスケール乱流の駆動源であるイオン温度勾配モードの線形計算における共鳴モ ード構造を示す。



図1 イオン温度勾配モードの静電ポテンシャルの等値面図:(a)運動論的電子モデル(長波長近 (Q)、(b)運動論的電子モデル(近似なし)、(c)ハイブリッド電子モデル。xは小半径方向 に対応し、zは磁力線平行方向に対応する。ρ<sub>i</sub>はイオンラーマ半径を示す。

図 1 (b)からわかるように、近似なしの運動論的電子(FLR-KE)モデルを用いた場合には、 非捕捉電子による磁力線平行方向に伸びたモード構造が形成される。一方、図 1 (a)に示すよう に長波長近似を用いた場合(LW-KE)には、径方向の微細構造は解像されず磁力線平行方向に 伸びたモード構造は見られない。ここで、このモデルにおいては、非捕捉電子自体は運動論的応 答することに注意されたい。同様に、図 1 (c)に示すようにハイブリッドモデル(FLR-HY)を用 いた場合には、非捕捉電子に断熱応答を過程するため、磁力線平行方向に伸びたモード構造は見 られない。続いて、FLR-KEとLW-KEの比較によって、共鳴構造の輸送への影響を、FLR-KE と FLR-HYの比較によって、非捕捉電子の輸送への影響を調べた。

図2は、上述の三モデル(FLR-KE、LW-KEおよびFLR-HY)による非線形シミュレーションの結果得られた、イオンエネルギーフラックス(a)、電子エネルギーフラックス(b)および粒子フラックス(c)を示す。

図2に示すように、ハイブリッドモデルを用いた場合(FLR-HY)の輸送レベルは運動論的モ デルを用いた場合(FLR-KE)の輸送レベルより低く見積もられるのに対し、長波長近似を用い た場合(LW-KE)の輸送レベルは運動論的モデル(FLR-KE)を用いた場合と同程度であるこ とがわかる。ただし、ハイブリッドモデルの結果に関しては微視的不安定性の線形成長率が運動

### JAEA-Review 2016-024

論的モデルより小さくなっており、先行研究と異なる結果を与えていることから、現在、モデル の実装方法等の再検証を行っている。FLR-KEとLW-KEの比較から、輸送レベルにおいて重要 なのは、非捕捉電子によって形成される径方向の微細構造そのものではなく、非捕捉電子の非断 熱的な応答であることがわかった。さらに、電子エネルギー輸送および粒子輸送フラックスにお ける非捕捉電子と捕捉電子の寄与を調べたところ、上述したすべての場合において、非捕捉電子 のフラックスへの寄与が捕捉電子の寄与を上回ることが明らかとなった。



図 2 本課題で用いたモデル (FLR-KE、FLR-HY、LW-KE) による非線形シミュレーションの 結果得られた、(a) イオンエネルギーフラックス Q<sub>i</sub>、(b) 電子エネルギーフラックス Q<sub>e</sub> お よび(c) 粒子フラックス Γ<sub>e</sub>。

本課題によって、イオンスケールのプラズマ乱流における非捕捉電子の輸送への影響およびそ の機構を明らかにした。まず、従来研究同様、非捕捉電子の断熱応答を仮定しない運動論的電子 の計算結果から、非捕捉電子の輸送への影響が無視できないことを確認した。続いて、非捕捉電 子の作る径方向の微細構造の輸送への影響を調べるために、運動論的電子モデルに長波長近似を 用いた場合と、用いない場合の計算結果を比較した。その結果、長波長近似によって微細構造が 形成されない場合でも、長波長近似を用いず微細構造が形成される場合でも輸送レベルは同程度 であることが明らかとなった。これによって、輸送レベルにおいて重要なのは、非捕捉電子によ って形成される径方向の微細構造そのものではなく、非捕捉電子の非断熱的な応答であることが 明らかとなった。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 朝比祐一,井戸村泰宏,前山伸也,仲田資季,石澤明宏,渡邉智彦, "電子熱輸送および粒子 輸送における非捕捉電子の影響",第32回プラズマ・核融合学会,2015,名古屋(口頭発表).

