



JAEA-Review

2018-018

DOI:10.11484/jaea-review-2018-018

平成29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 FY2017
(April 1, 2017 – March 31, 2018)

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

JAEA-Review

February 2019

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 (<https://www.jaea.go.jp>)
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, 2019

平成 29 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

(2018 年 10 月 1 日受理)

日本原子力研究開発機構では、原子力の総合的研究開発機関として原子力に係わるさまざまな分野の研究開発を行っており、これらの研究開発の多くにおいて計算科学技術が活用されている。計算科学技術活用の高まりは著しく、日本原子力研究開発機構における計算科学技術を活用した研究開発の成果は、全体の約 2 割を占めている。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（環境の回復・原子炉施設の廃止措置）に向けた研究開発や、高速炉サイクル技術に関する研究開発、原子力の安全性向上のための研究、原子力基礎基盤研究等といった主要事業に利用された。本報告は、平成 29 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。

Summaries of Research and Development Activities
by using Supercomputer System of JAEA
in FY2017 (April 1, 2017 – March 31, 2018)

Information Technology Systems' Management and Operating Office

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

(Received October 1, 2018)

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 FY2017, the system was used for R&D aiming to restore Fukushima (environmental recovery and nuclear installation decommissioning) as a priority issue, as well as for JAEA's major projects such as research and development of fast reactor cycle technology, research for safety improvement in the field of nuclear energy, and basic nuclear science and engineering research.

This report presents a great number of R&D results accomplished by using the system in FY2017, as well as user support, operational records and overviews of the system, and so on.

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

目 次

1. はじめに.....	1
2. 原子力機構の大型計算機システム環境.....	4
3. 平成 29 年度における計算機利用実績.....	6
3.1 システム稼働率・利用率.....	6
3.2 大型計算機システムの組織別利用実績.....	7
4. 大型計算機システムの利用支援.....	10
4.1 計算機利用における支援.....	11
4.1.1 利用相談.....	11
4.1.2 プログラム開発整備.....	11
4.1.3 プログラム最適化チューニング.....	14
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）.....	16
5. 大型計算機システム利用による研究成果.....	18
5.1 安全研究センター.....	18
5.1.1 大型格納容器実験装置 CIGMA を用いた凝縮実験の熱流動解析.....	18
5.1.2 航空機モニタリングにおける地形影響度と地形パラメータの相関.....	20
5.1.3 ENACCEF2 水素爆燃実験の CFD 解析.....	22
5.2 J-PARC センター.....	25
5.2.1 核変換実験施設（TEF）の放射線遮蔽評価.....	25
5.2.2 加速器駆動核変換システムのための核特性評価および線量評価.....	28
5.2.3 JAEA 溶融鉛ビスマスターゲットの数値設計.....	31
5.2.4 J-PARC AMATERAS 実験データ解析.....	34
5.2.5 密度汎関数摂動理論を用いた鉄系超伝導体 FeSe のフォノン計算.....	36
5.3 原子力基礎工学研究センター.....	37
5.3.1 外部被ばくのモニタリングに用いる実用量の検討.....	37
5.3.2 FNDI 法を用いた燃料デブリ計測に関するシミュレーション.....	40
5.3.3 DDA システム及び標準サンプル内中性子束分布に対するシミュレーション結果と実験値の比較.....	42
5.3.4 放射線飛跡の三次元可視化に関する PHITS の機能拡張.....	45
5.3.5 福島第一原子力発電所事故起源の放射性物質の長距離大気拡散解析.....	48
5.3.6 EXPACS-V の最新版 Windows への適用.....	50

5.3.7	環境放射性核種からの外部被ばく線量換算係数の評価.....	52
5.3.8	PHITS ユーザー入力支援ソフトウェア PHACE の開発	54
5.3.9	PHITS における出力形式の拡張	57
5.3.10	ニュートリノ核反応モデルの開発と検証.....	59
5.3.11	解析関数眼球モデルを用いた放射線線量評価	62
5.3.12	PHITS の T-DCHAIN タリーの改良	64
5.3.13	PHITS の計算シミュレーションによる新しい PKA 測定システム的设计	66
5.3.14	Cs シリケートの構造と熱力学特性.....	69
5.3.15	第一原理計算による SA 時の Cs 吸着挙動評価	72
5.3.16	界面追跡法に基づく混相流解析手法開発.....	75
5.3.17	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	78
5.3.18	3次元多相多成分熱流動解析 JUPITER による空気の自然対流熱伝達解析の妥当性検証.....	81
5.3.19	合金化と組織制御のための原子・電子シミュレーション	84
5.3.20	鉄鋼表面における吸着水素原子挙動の解析.....	87
5.4	先端基礎研究センター	89
5.4.1	低次元強相関係の基底状態および励起ダイナミクスの研究	89
5.5	物質科学研究センター	92
5.5.1	磁性体における微視的磁化過程シミュレーションプログラム.....	92
5.6	核燃料サイクル工学研究所.....	94
5.6.1	輸送容器の許認可申請に係る安全解析コードの整備	94
5.7	大洗研究開発センター	95
5.7.1	高温ガス炉の新しい利用に関する予備検討.....	95
5.7.2	JMTR 廃止措置計画のための構造部材の中性子束評価	98
5.8	高温ガス炉水素・熱利用研究センター	100
5.8.1	高温ガス炉用三次元動特性解析コードの開発	100
5.8.2	群分離技術併用による商用高温ガス炉の高レベル廃棄物の減容効果の評価.....	103
5.9	次世代高速炉サイクル研究開発センター.....	106
5.9.1	自然循環時燃料集合体内熱流動試験に対する妥当性確認解析.....	106
5.9.2	天井衝撃圧力評価のためのスロッシング解析モデルの開発	109
5.9.3	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.....	112

5.9.4	連続エネルギー中性子・光子輸送モンテカルロ法コード MVP を用いた ZPR6/7 の As-built モデルでの Na ボイド反応度解析	115
5.9.5	連続エネルギーモンテカルロコード MVP を使用した金属燃料ナトリウム冷却高速炉の炉心核特性解析	118
5.9.6	熱流動解析コード (Fluent) による崩壊熱除去性能評価ナトリウム試験検討のための解析評価手法整備について	120
5.10	もんじゅ運営計画・研究開発センター	122
5.10.1	高速炉の供用期間中検査のための電磁場シミュレーション	122
5.10.2	格納容器内事象解析コード CONTAIN/LMR の整備 (II)	125
5.11	廃炉国際共同研究センター	126
5.11.1	レーザーはつり除去加工中の現象把握のための解析手法の開発 (1)	126
5.11.2	レーザーはつり除去加工中の現象把握のための解析手法の開発 (2)	128
5.12	システム計算科学センター	130
5.12.1	粒界リン偏析過程の分子動力学シミュレーション	130
5.12.2	照射材料の微細構造発達シミュレーションのための原子論的シミュレーション	132
5.12.3	第一原理計算による原子力材料劣化機構の研究	134
5.12.4	高温水中多価アルコール脱水反応の第一原理メタダイナミクス計算	136
5.12.5	材料機能における核量子効果の計算科学研究	139
5.12.6	福島第一原子力発電所港湾内の放射性物質動態解析シミュレーション	141
5.12.7	転位と溶質元素の第一原理計算	144
5.12.8	原子・分子シミュレーションによる核燃料の物性評価	146
5.12.9	原子力分野での物性計算科学技術の高度化	148
5.12.10	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	151
5.12.11	大規模流体計算の超並列計算技術の開発	154
5.12.12	In-Situ PBVR を利用した流体解析向け可視化機能の開発	157
5.12.13	格子ボルツマン法に基づく実時間風況解析ソフトウェアの開発	160
6.	おわりに	163
	付 録	164
	著者名別 論文索引	166

Contents

1. Introduction	1
2. Supercomputer System of JAEA.....	4
3. Computer Usage Records in FY2017.....	6
3.1 Availability and Utilization Rate	6
3.2 Sector Computer Time	7
4. User Support of Supercomputer System of JAEA.....	10
4.1 Support for the Use of Supercomputer System of JAEA.....	11
4.1.1 Help Desk.....	11
4.1.2 Program Development and Maintenance.....	11
4.1.3 Program Optimization Tuning	14
4.2 Training for Computer Usage Techniques (Tutorials, Seminars)	17
5. Research and Development Activity by using Supercomputer System of JAEA	18
5.1 Nuclear Safety Research Center	18
5.1.1 Numerical Simulation of Thermal-hydraulic Behavior of Steam Condensation Experiment using Large Containment Vessel Facility CIGMA.....	18
5.1.2 Correlation Between Topographical Effects and Topographical Parameters in Radiological Aerial Measurement.....	20
5.1.3 CFD Analysis for Hydrogen Deflagration Tests at ENACCEF2 Facility.....	22
5.2 J-PARC Center.....	25
5.2.1 Evaluation of Radiation Shielding for Transmutation Experimental Facility (TEF)	25
5.2.2 Evaluation of Nuclear Properties and Radiation Dose for Accelerator-driven System.....	28
5.2.3 Numerical Design of JAEA LBE Spallation Target.....	31
5.2.4 Data Analysis of J-PARC AMATERAS Experiments.....	34
5.2.5 Lattice Dynamics of FeSe Superconductor Studied by Density-functional Perturbation Theory	36
5.3 Nuclear Science and Engineering Center.....	37
5.3.1 Study on Operational Quantity for Monitoring of External Exposure	37

5.3.2	Simulations for Measuring the Fuel Debris using the FNDI Method	40
5.3.3	Comparison between Simulation and Experimental Results for Neutron Flux in DDA Systems and Standard Samples	42
5.3.4	Development of 3D-visualization Tally for Particle Tracks	45
5.3.5	Long-range Atmospheric Dispersion Simulation of Radionuclides from the Fukushima Daiichi NPP Accident	48
5.3.6	Update of EXPACS-V Executable in Latest Windows PC.....	50
5.3.7	Evaluation of Dose-conversion Coefficients for External Exposure to Radionuclides Distributed in Environments.....	52
5.3.8	Development of PHITS Graphical User Interface: PHACE.....	54
5.3.9	Improvement of Function for Output Format of PHITS	57
5.3.10	Development and Verification of Reaction Model for Neutrino-induced Reactions.....	59
5.3.11	Radiation Dose Assessment using a Stylized Eye Model	62
5.3.12	Improvement of T-DCHAIN Tally in PHITS.....	64
5.3.13	Design of a New PKA Measurement System by PHITS Simulations	66
5.3.14	Structural and Thermodynamic Properties of Cs Silicates	69
5.3.15	Evaluation on Cs Adsorption Behavior during SA	72
5.3.16	Development of Multiphase Flow Analysis Method based on Interface Tracking Method	75
5.3.17	Development of Numerical Simulation Method for Thermal Fluid Flow Phenomena on Severe Accident Condition in Reactor Pressure Vessel	78
5.3.18	Validation of Air Free-convective Heat Transfer Analysis with JUPITER.....	81
5.3.19	Atomic and Electronic Modeling for Alloying and Defect Textures	84
5.3.20	Analysis of Hydrogen Adsorption at Surface of Steel.....	87
5.4	Advanced Science Research Center	89
5.4.1	Research for Ground State and Excitation Dynamics in Low-dimensional Strongly Correlated Systems.....	89
5.5	Materials Sciences Research Center	92
5.5.1	Simulation Program for Microscopic Magnetization Processes in Magnetic Materials.....	92
5.6	Nuclear Fuel Cycle Engineering Laboratories	94
5.6.1	Development of Safety Analysis Code Relating to Licensing Application of the Transport Container	94

5.7	Oarai Research and Development Center	95
5.7.1	Feasibility Study of New Applications at the High-temperature Gas-cooled Reactor	95
5.7.2	Evaluation of Neutron Flux of Structure Materials for JMTR Decommissioning Plan.....	98
5.8	HTGR Hydrogen and Heat Application Research Center	100
5.8.1	Development of Three-dimensional Reactor-kinetics Code for HTGRs	100
5.8.2	Evaluation on Volume Reduction Effect of HLW from a Commercial-scale HTGR	103
5.9	Advanced Fast Reactor Cycle System Research and Development Center	106
5.9.1	Validation Analysis of Thermal-hydraulic Experiments for Fuel Assembly under Natural Circulation Conditions	106
5.9.2	Development of Sloshing Analysis Model for Evaluation of Impacts on Roofs	109
5.9.3	Advancement of a Computer Program for Sodium-water Reaction Phenomena in a Steam Generator of Fast Reactors.....	112
5.9.4	Sodium Void Reactivity Analysis on an As-built Model of ZPR6/7 with the Monte-Carlo Code MVP for Neutron and Photon Transport Calculations based on the Continuous Energy Method	115
5.9.5	Calculation of Core Neutronics Characteristics of Metal Fuel Sodium-cooled Fast Reactor using the Continuous-energy Monte Carlo Code MVP	118
5.9.6	Establishment of Analysis and Evaluation Tool for the Investigation of the Sodium Test of Decay Heat Removal Characteristics	120
5.10	Monju Project Management and Engineering Center	122
5.10.1	Simulations of the In-service Inspection of FBR Components using Methods based on Eddy Currents	122
5.10.2	Development of Fast Reactor Containment Safety Analysis Code, CONTAIN/LMR, (II)	125
5.11	Collaborative Laboratories for Advanced Decommissioning Science	126
5.11.1	Development of a Numerical Simulation for Phenomenon of Laser Processing Techniques Combined with Water Jet Techniques (1).....	126
5.11.2	Development of a Numerical Simulation for Phenomenon of Laser Processing Techniques Combined with Water Jet Techniques (2).....	128

5.12	Center for Computational Science & e-Systems	130
5.12.1	Molecular Dynamics Simulation of Grain Boundary Phosphorus Segregation Process	130
5.12.2	Atomistic Simulations for Microstructural Evolution of Irradiated Materials.....	132
5.12.3	First-principles Study on the Degradation of Nuclear Reactor Steels.....	134
5.12.4	Ab Initio Metadynamics Calculations of Polyalcohol Dehydration Reactions in Hot Water	136
5.12.5	Computational Studies for Quantum Nuclear Effects in Functional Materials.....	139
5.12.6	Simulation for Radioactive Nuclide Transport Inside the Harbor in Fukushima Daiichi Nuclear Power Station	141
5.12.7	First-principles Calculations of Interaction between Dislocation and Solute Atoms	144
5.12.8	Atomic Simulations of Physical Properties for Nuclear Fuel	146
5.12.9	Development of Numerical Techniques for Materials in the Research Field of Atomic Energies.....	148
5.12.10	Numerical Simulation of Radioactive Materials in the Environment	151
5.12.11	Development of Massively Parallel Simulation Technology for Extreme Scale CFD Simulations.....	154
5.12.12	Development of Visualization Function for Fluid Analysis using In-Situ PBVR.....	157
5.12.13	Development of Turbulent Wind Simulation using Lattice Boltzmann Method	160
6.	Conclusion.....	163
	Appendices.....	164
	Author Name Index	166

This is a blank page.

1. はじめに

計算科学技術は「理論」及び「実験」と並ぶ第3の研究手法として、21世紀の先端的研究のフロンティアを切り開くための重要な基盤技術となっている。特に、原子力のような巨大技術においては、安全面や時間・空間の制約等により実験が困難な場合が多く、計算科学技術は従来から重要な研究手法となっている。日本原子力研究開発機構（以下「原子力機構」）においても、多くの研究開発に計算科学技術が用いられており、特に大型計算機システムは研究開発の推進に不可欠なものとなっている。

原子力機構の研究開発における計算科学技術の重要性は、発表論文数に見てとれる（図 1.1）。平成 29 年度に原子力機構の発表した査読付論文の総数は 854 件であった。このうち計算科学技術を利用した論文は 201 件（23.5%）である。この論文数は、全論文の 20%以上を占めており、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。

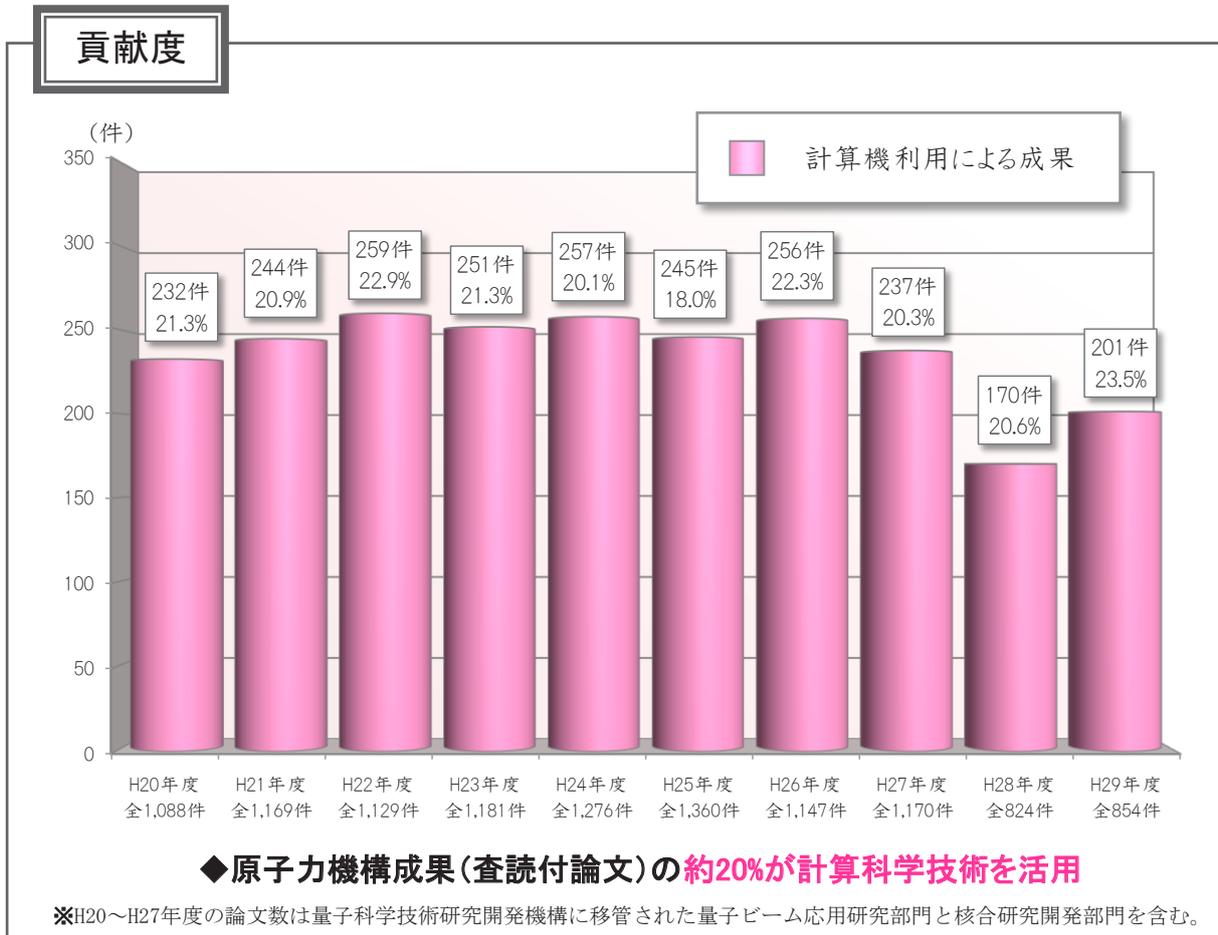


図 1.1 計算科学技術による研究成果創出貢献度 [平成 20～29 年度]
(原子力機構が発表した査読付き論文における計算科学技術を活用した論文の割合)

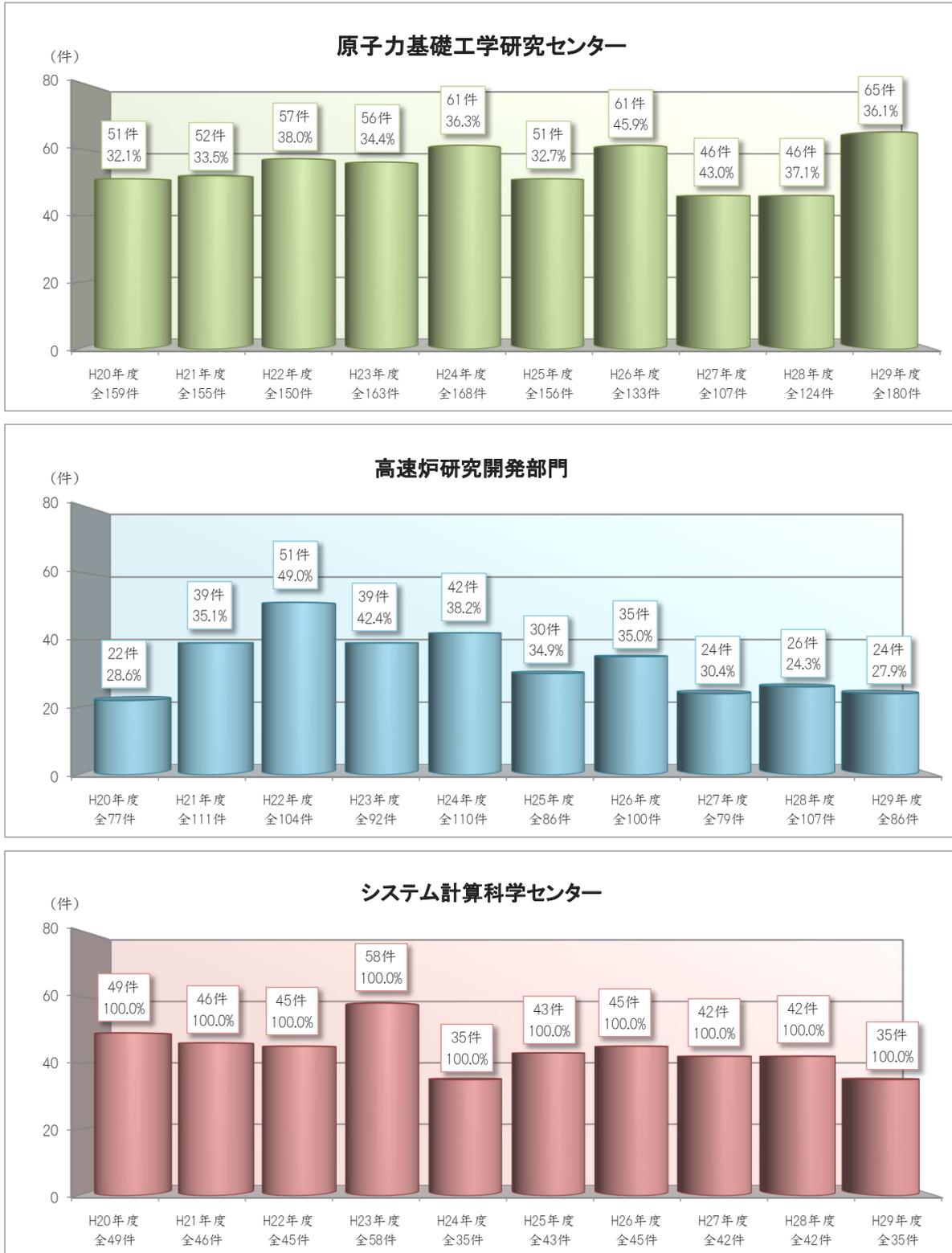


図 1.2 組織別計算科学技術による研究成果創出貢献度 [平成 20 年度～29 年度]

システムの利用実績が多い3組織（原子力基礎工学研究センター、高速炉研究開発部門、システム計算科学センター）の研究成果創出貢献度を図 1.2 に示す。原子力基礎工学研究センターにおいては、計算科学技術を活用した論文の割合が高く、1/3 以上を創出している。

本報告は、原子力機構における平成 29 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

平成 27 年 11 月 25 日より運用を開始した大型計算機システム（原子力機構スーパーコンピュータシステム）は、中核となる大規模並列演算部、ISV アプリ処理部、可視化処理部、ログイン処理部及び周辺機器から構成される。システムの構成を図 2.1 に、主な仕様を表 2.1 に示す。

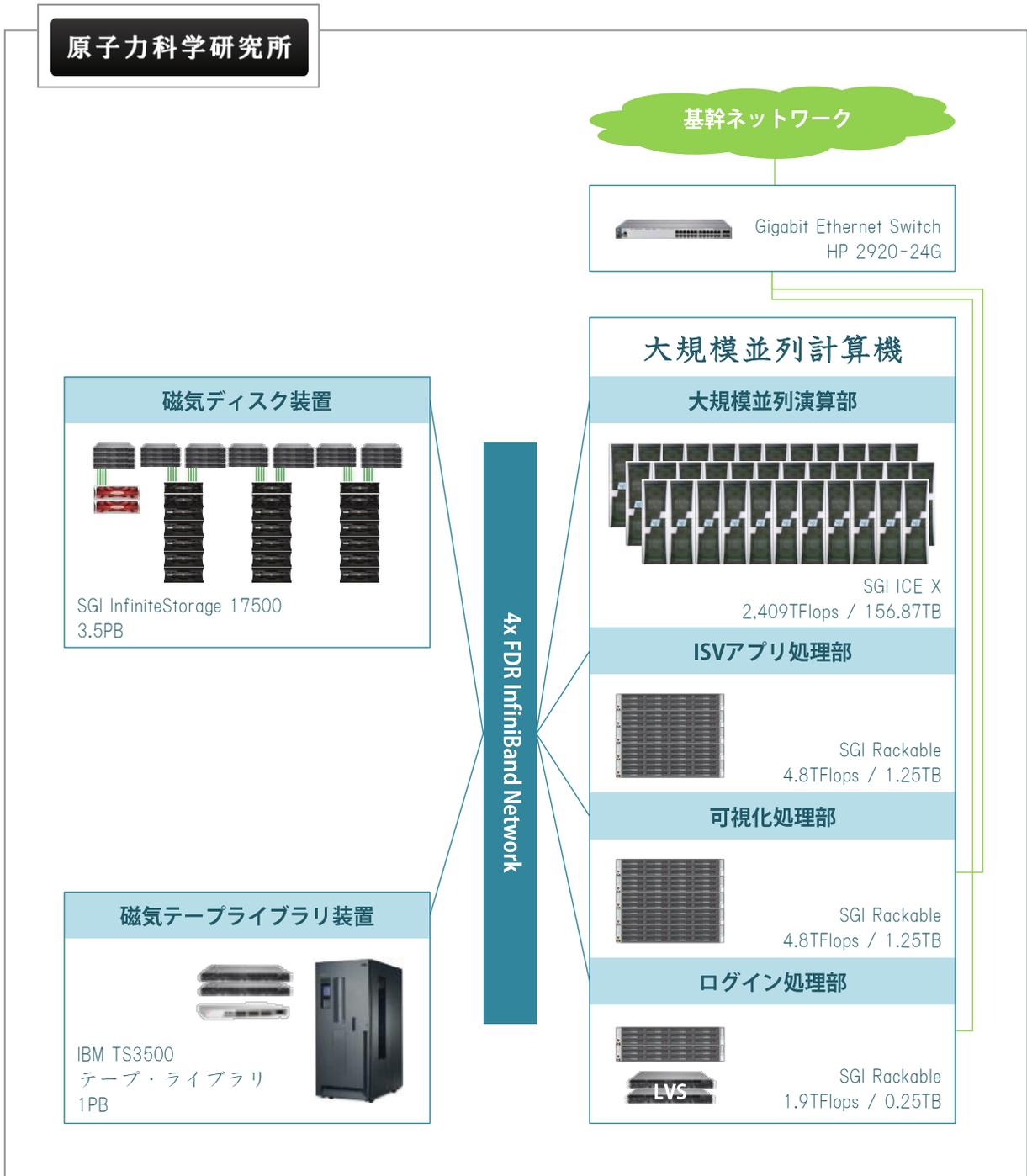


図 2.1 原子力機構スーパーコンピュータシステム

表 2.1 原子力機構スーパーコンピュータシステムの性能(主な仕様)

	大規模並列演算部 SGI ICE X	ISV アプリ処理部 SGI Rackable C2112-GP2	可視化処理部 SGI Rackable C2112-GP2	ログイン処理部 SGI Rackable C2112-GP2
タイプ	スカラ	スカラ	スカラ	スカラ
総演算性能 (TFLOPS)	2,409	4.8	4.8	1.9
コア数	60,240	120	120	48
ノード数	2,510	5	5	2
CPU	Xeon E5-2680 v3 12 コア/CPU	Xeon E5-2680 v3 12 コア/CPU	Xeon E5-2680 v3 12 コア/CPU	Xeon E5-2680 v3 12 コア/CPU
演算性能/コア (GFLOPS)	40.0	40.0	40.0	40.0
メモリ (GB/ノード)	64	256	256	128
総主記憶容量 (TB)	156.8	1.2	1.2	0.256
ノード間 通信性能	片方向 13.6GB/s (全二重)	片方向 13.6GB/s (全二重)	片方向 13.6GB/s (全二重)	片方向 13.6GB/s (全二重)
OS	SUSE Linux Enterprise Server 11 SP3	SUSE Linux Enterprise Server 11 SP3	RedHat Enterprise Linux Server 6.6	SUSE Linux Enterprise Server 11 SP3
コンパイラ	Fortran C/C++	Fortran C/C++	Fortran C/C++	Fortran C/C++

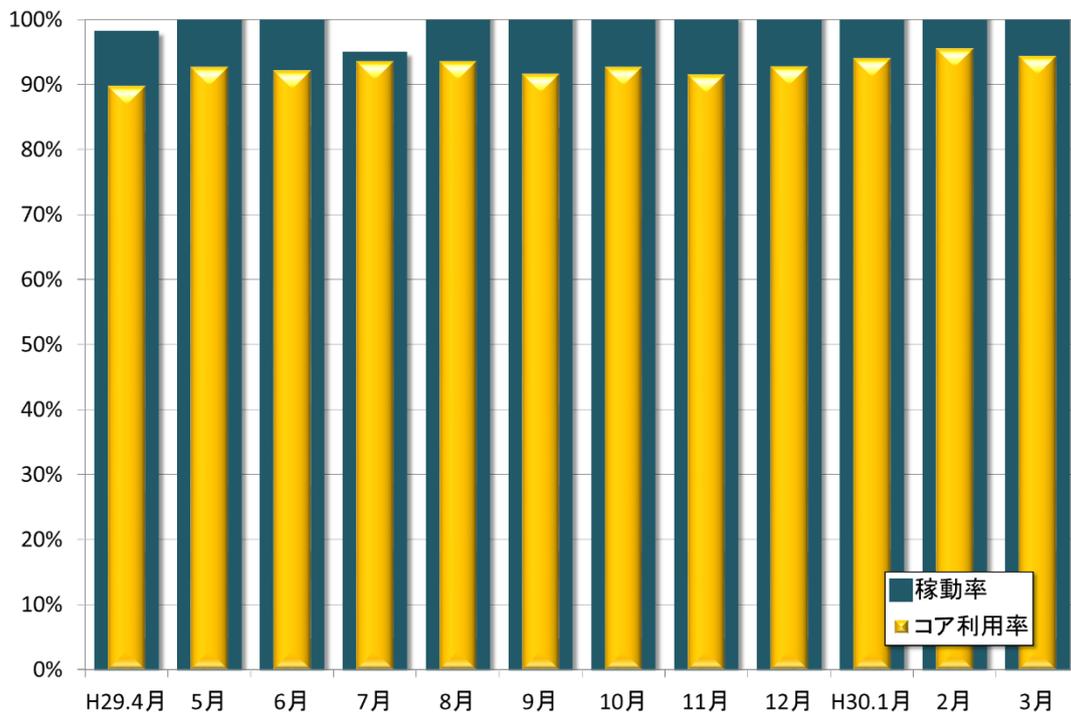
平成 29 年 3 月末 現在

3. 平成 29 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

① 稼働率

原子力機構スーパーコンピュータシステムの中核をなす ICE X は、システム停止を伴う大きなトラブルの発生もなく、稼働率は 99% の高率を達成した（図 3.1：紺の棒グラフ）。稼働率が 100% となっていない月は運用停止を伴う作業を実施している（4 月：年度切替え作業、7 月：構内全域停電作業、11 月：システム保守作業）。



※稼働率= (実運用時間 / 運用可能時間) × 100

運用可能時間：運用可能日数 × 24 時間

実運用時間：運用可能時間 - (システムダウン時間 + 保守時間)

※コア利用率= (総コア利用時間 / 総コア運用時間) × 100

総コア利用時間：ジョブで利用したコア時間の総合計

総コア運用時間：実運用時間 × 60,240 コア

図 3.1 ICE X の稼働率・コア利用率

② コア利用率

平成 28 年度に実施したジョブ運用の改善の一つである「プロセッサの割当変更による実行順序の制御」の対策においては、一般利用者用ノードのコア利用率（日次）が約 30% から約 60% に向上した。この対策による効果の高いことが認められたことから目標を 80% としてさらに向上すべく、課題承認者用ノードの小規模ジョブ（432 コア以下）の待ちジョブ数の推移から一般利用者用ノードのプロセッサの割当（表 3.1）を拡張することで、課題承認者用ノードの小規模ジョブ（432 コア以下）のスループット改善と一般利用者用ノードのコア利用率向上を図った。このプロセッ

サ割当の見直しの効果により、システム全体のコア利用率（年間）は 92.7%（前年度比：+4.1 ポイント）に向上している（図 3.1：橙の棒グラフ、詳細な利用実績は付録 A に示す）。

表 3.1 ジョブ運用の改善

対策日	対策内容
1 平成 29 年 7 月	一般利用者用ノードをより効果的に活用するため、小規模ジョブ（432 コア以下）がない場合、プロセッサ（2,592 コア→3,240 コア）の割当を変更し、課題承認者用ノードの小規模ジョブ（432 コア以下）の実行多重を増加

3.2 大型計算機システムの組織別利用実績

原子力機構における ICE X の利用者数は 317 名（システムの運用要員を除く）であった。組織別利用者数においては、原子力基礎工学研究センター、安全研究センター、システム計算科学センター及び次世代高速炉サイクル研究開発センターの 4 つの組織で大きな割合を占めている（図 3.2）。

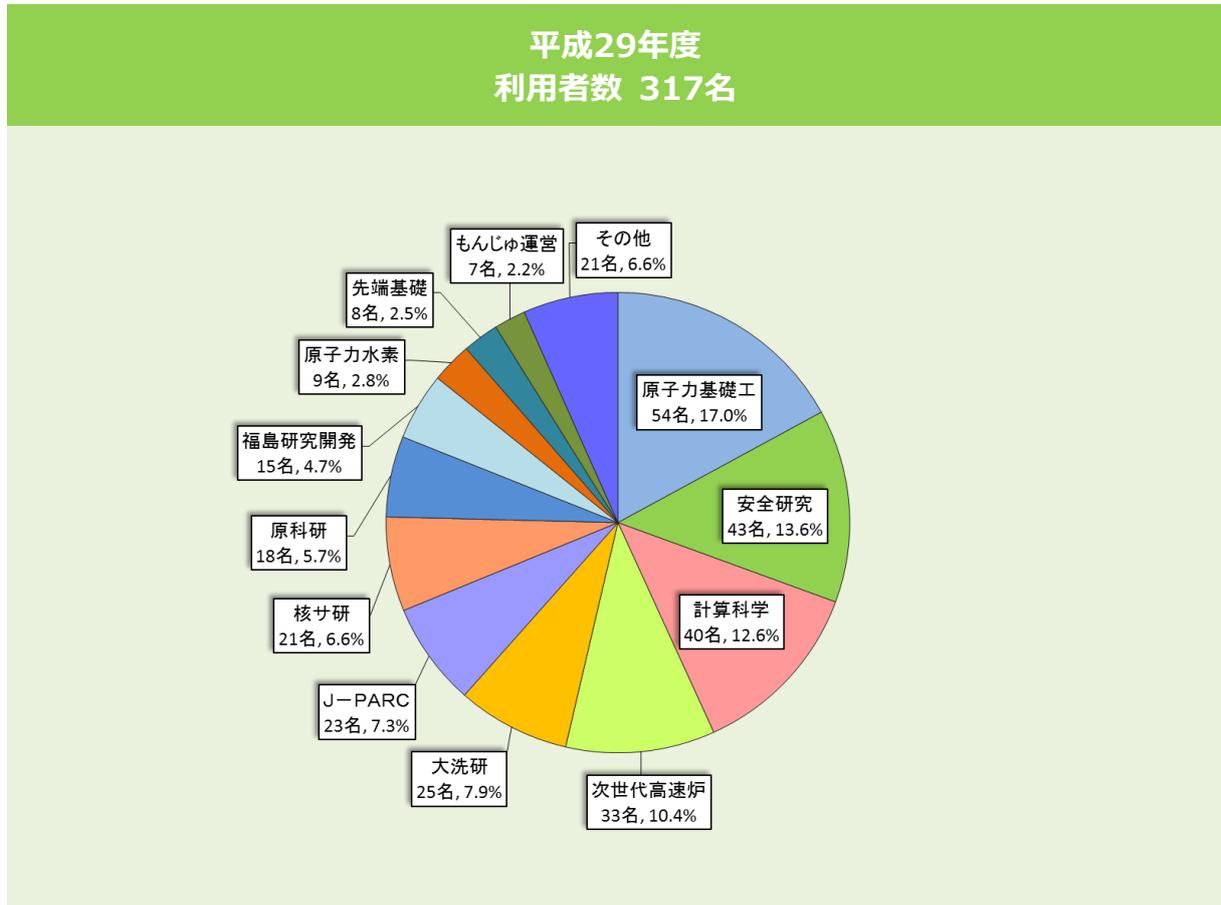


図 3.2 ICE X の組織別利用者数

原子力機構における ICE X の利用コア時間は、4 月からの累積で 35,384 万コア時間が利用された。分野別のコア利用時間を図 3.3 に示す。先端基礎研究センターの利用割合が 3.6 ポイント、次世代高速炉サイクル研究開発センターが 2.8 ポイント増加した。全体時間の約 20%は、福島第一原子力発電所事故対応として、環境中の放射線物質の挙動や炉心内構造物の溶融挙動などの事故解析関連計算に利用された。本報告に集録した福島復興に係る対応の一覧を表 3.2 に示す。

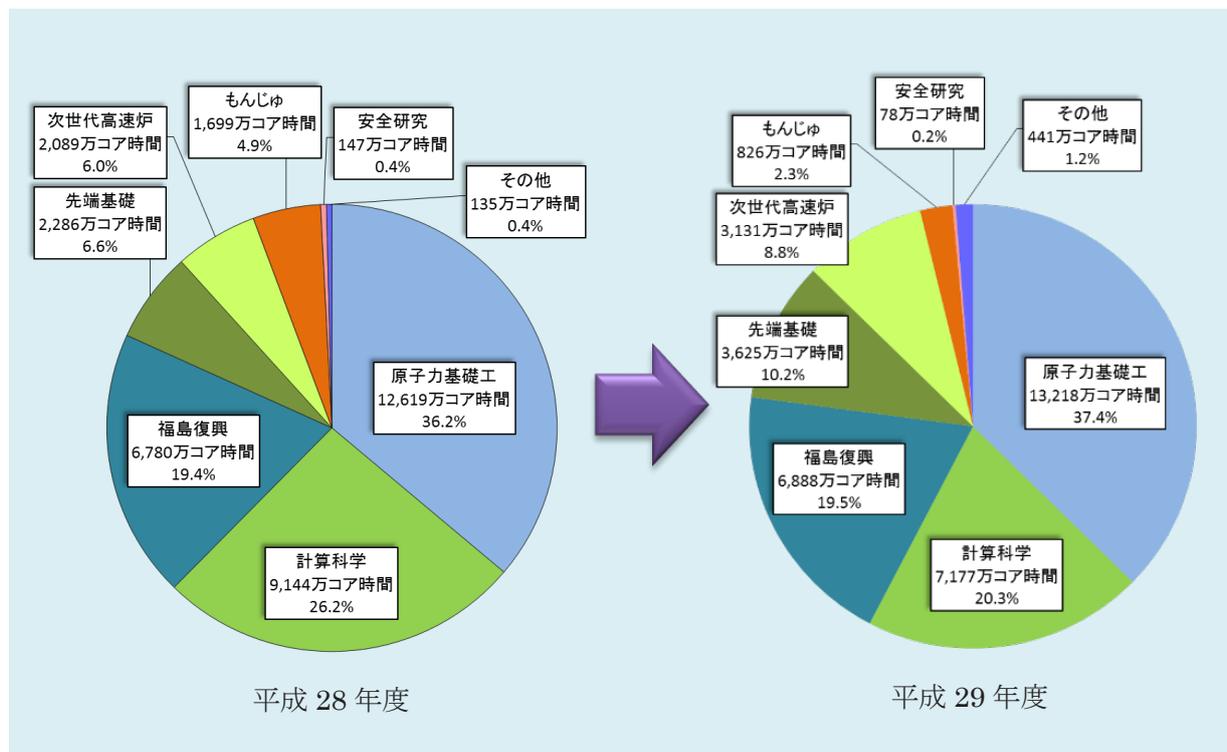


図 3.3 ICE X の分野別コア時間利用実績

表 3.2 主な ICE X 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	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 1,500	2,623.4	5.3.17 項
2	土壌中のセシウム (Cs) の除染、吸着・脱離挙動の評価	システム計算科 学センター	VASP 9,792	1,847.8	5.12.10 項

表 3.2 主な ICE X を利用した福島復興に係る対応 (2/2)

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
3	溶融燃料落下挙動評価手法 開発	原子力基礎工学 研究センター	TPFIT 4,000	1,579.7	5.3.16 項
4	トリチウム等の強い核量子 効果を示す物質群の物性解 明	システム計算科 学センター	VASP 5,040	444.4	5.12.1 項
5	シビアアクシデント時のセ シウム (Cs) 吸着挙動評価	原子力基礎工学 研究センター	VASP 2,400	187.0	5.3.15 項
6	過酷事故時の燃料挙動の解 析	システム計算科 学センター	VASP 432	81.6	5.12.8 項
7	福島第一原子力発電所港湾 内の放射性物質動態解析	システム計算科 学センター	KOWAN 432	36.8	5.12.6 項
8	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	35.2	5.3.7 項
9	福島第一原子力発電所事故 起源の放射性物質の長距離 大気拡散解析	原子力基礎工学 研究センター	WSPEEDI 96	2.2	5.3.5 項

4. 大型計算機システムの利用支援

大型計算機システムを利用した成果の着実な創出には、研究者における創意工夫によるところが第一ではあるが、システムを運用管理する部門における利用者への充実した支援が欠かせない。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。

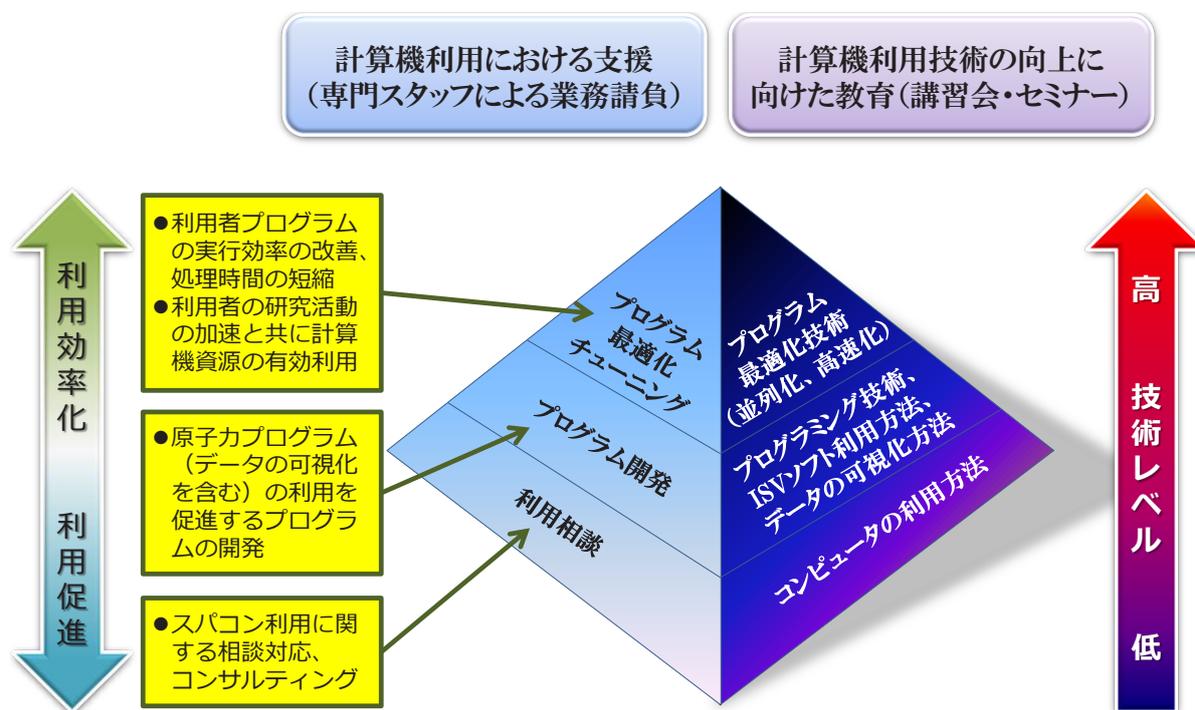


図 4.1 利用支援体制

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 29 年度の利用相談は、年間 860 件（月平均：約 70 件）寄せられた（詳細は付録 B に示す）。そのうち約 63%が ICE X の利用、約 16%が可視化（可視化相談・技術支援：111 件、可視化ソフトウェアのインストール支援：23 件）に関するものである。ICE X 利用相談の大半は ISV アプリに関するものであり、平成 28 年度に比べ 59 件増加した。

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。平成 29 年度は 9 件の応募があり、表 4.1 に示す選定要件に基づき、プログラム開発整備作業を採択・実施した。

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

選定要件	選定件数
(P1) 原子力機構内で共通に使用されるプログラム	5 件
(P2) 大規模課題で使用するプログラム	—
(P3) 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	1 件
(P4) 大規模データの可視化処理を行なうプログラム	—
(P5) 福島支援等、緊急対応が必要なプログラム	2 件
(P6) ICE X への整備が必要なプログラム	1 件

平成 29 年度の主な作業について表 4.2 に示す。福島支援等の緊急対応が必要であるとして選定した「福島廃炉関連レーザー切断技術を補完する解析手法の開発」では、福島第一原子力発電所の廃炉に向け、レーザーを利用した燃料デブリ切断現象を定量的に予測できる解析手法の開発に着手した。基礎検討として固体壁面上に液体が一定の厚さで存在する 2 次元モデルを作成し、汎

用ソフトを用いて解析した。これにより、液膜厚さの違う液体が沸騰し蒸発する過程の再現計算等に利用できる見通しが得られた。

表 4.2 平成 29 年度プログラム開発整備作業 (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Ⅲ (P1)	ユーザ数 2,000 名を超える汎用モンテカルロ計算コード (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ース (PHACE) の開発を支援。平成 28 年度に開発した Windows 版 PHACE (第Ⅱ版) に対し、面データの専用入力フォームによる入力補助機能の追加を実施。 これにより、PHITS が計算対象とする空間領域を定義するセクションで、構成する面の形質定義を記述することが可能となった。	5.3.8 項
2	PHITS における出力形式の追加 (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 PHITS コードの開発を支援。平成 28 年度に開発したタリー結果の統合機能に対し、以下の機能追加を実施。 ① タリー結果を核子あたりのエネルギー[MeV/u]で出力する機能 ② PHITS 実行時の実験値を読み込むことができる特殊な angel パラメータ (inf1:) を入力する機能 これにより、MeV/u 単位で書き出す機能が追加され、宇宙線など様々な重イオンが関与する研究の解析が容易となった。	5.3.9 項
3	EXPACS-V の最新版 Windows への適用 (P1)	宇宙線による被ばく線量を Google Earth 上で可視化する EXPACS-V コードに対し、実行バイナリのコンパイル及びインストーラ作成を生成する開発環境の構築ならびに最新版 Windows 環境に適用したコードの修正を実施。 これにより、Windows10 の環境で様々な条件に対する宇宙線被ばく線量率分布地図を簡単に可視化すること可能となった。	5.3.6 項

表 4.2 平成 29 年度プログラム開発整備作業 (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	ランダムネスを含む磁性体における磁区および磁化過程シミュレーションプログラムの作成 (P3)	<p>磁性体の物理的性質を解明するため、スカラー場に対する空間 2 次元及び 3 次元における時間依存ギンツブルグ=ランダウ方程式を用いたシミュレーションコード群 (6 本) に対し、時間経過に伴い変化する温度によるノイズを計算式に追加する機能とリスタート機能を追加し、リスタート機能を用いた計算結果の評価解析を実施。</p> <p>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より詳細に明らかにして、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。</p>	5.5.1 項
5	福島廃炉関連レーザー切断技術を補完する解析手法の開発 (I)、(II) (P5)	<p>レーザーによる燃料デブリ切断現象を定量的に予測できる解析手法の基礎検討を行うため、汎用熱体解析コード FLUENT を使用し、固体壁面上に液体が一定の厚さで存在する体系のモデル作成と沸騰現象を模擬した評価解析を実施。</p> <p>これにより、液膜厚さの違う液体が沸騰し蒸発する過程を詳細に把握することが可能となり、実験結果の再現計算ができる見通しを得られた。</p>	5.11.1 項 5.11.2 項
6	PHITS の [T-DCHAIN] タリーの改良 (P1)	<p>PHITS に実装されている高エネルギー粒子誘導放射能計算コード DCHAIN-SP の入力ファイルを作成する [T-DCHAIN] タリーに対し、以下の機能追加を実施。</p> <ol style="list-style-type: none"> ① PHITS の [T-DCHAIN] の xyz および r-z メッシュへの対応 ② DCHAIN-SP の ① で得られる入力ファイルの読込 ③ DCHAIN-SP の xyz および r-z メッシュの計算結果の出力 ④ DCHAIN-SP の二次元表示の出力 <p>これにより、DCHAIN 用入力ファイルの作成時間も短縮され、加速器施設や原子炉などの誘導放射能の計算が効率的に実施できるようになった。</p>	5.3.12 項

表 4.2 平成 29 年度プログラム開発整備作業 (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	格納容器内事象解析コード CONTAIN/LMR の整備 (Ⅱ) (P6)	ナトリウム冷却高速炉の事故時の格納容器の健全性評価技術開発を ICE X で実施する目的として、CONTAIN/LMR コードを使用し、データ構造の見直し (入出力モジュール間の配列の整合性調査と修正) と高速炉モデルプラントのレベル 2PSA・格納容器内事象進展の評価解析を実施。 これにより、数値計算の安定性向上や解析時間の短縮化などが図られ、効率的な実機解析評価が可能となった。	5.10.2 項
8	高温ガス炉用三次元動特性解析コードの開発 (P1)	超高温ガス炉 (VHTR) の研究開発を ICE X で実施する目的として、汎用流体解析コード STAR-CCM+を使用し、高温工学試験研究炉 (HTTR) の解析モデルの寸法や形状等の改良方法及び STAR-CCM+と他の汎用解析コードを結合し、双方のデータを入出力できる方法の調査ならびに原子炉出力 9MW の定常解析及び循環機 3 台停止試験の過渡解析を実施。 これにより、STAR-CCM+を用いた解析モデルの改良手順、他汎用解析コードとの入出力値を結合する手順及び作成した解析モデルの定常計算・過渡計算の実行手順も確立できたため、安全性評価に適用できる見通しを得られた。	5.8.1 項

4.1.3 プログラム最適化チューニング

プログラム最適化チューニングでは、大型計算機システムで実行されるプログラムについて、高速化・並列化チューニングを行い、実行効率の改善、処理時間の短縮を実現することで、利用者の研究活動を加速させるとともに計算資源の有効活用を図っている。例えば、チューニングにより、計算時間が 20%短縮されれば、計算機資源が 20%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 29 年度は 6 件の応募があり、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。

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

選定要件	選定件数
(T1) 大規模課題で使用するプログラム	2 件
(T2) 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	2 件
(T3) 原子力機構内で共通に使用されるプログラム	1 件
(T4) 福島支援等、緊急対応が必要なプログラム	—
(T5) ICE X への整備が必要なプログラム	1 件

平成 29 年度の主な作業について表 4.4 に示す。計算機資源の有効利用のため効率化が必要として選定した大規模課題で利用するプログラムの高速化・並列化作業では、「改良界面追跡法を用いた詳細二相流解析コード (TPFIT)」及び「非構造格子版の多次元ナトリウム-水反応解析コード (SERAPHIM)」において、並列化手法の高度化により大規模並列化（約 1,000→約 10,000 並列）を実現した。これら 2 コードの平成 30 年度における使用コア時間（4 月現在の予定）は、合計で約 4,200 万コア時間（システム全体の約 15%）を見込んでいる。