### (4) 今後の利用予定:

なし

## 5.19.17 多次元伝達関数による多変量ボリュームレンダリング

### Multivariate Volume Rendering using Multidimensional Transfer Function

河村 拓馬、野田 智之、井戸村 泰宏、宮村 浩子、武宮 博 高度計算機技術開発室

### (1)利用目的:

近年、高性能計算技術の発展はめざましく、スーパーコンピュータ上で実行されるシミュレー ションの規模や複雑さは加速度的な増大を続けており、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。このような大規模データで表現される複雑な現象を解析す るためには、大規模データの可視化、そして複雑データの可視化という二つの観点からの可視化 技術開発が必要となる。

大規模データの可視化技術に関しては、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は、データの大規模化に比例したポ リゴン数の爆発により対話的処理が困難という問題がある。粒子ベースボリュームレンダリング

(Particle-Based Volume rendering, PBVR)は結果データ(ボリュームデータ)の格子内部に 描画要素となる粒子を生成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データ転送量の少ない、対話的な可視化が可能なクラ イアント/サーバ可視化システムを開発している。昨年度はクライアント/サーバ間における通 信の枠組みの開発を行い、ICE X 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。

複雑データの可視化技術に関しては、計算モデルの精緻化に伴い多変量化するデータの中か ら、変量間の相関や特徴を抽出できる手法が必要とされている。1 変量向けの可視化手法として、 ボリュームデータに伝達関数(色と不透明度の関数)を指定することで変量の分布を描画するボ リュームレンダリングの有効性が知られている。この伝達関数を多変量向けに拡張した多次元伝 達関数を使用し、多変量ボリュームレンダリングをすることで特徴抽出が可能である。従来手法 として3変量に対する多次元伝達関数設計手法や、多次元データのクラスタリングにより自動的 に特徴抽出を行う手法があるが、3 変量以上にユーザが任意の多次元伝達関数を与える手法は無 かった。昨年度は1次元伝達関数を演算子によって合成することで多次元伝達関数を設計する手 法(Transfer Function Synthesizer, TFS)を提案しPBVR へと組み込んだ。本年度はTFS を 原子力分野のアプリケーションから生成される実データに対して適用し、多変量データの特徴抽 出が可能なことを示した。

### (2) 利用内容·結果:

1 次元伝達関数の標準的な GUI は、自由曲線や制御点による色関数・不透明度関数の指定を 可能にしている。TFS による多次元伝達関数の設計は、GUI で指定された1次元伝達関数を論 理演算することによって行われる。例えば、不透明度に対する和の演算は、各不透明度で生成さ れた対象の合成が可能であり、積による演算はそれらの共通部分を抽出できる。また、類似した データに対する減算は差分を、除算はデータのバイアス検出に使用できる。

原子力基礎工学研究センターで開発されている多相多成分熱流動解析コード JUPITER によ る原子炉の簡略模擬体系における燃料溶融シミュレーションの結果データに対して TFS を適用 し、図1に示す可視化結果を得た。データは5変量から構成され、図1の上段に各変量の空間分 布をボリュームレンダリングした結果を示す。左から、固体状の燃料、炉内構造物、溶融した燃 料、溶融した炉内構造物の境界形状、そして、右端が温度分布である。それぞれの描画に用いた 1次元伝達関数をその下に示す。これらの1次元伝達関数を TFS で合成し5次元伝達関数を生 成することで、図1下段の可視化結果を得ることができた。





図1 JUPITER データの5変量の分布と多変量ボリュームレンダリングの結果

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

## 論文

1) Takuma Kawamura, Yasuhiro Idomura, Hiroko (Nakamura) Miyamura, Hiroshi Takemiya, "Algebraic Design of Multi-dimensional Transfer Function Using Transfer Function Synthesizer", Journal of Visualization, DOI:10.1007/s12650-016-0387-1.

## 会議発表

- 2) Takuma Kawamura , Yasuhiro Idomura , Hiroko (Nakamura) Miyamura , Hiroshi Takemiya, "Multivariate Volume Rendering Using Transfer Function Synthesizer implemented in Remote Visualization System PBVR", SIGGRAPH ASIA 2015 Symposium On Visualization In High Performance Computing, (Kobe, Japan, Nov. 2-5, 2015).
- 3) Takuma Kawamura, Yasuhiro Idomura, Hiroko (Nakamura) Miyamura, Hiroshi Takemiya, "Remote visualization of massive data using particle-based volume rendering", US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on Innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing, (Nagoya, Japan, Aug.20-21, 2015).

## 招待講演

4) 河村拓馬、"遠隔可視化ソフトウェア PBVR による大規模データの可視化"、プラズマシミ ュレータシンポジウム 2015 (9月 3-4 日、土岐).

## チュートリアル講演

5) Takuma Kawamura, "Hands-on seminar of Remote Visualization System PBVR", SIGGRAPH ASIA 2015 Symposium On Visualization In High Performance Computing, (Kobe, Japan, Nov. 2-5, 2015).