表 4.4 平成 29 年度高速化・並列化作業（1/2）

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
1	改良界面追跡法を用いた詳細二相流解析コード TPFIT (T1)	① Z 軸方向の 1 次元領域分割から 3 (X,Y,Z) 方向の 3 次元領域分割の改良 ② 3 次元領域分割に伴う MPI 通信命令の変更	10 倍の大規模並列化（約 1,000→約 10,000 並列）を達成。	5.3.16 項
2	非構造格子版の多次元ナトリウム-水反応解析コード SERAPHIM (T1)	① Z 軸方向の 1 次元領域分割から 3 (X,Y,Z) 方向の 3 次元領域分割の改良 ② スレッド並列化	10 倍の大規模並列化（約 1,000→約 10,000 並列）を達成。	5.9.3 項

表 4.4 平成 29 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
3	磁性体における微視的 磁化過程シミュレーシ ョンコード LL-EQ (T1)	① 不要な演算処理の削除 ② フーリエ変換ルーチン 置き換え ③ メモリアクセスの改善 ④ LAPACK から ScaLAPACK へ置き換え ⑤ MPI 並列化	約 200 倍の速度向上 (24 ス レッド×1 並列→1 スレッド ×128 並列) を達成。	5.5.1 項
4	燃料集合体熱流動解析 コード ASFRE (T3)	① べき乗計算の変更 ② メモリアクセスの改善 ③ サブルーチンのインラ イン展開 ④ スレッド並列化	約 2.5 倍の速度向上 (逐次→ 4 スレッド並列) を達成。	5.9.1 項

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を図っている。

平成 29 年度の講習会は、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、ISV (Independent Software Vender) ソフト、可視化関連のセミナー及び講習会を 8 回開催 (初級レベル: 6 回、中級レベル: 2 回、上級レベル: 0 回)、延べ 105 名が参加した (表 4.5)。実習による講習会や実機を使って確実な技術習得を指向した。

表 4.5 平成 29 年度講習会 (1/2)

項	技術レベル	開催日時	開催場所	内容	形式	参加者
1	ISV ソフト 初級	平成 29 年 6 月 2 日	情報交流棟 104 会議室	STAR-CCM+の CAD 機能を使った モデリングトレーニング	講義 実習	7 名

表 4.5 平成 29 年度講習会 (2/2)

項	技術レベル	開催日時	開催場所	内容	形式	参加者
2	利用方法 初級	平成 29 年 7 月 29 日	情報交流棟 104 会議室	スーパーコンピュータシステムプ ログラミング講習会	講義	22 名
3	可視化 初級	平成 29 年 8 月 4 日	情報交流棟 104 会議室	ParaView 講習会	講義 実習	11 名
4	ISV ソフト 中級	平成 29 年 10 月 12,13 日	情報交流棟 104 会議室	STAR-CCM+のメッシングおよび 応用セミナー	講義 実習	13 名
5	ISV ソフト 初級	平成 29 年 11 月 9,10 日	情報交流棟 104 会議室	Fluent による形状最適化体験セミ ナー	講義 実習	15 名
6	ISV ソフト 初級	平成 29 年 12 月 7,8 日	情報交流棟 104 会議室	ANSYS Workbench Mechanical 入門および動解析セミナー	講義 実習	13 名
7	可視化 初級	平成 30 年 1 月 26 日	情報交流棟 104 会議室	EnSight 講習会 + V10.2 新機能紹 介	講義 実習	10 名
8	ISV ソフト 中級	平成 30 年 2 月 26,27 日	情報交流棟 104 会議室	Abaqus 破壊と損傷のモデル化セ ミナー	講義 実習	14 名

5. 大型計算機システム利用による研究成果

5.1 安全研究センター

Nuclear Safety Research Center

5.1.1 大型格納容器実験装置 CIGMA を用いた凝縮実験の熱流動解析

Numerical Simulation of Thermal-hydraulic Behavior of Steam Condensation Experiment using Large Containment Vessel Facility CIGMA

石垣 将宏

熱水力安全研究グループ

(1) 利用目的:

原子力機構ではシビアアクシデント時の格納容器内における熱水力挙動評価の高精度化に資する研究を進めている。その一環として、大型格納容器実験装置 CIGMA を製作し、格納容器内における水素挙動、蒸気凝縮挙動に関する実験を行っている。また実験と並行して、数値解析手法の高度化も実施している。

原子炉格納容器は大きな体積を有する容器であるため、その中では多次元的な流動が発生する。格納容器内の熱流動を高精度に評価するためには、数値流体力学 (CFD) による解析が必要となる。以上から、格納容器のような大規模体系での CFD 解析には大規模かつ長時間の計算が必要であり、大型計算機の利用が必須である。

(2) 利用内容・結果:

格納容器内熱流動解析手法の高度化を目的として、平成 29 年度は CIGMA における凝縮実験の CFD 解析を実施した。オープンソース CFD コード OpenFOAM の既存コードに対して、凝縮モデルを組み込んだコードを開発し、解析に適用した。

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

解析対象とした CIGMA 実験 CC-PL-13G の概要について述べる。CIGMA は高さ 11m、直径 2.5m の円筒型の容器であり、上部プール、中断・下段ジャケットに冷却水を注入することで容器外部から冷却を行える。また容器内に蒸気・空気・ヘリウム（水素の代替ガス）を注入可能である。CC-PL-13G 実験では、蒸気により十分加熱した容器内に蒸気・空気・ヘリウムを封入し、初期に容器頂部に高濃度のヘリウム層を形成した。次に上部プールへ冷却水を注水し、容器外部からの冷却を行い、容器内の熱流動挙動の計測を行った。

図1は容器内の各高さでのヘリウム濃度の時間変化を示す。破線が実験結果、実線が解析結果である。時刻0秒から冷却を開始している。容器上部では外面からの冷却により蒸気凝縮が進行し、非凝縮ガスであるヘリウムの濃度が増加している。一方、容器下部のヘリウム濃度は低下している。高さ10mにおけるヘリウム濃度の解析結果は実験結果よりも過大評価している。また高さ7mのヘリウム濃度の解析結果は実験結果よりも過小評価しており、解析結果の定量性に課題があることが分かる。今後、凝縮モデルの影響、乱流モデルの影響等について引き続き検討を進める予定である。

本研究は、原子力規制委員会原子力規制庁より受託した「平成29年度原子力施設等防災対策等委託費（軽水炉のシビアアクシデント時格納容器熱流動調査）事業」の一部として実施した。

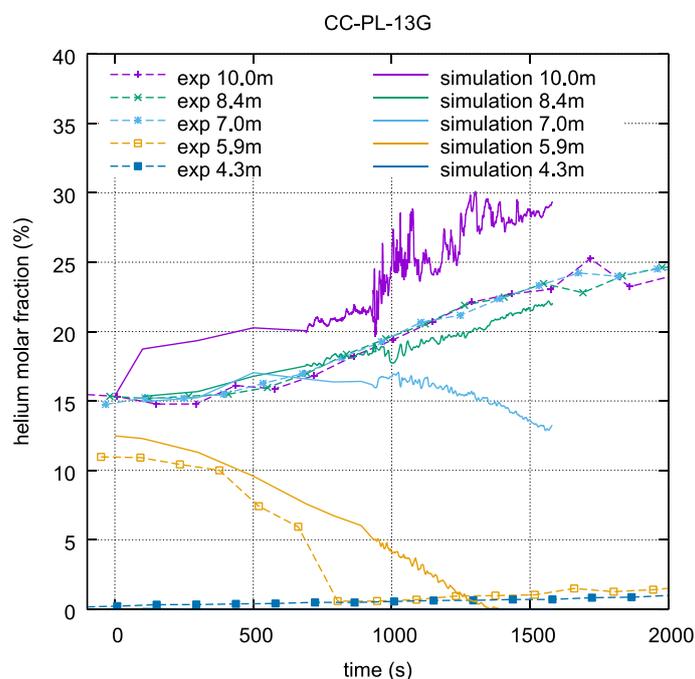


図1 高さにおけるヘリウム濃度の時間変化

(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、原子炉格納容器内熱水力挙動に関する研究を行っている。今後も引き続き、CIGMAを用いた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の検討を行い、熱水力挙動評価手法の性能向上を目指す予定である。

5.1.2 航空機モニタリングにおける地形影響度と地形パラメータの相関

Correlation Between Topographical Effects and Topographical Parameters in Radiological Aerial Measurement

石崎 梓

放射線安全防災研究グループ

(1) 利用目的:

航空機モニタリングは有人ヘリコプターに搭載された放射線測定システムを用いて地上の空間線量率や放射性核種の地表面沈着量を遠隔で測定する手法である。航空機モニタリングでは、地表から有人ヘリコプター内の放射線測定システムにて 1 秒間隔で測定されるガンマ線のエネルギースペクトルを取得し、バックグラウンド処理等を行った後、計数率を計数率-空間線量率換算係数 (CD) で除することによって地上 1m における空間線量率を算出している。しかし、係数 CD は測定対象となる地形が平坦であることが前提として定義された係数であるため、起伏地形にこの手法を適応した場合、不確かさが生じると考えられる。そこで、平坦な地形と比較して起伏のある地形を比較した場合、上空で測定されるガンマ線フラックスにどの程度の変動があるかについて、実際の地形上にランダムに抽出した評価点に対して、モンテカルロ粒子輸送コード PHITS2 を用いて評価するとともに、ガンマ線フラックスの変動と地形の起伏度を表現する何らかのパラメータとの間の相関について検証を行った。本件では、評価点数が 400 点ほどあり、計算量が膨大であったため、ICE X を利用した。

(2) 利用内容・結果:

実際の地形に対して、図 1 に示すような解析及び計算を実施した。

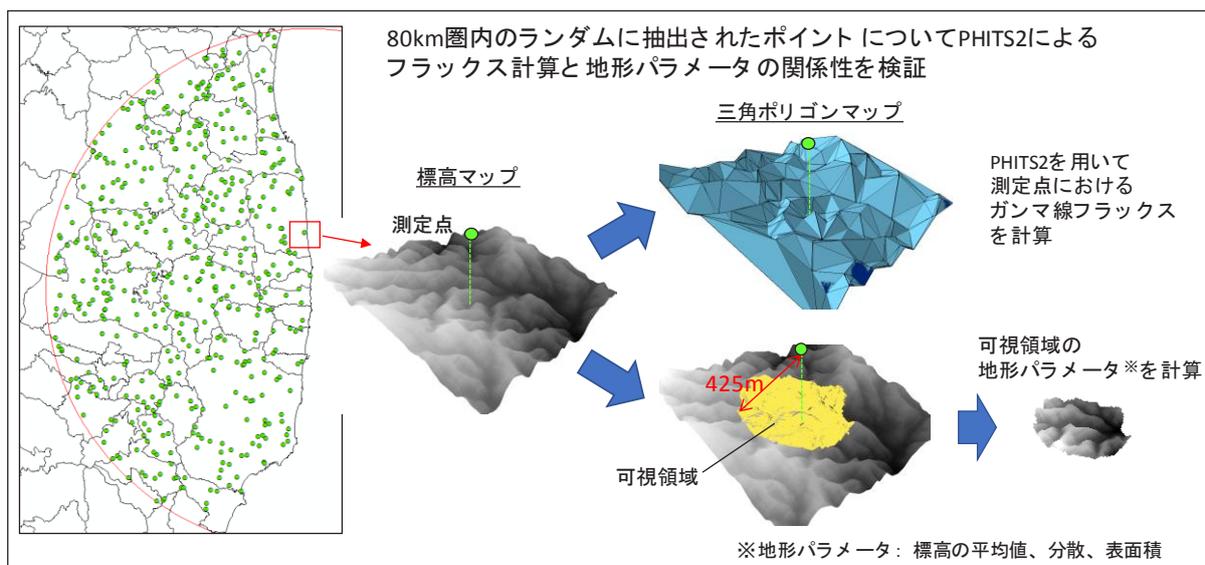


図 1 地形データの解析と PHITS2 によるフラックス計算の概要

評価点直下から半径 600m 以内の標高マップを四角形で抽出し、この標高マップに対して、① PHITS2 によるガンマ線フラックス計算と②可視領域内の地形パラメータ計算を実施した。①では抽出した標高マップを三角ポリゴンマップに変換し、得られた小三角形群をそれぞれ面線源と定義した PHITS2 のインプットファイルを作成した。②では、抽出した標高マップに対して、評価点から直線距離で 425m 以内の可視領域について、領域内の平均標高 (E)、標高の分散 (σ)、表面積 (S) を計算した。①の結果から、平坦な地形の場合のガンマ線フラックス (F_{fit}) に対する地形が起伏している場合のガンマ線フラックス (F) の比 (F/F_{fit}) は 0.5~2.5 であり、地形によって航空機モニタリングで計測される値と地表面の汚染密度との関係はこの範囲で変動することがわかった。また、①及び②の結果から、平均標高から得られるガンマ線減弱率 $C1(E)$ に表面積から得られるガンマ線減弱率 $C2(S)$ を乗じた値と F/F_{fit} に相関があることがわかった。この関係を用いて、地形影響を補正することを今後検討する。

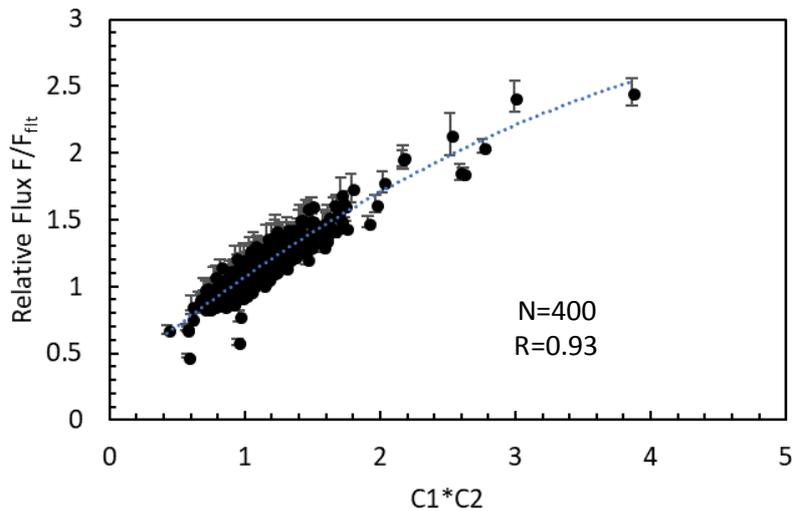


図2 地形パラメータとガンマ線フラックス比の関係

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) A. Ishizaki et al., “Application topographical source model in radiological aerial measurement”, 6th AMS International Technical Exchange on Uncertainty in Radiological Aerial Measurements (2018).

(4) 今後の利用予定:

本件の計算では、土壌への放射性核種の浸潤度を示す緩衝深度を 1.0 ($g\ cm^{-2}$) として PHITS2 のシミュレーションを行ったが、緩衝深度は放射性核種沈着からの経過時間に応じて増加するため、今後は緩衝深度が変化した場合の同様のシミュレーションを実施する。また、起伏度の多い地点を集中的に抽出し、データ数をさらに増やす予定である。膨大な計算を迅速に処理するためには ICE X の利用は必須であり、今後も利用を予定している。

5.1.3 ENACCEF2 水素爆燃実験の CFD 解析

CFD Analysis for Hydrogen Deflagration Tests at ENACCEF2 Facility

Nuri Trianti、佐藤 允俊、杉山 智之
シビアアクシデント評価研究グループ

(1) 利用目的:

Simulation techniques were developed to analyze the deflagration behavior of hydrogen generated during a hypothetical severe accident in the nuclear power plants. This work aimed to improve accurate and trustworthy combustion simulation that is applicable to the feasibility and effectiveness evaluation of countermeasures against hydrogen explosion in the reactor containment vessel or in the reactor buildings. CFD (Computational Fluid Dynamics) analyses using the OpenFOAM code were carried out on the hydrogen deflagration tests performed by IRSN at the ENACCEF2 facility in France [1].

(2) 利用内容・結果:

The ENACCEF2 is the flame acceleration test facility with mainly a vertical cylindrical tube with diameter of 230 mm and length of 7650 mm (Fig. 1). The tube is filled with hydrogen-air mixture and the gas is ignited at the bottom. To promote flame acceleration by turbulent flow, 9 annular obstacles are placed in the lower part of the tube.

The simulation is carried out using the ReactingFoam solver of OpenFOAM 3.0. The turbulence is modeled using the RNG (Renormalization group) k-epsilon model which is known for its reliable performance for the wall-bounded flow. The interaction of the chemical reaction with turbulence is modeled using PaSR (Partial Stirred Reactor) model with 19 elementary reaction set. This model scales the chemical reaction rate by a factor related to the chemical time scale and turbulence scale. Hydrogen reaction model of LLNL [2] was used for the chemical reaction model for PaSR. Figure 1 shows the computational grid with various cell sizes. The gas is ignited in the second mesh from the bottom by putting energy equivalent to the heat generated by complete combustion of hydrogen in the cell depending on the initial gas composition.

Figure 2 shows the transition of hydrogen mass fraction in the acceleration tube for ENACCEF2 Test 3 performed with initial gas composition of 15 vol% H₂ and 85 vol% of air. The position of flame front was detected by the steep drop of hydrogen mass fraction in the tube centerline, and the flame propagation velocity was estimated from the time-position relationship.

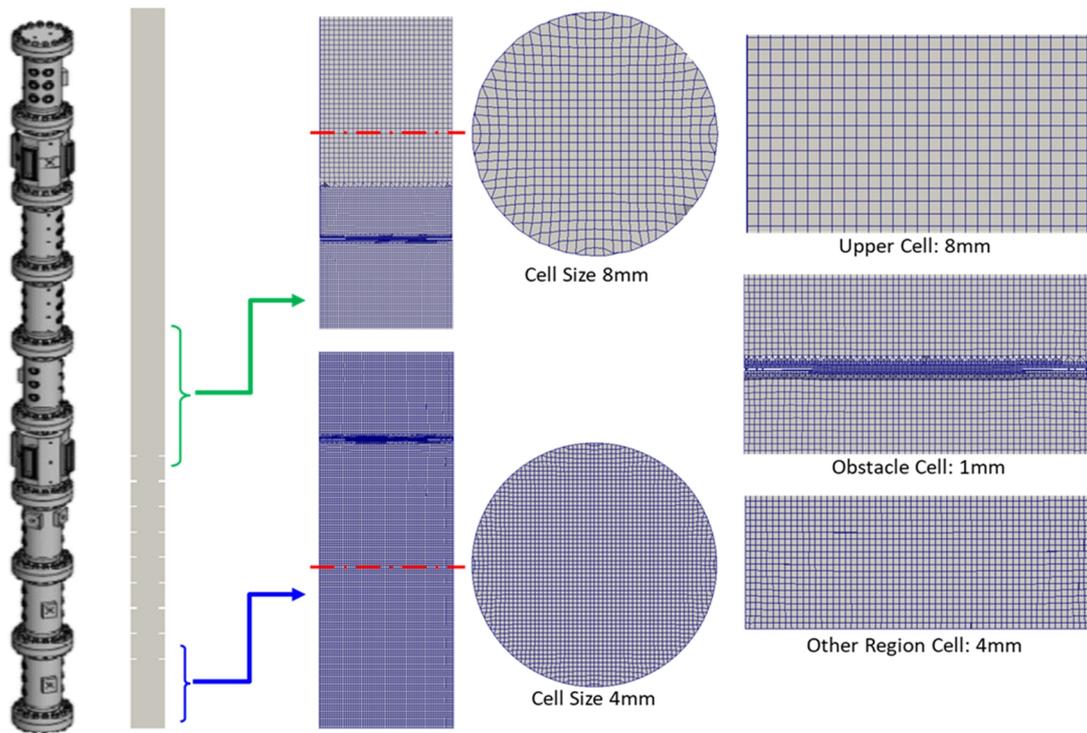


Fig. 1 ENACCEF2 facility [1] and computational grid used in this work

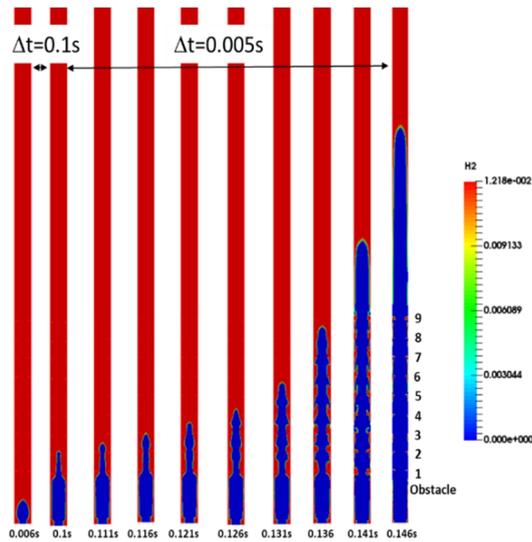


Fig. 2 Distribution of H₂ mass fraction of ENACCEF2 Test3

Figure 3 shows the flame propagation history in the ENACCEF2 Test 3. The experimental result shows the flame acceleration occurred when the flame passed through the first obstacle. The simulation result shows qualitative agreement with regard to the flame

acceleration in the obstacles. However, the reached velocity in the obstacle region is lower than the measurement and the simulation did not show the reduction of flame velocity above the obstacle region.

Further investigation is needed to clarify the cause of discrepancies and to identify effective modifications of the simulation models.

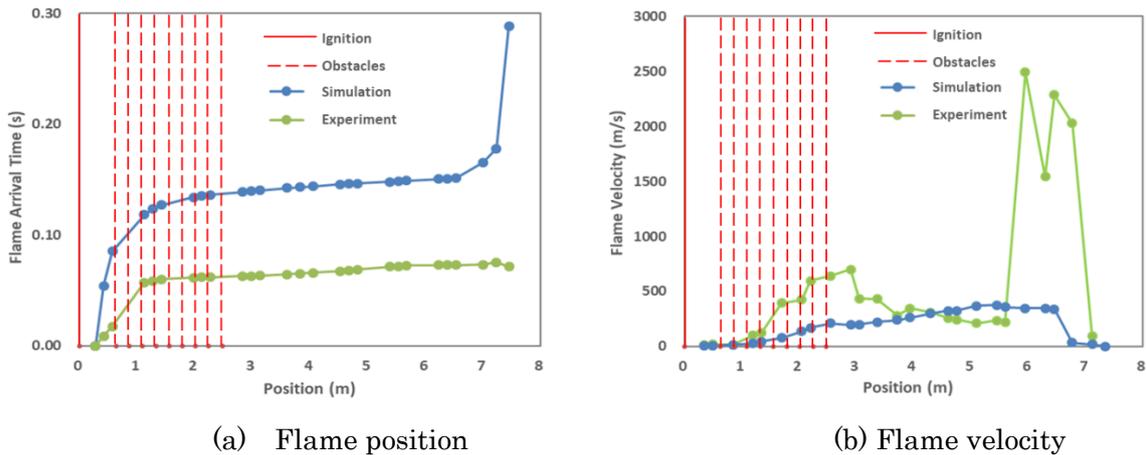


Fig. 3 Flame propagation in ENACCEF2 Test2

- [1] A. Bentaib and N. Chaumeix, “MITHYGENE project: Specification report for Double Blind simulations of Flame propagation in the new ENACCEF2 facility,” Technical report (2017).
- [2] Lawrence Livermore National Laboratory, Hydrogen, 2004, <https://combustion.llnl.gov/archived-mechanisms/hydrogen> (参照：2018年12月11日)。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) A. Bentaib, et al., “ETSON-MITHYGENE benchmark on simulations of upward flame propagation experiment in the ENACCEF2 experimental facility”, 12th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, Operation and Safety (NUTHOS-12), Qingdao, China, October 14-18, 2018.

(4) 今後の利用予定:

Improvements of analysis techniques of hydrogen deflagration, such as influence of cell size, turbulence model, application of burning velocity, and application of laminar flame velocity, are needed to resolve discrepancies with experiment result and to construct appropriate simulation methodology to evaluate hydrogen behavior in severe accidents.

5.2 J-PARCセンター J-PARC Center

5.2.1 核変換実験施設(TEF)の放射線遮蔽評価

Evaluation of Radiation Shielding for Transmutation Experimental Facility (TEF)

松田 洋樹、中山 優祐*、明午 伸一郎
施設利用開発セクション
*長岡技術科学大学

(1) 利用目的:

加速器駆動核変換システム(ADS)による長寿命核種の核変換技術に関する研究を行う、核変換実験施設(TEF)の建設がJ-PARCにて検討されている。TEFはADS独自の構成要素である核破砕ターゲットなどシステム技術の確立を目指すADSターゲット試験施設(TEF-T)と核変換技術の成立性に係る物理特性や運転・制御に関する研究を行う核変換物理実験施設(TEF-P)の二つで構成される。TEF-Tではビーム窓の損傷に関する研究、高放射線線量下での鉛ビスマス共晶体(LBE)ターゲット内の構造材の性質に関する研究、及びLBEターゲットシステムの制御・運転特性に関する研究が行われる。TEF-Pではマイナーアクチノイドを用いた未臨界炉の特性や制御に関する研究が行われる。

TEF-Tの陽子ビームラインに電磁石等の機器を搬入に用いる機器搬通路の入口は、常時立入区域の境界となり、ビーム運転中の実効線量を $25 \mu\text{Sv/h}$ 未満とする必要がある。利用者はPHITS[1]コードの習熟のため文献[2]に記された遮蔽計算の再現性を確認し、更に建屋構造を詳細にした計算体系における遮蔽に関し大型計算機を用いて行った。

(2) 利用内容・結果:

大型計算機上でTEF-Tにおける実効線量率分布の計算を行い、概ね文献[2]の結果を再現することを確認した。図1にTEFビームラインにおける後方中性子が寄与する実効線量分布(左図)とビームロスが寄与する分布(右図)を示す。赤色は常時立入条件の線量を超える領域を表す。ビームロスの寄与のみでは条件を満たすものの、LBE標的からの後方に生成した中性子では線量率が $25 \mu\text{Sv/h}$ を超えることが示された。文献[2]では必要条件を満足したものの、この計算結果を再現しない原因には、以前の計算に用いた統計が不十分であったことが考えられ、このために過小評価していたと思われる。

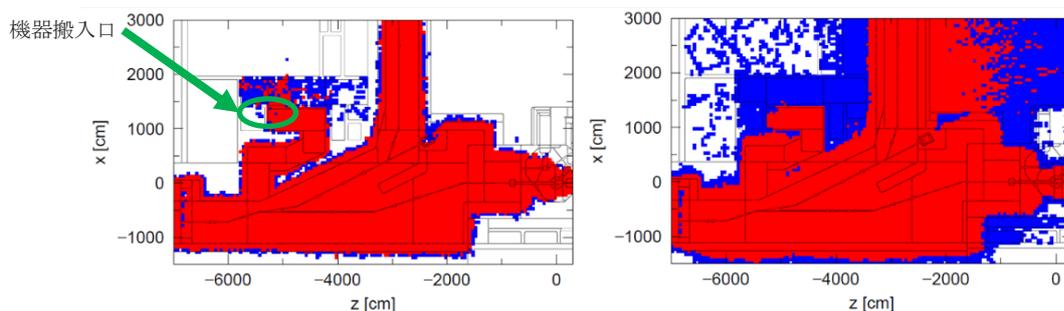


図1 TEF ビームラインにおける実効線量分布。

左図: LBE 標的からの後方中性子による線量分布、右図: ビームロスによる線量分布。

設計条件を満足させるために、搬入路の遮蔽厚の条件を変更せずに機器搬入通路を狭め、線量率を計算した。通路における中性子等の放射線のストリーミングを抑えるため、通路の高さと幅をそれぞれ半分にして断面積を従来案の 25%とした条件 (図2) で実効線量率を評価した。

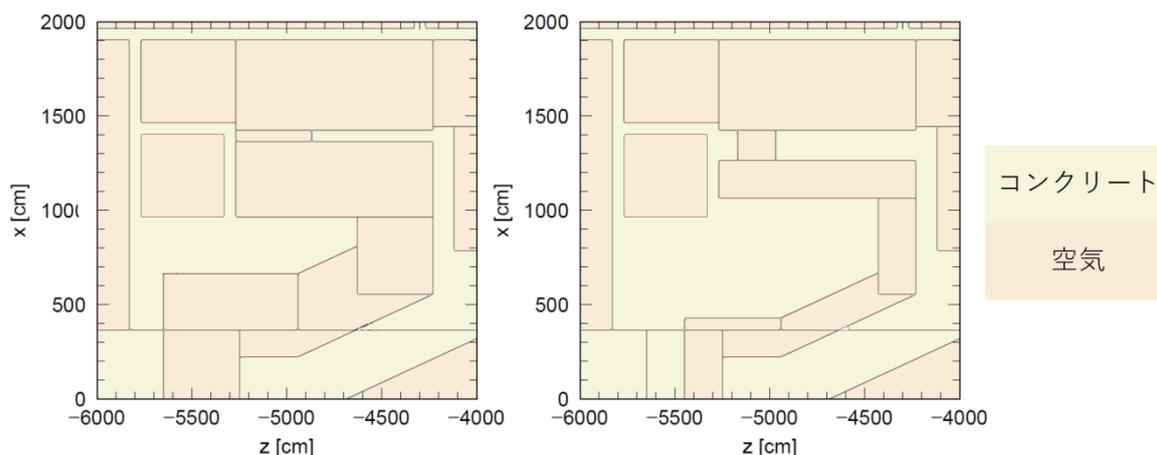


図2 計算に用いた体系の比較。左: 従来案、右: 幅・高さを半分にした形状。

計算の結果、搬入路の断面積を従来案の 25%とする場合には、常時立入条件となる線量率が $25 \mu\text{Sv/h}$ を十分下回ることが分かった。電磁石等の大型の機器搬入のためには、通路の幅を従来案の 50%以上確保することが要求されるため、通路断面積を従来案の 70%とし計算した。この条件の実効線量分布の計算結果を図3に示す。従来案の 70%とした場合、線量率が $25 \mu\text{Sv/h}$ を超えることが示された。ストリーミングによる線量率は通路の面積に比例するため、通路断面は従来案の 50%程度とすれば良いと考えられる。

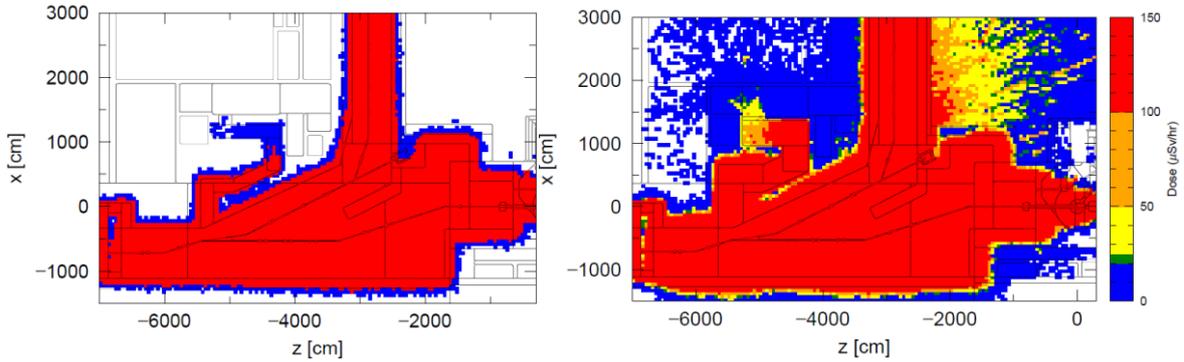


図3 断面積 25% (左)、断面積 70% (右) の場合の実効線量率分布。黄色、橙色、赤色は $25 \mu\text{Sv/h}$ 以上を表す。

以上の結果より、機器搬入通路の断面積は従来案の 75%では必要条件が満足できなく、従来案の 50%以下に抑えることにより、常時立入の基準値を満たされることが判明した。また、線量率の寄与は LBE から生じる中性子が支配的となることより、この寄与を減少させる遮蔽の増強により通路の拡幅が可能と思われる。

- [1] T. Sato, Y. Iwamoto, S. Hashimoto, T. Ogawa, T. Furuta, S. Abe, T. Kai, P. Tsai, N. Matsuda, H. Iwase, N. Shigyo, L. Sihver and K. Niita, Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02, J. Nucl. Sci. Technol., vol.55, No.6, pp.684-690, 2018.
- [2] J-PARC センター 核変換ディビジョン, J-PARC 核変換実験施設技術設計書; ADS ターゲット試験施設(TEF-T), JAEA-Technology 2017-003, 539p., 2017.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

特になし

(4) 今後の利用予定:

建築コスト削減および更なる合理化のため、今後建屋の詳細設計が完了した後に再度評価を行う計画である。

5.2.2 加速器駆動核変換システムのための核特性評価および線量評価

Evaluation of Nuclear Properties and Radiation Dose for Accelerator-driven System

松田 洋樹

施設利用開発セクション

(1) 利用目的:

加速器駆動核変換システム (ADS) 実現のためには克服すべき課題が多くあるが、その中でも特に(a) 核種生成断面積、(b) 180 度方向に生成する中性子、さらに(c) 線量評価が重要になる。これら計算は莫大な計算時間が必要となるため、大型計算機を用いて計算を行った。

(a) 陽子ビーム窓や標的などに使われる材料の陽子による核種生成断面積を精度よく評価することは施設を安定に運転するために重要となる。実機 ADS で想定する 1.5 GeV 陽子および TEF で想定する 400 MeV 陽子入射に対する放射化断面積の実験値は詳細な検討を行う上で必要であり、放射線挙動解析コード PHITS [1]による計算値は既存の実験値を再現するためには、さらに改良が必要となる[1]。平成 28 年度から継続して実験を行うとともに PHITS による計算との比較を行った。

(b) 実機 ADS の最適なパラメータを決定するための計算に関しても大型計算機を用いた。体系が比較的大きいうえ鉛などの重元素を扱うため粒子輸送に時間がかかり、さらにはパラメータを何通りか変えて評価を行うため、大型計算機で計算を行った。

(c) 原子力機構が提唱する ADS では炉心から陽子ビームに対し 180° 方向に生成する中性子が陽子ビームダクトを通じて外部に大量に漏洩し、線量および遮蔽設計に重大なインパクトを与える。そこで J-PARC 物質・生命科学実験施設 (MLF) の中性子源である水銀から生成する中性子を測定し PHITS による計算との比較検討を行った。計算において実際の水銀標的システムを再現した計算体系を用いて高い統計精度を得るため、大型計算機を用いて計算を行った。

(2) 利用内容・結果:

(a) 放射化断面積測定では 0.1mm 厚のさまざまな種類の金属板を積層させた試料に陽子を照射した。陽子エネルギーは 0.4 GeV から 3.0 GeV まで任意に変更することができる。また試料の種類を変えてシステムティックに測定を行った。同時に PHITS を用いて核反応モデル等を変えて計算を行った。さらに PHITS に組み込まれている蒸発モデル (GEM) をオリジナルコードに変更して計算を行った。その結果、PHITS 組み込みの GEM では実験値を 40%過小評価していたが、オリジナルの GEM コードを用いた計算結果は実験値を再現するようになった 1)[2]。

(b) 実機 ADS の体系において、1.5 GeV に加速された最大出力 20.25 MW の陽子ビームが鉛ビスマス標的に入射することを想定し、炉心上部の線量評価に大きく影響すると考えられるビームダクト半径および陽子ビーム幅をパラメータとして、計 4 ケースに対して炉心上部における実効線量率を求めた。なおここでは、計算コストの増大を抑えるため、鉛ビスマス標的から生成される二次粒子（中性子、陽子および光子）の寄与のみを示し、炉心の核燃料から生成される核分裂中性子及び光子の寄与は考慮していない。

この結果からビームダクト半径が 180 mm である時、遮蔽の観点から最適であることが分かった。一方でビームダクト径の変化により線量は桁ではなく数倍以内の範囲で変化することどまっていた。また炉心から離れた位置における線量値の相対誤差は 10% 以上であり、5% 以下にするためには計算時間をさらに増やす必要がある。

(c) 中性子測定では ϕ 8mm \times 10mm の小型液体シンチレータ（NE213）を標的から約 126m はなれた場所に設置しエネルギースペクトルを TOF 法により測定した。一方数値計算では、まず標的から後方に 5m 離れた場所でエネルギースペクトルをタリーした。次に得られたスペクトルで中性子を発生させ、実験で計測した位置におけるスペクトルをポイントタリーでタリーした。原理的にはつなぎ計算を行わずに計算できるが、膨大な時間が必要になるためつなぎ計算を行った。

実測値と 2 種類の核反応モデルによる計算値を図 1 に示す。この結果から INCL4.6/GEM [3,4] は全体的に実験値を再現することが分かった。

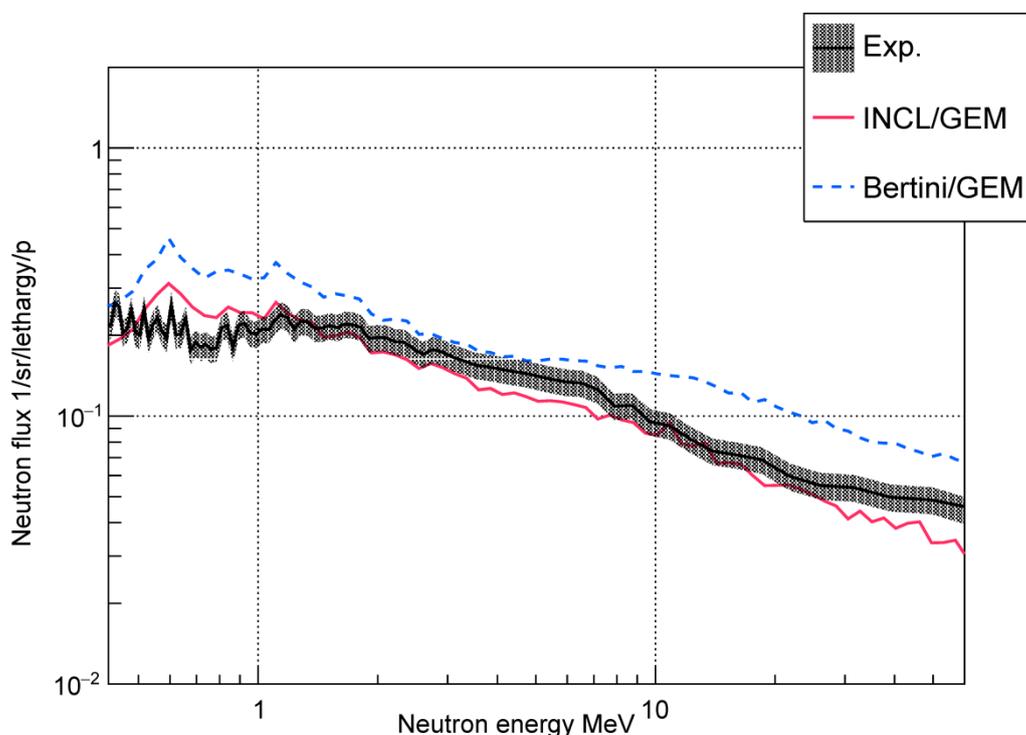


図 1 測定および計算で得た中性子エネルギースペクトル

- [1] T. Sato, Y. Iwamoto, S. Hashimoto, T. Ogawa, T. Furuta, S. Abe, T. Kai, P. Tsai, N. Matsuda, H. Iwase, N. Shigyo, L. Sihver and K. Niita, Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02, J. Nucl. Sci. Technol., vol.55, No.6, pp684-690, 2018.
- [2] 情報システム管理室, 平成 28 年度大型計算機システム利用による研究成果報告集, JAEA-Review 2017-023, pp.38-39, 2018.
- [3] A. Boudard, J. Cugnon, J.-C. David, S. Leray, and D. Mancusi, New potentialities of the Liège intranuclear cascade model for reactions induced by nucleons and light charged particles, Phys. Rev C, vol.87, No.1, 2013.
- [4] S. Furihata, Statistical analysis of light fragment production from medium energy proton-induced reactions, Nucl. Instr. Meth. B, vol.171, No.3, 2000.
- [5] T. Goorley, MCNP6.1.1-Beta Release Notes, LA-UR-14-24680, 2014.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) H. Matsuda, S. Meigo, H. Iwamoto, Proton-induced activation cross section measurement for aluminum with proton energy range from 0.4 to 3GeV at J-PARC, J. Nucl. Sci. Technol., vol.53, No.8, pp.1-7, 2018.
- 2) T. Sugawara, Y. Eguchi, K. Tsujimoto, H. Obayashi, H. Iwamoto, H. Matsuda, Design study of beam window for accelerator-driven system with subcriticality adjustment rod, the 26th International Conference on Nuclear Engineering, London, England, 2018.

(4) 今後の利用予定:

核種生成断面積の計算は平成 27 年度より継続して行ったが、来年度も必要な計算を続ける予定である。実機 ADS 遮蔽計算は実効線量率で評価したが、DPA や吸収線量の単位で評価を行う予定である。さらに効果的な遮蔽方法を検討し、計算を行い評価する。また MCNP [5]を用いて計算を行い PHITS との比較を行う。180° 核破碎中性子測定に関しては 1 MeV 以下の領域を重点的に測定し、並行して実験値と計算値の際の原因を特定する計画である。ADS 遮蔽計算と同様に MCNP でも計算を行う計画である。

5.2.3 JAEA 溶融鉛ビスマスターゲットの数值設計

Numerical Design of JAEA LBE Spallation Target

Tao WAN

ターゲット技術開発セクション

(1) 利用目的:

JAEA plans to construct a Lead-Bismuth Eutectic (LBE) spallation target within the framework of J-PARC to perform basic R&Ds for the future accelerator-driven systems (ADSs). The target will be bombarded by high power and high intense pulsed proton beams to produce neutrons. The target design should be optimized to allow the LBE flow to remove the generated huge heat effectively, and to suppress the damage occurrence as well.

The thermal-hydraulic analysis on LBE flow needs strong calculation capability. To carry out the detailed design work more efficiently, it is required to utilize the super computer to perform the calculation.

(2) 利用内容・結果:

1) Original target design

Figure 1 shows the Schematic drawing of the LBE spallation target at JAEA. The effective target length is 1000 mm. The inner diameter of the LBE vessel and the inner tube are 150 mm and 105 mm, respectively. The arrows show the LBE flow path in the target. The pulsed proton beams are injected into the target through the beam window (BW).

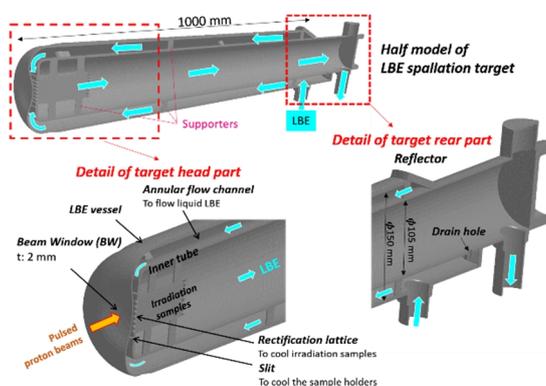


Fig.1 Schematic drawing of the LBE spallation target at JAEA.

Figure 2 shows the LBE flow pattern for the original full target design. Several issues arose due to the special configuration of the original full target design: 1) stagnant flow regions are formed in front of the inner tube; 2) a stagnant flow region at the BW tip; 3) a large re-circulation flow region is formed in the drain hole area; 4) a stagnant flow region is formed in the upper side of the annular flow channel close to the reflector; 5) extreme imbalance flow between the upper and lower part of the annular flow channel. The target head design and full target design was performed to solve the above issues. Details of the designs please refer to the publications listed in the next section.

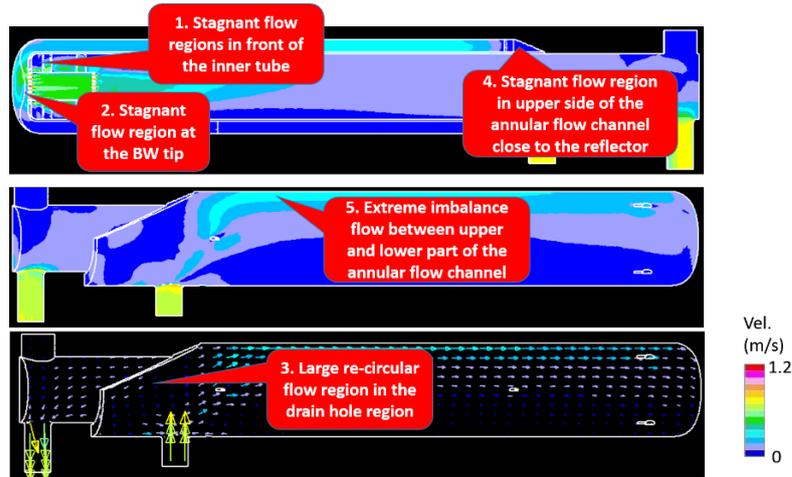


Fig.2 LBE flow pattern of the original full target design.

2) Comparison of original target design and updated target design

Figure 3 shows comparison of the LBE flow pattern between the original target design and the updated target design. Results show that all the issues mentioned above have been solved effectively by modifying the original target design. Moreover, flow velocity in the irradiation sample region is uniform and is similar to that of the original design, which provides a steady condition for material irradiation test in flowing LBE. Figure 4 shows the temperature and generated thermal stress on BW. After the modifications, the maximum temperature on BW has been reduced by approximately 35 °C to 506 °C. Consequently, the maximum generated stress has also been decreased by approximately 10 MPa to 205 MPa. Furthermore, there is no stress concentrated on the center of the BW. The strength of the BW improved by target modification.

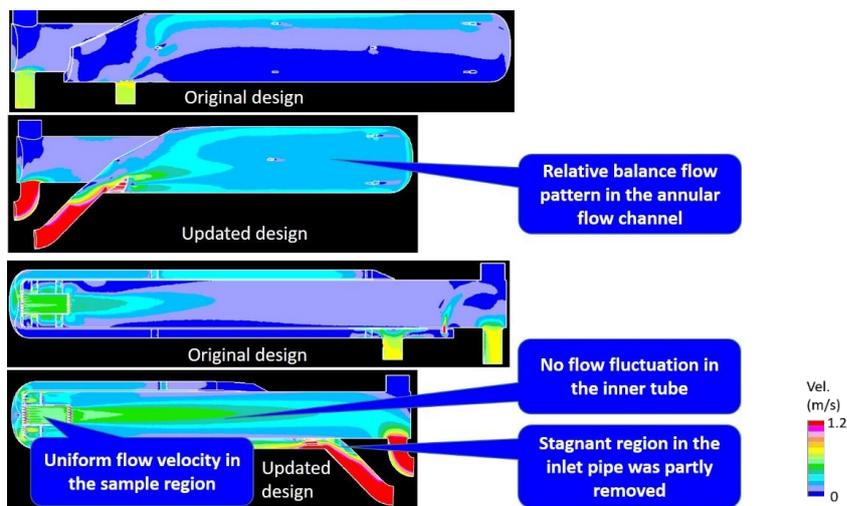


Fig.3 Comparison of the LBE flow pattern between the original target design and the updated target design.

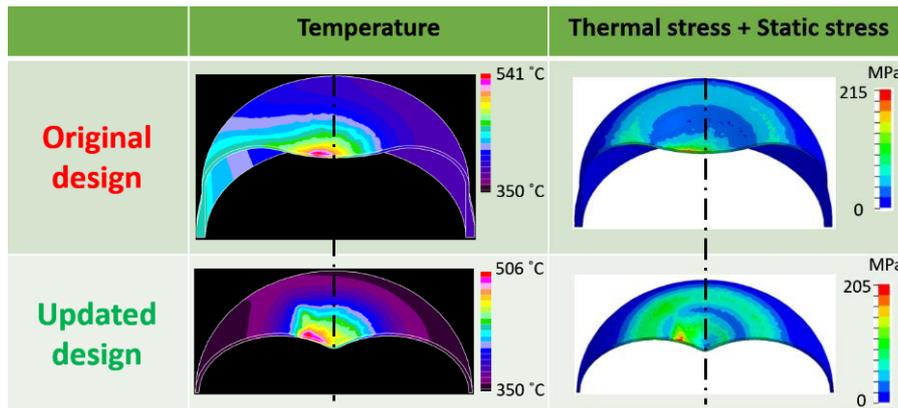


Fig.4 Comparison of the temperature and thermal plus static stress on BW between the original target design and the updated target design.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) T. Wan, H. Obayashi, T. Sasa, “Study on optimization of target head design for the TEF-T LBE spallation target”, in: Proceedings of Third International Workshop on Technology and Components of Accelerator-Driven Systems (TCADS-3), Mito, Japan, NEA/NSC/R(2017)2, pp.117-127.
- 2) T. Wan, H. Obayashi, T. Sasa, “Status of J-PARC Transmutation Experimental Facility Program Numerical design analyses for the TEF-T lead-bismuth spallation target”, AESJ 2017 Annual Meeting, 1D03, (2017).
- 3) T. Wan, H. Obayashi, T. Sasa, “Study on the Thermal-hydraulic of TEF-T LBE Spallation Target in JAEA”, in: Proceedings of 17th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-17), Xi’an, China, (2017).
- 4) T. Wan, H. Obayashi, T. Sasa, “Study on the thermal-hydraulic of the LBE spallation target head in JAEA”, Nuclear Technology, pp.1-12, (2018).

(4) 今後の利用予定:

In the future, detailed design for the LBE spallation target will be continuously carried out. Other more accurate turbulence models such as Large Eddy Simulation (LES) will be performed as well. Therefore, the support from the super computer system is much more necessary.

5.2.4 J-PARC AMATERAS 実験データ解析

Data Analysis of J-PARC AMATERAS Experiments

中島 健次
中性子利用セクション

(1) 利用目的:

J-PARC に設置された冷中性子チョッパー型分光器 AMATERAS で行った中性子非弾性散乱実験のデータについて、その解析を試みた。同装置で取得された中性子イベントから測定試料内の磁氣的揺動の成分を物理学的モデルと比較して、磁性に関わる微視的パラメーターを中種することを旨とした。

(2) 利用内容・結果:

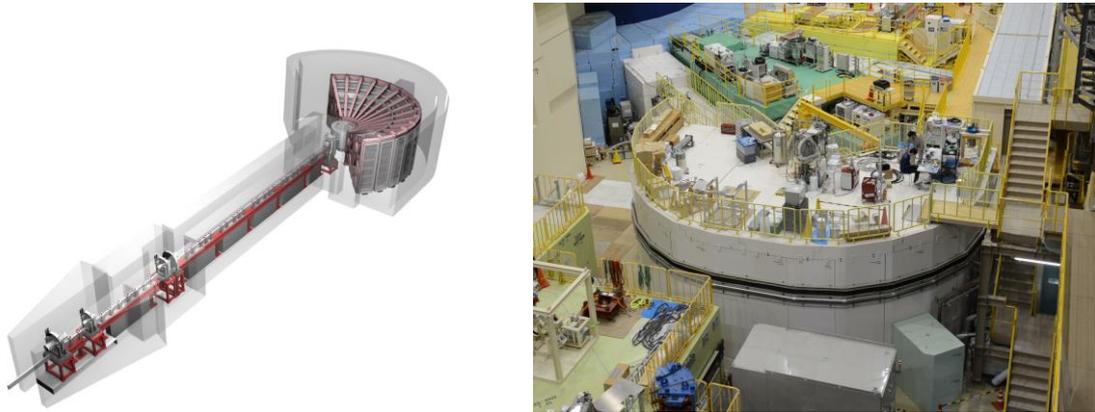


図1 物質・生命科学実験施設第2実験ホールに設置された AMATERAS

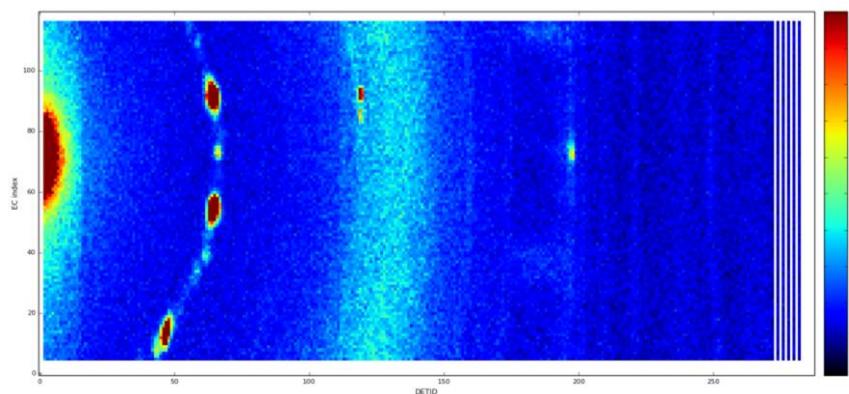


図2 AMATERAS の検出器バンクで得られた中性子イベントの例(時間情報は積分している。)

J-PARC の物質・生命科学実験施設には、様々な種類の中性子実験装置が設置され、中性子をプローブとした物質科学研究が行われている。中でも、原子力機構が設置し運用を行っている冷中性子ディスクチョッパー型分光器 AMATERAS (図1、[1]) は、線源から発せられる中性

子のエネルギーを複数の中性子チョッパーで速度選別を行って、いくつかの揃ったエネルギーの入射ビームとして試料に入射し、試料から散乱された中性子を 2 ステララジアンの大立体角検出器バンクで検出して、その入射時刻と入射位置から試料内で中性子が試料中の格子の揺らぎ、あるいは磁性原子が作るスピンの揺動を励起するプロセスを仮定することで、それらのダイナミクスについてのエネルギーと空間に関する情報を抽出する装置である[2]。得られた情報から、原子間の相互作用、スピン間の相互作用、それらを取り巻く環境についての情報を引き出し、電子物性に関する学術的知見を得る。AMATERAS の場合、120 ピクセルに分割された直径 1 インチ、長さ 3 m の一次元位置敏感型 ^3He 中性子検出器を 276 本装備し、33,120 ピクセルで得られた中性子イベント (図 2) をさらに必要なエネルギー分解能に対応する時間分割幅でヒストグラム化して、それらを試料内で起こった各種素励起と中性子とのエネルギーと運動量の交換量に変換する。今回は、そうやって得られた 33,120 ピクセルの各ピクセルの情報を、極低温下の磁氣的挙動が興味を持たれている物質の一つである $\text{Tb}_{2+x}\text{Ti}_{2-x}\text{O}_{7+y}$ の単結晶試料を用いた実験で得られたデータについて、予想される物理モデルとの比較を行うことで、この系における磁性的微視的挙動を決定する各種パラメーターの抽出を試み、大型計算システムの利用を試みた。AMATERAS で得られる実験データはサイズの大きいデータであるため、通常の最小自乗法による解析にも大きな計算機パワーが必要となるため、その汎用的な解析手法の確立の試みの一環として、同システムを試用したものである。8 ノードを用いた計算で一定の物理量の抽出を行うことができたが、一方で、一つのデータの処理に 2 週間程度の連続時が必要であることが分かった。

- [1] K. Nakajima *et. al.*, AMATERAS : A Cold-Neutron Disk Chopper Spectrometer, J. Phys. Soc. Jpn., vol.80 (2011), SB028.
- [2] 中島健次, 冷中性子ディスクチョッパー型分光器・AMATERAS とそれによって行われる研究, RADIOISOTOPES, vol.66, No.2 (2017) pp.101-115.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) H. Kadowaki, M. Wakita, B. Fak, J. Ollivier, S. Ohira-Kawamura, K. Nakajima, H. Takatsu, M. Tamai, “Continuum excitation and pseudospin wave in quantum spin-liquid and quadrupole ordered states of $\text{Tb}_{2+x}\text{Ti}_{2-x}\text{O}_{7+y}$ ”, J. Phys. Soc. Jpn., vol.87, No.6(2018) pp.064704_1-064704_6.

(4) 今後の利用予定:

今回試験的に実験で得られた一部のデータについて大型計算機システムの資源を利用したが、データ数が膨大であるために、計算時間が予想以上にかかった。実験の全データを様々なモデルやパラメーター試行しながら計算を行わせるためにはこの方法では難しいと考えており、むしろ、市販の安価な計算機資源をクラスター化するなどして対応できないか検討中である。従って、大型計算機システムについては今のところ今後の利用予定はない。

5.2.5 密度汎関数摂動理論を用いた鉄系超伝導体 FeSe のフォノン計算

Lattice Dynamics of FeSe Superconductor Studied by Density-functional Perturbation Theory

村井 直樹

中性子利用セクション

(1) 利用目的:

超伝導体や熱電材料の研究において、系の格子ダイナミクス（フォノン）情報を実験的に調べることは、古くから続く重要な研究テーマの一つである。特に、近年の非弾性中性子、X線散乱手法の発達に伴い、非常に効率的なフォノン測定が可能になりつつある。その一方で、得られた測定データをどのように解釈するのかという点は依然、大きな課題として残っている。一つのアプローチは、第一原理計算に代表される理論計算を組み合わせることで、実験結果の理解を深めることである。特に、密度汎関数摂動理論（density-functional perturbation theory 以下、「DFPT」）の発達に伴い、フォノンの第一原理計算手法は近年、大きな発展を迎えた。原子力機構所有の大型計算機利用の目的は、非弾性散乱測定手法と第一原理計算手法とを組み合わせることによって、フォノンの測定データの新たな解析手法を確立することである。

(2) 利用内容・結果:

鉄系超伝導体 FeSe のフォノン測定を SPring-8 の非弾性 X 線ビームラインにて行い、その結果の解析を行った。具体的には第一原理計算プログラム QUANTUM ESPRESSO が提供する DFPT コードを利用し、FeSe のフォノン分散の計算を行った。一般的に、第一原理フォノン計算は通常

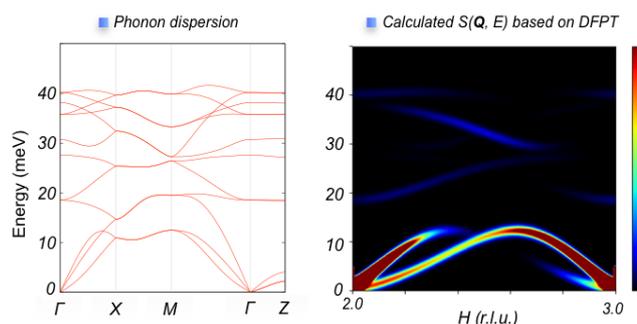


図 1 密度汎関数摂動理論 (DFPT)

の第一原理計算と比較して、桁違いに大きな計算コストを必要とするため、大型計算機の利用は不可欠である。フォノンのエネルギーの k 点数の依存性を確認し、最終的には $32 \times 32 \times 32$ の k 点数での計算を行った（計算結果は図 1 左を参照）。更に DFPT によるフォノン計算の結果から、中性子・X 線の散乱強度（より正確には、格子の動的構造因子 $S(\mathbf{Q}, E)$ ）を計算するプログラムを作成した（図 1 右参照）。これにより、実験結果と理論計算との直接比較が可能となった。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

特になし

(4) 今後の利用予定:

当面の目標は上記の FeSe の解析を継続し、論文化を進めることである。また、複雑な装置分解能を考慮した動的構造因子 $S(\mathbf{Q}, E)$ のシミュレーションを計画中である。今回報告した第一原理計算手法を用いたデータ解析手法を発展させることで、装置高度化に繋げてゆきたいと考えている。

5.3 原子力基礎工学研究センター Nuclear Science and Engineering Center

5.3.1 外部被ばくのモニタリングに用いる実用量の検討

Study on Operational Quantity for Monitoring of External Exposure

遠藤 章

原子力基礎工学研究センター

(1) 利用目的:

国際放射線防護委員会（ICRP）は、放射線防護に関する 2007 年勧告において実効線量の評価方法を見直し、それに基づく外部被ばく実効線量換算係数を ICRP Publication 116（ICRP116）[1]として公表した。この線量換算係数は、将来、放射線防護関連法令等に取り入れられ、線量評価に利用される予定である。一方、実効線量を管理するためのモニタリングは、国際放射線単位測定委員会（ICRU）が定める実用量に基づいて行われている。サーベイメータを用いて測定するエリアモニタリングには、現在、周辺線量当量 $H^*(10)$ が使われているが、ICRU は ICRP116 に対応するための検討を行い、 $H^*(10)$ に代わり ICRP のリファレンスファントムを用いて定義される周辺線量 H^* を使用することを提案した[2]。

本研究では、代表的な作業場を対象に、ICRP116 の実効線量換算係数と $H^*(10)$ 及び H^* との関係を分析し、ICRP116 に基づく外部被ばく線量の管理に適切なモニタリング量を検討した。

(2) 利用内容・結果:

検討は中性子に対するモニタリングを対象に行った。 $H^*(10)$ 及び H^* の換算係数を、それぞれの定義に基づき、 10^{-9} MeV から 10GeV まで、粒子・重イオン輸送計算コード PHITS を用いて計算した。 $H^*(10)$ は、整列・拡張場に置かれた ICRU 球の 10mm の深さにおける線量当量である。 H^* は、ICRP の成人リファレンスファントムに対して様々な照射方向から得られる実効線量の最大値である。 $H^*(10)$ 及び H^* の計算結果を、ICRP116 の前方・後方照射の実効線量 (E_{AP} -ICRP116) とともに図 1 に示す。

図 2 に、加速器、原子炉施設等の代表的な作業場における中性子スペクトルを示す[3]。図 2 のスペクトルと図 1 の線量換算係数を用いて、それぞれの作業場における実効線量と $H^*(10)$ 及び H^* との比を求めた。結果を図 3 に示す。比が 1.0 は、モニタリング値 ($H^*(10)$ 、 H^*) と実効線量 (E_{AP} -ICRP116) は等しく、1.0 以下では、モニタリング値は実効線量より大きい。

図 3 から、 E_{AP} -ICRP116/ $H^*(10)$ の値は、中性子スペクトルに依存して大きく変化することが分かる。欧州原子核研究機構（CERN）や高エネルギー加速器研究機構（KEK）の高エネルギー加速器施設では、 E_{AP} -ICRP116/ $H^*(10)$ は 1.0 を上回っており、モニタリング値は実効線量を過小評価している。これとは対比的に、BWR maze entrance では、比が約 0.5 にまで小さくな

り、モニタリング値は実効線量を約 2 倍も過大評価している。一方、 $E_{AP}\text{-ICRP116}/H^*$ は、中性子スペクトルによらず、比はほぼ 1 で、実効線量を適切に評価している。

ICRP 2007 年勧告における実効線量の評価方法の見直しにより、中性子に対する放射線加重係数は、エネルギーによっては従来の半分になった[1]。これを受けて、実効線量換算係数は、従来より小さくなり $H^*(10)$ との違いが大きくなった。これに対して、 H^* は実効線量を基に定義されているため[2]、図 3 に示すように、実効線量を過小評価することなく適切に管理できる。

以上の結果から、ICRP116 の実効線量換算係数の取入れにあたっては、モニタリング量は $H^*(10)$ に代わり H^* を用いるのが適切であると判断できる。

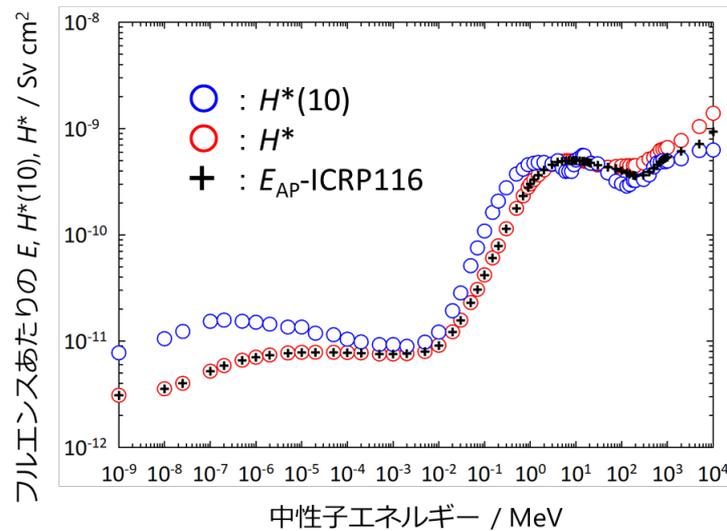


図 1 中性子に対する線量換算係数： $H^*(10)$ ：周辺線量当量、 H^* ：周辺線量、 $E_{AP}\text{-ICRP116}$ ：ICRP116 の前方-後方照射に対する実効線量。

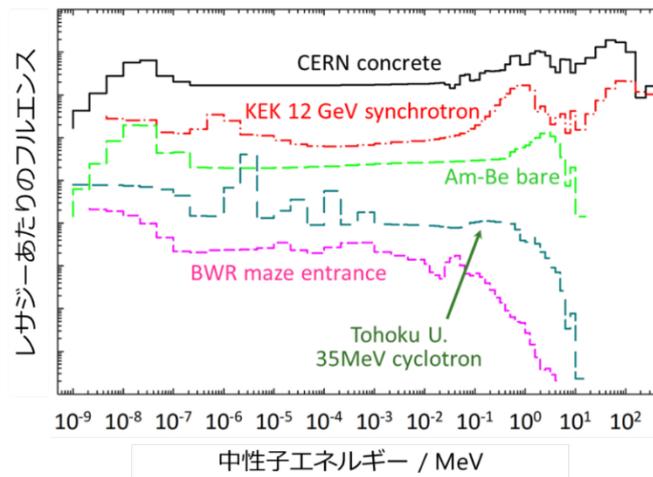


図 2 代表的な作業場における中性子スペクトル

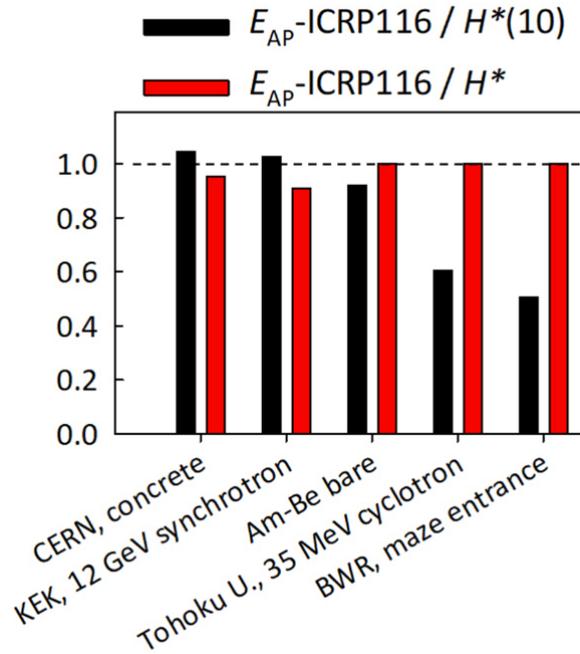


図3 各作業場における E と $H^*(10)$ 及び H^* との比較

- [1] N. Petoussi-Henss, et al., Conversion Coefficients for Radiological Protection Quantities for External Radiation Exposures, ICRP Publication 116, Ann. ICRP, vol.40, No.2-5 (2010).
- [2] A. Endo, Operational Quantities and New Approach by ICRU, Ann. ICRP, vol.45, suppl.1, pp.178-187 (2016).
- [3] International Atomic Energy Agency, Compendium of neutron spectra and detector responses for radiation protection purposes, IAEA Technical Reports Series No.403 (2001).

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) T. Otto, N.E. Hertel, D.T. Bartlett, R. Behrens, J.-M. Bordy, G. Dietze, A. Endo, G. Gualdrini, M. Pelliccioni, The ICRU Proposal for New Operational Quantities for External Radiation, Radiat. Prot. Dosim., vol.180, No.1-4, pp.10-16 (2018).

(4) 今後の利用予定:

2017年度までに得られた成果を、新しい線量測定指針を定める ICRU 報告書の作成に反映させ、本研究をまとめる予定である。

5.3.2 FNDI 法を用いた燃料デブリ計測に関するシミュレーション

Simulations for Measuring the Fuel Debris using 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:

高速中性子直接問いかけ (Fast Neutron Direct Interrogation: FNDI) 法は、核分裂性核種を含む廃棄物に高速中性子を照射し、そこで発生する核分裂中性子を測定することにより廃棄物中に含まれる核分裂性核種の総量を求める手法であり、様々な対象物・組成に対して計量することが可能である。FNDI 法装置を用いた燃料デブリ計測装置についてシミュレーションによる研究開発を進めており、平成 29 年度はキャニスタ内のデブリの偏在の影響について調べた。強いバックグラウンド中性子を含み、中性子吸収材を含む対象物に対するシミュレーションでは、非常に多くの中性子を発生させる必要があるため、大型計算機 (ICE X) を用いた解析を実施した。なお、本件は大型計算機の大口課題「アクティブ中性子法の高性能化に向けた解析」として実施した。

(2) 利用内容・結果:

FNDI 法を用いた計測装置案の 3D イメージ図及び水平断面図を図 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 (He-3 検出器) を 16 本使用している。図 1 は水中での測定を想定した湿式体系であり、水色部は水を示している。気中での測定を想定した乾式体系では、図 1 における水色部は空気になり、キャニスタと鉛部の間に減速材のポリエチレンを配置している。デブリを格納するキャニスタは直径 23cm、長さ 450cm の円筒容器を仮定し、その中に直径 11cm の円筒形状のデブリを配置した。図 1 (右) の水平断面図において、キャニスタ中央部にある円はデブリを示している。中央部にデブリを配置した場合と、デブリをキャニスタ内面に接するように配置した場合 (偏在位置) のシミュレーションを実施した。偏在位置では、その角度 (例えば 12 時方向か、6 時方向等) によって、測定が受ける影響は異なるため、回転照射を模擬した計算を実施した。図 1 (右) のボロンゴムは、体系から漏れて熱化した中性子が再度装置内に入ることを防ぐためのものである。シミュレーションには、モンテカルロコードである MVP を使用し、核データは JENDL-4.0 を使用した。

湿式及び乾式体系を用いたシミュレーション結果の一例をそれぞれ図 2 及び図 3 に示す。本装置では、中性子発生管から発生する D-T 中性子 (パルス中性子) をキャニスタに照射し、パルス発生直後から次のパルス (1ms) までの中性子検出器によるカウント数推移を求める。デブリにホウ素を含む場合と含まない場合の計算を行い、それぞれデブリが中心位置にある場合と偏在する場合の計算を行った。値が水平になっている部分はバックグラウンド領域であり、Cm-244 から発生する中性子によるものである。湿式体系の場合、30~300 μ s で観測される核分裂中性子成分については、ホウ素の有無によって中心位置と偏在位置とで大きな差異は生じていない。一方で 400 μ s 以降のバックグラウンド領域では、ホウ素の有無によって中心位置と偏在位置の

値に差が生じている。これは、キャニスタ内にある水分によって高速中性子の熱化が促進され、一部中性子がホウ素に吸収されたためと考えられる。乾式体系では、ホウ素の影響が小さく、中心位置と偏在位置の値がほぼ一致するということが分かった。

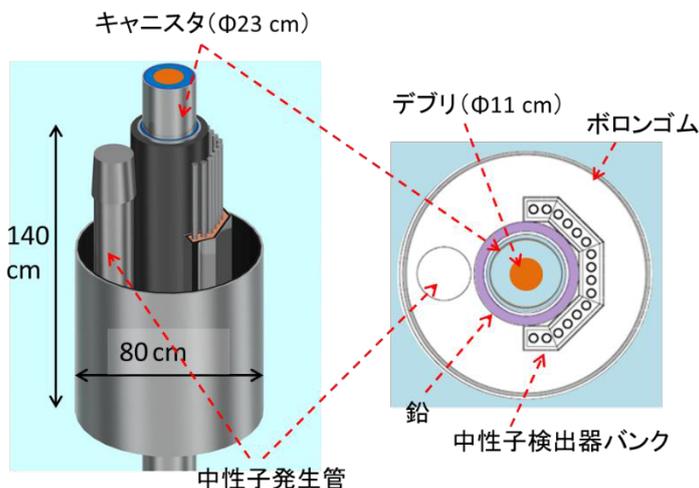


図1 計測装置案の3Dイメージ図及び水平断面図

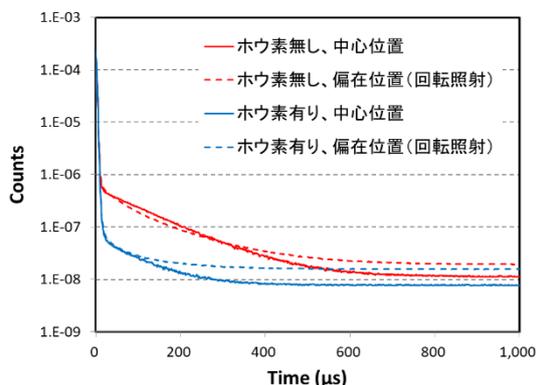


図2 湿式体系のシミュレーション結果

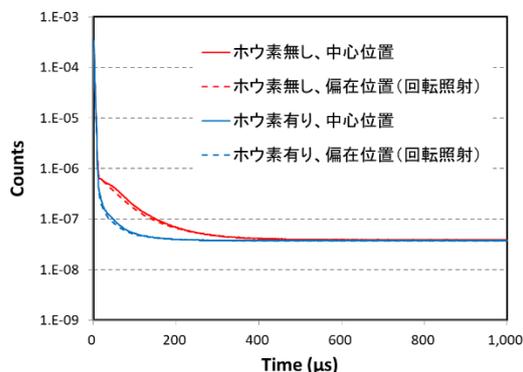


図3 乾式体系のシミュレーション結果

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) M.Komeda, M.Maeda, A.Ohzu, M.Kureta, Y.Toh, Characterization Study of Four Candidate Technologies for Nuclear Material Quantification in Fuel Debris at Fukushima Daiichi Nuclear Power Station (4) -Numerical Simulations for Active Neutron Technique- Proc. of GLOBAL 2017 : International Nuclear Fuel Cycle Conference (2017).

(4) 今後の利用予定:

大型計算機 (ICE X) を用いて、非破壊測定手法に関する解析を進めていく。

5.3.3 DDA システム及び標準サンプル内中性子束分布に対するシミュレーション結果と実験値の比較

Comparison between Simulation and Experimental Results for Neutron Flux in DDA Systems and Standard Samples

前田 亮

原子力センシング研究グループ

(1) 利用目的:

欧州共同研究センター（JRC）と高線量核燃量へ適用可能な非破壊測定技術の開発に関する共同研究を行っており、その実証装置である Active-N 開発の一環として Differential Die-Away (DDA) 技術の研究開発を実施している。本研究では、中性子輸送計算コードによるシミュレーションを用いて性能を評価して構造を最適化しているため、シミュレーションによる実験の再現性が重要である。その再現性は、DDA 測定システムの試料空間内及びサンプル内中性子束分布を実験とシミュレーションで求め、それを比較することにより評価した。評価のためには、様々な条件でモンテカルロシミュレーション計算を行わなければならないが、発生確率が低いため十分な統計精度を得るためには大型計算機を用いる必要があった。

(2) 利用内容・結果:

本研究では、小型 He-3 検出器を用いて中性子束を測定した結果とモンテカルロシミュレーションによる結果を比較することにより評価を行った。ここでは一例として JRC 型 DDA 測定装置 PUNITA (Pulsed Neutron Interrogation Test Assembly) 内に設置した標準サンプル内中性子束の比較結果を紹介する。図 1 に PUNITA の概観図、水平断面図、鉛直断面図を示した。

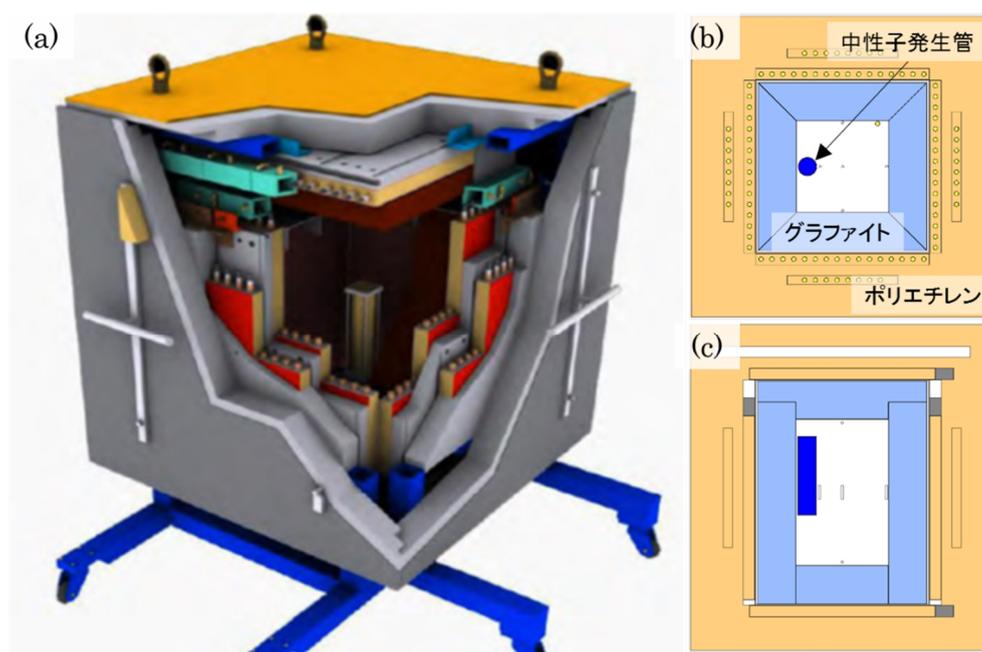


図 1 PUNITA (a)概観図、(b)水平断面図、(c)鉛直断面図

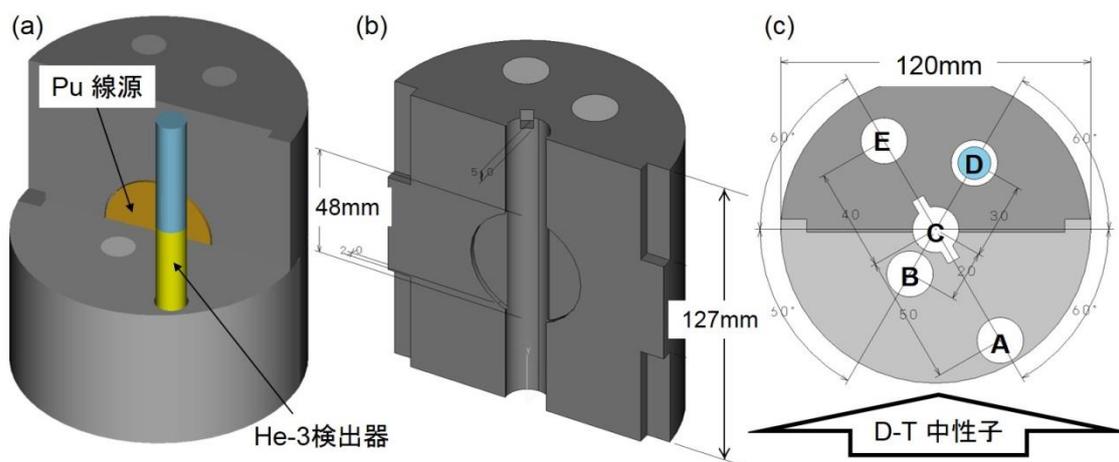


図2 中性子束測定用標準サンプル (a)概観図、(b)鉛直断面図、(c)水平断面図

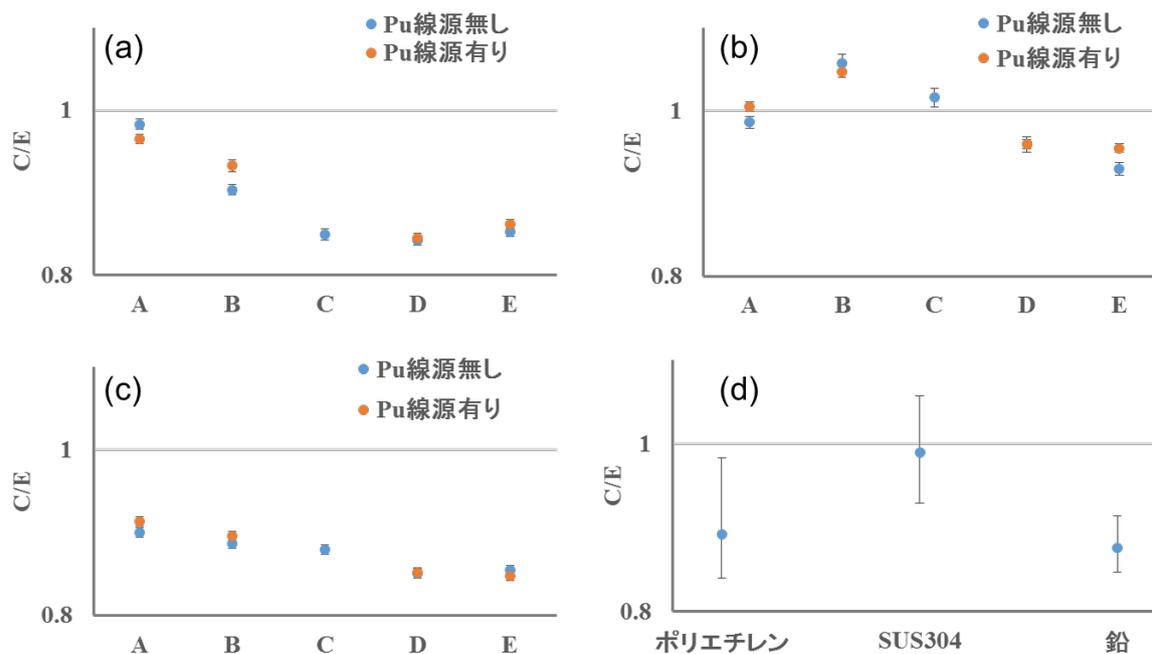


図3 標準サンプル内中性子束の実験とシミュレーションの比較結果

中央のサンプル空間には 14 MeV 中性子を発生させる D-T 中性子発生管が設置されており、サンプル空間は中性子を減速、熱化させるためのグラファイト及び遮蔽のためのポリエチレンで覆われている。図2に中性子束測定用標準サンプルの概観図、鉛直断面図、水平断面図を示した。標準サンプル内にはプルトニウム (Pu) 線源と小型 He-3 検出器を設置可能な構造となっており、

Pu 線源がある場合とない場合での標準サンプル内中性子束を測定することが可能である。標準サンプルは中性子に対する断面積が大きく異なるポリエチレン、SUS304、鉛の3種類の材質で製作した。実験では PUNITA のサンプル空間中央に標準サンプルを設置し小型 He-3 検出器を用いて標準サンプル内中性子束を測定し、シミュレーション結果と比較した。

図3に標準サンプル内中性子束の比較結果を示す。縦軸は計算値/実験値で定義した C/E を示している。(a)はポリエチレン、(b)は SUS304、(c)は鉛の評価結果を示している。(d)は全材質をまとめた結果でプロットは各材質の C/E の平均値を表しエラーバーは最大値と最小値を表している。シミュレーションはポリエチレン、鉛において実験結果を過小評価していた。これらの過小評価の原因として熱中性子散乱則に関する S(α ,B)データの精度が影響している可能性があり、より精度の高い核データが得られれば再現性は向上すると考えられる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) M. Maeda, M. Komeda, A. Ozu, M. Kureta, Y. Toh, T. Bogucarska, J. M. Crochemore, G. Varasano, B. Pedersen, JRC conference and workshop reports ESARDA 39th Annual Meeting “Comparison between simulation and experimental results for neutron flux in DDA systems”, ESARDA Symposium 2017 / 39th Annual Meeting, Düsseldorf Germany, 2017, pp.694-701.
- 2) 前田亮、大図章、米田政夫、藤暢輔, “JAEA 型 DDA 法における位置感度差の評価”, 京都大学原子炉実験所専門研究会「核燃料物質を対象とした非破壊分析技術に関する研究会」, 熊取, 2018.

(4) 今後の利用予定:

今後も DDA に関するシミュレーションを実施する予定で、そのシミュレーションでは多くの計算資源を必要とするため大型計算機による支援は必須であり、その利用を予定している。

5.3.4 放射線飛跡の三次元可視化に関する PHITS の機能拡張

Development of 3D-visualization Tally for Particle Tracks

松田 規宏

炉物理標準コード研究グループ

(1) 利用目的:

粒子・重イオン輸送計算コード PHITS [1] では、コード利用者の利便性を向上させるために入力体系及び出力結果の可視化に力を入れており、利用者が指定するタリー（エスティメータ）の種類に応じた図（折れ線グラフ、二次元等高線図、又は色分布図）の作成機能を備えている。PHITS による放射線のシミュレーションにおいて、その飛跡（放射線の生成から体系内物質との衝突・散乱、吸収又は体系外への漏洩までの軌跡）は、物質内での放射線の振る舞い（挙動）を理解する上で有用な情報を与えるものである。しかしながら、これまで放射線の飛跡を三次元で描画する適当なソフトウェアが存在しなかったために、放射線の飛跡を出力する専用のタリーは整備されてこなかった。

そこで、本研究では、PHITS シミュレーションによる放射線の挙動を視覚的に確認するため、PHITS のユーザー定義タリー（[T-Userdefined]）を活用して、科学的データ解析及び可視化アプリケーション ParaView [2] の入力書式である VTK 形式 [3] で出力するタリーを整備した。

(2) 利用内容・結果:

PHITS のユーザー定義タリーは、放射線のシミュレーションにおいてユーザーが関心を持っている様々な物理量（情報）を取り出すことのできるタリーである。PHITS 入力ファイル中の [T-Userdefined] では、最大 50 個の出力ファイルと最大 10 個の変数が指定できる。ただし、指定した出力ファイルに取り出す情報は、ユーザーが PHITS のソースファイルの一つである usrtally.f に FORTRAN 言語であらかじめ記述しておく必要があるため、ユーザー定義タリーの作成には中級以上の練度を必要とする。

本研究では、任意の放射線の飛跡を取り出すために、1) 放射線の位置データの取得、2) データの登録、及び 3) ファイルへの書き出し の 3 つの機能より構成されるユーザー定義タリーを整備した。飛跡を取り出す放射線の種類は、入力ファイル（[T-Userdefined] 内）から指定できるように設定した。体系内における生成、衝突、境界面横断時に得られる指定した放射線の位置データは、VTK 形式に変換して、ファイルに書き出すようにした。これにより、このユーザー定義タリーによる出力ファイルは、ParaView で直接、読み込むことができる。

開発したユーザー定義タリーを用いて、電子が、物質に入射してきた方向に跳ね返される現象（以下「後方散乱」）を可視化した結果を図 1 に示す。

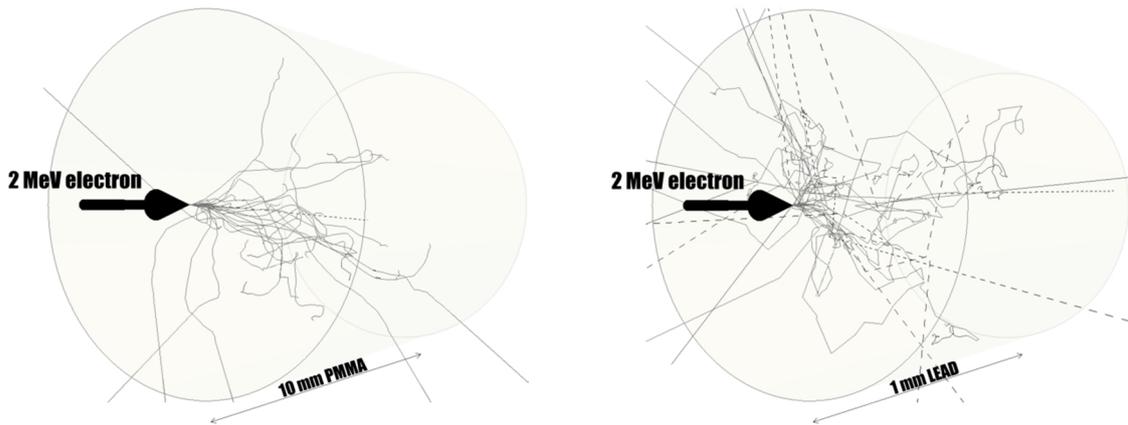


図 1 アクリル樹脂 (PMMA) 及び鉛に垂直に入射した 2 MeV の電子線による電子 (実線) 及び光子 (破線) の三次元飛跡

単色の電子線に対する飽和後方散乱係数は物質の原子番号とともに大きくなること、また、電子の制動放射 (それに伴う光子の生成) も物質の原子番号とともに多く発生することが知られており [4]、図 1 に実線で示した電子、及び破線で示した光子の飛跡は、この性質を端的に表わしている。

図 2 は、光子の物質との相互作用による二次電子の生成と、二次電子平衡について可視化したものである。

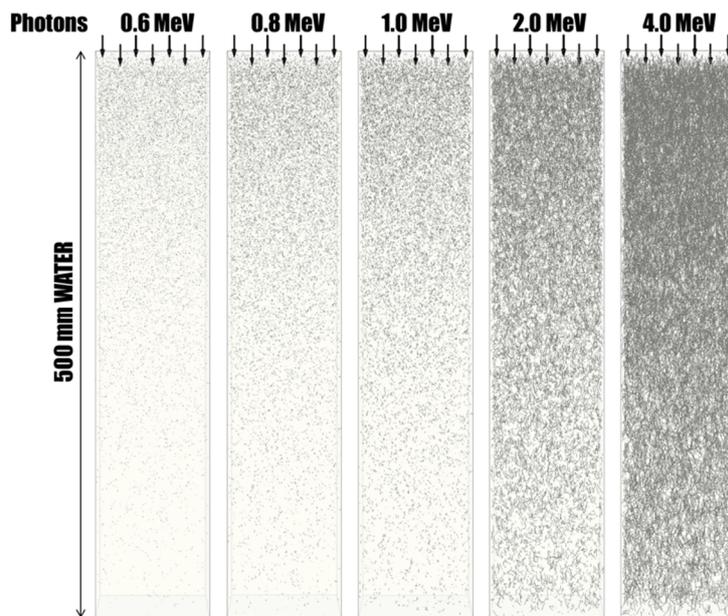


図 2 真空中から水に垂直に入射した単色の光子による二次電子の飛跡 (実線)

光子と水との相互作用により生成する二次電子の数は、その場所の光子線束に比例し、生成した二次電子は、運動量を保存するためガンマ線の進行方向に偏って放出される [4]。図 2 の上側に示されるように、光子が入射する水面付近における二次電子の数（ここでは、電子の飛跡の数）の急激な増加、及び、その後の光子線束の物質内減衰に伴う減少（「二次電子平衡」と言う。）を確認することができるようになった。

上記の例のように、放射線の飛跡の可視化は、物質内での放射線の挙動を理解する上で非常に有用であり、科学的データ解析及び可視化アプリケーション ParaView を用いることで、実際に目で見ることが難しい放射線を、その時間変動を含めて、あらゆる角度から観察することができるようになった。特に、教育において有用なツールとなることが期待される。

- [1] T. Sato, Y. Iwamoto, S. Hashimoto, T. Ogawa, T. Furuta, S. Abe, T. Kai, P.E. Tsai, N. Matsuda, H. Iwase, N. Shigyo, Lembit Sihver and Koji Niita, "Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02", J. Nucl. Sci. Technol., vol.55, No.6, pp.684-690 (2018).
- [2] ParaView project, ParaView, <https://www.paraview.org/>（参照：2018.12.10）.
- [3] VTK project, VTK, <https://www.vtk.org/>（参照：2018.12.10）.
- [4] 多田順一郎, 中島宏, 早野龍五, 小林仁, 浅野芳裕, "わかりやすい放射線物理学 改訂 3 版", オーム社, 平成 30 年 (2018) 295p.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Tatsuhiko Sato, Yosuke Iwamoto, Shintaro Hashimoto, Tatsuhiko Ogawa, Takuya Furuta, Shin-ichiro Abe, Takeshi Kai, Pi-En Tsai, Norihiro Matsuda, Hiroshi Iwase, Nobuhiro Shigyo, Lembit Sihver and Koji Niita, "Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02", J. Nucl. Sci. Technol. vol.55, No.6, pp.684-690 (2018).

(4) 今後の利用予定:

モンテカルロ計算法コードを用いて、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予定である。この場合、広い範囲に分布した放射性物質からの放射線による寄与を精度よく計算する必要があるため、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。

5.3.5 福島第一原子力発電所事故起源の放射性物質の長距離大気拡散解析

Long-range Atmospheric Dispersion Simulation of Radionuclides from the Fukushima Daiichi NPP Accident

古野 朗子

環境動態研究グループ

(1) 利用目的:

環境動態研究グループでは、大規模並列計算機 SGI ICE X システムを利用して、福島第一原子力発電所事故により放出された放射性物質の長距離大気拡散解析を実施している。拡散解析に用いた世界版緊急時環境線量情報予測システム (WSPEEDI-II) は、領域気象シミュレーションモデル WRF (the Weather Research and Forecasting model) 及び粒子拡散モデル GEARN から構成されており、数 km スケールから半球規模スケールまでを対象としている。

これまで、原子力機構をはじめ国内外の多数の研究機関は、主に日本域 (数百~1,000km 領域) スケールでの放射性物質の大気拡散解析を行い、移行挙動の解明を進めてきた。一方、長距離移行挙動に関しては解明が進んでいない。この原因の一つとして、広域かつ高分解能で粒子拡散モデルを実行する場合、粒子数不足の問題により遠方の領域で濃度の過小評価傾向が発生しやすくなることが挙げられる。そこで筆者は、大規模並列計算技術により粒子数を十分確保しつつ広域拡散計算を実施している。

(2) 利用内容・結果:

a) GEARN の湿性、乾性沈着過程の検証、改良

大規模並列計算技術を用いて、福島第一原子力発電所事故起源の ^{133}Xe と ^{137}Cs を対象とした半球規模解析を実施し、世界各地の観測データを用いて精度を検証した。粒子数不足による統計誤差が解消された結果、沈着をおこさない ^{133}Xe では欧州大陸などの遠方の測定点でも計算値が測定値とよく一致した。それに対し、沈着の効果を無視できない ^{137}Cs では、遠方で計算値が測定値より過小評価する傾向が著しかった。そこで、沈着パラメータの特性を把握するため、 ^{137}Cs について湿性沈着のみ、乾性沈着のみの解析をそれぞれ実施したところ、湿性沈着のみの解析では遠方で計算値が測定値を過小評価したが、乾性沈着のみの解析では過小評価傾向が解消され、遠方の測定点でも計算値が測定値を大幅に過大評価した。これらの結果により、湿性沈着パラメータに問題があることを確認した。今後は湿性沈着パラメータの特性を把握し、必要な改良を実施する。

b) 北太平洋領域における海洋拡散シミュレーションへの大気からの沈着量提供

環境動態研究グループでは、福島第一原子力発電所事故起源の ^{137}Cs による環境への影響について、大気だけではなく海洋についても拡散解析を実施してきた。海洋中の事故起源 ^{137}Cs 移行

挙動解析を実施する際、大気からの沈着量を併せて考慮することが重要であることは、過去の論文で示された (Kawamura *et al.*, 2011 [1])。昨年度は、単一の海洋拡散モデルと複数の海洋大循環モデルを使用した ^{137}Cs の海洋拡散シミュレーションの相互比較が実施され (Kawamura *et al.*, 2017 1) 2)、筆者は WSPEEDI を利用して大気からの北太平洋の海表面への沈着量(流入量)を評価した。シミュレーションは、福島県沿岸、日本沖合及び外洋で観測された ^{137}Cs 濃度を比較的良好に再現した。しかし、a)で示した遠方での ^{137}Cs 過小評価の問題は本シミュレーションでも発生し、発生源から遠い北米大陸やハワイ諸島などでは、計算された大気中濃度が測定値を過小評価した。過小評価の原因としては、計算領域外に出た粒子の再流入を評価していないこと等も挙げられるが、沈着過程の再現性も要検討課題であるため、早急に対応する。

- [1] Kawamura H., Kobayashi T., Furuno A. et al., Preliminary Numerical Experiments on Oceanic Dispersion of ^{131}I and ^{137}Cs Discharged into the Ocean because of the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant Disaster, J. Nuc. Sci. Technol., vol.48, No.11, pp.1349-1356, 2011.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Kawamura H., Furuno A., Kobayashi T. *et al.*, Oceanic dispersion of Fukushima-derived Cs-137 simulated by multiple oceanic general circulation models, J. Environ. Radioact., vol.180, pp.36-58, 2017.
- 2) Kawamura H., Furuno A., Kobayashi T. *et al.*, Oceanic dispersion of Fukushima-derived Cs-137 in the coastal, offshore, and open oceans simulated by multiple oceanic general circulation models, American Geophysical Union 2017 Fall Meeting (AGU 2017), New Orleans, U.S.A.

(4) 今後の利用予定:

本年度は GEARN の湿性沈着パラメータの改善を行う予定である。将来的には局所域から地球規模まで矛盾なく一貫した拡散解析を実現することが目標である。

5.3.6 EXPACS-V の最新版 Windows への適用

Update of EXPACS-V Executable in Latest Windows PC

佐藤 達彦

放射線挙動解析研究グループ

(1) 利用目的:

大気圏内の宇宙線フラックスは、公衆や航空機乗務員の宇宙線被ばく線量や半導体ソフトウェア発生率の評価で重要となる。原子力機構では、平成 2007～2008 年度のプログラム開発整備作業において、大気圏内の任意地点における宇宙線フラックスや被ばく線量を計算して Google Earth 上に可視化する Windows 用ソフトウェア EXPACS-V を制作し、ユーザー登録制のコードとして公開した。しかし、EXPACS-V は、古い仕様の Windows や Google Earth の利用を想定していたため、最新の Windows PC では正しく動作しないとの報告例が多数あった。そこで、EXPACS-V を最新の Windows で動作するよう改良した。本改良は、プログラム開発整備作業の一環として実施した。

(2) 利用内容・結果:

本改良により、EXPACS-V が最新の Windows で動作するようになった。最新版 Windows で起動した EXPACS-V の画面を図 1 及び図 2 に示す。これらの図では、2018 年 1 月 1 日の高度 12,000m における宇宙線被ばく線量率を、東京（緯度 36.462°、経度 140.6°）を中心として計算・可視化するように設定されている。

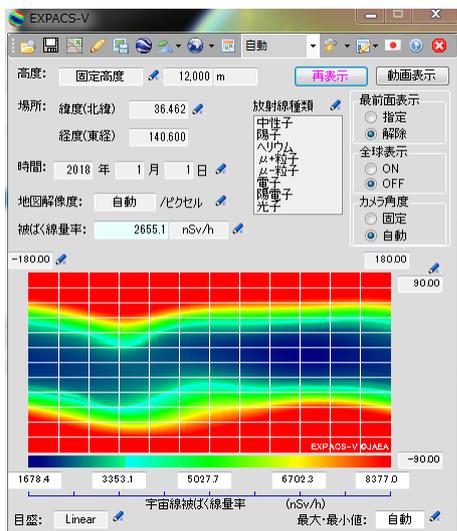


図 1 最新版 Windows で起動した EXPACS-V の画面

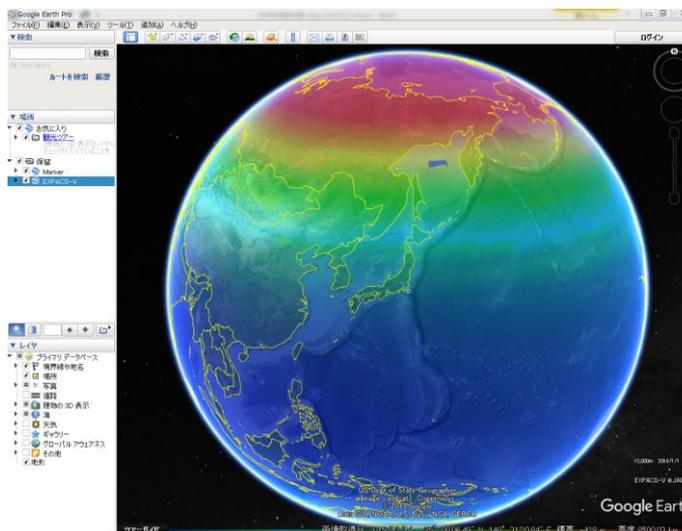


図 2 Google Earth 上に可視化した被ばく線量率

また、この状態で図 1 の左上にあるグラフボタンを押すと、この条件に対する宇宙線フラックスの数値データとグラフが Excel 上に表示される（図 3 参照）。これまで、このような宇宙線フ

フラックスを計算するためには、大規模な並列計算を必要としていたが、本ソフトウェアにより、誰でも簡単に計算し可視化することが可能となった。

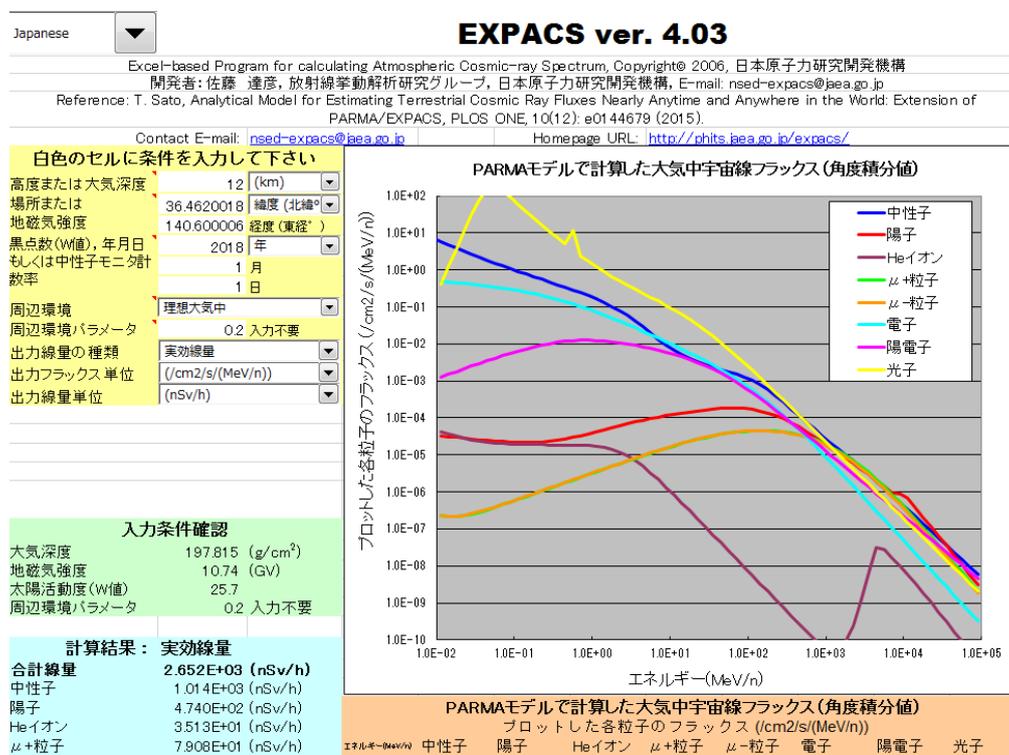


図3 宇宙線フラックスの数値データとグラフ

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 佐藤達彦, “PHITS を利用した宇宙線シミュレーションと地球科学への応用”, 京都大学原子炉実験所専門研究会「放射化分析及び中性子を用いた地球化学的研究」, 熊取, 2018年1月.
- 2) T. Sato, “Cosmic-ray transport simulation using PHITS”, 2017年度核データ研究会, 東海, 2017年11月.
- 3) T. Sato, “Features and applications of the analytical model for estimating terrestrial cosmic-ray fluxes: PARMA/EXPACS”, European Geosciences Union General Assembly 2018, Vienna, Austria, Apr 8-13, 2018 (Invited).