## (4) 今後の利用予定:

今後はスーパーコンピュータ上のシミュレーションと可視化処理を結合したシミュレーショ ン時可視化(In-Situ 可視化)による PBVR の大規模可視化を試みる予定である。原子力機構の 新システム ICE X の導入によりシミュレーション規模が増大し、最新の JUPITER コードによ る計算結果は既に従来可視化手法では取り扱えないサイズになっている。PBVR を利用した In-Situ 可視化ではシミュレーションが実行される計算ノード・メモリを利用して超並列の粒子 生成を行うことで、かつてない規模のデータに対する可視化が可能になると見込まれる。

### 5.19.18 圧縮対角格納形式の適用による多相流体コードの高速化

# Acceleration of a Multiphase Fluid Code by the Application of Compression Diagonal Storage Format

伊奈 拓也<sup>†1</sup>、真弓 明恵<sup>†2</sup>、山田 進<sup>†3</sup>、井戸村 泰宏<sup>†2</sup> †1 情報システム利用推進室、<sup>†2</sup> 高度計算機技術開発室、<sup>†3</sup> シミュレーション技術開発室

### (1) 利用目的:

原子力機構では過酷事故時の原子炉内溶融物の移行挙動を再現することを目的として、多相多 成分熱流動解析コード JUPITER の開発を進めている。JUPITER コードは原子炉内溶融物の挙 動を解析するために非圧縮性流体のナビエ・ストークス方程式、連続の式を連立して解いている。 この過程で圧力のポアソン方程式を解く必要があり数値計算ライブラリ PETSc の反復法ソルバ を使用している。反復法ソルバは JUPITER コードの計算コストの約8割以上を占めるホットス ポットとなっており、演算性能とスケーラビリティの向上が必須となっている。また、PETSc はフラット MPI 並列で計算を行うため、メモリ使用量が大きく、大規模並列計算時に通信がボ トルネックになりスケールしなくなる問題がある。PETSc は疎行列の格納形式として圧縮行格 納 (CSR) 形式を使用している。しかし、構造格子における差分法で離散化した連立一次方程式 の係数行列は規則的なブロック対角行列であるため間接参照の無い対角行列専用の圧縮対角格 納 (DIA) 形式で格納することにより演算処理を効率化することが可能である。ポアソン方程式 を高速に計算するために DIA 形式に対応した前処理付き共役勾配法 (CG 法) ハイブリッド並列 ソルバを独自に開発し、JUPITER コードの演算性能とスケーラビリティの向上を目指す。

### (2) 利用内容·結果:

今回採用した前処理付 CG 法は行列ベクトル積、ベクトル内積、及び、ブロックヤコビ法によ る前処理で構成されている。図1に CSR 形式の行列ベクトル積の擬似コードを示す。CSR 形式 では間接参照を行うため SIMD 演算を行うことが困難である。さらに、JUPITER コードのポア ソン方程式は 2 次中心差分法で離散化されているため各行の要素数となる最内ループの反復回 数は最大で 7 回と少ないためソフトウェアパイプライニングが適用されない問題がある。図 2 に DIA 形式の行列ベクトル積の擬似コードを示す。DIA 形式では間接参照が無いため SIMD 演 算を実行できる上、最内ループの反復回数がベクトルの行数であるため行数の多いベクトルの場 合にソフトウェアパイプライニングが適用される。さらに JUPITER コードでは各行の 7 要素 (xyz 方向の3 点差分)について図3に示すようにフルアンロールすることでメモリ参照量を削 減している。また、今回の最適化では並列化に伴うプロセス数の削減を考慮して MPI+OpenMP によるハイブリッド並列処理を実装した。今回の DIA 形式による最適化の効果を確認するため に、CG 法プログラムにおけるベクトル内積、行列ベクトル積、前処理に関してルーフラインモ デルで評価した理論演算性能と ICEX で測定した単体性能を比較した結果を表1に示す。ルーフ ラインモデルはアプリケーションが持っている演算数(Flop) f とメモリアクセス数(Byte) b、 および、ハードウェアの演算性能(Flops)Fとメモリバンド幅(Byte/s)Bから処理時間をf/F+b/B と仮定し、これで演算数fを割ることによって、理論上の実行性能をf/(f/F+b/B)と評価するモデ ルである。行列ベクトル積についてはルーフラインモデルの7割程度であるがCG法全体ではル ーフラインモデルの8割を達成した。この結果から、今回の最適化によって十分にハードウェア の性能を引き出すことができたと判断した。

独自開発した DIA 形式に対応した前処理付 CG 法ハイブリッド並列ソルバを適用した JUPITER コードと PETSc を使用した JUPITER コードで強スケーリングを比較した結果を図 4 に示す。独自開発したソルバを使用することで 1.3 倍の性能向上を達成した。スケーラビリテ ィに関しては、今回測定した問題サイズ、コア数の範囲内では PETSc でも十分にスケールして いることがわかった。ただし、独自開発ソルバの場合にはメモリ使用量が約 1/3 に削減されてお り、576 コア以上のケースではほぼ L3 キャッシュにデータが載った状態が実現し、スーパーリ ニアな処理性能を確認することができた。



# 表1 CG 法の単体性能測定結果 (問題サイズ:104×104×265,反復回数:100)

	処理時間	演算性能	バンド幅	ルーフラインモデル
	[s]	[Gflops]	[GB/s]	[Gflops]
ベクトル内積	0.22	5.29	52.88	5.76
行列ベクトル積	0.53	8.14	43.41	10.69
前処理 (ブッロックヤコビ+ILU)	0.71	8.19	52.03	8.94
CG 法	1.56	7.18	45.35	9.00



図 4 JUPITER コードの並列性能測定結果 (問題サイズ: 240×150×1024)

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

### 学会発表

1) 伊奈拓也、井戸村泰宏、山田進、真弓明恵、山下晋、圧縮対角格納形式の適用による多相流 体コードの高速化"、2016年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウ ム(6月 6-7 日, 2016, 仙台).

### (4) 今後の利用予定:

独自開発した CG 法ソルバにおいてルーフラインモデルの7割程度に留まっていた行列ベクト ル積処理をさらに最適化することで単体性能の向上を目指す。また、通信隠蔽処理や省通信アル ゴリズム等の導入による大規模並列計算時のスケーラビリティの向上を行う。

# 5.19.19 原子力施設の耐震シミュレーション結果の可視化のための商用可視化ソフトウェ アの調査

Research for a Commercial Software to Visualize Seismic Simulation Results of Nuclear Plant

鈴木 喜雄

情報システム利用推進室

### (1) 利用目的:

これまで、原子力施設全体規模を対象とした耐震シミュレーションを進めてきている。ここで、 地震波を入力とし、原子力施設の建屋や機器を対象とした構造解析を行うことで各所に生じ得る 応力やひずみ等の物理量の評価をしている。その確認・評価手法の一つとして、構造物の物理量 の大きさをカラー別に表示することで値の大小を確認する、一般的な可視化手法を用いている。 ただし、実施しているシミュレーションでは、構造物を構成している複数の部品を個別に読み込 み、それぞれの部品を個別のコアに割り当てて計算し、結果も部品ごとに出力される。そのため、 部品数×時間ステップ分の結果データが出力される。これまでは、このデータを可視化する際に は、部品データを一つのデータに統合し、時間ステップ分のみのデータにしたのちに、時間ステ ップごとに可視化していた。しかしながら、事前にデータを統合せずに可視化できれば、データ を統合するために計算を行わなければならない点、統合前後のデータを管理しなければならない 点を回避することができる。これにより、計算時間とディスクの使用量を削減できるだけでなく、 それらに要する手間を削減できる。そこで、今回は、原子力機構に新しく導入された ICEX にお いて、並列に可視化処理を行える商用可視化ソフトウェア AVS/Express PCE を対象として、部 品数×時間ステップ分の結果データを、部品データを統合することなく読み込んで可視化してみ ることで、どの程度利用できそうであるかを調査した。

### (2) 利用内容·結果:

今回は、まだ、ICEX が導入される前から調査を開始したため、前の機種である BX900 を用 いて調査を行った。表1にハードウェア構成を示す。可視化ソフトウェアのバージョンは、Ver8.2 である。その特徴として利用できる動作モードを表2に整理している。動作モードとして、並列 処理モードと描画モードがあり、それぞれ複数のモードから選択して利用できる。対象とした結 果データは、以下の表3のとおりである。部品数は1752個であり、小さな部品から大きな部品 までだいたい100KBから10MBくらいの幅を有している。時間ステップは1600ステップであ る。微小変位理論に基づいた解析のため、形状データは時間で変化しないが、変位情報を用いて offset することで形状の変化を確認できるようにしている。

まず、部品を並列に扱う場合、複数の UCD ファイルを個別かつ同時に読み込み可視化処理す ることになるが、この場合、それぞれの UCD ファイルが接合する面において節点の位置が同じ 場合(Non-matching mesh でない場合)、節点番号とマテリアル番号(要素をグループ分けする のに用いる整数値)が共通の場合であっても、並列処理モード、描画モードに依存せず、接合す る面(共有面)が表示されてしまうことが分かった。

表1 ハードウェア構成

検証マシン	BX900
可視化ノード	6ノード
ノードあたりのコア数	8コア
ノードあたりのメモリ容量	42GB
全ノードのメモリ容量	252GB (6 $\checkmark - \ltimes \times 42$ GB)

### 表 2 AVS/Express PCE で利用できる動作モード

(1) 並列処理モード

領域分割	シングルモード	・領域分割データで、並列数=領域分割数のデータを処理
	マルチモード	・領域分割データで、並列数<領域分割数のデータを処理
		・各 PCE ノードあたり複数の領域分割データを処理
時間ステップ		・1 PCE ノードで1ステップのファイルを処理