(4) 今後の利用予定:

最新版 Windows に対応した EXPACS-V を 2018 年 1 月に公開したところ、既に、5 件の利用申請があった。今後も EXPACS-V の利用普及に努める予定である。また、現在のところ 64bit 版の Google Earth に適用していないため、64bit Windows においても 32bit 版の Google Earth インストールをユーザーに依頼している。可能であれば、64bit 版の Google Earth にも適用可能なよう EXPACS-V を改良したい。

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

(2) 利用内容・結果:

平成 28 年度までに大気、水および土壌に一様分布する放射性核種に対して核種の放射能濃度から公衆を代表する各年齢の実効線量を導出する換算係数を整備した。特に、福島県やその周辺で観測される土壌に沈着した放射性セシウムに対しては、現地で測定されている周辺線量当量や個人線量当量と実効線量の相関関係を明らかにし、モニタリング値に基づく線量管理の妥当性を示した[1, 2]。平成 29 年度は、原子力施設での事故による放射性核種の環境流出の初期に観測される放射性雲（プルーム）からの外部被ばく線量の評価に利用する基礎データの整備を行った。

計算は、ICE X の 432 演算コアを利用し MPI 並列で実施した。環境中の放射線輸送シミュレーションには、原子力機構が開発を進めている粒子・重イオン輸送計算コード PHITS を用いた。図 1 に環境を模擬して土壌と大気で構成したシミュレーション体系の模式図を示す。任意の放射能濃度分布を持つ放射性雲からの外部被ばく線量を解析するため、大気中に配置した単位放射線源による地表から高さ 1m での周辺線量当量率への寄与割合（応答関数）を計算した。放射線源として考慮した核種は ^{85}Kr 、 ^{131}I 、 ^{132}I 、 ^{133}I 、 ^{132}Te 、 ^{134}Cs 、 ^{136}Cs および ^{137}Cs であり、子孫核種の崩壊も含めて $1\text{m} \times 1\text{m} \times 1\text{m}$ の領域から 1kBq の放射能で光子を等方的に放出する。線源の高さは、地表面から上空 1,000m まで考慮した。応答関数のサイズは $1,000\text{m} \times 1,000\text{m}$ であり、各要素は $1\text{m} \times 1\text{m}$ の格子状のメッシュから成る。図 2 に ^{137}Cs の応答関数を示す。単位放射線源からの応答は、線源高さが高くなるほど小さくなる。また、直上に線源の存在する応答関数の中心から離れるほど急速に小さくなる。この傾向は、線源と応答関数の評価高さが近いほど顕著となる。

任意の放射能分布を持つ放射性雲を 3 次元格子状のメッシュで区切り、各メッシュの放射能に今回整備した応答関数を乗じて全メッシュについて積分することで、地表面における周辺線量当量率の分布を計算することができる。

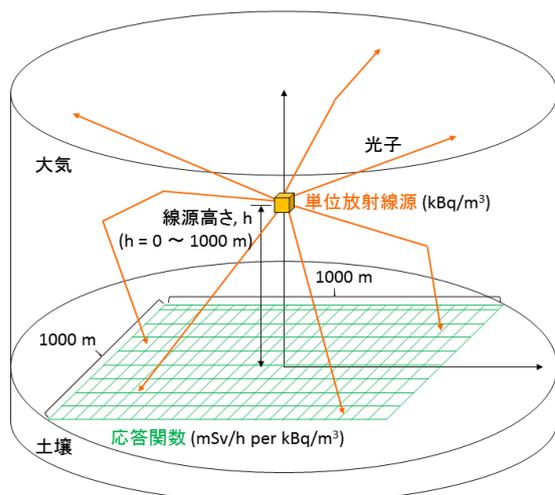


図1 PHITSによる応答関数計算におけるシミュレーション体系の模式図

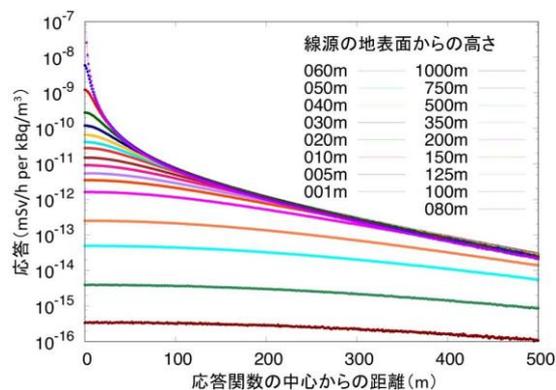


図2 ¹³⁷Csの応答関数

- [1] D. Satoh, T. Furuta, F. Takahashi, A. Endo, C. Lee, W.E. Bolch, "Age-dependent dose conversion coefficients for external exposure to radioactive cesium in soil", Journal of Nuclear Science and Technology, vol.53, No.1, pp.69-81, 2016.
- [2] D. Satoh, T. Furuta, F. Takahashi, C. Lee, W.E. Bolch, "Simulation study of personal dose equivalent for external exposure to radioactive cesium distributed in soil", Journal of Nuclear Science and Technology, vol.54, No.9, pp.1018-1027, 2017.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 佐藤大樹, 中山浩成, 古田琢哉, "任意形状の放射性雲からの外部被ばく線量評価コードの開発", 日本原子力学会 2018 年秋の大会, 岡山, 2018.

(4) 今後の利用予定:

平成 30 年度は、任意の放射能濃度分布を持つ放射性雲に対し、整備した応答関数を用いて外部被ばく線量を迅速に解析するコードを開発する。開発したコードの精度検証には、モンテカルロ法に基づく PHITS の詳細計算の結果との比較が不可欠であり、この目的を達成するため大型計算機システムの演算能力が必要となる。

5.3.8 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 3,000 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ース (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:

PHITS 入力データの [material]、[surface]、[cell] および [mat name color] セクションの入力補助のため、これらセクションの専用入力フォームを追加する作業を平成 28 年度に引き続き実施した。平成 28 年度は [material] および [mat name color] セクションについて、物質データおよび物質の色データを入力する専用入力フォームを追加した。平成 29 年度は、平成 28 年度版 PHACE の利便性の向上を目指し、[surface] セクションについて面データの専用入力フォームを作成し、面データ入力機能の強化および図例表示機能の追加を行った。また、平成 28 年度版 PHACE の機能の修正として、各種タリーの群数、最小値、最大値等の入力フォームの文書表示で、文書表示の体裁を整えるために、上下左右いずれの方向にもウィンドウ幅が変更可能な機能の追加を行った。

開発および動作条件は平成 28 年度と同様に、多くのユーザーが利用する以下の Windows の環境下とした。

- | | |
|----------------|------------------------------|
| 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 |

図 1 に今回作成した面データの専用入力フォームを示す。

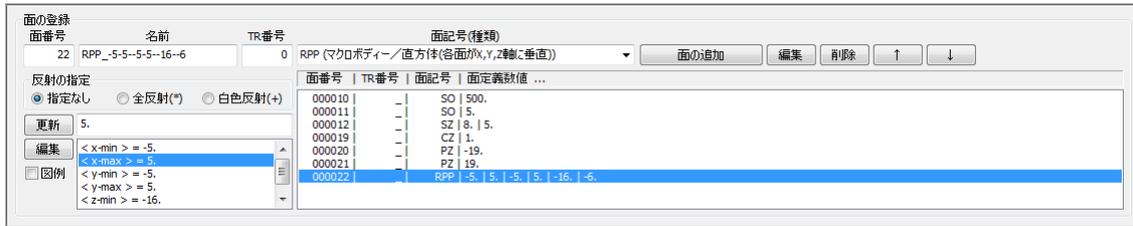


図 1 面データの専用入力フォーム

同入力フォームは、図 2 のように面記号入力欄がプルダウンリストからの選択を可能とするコンボボックスとなっている。

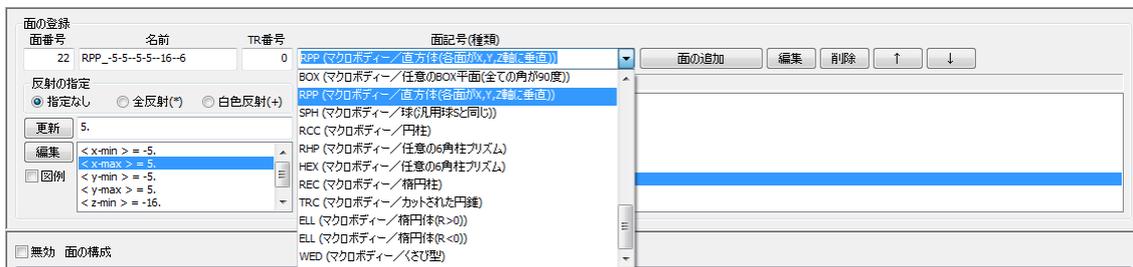


図 2 面記号のプルダウンリスト

また、面記号ごとの面定義数値入力補助のため、図 3 のような選択面記号の図例の表示機能も備えている。

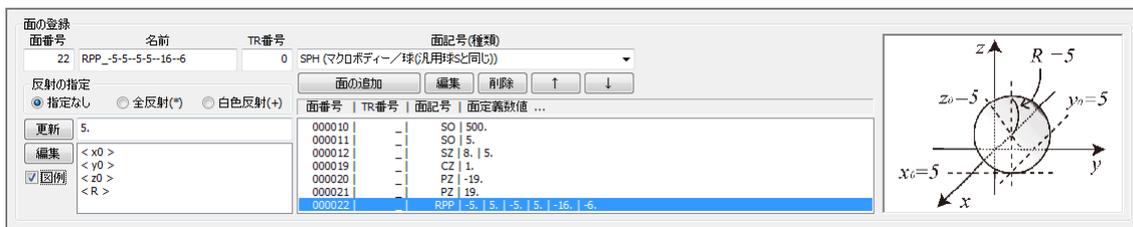


図 3 選択面記号に対応した図例表示の例

面データの専用入力フォーム（以下「面データ入力フォーム」）は、入力フォーム上部および左部に面データを編集するための入力欄等を配し、右部にデータベースに登録された面データを選択や削除、並び替えといった操作を行うリストボックス等を配した構成となっている。また、面データ入力フォーム左下部にあるチェックボックス 図例) を指定することにより入力フォーム右端部に選択された面記号に対応する図例を表示するようになっている。

さらに、各種タリーの入力フォームの文書表示で、文書の体裁を整えるために、図 4 に示す通り上下左右いずれの方向にもウィンドウ幅がマウスにより変更可能となる機能を追加した。



図4 入力フォームのウィンドウ幅変更機能の例

今回作成した PHACE が PHITS のパッケージに含まれる例
 (phits/lecture/basic/lec01/input/lec01-end.inp) 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):

- 1) Tatsuhiko Sato, Yosuke Iwamoto, Shintaro Hashimoto, Tatsuhiko Ogawa, Takuya Furuta, Shin-ichiro Abe, Takeshi Kai, Pi-En Tsai, Norihiro Matsuda, Hiroshi Iwase, Nobuhiro Shigyo, Lembit Sihver and Koji Niita, Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02, J. Nucl. Sci. Technol., vol.55, No.6, pp.684-690 (2018).

(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体系の領域を定義する [cell] セクションの入力補助機能の追加、②計算体系の面を定義する [surface] セクション、物質を定義する [material] セクション、[cell] との連動機能の追加、③PHITS 入力ファイルに記載された入力データを読み込み、PHACE の GUI によって編集を可能とする機能の追加、④PHACE 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。

5.3.9 PHITS における出力形式の拡張

Improvement of Function for Output Format 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。加速器施設の遮蔽設計を始めとして、医学物理学や放射線防護、宇宙線・地球惑星科学といった幅広い分野で利用されている。

PHITS は、放射線として陽子・中性子と同様に重イオンを扱うことができ、同時にそれらの振る舞いを模擬することが可能である。その際、重イオンについては、核子あたりの量である MeV/u という単位でそのエネルギーを扱うことが便利な場合があるが、従来の PHITS はタリー（仮想的な検出器の意）の出力におけるエネルギーの単位が MeV しか選択できず、MeV/u の単位で出力結果を分析するためには、ユーザー自身で単位の変換を行う必要があった。

そこで、我々は原子力機構の大型計算機 ICE X を利用し、重イオンに関するエネルギーの単位を自動的に MeV/u に変換する機能の開発を行った。これにより核子と重イオンを MeV/u 単位で図示することが可能となるため、重イオンが主な役割を果たす炭素線治療や宇宙線の研究を進める際に、容易に計算結果の分析を行うことが可能となる。なお、本開発は、平成 29 年度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:

タリー出力におけるエネルギーの単位を MeV/u に変換する機能は、PHITS の入力ファイルにおいて、iMeVperu=1 の設定を[parameters]セクションに追加するのみで利用できる。輸送粒子のエネルギー分布を出力できる[t-track]や[t-cross]タリーの他、核反応で生成する粒子のエネルギー分布を出力できる[t-product]タリー等で本機能が有効となり、エネルギーに関して単位を MeV/u とする物理量を出力する。

本稿では、250MeV/u の炭素線を水標的に照射する簡易な計算を行い、出力を MeV/u に変換する機能を利用した分析方法について紹介する。PHITS で計算した体系を図 1 に示した。Z 軸を中心軸とする高さ 50cm、半径 10cm の円柱形状の水標的に対して、z 軸に沿って正の方向に炭素線を照射した。水の周囲は真空とし、これらの空間における各粒子の振る舞いを分析した。

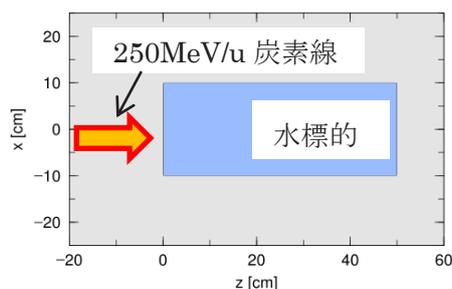


図 1 水標的に 250MeV/u の炭素線を照射した計算体系

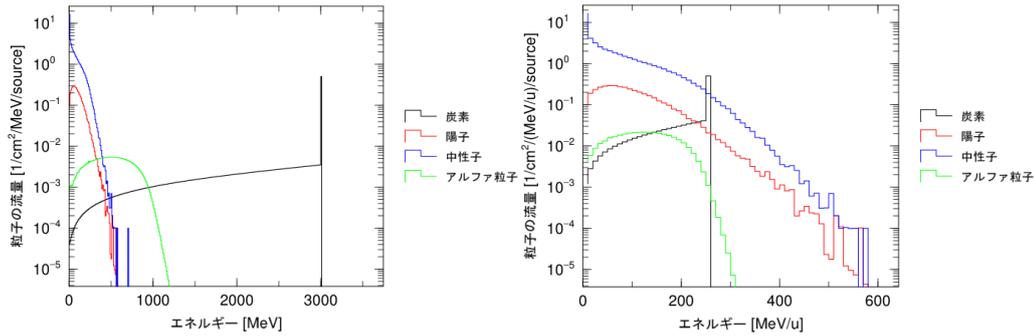


図 2 水標的及び真空中における各粒子のエネルギー分布。左: MeV 単位。右: MeV/u 単位。ただし、横軸に関して、左は 0 から 3,500MeV、右は 0 から 600MeV/u の範囲を図示した。

図 2 の左と右のパネルのそれぞれに、エネルギーを MeV、MeV/u の単位で出力した結果を示した。図 2 の左パネルにおいて、250MeV/u \times 12=3,000MeV にあるピークが真空中を通過する炭素線に対応しており、ピーク以下のエネルギーの成分は、水標的において徐々にエネルギーを失いながら輸送される炭素線の流量を表している。陽子、中性子、アルファ粒子は、炭素線が水標的中の陽子や酸素と衝突し、核反応を起こすことで発生する。一般的に、炭素線中の核子（陽子や中性子）は全運動エネルギー（3,000MeV）を核子数で割った量（250MeV）を平均的に担っていると考えられるため、分析の際は核子あたりのエネルギー量が基準となる。しかし、図 2 の左パネルでは MeV 単位で図示されているため、核子の結果を炭素線やアルファ粒子の結果と比較する場合は、MeV/u への変換をする必要がある。これに対し、図 2 の右パネルでは、入射炭素線の 250MeV/u のピークを基準として、各粒子の振る舞いを図から容易に分析できる。この図では、炭素線のピークの左右に陽子と中性子の成分が広がっていることが一目瞭然であり、アルファ粒子に関しても、その幅広いピークと入射炭素線のピークとのエネルギー差が MeV/u 単位で容易に評価できる。

本開発により、重イオンを扱うシミュレーションを行う際に、MeV/u の単位で様々な核種の振る舞いを簡便に分析できるようになった。本機能は PHITS のバージョン 3.02 に組み込まれており、利用可能となっている。平成 29 年度の国内における PHITS の新規ユーザー数は約 500 名であり、本機能の実装により研究開発の更なる進展が期待される。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Tatsuhiko Sato, Yosuke Iwamoto, Shintaro Hashimoto, Tatsuhiko Ogawa, Takuya Furuta, Shin-ichiro Abe, Takeshi Kai, Pi-En Tsai, Norihiro Matsuda, Hiroshi Iwase, Nobuhiro Shigyo, Lembit Sihver, and Koji Niita, “Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02”, J. Nucl. Sci. Technol., vol.55, No.6, pp.684-690 (2018).

(4) 今後の利用予定:

今後は、入力情報の値の変化が PHITS の計算結果に与える影響を調査できる分析機能の開発や、計算結果が特定の条件を満たすような入力情報の値を導出する最適化機能の開発を行う。これらにより、PHITS の計算結果をより多角的かつ容易に分析することが可能となる。

5.3.10 ニュートリノ核反応モデルの開発と検証

Development and Verification of Reaction Model for Neutrino-induced Reactions

小川 達彦

放射線挙動解析研究グループ

(1) 利用目的:

ニュートリノによる核反応は、ニュートリノの基礎特性研究や、原子炉の遠隔監視といった応用の点で、近年特に注目が集まっている。また、ニュートリノが起こす弱い相互作用は定式化されており、断面積や終状態は高精度に予想されている。

一方、原子力機構が開発を進めている汎用放射線輸送計算コード PHITS は、ニュートリノによる核反応を模擬するモデルがなく、ニュートリノは物質中を反応することなく透過していた。そこで本研究では、ニュートリノによる核反応モデル JQMD を開発して PHITS に実装し、その動作を様々な計算により検証した。

(2) 利用内容・結果:

1) 計算モデルの設定

ニュートリノによる核反応には、ニュートリノがレプトンに変わる荷電カレント反応と、ニュートリノが反応の終状態まで残る中性カレント反応という大分類の中に、電子との散乱・核子との弾性散乱・核子との非弾性散乱といった小分類が存在し多岐にわたる。それらすべてを一つの模型で表現することはできないため、特に応用上重要な ${}^1\text{H}(\bar{\nu}_e, e^+)n$ 荷電カレント反応、 ${}^2\text{H}(\bar{\nu}_e, e^+)2n$ 荷電カレント反応、 ${}^2\text{H}(\nu_e, e^-)2p$ 荷電カレント反応、 ${}^2\text{H}(\nu_e, \nu_e)np$ 中性カレント反応に注目し、その模型を開発・実装した。なお、図 1 に ${}^1\text{H}(\bar{\nu}_e, e^+)n$ 荷電カレント反応を用いたニュートリノ検知の模式図を示す。陽子がニュートリノを吸収した結果、中性子と陽電子が生じ、それらが起こす反応の結果、チェレンコフ光や γ （ガンマ線）を放出する。そのため、反応から生成する粒子の運動が重要となる。

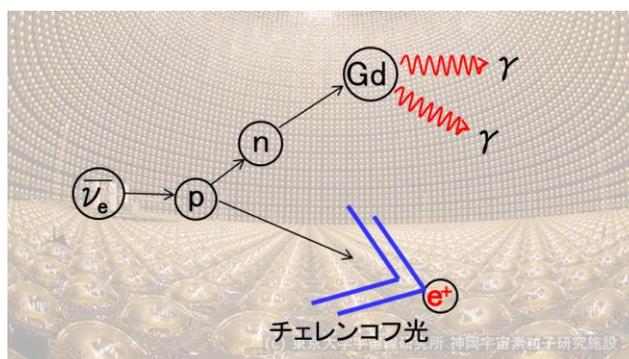


図 1 計算の幾何形状。燃料中の核分裂生成物から出るニュートリノを輸送した。

反電子ニュートリノに対する ^1H の反応断面積として、Strumia 他の系統式[1]を採用した。これにより、入射エネルギー200MeV までの反応を扱うことができる。ニュートリノと ^1H の反応により生成する陽電子と中性子の運動量は、運動量とエネルギーの保存と、Strumia 他の系統式で与えられる分散をもとに分布させた。また、ニュートリノに対する ^2H の反応断面積は Nakamura 他のデータ [2]を使用した。

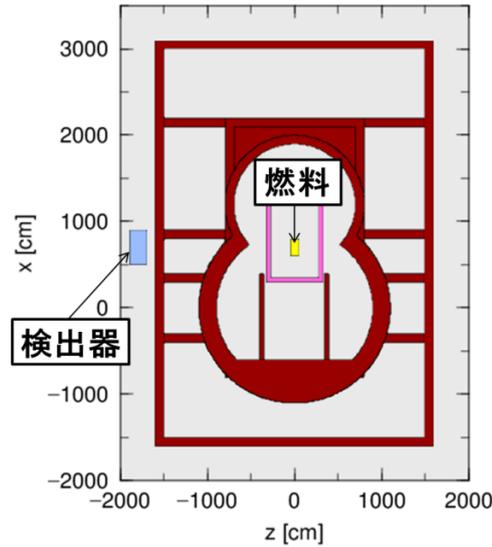


図2 計算の幾何形状。燃料中の核分裂生成物から出るニュートリノを輸送した。

ニュートリノ入射反応モデルの動作を確認するため、図2に示す原子炉の遠隔監視装置を模擬した体系で計算を行った。中央に示された燃料（核分裂生成物が β 崩壊し、ニュートリノを放出する。）の領域から 5MeV の $\bar{\nu}_e$ を放出させ、図左側に示された検出器におけるパルス波高を計算した。検出器は水であり、主に $\bar{\nu}_e$ と水素の反応で発生する陽電子によりエネルギー付与を受ける。

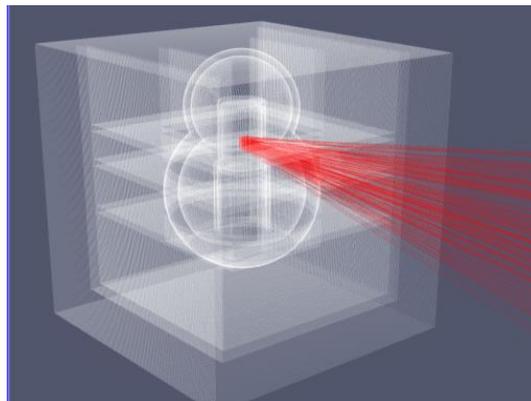


図3 検出器を通過するニュートリノの飛跡分布

図3に本計算を実行した際に検出器に到達したニュートリノの飛跡分布を示す。白い線で示された原子炉の構造のうち中心部に位置する燃料から、ニュートリノが赤線で示された飛跡に沿っ

て放出されている。これはニュートリノの反応断面積が非常に小さく、ほとんど散乱されないことと整合する結果を示すものである。

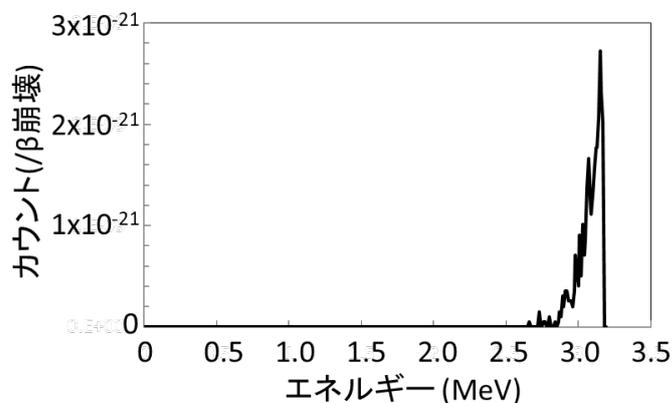


図4 検出器で得られるパルス波高分布

図4はこの計算で得られたパルス波高分布（検出器に生じる信号の強度分布）であり、 3.0×10^{-20} カウント（ $1/\beta$ 崩壊）が得られた。これはニュートリノの反応断面積が $10^{-42}(\text{cm}^2)$ と非常に低いことを示しており、また波高の最高値 3.2MeV は、反応の Q 値(-1.8MeV)から妥当であることも確認できた。

$^1\text{H}(\bar{\nu}_e, e^+)n$ 荷電カレント反応反応モデルは、2018年夏にリリースを計画している PHITS 最新版に実装する予定である。

[1] A. Strumia, F. Vissani, *Physics Letters B*, vol.564, No.1-2, pp.42-54 (2003).

[2] S.Nakamura *et al.*, *Nucl. Phys. A*, vol.707, No.3-4, pp. 561-576 (2002).

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 小川達彦, 橋本慎太郎, 佐藤達彦, ニュートリノ核反応モデルの開発と PHITS への実装, 日本原子力学会 2018 年春の年会, 大阪, (2018).

(4) 今後の利用予定:

汎用放射線輸送計算コード PHITS に組み込まれている核反応モデル JQMD は、核子当たり $10\text{-}3000\text{MeV}$ のエネルギーで発生する原子核-原子核衝突反応を記述するモデルであるが、重陽子やヘリウムなどの軽クラスター生成を過小評価することが指摘されていた。この問題を解決するために、反応が時間発展する間に核子同士が結びつく効果などを考慮してこのモデルを改良する予定である。これにより、宇宙線科学分野や加速器安全分野、医療放射線科学への応用利用において、PHITS による高精度の予測が実現できると期待される。

5.3.11 解析関数眼球モデルを用いた放射線線量評価

Radiation Dose Assessment using a Stylized Eye Model

古田 琢哉

放射線挙動解析研究グループ

(1) 利用目的:

眼の水晶体に対する年間線量限度の推奨値の引き下げが国際放射線防護委員会より発表されて以降、眼の詳細構造に対する線量予測システムの構築に関心が高まっている。これを受けて、線量評価に用いる詳細な数値眼球モデルがいくつか開発されたが、いずれも典型的な球形を持たせた通常サイズの正常視眼球モデルであった。そこで、サイズ及び形状の変更が可能で、放射線被ばく及び眼疾患の放射線治療のシミュレーションに使用できる解析関数眼球モデルを開発した(図1)。この眼球モデルを利用したシミュレーションの一例として、

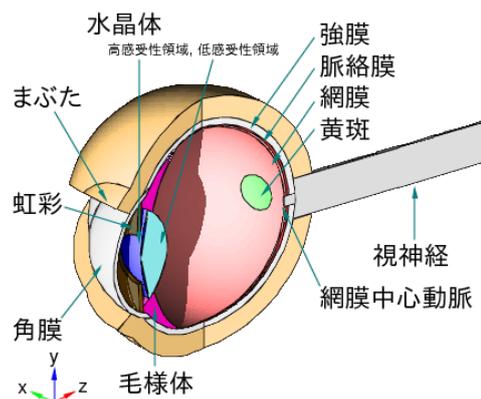


図1 解析関数眼球モデル

前方照射条件での電子及び光子の放射線輸送計算を大型計算システム ICE X を使って実行し、入射エネルギーを変化させた場合の眼球内詳細構造に対する線量率の変化を調べた。

(2) 利用内容・結果:

構築した解析関数眼球モデルを粒子・重粒子輸送計算コード PHITS に取り込み、電子及び光子の輸送計算を実行した。シミュレーション体系は脂質ブロックに埋め込んだ眼球モデルの正面から 4 cm×4 cm の照射野で均一照射を行う照射体系を設定し、単色エネルギーの電子 (1 MeV から 8 MeV までの 29 点) 及び光子 (7.5 keV から 10 MeV までの 25 点) について計算した。PHITS の計算モデルパラメータは、X 線治療シミュレーションに対する推奨値を参考にし、電子及び光子の運動エネルギーが 1 keV 以下になるまでの輸送計算を PHITS に組み込まれた電磁カスケードモンテカルロコード EGS5 で実行した。この設定では、一つのコアで電子 10 万個の輸送を全エネルギー 29 点で実施するのに約 8 時間程度、また光子 100 万個の輸送を全エネルギー 25 点で実施するのに約 10 時間程度を要した。体積が小さく統計の溜まりにくい網膜中心動脈でも 1% 程度の十分な統計精度を得るには、これらの 2000 倍程度の計算量が必要であったため、大型計算機システムの利用が必要不可欠であった。実際の計算では、PHITS に用意されている MPI の並列プロトコルを利用し、ICE X の 216 並列ジョブキューを利用して計算を実施した。

眼球のサイズ及び形状を変更した複数のケースで計算を実行したが、ここでは典型的な球形で通常サイズの正常視眼球に対する電子の輸送計算の結果を一例として図 2 に示す。前方照射条件のため、各構造体の深さ位置が重要となり、眼球内の比較的前方に位置する水晶体、角膜、毛様体では、線量係数(線量/フルエンス)が低いエネルギーにピーク構造を持ち、その後はエネルギー増加に対して徐々に減少して一定の値に漸近する様子が見られる。これは、眼球前方から入

射した電子が形成するビルドアップピークのため、入射電子エネルギーの増加に伴って深い位置に形成されるピークの位置が各構造体の深さに一致するエネルギーで線量値が最大になり、それ以上のエネルギーでは、各構造体がビルドアップピークの手前に位置するようになるために線量係数が減少する。水晶体の高感受性領域は水晶体の前方表面に位置するため、高感受性領域の線量計数のピークは全水晶体のピークよりも低エネルギー側にシフトし、また最大線量も高くなった。この傾向は従来の数値眼球モデルの研究結果と良く一致する。比較的後方に位置する網膜、網膜中心動脈、視神経では、ある程度の入射電子

エネルギー（数 MeV）までは、各構造体がビルドアップピークよりも後方に位置しており構造体まで届く電子はほとんどない。入射電子エネルギーが増加するに連れて、各構造体に届く電子の量が増え、線量が上昇した。

眼球のサイズ及び形状の違いに対しても、前方照射条件のために各構造体の深さ位置が重要となる。眼球サイズが大きい場合や近視のために眼球が扁長変形を持つ場合は、通常サイズの正視の場合に比べて各構造体が深い位置にずれるため、エネルギー応答が高エネルギー側にシフトする傾向があることがわかった。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) D. El Basha, T. Furuta, S. S. R. Iyer and W. E. Bolch, "A scalable and deformable stylized model of the adult human eye for radiation dose assessment", Phys Med Biol., vol.63 (2018) pp.105017_1-105017_13.

(4) 今後の利用予定:

今後は、本研究で構築した解析関数眼球モデルを様々な放射線環境での被ばくシミュレーションや放射線治療シミュレーションに応用していく予定である。本研究では、解析関数眼球モデルに対して正面から均一照射するシミュレーションを実施したが、今後は異なる照射方向やビーム形状を考慮し、眼球サイズ及び形状の違いが与える影響について評価していきたい。眼球の各詳細構造における線量を精度良く計算するためには、大型計算機の使用が必須であるため、今後も本システムを利用して、引き続き研究を行って行く予定である。

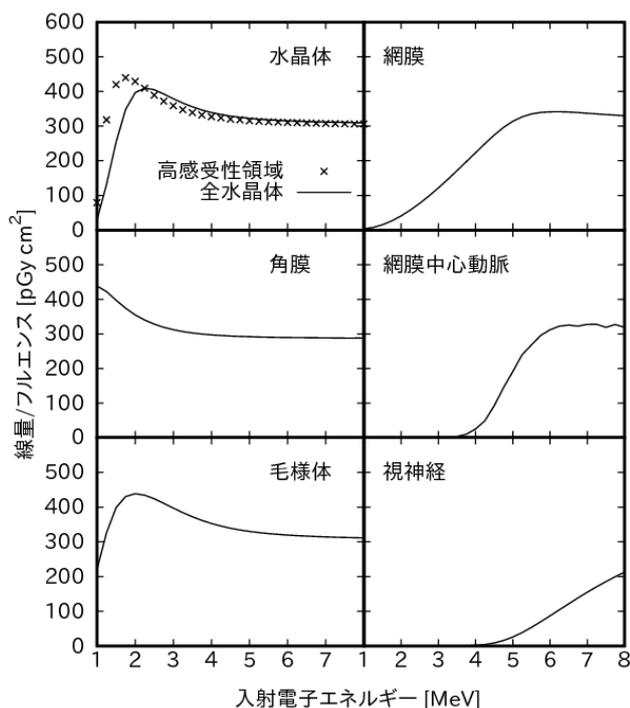


図2 電子に対する眼球内詳細構造の線量係数

5.3.12 PHITS の T-DCHAIN タリーの改良

Improvement of T-DCHAIN Tally in PHITS

安部 晋一郎

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 には、高エネルギー粒子誘導放射能計算コード DCHAIN-SP の入力ファイルを作成する[T-DCHAIN]タリーが実装されている。PHITS の一般的なタリーでは、データを収集する幾何形状の種類として領域メッシュ (reg)、xyz スコアリングメッシュ (xyz) 及び r-z スコアリングメッシュ (r-z) の 3 種類が使用可能である。xyz メッシュ及び r-z メッシュは誘導放射能の空間プロファイルを計算するために必要となるが、従来の [T-DCHAIN]タリーは、xyz メッシュ及び r-z メッシュに対応していない。そこで、[T-DCHAIN]タリーで xyz メッシュ及び r-z メッシュを使用できるように、PHITS 及び DCHAIN-SP を改良する。本改良により、誘導放射能の空間プロファイルの計算が可能となると同時に、DCHAIN 入力ファイルの作成に要する時間も短縮できるため、加速器施設や原子炉などの誘導放射能の計算における PHITS の利用拡大が期待される。

(2) 利用内容・結果:

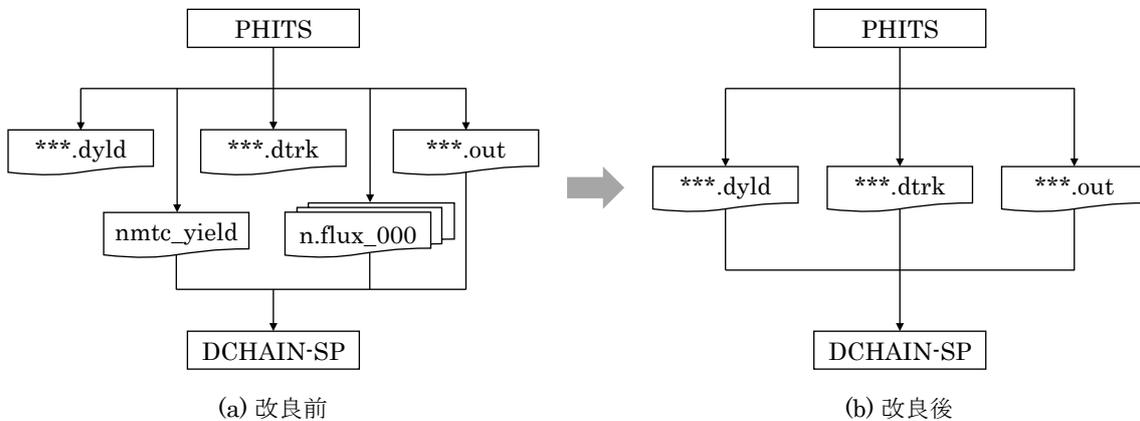


図 1 改良前後の PHITS の出力ファイルと DCHAIN-SP の入力ファイルの関係。***は指定した任意のファイル名が代入される。

従来の[T-DCHAIN]タリーは、図 1.(a)に示すように 5 つのファイルを出力する。これらのうち、***.out、nmtc_yield 及び n.flux_000 が DCHAIN-SP の入力ファイルとして使用される。なお、nmtc_yield は***.dyld、n.flux_000 は***.dtrk をそれぞれ DCHAIN-SP の入力ファイル形式に編集したものである。このうち、n.flux_000 の末尾の番号は DCHAIN-SP で計算する領域番号に対応しており、領域が増える毎に n.flux_001、n.flux_002、...と新たなファイルが作成される。[T-DCHAIN]タリーで xyz メッシュ及び r-z メッシュを使用するとき、対象とする空間

は多数の領域に細分化されるため、現状の仕様では n.flux のファイル数が膨大に作成されてしまう。また、DCHAIN-SP の入力ファイルである nmte_yield 及び n.flux_000 はファイル名が固定となっており、これらの上書きを避けるために複数の[T-DCHAIN]セクションを 1 つの PHITS の入力ファイルに設定出来ないという問題もある。

そこで本改良では、図 1.(b)に示すように、nmte_yield 及び n.flux_000 の代わりに***.dyld 及び***.dtrk を DCHAIN-SP の入力ファイルとして読み込ませ、従来の[T-DCHAIN]タリーで行われていた情報の編集 (nmte_yield 及び n.flux_000 の作成に相当する箇所) については、DCHAIN-SP の内部で処理するようにした。これにより、n.flux_000 のファイルの膨大な作成を回避できた。さらに、DCHAIN-SP の全ての入力ファイルを任意のファイル名に設定可能となったため、PHITS の入力ファイルに複数の[T-DCHAIN]セクションを設定できるようになった。

上記の改良に加え、従来の[T-DCHAIN]タリーで出力された***.out、nmte_yield 及び n.flux_000 も DCHAIN-SP の入力ファイルとして認識できるように、DCHAIN-SP に新たなパラメータ”itdchout”を追加した。itdchout の指定がなければ、従来通り***.out、nmte_yield 及び n.flux_000 が DCHAIN-SP の入力ファイルとして認識される。一方、改良後の[T-DCHAIN]タリーでは、***.out、***.dyld 及び***.dtrk が DCHAIN-SP の入力ファイルとして認識されるように itdchout の値を自動で設定する。

以上の改良を行った後、[T-DCHAIN]タリーの reg メッシュ形式で計算を行い、出力される nmte_yield、n.flux_000 を入力ファイルとした DCHAIN-SP の計算結果と、***.dyld、***.dtrk を入力ファイルとした場合、同じ結果が得られることを確認した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

(4) 今後の利用予定:

今後も PHITS 及び DCHAIN-SP の改良を進める予定である。はじめに今回改良した[T-DCHAIN]タリーによるファイルの出力及び DCHAIN-SP での読み込みが、xyz メッシュ及び r-z メッシュでも正しく動作するか確認作業を進める。続いて、xyz メッシュ及び r-z メッシュでの DCHAIN-SP の計算結果の出力機能を新たに開発する。具体的には、誘導放射能の空間プロファイルを瞬時に把握する上で有用な形式として、放射エネルギーを色の濃淡などで表現する二次元プロット機能の開発を検討している。

5.3.13 PHITS の計算シミュレーションによる新しい PKA 測定システムの設計

Design of a New PKA Measurement System by PHITS Simulations

蔡 碧恩

放射線挙動解析研究グループ

(1) 利用目的:

Primary knock-on atoms (PKAs), which are heavy recoiled charged particles created from spallation reactions, are critical for various applications, particularly for radiation damage assessment in accelerator facilities and in space environment. PKAs have a continuous mass distribution from target nuclide down to one atomic mass unit (amu) and a wide energy distribution from a few tens of MeV down to sub-MeV. The PKA energy spectra and its yields are one of the fundamental input parameters for radiation damage calculation models. Yet the experimental data up to date are still limited, due to the high measurement thresholds and the insufficient mass resolutions to identify PKA species in the conventional experimental setups using solid state detectors.

To provide the important PKA data, we proposed a new measurement system consisting of two fast timing detectors and one dE-E gas ionization chamber (GIC). The design of the customized GIC, the experimental setup, as well as the estimation of the system performance were all performed by Monte Carlo simulations using the PHITS code.

(2) 利用内容・結果:

I. Design of the Gas Ionization Chamber

The all-in-one dE-E gas ionization chamber in the measurement system should feature (i) a thin window that minimizes energy losses in the window when PKAs enter the chamber, (ii) adjustable operation pressures to be able to measure a dynamic range of PKA energies, and (iii) an optimized length ratio of the two anodes/cathodes, respectively for measuring the PKA stopping powers and the remaining kinetic energies, such that the PKA atomic number can be identified at the energies as low as possible.

The above mentioned three factors are the key that determines the performance of a GIC. The PHITS Monte Carlo simulation code was employed to simulate a various combination of those three factors. The optimal conditions determined from the simulation results are described below, and the design is shown in Fig. 1.

- (i) A silicon nitride window at a 30-75 nm thickness is technically achievable and the PKA energy losses caused by the window can be neglected.
- (ii) The GIC operation pressure will be between 15 and 50 mbar.
- (iii) The dE and E anode segments are 2 cm and 10 cm long respectively.

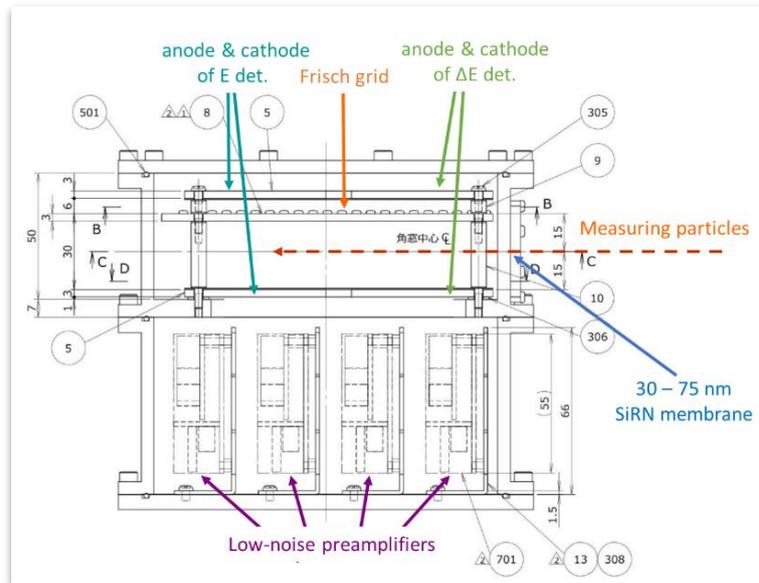


Fig.1. The design of the ΔE -E gas ionization chamber.

II. Design of the Experimental Setup & The Estimation of the System Performance

The PHITS code was used to simulate (1) the correlation between the PKAs' time of flight (TOF) between the timing detectors and their kinetic energies, and (2) the relationship of the PKAs' stopping powers and their total kinetic energies as part of the GIC design mentioned earlier. By combining these two relationships, the PKA isotopes can be distinguished.

With the assumption of a 16-cm distance between the two timing detectors, Fig. 2 shows two examples of the TOF and E relationship from (a) 70-MeV protons bombarding a thin ^{12}C foil, and (b) 400-MeV protons bombarding a thin ^{28}Si target. It is found that the for ^{12}C targets, the PKA masses can be clearly separated above ~ 1.5 -2 MeV for all isotopes, i.e. less than ~ 0.15 MeV/nucleon. Compared Fig. 2 (b) with Fig. 2 (a), with the increasing target nuclide mass and the increasing projectile energy, more heavier reaction

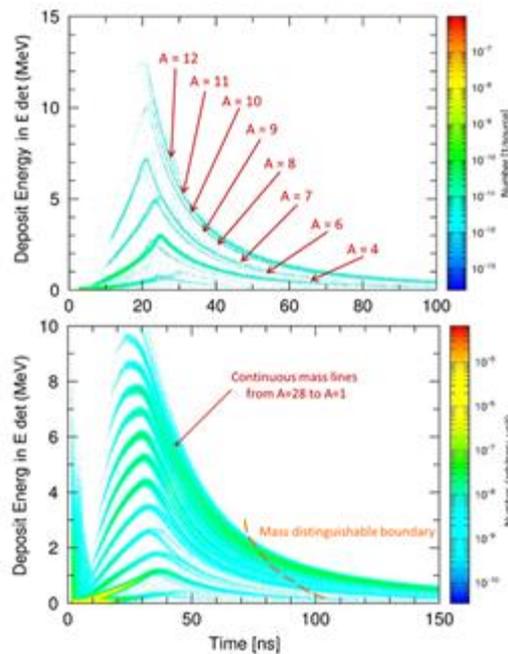


Fig.2. The TOF-E relationship simulated by PHITS from (a) 70-MeV protons bombarding ^{12}C , and (b) 400-MeV protons bombarding ^{28}Si .

products with higher kinetic energies are created. The separation energy limit for different PKA masses also increases to ~ 3 MeV as the PKA mass increases to 28 amu.

Figure 3 shows a simulation example of the energy depositions respectively in the dE and E region in the gas ionization chamber. Such a dE-E relationship can be used to identify the atomic numbers of PKAs. The trend of the element identification is similar to the mass discrimination: the thresholds increase as PKAs become heavier. For PKAs with atomic number between 10 and 14, the charge discrimination thresholds are ~ 6 -8 MeV in total kinetic energy. To be able to identify the PKA isotopes, the dE-E relationship needs to be combined with the tof-E information. Thus, the isotope identification thresholds become 0.2-0.3 MeV/nucleon for $A = 20$ -30 amu, and less than 0.2 MeV/nucleon for lighter PKAs.

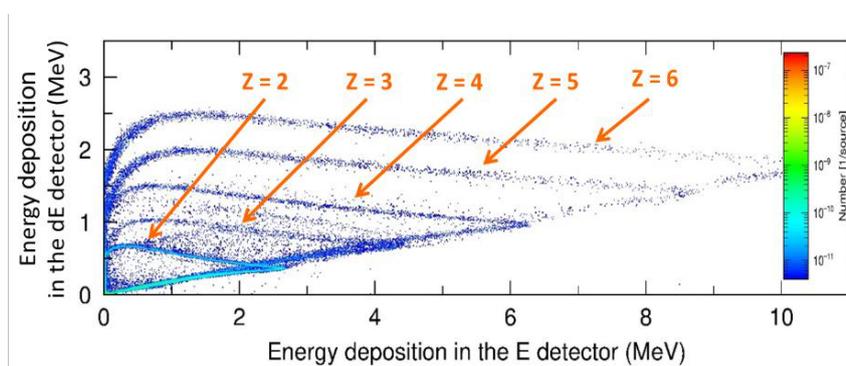


Fig.3. The dE-E relationship simulated by PHITS from a system with 70-MeV protons bombarding a thin ^{12}C target.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) P.-E. Tsai, Development of the Detection System for 70-MeV Proton-induced PKAs, Workshop of Accelerator Driven System and Transmutation Study, Tokai, Japan, Jan. 24, 2018.
- 2) P.-E. Tsai, Y. Iwamoto, M. Hagiwara, T. Sato, D. Satoh, M. Itoh, and H. Watabe, Establishment of a Novel Detection System for Measuring Primary Knock-on Atoms, the IEEE Nuclear Science Symposium (NSS), Atlanta, GA, USA, Oct. 21-28, 2017.

(4) 今後の利用予定:

The new measurement system has been constructed and undergoing tests. The new PKA experimental data will be compared to the PHITS simulation results for future PHITS code improvements.

5.3.14 Cs シリケートの構造と熱力学特性

Structural and Thermodynamic Properties of Cs Silicates

Miradji Faoulat

性能高度化技術開発グループ

(1) 利用目的:

In the framework of Fukushima Daiichi Nuclear Power Station (1F) severe accident (SA), cesium (Cs) retention phenomena are of high interest due to their impact on the decommissioning and dismantling work. Current SA analysis codes present large uncertainties in the estimation of Cs retention onto structural materials of reactor coolant system (RCS) regions, due in part to the lack of knowledge in Cs chemisorption processes onto stainless steel (SS) surfaces. To improve and extend knowledge on Cs chemisorption mechanisms with SS, we investigated chemisorption behavior by means of experimental and theoretical approaches, aiming to derive a Cs chemisorption model able to take into account specific chemical conditions of 1F SA. In particular, to characterize the possible formed chemisorbed species and revaporization processes, the thermodynamic data of identified and potential Cs chemisorbed species are needed. In this study, we will present the derivation of Cs-(Fe)-Si-O substances structural and thermodynamic properties from DFT calculations and the validation of developed computational methodology through comparisons with available literature data. In particular, the thermodynamic properties of a newly characterized Cs chemisorbed species in our chemisorption tests, CsFeSiO₄, are provided for the first time.

(2) 利用内容・結果:

To obtain the desired structural and thermodynamic properties of our targets substances, we computed the geometric and energetic properties with density-functional theory (DFT) approximations, using the Vienna Ab initio Simulation Package (VASP). Thus, the derivation of the thermal properties was computed by calculating the phonon dispersion curves of the crystal structure. PHONO.PY software was used to obtain the force constants within the small displacement method and to post-process the obtained matrix to derive the phonon density of states as well as the related thermal properties. The latter values were computed using the harmonic approximation, assuming it is a good approximation regarding our study, as our experimental highest temperature was chosen under the melting point of investigated substances. All these calculations were performed using the Super Computer installed in JAEA (CCSE-ICEFS Tokai). The investigated substances were CsFeSiO₄, a newly characterized chemisorbed species in our experiments [1], and Cs₂Si₄O₉, an identified chemisorbed species from literature, for which standard enthalpy of formation was derived using calorimetric solution measurements [2, 3]. The increment enthalpy was measured by

vaporization tests [4]. Afterwards, the data regarding standard entropy and heat capacity were extrapolated from room to high temperatures regions. To identify the main stable crystal structures of our target species, we started by investigating several prototypes for each substance.

After computing the relative heat of formation at 0 K of all candidates, two prototypes were found suitable for $\text{Cs}_2\text{Si}_4\text{O}_9$ (P-3m1 and P-3c1 space group), for which no clearly defined crystal structure is available from the literature. Two symmetries were selected for CsFeSiO_4 , two crystal structures in P63 space group, differences coming from unit cell shape, with one having 24 formula units (f.u) in the primitive cell, and the other 8. The second symmetry is Pc21n, crystal candidate taken from Henry study who synthesized CsFeSiO_4 [5]. For $\text{Cs}_2\text{Si}_4\text{O}_9$, the standard enthalpy of P-3m1 (-2.923 eV/atom) prototype is the closest of literature one (-2.969 eV/atom), but while observing the derived heat capacity in Fig. 1, the P-3c1 candidate is the most likely one, with a $\Delta H_{298\text{K}}$ of -2.885 eV/atom. As the computed heat of formation for both prototypes are in good agreement with literature accuracy on standard enthalpy calculations within DFT [6], we selected P-3c1 crystal structure as the most likely one to represent $\text{Cs}_2\text{Si}_4\text{O}_9$.

For CsFeSiO_4 , one computed heat of formation at 0 K was available from Material Database (-2.427 eV/atom) [7], using DFT approximations and crystal structure similar to ours, our derived heat of formation at 0 K (-2.429 eV/atom) similar to the one from literature DFT calculations emphasizes the appropriateness of built computational methodology. The derived thermodynamic data are almost equal for both symmetries considered for the cesium iron containing silicate. To conclude on these results, it seems that, even under the harmonic approximation, the computed thermodynamic data for $\text{Cs}_2\text{Si}_4\text{O}_9$, in particular, the derived heat capacities from room to high-temperature regions are in good agreement with available literature data. In addition, we proposed for the first time a specific crystal structure for this compound. Regarding CsFeSiO_4 results, not only we derived the thermal properties for the first time from low- to high-temperature regions, using first-principles calculations, but also we determined a polymorphous characteristic for this substance. Such data will be incorporated in

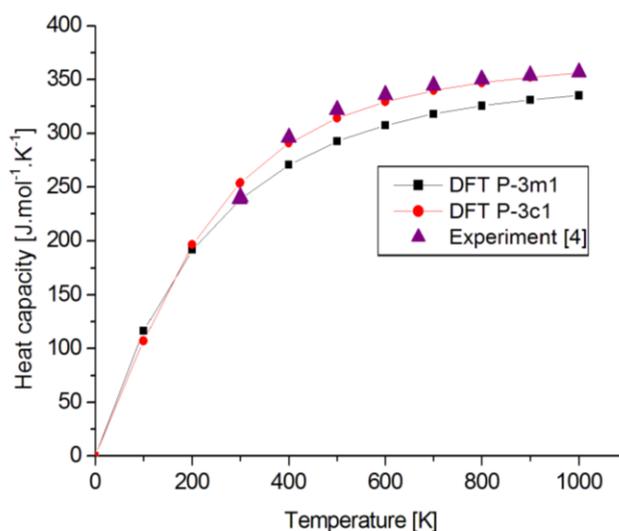


Fig.1 Calculated heat capacities of $\text{Cs}_2\text{Si}_4\text{O}_9$ compared with literature [4]

equilibrium thermodynamic calculations to evaluate which candidates remain the most stable while varying the partial pressure and atmospheres to reproduce SA conditions.

- [1] F. D. Lemma, K. Nakajima, S. Yamashita, M. Osaka, Nucl. Eng. Des., vol.305, pp.411-420 (2016).
- [2] E. Cordfunke, W. Ouweltjes, J. Chem. Thermodynamics, vol.25, No.8, pp.1011-1016 (1993).
- [3] P. J. Spencer, NPL Report Chem. vol.21, 36p. (1973).
- [4] R. Ball, B. Bowsher, E. Cordfunke, S. Dickinson, R. Konings, J. Nucl. Mater., vol.201, pp.81-91 (1993).
- [5] P. Henry, M. Weller, Chem. Commun., NO.24, pp.2723-2724 (1998).
- [6] S. Kirklin, J. E. Saal, B. Meredig, A. Thompson, J. W. Doak, M. Aykol, S. Rühl, C. Wolverton, Npj Comput. Mater., vol.1, 15010p. (2015).
- [7] J. Saal, S. Kirklin, M. E. A. Aykol, JOM, vol.65, No.11, pp.1501-1509 (2013).