(2) 描画モード

ポリゴン	<ul> <li>・レンダリング処理は、操作画面(PCEマスタ、PCEクライアント)で行う。</li> <li>・ポリゴン量分のメモリが各 PCEノードで必要</li></ul>
モード	領域分割(マルチモード)では、複数データを一度に読み込むだけのメモリが必要 <li>・出力されるポリゴン数が多いとネットワーク転送に時間がかかる。</li> <li>・加理性的は、提供することのグラフィックスボードの右無の性的にたたされる</li>
画像 モード	・各 PCE ノードでデータ読み込みからレンダリング処理までを行い、画像を重ねな がら PCE マスタに結果を転送する(各 PCE ノードが利用するメモリ量はほぼ均 等) ★半透明表示は未サポート

表3 対象とした結果データ

データタイプ	UCD バイナリ
ファイルサイズ	小部品:100KB、大部品:10MB
総ファイル数	1,752 個
1ステップのサイズ	$5{\sim}6\mathrm{GB}$
総ステップ数	1,600 ステップ(形状(geometry data)は変化しない。 変位情報を有しており、この情報により offset している。)

シミュレーションの対象となる構造物を部品分割して準備する際に、まずは、部品の機能の違いや物性の違いによって分割しているが、さらにメッシュを生成しやすいように分割したり、1 コアのメモリに収まるように分割したりしているため、現状では、共有面が必ずしも意味のある 箇所になるとは限らない。そのため、表示したくない面が表示されてしまうことになっている。 表示したくない面を包含するように部品を定めてその部品単位で外形線だけのデータを作成す ることで回避可能と思われるが、余分なデータ作成をしなければならないことになる。

次に、時間ステップを並列に扱う場合、時間ステップと部品の両方を並列に扱うことが出来ない。 そのため、時間ステップで読み込むデータは統合されている必要がある。そのため、今回の目的 には適さない。 共有面が表示されてもよいという前提のもと、可視化に要する処理時間を測定した。その結果 を表4および図1に示す。まず、ファイル数(部品数)が異なる場合の処理時間の比較を行った。 並列処理モードにはマルチモードを用い、描画モードにはポリゴンモードを用いた。測定の結果、 並列数固定の場合、ファイル数が増えると等比級数的に処理時間が長くなっている。これは、イ ンスタンスされるモジュール数が増えるために生じると考えられる。ファイル数固定の場合、並 列数が増えると処理時間は短くなっている。ただし、並列数が少ない場合には、処理時間が急激 に遅くなっている(例えば図1の青丸)。これは各プロセスがインスタンスするモジュール数が 変わることに起因していることを、インスタンスするモジュール数とインスタンスにかかる時 間・使用メモリの関係から確認した。その他、描画モードの違い(ポリゴン/画像)による時間 比較や、表示場所の違い(原科研/柏)による時間比較等も行ったが、紙面の都合上割愛する。

表 4 測定結果

ファイル数	-lP=48, -lp=1	-1P=24 , -1p=2	-lP=12, -lp=4
500	32.305935	47.104828	225.121124
800	85.386925	206.782272	1412.450195
900	117.024124	308.794922	2231.501709
1,000	161.898804	453.973236	経過時間オーバーで測定できず
1,752	メモリオーバーで測定できず	3999.325195	経過時間オーバーで測定できず



(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、より目的にあった利便性の高い可視化ソフトウェアを選定するために、他のソフトウ ェアについても調査を広げていきたい。そのために、ICEX を用いた評価を進めていきたい。本 調査においては、システム計算科学センター情報システム管理室の支援を受けました。ここに感 謝致します。

# 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。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。

情報システム管理室は、原子力機構における計算資源不足を改善するため、約3年に渡る政府 調達手続きを経て、従来比で約12倍の理論演算性能となる「ICEX」を中核とする大規模な並列 計算機システムへと更新し、平成27年11月25日から運用を開始した。当該システムにおいて、 原子力分野の取り扱う大規模かつ複雑化する様々な事象の解明や予測のためのシミュレーション などが短期間で効率的に行われ、研究成果の着実な創出に貢献すべく、計算機運用及び利用支援 に係るスタッフが全力でサポートしていく。

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27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。

平成 28 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、増子 献児

# 付録

# 付録A

	BX900			ICE X			FX10*	
	バッチ 処理 件数	<ul><li>会話</li><li>処理</li><li>件数</li></ul>	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	6,674	4,671	3,863,915				1,683	5,216,614
5月	6,082	4,027	3,697,117				2,109	7,431,125
6月	13,025	5,326	3,847,810				1,215	5,050,413
7月	12,552	4,735	3,729,880				1,350	5,078,658
8月	15,282	4,005	3,889,626				556	3,838,072
9月	12,411	3,609	4,013,253				972	6,509,534
10 月	11,347	3,719	4,100,418				1,312	5,229,133
11 月				3,244	1,681	5,836,051	650	6,006,010
12 月				11,639	5,177	36,340,863	1,314	2,508,722
1月				13,878	5,930	37,858,178		
2月				13,306	6,064	36,642,524		
3月				14,757	5,272	40,195,254		
合計	77,373	30,092	27,142,019	56,824	24,124	156,872,870	11,161	46,868,281

表 A.1 平成 27 年度大型計算機システムの利用実績

\*東京大学スーパーコンピュータシステム

# 付録B

	BX900 (FX10 含む)	ICE X	Linux	パソコン	network	その他 (利用一般)	合計
4月	76		2	3	1	9	91
5月	17		1	3	2	12	35
6月	39		0	1	1	8	49
7月	47		1	0	2	8	58
8月	26		0	4	1	10	41
9月	25		1	1	2	7	36
10 月	39		0	7	1	20	67
11 月	11	28	7	6	2	15	69
12 月		83	3	1	2	12	101
1月		77	6	3	1	29	116
2 月		64	0	5	0	19	88
3月		50	0	0	2	7	59
合計	280	302	21	34	17	156	810

表 B.1 平成 27 年度利用相談件数(可視化を除く)

## 表 B.2 平成 27 年度可視化相談件数

1.	可視化相談(技術支援)
1	可視化ノード及び遠隔可視化用表示装置の可視化相談・技術支援(79件)
2	PC 版 MicroAVS インストール支援(17 件)
3	PC 版 AVS/Express インストール支援(3 件)
4	Ensight DR インストール支援(1 件)

## 2. 可視化ツール提供等

- ① AVS/Express PCE における複数非構造格子データの可視化処理環境の構築
- ② AVS/Express PCE のマニュアル作成

# 著者名別 論文索引

## A-Z

Alex Malins ······212
Douglas Chase Rodriguez27
Fabiana Rossi ······27
Gu Bo136
James Koga ·····166
James R HARRIES ······168
Mihalache Ovidiu ·····191
Tao WAN
Xu Zhuo136

## あ

相羽	信行
相原	純
朝比	祐一
阿部	陽介
天野	健治197

### V

池田	隆司171
池部	仁善148
石川	正男
石黒	裕大
石﨑	梓
石田	恒151
板倉	充洋
伊藤	啓178
井戸村	† 泰宏
伊奈	拓也
井上	静雄
伊巻	正134
岩元	洋介

# う

上澤	伸一郎	10
植田	祥平	23
内堀	昭寛	75
宇都野	, 穣	31

# え

江口	悠太69	9
----	------	---

### お

大釜	和也187
太田	幸宏
大西	弘明136
岡垣	百合亜
小川	達彦
奥村	雅彦
乙部	智仁

### か

郭智	習宏
加藤	由幹110
上地	優
河合	智賀
河村	拓馬
河村	拓己

## き

# く 栗田 圭輔 ………146

## せ

関 洋治	36
瀬戸 春樹	51
瀬谷 道夫	27

# そ

# た

高瀬	和之
高峰	潤
高屋	茂184
武宮	博

## っ

都留	智仁
鶴岡	卓哉

# て

寺川	貴樹
寺田	敦彦

# な

晴康
佑紀
悠人
拓
剛実
博樹
浩成
絵美

# に

西田	明美
西原	哲夫123

# ٢

小泉	光生
河野	秀俊148
後藤	実
小林	恵太
米田	政夫
菰田	宏

# さ

作花	拓
佐藤	聡
佐藤	大樹86
佐藤	隆博141
佐藤	達彦
佐藤	允俊
沢村	勝

# ι

志賀	基之
柴田	光彦
嶋田	恭彦
清水	大志197
社本	真一134
焦 利	芳110
白石	淳也

# す

杉本	貴則136
鈴木	貴行110
鈴木	知史
鈴木	喜雄
鈴土	知明

## の

野田	智之
延原	文祥61

# は

## રુ

深谷	裕司126
福島	昌宏120
古田	琢哉81
古野	朗子

# ほ

堀口	直樹	110

## ま

増川	史洋61
町田	昌彦
松田	規宏199
松本	淳151
松山	顕之
真弓	明恵
丸山	修平187

## み

宮村	浩子	245

# む

村松 壽晴……194

# Ł

森道	直康	136
守田	利昌	163
森林	健悟	173

## や

谷塚	英一
柳沢	秀樹
矢花	一浩160
山口	正剛
山口	充孝
山下	晋
山田	進
山野	秀将

# よ

横田	光史
吉氏	崇浩
吉田	啓之
吉田	芙美子

# ŋ

劉	維		114
---	---	--	-----

# わ

和田	明
渡部	晃

This is a blank page.