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

Oral communications

- 1) **F. Miradji**, C. Suzuki, N. Nakajima, M. Osaka, “Quantum modelling of Cs substances in the case of LWR severe accident”, 2M14-17, AESJ Spring Meeting, Osaka, 26-28 March, 2018, Japan.
- 2) **F. Miradji**, C. Suzuki, N. Nakajima, M. Osaka, “Structural and thermal properties of Cs-Fe-Si-O systems under LWR severe accident by DFT calculations”, HTMC-16 Conference, Ekaterinburg, 2-6 July, Russia.
- 3) **F. Miradji**, E. Suzuki, S. Nishioka, C. Suzuki, K. Nakajima, M. Osaka, “Comparative study of Cs silicates properties between DFT calculations and experimental data”, 3E10-12-17, AESJ Fall Meeting, Okayama, 5-7 September 2018, Japan.

(4) 今後の利用予定:

For future plan using CCSE Super Computer center, an application for computational resources project was launched to finish the investigation of remaining Cs-(Fe)-Si-O compounds. Several compounds, identified or predicted to be chemisorbed are investigated, the thermodynamic data extrapolated and calculations using the quasi-harmonic approximation carried out. A further analysis will be conducted to understand the mechanisms of diffusion of the Cs particles into the oxidized layers of stainless steel. The final purpose is to identify main possible compounds retained in the reactor structural material to help develop mitigation tools in the decommissioning and dismantling work of 1F.

5.3.15 第一原理計算による SA 時の Cs 吸着挙動評価

Evaluation on Cs Adsorption Behavior during SA

鈴木 知史

性能高度化技術開発グループ

(1) 利用目的:

現在、福島第一原子力発電所（1F）における燃料デブリ取り出しや軽水炉シビアアクシデント（SA）に対し、軽水炉 SA 時の核分裂生成物（FP）の放出・移行挙動評価手法の高度化が進められている。このためには、炉内環境にある核分裂生成物（FP）の化学形を特定して FP の化学挙動を解明する必要がある。FP の中でも、長期にわたり放射線源・発熱源となり得るセシウム（Cs）の構造材への化学吸着挙動の解明は重要である。しかしながら、1F 事故解析から類推される温度や雰囲気等での Cs の化学吸着挙動の把握は十分ではない。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。また、構造材への Cs の化学吸着実験が進められており、Cs-Fe-Si-O 系の化合物の存在が示唆されている。これらの化合物は組成や特性が異なるため、化学吸着プロセスにおいて生成する化合物を特定することは重要である。

本課題では、第一原理計算を用いて、炉内環境における Cs の化学形の評価に有効である硬 X 線光電子分光法（HAXPES）の解析手法を構築する。さらに、HAXPES 等の実験の解析から抽出された結果を併せて評価することで Cs 吸着挙動を推定することを目的とする。

(2) 利用内容・結果:

高温における Cs の構造材上の化学吸着挙動の解明に向けた研究の一環として、化学吸着により生成した化合物の硬 X 線光電子分光法（HAXPES）等による評価を進めている。これまでに、Cs 化学吸着により Cs-Si-O 化合物や Cs-Fe-Si-O 化合物が生成することが知られている。一方、これらの化合物の HAXPES 測定によるスペクトルは知られていないため、その解析手法を確立する必要がある。特に、これらの化合物は吸湿性が高く表面の原子配置が変化しやすいため、HAXPES 測定により得られたスペクトルの妥当性をあらかじめ確認する必要がある。そこで、これらの純粋な化合物の HAXPES を第一原理計算により求め、測定結果の妥当性を評価した。

Cs-Si-O 化合物や Cs-Fe-Si-O 化合物として、 $\text{Cs}_2\text{Si}_2\text{O}_5$ 、 $\text{Cs}_6\text{Si}_{10}\text{O}_{23}$ および CsFeSiO_4 の HAXPES を対象として、第一原理計算による評価を実施した。計算コードは WIEN2k [1]を用いて、Fe を含む CsFeSiO_4 については、GGA+U 法により計算を実施し、パラメータとして Fe_2O_3 で用いられている $U=4.6$ eV, $J=0.3$ eV を用いた。内殻軌道の HAXPES のエネルギーは、内殻軌道の電子を除去した系と基底状態の系のそれぞれのエネルギーの計算結果の差として求めた。

表 1 に Si 1s HAXPES の測定結果と計算結果の比較を示す。エネルギーは、 CsFeSiO_4 を基準として示している。測定結果は、 $\text{Cs}_2\text{Si}_2\text{O}_5$ と $\text{Cs}_6\text{Si}_{10}\text{O}_{23}$ のエネルギーはほぼ同じであるが、 CsFeSiO_4

はそれより低い値である。第一原理計算による結果は、測定結果の傾向と一致した。測定における試料の表面状態等の影響、HAXPES の測定精度および第一原理計算の計算精度等を考慮すると、測定結果と計算結果はほぼ同等であると考えられる。以上より、CsFeSiO₄、Cs₂Si₂O₅ および Cs₆Si₁₀O₂₃ の HAXPES 測定結果は妥当であると評価される。

表 1 Si 1s HAXPES のエネルギー

試料	測定結果	計算結果
CsFeSiO ₄	0 eV	0 eV
Cs ₂ Si ₂ O ₅	1.3 eV	1.5 eV
Cs ₆ Si ₁₀ O ₂₃	1.1 eV	1.6 eV

さらに CsFeSiO₄ と Cs₂Si₂O₅ と Cs₆Si₁₀O₂₃ の価電子域の HAXPES の測定結果と計算結果を図 1 に示す。測定結果ではいずれの化合物も Cs 5p_{3/2} の高エネルギー側にテールが存在しているが、計算結果では CsFeSiO₄ のみテールがあり Cs₂Si₂O₅ と Cs₆Si₁₀O₂₃ にはない。Cs₂Si₂O₅ と Cs₆Si₁₀O₂₃ では表面に Cs₂CO₃ の形成が考えられるため、価電子域の HAXPES について測定結果と Cs₂CO₃ の影響を考慮した計算結果を図 2 に示す。図 2 により計算によりテールが再現されており、Cs₂Si₂O₅ と Cs₆Si₁₀O₂₃ の価電子域の HAXPES は表面の Cs₂CO₃ の影響が重要であると考えられる。

[1] K. Schwarz et al., Comput. Phys. Commun., vol.147, No.1 (2002) pp.71-76.

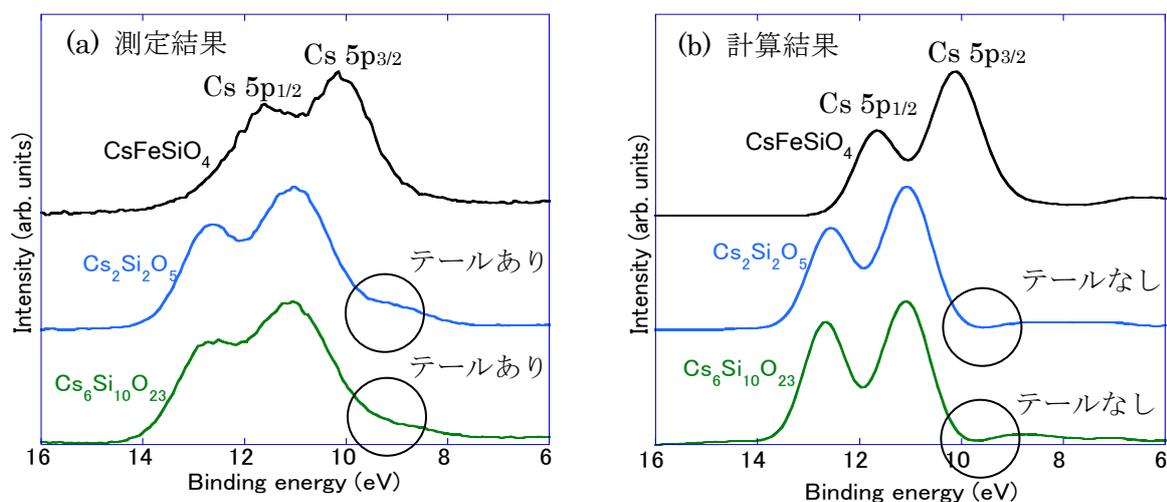


図 1 CsFeSiO₄ と Cs₂Si₂O₅ と Cs₆Si₁₀O₂₃ の価電子域の HAXPES (a) 測定結果 (b) 計算結果

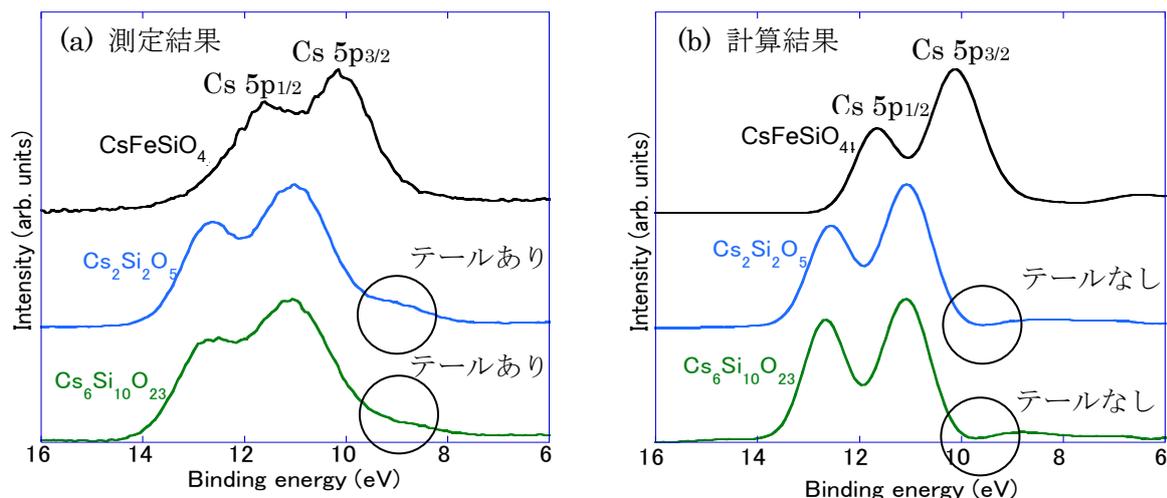


図2 Cs₂Si₂O₅ と Cs₆Si₁₀O₂₃ の価電子域の HAXPES (a) 測定結果 (b) Cs₂CO₃ を考慮した計算結果

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

[査読付き論文]

- 1) C. Suzuki, T. Yaita, S. Suzuki, J. Pacold, A. B. Altman, S. Minasian, T. Tyliczszak, D. K. Shuh, H. Yoshida., and M. Osaka, “Evaluation of electronic state of Cs-adsorbed clay minerals by NEXAFS analysis using DFT calculations”, J. Phys. Chem. Solids, <https://doi.org/10.1016/j.jpcs.2018.11.011>.

[学会発表]

- 2) 鈴木知史, 小島雅明, 中島邦久, 岡根哲夫, 逢坂正彦, “軽水炉シビアアクシデント時の炉内高温領域における FP 及び制御材の化学挙動評価 (1) DFT 計算による Cs 化合物の硬 X 線光電子分光スペクトル解析手法の構築”, 日本原子力学会 2018 年春の年会, 吹田 (2018).
- 3) 鈴木知史, 小島雅明, 中島邦久, 岡根哲夫, 逢坂正彦, “軽水炉重大事故時における Cs と鋼材の化学反応の評価 (2) 第一原理計算による Cs 吸着化合物の HAXPES 分析結果の解析”, 日本原子力学会 2017 年秋の年会, 札幌 (2017).

(4) 今後の利用予定:

今後、イオン化断面積を理論的に計算してより高精度の HAXPES スペクトルの解析を行う。また、埋設処分したウラン化合物の安定性を評価するため、ウラン燐酸化合物の計算を実施する。

5.3.16 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、堀口 直樹、上澤 伸一郎
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も行った。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 29 年度の実施内容に関する目的・意義を以下に示す。

1. 溶融燃料落下挙動評価手法開発に関する研究

シビアアクシデント解析コードの高度化には、炉心溶融時の複雑な熱流動現象を適切にモデル化し、解析コードに反映する必要がある。本研究では、これまで気液二相流を対象に開発してきた詳細解析手法を、溶融燃料落下時の熱流動解析に対応できるように拡張することで、複雑な構造物を内包する炉心下部プレナムなどへの、溶融燃料落下時の熱流動現象を詳細に評価できる解析手法を開発する。さらに、開発した解析手法を用いて、溶融燃料落下時の熱流動挙動を予測する数値モデルを構築する。本年度は、平成 28 年度までに改良を行った解析手法を用いて、浅水プール内液体ジェット侵入挙動解析を実施した。

2. 限界熱流束予測手法開発に関する研究

軽水炉安全性の向上及び燃料設計の評価手法の最適化をする上で、長年評価上の課題とされてきた沸騰における除熱限界である「限界熱流束」について、機構論的な予測手法の開発に向け、詳細二相流解析コード TPFIT の発展・改良を行うとともに、TPFIT を用いた二相流解析を実施し、限界熱流束予測手法に向けた現象解明に反映する。本年度は、解析コードの適用性検証のため、簡易体系を用いた複数気泡合体挙動解析を実施した。

(2) 利用内容・結果:

1. 溶融燃料落下挙動評価手法開発に関する研究

溶融燃料落下挙動評価手法開発の一環として、浅水プール内液体ジェット侵入挙動解析を実施した。体系は筑波大学で実施された浅水プール内液体ジェット侵入実験の実験装置を模擬している。体系の幅、奥行き高さはそれぞれ 200.0、200.0、50.0[mm]である。初期の体系内は常温常圧のシリコンオイルで満たされている。体系上部中央には液体ジェットの射出口を模擬したノズル(内径 3.0[mm])を設置した。液体ジェットの物性値は実験と同様にグリセリン水溶液(34wt%)を用いた。ノズルからの射出速度は 1.7[m/s]とした。境界条件は上部のノズル部以外を自由流出条件、ノズル部には流入条件を与えた。側壁は壁面境界条件、底面は接触角の働く固体壁の条件

とした。計算格子数は $[x,y,z]=[400,400,100]=1600$ 万格子とし、 x,y,z 方向の並列数は全て 10 とし、計 1000 並列で解析を行った。

解析結果の一例として、側面と底面から見た液体ジェットの界面形状の時系列変化と実験結果を図 1 に示す。図中の白い部分が液体ジェットの界面形状を表している。シリコンオイル中に射出されたグリセリン水溶液の液体ジェットはわずかに微粒化を伴いながら侵入してくる挙動が確認できる。その後、ジェットが着底すると薄膜状の挙動を示す。更に時間が経過すると薄膜の先端部で巻き上げられた液体ジェットは微粒化の様子が確認できる。底部からの観測ではジェットの液膜が時間経過とともに広がる様子が確認できる。結果から、液膜が壁面でちぎれる様子が見て取れるが、これは格子解像度や表面張力、接触角の影響ではないかと考えられる。しかしながら、定性的な傾向は実験結果と一致しており、今後は、プールの水深などをパラメータとした解析を実施し、実験結果との詳細な比較を行う予定である。

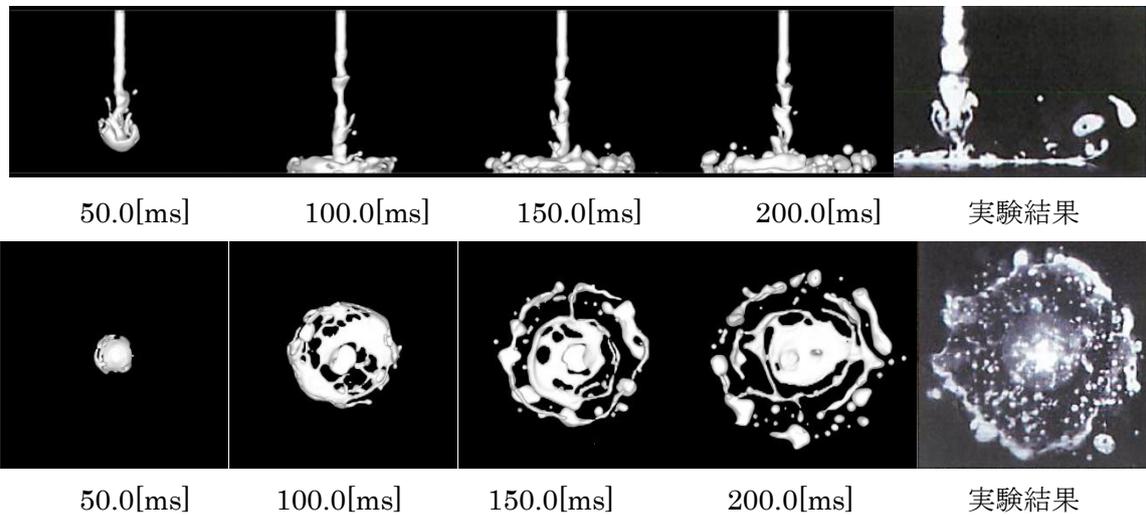


図 1 液体ジェットの界面形状時系列変化と実験結果との比較（上段：側面視点、下段：底面視点）

2. 限界熱流束予測手法開発に関する研究

限界熱流束予測手法開発の一環として、複数気泡合体挙動解析を実施した。本年度は気泡合体挙動に対する圧力の影響評価のため、圧力をパラメータとして体系内圧力 0.1、1.0MPa の 2 ケース実施した。体系の各方向の長さは $6 \times 6 \times 6(12)[\text{mm}]$ とし、高圧のケースでは高さ方向を 12mm とした。また、体系の底面に直径 1.7mm のオリフィスを 4 つ設け、そこから注入される気泡の合体挙動や接合過程を解析対象とした。各気泡間の距離は 2.0[mm] とし、気泡の流入速度は 1.0m/s で一定とした。解析格子は全てのケースで $dx=dy=dz=0.1\text{mm}$ とし、総格子数は低圧条件で $[x,y,z]=60 \times 60 \times 60=216,000$ 、高圧条件では $[x,y,z]=60 \times 60 \times 120=432,000$ とした。図 2 に解析で得られた各ケースでの気泡の成長、合体挙動の時系列変化を示す。低圧の条件ではオリフィスから注入された気泡の形状は半球形状を示しており、時間の経過とともに 4 つの気泡が合体し、5.0[ms] の時点で大気泡が形成される様子が確認できる。しかしながら、高圧の条件になると合体気泡が形成される時刻は 6.5[ms] と遅くなるのがわかる。これは気泡一つ一つの形状が影響していると考えられ、高圧条件下での気泡形状の方が低圧条件下より相対的に球形に近

く、横方向への気泡の合体が遅くなることが解析より明らかとなった。今後は、より高解像度の解析を実施し、気泡下部の液膜量の理論値との比較などを行う予定である。

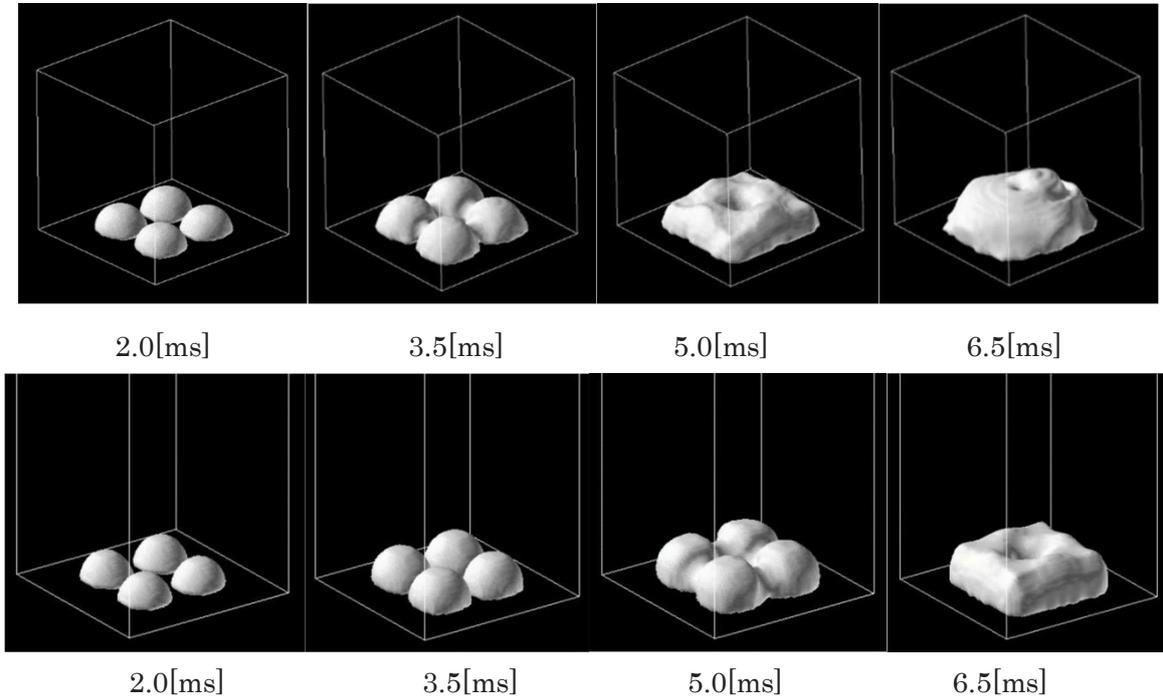


図2 複数気泡合体挙動の時系列変化（上段：低圧条件、下段：高圧条件）

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

表彰

- 1) 吉田啓之「詳細二相流解析コード TPFIT の開発」 日本混相流学会技術賞.

口頭発表

- 2) 鈴木貴行, 吉田啓之, 阿部豊, 金子暁子, Development of numerical simulation for jet breakup behavior in complicated structure of BWR lower plenum, 8; Influence of the structures on molten atomization behavior by the high resolution analysis (ICONE-25).
- 3) 吉田啓之, 木村郁仁, 鈴木貴行, 金子暁子, 阿部豊, 浅水プール中に落下する液体ジェットの侵入挙動 (3)ジェット拡がり挙動の詳細解析, 日本原子力学会 2018 年春の年会.
- 4) 小野綾子, 鈴木貴行, 吉田啓之, 詳細二相流解析コード TPFIT を用いた気泡の挙動および接合過程に関わる基礎的研究 (1)圧力の影響, 日本原子力学会 2018 年春の年会.

(4) 今後の利用予定:

これまで、様々な条件において、界面追跡法に基づく二相流解析手法開発のため、大型計算機を利用してきた。今後は、詳細な現象の把握を目的とした大規模解析の実施や、水-蒸気系の相変化を伴う条件での解析のために大型計算機を利用する予定である。

5.3.17 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 Numerical Simulation Method for Thermal Fluid Flow Phenomena on Severe Accident Condition in Reactor Pressure Vessel

山下 晋、小瀬 裕男、永武 拓、柴田 光彦、上澤 伸一郎
熱流動技術開発グループ

(1) 利用目的:

本課題では、福島第一原子力発電所事故対応として、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と相互作用を伴い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、詳細な燃料溶融挙動の基礎的解析機能の開発及び妥当性を確認することを目的とする。なお、本課題は大規模利用課題：「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」により実施されたものである。

(2) 利用内容・結果:

炉心内容融物移行挙動解析コード JUPITER の開発

福島第一原子力発電所事故では、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し、シビアアクシデント時の炉内容融物移行挙動に係る不確かさを低減するためには、溶融現象を詳細且つ現象論的に予測できる解析コードが必要である。そこで、炉心内容融物移行挙動解析コード JUPITER (Jaea Utility Program for Interdisciplinary Thermal-hydraulics Engineering and Research) の開発を行っている。炉心内燃料要素の溶融過程における液体金属は流体であることから、非圧縮粘性流体を仮定すると支配方程式は、連続の式、Navier-Stokes 方程式、エネルギー方程式及び界面移流方程式 (VOF 関数移流方程式) で記述される。平成 29 年度は、JUPITER を用い以下に示す結果を得た。

ペDESTALへのコリウム広がり・蓄積挙動解析

福島第一原子力発電所廃止措置において、格納容器内での燃料デブリ蓄積分布の詳細を把握することは重要である (福島支援：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)。既存 SA 解析コードでは形状や複雑な流動現象の表現に関して不確かさが存在するため、それらの低減に資するために、現象論的に詳細な解析が可能な JUPITER を用いて、ペDESTAL内部のコリウム広がり予備解析を実施し、コリウム広がり解析への JUPITER の適用性の検討を行った。解析に当たり、図 1 に示す解析体系を構築した。対象は、ペDESTAL内部のサンピットを含む格納容器株から圧力容器下部まで (図 1 左) であり、図 1 右に示すように、圧力容器下部直下を境界として直径 1 m の円形状領域から、溶融燃料、溶融構造物の順に流入するように境界条件として与える (図 1 右)。

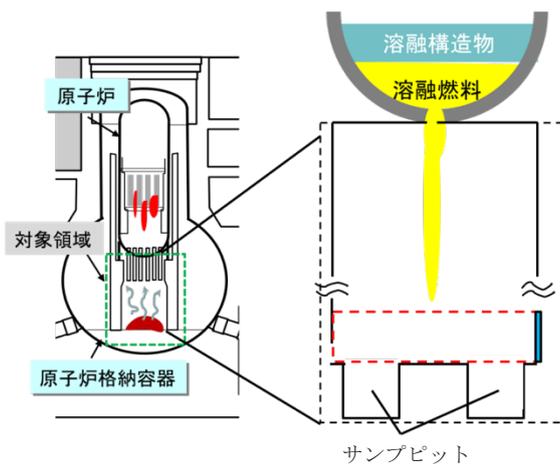


図1 ペDESTAL内部コリウム広がり解析体系

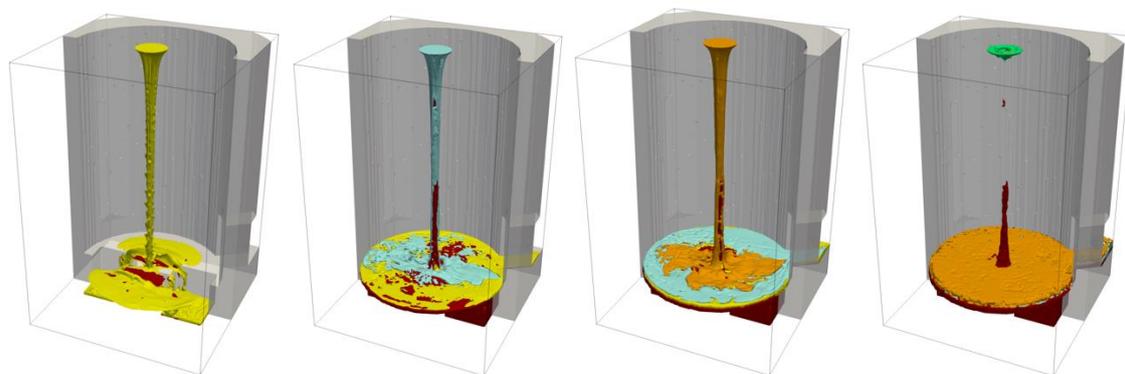


図2 コリウム広がり時間変化

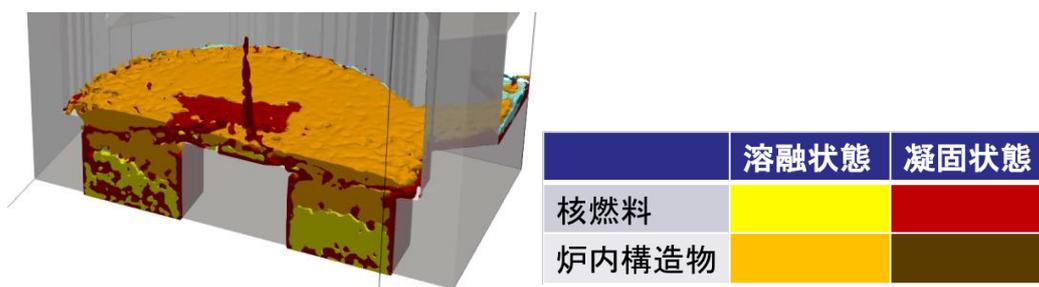


図3 燃料デブリ各成分の蓄積分布

図2はコリウム広がり及び蓄積挙動の時間変化である。図より、コリウムがペDESTAL底部へ衝突し凝固を伴いながら一部はサンプルピット内部へ、他の部分は横方向へ及びゲートから流出していく様子が確認できる。また、熔融燃料よりも熔融構造物の方が密度が小さいため、燃料成分より上に堆積して広がっていく様子が確認できた。図3は、燃料デブリの各成分の縦断面状態で

あり、黄色領域が燃料成分、茶褐色領域が凝固した燃料成分、橙色領域が構造物成分である。図より、コリウムはサンプルピット内部及びペDESTAL内部に非常に複雑に混合した状態で堆積していることが確認できる。

以上より、JUPITERによりペDESTAL内部への現象論的なコリウム広がり蓄積挙動の解析で実施できる見通しを得ることができた。また、このようなデータは、連続エネルギーモンテカルロコード MVP による再臨界計算や FP 放出挙動解析できる CORSOR モデルの入力データとして使用でき、廃止措置に対して重要な知見を与えることが期待できる。今後は、JUPITER を用いて得られるより現実的なデブリ成分分布データを用いて、廃止措置において重要となる再臨界挙動や FP 放出挙動などを解析する予定である。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) S. Yamashita, T. Ina, Y. Idomura and H. Yoshida, “A numerical simulation method for molten material behavior in nuclear reactors”, Nucl. Eng. Des., vol.322, pp.301-312, 2017.
- 2) S. Yamashita, K. Tokushima, M. Kurata and H. Yoshida, “Development of Numerical Simulation Method for Melt Relocation Behavior in Nuclear Reactors: Validation and Applicability for Actual Core Structures”, JSME Journal, vol.4, NO.3, pp.16-00567_1-16-00567_13, 2017.
- 3) S. Yamashita, S. Uesawa and H. Yoshida, “Development of a Numerical Simulation Method to Evaluate Molten Material Behavior in Nuclear Reactors”, Proc. ICAPP2017, 2017.
- 4) S. Yamashita, S. Uesawa and H. Yoshida, “Development of Numerical Simulation Method to Evaluate Heat Transfer Performance of Air Around Fuel Debris (1) Effect of the Debris Shape”, Proc. ICONE25, 2017.
- 5) S. Yamashita, H. Yoshida, “Development of numerical simulation method to evaluate molten material behaviors in nuclear reactors: Estimation of fuel debris distribution in the pedestal”, Proc. ICONE26, 2018.

(4) 今後の利用予定:

今年度は、熔融物を上境界面の1箇所から鉛直下方のみに流れるといった仮定の下で解析を実施した。今後は、今年度の格子数を基準とし、さらに格子点数を増加させた場合において、解像度が燃料デブリ堆積分布に及ぼす影響を調査する。また、デブリ堆積分布に対する流入箇所、流入方向、流入速度、流入間隔などの影響について、パラメータ解析を行う予定である。

5.3.18 3次元多相多成分熱流動解析 JUPITERによる空気の自然対流熱伝達解析の妥当性検証

Validation of Air Free-convective Heat Transfer Analysis with JUPITER

上澤 伸一郎

熱流動技術開発グループ

(1) 利用目的:

福島第一原子力発電所廃止措置における燃料デブリ取り出し工法の1つとして気中工法が検討されている。気中工法では、燃料デブリを水に浸すことなく気中にて取り出しを行うため、気中での燃料デブリの除熱性能の評価が求められる。しかし、燃料デブリの形状や分布がわかっておらず、また震災の影響で炉内構造は健全なときよりも複雑になっている可能性が考えられ、除熱性能の推定は容易ではない。

本研究グループでは、気中での燃料デブリの除熱性能評価解析として、解析の初期及び境界条件となる溶融デブリの形状や分布を含めた評価を行うことのできる、3次元多相多成分熱流動解析コード JUPITER を用いた解析手法の開発を進めている。本解析手法開発のためには、JUPITER の自然対流などに対する妥当性の検証が必要である。JUPITER の自然対流冷却評価解析の妥当性を検証するため、本件で実施した密閉試験容器内の上向き水平加熱面に対する自然対流の解析結果と試験結果との比較を行い、JUPITER の自然対流冷却評価解析の妥当性を検証した。本件における解析では、水平加熱面近傍の熱流動場が非常に複雑であり、高解像度な計算を要することから、大型計算機による支援が必要不可欠であった。

(2) 利用内容・結果:

計算体系を図1に示す。1,000 mm×1,000 mm×1,600 mm の領域に試験容器を再現した 580 mm×580 mm×800 mm の矩形容器を設置した。容器下部に直径 500 mm の加熱領域を設定した。矩形容器は埋め込み境界法により表現されているため、その壁面は滑り無し条件となる。計算境界条件も滑り無し条件とした。境界の温度については試験で計測した雰囲気温度を用いた。加熱領域は試験で得られた定常時の加熱面温度を用いた。計算は加熱面温度が 420 K、476 K、573K の3ケースで実施した。

図2は計算で得られた試験模擬容器中心断面における温度分布と流速分布の時系列画像である。図より、試験容器の下部が加熱されると、各場所で湯気のように高温領域が立ち上るのが確認できる(図中A)。これは、既存研究で指摘されているブルームと呼ばれる上昇流と考えられ、本解析でもブルームを再現できているといえる。また、容器外部でも上昇流が再現できた(図中B)。さらに準定常状態に達した 600 s での結果においても上昇流が確認された(図中C)。このように、比較的広い体系に対して、ブルームのような局所での複雑な熱流動場が再現できたことは大型計算機による詳細な解析が実施できたことによるものである。

図3は準定常状態における試験模擬容器中心の垂直方向温度分布である。実線で示された解析

結果とポイントで示された試験結果がよく一致していることがわかる。このように本解析が定量的にも妥当であることが確認された。

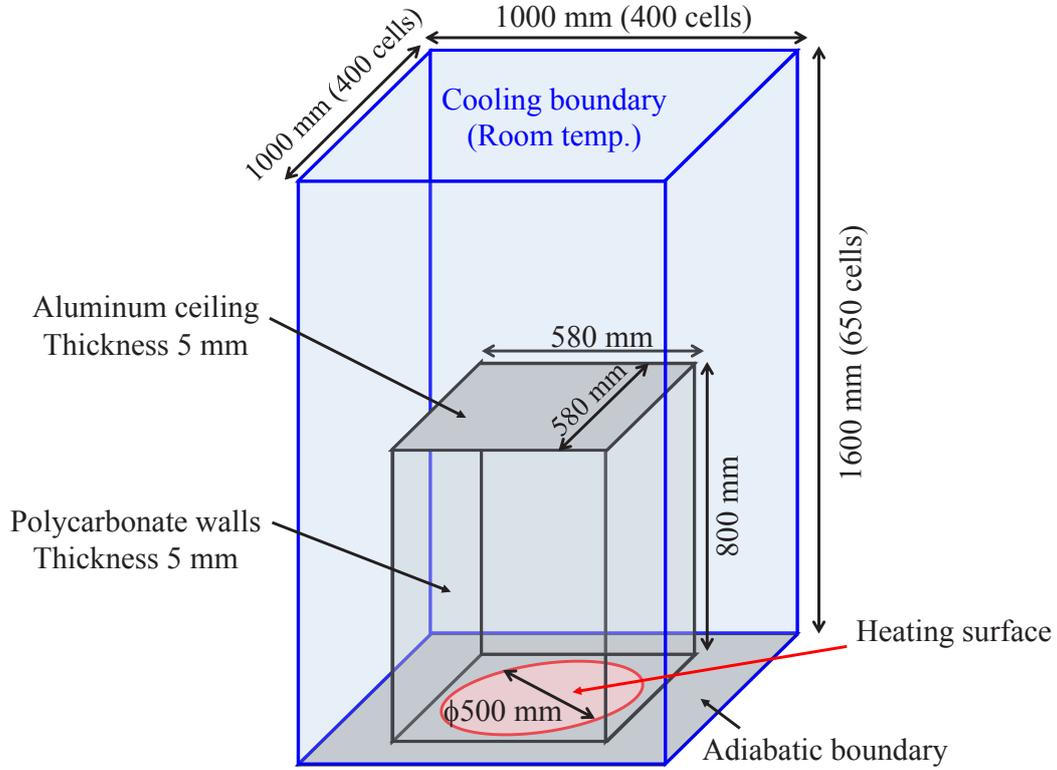


図 1 計算体系

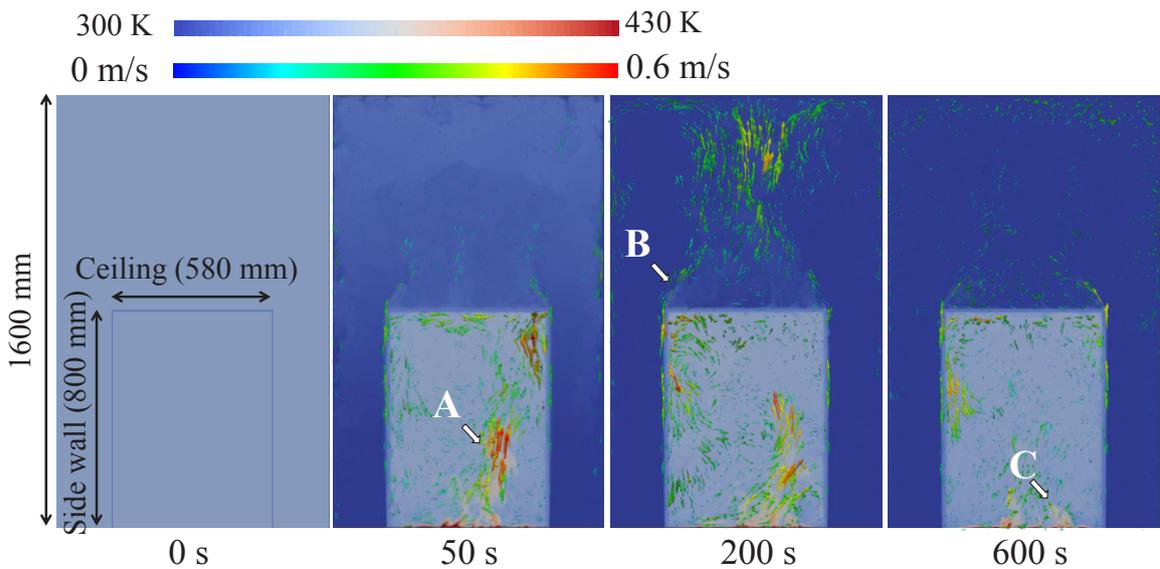


図 2 試験模擬容器中心断面における温度分布と流速分布の時系列画像

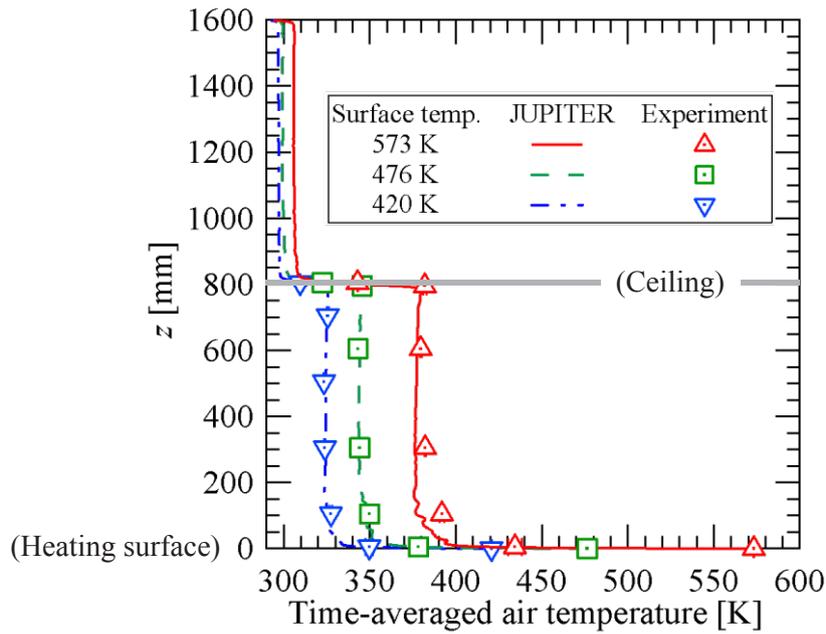


図 3 準定常状態における試験模擬容器中心の垂直方向温度分布

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) S. Yamashita, S. Uesawa, H. Yoshida, “Development of numerical simulation method to evaluate heat transfer performance of air around fuel debris (1) Effect of the debris shape”, Proc. ICONE25, ICONE25-67516, 2017.
- 2) S. Uesawa, S. Yamashita, M. Shibata, H. Yoshida, “Development of numerical simulation method to evaluate heat transfer performance of air around fuel debris (2) Validation of JUPITER for free convection heat transfer”, Proc. ICONE25, ICONE25-67516, 2017.
- 3) S. Uesawa, S. Yamashita, M. Shibata, H. Yoshida, “Validation of free-convective heat transfer analysis with JUPITER to evaluate air-cooling performance of fuel debris in dry method”, Mechanical Engineering Journal, vol.5 pp. 18-00115_1 - 18-00115_13, 2018.

(4) 今後の利用予定:

図 3 からわかるように、本解析結果が定量的にも妥当な結果であることが確認できたものの、高温（加熱面温度 573 K）の結果では高位置において解析結果と試験結果に乖離が見られた。これは、上記の解析では輻射伝熱モデルを考慮していないことに起因する。しかし、過酷事故時の炉内温度は数千度に達するため、輻射伝熱の影響が高く、輻射伝熱モデルを実装した大規模解析の実施が求められる。上記のような比較的規模の大きい解析に対して輻射伝熱モデルを実装することにより、大幅に計算負荷が増加すると予想される。以上より、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。

5.3.19 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:

近年の計算機技術の発展により、多様な欠陥構造を原子スケールから直接解析することが可能になっている。照射材、強加工材、微細粒材において欠陥組織と機械特性の関係を理解することは、構造材料全体に共通する課題であり、本課題は大規模原子シミュレーションを用いて、照射材や微細粒材といった多様な欠陥が複雑に関係する材料に対して、変形理論を構築することを目的としている。また、合金元素の変形・破壊への影響を非経験的に理解、予測するため、第一原理計算に基づく枠組みを構築し、元素戦略的に合金元素の影響を評価する。以下に、大規模原子シミュレーションによって得られた結果について示す。

(2) 利用内容・結果:

材料内部の組織は加工などによって大きく変化するため、機械特性を評価するためには欠陥構造の動的挙動の理解が不可欠になる。超微細材料では変形時に結晶粒の内部の転位が運動するとともに、粒界からの新たな転位生成が生じることに着目した。材料内部の構造を再現するために、幾何学的手法を用いて多結晶モデルを作成すると同時に、内部に転位源を有する現実の材料を模擬した原子モデルを考案した。当該年度では、超微細粒材の一部の材料でのみ発現する引張-圧縮異方性（引張と圧縮で降伏応力が異なる現象：T/C異方性）に関する検討を行った。大規模分子動力学シミュレーションによって、実際の超微細粒を作成して解析を行った結果、

$(\sigma_y^c - \sigma_y^t) / (\sigma_y^c + \sigma_y^t)$ として異方性の程度を定義すると、図1(a)に示すようにAlのみが大きなT/C異方性を生じることがわかった。この要因として、離散変分パイエルス

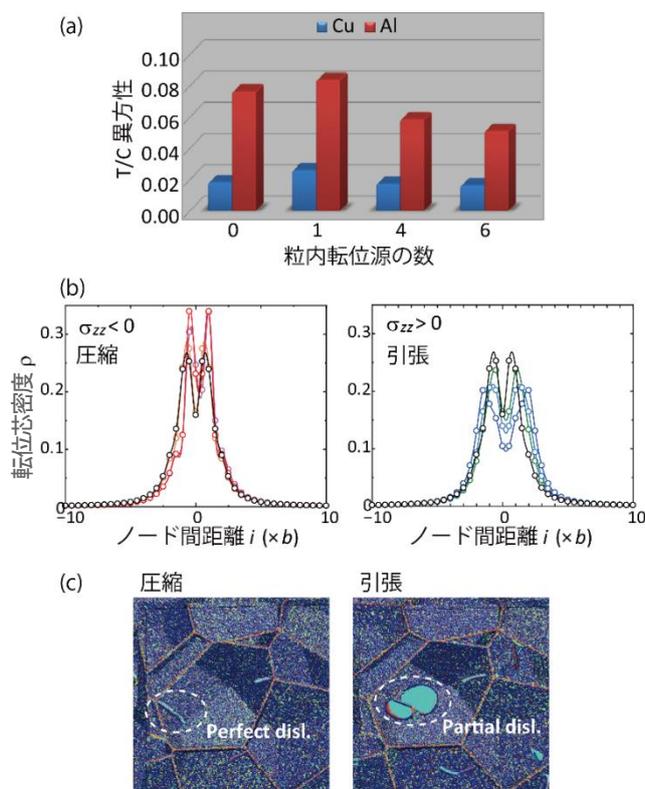


図1 (a) 評価式に基づく異方性の度合い, (b) 転位芯密度の外部負荷依存性, (c) 大規模分子動力学シミュレーションによる転位生成

モデル (SVPN) を応力下の積層欠陥エネルギーに応用し、外部負荷依存性について検討したところ、図 1(b)に示すように Al では圧縮と引張で転位芯構造が大きく異なり、引張下で転位の拡張幅が大きくなることが確認された。これは、Al における積層欠陥エネルギーは外部負荷に敏感であり、引張において積層欠陥が大きく低下することに起因する。これらの知見から、Al では引張で積層欠陥エネルギーを下げることで転位が部分転位に分裂し (図 1(c))、これらの部分転位は粒界からの転位生成を容易にすることで引張でのみ低い応力で塑性変形を生じる要因になることを明らかにした (論文(3))。超微細粒材料では、粒内の転位源の活動に必要な力が通常の材料に比べて大きくなるため強度が増大する。また、粒内の転位源が通常の材料よりも少なく枯渇するため、粒界からの転位生成が重要となりそれに必要な応力のレベルは大きい。このような外部負荷が大きくなる状況が微細粒化によって達成されることで、粗大粒材料では見られない T/C 異方性が発現することがわかった。このように、大規模原子シミュレーションは内部の欠陥挙動とマクロな力学特性の関係を理解する上で重要な役割を果たしている。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

<投稿論文 (査読あり) >出版済 8 報

- 1) T. Tsuru, M. Yamaguchi, K. Ebihara, M. Itakura, Y. Shiihara, K. Matsuda, H. Toda, “First-principles calculation of hydrogen segregation in Al-Mg-Zn alloys”, *Comput. Mater. Sci.*, vol.148 (2018) pp.301-306.
- 2) T. Suzudo, T. Tsuru and A. Hasegawa, “First-principles study of solvent-solute mixed dumbbells in body-centered-cubic tungsten crystals”, *J. Nucl. Mater.*, vol.505 (2018) pp.15-21.
- 3) T. Tsuru, “Origin of tension-compression asymmetry in ultrafine-grained fcc metals”, *Phys. Rev. Mater.*, vol.1, No.3 (2017) p.033604.
- 4) I.S. Winter, T. Tsuru and D. C. Chrzan, “Lattice softening in body-centered-cubic lithium-magnesium alloys”, *Phys. Rev. Mater.*, vol.1, No.3 (2017), p.033606.
- 5) I. S. Winter, M. Poschmann, T. Tsuru, M. Asta and D. C. Chrzan, “Dislocations near elastic instability in high pressure body-centered cubic magnesium”, *Phys. Rev. B*, vol.95, No.6 (2017) p.064107.
- 6) H. Somekawa and T. Tsuru, “Effect of alloying elements on grain boundary sliding in magnesium binary alloys: Experimental and numerical studies”, *Mater. Sci. Eng. A*, vol.708 (2017) pp.267-273.
- 7) H. Somekawa, T. Tsuru, A. Singh, S. Miura and C. A. Schuh, “Effect of crystal orientation on incipient plasticity during nanoindentation of magnesium”, *Acta Mater.*, vol.139 (2017) pp.21-29.
- 8) M. Wakeda, T. Tsuru, M. Kohyama, T. Ozaki, H. Sawada, M. Itakura and S. Ogata, “Chemical misfit origin of solute strengthening in iron alloys”, *Acta Mater.*, vol.131 (2017) pp.445-456

<受賞> 2 件

- 9) 平成 29 年度科学技術分野の文部大臣表彰 若手科学者賞, 平成 29 年 4 月 19 日.
- 10) 第 27 回日本 MRS 年次大会奨励賞, “First-principles and experimental study on interfacial fracture in Mg alloys”, 平成 29 年 12 月 7 日.

<国際・国内会議> 4 件

- 11) T. Tsuru and T. Suzudo, “First-principles calculations of interaction between 5d solutes and dislocation in tungsten”, The 18th International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM-18), Nov. 5-10, 2017, Aomori, Japan.
- 12) T. Tsuru, “Anomalous strengthening mechanism in HCP Ti”, 9th Korea-Japan Berkeley Symposium, Jun. 22-22, 2017, Berkeley, CA, USA.
- 13) 都留智仁, 山口正剛, 板倉充洋, D. C. Chrzan, “六方晶 Ti の転位運動と合金元素との相互作用の第一原理計算”, 金属学会 2018 年春期 (第 162 回) 講演大会, 2018 年 3 月 19-21 日, 千葉工業大学.
- 14) 都留智仁, 染川英俊, “First-principles and experimental study on interfacial fracture in Mg alloys”, 第 27 回日本 MRS 年次大会, 2017 年 12 月 5-7 日, 横浜市開港記念会館 他.

(4) 今後の利用予定:

電子論に基づく転位解析による合金設計に関して、BCC 金属を対象として固溶強化・軟化モデルを組み合わせてマクロな機械特性を予測する枠組みを作成する。また、希薄合金に加えて多元系合金の元素影響を包括的に理解するための方法を検討している。これらの特性の取得に転位芯を含む大規模なモデルと多様な合金の組み合わせを考慮した第一原理計算を実行する。また、加速器駆動システム (ADS) 研究として、フェライト鋼を対象とした脆化機構について検討を行う。

5.3.20 鉄鋼表面における吸着水素原子挙動の解析

Analysis of Hydrogen Adsorption at Surface of Steel

五十嵐 誉廣

防食材料技術開発グループ

(1) 利用目的:

腐食反応に伴う材料への水素侵入は、原子力材料のみならず高強度鋼を用いている一般材料にとっても水素脆化を引き起こす原因となるため、材料の健全性を確保するためには水素脆化対策が不可欠である。近年、水素侵入挙動を理解するべく、鋼中の水素分布測定を行うための技術開発や研究が盛んに行われている。本研究では、量子論的視点から鉄鋼表面における水素原子の状態が、表面電位に与える影響とその原理を理解することを目的として、第一原理計算を用いた鉄表面の電子状態解析を行った。本研究の発展によって、実験値である表面電位と計算による表面の電子状態との整合性が得られ、水素吸着および透過現象の機構解明につながることを期待できる。本件では、電子状態解析に第一原理計算を行うため多くの計算資源が必要であり、大型計算機による支援が必要であった。

(2) 利用内容・結果:

本研究では電子状態解析に Quantum ESPRESSO を用い i)対象となるモデルを適切に計算するための各種パラメータ取得 ii)原子数 10~20 個程度からなる鉄表面と水素原子のモデルの表面電位解析を行った。鉄表面は清浄面と酸化被膜を模擬した酸素原子吸着面の 2 種類を考慮した。図 1 に例として鉄(100)酸素原子吸着面+水素原子吸着モデルの概要を示す。i)さまざまなパラメータ探索の結果、本件に適切な条件（擬ポテンシャル、k 点数、カットオフ距離等）を得た。ii)解析の結果、酸素原子吸着面に対し水素原子が吸着した時に、表面電位が大きく低下することがわかった。図 2 に鉄(100)酸素原子吸着面+水素原子吸着モデルに対する表面電位解析結果を示す。これは実験測定で得られた結果と一致している。表面近傍の電子状態から、電位低下の原因は酸素原子吸着面の表面電気双極子が水素原子吸着によって大きく変化するためであることがわかった。

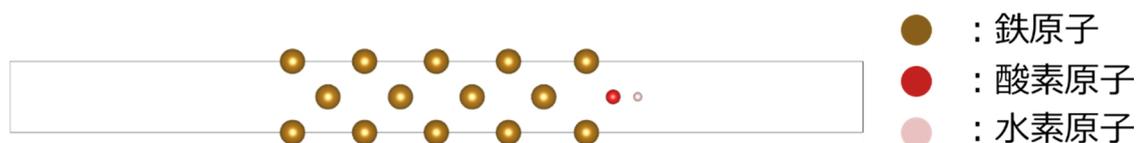


図 1 解析モデル例（鉄(100)酸素原子吸着面+水素原子吸着）

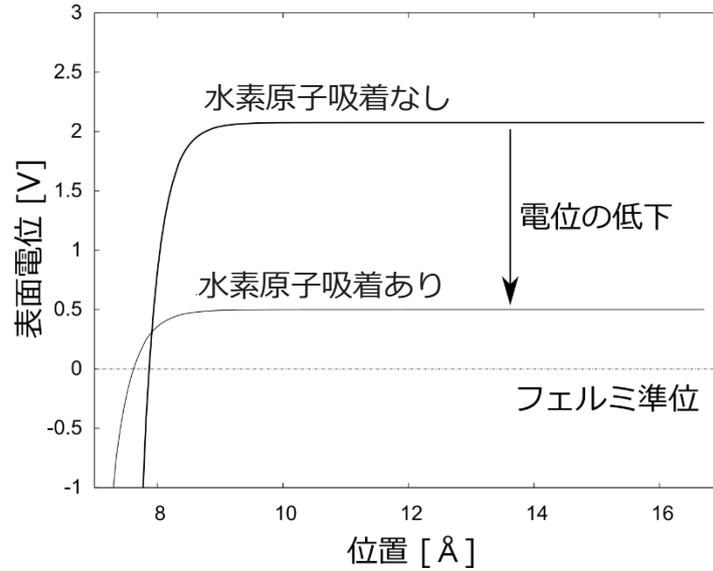


図2 表面電位の計算解析結果（鉄(100)酸素原子吸着面＋水素原子吸着）

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 五十嵐誉廣, 小松篤史, 山口正剛, 海老原健一, 上野文義, “鉄鋼材料への水素侵入挙動に関する計算機シミュレーション解析”, 日本鉄鋼協会第175回春季講演大会, 千葉, 2018.