\_

表 1. SI 基本単位				
甘大昌	SI 基本単位			
本平里	名称	記号		
長さ	メートル	m		
質 量	キログラム	kg		
時 間	秒	s		
電 流	アンペア	Α		
熱力学温度	ケルビン	Κ		
物質量	モル	mol		
光度	カンデラ	cd		

表2. 基本単位を用いて表されるSI組立単位の例							
AI 立長 SI 組立単位							
名称	記号						
面 積 平方メートル	m <sup>2</sup>						
体 積 立方メートル	m <sup>3</sup>						
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 <sup>-1</sup>						
密度,質量密度キログラム毎立方メートル	kg/m <sup>3</sup>						
面 積 密 度 キログラム毎平方メートル	kg/m <sup>2</sup>						
比体積 立方メートル毎キログラム	m <sup>3</sup> /kg						
電 流 密 度 アンペア毎平方メートル	A/m <sup>2</sup>						
磁 界 の 強 さ アンペア毎メートル	A/m						
量 濃 度 <sup>(a)</sup> , 濃 度 モル毎立方メートル	mol/m <sup>8</sup>						
質量濃度 キログラム毎立方メートル	kg/m <sup>3</sup>						
輝 度 カンデラ毎平方メートル	cd/m <sup>2</sup>						
屈 折 率 <sup>(b)</sup> (数字の) 1	1						
比 透 磁 率 <sup>(b)</sup> (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 旭立単位				
組立量	名称	記号	他のSI単位による 表し方	SI基本単位による 表し方	
平 面 角	ラジアン <sup>(b)</sup>	rad	1 <sup>(b)</sup>	m/m	
立体鱼	ステラジアン <sup>(b)</sup>	$sr^{(c)}$	1 (b)	$m^2/m^2$	
周 波 数	ヘルツ <sup>(d)</sup>	Hz	-	s <sup>-1</sup>	
力	ニュートン	Ν		m kg s <sup>-2</sup>	
E 力 , 応 力	パスカル	Pa	N/m <sup>2</sup>	$m^{-1} kg s^{-2}$	
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 <sup>2</sup> kg s <sup>-3</sup>	
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	$m^2 kg s^{\cdot 3} A^{\cdot 1}$	
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 <sup>2</sup>	$kg s^{2} A^{1}$	
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 <sup>(e)</sup>	°C		K	
光東	ルーメン	lm	cd sr <sup>(c)</sup>	cd	
照度	ルクス	lx	lm/m <sup>2</sup>	m <sup>-2</sup> cd	
放射性核種の放射能 <sup>(f)</sup>	ベクレル <sup>(d)</sup>	Bq		s <sup>-1</sup>	
吸収線量, 比エネルギー分与, カーマ	グレイ	Gy	J/kg	$m^2 s^2$	
線量当量,周辺線量当量, 方向性線量当量,個人線量当量	シーベルト <sup>(g)</sup>	Sv	J/kg	$m^2 s^{-2}$	
酸素活性	カタール	kat		s <sup>-1</sup> mol	

酸素活性(1) ダール kat [s<sup>1</sup> mol]
 (w)SH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 コヒーレントではない。
 (h)ラジアンとステラジアンは数字の1に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。 実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号である数字の1は明 示されない。
 (a)測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。
 (d)へルツは周期現象についてのみ、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。 セル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。それシウス度とケルビンの
 (a)やレシウス度はケルビンの特別な名称で、温度器や温度開隔を表す整備はどもらの単位で表しても同じである。
 (b)放射性核種の放射能(activity referred to a radionuclide) は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。
 (g)単位シーベルト(PV,2002,70,205) についてはCIPM物告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 <sup>-1</sup> kg s <sup>-1</sup>		
カのモーメント	ニュートンメートル	N m	m <sup>2</sup> kg s <sup>-2</sup>		
表 面 張 九	リニュートン毎メートル	N/m	kg s <sup>-2</sup>		
角 速 度	ラジアン毎秒	rad/s	m m <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> =s <sup>-1</sup>		
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 <sup>-3</sup>		
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 <sup>-3</sup> K <sup>-1</sup>		
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m <sup>3</sup>	m <sup>-1</sup> kg s <sup>-2</sup>		
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	m kg s <sup>-3</sup> A <sup>-1</sup>		
電 荷 密 度	クーロン毎立方メートル	C/m <sup>3</sup>	m <sup>-3</sup> s A		
表面電荷	「クーロン毎平方メートル	C/m <sup>2</sup>	m <sup>-2</sup> s A		
電東密度, 電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m <sup>2</sup>	m <sup>2</sup> s A		
誘 電 卒	コアラド毎メートル	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 <sup>-2</sup> A <sup>-2</sup>		
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 <sup>-1</sup> s A		
吸収線量率	ダレイ毎秒	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 <sup>2</sup> m <sup>-2</sup> kg s <sup>-3</sup> =kg s <sup>-3</sup>		
酵素活性濃度	カタール毎立方メートル	kat/m <sup>3</sup>	$m^{-3} s^{-1} mol$		

表 5. SI 接頭語							
乗数	名称	記号	乗数	名称	記号		
$10^{24}$	<b>э</b> 9	Y	10 <sup>-1</sup>	デシ	d		
$10^{21}$	ゼタ	Z	$10^{-2}$	センチ	с		
$10^{18}$	エクサ	E	$10^{-3}$	ミリ	m		
$10^{15}$	ペタ	Р	$10^{-6}$	マイクロ	μ		
$10^{12}$	テラ	Т	$10^{-9}$	ナノ	n		
$10^{9}$	ギガ	G	$10^{-12}$	ピコ	р		
$10^{6}$	メガ	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	۰	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 <sup>2</sup> =10 <sup>4</sup> m <sup>2</sup>		
リットル	L, 1	1 L=1 l=1 dm <sup>3</sup> =10 <sup>3</sup> cm <sup>3</sup> =10 <sup>-3</sup> m <sup>3</sup>		
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						
3	名称		記号	SI 単位で表される数値		
電子	ボル	ŀ	eV	1 eV=1.602 176 53(14)×10 <sup>-19</sup> J		
ダル	- F	$\sim$	Da	1 Da=1.660 538 86(28)×10 <sup>-27</sup> kg		
統一原	子質量単	単位	u	1 u=1 Da		
天 文	単	位	ua	1 ua=1.495 978 706 91(6)×10 <sup>11</sup> 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 <sup>5</sup> 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 <sup>-10</sup> m
海 里	Μ	1 M=1852m
バーン	b	$1 \text{ b}=100 \text{ fm}^2=(10^{-12} \text{ cm})^2=10^{-28} \text{m}^2$
ノット	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネーパ	Np	SI単位しの粉結的な朋友け
ベル	В	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 <sup>-7</sup> J		
ダイン	dyn	1 dyn=10 <sup>-5</sup> N		
ポアズ	Р	1 P=1 dyn s cm <sup>-2</sup> =0.1Pa s		
ストークス	St	$1 \text{ St} = 1 \text{ cm}^2 \text{ s}^{\cdot 1} = 10^{\cdot 4} \text{ m}^2 \text{ s}^{\cdot 1}$		
スチルブ	$^{\mathrm{sb}}$	$1 \text{ sb} = 1 \text{ cd cm}^{-2} = 10^4 \text{ cd m}^{-2}$		
フォト	ph	1 ph=1cd sr cm <sup>-2</sup> =10 <sup>4</sup> lx		
ガ ル	Gal	1 Gal =1cm s <sup>-2</sup> =10 <sup>-2</sup> ms <sup>-2</sup>		
マクスウエル	Mx	$1 \text{ Mx} = 1 \text{ G cm}^2 = 10^{-8} \text{Wb}$		
ガウス	G	1 G =1Mx cm <sup>-2</sup> =10 <sup>-4</sup> T		
エルステッド <sup>(a)</sup>	Oe	1 Oe ≙ (10 <sup>3</sup> /4 π)A m <sup>-1</sup>		
(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							
名称					記号	SI 単位で表される数値		
キ	ユ		IJ	ſ	Ci	1 Ci=3.7×10 <sup>10</sup> Bq		
$\scriptstyle  u$	$\sim$	ŀ	ゲ	$\sim$	R	$1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{C/kg}$		
ラ				k	rad	1 rad=1cGy=10 <sup>-2</sup> Gy		
$\scriptstyle  u$				Д	rem	1 rem=1 cSv=10 <sup>-2</sup> Sv		
ガ		$\boldsymbol{\mathcal{V}}$		7	γ	$1 \gamma = 1 \text{ nT} = 10^{-9} \text{T}$		
フ	T.		N	"		1フェルミ=1 fm=10 <sup>-15</sup> m		
メー	ートル	采	カラゞ	ット		1 メートル系カラット= 0.2 g = 2×10 <sup>-4</sup> kg		
ŀ				ル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa		
標	準	大	気	圧	atm	1 atm = 101 325 Pa		
+1	ы		11	_		1 cal=4.1858J(「15℃」カロリー), 4.1868J		
15	Ц		9		cal	(「IT」カロリー), 4.184J(「熱化学」カロリー)		
3	ク			~	u	$1 \mu = 1 \mu m = 10^{-6} m$		