(4) 今後の利用予定:

これまでの解析は、真空中材料を仮定したものであった。今後は、腐食反応に伴う材料への水素侵入挙動の機構解明を念頭に、固液界面を想定した解析を行う予定である。固液界面を取り扱う解析は溶液中分子の分布を取り扱うため、これまで以上に重い解析となることが予想される。それゆえに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。

5.4 先端基礎研究センター Advanced Science Research Center

5.4.1 低次元強相関係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
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、低次元強相関係の磁性に関するトピックスを中心に、多角的な視野で、周辺分野との横断的・融合的研究にも意欲的に取り組み、スピンの関与する様々な物性の発現機構を明らかにすることを目的としている。多様なスピン物性の微視的メカニズムを解き明かすことで、高い超伝導転移温度の実現、高機能なマルチフェロイック材料の開発、高効率なスピン流の生成・制御、レーザー光照射による電子物性の超高速制御、新しいタイプの準粒子が媒介する輸送現象など、新機能・多機能・高効率材料開発に繋がる知見が得られると期待される。

低次元強相関係では、強い量子揺らぎのため平均場理論などの伝統的な手法を単純に適用できず、数値的手法による取り扱いが有効な手段として広く適用されている。本研究で使用するコードの根幹を成す行列積状態変分法は、密度行列繰り込み群法の拡張として、低次元強相関係の基底状態や低エネルギー励起状態、励起スペクトル、静的および動的相関関数、熱力学量など様々な物理量を計算する上で非常に強力な手法である。様々な実験観測量と直接比較可能な理論値を系統的に得るための数値計算スキームを構築・高度化して、J-PARC などでの実験研究との連携を強力に推進する。

(2) 利用内容・結果:

- (a) フラストレート強磁性鎖におけるスピンネマティック状態の特異な磁気励起を明らかにするため、四極子励起スペクトルの解析を行った。交換相互作用や磁場に依らず波数 π の位置にギャップレスモードが生じ、特に飽和磁場近傍では底広のフラット構造を示し、磁気フラストレーションの効果で多くの状態が擬縮退する特徴を見出した。(論文 7))
- (b) スピンネマティック状態において、磁化 2 を運ぶマグノン対がスピン伝導・熱伝導にどのように寄与するかを明らかにするため、スピン伝導度と熱伝導度のゼロ周波数成分であるドルーデ重みの温度・磁場依存性、および絶対零度基底状態でのスピン流と熱流の静的・動的相関関数を解析して、磁気特性と輸送特性の関係を論じた。(論文投稿準備中)
- (c) 擬一次元 XXZ 反強磁性体 $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ の横磁場中での奇妙な面内異方性の起源を解明するため、結晶構造に起因して現れる有効交替磁場を取り入れた有効多体模型の磁気構造と磁気励起スペクトルを解析して、中性子実験との詳細な比較を行った。理論・実験両面からの微視的観点での研究で、有効交替磁場の存在を実証できた。磁場方向に応じた磁性の制御について知見が得られており、新規磁性材料への応用可能性という観点でも意義が大きい。(論文 11))

- (d) 高温超伝導体と類似の結晶構造を持つ BiCu_2PO_6 の磁性に関連して、磁氣的フラストレーションが磁場下の低温磁性に与える効果を解析した結果、スピン伝導度が導体的状態から絶縁体的状態へ転移する磁化プラトー転移が複数出現することを明らかにした。この輸送特性の差異に注目すれば、スピンゼーバック効果を用いた熱スピン流から効率的にエネルギーを取り出すための素子などの開発に繋がると期待される。(論文 1))
- (e) トポロジカル超伝導を発現する典型例としてキタエフ鎖模型を考え、ボンダ交替や準周期性など周期性の変調効果を調べた。ボンダ交替の効果は、マヨラナ粒子の移動により説明でき、結果として別のトポロジカル秩序状態が形成される。一方、準周期的な変調により、自己相似構造を持つ相図のもとで複雑に相転移を繰り返し、この相図が量子ホール系における Hofstadter の蝶のようなフラクタル次元を持つことを発見した。(論文 6)、9))

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学術論文

- 1) T. Sugimoto, M. Mori, T. Tohyama, and S. Maekawa, "Magnetic phase diagram of frustrated spin ladder", *Phys. Rev. B*, vol.97, p.144424 (2018).
- 2) S. Shamoto, T. U. Ito, H. Onishi, H. Yamauchi, Y. Inamura, M. Matsuura, M. Akatsu, K. Kodama, A. Nakao, T. Moyoshi, K. Munakata, T. Ohhara, M. Nakamura, S. Ohira-Kawamura, Y. Nemoto, and K. Shibata, "Neutron scattering study of yttrium iron garnet", *Phys. Rev. B*, vol.97, p.054429 (2018).
- 3) M. Fujihala, T. Sugimoto, T. Tohyama, S. Mitsuda, R. A. Mole, D. H. Yu, S. Yano, Y. Inagaki, H. Morodomi, T. Kawae, H. Sagayama, R. Kumai, Y. Murakami, K. Tomiyasu, A. Matsuo, and K. Kindo, "Cluster-based Haldane state in edge-shared tetrahedral spin-cluster chain: Fedotovite $\text{K}_2\text{Cu}_3\text{O}(\text{SO}_4)_3$ ", *Phys. Rev. Lett.*, vol.120, p.077201 (2018).
- 4) K. Morita, T. Sugimoto, S. Sota, and T. Tohyama, "Magnetization plateaus in the spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg model on a kagome-strip chain", *Phys. Rev. B*, vol.97, p.014412 (2018).
- 5) B. Gu, S. Takahashi, and S. Maekawa, "Enhanced magneto-optical Kerr effect at Fe/insulator interfaces", *Phys. Rev. B*, vol.96, p.214423 (2017).
- 6) T. Sugimoto, M. Ohtsu, and T. Tohyama, "Reentrant topological phase transition in a bridging model between Kitaev and Haldane chains", *Phys. Rev. B*, vol.96, p.245118 (2017).
- 7) H. Onishi, "Dynamical quadrupole structure factor of frustrated ferromagnetic chain", *Physica B*, vol.536, pp.346-349 (2018).
- 8) M. Mori, "Broad linewidth of antiferromagnetic spin wave due to electron correlation", *J. Phys. Soc. Jpn.*, vol.86, p.124705 (2017).
- 9) R. Ghadimi, T. Sugimoto, and T. Tohyama, "Majorana zero-energy mode and fractal structure in Fibonacci-Kitaev chain", *J. Phys. Soc. Jpn.*, vol.86, p.114707 (2017).
- 10) Y. Tzeng, H. Onishi, T. Okubo, and Y. Kao, "Quantum phase transitions driven by rhombic-type single-ion anisotropy in the $S=1$ Haldane chain", *Phys. Rev. B*, vol.96, p.060404(R) (2017).
- 11) M. Matsuda, H. Onishi, A. Okutani, J. Ma, H. Agrawal, T. Hong, D. M. Pajerowski, J. R. D. Copley, K. Okunishi, M. Mori, S. Kimura, and M. Hagiwara, "Magnetic structure and

- dispersion relation of the $S=1/2$ quasi-one-dimensional Ising-like antiferromagnet $\text{BaCo}_2\text{V}_2\text{O}_8$ in a transverse magnetic field", *Phys. Rev. B*, vol.96, p.024439 (2017).
- 12) K. Morita, M. Fujihala, H. Koorikawa, T. Sugimoto, S. Sota, S. Mitsuda, and T. Tohyama, "Static and dynamic magnetic properties of the spin-1/2 inequilateral diamond-chain compounds $\text{A}_3\text{Cu}_3\text{AlO}_2(\text{SO}_4)_4$ ($\text{A}=\text{K}, \text{Rb}, \text{Cs}$)", *Phys. Rev. B*, vol.95, p.184412 (2017).
 - 13) A. Okada, S. He, B. Gu, S. Kanai, A. Soumyanarayanan, S. T. Lim, M. Tran, M. Mori, S. Maekawa, F. Matsukura, H. Ohno, and C. Panagopoulos, "Magnetization dynamics and its scattering mechanism in thin CoFeB films with interfacial anisotropy", *PNAS*, vol.144, No.15, pp.3815-3820 (2017).

国際会議

- 14) B. Gu, "Large magneto-optical Kerr effect at Fe/insulator interfaces", CEMS-Tsinghua-Asia Pacific Workshop (APW) Joint Workshop "Highlights of condensed matter physics" (2017年12月).
- 15) T. Sugimoto, "Majorana zero mode and fractal structure in Fibonacci-Kitaev chain", *Novel Quantum States in Condensed Matter* (2017年11月).
- 16) B. Gu, S. Takahashi, and S. Maekawa, "Theoretical study of enhanced magneto-optical Kerr effect at Fe/insulator interfaces", 62nd Annual Conference on Magnetism and Magnetic Materials, Pittsburgh, U.S.A. (2017年11月).
- 17) M. Mori, "Lifetime of magnons in an antiferromagnet/correlated-metal bilayer", Workshop on Antiferromagnetic spintronics, Grenoble, France (2017年10月).
- 18) M. Mori, "Thermal Hall effect and multipole", International Workshop on Multipole Physics and Related Phenomena, Hachimantai, Iwate, Japan (2017年9月).
- 19) T. Sugimoto, M. Mori, T. Tohyama, and S. Maekawa, "Symmetry breaking of quasi-spin inversion in magnetization-plateau phase diagram of frustrated spin ladder", The International Conference on Low-Temperature Physics, Goteborg, Sweden (2017年8月).
- 20) M. Mori, "Lifetime of antiferromagnetic spinwave due to electrons correlation", The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, Prague, Czech Republic (2017年7月).
- 21) T. Sugimoto, M. Ohtsu, S. A. Jafari, and T. Tohyama, "Topological transition induced by anisotropy, alternation and frustration in XYZ spin chain", The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, Prague, Czech Republic (2017年7月).
- 22) H. Onishi, "Dynamical quadrupole structure factor of frustrated ferromagnetic chain", The International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, Prague, Czech Republic (2017年7月).

(4) 今後の利用予定:

フラストレート強磁性鎖のスピンネマティック相に関する研究の発展として、さらに高次の八極子相まで含めて磁気特性と輸送特性の関係を理解するため、スピン・四極子・八極子励起スペクトルを系統的に解析する。また、マグノン対の波束ダイナミクス、スピン軌道結合系、新規量子スピン系物質に関する解析を行う予定である。

5.5 物質科学研究センター Materials Sciences Research Center

5.5.1 磁性体における微視的磁化過程シミュレーションプログラム Simulation Program for Microscopic Magnetization Processes in Magnetic Materials

横田 光史
多重自由度相関研究グループ

(1) 利用目的:

磁性体における微視的磁化過程を調べることは、磁性体が記憶媒体として利用できるという実用性および磁区パターン形成という観点から盛んに研究されてきた。シミュレーションを用いた研究は、内部の磁区構造などを調べることに對して有用性が高い。

ここでは、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に対するランダウ＝リフシッツ方程式を用いたシミュレーションを行うためのプログラムを作成した。長距離相互作用であるスピン間双極子相互作用および交換相互作用にランダムネスが入った場合についても調べることができるという特徴がある。このプログラムを用いて、磁区パターンに對する磁気異方性や交換相互作用にランダムネスが入った時の影響などを調べている。また、磁気バブルについても形状などを調べている。

(2) 利用内容・結果:

ハイゼンベルグ模型について、ランダウ＝リフシッツ方程式を数値的に解くプログラムを作成した。さらに、そのプログラムを高速化することによって、より大きなシステムのシミュレーションが可能になった。薄膜に對する 2 次元系で、双極子相互作用と磁気異方性を含む場合、それらの相対的な大きさによって、磁区パターンが変化する。基底状態では、薄膜の面内方向に磁化をもつ強磁性状態のほか、面直方向の磁化がプラスとマイナスを繰り返すストライプパターンを持つ状態が出現する。どのような基底状態を取るかは、交換相互作用、双極子相互作用、および磁気異方性の相対的な大きさに依存する。また、ストライプパターンが出現する場合のストライプの間隔は、交換相互作用と双極子相互作用の大きさの比によって決まる。図 1 にストライプ的パターンが出る場合の面直方向の磁化成分と面内方向の磁化成分の例を示す。色凡例は面直方向および面内方向の磁化の成分の値を表す。

また、外部磁場中では、双極子相互作用と磁気異方性の値によっては、磁気スキルミオンというトポロジカルな磁気バブルの出現が見られることがある。スキルミオンの大きさの磁場依存性や磁壁の厚さの磁気異方性依存性などを調べている。図 2 にランダウ＝リフシッツ方程式を用いたシミュレーションによって得られた磁気スキルミオンの例を示す。

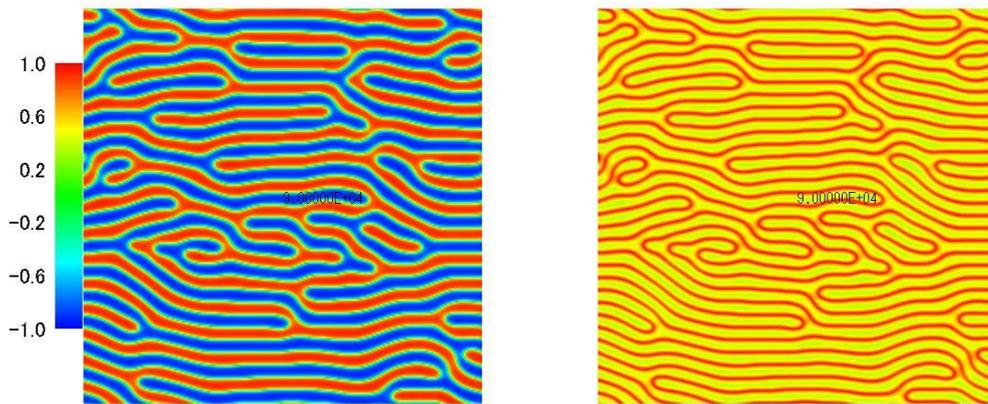


図 1 ストライプ的磁区パターンの例 (左図は面直方向の磁化成分(S_z)、右図は面内方向の磁化成分(S_x))

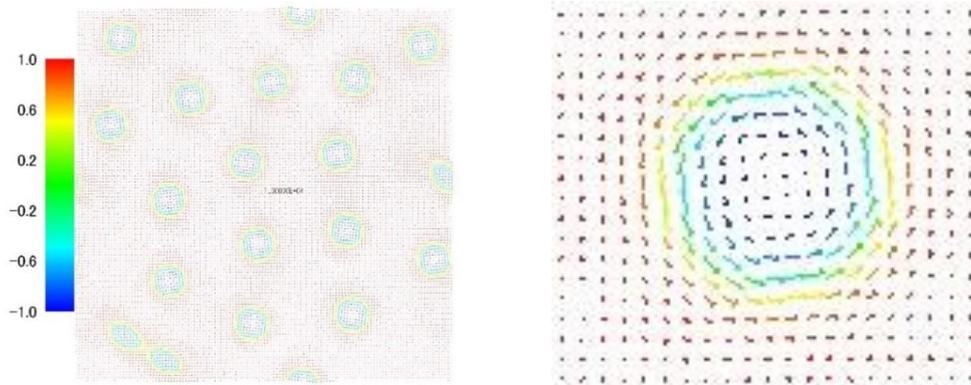


図 2 磁気スキルミオンを含む磁気バブルパターンを各点の磁化の向きを矢印で示したもの。色凡例は面直の磁化の成分を表す。(左は全体、右はその中の 1 つの磁気スキルミオンを拡大したもの)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 横田光史, “双極子相互作用を含む 2 次元強磁性体における磁気バブル”, 日本物理学会 2017 年秋季大会.
- 2) 横田光史, “双極子相互作用を含む 2 次元強磁性体の基底状態”, 日本物理学会第 73 回年次大会.
- 3) T. Yokota, “On the Ordered States in a Two-Dimensional Heisenberg Model with Dipole-Dipole Interactions”, J Phys Soc Jpn, vol87, pp.094701_1-094701_5 (2018).

(4) 今後の利用予定:

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ランダウ＝リフシッツ方程式を用いて数値的に解くシミュレーションでは、交換相互作用などにランダムネスを含む場合や 3 次元系では計算時間が多くかかり、また、多数の計算例が必要となる。これらの計算に対して、大型計算機システムの利用を継続していきたい。

5.6 核燃料サイクル工学研究所 Nuclear Fuel Cycle Engineering Laboratories

5.6.1 輸送容器の許認可申請に係る安全解析コードの整備

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

菊池 圭一、浅川 健一*

技術部 核物質管理課、*エイ・ティ・エス株式会社

(1) 利用目的:

すでに大型計算機システム ICE X に整備済みの遮蔽解析コード DOT3.5 の出力ファイルより、遮蔽解析の結果として必要となる線量当量率を求めることが出来るよう DOT3.5 出力データ変換プログラムの整備を行った。

(2) 利用内容・結果:

本整備作業は、線量当量率を求めるためには新たに変換プログラムを作成する必要があることから、情報システム管理室に依頼して実施した。

DOT3.5 コードの出力ファイル中のフラックスデータは、中性子及びガンマ線からなり、中性子とガンマ線を含めると 40 グループから構成され、解析モデルのメッシュ毎にフラックスデータが存在する。

線量当量率を計算するには、中性子及びガンマ線のそれぞれの 1 グループのフラックスに対し、ひとつの線量当量率変換係数で乗算を行い、これらの結果よりメッシュ毎の総和を取る。

線量当量率変換係数は、2 種類の核データライブラリに基づく変換係数と、ユーザ指定による変換係数の合計 3 種類とした。変換係数は 1 グループ当たり 1 つの変換係数を使用するので、中性子及びガンマ線用に 40 個使用することになる。

変換プログラムには、DOT3.5 コードの出力及び線量等量率変換入力データが正しいかをチェックする機能を持たせた。もし、チェック機能に当てはまる事象が発生した場合、エラーコード及びエラーメッセージを出力して変換処理が停止するようにした。また、DOT3.5 コードの出力データによっては、フラックスデータの一部のグループが出力されない場合にも変換処理が正常に機能するようにした。

以上により、DOT3.5 出力データ変換プログラムの整備が完了した。

今回作成した変換プログラムを使うことにより、DOT3.5 コードを実行する計算機上で線量当量率を即座に求めることが可能となり、遮蔽解析の作業効率が向上することとなった。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

(4) 今後の利用予定:

今後実施する輸送容器の設計変更等に係る安全解析で使用する。

5.7 大洗研究開発センター Oarai Research and Development Center

5.7.1 高温ガス炉の新しい利用に関する予備検討

Feasibility Study of New Applications at the High-temperature Gas-cooled Reactor

Hai Quan Ho
HTTR 技術課

(1) 利用目的:

Development of the multi-purpose use will be the important key for future commercialization of the HTGRs. Besides the electricity generation and hydrogen production, HTGRs also have advantages for irradiation applications such as great stable operation over a long period and large space available for neutron irradiation applications. This study investigated the feasibility of irradiation applications using the high temperature engineering test reactor (HTTR), including neutron transmutation doping (NTD) and radioisotopes productions.

(2) 利用内容・結果:

(2.1) Neutron transmutation doping of spherical silicon solar cell

The p-type spherical silicon solar cell, as shown in **Fig. 1**, is a candidate for future solar energy with low fabrication cost, however, its conversion efficiency is only about 10%. The conversion efficiency of a silicon solar cell can be increased by using n-type silicon semiconductor as a substrate. This study proposed a new method of NTD silicon (NTD-Si) for producing the n-type spherical silicon solar cell at the HTTR [1].

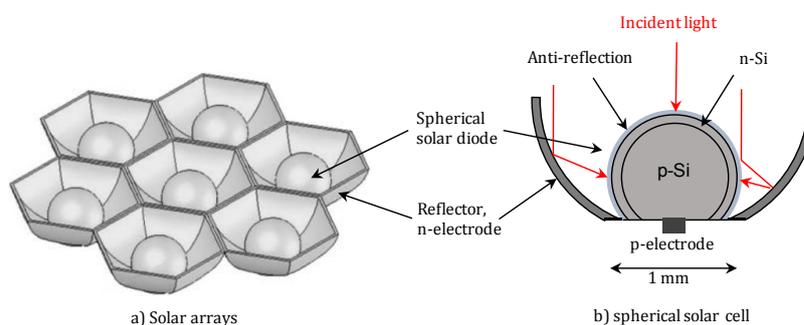


Fig. 1. Designs of a p-type spherical solar cell

In the conventional NTD-Si method, the cylinder silicon ingot is irradiated. Thus, keeping a highly uniform resistivity of the doped silicon is the most difficult task. In this new method (**Fig. 2**), spherical silicon particles (Si-particles) are irradiated directly instead of the cylinder silicon

ingot. The Si-particles move from the top to bottom of the NTD-hole around a screw conveyor by gravity, so that the radial uniformity of resistivity can be pursued and the complicated procedure for flattening axial uniformity of resistivity is also not necessary. A further advantage is that the Si-particles can be irradiated continuously without changing the neutron flux. It does not influence the other experiments as well as the operation of the reactor.

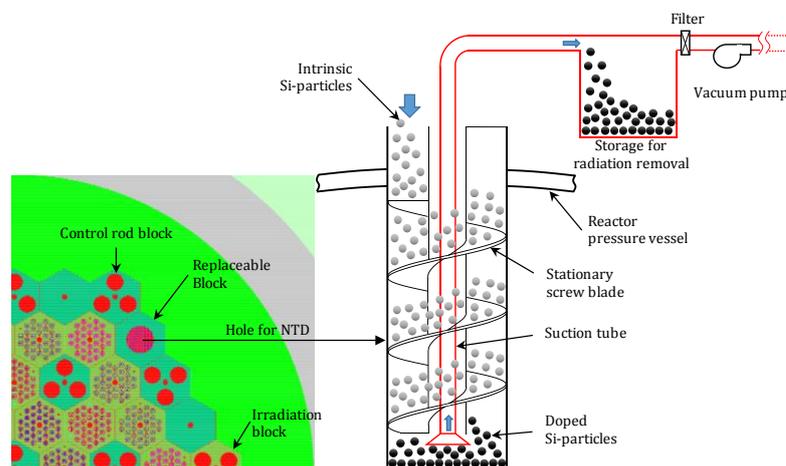


Fig. 2. Proposed scheme for NTD of Si-particles (not to scale)

Optimization of NTD-Si facility at the HTTR showed that we could design three holes with a diameter of 20 cm at the replaceable reflectors of the HTTR that could produce approximately 40 tons of doped Si-particles per year. In this case, the irradiation time is about 42 hours in order to produce 10 Ω cm resistivity of doped silicon for spherical solar cells with 0.5 %Δk/k of negative reactivity insertion. Furthermore, the optimal core design for NTD had a negative temperature reactivity coefficient, required for the passive safety feature of the HTTR.

(2.2) Feasibility of producing Iodine-125 at the HTTR

Iodine-125 (¹²⁵I) is an attractive radioisotope which is widely used in various in vitro and in vivo medical applications. The demand for ¹²⁵I as a medical radioisotope is increasing significantly in the recent year. However, the ¹²⁵I production is still limited. The ¹²⁵I can be produced by irradiating natural xenon gas, which is suitable to be irradiated in the HTGRs. This is because the gas phase of xenon target allows it to access easily into the reactor core and possible to design a continuously irradiated facility for large-scale gas target. Therefore, this study investigated the feasibility of a large-scale facility at the HTTR for producing a large amount of ¹²⁵I production [2].

The ¹²⁵I is produced through the neutron capture of nature xenon gas containing ¹²⁴Xe, which will become the unstable isotope ¹²⁵Xe and finally the ¹²⁵I through the beta decay. During irradiation process, various isotopes are produced (as presented in **Fig. 3**) so that a complicated differential equations need to be solved. First, a computer code based on a Runge-Kutta method was developed to calculate the ¹²⁵I and other isotopes concentration. Then, the irradiation time and decay time were optimized to obtain high specific activity of ¹²⁵I with minimum

contamination. The total ^{125}I activity produced in a year when irradiating 1g natural xenon gas with different irradiation time and different decay time is shown in Fig. 4.

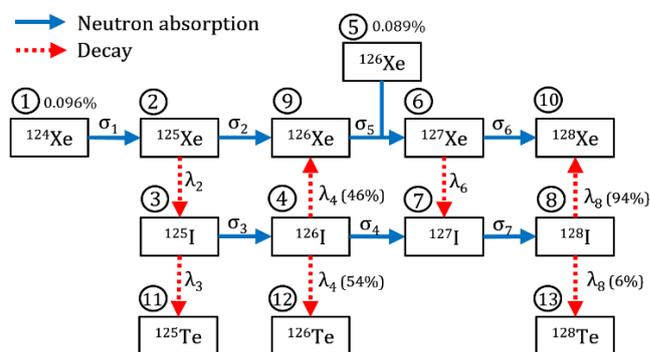


Fig.3. Formation of isotopes of interest during irradiation of natural xenon gas

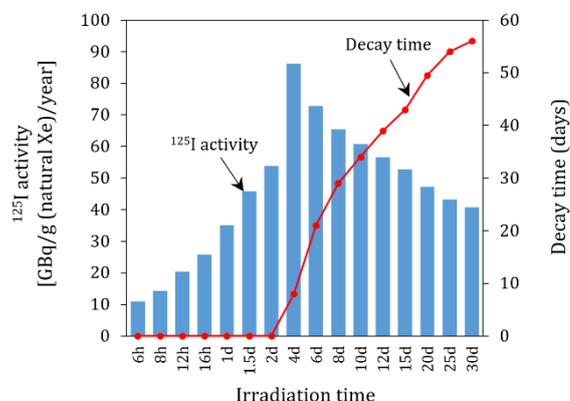


Fig.4. Total ^{125}I activity per year with different irradiation time and decay time

The optimum design of HTTR could produce about $1.8 \times 10^5 \text{GBq}$ in comparison with $3.0 \times 10^3 \text{GBq}$ of total ^{125}I supplied in Japan in 2016.

In conclusion, the feasibility of the new irradiation applications, including silicon doping of spherical solar cell and radioisotopes production, in the HTTR was studied. The HTTR shows the advantages for thermal neutron irradiation application with properties of stable operation in long-term and large space available for irradiation purpose, which makes the HTGRs become more attractive for future commercialization.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) H. Q. Ho, Y. Honda, M. Motoyama, S. Hamamoto, T. Ishii, E. Ishitsuka, "Proposal of a neutron transmutation doping facility for n-type spherical silicon solar cell at high-temperature engineering test reactor", Applied Radiation and Isotopes, vol.135, pp.12-18 (2018).
- 2) H. Q. Ho, Y. Honda, S. Hamamoto, T. Ishii, N. Fujimoto, E. Ishitsuka, "Feasibility study of large-scale production of iodine-125 at the high temperature engineering test reactor". Applied Radiation and Isotopes, vol.140, pp.209-214 (2018)
- 3) H. Q. Ho, Y. Honda, S. Hamamoto, T. Ishii, S. Takada, N. Fujimoto, E. Ishitsuka, "Feasibility study of new applications at the high-temperature gas-cooled reactor", In: HTR 2018, Warsaw, Poland (8-10 October 2018).

(4) 今後の利用予定:

In future, the feasibility study of producing the $^{99}\text{Mo}/^{99\text{m}}\text{Tc}$ production will be carried out as one of a new irradiation application at the HTTR.

5.7.2 JMTR 廃止措置計画のための構造部材の中性子束評価

Evaluation of Neutron Flux of Structure Materials for JMTR Decommissioning Plan

井手 広史、村崎 穰
材料試験炉部技術課

(1) 利用目的:

材料試験炉部では、JMTR の廃止措置に係る認可申請を計画している。当該申請にあたっては、廃止措置に伴い発生する放射性廃棄物の発生量を評価する必要がある。

原子炉の運転が終了し、核燃料を撤去した後も施設内には放射性物質が存在する。放射性物質の残存量を評価することは、解体方式の決定、解体作業に伴う被ばく量の推定、解体計画の策定、放射性廃棄物の処理処分に係る検討などにとって重要である。

原子炉内及び原子炉近傍の機器・構造物等が炉心から中性子の照射を受けて放射化することにより汚染物質として生成し施設内に残存していく廃棄物を定量するには、原子炉内外の中性子束分布の評価が必要であり、本件は、当該評価を遂行するため大型計算機を有効活用したものである。

(2) 利用内容・結果:

JMTR は原子炉圧力容器、炉内構造物、炉心及び制御棒等から構成され、原子炉圧力容器周りには生体遮蔽のコンクリートが配置されている。概略計算モデル（縦断面図）を図 1 に、JMTR 炉心構成を図 2 に示す。モデル化した各構造材等の位置における中性子束の評価を MCNP5 により行った。

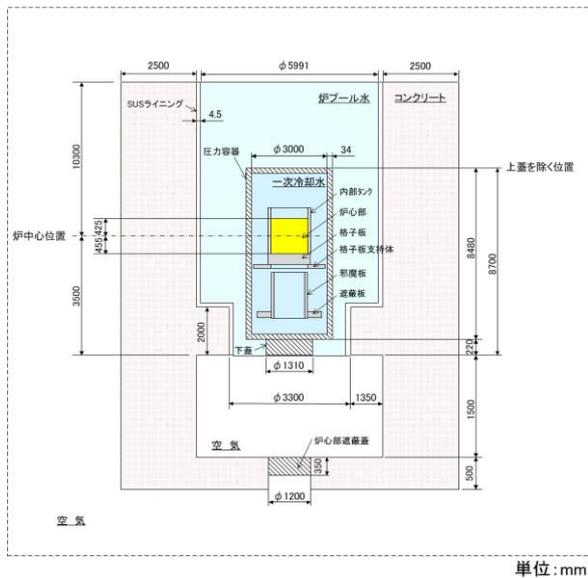


図 1 概略計算モデル（縦断面図）

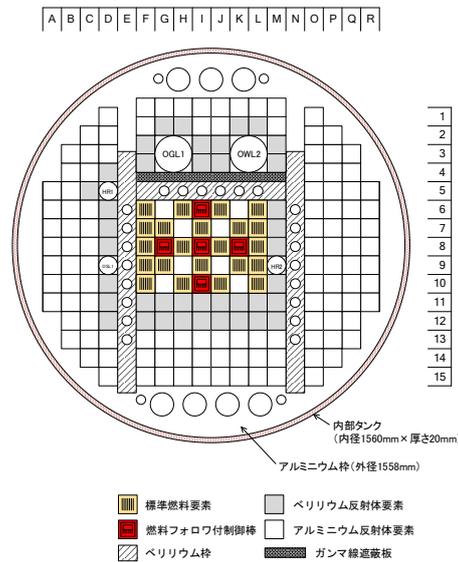


図 2 JMTR 炉心構成

炉中心付近における代表的な構造材等の中性子束を表 1 に示す。また、全中性子束の分布図（縦断面図及び横断面図）を図 3 に示す。ワークステーションを用いて行った炉プール周りの生体遮蔽コンクリートの中性子束評価では、計算時間の関係から相対誤差が大きく信頼できる計算値を

得られなかった。一方、大型計算機による評価結果から、十分信頼できる評価結果が得られ、わずかであるが中性子が生体遮蔽コンクリートまで到達していることが確認できた。

表 1 代表的な構造材等の中性子束

構造物	対象物	50M W 規格化後 ($/\text{cm}^2/\text{s}$)	
		熱中性子束	全中性子束
制御棒 (Hf)	SH-2中性子吸収体(Hf)	3.38E+13	5.11E+14
制御棒ガイドチューブ(AL)	SH-2を除く4本の燃料フォロワのガイドチューブ(AL)	2.96E+14	9.01E+14
Be反射体要素	Be反射体1層目平均(Be)	3.19E+14	5.81E+14
	Be反射体2層目平均(Be)	1.69E+14	2.36E+14
AL反射体要素	燃料領域AL反射体8本平均(AL)	2.54E+14	8.10E+14
	AL反射体1層目平均(AL)	5.11E+13	7.29E+13
	AL反射体2層目平均(AL)	2.38E+13	3.55E+13
	AL反射体3層目平均(AL)	1.36E+13	2.16E+13
γ 遮蔽板	γ 遮蔽板(Zr-2)	1.83E+14	2.96E+14
圧力容器	圧力容器(SUS304L)	2.56E+06	1.14E+07
炉プールライニング(SUS304)	炉心部	1.22E+00	2.97E+00
炉プール周りの生体遮蔽コンクリート	R方向厚: 0~10cm	1.10E+00	2.44E+00
	R方向厚: 10~40cm	4.23E-01	7.55E-01

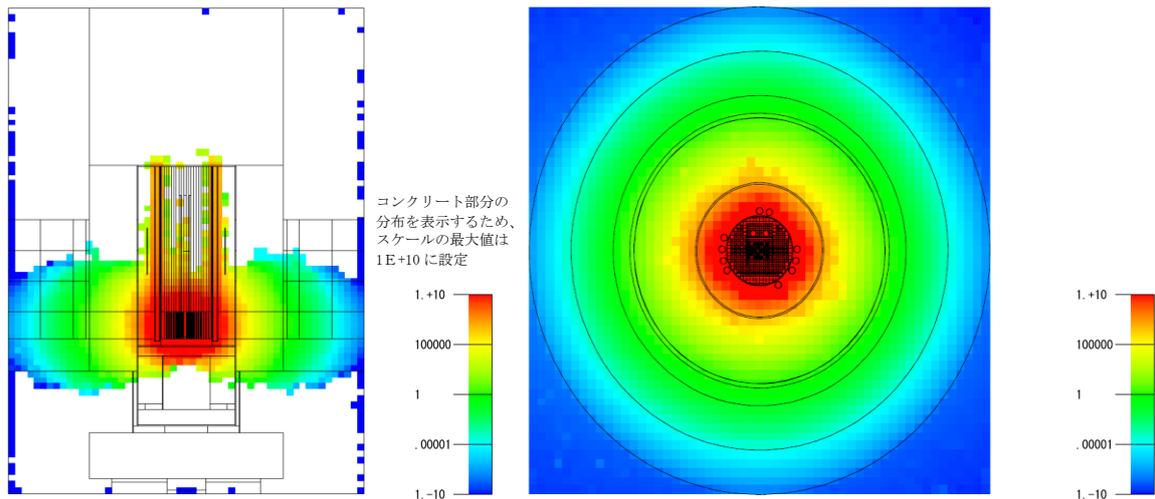


図 3 全中性子束の分布図（縦断面図及び横断面図）

(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:

今後、JMTR の廃止措置認可申請が認可され、準備作業が開始されると、実際の放射化物との比較検討等を行い、評価精度を向上させ、廃棄体の放射能レベル区分を決定することが必要となり、中性子束の再評価が必須になるものと予想される。特に、炉心から離れた部材については、中性子束評価の相対誤差を最小限にすることに多くの計算時間を必要とすることから、大型計算機の活用が不可欠であり、今後も利用を予定している。

5.8 高温ガス炉水素・熱利用研究センター HTGR Hydrogen and Heat Application Research Center

5.8.1 高温ガス炉用三次元動特性解析コードの開発

Development of Three-dimensional Reactor-kinetics Code for HTGRs

高松 邦吉

国際共同試験グループ

(1) 利用目的:

第4世代原子力システム（GenerationIV）の候補の一つである電力水素併産を目的とした超高温ガス炉（VHTR）の研究開発に資するため、本作業では高温ガス炉用三次元動特性解析コードの開発を行う。原子炉出力制御系が作動していない状態で、炉心へ反応度が添加された場合、および冷却材流量が減少した場合の炉心動特性を評価するため、STAR-CCM+（汎用熱流体解析ソフト）の解析モデルの問題点を洗い出し、それを解決するための改良を行う。また、STAR-CCM+と他の解析コードとの結合を行う。

(2) 利用内容・結果:

1. STAR-CCM+の解析モデルの改良

既存のHTTRの解析モデルは、元々、ANSYS-FLUENTの入力データ（拡張子：.cas）を、STAR-CCM+にインポートして作成された。今回、既存のHTTRの解析モデルの寸法や形状等を改良するため、STAR-CCM+のジオメトリ > パーツに存在するデータを、ジオメトリ > 3D-CADモデルへ逆に展開する方法を調査した。

1.1. STAR-CCM+側での形状データ抽出方法

STAR-CCM+側で、（拡張子：.sim または.cas）より形状データを抽出するための方法は3つあることがわかった。

方法1) 形状を作成したANSYS-FLUENT側で形状の修正を行い、そのデータをSTAR-CCM+に再度読み込む。STAR-CCM+で、部品の置換機能を使用する。STAR-CCM+で、インポート後のジオメトリのパーツのサーフェス名が、置換前と置換後で違いがなければ、正しく機能する。パーツの置換は、ジオメトリのパーツ内の部品を右クリック、表示されたポップアップメニューの「パーツを置換」を選択することで置換が可能である。

方法2) サーフェスの修正機能を使用し、燃料体に開けられた燃料棒の挿入孔の径や位置を変更する。孔の側面を削除、空間が空く。フリーエッジとなるので、その面を埋める。境界を整備

する。孔の径と孔の位置を変えた棒を作成する。ブーリアンで穴をあける。この作業を部品の数だけ繰り返す。注意点として、本方法は習熟が必要であり、パーツ数が多いため、現実的な作業時間に収まらない可能性がある。

方法 3) 「CAD クライアント」上で、CAD ソフトと STAR-CCM+を連動させる機能を使用する。追加ライセンスが必要である。CAD クライアントである NX、CATIA5、Creo、Inventor 等上で、STAR-CCM+を実行できる機能がある。メッシング、物理モデル設定の GUI があり、1 クリックで、STAR-CCM+ヘジオメトリを移動することが可能である。

1.2. ANSYS-FLUENT 側での形状データ抽出方法

ANSYS-FLUENT 側で、(拡張子.cas) より形状データを抽出するための方法を示す。

方法 1) ICEM CFD を使用する方法。抽出できる形状はメッシュに沿ったもので直線的であり、オリジナルデータの曲面等は忠実に再現できない。

方法 2) Space Claim を使用する方法。中間ファイルのフォーマットとして STL file を利用する。ANSYS-FLUENT 上で Adjoint solver の STL export 機能を利用し、拡張子.cas から STL file を書き出す。例えば、ver.18.2 において、case file を読み込み、初期化を実施後、Adjoint solver の design tool で Export STL する。Space Claim で STL file を読み込む。読み込み後のファセットボディは、面のマージ、エッジ上の余分な分割の修正やエッジの修復、縫い合わせ等で surface から solid を作成する。ファセットボディの修復など様々な機能がある。元の形状によっては、その後の操作の手順等が異なる。

なお、注意点として、STL の情報を元に形状が構築されているので、元のメッシュ分割を反映してエッジが分割されている。このため、エッジ上の余分な分割をそのままにしておくと、その形状に対してメッシュが生成されてしまう。抽出する部品の形状によっては、一から作成し直す必要がある。例えば、円柱の抽出において、断面モードで、カーブを抽出する機能を利用する。抽出したカーブまで円を作成すると面になる。3D モードに戻ると、自動的に surface が作成される。もう一方のカーブについても、同様の作業を行う。2つの面が作成できたら、一方の面から一方の面までプル機能を利用し、円柱形状を作成する。なお、他の CAD で作成したファイルをインポートする場合は、データの欠落等の不具合が発生することがある。

2. STAR-CCM+または ANSYS-FLUENT と他の解析コードの結合

STAR-CCM+または ANSYS-FLUENT の解析結果（出力値）を、他の解析コードの解析条件（入力値）として取り扱い、他の解析コードの解析結果（出力値）を、STAR-CCM+または ANSYS-FLUENT の解析条件（入力値）として取り扱えるよう、他の解析コードと結合し、両データをやり取りできる方法を調査した。

2.1. STAR-CCM+と他の解析コードの結合

方法 1) 他の解析コードの種類に依存するが、STAR-CCM+の連成シミュレーション

(co-simulation) 機能が適用可能である。両データのやり取りや計算の同期も含めて、ファイルベースで情報交換を行う連成スクリプトを作成する必要がある。

方法 2) Java の Runtime クラスの exec メソッドを用いると、Java 実行中に結合コマンドを実行できる。大まかな処理の流れとして、(1)STAR-CCM+で数ステップを計算。(2)レポート実行、ファイルをエクスポート。(3)exec メソッドで他の解析コードを実行、ファイルをエクスポート。(4)STAR-CCM+へファイルをインポート。(5)最初(1)へ戻る。

なお、注意点として、STAR-CCM+側で「ファイルのエクスポートおよびインポートまで含めて手作業で実施し、その 1 ループだけでも計算を回せるのか？」を確認する必要がある。手作業で実施したプロセスを、STAR-CCM+のレコーディング機能を用いて Java マクロとして記録する。レコーディングした Java マクロをベースとして、一般化を目指す。

2.2. ANSYS-FLUENT と他の解析コードの結合

方法 1) 他コードに対応したツールが準備されていない。下記を手作業で、または特別なツールを作成して実行する必要がある。ANSYS-FLUENT の解析結果（出力値）を他の解析コードで読み込めるファイル形式に変換し、解析条件（入力値）として読み込ませる。逆に、他の解析コードの結果（出力値）を ANSYS-FLUENT で読み込める Profile ファイルや Interpolate ファイル形式に変換し、解析条件（入力値）として読み込ませる。

方法 2) UDF を用いて任意のテキスト形式ファイルを入力条件にする。

(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:

福島第一原子力発電所事故の発生後、日本国内は元より世界中で高温ガス炉（HTGR）の固有の安全性に注目が集まっており、高温ガス炉用三次元動特性解析コードの改良は引き続き進める必要がある。本作業で得られた知見は、将来型高温ガス炉の安全性技術および評価手法の高度化に役立つと共に、第 4 世代原子力システム（GenerationIV）の候補の一つである電力水素併産を目的とした超高温ガス炉（VHTR）の研究開発に活用できる。

5.8.2 群分離技術併用による商用高温ガス炉の高レベル廃棄物の減容効果の評価 Evaluation on Volume Reduction Effect of HLW from a Commercial-scale HTGR

深谷 裕司
原子炉設計グループ

(1) 利用目的:

高温ガス炉は完全な自己制御性と優れた除熱性能により、能動的な機構を用いなくても、「止める・冷やす・閉じ込める」の原子炉に求められる安全性の機能を自然に発揮できる高い安全性を持つ原子炉であり、その安全性が注目されている。昨年度は、この高温ガス炉の廃棄物に関する評価を行い、その高い熱効率、燃焼度から、代表的な条件において軽水炉よりも廃棄物発生量・処分場専有面積が顕著に少ないことを確認した。

放射性廃棄物による環境負荷の問題は、その毒性そのものではなく、処分場から放出される放射線核種による被ばくを考慮すべきである。廃棄物の腐食を前提とし放射性核種の地下水を伝っての処分場敷地からの流出、生活圈への拡散を評価し、その放出核種による公衆被ばくが自然界から受ける被ばく線量よりも十分に小さいことが要求される。代表的な処分シナリオでは、その基準値の百万分の一程度の線量であり非常に安全であることが確認されている。これは、人工バリア・天然バリアによる閉じ込め機能によるものであり、原子炉の安全性と同じ考え方である。

残る問題は、処分場の立地の問題であり、もし、処分場が決定した場合は効果的に利用する必要がある。また、集中的な処分ができれば、地下水への放射性核種の溶解度制限により核種の放出量を抑えたり、天然バリア（岩盤）の領域を広くとることによる、さらなる安全性の向上も期待できる。この観点から今回は、廃棄法及び処分シナリオを最適化することにより、高温ガス炉高レベル廃棄物の廃棄物発生量・処分場専有面積をさらに減らすことを目的とする。なお、今回は早期導入オプションとしての検討であり、すでに実証されている群分離技術を用いるものの核変換は行わないものとする。

(2) 利用内容・結果:

本研究では、燃焼解析コード ORIGEN のライブラリ作成およ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。Fig.1 には商用高温ガス炉 GTHTR300 の MVP 解析モデルを示す。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。また、処分場専有面積の評価には地層中における温度評価が必要となるが、専用の CAD ソフトを内蔵し、詳細なモデルを忠実に表現できる ANSYS コードにより実施し高精度な評価が可能となった。ANSYS コードは ICE X に導入されており、大型計算機ユーザは利用可能である。

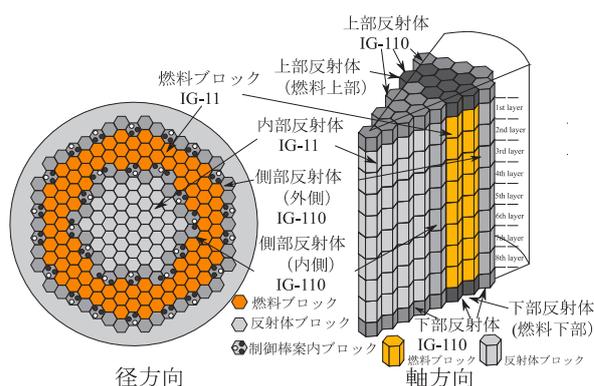


Fig.1 GTHTR300 炉心構成

昨年度は、上記の ORIGEN コードで評価した高温ガス炉使用済燃料組成を用い高レベル廃棄物発生体数および崩壊熱を評価し、取り出し 4 年冷却後再処理、50 年冷却後地層処分、処分法は地下 500m の軟岩の岩盤に縦置き処分 (KBS - 3V 概念相当) の条件で処分場専有面積を評価した。ベントナイト温度を 90°C 以下となるように、ANSYS コードで評価を行いながら、廃棄物のピッチを決め専有面積を決定した。今年度は、坑道の健全性の観点からの力学的制約が少なく、廃棄体を密に廃棄できる横置き処分 (KBS - 3H 概念相当) および、処分シナリオを最適化するものとする。昨年度の評価を代表ケースとし比較し、減容効果を確認する。

Table 1 直接処分時のシナリオ最適化と減容効果

	代表ケース	最適化 1	最適化 2	最適化 3
処分法	縦置き	横置き	横置き	横置き
冷却期間 (年)	54	54	74	94
キャニスターあたりの専有面積 (m ² /canister)	204 (力学的制約)	160	117	104
発電量あたりの専有面積 (m ² /TWeh)	244	191	140	125

Table 1 は高温ガス炉使用済燃料の直接処分時の減容効果を比較している。最適化 1 では処分法を縦置きから横置きに変更したものであり、これだけで専有面積の 2 割低減が可能である。高温ガス炉廃棄物がエネルギー発生あたりの TRU 発生量が軽水炉の半分程度であるという特性により、崩壊熱が少なく熱的には余裕があるが、縦置きの力学的制約により廃棄体ピッチが決められていた。そこで、横置きにすることにより、より密な廃棄が可能となった。最適化 2、3 は冷却期間を 20 年、40 年と延長したものである。冷却期間を長くするほどに専有面積は小さくなるが、40 年程度の延長を境に減容効果が著しく低下する。これは、FP による崩壊熱が減衰し、長半減期のアクチノイド核種による崩壊熱が支配的になるためである。そこで、最適化 3 の 100 年程度の冷却が許容できる範囲の冷却期間で専有面積 5 割低減の効果的な減容が図れる条件といえる。

Table 2 再処理時のシナリオ最適化と減容効果

	代表ケース	最適化 1	最適化 2
処分法	縦置き	横置き	横置き
再処理までの期間 (年)	4	5.5	5.5
キャニスター発生体数 (canister/TWeh)	2.31	1.77	1.77
冷却期間 (年)	54	54	94
キャニスターあたりの専有面積 (m ² /canister)	90 (力学的制約)	66	20 (力学的制約)
発電量あたりの専有面積 (m ² /TWeh)	209	117	36

Table 2 は再処理時のガラス固化体の発生体数と処分場専有面積を示している。最適化 1 では縦置き処分から横置き処分への変更のほかに、再処理までの期間を 4 年から 5.5 年に延長している。ガラス固化体の製造時の制約が崩壊熱による発熱であるため、冷却期間を延長することにより、ガラス固化体に多くの廃棄物を装荷し、ガラス固化体発生体数を 3 割程度低減している。結果として専有面積が 5 割程度低減している。最適化 2 では直接処分時と同様に冷却期間を 100 年程度に延長することにより、更なる専有面積の低減を図っている。結果として力学的制約の最小限の専有面積が実現でき、代表ケースより 8 割低減の専有面積が実現できる。

Table 3 群分離併用時の減容効果

	代表 ケース	群分離適用			
		合計	ガラス 固化体	Sr 焼成体	Cs 焼成体
処分法	縦置き	横置き			
再処理までの期間 (年)	4	4			
キャニスター発生体数 (canister/TWeh)	2.31	0.83	0.50	0.15	0.18
冷却期間 (年)	54	-	154		
キャニスターあたりの専有面積 (m ² /canister)	90	-	35	20 (力学的制約)	
発電量あたりの専有面積 (m ² /TWeh)	209	24.3	17.6	3.1	3.6

Table 3 は群分離併用時の減容効果を示している。群分離技術は階層型核変換システムとして ADS と共に開発されてきた技術であり、ADS と違い実証もされた確立した技術である。群分離技術は 4 群分離とも言われ、ガラスメルトの寿命を縮める白金族、ガラス固化体の発熱制限を回避するため Sr-Cs を分離し、MA とその他の FP を分離し 4 群に分ける。今回は、MA を核変換せずその他の FP と共にガラス固化する。なお、群分離で用いるガラス固化体は高充填ガラス固化体と呼ばれる特殊なものである。Sr と Cs の吸着カラムはそのまま焼き固め焼成体とし廃棄する。寸法はガラス固化体と合わせてあり、ガラス固化体と同様の処分を考える。廃棄体発生体数は 6 割減と大幅な廃棄物低減効果が確認できた。一方で、専有面積は 150 年の冷却期間を想定すると代表ケースの 9 割低減という効果的な減容効果が確認できた。Sr-Cs 焼成体の専有面積は力学的制約の最小限のものとなっているが、ガラス固化体は MA (Am-241) の発熱が専有面積を決定しているため、冷却期間の延長でのこれ以上の減容は難しい。しかし、既存の技術のみで専有面積 9 割低減の減容効果を実現できることを確認できたことは大きな意義である。

なお、本研究には群分離研究グループの松村達郎氏、津幡靖宏氏の全面的な協力を得て実施することができました。この場を以って感謝の意を示します。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 深谷裕司, 大橋弘史, “高温ガス炉の高レベル廃棄物の減容に関する研究; 処分シナリオ、分離導入による減容効果の確認”, 日本原子力学会 2017 年秋の大会(2017).
- 2) Y. Fukaya, M. Goto, H. Ohashi, et al., “Optimization of disposal method and scenario to reduce high level waste volume and repository footprint for HTGR”, Ann. Nucl. Energ., vol.116, pp.224-234 (2018).

(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 次世代高速炉サイクル研究開発センター Advanced Fast Reactor Cycle System Research and Development Center

5.9.1 自然循環時燃料集合体内熱流動試験に対する妥当性確認解析

Validation Analysis of Thermal-hydraulic Experiments for Fuel Assembly under Natural Circulation Conditions

菊地 紀宏、吉川 龍志、田中 正暁
流動・系統解析グループ

(1) 利用目的:

ナトリウム冷却高速炉の安全性強化の方策として、自然循環を活用した炉心崩壊熱の除去が期待されている。自然循環時の炉心部では、浮力が駆動力となる流量再配分の影響により、炉心全体での炉心部径方向温度分布の平坦化に加え、燃料集合体内の水平断面温度分布の平坦化が生じる。また、強制循環時に比べ、炉心通過流量は大幅に低下するため燃料集合体内の最高温度は上昇することになる。このため、自然循環を含む広範囲の流動条件下での燃料集合体内の熱流動を評価することが重要となる。そこで、ナトリウムを作動流体とする小規模模擬燃料集合体でのナトリウム試験データの取得にくわえて、実機での大型燃料集合体に対して数値解析により高速炉燃料集合体内の詳細温度分布の評価を行うべく開発・整備を進めている、熱流動場を詳細に評価する燃料集合体熱流動詳細解析コード SPIRAL 並びに設計検討及び安全評価用の高速炉燃料集合体内熱流動サブチャンネル解析コード ASFRE の妥当性確認解析を実施する。また、設計検討用の評価ツールである ASFRE については、設計検討において、より容易にパラメータ解析が実施できるよう、並列計算による高速化について検討を行う。

(2) 利用内容・結果:

燃料集合体熱流動詳細解析コード SPIRAL は、高速炉の燃料集合体の特徴であるラップ管内に格納される燃料ピンやピン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る複雑形状（図 1 参照）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問題により検証を行うとともに、試験解析に適用しその妥当性を確認してきている。平成 29 年度

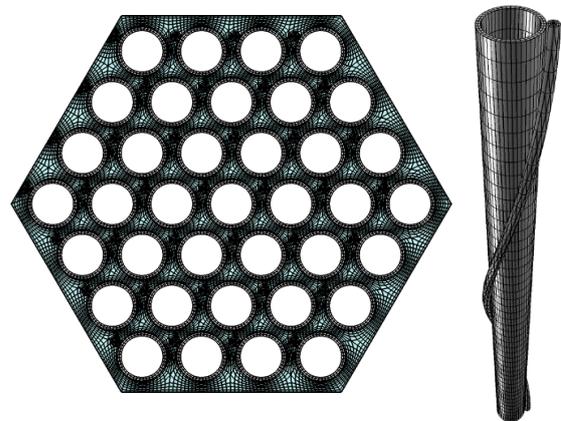


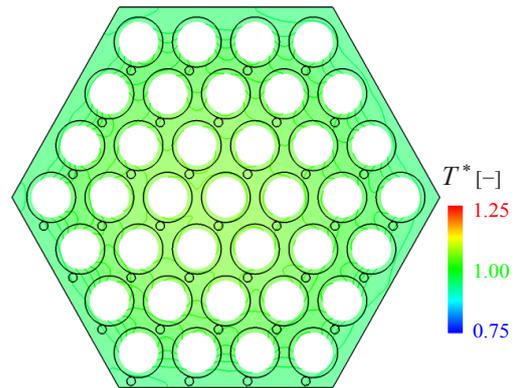
図 1 37 本ピン集合体の要素分割
(ワイヤ 1 巻きピッチ分を示す。)

はナトリウムを作動流体とした自然循環条件時の境界条件を模擬した試験を対象に解析を実施し、SPIRAL を用いた自然循環相当時における集合体内温度評価の妥当性確認を実施した。

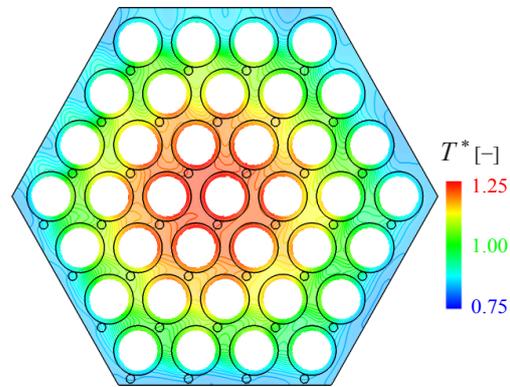
図 1 に解析要素分割を示す。解析対象は試験装置 PLANDTL-DHX の炉心を構成する 7 体の模擬燃料集合体のうち、中心に位置する 37 本ピンの模擬燃料集合体であり、燃料ピン発熱長を包含できるワイヤ 8 巻きピッチ長を解析領域に設定した。要素総数は約 667 万要素であり、水平断面あたりでは約 1.7 万要素となる。ナトリウム試験条件として自然循環を想定した低流量条件（試験番号：ST-070）と、比較のため強制循環条件（試験番号：TR-043）を解析対象として選定した。冷却材平均流入流速は、それぞれ $w_{in} = 0.096$ m/s、 0.591 m/s であり、レイノルズ数に換算すると、それぞれ $Re_{in} = 980$ 、 $5,983$ となる。また、集合体発熱量は試験条件 $Q = 24.0$ kW、 144.3 kW に合わせて設定した。冷却材流入温度 ($T_{in} = 300$ °C) に対して、通過流量と発熱量から推定した冷却材の出入口平均上昇温度 ΔT はそれぞれ、 158.8 °C、 155.6 °C

となる。境界条件は、流速場に関して、入口境界には下流側の断面との間で周期境界条件を適用した流速分布を、出口境界は上流側断面との間で周期境界条件を適用した圧力分布をそれぞれ与えている。壁境界は Non-Slip 条件を課した上で低 Re 数効果を加味した壁関数を適用した。温度場に関して、流入境界の温度を一定として、被覆管内表面に対して軸方向分布を有する熱流束条件を設定した。数値計算安定化手法として方程式の移流項に対して Brooks & Hughes による Streamline Upwind 法を、乱流モデルとして壁漸近挙動を表現する低 Re 数型のモデル関数 f_p 、 f_s 等を導入した Hybrid 型 $k-\epsilon/k_0-\epsilon_0$ モデルを採用した。

解析結果の一例として、図 2 に燃料ピン発熱長上端の水平断面内における冷却材と構造材温度分布を示す。強制循環条件 (TR-043) の結果と比較して、自然循環条件 (ST-070) の結果は、浮力に駆動される集合体中心側の流速が上昇する影響によって、集合体中心側-周辺側間の温度差が縮小する結果となる。また、図 3 に同水平断面上におけるサブチャンネル平均温度の分布を示す。試験計測温度との比較では、強制循環条件 (TR-043) の結果は、試験と解析で全般的に良い一致を示している。一方、自然循環条件 (ST-070) の結果は、試験と比べて解析は発熱部上端で $3\sim 4$ °C の高温となる。ただし、約 160 °C の出入口平均上昇温度 ΔT に対して数度の差にと



(a) 自然循環条件 (ST-070)
($Re_{in} = 980$ 、 $Q = 24.0$ kW)

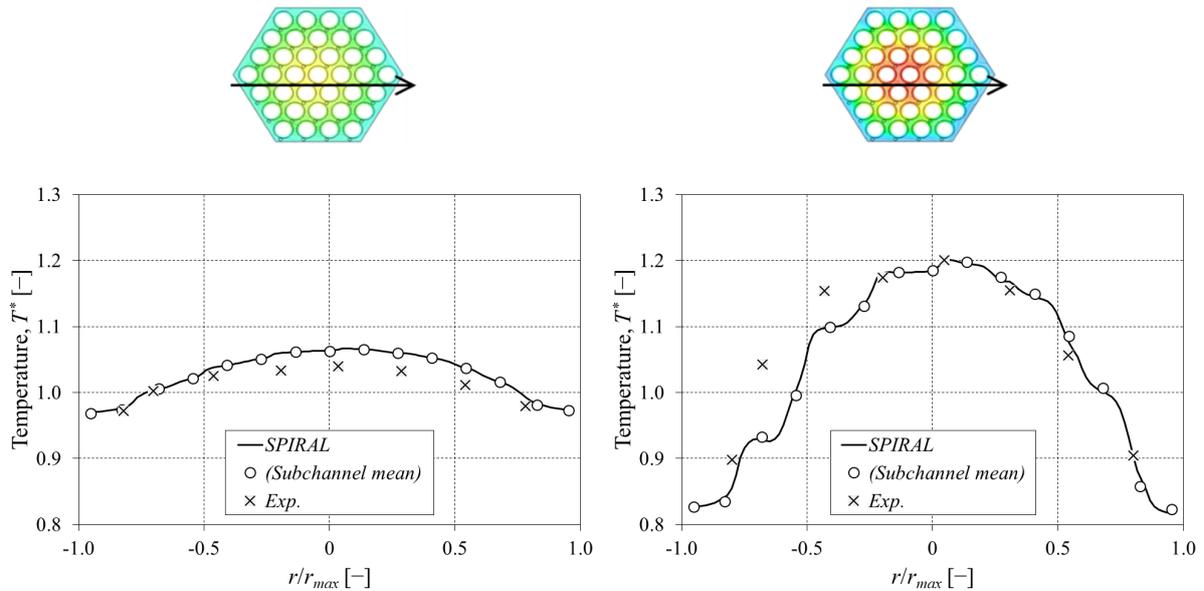


(b) 強制循環条件 (TR-043)
($Re_{in} = 5,983$ 、 $Q = 144.3$ kW)

図 2 発熱長上端断面における温度分布

どまっている。以上の解析結果から、SPIRALの結果は概ね妥当であるとの結論を得た。

また、詳細な熱流動解析場の評価を行う SPIRAL とは異なり、設計検討には、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、数多くのパラメータ解析を実施する必要がある。そこで、スカラチューニング及び OpenMP を用いたスレッド並列による ASFRE の高速化を図るとともに、今後の課題を抽出した。



(a) 自然循環条件 ($Re_{in} = 980, Q = 24.0 \text{ kW}$) (b) 強制循環条件 ($Re_{in} = 5,983, Q = 144.3 \text{ kW}$)

図3 サブチャンネル平均冷却材温度分布

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) H. Ohshima, Y. Imai, “Numerical Simulation Method of Thermal-Hydraulics in Wire-Wrapped Fuel Pin Bundle of Sodium-Cooled Fast Reactor”, International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Next Generation Nuclear Systems for Sustainable Development (FR17), Yekaterinburg Russian Federation, 2017.

(4) 今後の利用予定:

燃料集合体熱流動詳細解析コード SPIRAL の妥当性を確認するため、種々の燃料集合体試験による妥当性確認解析を進める予定である。また、実機評価への適用として、様々な運転条件下における内部ダクトを有する燃料集合体 (FAIDUS) 内の熱流動特性評価解析等の大規模解析を実施する予定である。

5.9.2 天井衝撃圧力評価のためのスロッシング解析モデルの開発

Development of Sloshing Analysis Model for Evaluation of Impacts on Roofs

高屋 茂

流動・系統解析グループ

(1) 利用目的:

ナトリウム冷却高速炉には、一般に、炉容器等のように自由液面を有する容器があり、地震時のスロッシングの影響を適切に考慮する必要がある。近年、より厳しい地震条件に対しても機器の健全性を確保するために免震システムの導入が検討されているが、加振周期が長周期化し、スロッシングの固有周期に近づくことから、スロッシングの影響が増大し、地震条件によっては、スロッシング波が容器の天井にまで到達することが懸念されている。このため、容器の天井の構造健全性評価の必要性が高まっているが、平坦な天井のスロッシング衝撃圧を評価するための一般的な評価方法はまだ確立されていない。そこで我々のグループでは、静止した水面に落下するくさび形物体に対する衝撃流体荷重の評価に用いられるワグナー理論に着目し、平坦な天井に対する簡易評価手法の開発の検討を進めている。ここでは、簡易評価手法の妥当性検討のために、天井への衝突までを含めたスロッシングの数値解析モデルの開発を行った。

(2) 利用内容・結果:

解析には商用コード STAR-CCM+ Ver4.12 を使用し、解法や乱流モデルといった主要な解析オプションは、類似解析で使用実績のあるオプションを参考に表 1 の通り設定した。また、評価条件は、既往の実験結果から、天井へのスロッシング波の衝突が確認されている条件を用いた。内部流体は水（水深 0.63m）であり、加振条件は振幅 0.088m、周期 1.77 s の正弦波を設定した。解析に使用したメッシュは、実験で使用された円筒容器と同様の寸法（直径 2.23m、高さ 1m）で作成した。図 1 にメッシュ図を示す。総メッシュ数は約 130 万で、メッシュ形状は全てヘキサである。なお、天井、側壁、床に対し、滑り無しの壁境界を設定した。過渡解析の時間刻みに関しては、定数値 (2.5×10^{-3} s) を設定した場合（設定①）と、クーラン数の最大値を設定して計算中に自動的に調整されるように設定した場合（設定②）の 2 通りの設定で解析を実施した。

まず、設定①の解析結果について述べる。天井への第 1 回目の衝突の様子を確認するため、図 1(a)の右上隅に相当する領域にて代表的な時刻における水の波形を可視化したところ、図 2 のような波形が確認された。側壁から離れたところでは水が天井に衝突するが、図 2 の破線に示す領域では、空気の層が過剰に形成されて波が不自然な形状となり、天井に衝突しないことが分かった。本報では図示していないが、この特徴は他の時刻においても同様である。水が天井に衝突する前後は、波形が急激に変化することから、時間刻み、メッシュ幅、流速の関係を確かめるために、中心断面におけるクーラン数を確認した。図 2 と同時刻におけるクーラン数の分布を図 3 に示す。天井近傍の広範囲でクーラン数が 3 を超えている領域が存在する。図 2 の破線部に相当する領域でもクーラン数が 0.5~1.0 程度になっていた。STAR-CCM+のクーラン数の最大の推

奨値は0.5であり、それを上回っていることが分かった。水が天井に衝突しない問題の原因の1つとして、クーラン数が推奨値よりも大きいため、現象を十分に再現できていないことが懸念された。

次に、設定②の解析結果について述べる。クーラン数の最大値の設定は、STAR-CCM+の推奨値0.5未満の値(0.4、0.2、0.1、0.05)を設定した。本報では、0.4とした場合の解析結果について、図4に示す。図2で確認された不自然な空気の層は認められず、図2の結果が改善されたことが分かる。また、図5に示した通り、水が衝突する領域(クーラン数が最大になる領域)で、クーラン数の最大値が0.4に抑えられている様子が確認できた。

以上のように、今回整備した解析モデルを用い、クーラン数の上限値を適切に設定することで、定性的に妥当なスロッシング波形が得られることを確認することができた。

表1 主要な解析オプション

解法	陰解法非定常解析
乱流モデル	SST k- ω
物理モデル(水)	密度一定(非圧縮)
物理モデル(空気)	理想気体(圧縮性)
自由表面	VOF法

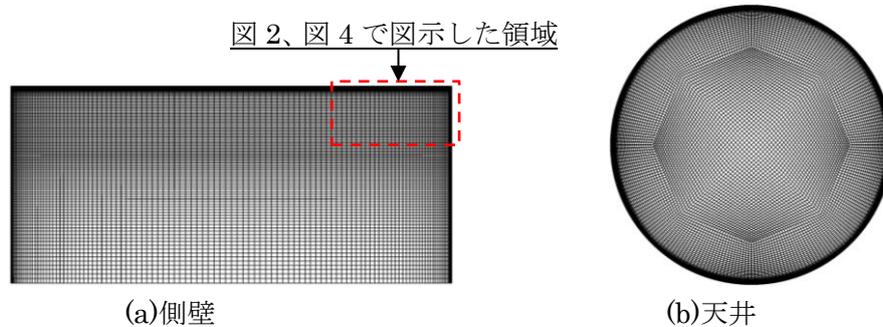


図1 メッシュ配置

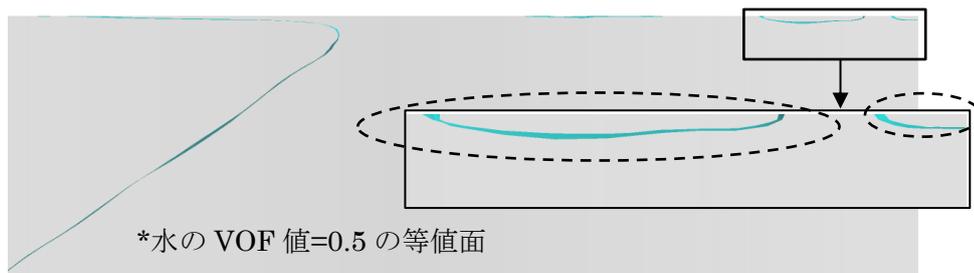


図2 瞬時の水の波形(時間刻み 2.5×10^{-3} s)

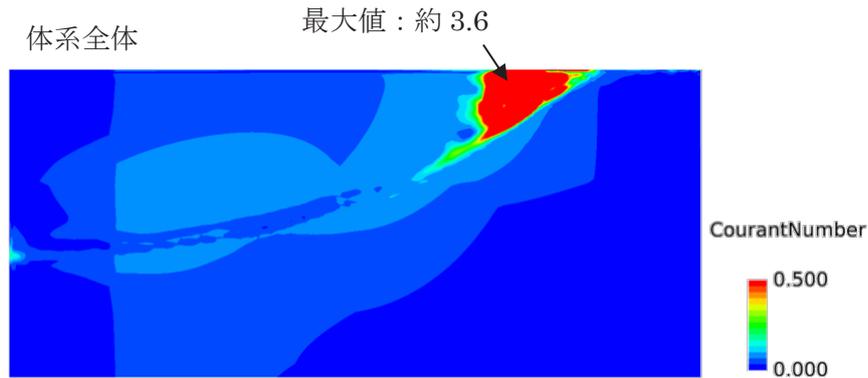


図3 瞬時のクーラン数の分布 (時間刻み 2.5×10^{-3} s)



図4 瞬時の水の波形 (クーラン数の最大値 0.4)



図5 瞬時のクーラン数の分布 (クーラン数の最大値 0.4)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) S. Takaya and T. Fujisaki, "Proposal of a Simple Evaluation Method for Sloshing Impact Pressure on Flat roofs", Proc. 26th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE26), ICONE26-82562, July 22-26, Hammersmith, London, England (2018).

(4) 今後の利用予定:

スロッシングの数値解析モデルの整備を進め、天井のスロッシング衝撃圧力評価へのワグナー理論の適用の妥当性を検討する際に重要となる天井に衝突した場合のスプラッシュ波形の解析を実施する予定である。

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

内堀 昭寛、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。SG の設計及び安全評価では、この反応ジェットの影響により隣接伝熱管が二次的な破損 (破損伝播) に至る可能性を評価することが重要な課題となっている。そこで本研究では、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、大型計算機システムを活用して開発整備を進めている。

従来 SERAPHIM コードでは構造格子を用いていたが、伝熱管群の存在する複雑形状体系に対して模擬性を向上するため、非構造格子用解析手法の開発、適用をこれまでに実施し、昨年度はターゲット伝熱管 1 本を配置した非構造格子体系での解析を実施した。今年度は、より実機に近い条件での計算実行性 (安定性) 確認を主な目的とし、ターゲット伝熱管が複数存在する体系での解析を実施した。また、高速化検討として、本解析コードにスレッド並列化等の改良を施し、その性能確認を行った。

(2) 利用内容・結果:

非構造格子版 SERAPHIM コードについて、プロセス並列化に加えてスレッド並列化を実施し、多数のコア (最大 2000 コア程度) を用いた場合の動作確認解析から並列計算処理に不具合はないことを確認した。さらに、プロセス並列とスレッド並列を組み合わせたハイブリッド並列とすることで、大規模体系 (数百万メッシュ以上) において CPU をより有効活用した解析が実施可能となった。以上の検討により、本解析コードを大規模計算に対応させることに成功した。

本解析コードの計算実行性 (安定性) を確認するため、実機条件の下、伝熱管群の存在する体系で液体 Na 中水蒸気噴出を模擬した試験を対象に、非構造格子を適用した 3 次元体系での並列計算を実施した。試験・解析体系の概観及び解析メッシュを図 1 に示す。円筒容器内には 43 本の模擬伝熱管群が配置されており、最初に Na が充填されている。伝熱管群最下段にある伝熱管の中央に設けられた模擬破損孔 (注水ノズル) より飽和水蒸気が上方へ噴出する。構造格子を用いる場合は伝熱管表面が階段状になるが、非構造格子を用いることで高い形状模擬性が得られている。図 2 に、水蒸気噴出開始から 0.2 秒経過後の解析結果を示す。気相 (水蒸気) は噴出後膨張して不足膨張噴流を形成し、その最大速度は超音速に達している。噴出した水蒸気は、体系内を上昇するとともに Na との化学反応により消費され、体系内には反応生成物である水素と水酸

化ナトリウム (NaOH) が移流拡散により分布している。また、化学反応によって形成される高温領域は、注水ノズル直上から鉛直上向きよりやや左方向へ傾斜して発達している。また、気相温度は最大で 1200~1300℃程度まで上昇する結果となっている。これらの解析結果は試験結果と定性的に一致している。本解析を実施する過程でコードの改修やメッシュ品質の改良を行い、実機に近い条件での安定解析を実現した。

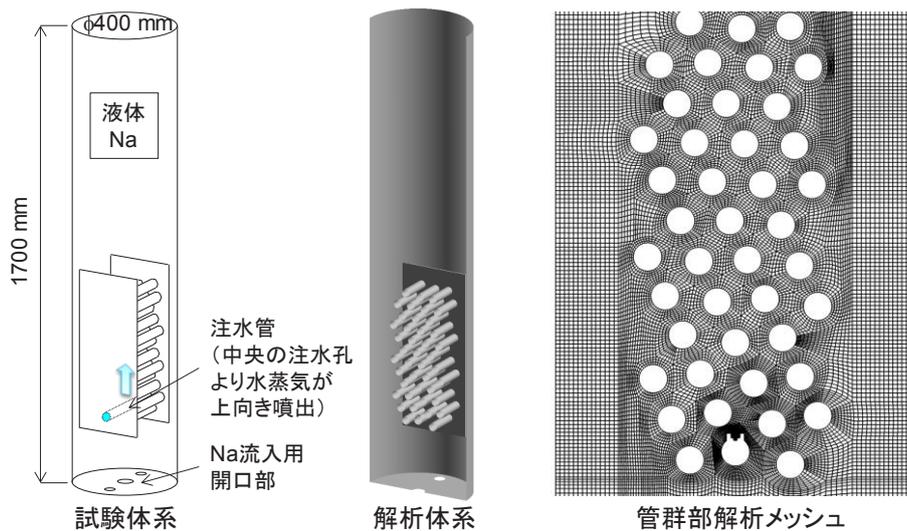


図1 試験・解析体系の概観及び解析メッシュ

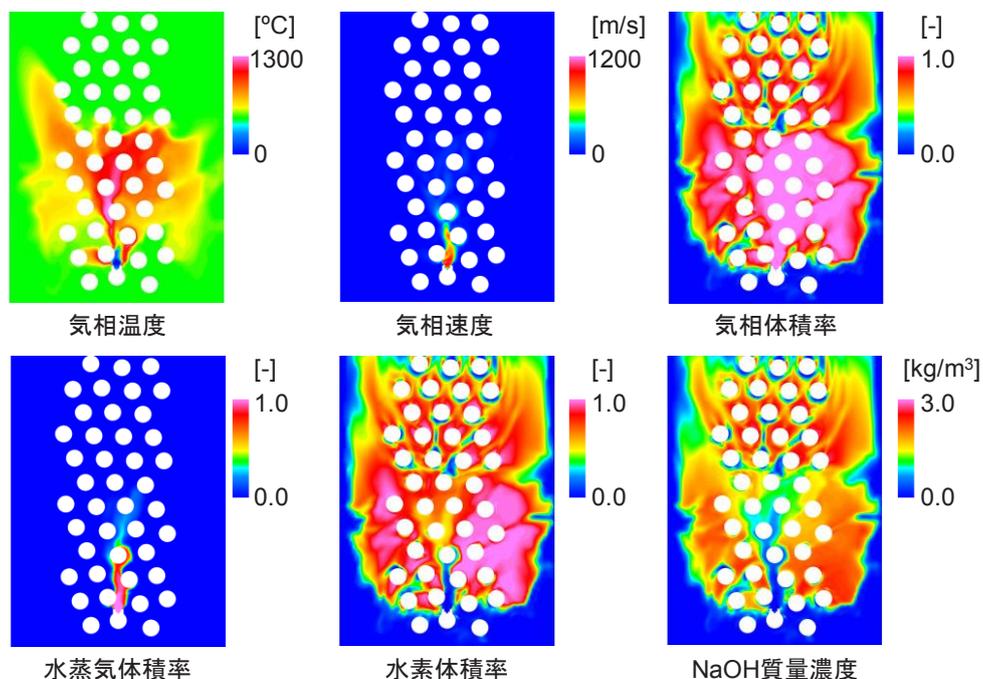


図2 解析結果

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) A. Uchibori, A. Watanabe, T. Takata, H. Ohshima, “Development of Unstructured Mesh-based Numerical Method for Sodium-water Reaction Phenomenon”, The 17th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-17), Xi’an, China, 2017.
- 2) A. Uchibori, A. Watanabe, T. Takata, H. Ohshima, “Development of Unstructured Mesh-based Numerical Method for Sodium-water Reaction Phenomenon in Steam Generators of Sodium-cooled Fast Reactors”, Journal of Nuclear Science and Technology, vol.54, No.10, 2017, pp.1036-1045.
- 3) 内堀昭寛, 渡部晃, 高田孝, 大島宏之, “ナトリウム-水反応現象解析コード SERAPHIM に対する非構造格子用解析手法の適用”, 第 22 回動力・エネルギー技術シンポジウム, 豊橋市, 2017.
- 4) 内堀昭寛, 渡部晃, 高田孝, 大島宏之, “ナトリウム-水反応現象解析コード SERAPHIM に対する非構造格子用解析手法の適用”, 日本機械学会論文集, vol.84, No.859, 2018.

(4) 今後の利用予定:

今後、大型計算機を継続して活用し、非構造格子版 SERAPHIM コードにより、温度、圧力や伝熱管配置等条件の異なる体系での解析を実施する。これにより、妥当性確認実績の拡充を図る計画としている。

5.9.4 連続エネルギー中性子・光子輸送モンテカルロ法コード MVP を用いた ZPR6/7 の As-built モデルでの Na ボイド反応度解析

Sodium Void Reactivity Analysis on an As-built Model of ZPR6/7 with the Monte-Carlo Code MVP for Neutron and Photon Transport Calculations based on the Continuous Energy Method

滝野 一夫

炉心挙動解析グループ

(1) 利用目的:

高速炉の経済性及び安全性の向上に係る研究の一環として、核設計精度向上に資する高次化 Pu に係わる実験解析データベースを得ることを目的とし、連続エネルギー中性子・光子輸送モンテカルロ法コード MVP を用いて、Na 冷却高速炉を模擬した ^{240}Pu 高含有領域 (^{240}Pu 同位体組成比約 26 wt%) を持つ ZPR6/7 臨界実験を対象に Na ボイド反応度解析を実施した。

(2) 利用内容・結果:

ZPR6/7 臨界実験について、 ^{240}Pu 高含有領域の一部のドロウ内の Na プレートがボイド缶に置換することで得られる Na ボイド反応度の実測値と MVP コードによる解析値を比較した。基本となるリファレンス体系について、XY 方向断面の一部を拡大した MVP コードでの解析モデルを図 1 に示す。表 1 に Na プレート置換パターンに関する 5 つの解析ケースを示す。各解析ケースの入力は参考資料[1]に添付されている MCNP 及び VIM コードの As-built モデルの入力データを MVP コード用に変換することで作成した。核データライブラリには JENDL-4.0 を使用し、全ての解析ケースで MVP コードの総ヒストリ数は 20 億 4 千万 (実効増倍率の統計誤差 0.001% 以下) とした。解析結果について、図 2 に実測値、拡散近似を取り入れた中性子輸送コードによる解析値^[1]、MVP コードによる解析値を示す。図 2 を見ると、多くの解析ケースで拡散近似を取り入れた中性子輸送コードによる解析値よりも MVP コードによる解析値の方が実測値に近づくことが分かる。Case 3 については実測値と MVP コードによる解析値との間に大きな差異があり、実測値が誤っている可能性が示唆される。今後、Case 3 以外を対象に、核設計精度向上に資する実験解析データベースとなり得るか調査する。

[1] Richard M. Lell, et al., ZPR-6 ASSEMBLY 7 HIGH ^{240}PU CORE EXPERIMENTS: A FAST REACTOR CORE WITH MIXED (PU,U)-OXIDE FUEL AND A CENTRAL HIGH ^{240}PU ZONE, Chapter 1, NEA/NSC/DOC (2006).

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

特になし

(4) 今後の利用予定:

引き続き、ZPR6/7 臨界実験の解析を行う。モンテカルロ法による解析を実施して参照解を求めるために ICE X を利用する。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。

表 1 各解析ケースの設定

Case 1	Case 2	Case 3	Case 4	Case 5
炉中心 3×3 ドロワを中央から軸方向に±15.24cm ボイド化	炉中心 3×3 ドロワを中央から軸方向に±76.24cm ボイド化	炉中心 37 ドロワ (図 1 中の破線部) を中央から軸方向に±76.24cm ボイド化	炉中心のモックアップ制御棒*1 周囲 8 ドロワを中央から軸方向に±15.24cm ボイド化	炉中心のモックアップ制御棒 (BeO リング付) *2 周囲 8 ドロワを中央から軸方向に±15.24cm ボイド化

*1 Case 4 では炉中心のドロワをモックアップ制御棒に置き換える。

*2 Case 5 では炉中心のドロワをモックアップ制御棒に置き換え、そのモックアップ制御棒を囲むように周囲のドロワ内に BeO プレート装荷する。

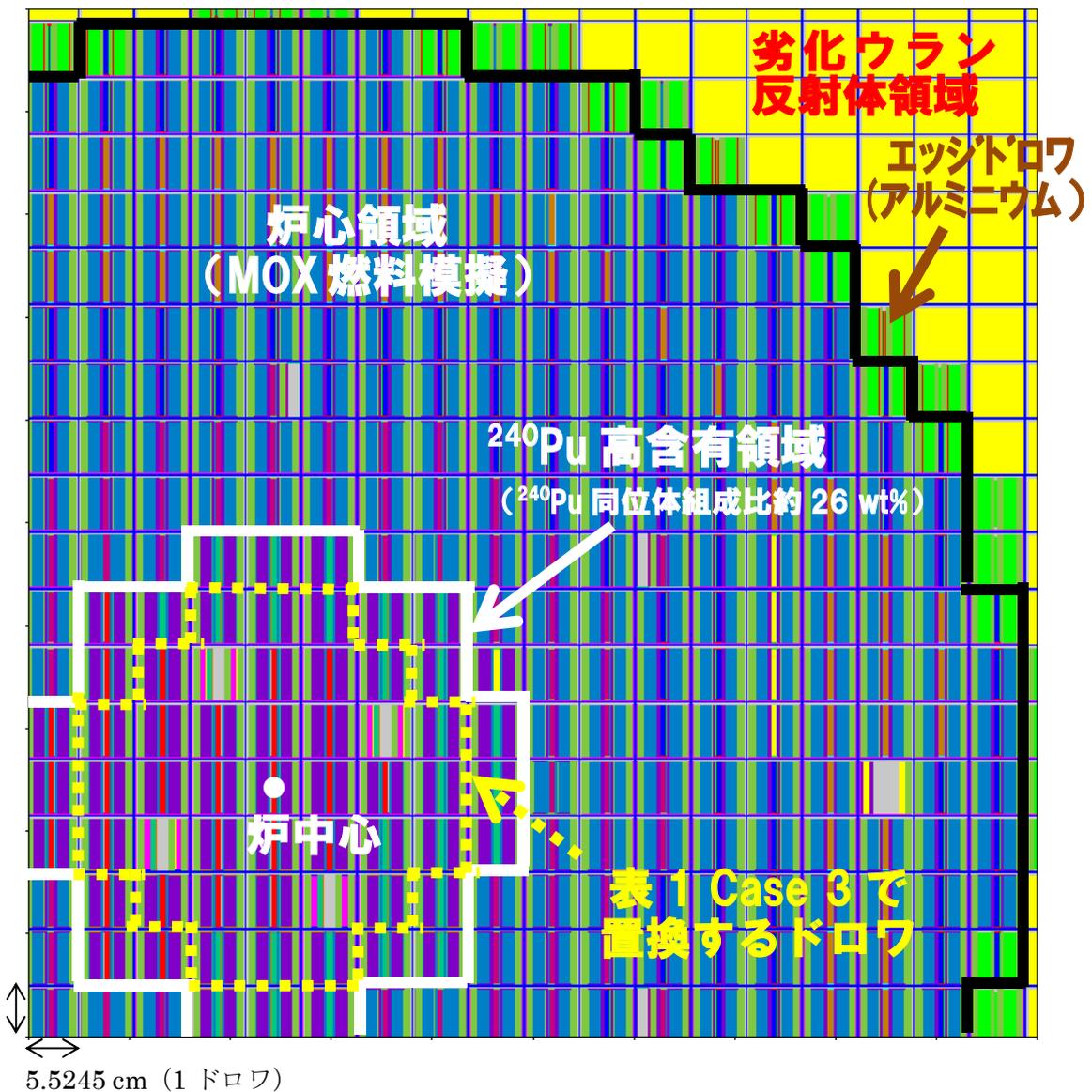
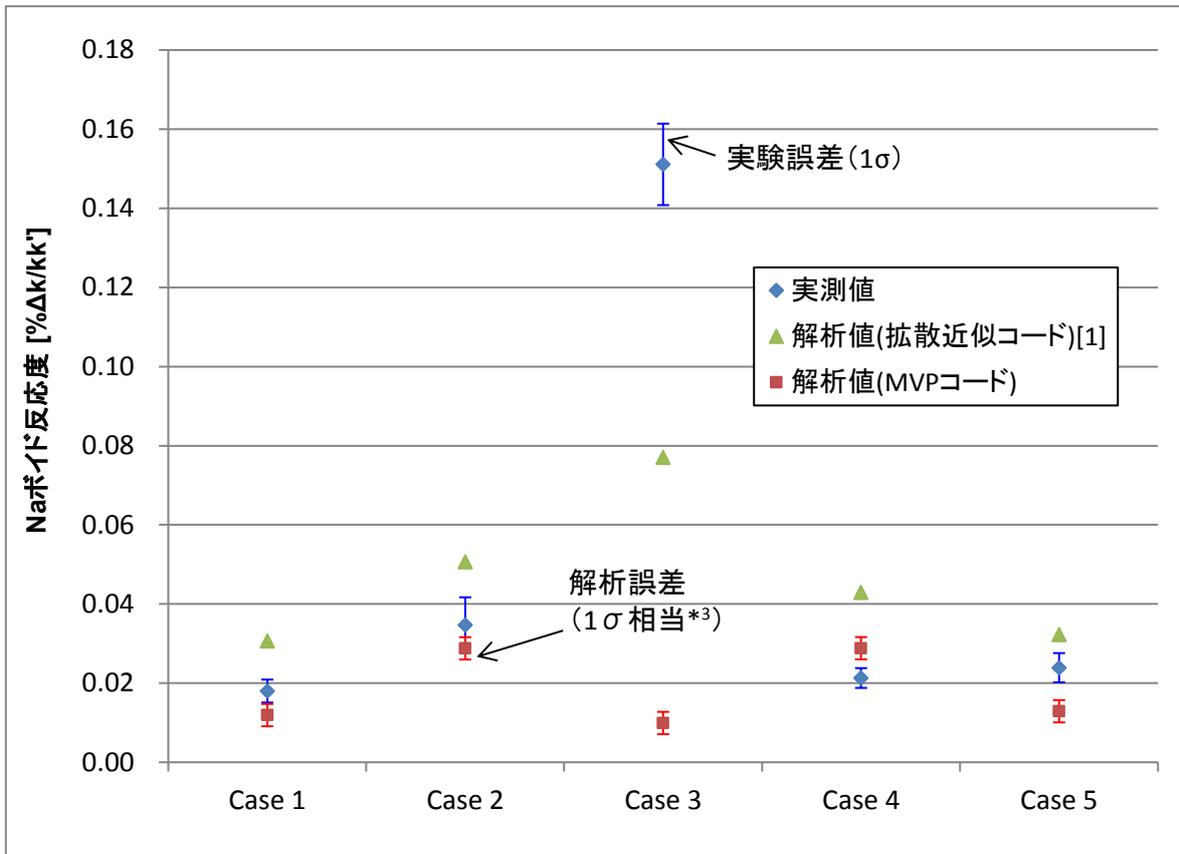


図 1 ZPR6/7 リファレンス体系の一部を拡大した MVP コードでの解析モデル図



*3 MVP コードの統計誤差の 2 倍を 1σ 相当の解析誤差とした。

図 2 Na ボイド反応度解析結果

5.9.5 連続エネルギーモンテカルロコード MVP を使用した金属燃料ナトリウム冷却高速炉の炉心核特性解析

Calculation of Core Neutronics Characteristics of Metal Fuel Sodium-cooled Fast Reactor using the Continuous-energy Monte Carlo Code MVP

大釜 和也、菰田 宏、曾我 彰
炉心挙動解析グループ

(1) 利用目的:

燃料集合体などの炉心構成要素を忠実に模擬した全炉心の連続エネルギーモンテカルロ計算は、膨大な計算時間を要するものの、近似がほとんどない計算手法であることから、参照解としての精緻な計算結果を得ることが期待できる。一方、設計に使用する決定論解析手法は、計算時間が合理的であるが、近似等を含むため、この精度を検証する必要がある。

そこで、本研究では、設計に使用する決定論解析手法の精度検証を目的とし、そのために必要な参照解を連続エネルギーモンテカルロ計算で得ることを目的とし、大型計算機システムを利用した計算を実施した。

なお、本研究は、日米民生原子力研究開発ワーキンググループの下で、新型炉開発サブワーキンググループの一つのプロジェクト”Metal Fuel Core”として、米国アルゴンヌ国立研究所との共同研究として実施している。本研究では、1500MWe の金属燃料ナトリウム冷却高速炉を対象として、MVP コードによる計算結果を利用した決定論解析手法の検証を試みている。

(2) 利用内容・結果:

燃料集合体内の燃料ピン及びラップ管並びに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、MVP コードを使用して一部の反応度係数の試計算を実施した。図 1 に対象とした金属燃料炉心の炉心配置図を、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、設計で用いる決定論解析手法による計算結果の検証のための参照解を得た。また、本研究で得られた MVP コードによる結果と決定論解析手法での計算結果の比較も実施し、両者が良く一致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):

今後、国際会議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:

今後、反応度係数の評価を継続していく予定である。

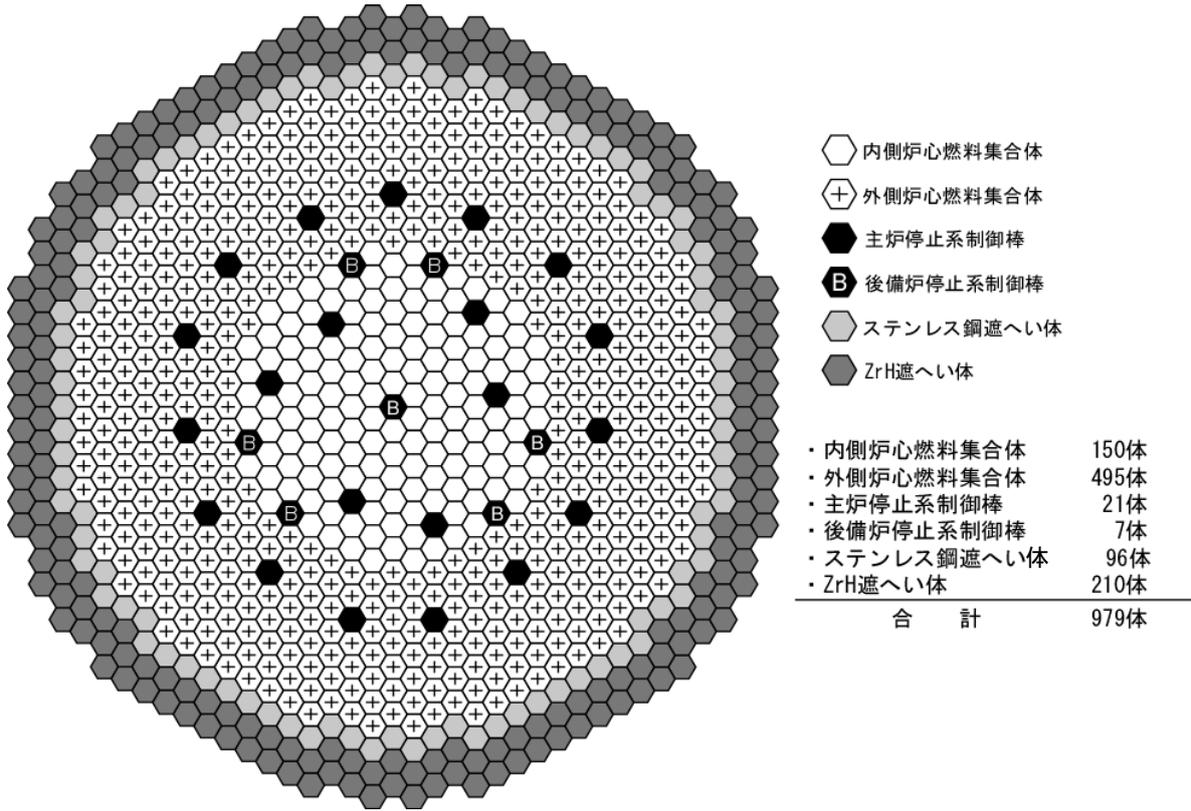


図 1 1500MWe 金属燃料炉心の炉心配置図

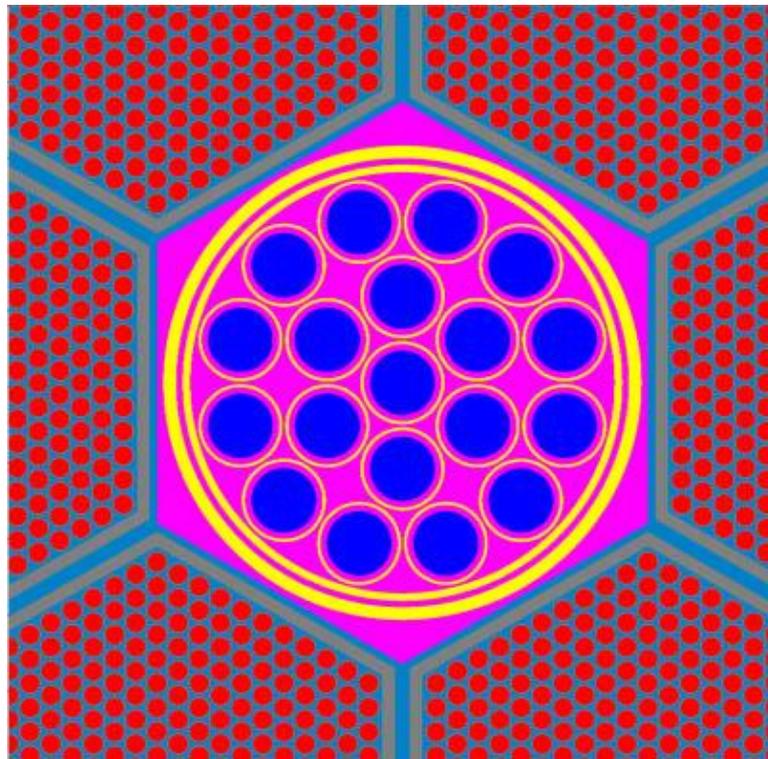


図 2 MVP コードでの解析体系の例 (制御棒)

5.9.6 熱流動解析コード(Fluent)による崩壊熱除去性能評価ナトリウム試験検討のための解析評価手法整備について

Establishment of Analysis and Evaluation Tool for the Investigation of the Sodium Test of Decay Heat Removal Characteristics

石川 信行、和田 明*

設計・規格基準室、*株式会社 NESI

(1) 利用目的:

シビアアクシデント対応も考慮して、ナトリウム高速炉冷却炉の原子炉容器内からの崩壊熱除去のための多様な炉内冷却システムの成立性確認のための試験装置 (AtheNa-RV/DHRS) の設計検討を実施している。本試験装置の検討では、試験目的を達成できるよう、原子炉容器内の熱流動特性を数値解析により評価して装置仕様の最適化を図ることとしている。

平成 29 年度は前年度に整備した原子炉容器内の解析モデルを用いて商用の CFD コード (FLUENT) による多次元解析を実施してその動作確認を行った。

解析モデルでは原子炉容器内に 2 つの崩壊熱除去系 (DHX) を模擬している。これらの DHX の運転状況の影響を確認するため、DHX 模擬部の吐出し位置と吸込み位置を変えて定常計算を実施した。本解析モデルを用いた計算を実施するためには、詳細なメッシュによる長時間の熱流動解析を実施する必要がある、大規模並列計算機の利用が有効である

(2) 利用内容・結果:

本解析においては、商用 CFD コード Fluent Ver.18.2 を用いて定常解析を実施した。図 1 に DHX の運転状態を示す。

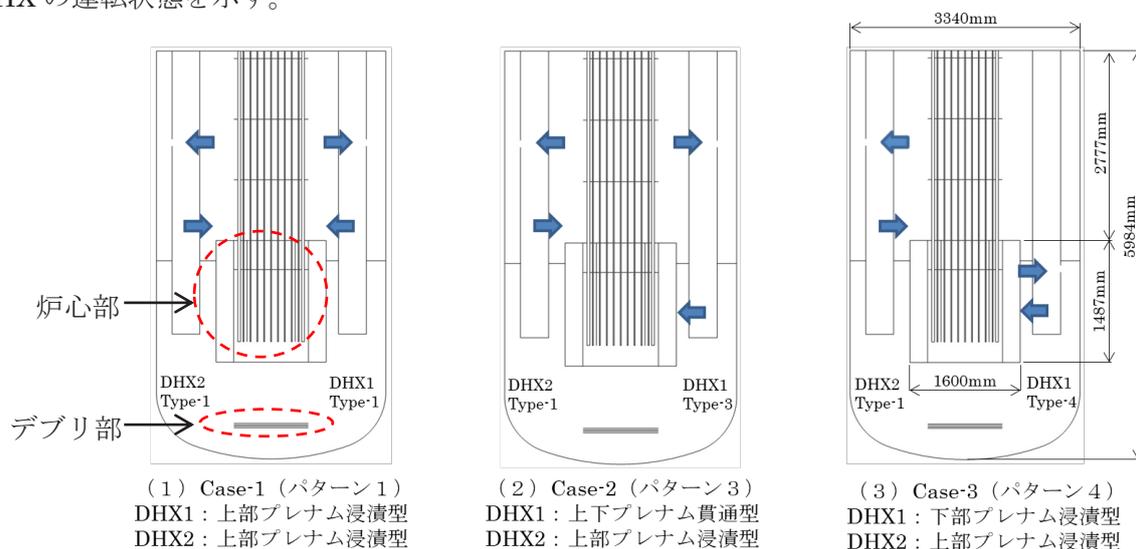


図 1 DHX の運転状態

この DHX の運転状態の影響を確認するため、メッシュ数 3,914,170 のモデルを用いて定常解析手法の一つである擬似時間進行法 (Pseudo Transient Options) により定常計算を行った。表 1 に解析ケースを示す。

表 1 解析ケース (定常計算 : RNG k-e)

ケース	発熱部 (kW)	DHX1 (kg/s)		DHX2 (kg/s)	
	炉心部/デブリ	吐出し流量	吸込み流量	吐出し流量	吸込み流量
Case-1	500/ -	0.1135×4	0.4539	0.1135×4	0.4539
Case-2	500/150	0.1494×4	0.5975	0.2269×4	0.9077
Case-3	500/150	0.1494×4	0.5975	0.2269×4	0.9077

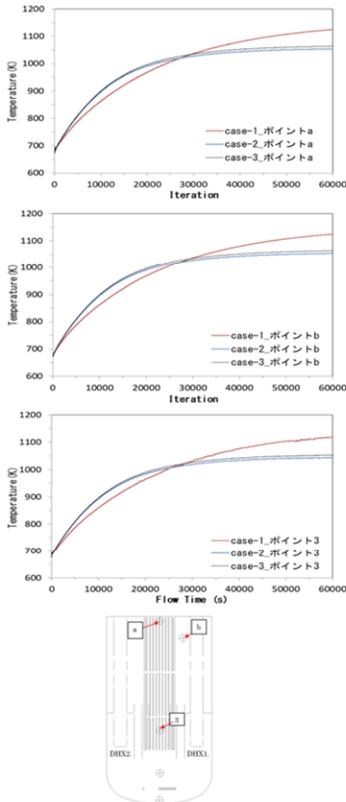


図 2 温度

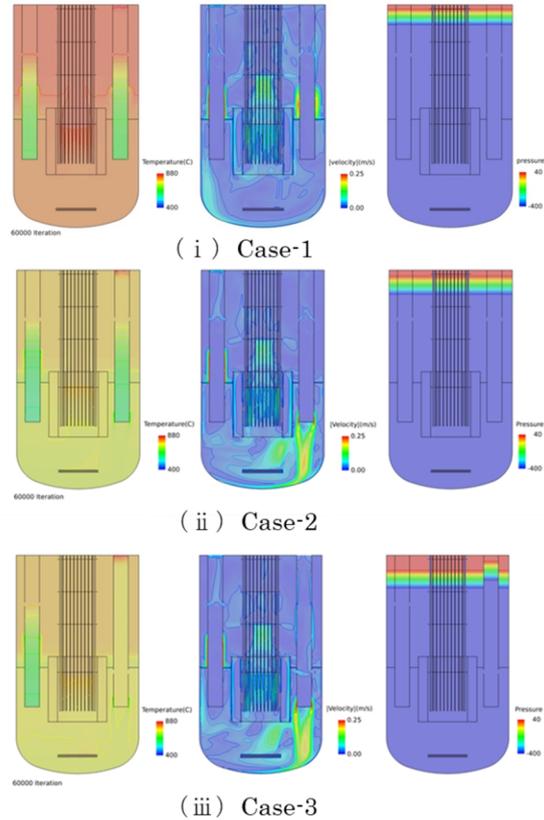


図 3 速度・温度・圧力分布

図 2 に炉内ナトリウム温度の計算結果を示す。60,000 Iteration 程度で定常状態が得られる。図 3 は炉内の速度・温度・圧力分布をそれぞれ示している。デブリ部の発熱にもかかわらず、下部プレナムを冷却する Case-2 と Case-3 では上部プレナムを冷却する Case-1 よりも温度上昇が抑えられる傾向が示されている。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

(4) 今後の利用予定:

平成 29 年度はモデルの動作確認として定常計算を実施した。今後はこの結果を初期条件とした非定常計算 (過渡計算) を実施する予定である。

5.10 もんじゅ運営計画・研究開発センター

Monju Project Management and Engineering Center

5.10.1 高速炉の供用期間中検査のための電磁場シミュレーション

Simulations of the In-service Inspection of FBR Components using Methods based on Eddy Currents

Mihalache Ovidiu

保全技術開発グループ

(1) 利用目的:

The simulations aim to validate multi-frequency algorithms based on eddy currents (ECT) using multi-coil ECT for FBR SG tubes in the presence or absence of sodium located on outer tube surface. In 2017 were conducted validations of multi-frequency algorithms with experimental data for multi-coil ECT using either only measurements or even mixed data (measurements and 3D FEM simulations) in the multi-frequency algorithm.

(2) 利用内容・結果:

Three dimensional finite element (3D FEM) simulations were conducted for in-service inspection (ISI) of steam generator (SG) tubes of FBR with sodium filling or not artificial defects located on outside surface of tubes. The simulation model take into account the full 3D complex geometry of helical ferromagnetic SG tubes in FBR with a complete 3D model of the tube support plate (SP), connected to the tube by steel rings.

In multi-frequency algorithm, the eddy currents at various frequencies are combined in order to suppress or minimize the combined signal from sodium and SP and to enhance the defect signal. The parameters of the algorithms change for each set of frequencies. Therefore 3D FEM simulations are used to identify, specifically for each algorithm, the optimum values of parameters that enhance the signal to noise ratio (S/N) of defect detection in the assumption that (OD) outside tube defects (located near tube SP) are filled with sodium in any unknown percentage (from 0% to 100%). The effect of window size band in the WMF (window multi-frequency) was studied using 3D simulations and then compared with data from measurements (Fig. 1) to validate 3D simulations at one frequency and also the optimum window band for multi-frequency ECT for higher S/N ratio as shown in Fig. 2, 3.

While the application of multi-frequency ECT algorithm using multi-coils using only 3D FEM simulations was shown in 2016, in 2017 the focus was to validate the multi-frequency ECT algorithms with experimental measurements.

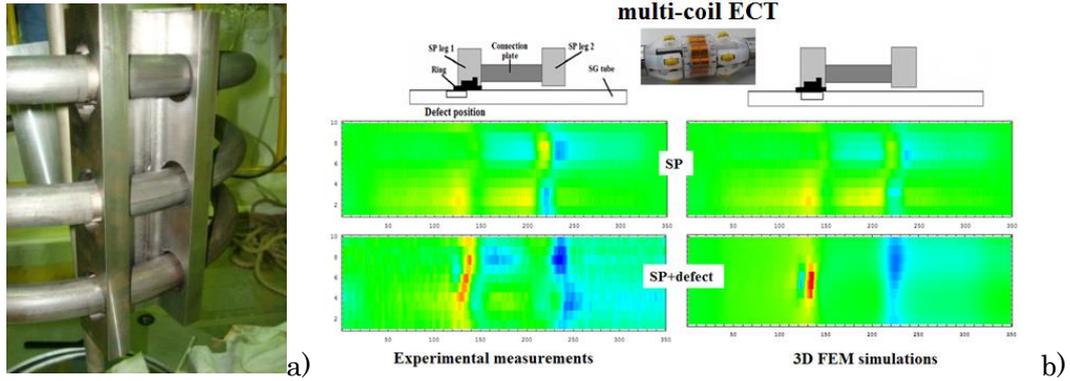


Fig.1 a) View of SG tubes and support plate; b) Comparison of 3D FEM simulations with measurements of ECT signal from SG tube support for a 10-channel multi-coils sensors in the RFEC system.

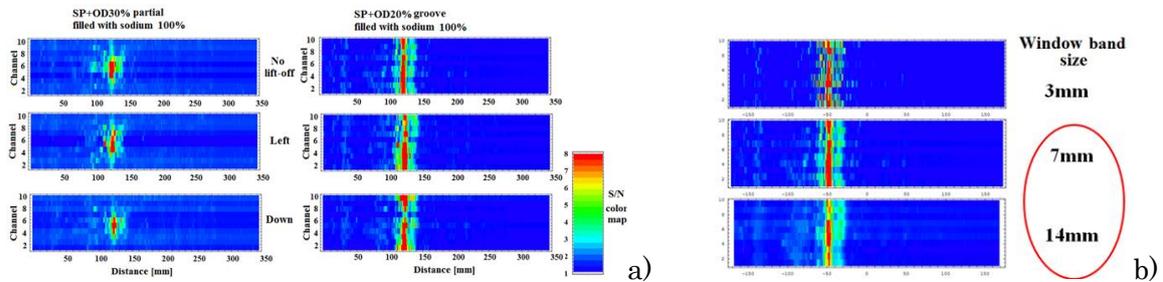


Fig.2 a) WMF using 3D FEM simulations of ECT signals; b) The effect of window band size on defect signal.

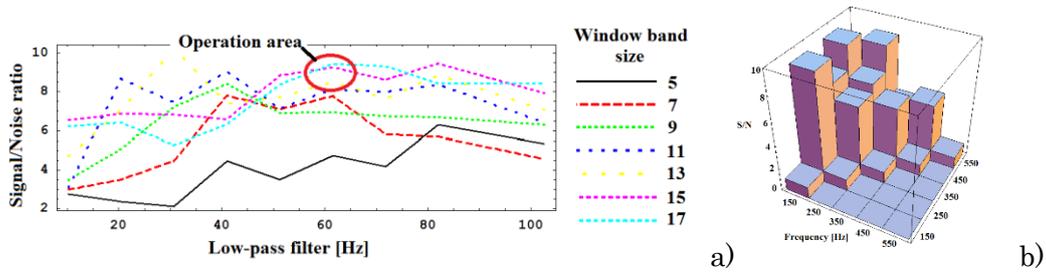


Fig.3 a) Influence of window band in dynamic WMF algorithm using measurements with a low-pass filter using 2-frequencies; b) Peak of S/N using 2-frequencies in dynamic WMF for measurements of partial OD30%tw near tube SP.

While in experimental measurements in a mock-up the ECT signal from SG tubes both signals from defects near tube SP or SP free of defects are known (and can be combined in the WMF algorithm), in the actual inspection of SG tubes of FBR only one measurement is available: the ECT data from coils scanning the SG tube. Therefore, it is not possible to know if the data is either a signal from a SP with sodium residue or a SP with a defect filled with sodium (in an unknown percentage) and located near SP. Therefore the focus was to show

that is feasible to use the multi-frequency algorithm with mixed data: the computed SP signal using 3D FEM simulations (used as a reference signal of SP without any defect) and experimental measurements (without knowing if there is a defect hidden under tube SP). Figure 4 presents the validation of the WMF using the above approach, before SG tubes were soaked in sodium, and it shows that SP signal is removed while signal from a partial OD near SP is enhanced with higher S/N ratio. The same results is shown also Fig. 5 for SG tubes with both partial OD and groove OD near tube SP after the tubes were soaked and drained of sodium, confirming the feasibility of WMF algorithms using mixed 3D FEM simulation-measurements data.

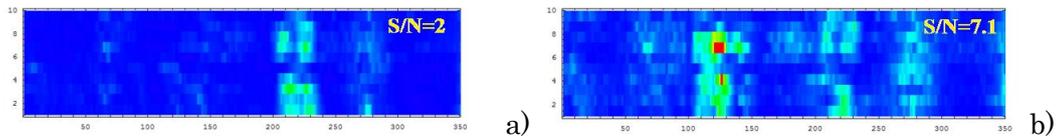


Fig.4 Validation of WMF using mixed FEM simulations-measurements to suppress SP (before sodium adherence): a) tube SP; b) partial OD30%tw near SP

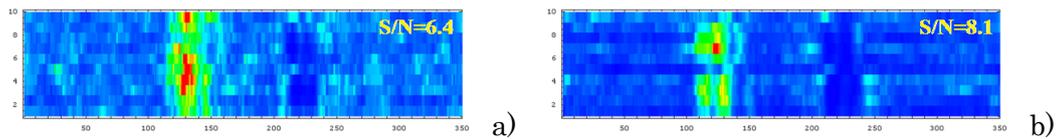


Fig.5 Validation of WMF using mixed FEM simulations-measurements to suppress SP and sodium signal (after sodium drain): a) groove OD20%tw near SP; b) partial OD30%tw near SP

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) O. Mihalache, T. Yamaguchi, T. Shirahama, M. Ueda, “Window Multi-Frequency ECT for Multi-coils in a RFEC System for FBR SG Tubes”, International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics, vol. Pre-press, No. Pre-press, pp.1-8, 2018.
- 2) T. Yamaguchi, O. Mihalache, M. Ueda, “Progress in Developments of an EMAT based on a Halbach Magnet System for FBR Vessel”, International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics, vol. Pre-press, No. Pre-press, pp.1-9, 2018.

(4) 今後の利用予定:

In the next year, numerical simulations will focus on two directions: 1st) feasibility of in-service inspection (ISI) using transient eddy currents for steam generator tubes covered by thick sodium layers at high temperature; 2nd) Testing the development of a new simulation code for electromagnetic acoustic sensor including coupling of eddy currents and ultrasonic waves for ISI of thick plates of reactor vessels.

5.10.2 格納容器内事象解析コード CONTAIN/LMR の整備(Ⅱ)

Development of Fast Reactor Containment Safety Analysis Code, CONTAIN/LMR, (II)

小野 功、清野 裕

ナトリウム安全・格納容器評価グループ

(1) 利用目的:

ナトリウム冷却高速炉の確率論的リスク評価手法の開発・整備の一環として、格納容器内事象解析コード CONTAIN/LMR (以下「CONTAIN」) を整備している。CONTAIN には、格納容器内で生じる様々な現象(ナトリウム及び水素燃焼、放射性物質移行挙動等)について、各々計算できる stand-alone コードが組み込まれており、これらをリンク・フィードバックしつつ計算を行っている。近年では、主にナトリウム-コンクリート反応、デブリ-コンクリート相互作用等の個別モデルについて整備・検証を行っている。現在、CONTAIN はステップ数で約 18 万となっており、①改良・拡張性の難しさ、②計算速度の遅さ、③数値計算の不安定性がコード全体としての課題となっている。

このため、平成 28 年度は、上記課題のうち①及び②の解決に向けて調査・整備等を行った。平成 29 年度は、③に係る調査・整備等を実施した。

(2) 利用内容・結果:

平成 29 年度における「プログラム開発整備」として、下記の(a)及び(b)の作業を実施した。

(a) プログラム整備

数値計算の安定性向上のためのプログラム整備として、任意の配列のモジュール間の整合性の調査・確認を行い、必要なソースコードの修正を行った。具体的には、モジュールの仮配列(配列の仮引数)での配列宣言子の最後の寸法宣言子の寸法上限を、“*”の擬寸法仮配列に修正して表記方法を統一した。また、今後の再修正を考慮して、極力一箇所にまとめて仮配列を宣言するよう修正した。

(b) 確認解析

上記(a)の整備が適切に行われていることを確認するため、高速炉のモデルプラントを対象にして解析を行った。整備前後の CONTAIN を使用した結果を比較し、両者が変わらないことを確認した。

実働期間が約 3 か月と短く、主目的の「数値計算の安定性向上」には至らなかったが、その準備作業を進めることができた。

(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

5.11 廃炉国際共同研究センター Collaborative Laboratories for Advanced Decommissioning Science

5.11.1 レーザーはつり除去加工中の現象把握のための解析手法の開発 (1)

Development of a Numerical Simulation for Phenomenon of Laser Processing Techniques Combined with Water Jet Techniques (1)

羽成 敏秀、山田 知典⁺¹、北村 竜明⁺²、高瀬 和之^{*1}

遠隔システム開発グループ

+1 遠隔分析技術開発グループ

+2 システム計算科学センター 情報システム管理室

*1 長岡技術科学大学 大学院工学研究科

(1) 利用目的:

東京電力ホールディングス株式会社福島第一原子力発電所の安全で確実な廃炉の実施は、国民の関心の高い課題になっている。この廃炉作業では、作業空間が高放射線環境下であり、人が容易に立ち入って作業を行うことが困難であるため、ロボット等の遠隔操作機器で作業を行う必要がある。レーザー技術は、出力密度制御、局所加工性、遠隔操作性に優れていることから、廃炉作業においても遠隔操作機器と組み合わせるツールの一つとして期待されている。

著者の所属する廃炉国際共同研究センターでは、日立 GE ニュークリア・エナジー株式会社及び株式会社スギノマシンと廃炉に資する炉内構造物及び燃料デブリ等の取出し技術に関する共同研究を行っている。その中で、レーザーとウォータージェットの各技術の強みを活かし、炉内構造物及び燃料デブリ等の取出しに有効な対象物を表面から連続して削り取って回収する除去技術（レーザーはつり除去技術）の開発を行っている。この除去技術は、レーザーと対象物の相互作用による相変化（溶融、凝固）やウォータージェットに用いている水の蒸発などを含む様々な現象が複合的に発生している。そのため、除去効率を向上させるためには、レーザーはつり除去過程の各相の現象を把握し、それぞれの相互作用を評価することが重要となる。本件は、このレーザーはつり除去の現象を評価するための解析手法を開発するものであり、レーザーはつり除去加工基礎過程の半定量的評価を実現し、レーザーはつり除去条件の最適化に資するものである。

(2) 利用内容・結果:

一般的なレーザー加工では、レーザー照射により対象物を溶融させ、その溶融物をガスの噴射により除去するが、本研究で進めているレーザーはつり除去加工では、溶融物を水の噴射により除去し回収するため、液相である水が与える影響の評価が重要となる。そこで、本解析手法の開発においては、まず汎用熱流体解析ソフト **Fluent** を利用した液相の沸騰現象の解析に着手した。固相壁面上に液相が一定の厚さで存在する系に対して気相と液相間の相変化現象として沸騰モデルを使用し、レーザー照射による伝熱面上の沸騰現象の基礎検討を行った。図 1 に解析モデル

を示す。解析モデルに対して計算格子は、均等な正方形に分割した。開発しているレーザーはつり除去加工の条件に従って気相は空気、液相は水とした。固相は解析モデルの空間スケールの妥当性を検証するために熱伝導率が鋼よりも大きい銅として計算した。レーザー照射を模擬するため、加熱は銅表面上のレーザー加熱位置に熱流束として入力した。モデルの簡単化のため、銅表面でのレーザーの吸収率を 1 としてレーザー出力から熱流束を計算した。また、解析モデルの計算時間の短縮及び時間スケールの妥当性を検証するために、レーザーの入熱密度は実験条件の 5.5 kW を 10^3 倍した 5.5 MW として解析を行った。

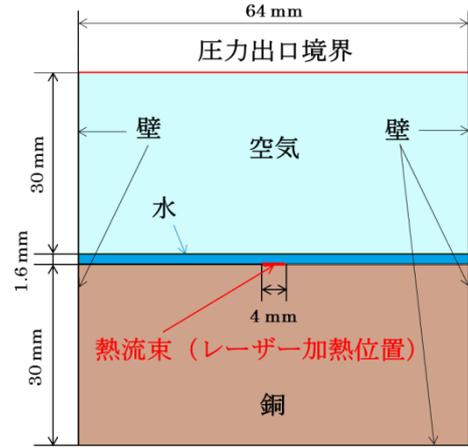


図 1 解析モデル

解析結果の一例として、水の体積分率の時間変化を図 2 に示す。図中の赤色は水の体積分率が 1、青色は体積分率が 0 (空気の体積分率が 1) となっている。レーザー入熱開始時の 0.0 ms (図 2(a)) では銅表面に一樣に分布している水が、1.5 ms (図 2(b)) では熱流束の入力部から蒸発していく様子が確認できる。そして時間経過に伴って水の蒸発量は増加し (図 2(c))、4.5 ms (図 2(d)) ではレーザー入熱箇所から水が消失して銅表面部分が露出していることが確認できる。このことから、解析モデルは金属 (銅) 表面上の水の蒸発現象を定性的に表現できており、計算格子の空間スケールも十分であると考えられる。今後は、実際に近い系の沸騰時の圧力変化等の現象把握を行うために、金属を鋼に変更し、レーザー出力を 5.5 kW として計算を行う。また、沸騰現象が発生している液相部付近の計算格子を密にすることで空間分解能を向上させ、より詳細な現象の解析を行う。

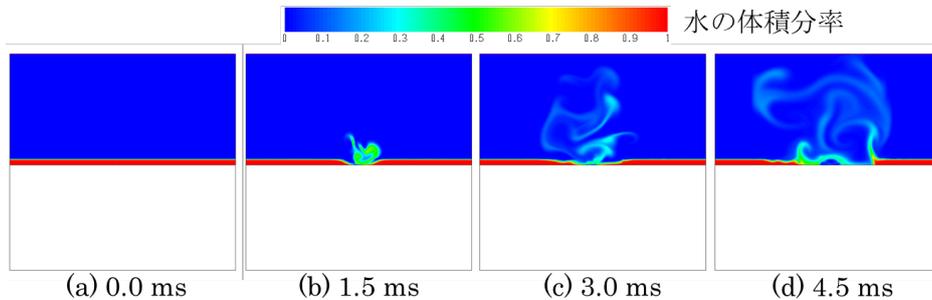


図 2 水の体積分率の時間変化

(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:

本報の結果を受け、後述の第 2 報「レーザーはつり除去加工中の現象把握のための解析手法の開発 (2)」では、解析モデルに対する計算格子の非等方化の検討を行った。この結果を受け、今後は実験との比較を視野に入れつつ、物体表面を流れる水流速度、物質の相変化、3次元性などが解析に及ぼす影響を明らかにするため、大型計算機システムの利用を予定している。

5.11.2 レーザーはつり除去加工中の現象把握のための解析手法の開発 (2)

Development of a Numerical Simulation for Phenomenon of Laser Processing Techniques Combined with Water Jet Techniques (2)

山田 知典、北村 竜明⁺¹、高瀬 和之^{*1}

遠隔分析技術開発グループ

⁺¹ システム計算科学センター 情報システム管理室

^{*1} 長岡技術科学大学 大学院工学研究科

(1) 利用目的:

東京電力ホールディングス株式会社福島第一原子力発電所の安全で確実な廃炉の実施は、国民の関心の高い課題になっている。この廃炉作業では、高線量などの理由により、人が近づいて作業を行うのが困難なため、ロボット等の遠隔操作機器と組み合わせた技術が必要不可欠である。レーザー技術は、出力密度制御、局所加工性、遠隔操作性に優れていることから、廃炉作業においても遠隔操作機器と組み合わせるツールの一つとして期待されている。著者の所属する廃炉国際共同研究センターでは、日立 GE ニュークリア・エナジー株式会社及び株式会社スギノマシンとの共同研究で、レーザーとウォータージェットの各技術の強みを活かし、炉内構造物及び燃料デブリ等の取出しに有効な対象物を表面から連続して削り取って回収する除去技術（レーザーはつり除去技術）の開発を行っている。本件は、このレーザーはつり除去の現象を評価するための解析手法を開発するものであり、レーザーはつり除去加工基礎過程の半定量的評価を実現し、レーザーはつり除去条件の最適化に資するものである。

(2) 利用内容・結果:

一般的なレーザー加工では、レーザー照射により対象物を熔融させ、その熔融物をガスの噴射により除去するが、レーザーはつり除去加工では、熔融物を水の噴射により除去し、回収するため、水の影響の評価が重要となる。従って、本解析手法の開発においては、まず汎用熱流体解析ソフト **Fluent** の沸騰モデルを利用した液相の沸騰現象の解析に着手した。この解析では、固相壁面上に液相が一定の厚さで存在する系に対し沸騰現象を模擬した解析を行い、レーザー照射による伝熱面上の沸騰現象を検討した。図 1 に解析モデル形状を示す。気相と液相間の相変化現象は、2次元モデルを、**ANSYS DesignModeler**（形状作成/修正）及び**ANSYS Meshing**（計算格子生成）を使用して作成し、代表的な伝熱面上の沸騰現象（サブクール沸騰）を評価、検討した。固相、液相、気相の各相は、それぞれ鋼、水、空気のパラメータとした。さらに、本解析では、第 1 報の「レーザーはつり除去加工中の現象把握のための解析手法の開発 (1)」で行った単純体系での検討結果を踏まえ、一様計算格子とバイアス係数を使用した複数ケースの計算格子（図 2 はバイアス係数 5.0）で解析を実施した。

図 2 の計算格子を用いた解析結果の一例を図 3 に示す。レーザー出力（加熱量）を 5.5 kW とし、60 ms のレーザー照射を行った結果である。図 3 (a) は水の体積分率である。青色は水の体積分率が 0（空気の体積分率が 1）であり、赤色は水の体積分率が 1（空気の体積分率が 0）である。レーザー加熱位置で色の変化が確認できるが、これはレーザー照射により水が蒸気に変化したことを示す。図 3 (b) は温度分布である。**Fluent** の仕様上、液相及び気相の体積分率が 0

となる箇所では飽和温度 (373.15 K) の値が表示される。本解析では沸騰現象に着目しているため、温度表示は最大 400 K としているが、固相はレーザー照射により、400 K 以上の高温となっていると考えられる。現状の解析では、固相の相変化を考慮していないため、この取扱いが今後の課題の一つである。図 3 (c) は流速分布である。レーザー加熱部を中心として流速が生じている様子が確認できる。図 3 (d) は圧力分布であるが、本解析では固相領域に対する圧力は求めている。これまでの解析により、液相の沸騰現象による固相への影響が小さいことが確認できたため、今後は液相に流れがある場合の影響や固相の相変化のモデル化が重要であることがわかった。

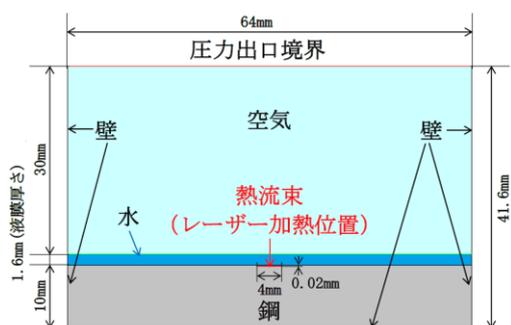


図 1 解析モデル形状

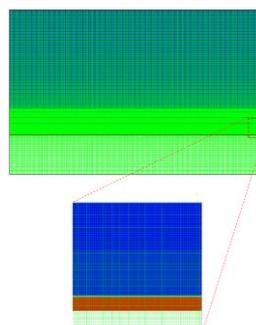
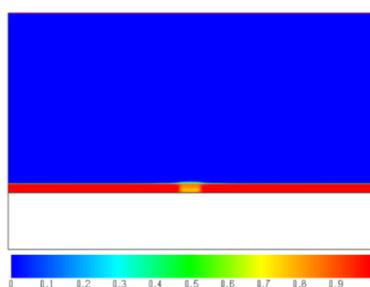
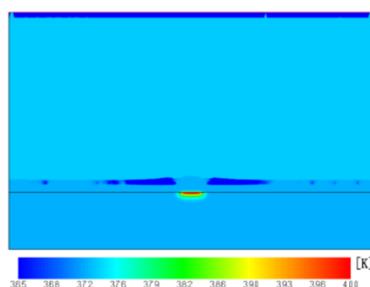


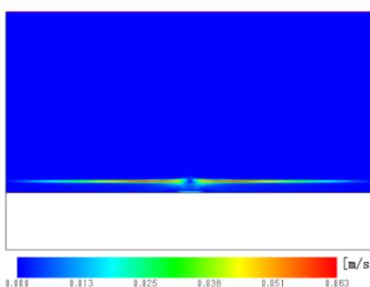
図 2 計算格子 (バイアス係数 5.0)



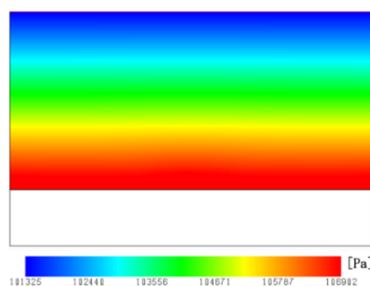
(a) 水の体積分率



(b) 温度分布



(c) 流速分布



(d) 圧力分布

図 3 レーザー出力 5.5 kW で 60 ms の照射を行った解析結果

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

(4) 今後の利用予定:

今後は、実験との比較を視野に入れつつ、物体表面を流れる水流速度、物質の相変化、3次元性などが解析に及ぼす影響を明らかにするため、大型計算機システムの利用を予定している。

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

5.12.1 粒界リン偏析過程の分子動力学シミュレーション

Molecular Dynamics Simulation of Grain Boundary Phosphorus Segregation Process

海老原 健一

シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

不純物や溶質元素の粒界偏析による脆化は、構造材料における突然の破断をもたらす原因となり、その機構の解明が望まれている。鉄中におけるリン原子は、このような粒界脆化を引き起こす元素の1つとして知られており、その粒界偏析に関する情報は原子炉圧力容器鋼の経年劣化を予測する上で重要となる。元素の粒界偏析を左右する重要な量は粒界偏析エネルギーであり、その値が第一原理計算によって広く評価されている。一方、近年、第一原理計算での評価値と実験データからの評価値が異なることが指摘されており、その原因として第一原理計算の精度が指摘されている。しかし、これは、元素の粒界偏析挙動の考え方に起因するものと思われる。また、リン原子の熱や照射による粒界偏析量の拡散レート方程式による評価において、粒界偏析挙動の適切な考察が必要であることも報告されている。これからのことから、鉄中のリン原子の各移動モードによる粒界への偏析過程、粒界の熱によるゆらぎの影響、粒界中でのリン原子の挙動などを分子動力学シミュレーションで調べる必要がある。このシミュレーションでは、粒界周辺での熱活性化過程に基づく原子の移動を観察するため、比較的長い時間ステップでの計算が必要であることから、大型計算機を利用した。

(2) 利用内容・結果:

42 Å × 97 Å × 49 Å の領域の y 方向中央に鉄原子による Σ3(111)対称傾角粒界を設定し、y 方向の領域の両端にはそれぞれ幅 6 Å 程度の真空領域を設定した。また、熱による粒界の移動を抑えるため、x、y 方向の両端の原子は固定した。まず、リンの場合の粒界のゆらぎを異なる温度において調べた。その結果、粒界が熱によって揺らぐことが観察された。次に、図 1 の水色点で示す粒界から離れた位置の 1 つに、リンを輸送する欠陥である侵入型リン原子、鉄とリンの混合格子間原子対、空孔とリンの複合体の内の 1 つを設定し、290°C におけるそれぞれの欠陥のリンの粒界への移動を調べた。この結果、それぞれの欠陥は粒界のほうへ移動する (図 2) が、いずれの場合も、粒界へ到達する前に、空孔や自己格子間原子が粒界に吸収され、リン原子は置換型になることが分かった (図 3)。

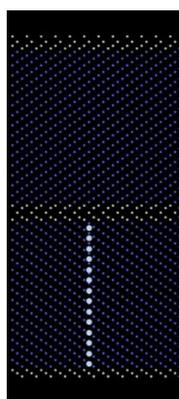


図1 リン輸送の欠陥の設定位置：青色粒子は、正規格子に並んだ鉄原子、白色粒子は正規格子からずれた鉄原子を表す。

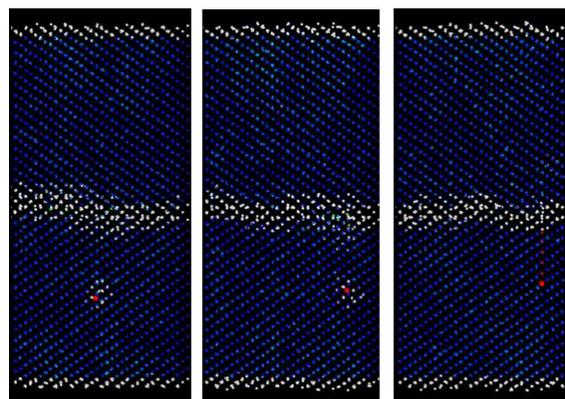


図2 侵入型リン原子の粒界への移動の様子：大きな粒子はリン原子を表す。赤色粒子は、初期位置より1格子間隔以上移動した原子を表す。

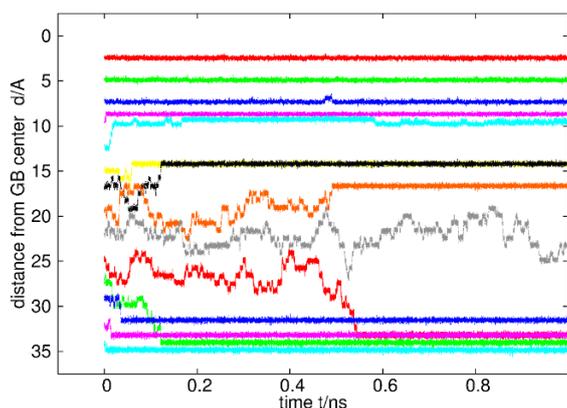


図3 リン原子の粒界中央から距離の時間変化（侵入型リン原子の場合）：各線における時刻0での位置は図1の水色の点の位置に対応している。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 海老原健一, 鈴木知明, 山口正剛, “分子動力学シミュレーションによる粒界リン偏析過程の考察”, 日本金属学会 2017 年秋期 (第 161 回) 講演大会 (札幌, 2017.9) .
- 2) K. Ebihara, T. Suzudo, M. Yamaguchi, “Simulation of Phosphorus Migration to Grain-boundary by Molecular Dynamics”, TMS2018, 147th Annual Meeting & Exhibition, Phoenix, Arizona, USA, 11-15 March (2018).

(4) 今後の利用予定:

今回の結果を詳細に理解するため、粒界周辺でのエネルギーの変化などを調べることを予定している。

5.12.2 照射材料の微細構造発達シミュレーションのための原子論的シミュレーション Atomistic Simulations for Microstructural Evolution of Irradiated Materials

鈴木 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变化の素課程で材料劣化に影響を与えるものに注目し、第一原理計算や分子動力学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。特に、以下の3つの課題を行った。

- A) 鉄クロム2元合金の相分離による硬化メカニズムの解明
- B) BCC金属中のらせん転位の移動キネティクスの解明
- C) タングステン合金の照射効果シミュレーション

(2) 利用内容・結果:

課題 A) 鉄クロム2元合金は様々な原子力機器で使用される高クロム鉄鋼材料のモデル合金であり、高温で時間経過とともに鉄相とクロム相に相分離して脆化するいわゆる475°C脆性を起こすことが知られている。この脆化の原因は相分離による硬化が原因であるが、その硬化の原子論的メカニズムが不明である。これまで、キネティックモンテカルロ法と分子動力学を用いてこの硬化のメカニズム解明研究を行ってきたが、計算機資源の制限によりシミュレーションの統計精度に問題があった。しかしながら現スパコンに更新されて以来、シミュレーションの空間サイズを大規模化し問題点の克服を試み、大幅な改善がみられた。この結果から、硬化はクロム原子同士の結合力が原因であるとの見通しを得た。

課題 B) 鉄やタングstenは重要な原子力材料でありBCC結晶構造を有している。そのような金属は低温で脆性的になるとされている。低温での変形はらせん転位の移動によるものだがそのキネティクスはよくわかっていない。特に、転位が間欠的に移動したり、温度が上がるにつれすべり面が変化したりする等の実験結果をシミュレーションで再現することができなかった。平成29年度は、分子動力学のポテンシャルや計算上の変形速度等、様々な条件の最適化に努め、上記2つの現象を再現することができた。(図1)

課題 C) 照射下のタングsten材では、レニウムやオスミウムなどの核変換元素が照射効果を軽減することが知られており、報告者は以前、このメカニズムの有望な理論を提案した。この理論に従えば、ほかの元素でもある条件を満たせば照射効果を軽減できるはずである。そこで、

多くの元素に関してこの条件を満たすかどうかを第一原理計算から解析した。その結果、チタン、クロム、バナジウムがこの条件を満たすことがわかり、照射実験等で確認する必要があることが分かった。

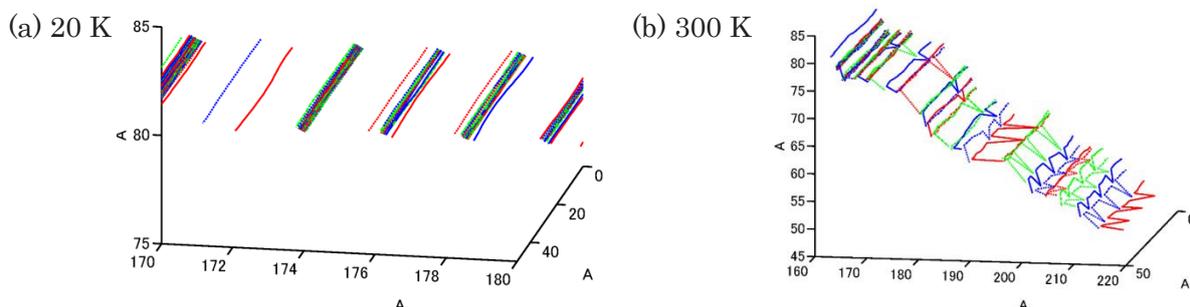


図1 鉄中のらせん転位の移動。温度が上がるとz面平行な $\{110\}$ 面から変わって、 $\{112\}$ 面で滑ることが実験的に確認されている。この現象を分子動力学で再現することに成功した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) J. Marian, C. S. Becquart, C. Domain, S. L. Dudarev, M. R. Gilbert, R. J. Kurtz, D. R. Mason, K. Nordlund, A. E. Sand, L. L. Snead, T. Suzudo, B. D. Wirth, “Recent advances in modeling and simulation of the exposure and response of tungsten to fusion energy conditions”, Nuclear Fusion, vol.57, No.9 (2017) p.092008-1.
- 2) T. Suzudo, “How rhenium and osmium in tungsten crystals suppress radiation induced defects”, MRS 2017 Spring Meeting, Phoenix, AZ, April (2017) (招待講演) .
- 3) T. Suzudo, T. Tsuru, A. Hasegawa, “First-principles study of solvent-solute mixed dumbbells in body-centered-cubic tungsten crystals”, J. Nuclear Materials, vol.505 (2018) pp.15-21.
- 4) T. Tsuru, T. Suzudo, “First-principles calculations of interaction between solutes and dislocations in tungsten”, Nuclear Materials and Energy, vol.16 (2018) pp.221-225.
- 5) K. Nordlund, S. Zinkle, A.E. Sand, F. Grangerg, R.S. Averback, R. Stoller, T. Suzudo, L. Malerba, F. Banhart, W.J. Weber, F. Willaime, S. Dudarev, D. Simeone, “Improving atomic displacement and replacement calculations with physically realistic damage models: arc-dpa and rpa”, Nature Communications, vol.9 (2018) p.1.
- 6) K. Nordlund, S. Zinkle, A.E. Sand, F. Grangerg, R.S. Averback, R. Stoller, T. Suzudo, L. Malerba, F. Banhart, W.J. Weber, F. Willaime, S. Dudarev, D. Simeone, “Primary radiation damage: A review of current understanding and models”, J Nucl Mater., vol.512 (2018) pp.450-479.
- 7) T. Suzudo, “Modeling of solute effects on radiation damage in W-based alloys”, COSIRES2018, Shanghai, China, June (2018) (招待講演) .

(4) 今後の利用予定:

課題 A および B に関しては、追加の計算を行いこれまで得られた結果の解釈を確認し、論文投稿する。課題 C に関しては、溶質元素の機械的性質におよぼす影響を第一原理計算から解析していく。また、新たに分子動力学等を用いた破壊(き裂進展)のシミュレーション法を確立していく。

5.12.3 第一原理計算による原子力材料劣化機構の研究

First-principles Study on the Degradation of Nuclear Reactor Steels

山口 正剛

シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

原子炉材料の問題として、中性子照射を受けた圧力容器鋼が脆くなっていく照射脆化、冷却水中の腐食環境における炉心シュラウドの応力腐食割れ等がある。これら材料劣化現象の原子・電子レベルの振る舞いはよく理解されておらず、科学的根拠に基づく劣化予測が不足している。そのため、計算機の発展とともに近年になり大きな進歩を遂げた物質の電子構造計算法である第一原理計算などの材料計算科学手法を活用し、材料劣化現象の原子レベルからのメカニズム解明に貢献し、原子炉材料劣化予測の高度化に資することを目的とする。

照射脆化や応力腐食割れは様々な材料因子、環境因子に影響される複雑な現象である。そのため計算科学研究の対象としては、基本的要素である次の2つの現象に着目し、

- ①中性子照射によって生じる不純物偏析が引き起こす粒界脆化
- ②腐食環境において生じる鉄鋼材料の水素誘起粒界破壊及び擬劈開

を主な研究対象とする。

(2) 利用内容・結果:

下記では、本年度に行った主な研究である、軽元素 (B, C, N) が粒界に及ぼす影響に関する結果について記述する。

OB, C, N の鉄粒界における偏析エネルギー等

Cは鉄鋼には必ず含まれる元素であり、Bは微量でも粒界を強化する性質をもつことが知られている。今回は鉄鋼材料中の軽元素 (B, C, N) の粒界偏析エネルギー及び表面偏析エネルギー、及び、粒界凝集エネルギー変化を計算した。さらに、過去には行えなかった数種類の粒界において計算を行うことにより、粒界性格によるばらつきを考慮した。

Fig.1 に粒界構造の模式図と、低電子密度領域を示した図を示す。粒界付近では結晶構造の乱れにより、空隙が生じている。その様子を示すため、電子密度の低い領域を等電子密度面を用いて示した。エネルギーの低い $\Sigma 3(112)$ 双晶境界では低電子密度領域がほとんどないことが分かる。他の粒界はその形状は異なるが、ある程度の大きさの領域が生じていることがわかる。

Fig.2 に計算結果を示す。6種類の粒界とその破面における計算結果を示している。 $\Sigma 3(112)$ 粒界は、エネルギーの低い双晶境界であり特殊である (Fig.2(a))。他の粒界はほぼ同じ粒界エネルギーを持っている。これらの粒界の破面の表面エネルギーは、ほぼ同程度である (Fig.2(b))。表面偏析エネルギーと粒界偏析エネルギーの差である脆化エネルギーを Fig.2(c) に示す。

実験的にも知られるように B と C は粒界を強化することが示された。N の粒界偏析による影響は実験的には知られていないが、計算では偏析すれば脆化の方向に寄与することが分かった。粒界エネルギーの低い双晶境界のような場合、粒界偏析エネルギーは小さくなった。一方、粒界エネルギーが大きくほぼ同じ程度の幾つかの粒界においては、粒界偏析エネルギーのバラ付きが50%程度あり、粒界エネルギーの差は小さくても粒界性格への依存性が強いことが分かった。一方、表面偏析エネルギーの表面指数に対する依存性は小さかった。

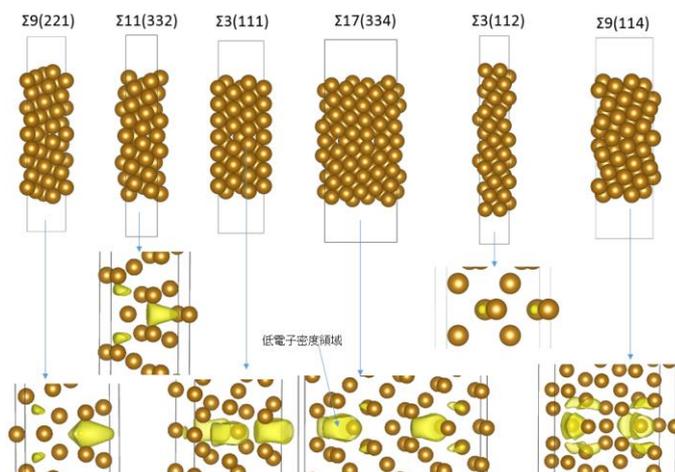


Fig.1 6種類の結晶粒界と、粒界付近の低電子密度領域。

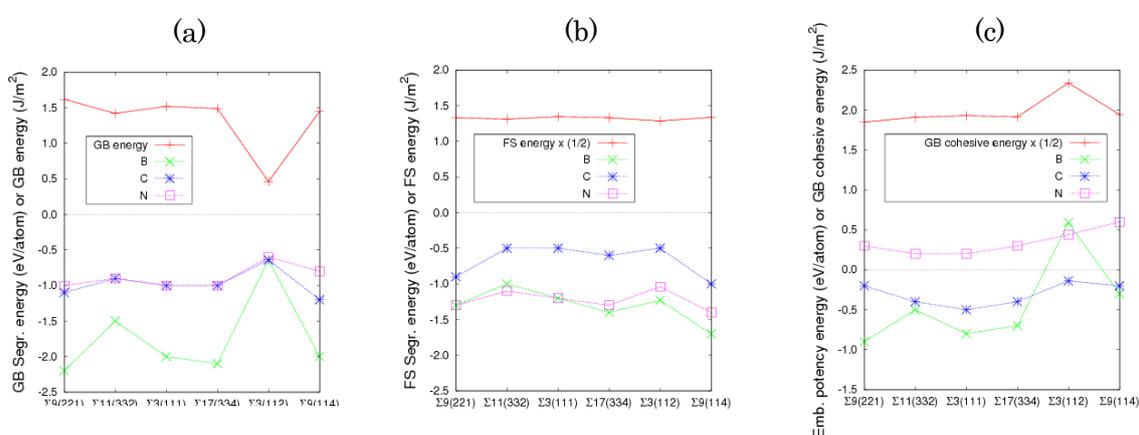


Fig.2 B, C, Nの粒界偏析エネルギー (a)、
表面偏析エネルギー (b)、脆化能エネルギー (c) の計算結果

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) M. Yamaguchi, “Combined analysis of first-principles calculations and fracture mechanics experiments on intergranular embrittlement of a Ni-Cr steel”, The 5th International Symposium on Steel Science (Kyoto, Japan, November 13-16, 2017) (国際会議招待講演) .
- 2) 山口正剛, 板倉充洋, “転位及び粒界と C,N の相互作用：第一原理計算”, 日本鉄鋼協会軽元素シンポジウム, 2018年3月21日, 千葉工大.
- 3) 山口正剛, 海老原健一, 板倉充洋, “金属表面の水素による表面エネルギー低下：第一原理計算”, 日本鉄鋼協会学術講演会, 2017年9月, 北大.

(4) 今後の利用予定:

引き続き、原子力材料劣化機構解明のための計算を進める。

5.12.4 高温水中多価アルコール脱水反応の第一原理メタダイナミクス計算

Ab Initio Metadynamics Calculations of Polyalcohol Dehydration Reactions in Hot Water

志賀 基之

シミュレーション開発室

(1) 利用目的:

著者は、科研費基盤研究 C「水を反応場とするグリーンケミストリーの計算化学」の一環として、東京大学新領域創成科学研究科と協力し、多価アルコール脱水反応の理論的研究を行っている。この反応は、有機溶媒や触媒などの有害物質を全く用いずに、高温水中で立体選択性を制御できることから、近年関心を集めている。本研究では、大規模な第一原理メタダイナミクス計算を用いて、今まで知られていなかった反応機構を解明し、遷移状態など、実験では得られない微視的反応過程に迫る。

水溶液中の化学反応を実験と同じ熱力学的環境で計算を行うためには、電子状態計算と原子の運動方程式を同時に解き、発生確率の低い遷移状態を捉えて反応の自由エネルギー障壁を正しく評価する必要がある。これを可能とする第一原理メタダイナミクス計算には、超並列大型計算機による支援が不可欠であった。

(2) 利用内容・結果:

本研究では、1,2,5-Pentanetriol (PTO) の脱水反応を対象とした (図 1)。

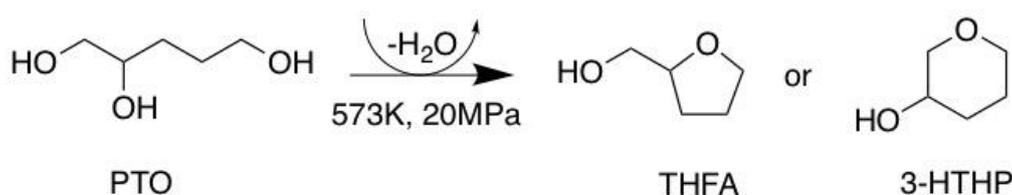


図 1 PTO の脱水反応

この反応経路には、四つの可能性が考えられるが (図 2)、このうち 5PTO2 について、先行実験と同じ熱力学的条件 (573K、20MPa) のもとで計算を行った。原子力機構で独自に開発された分子シミュレーションソフトウェア PIMD を用いて、第一原理メタダイナミクス計算と電子状態計算を同時に行った。系は PTO 分子、水 30 分子、および HCl 分子からなり、周期境界条件を課したものを採用した。HCl を入れたのは水溶液を酸性にするためである。電子状態計算には、VASP コードによる平面波密度汎関数法を用いた。汎関数は PBE-D2 とし、コア電子は PAW 法で扱った。自由エネルギー計算には、反応を特徴づける集団座標を次のように三つ選んだ。すなわち、1) PTO 分子のコンフォメーションに関わる C-C-C-O 二面角 Φ 、2) OC, CO 結合

交替に関わる結合距離の差 d 、3) OH 基のプロトン化に関わる配位数 n の三つである (図 3)。第一原理メタダイナミクス計算は 0.25 fs 刻みで行った。5PTO2 反応の遷移状態を検出するのに 46 ps 要した。

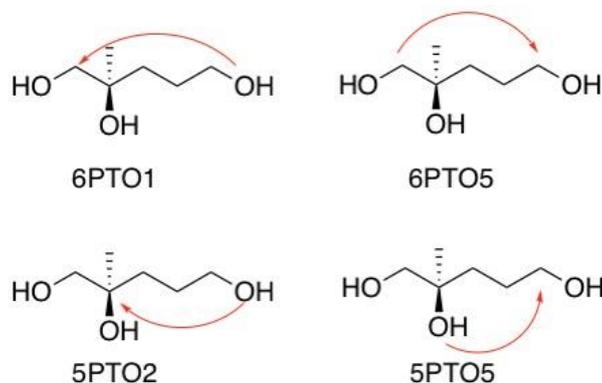


図 2 PTO の脱水反応経路

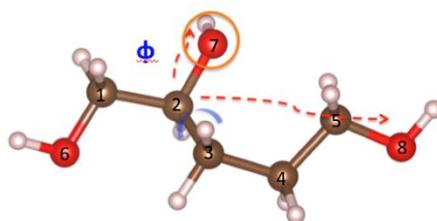


図 3 二面角 Φ (青矢印で示した C-C 結合の回転)、結合距離の差 d (赤点線で示した CO-OC 距離の差)、配位数 n (赤丸で示した O への H 配位数)

5PTO2 経路の自由エネルギー計算の結果を図 4 に示す。自由エネルギー面上の鞍点である遷移状態は $\Phi = 160$ 、 $r = 0.0$ 、 $n = 2.0$ 付近に現れた。その自由エネルギー値は PTO に比べて 34.5 kcal/mol ほど高く、これが反応自由エネルギー障壁に相当する。

遷移状態において、 $r = 0.0$ は一方の OH 基が C を攻撃し、もう一方の OH 基が水分子となって放出する過程で CO-OC 結合が交替していることに対応している。また、 $\Phi = 160$ は C-O-C が直線状になっていることに対応する。 $n = 2.0$ は OH 基がプロトン化されて OH_2^+ になっていることに対応し、プロトンの供給は水溶液から水素結合網を介したリレーで行われる。すなわち、この反応は OH のプロトン化に続く $\text{S}_{\text{N}}2$ 反応であることを表している。これは、図 4 に示す遷移状態の特徴的な分子構造と合致している。また、鞍点は一つであることから、プロトン化と $\text{S}_{\text{N}}2$ 反応の間には安定な中間体がなく、反応の進行にはプロトン化と $\text{S}_{\text{N}}2$ 反応が連動しなくてはならないことがわかる。また、反応は $n = 2.0$ で起こり、 $n = 1.0$ のままでは起こらないことは、OH のプロトン化によって反応障壁が低下することをほのめかしている。このことは、反応が酸性条件で加速するという実験結果にかなっている。

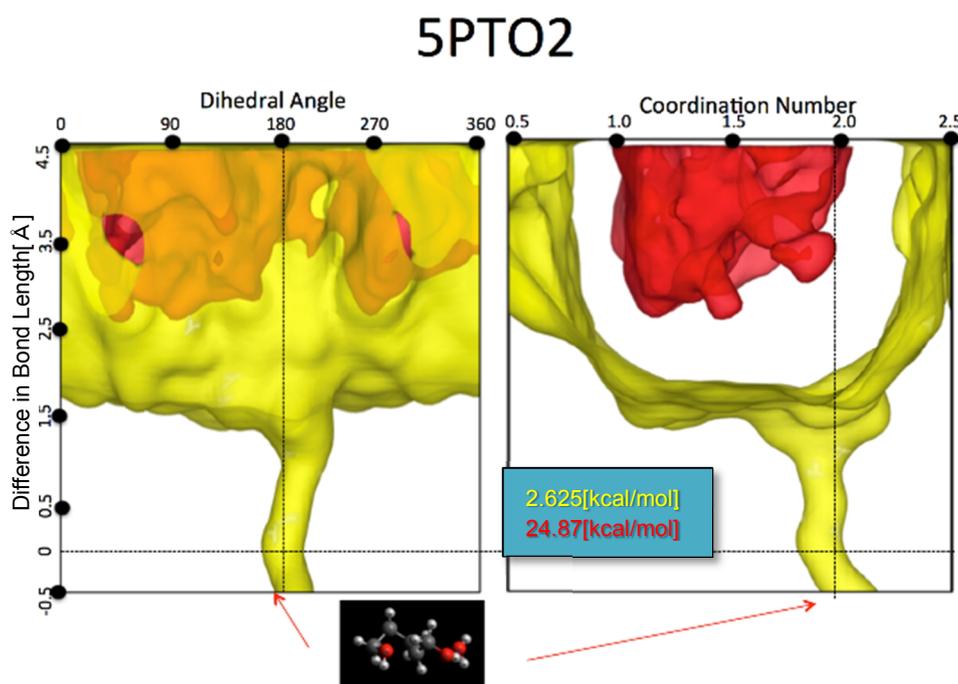


図4 5PTO2 経路の自由エネルギー面

最後に、 S_N2 反応に伴って五員環が閉じて水分子が放出されたのち、水の水素結合網を介して脱プロトン化が自発的に起きて反応が終了する。こうして、水の水素結合網が反応に重要な役割を果たすことが示された。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 志賀基之, “溶液反応の計算法: ポリアルコール脱水反応を例として”, 岩手大学理工学部 応用化学・生命理工学科セミナー (2018/3/16) (依頼講演).
- 2) M. Shiga, “Ab initio simulations of hexanediol dehydration reaction in water”, Indo-Japan Conference: New Insights into Multifunctional Catalysis for Biomass Transformations, National Chemical Laboratory, Pune, India (2018/1/18) (招待講演).
- 3) M. Shiga, “Free Energy Landmark Search For Chemical Reactions”, Recent Advances in Modelling Rare Events 2017, Agra, India (2017/12/7) (招待講演).

(4) 今後の利用予定:

今後は、上記図2で示した5PTO2以外の三つの反応経路でも計算を続ける。また、ブルームーン法などを併用して反応自由エネルギー障壁の計算精度を高める。これを達成するには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。

5.12.5 材料機能における核量子効果の計算科学研究

Computational Studies for Quantum Nuclear Effects in Functional Materials

町田 昌彦、志賀 基之、中村 博樹
シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

本研究課題では、液体相と固体相を対象に原子核量子効果を考慮したシミュレーション手法を利用し、対象とする物性を高精度に計算することで各分野の課題解決に貢献する。以下に3つの対象物質群を記す。

① 液体相（水の同位体：トリチウム水の高精度物性計算）:

福島第一原子力発電所の事故以後、大量の汚染水問題が取り沙汰されてきたが、現在は、トリチウムを除くほぼ全ての核種の分離が可能な状態となっており、トリチウムの処理法の確立は、残された課題でとなっている。そこで、トリチウム水の物性を正確に理解することが重要であるが、トリチウムは水素の同位体であり核量子効果を考慮する計算科学手法がその物性理解に必須となる。本課題では、水との分離に必要な物性の微妙な違いを明らかにし、効率的分離を可能にする技術開発に貢献すべく計算科学技術の研究開発を実施する。

② 固体相（超伝導体、イオン伝導体）:

常温・常圧で固体相を取る材料は様々な工学的用途を持ち、その機能の充実こそが原子力分野やその他の産業を進歩させる大きな力となる。本課題では、固体機能材料として二つの重要な材料である超伝導体とイオン伝導体を主たるターゲットとする。

i) 超伝導体: 超伝導体は、原子力分野では加速器にて超伝導コイルが用いられている一方、高精度な放射線検出器は主に超伝導を利用しており、その利用は広範囲に及び、超伝導転移温度の上昇は、その適用範囲を更に大きく拡大させる。本研究では、平成27年に最も高い超伝導転移温度（約200K）を示した H_2S に着目する。当該物質では、高温超伝導の起源が含有する水素（H）の振動にあり、核量子効果が大きな影響を持つことから、本課題が対象とする核量子効果の計算科学研究手法の恰好な材料であり、高压条件を必要としない新たな材料を考案するのが本課題の最終目標となる。

ii) イオン伝導体: イオン伝導体とはイオンが伝導する固体の総称だが、そのイオンがリチウムの場合には、固体二次電池の開発に欠かせない材料となり、自動車メーカーやその他の企業が研究にしのぎを削っている先端材料である。このように重要な戦略的材料であるイオン伝導体だが、原子力分野でも、幾つかの適用先がある。中でも最も重要な一つは大量の Li^6 を燃料として必要とする核融合分野であり、 Li^6 のみの選択的収集が求められている。本課題提案者らは、リチウムイオン伝導体の開発に当って、QST（連携当初は原子力機構内・核融合部門）及びトヨタ自動車と平成27年度後半から共同研究を開始した。

(2) 利用内容・結果:

① 液体相（水の同位体、トリチウム水の高精度物性計算）:

トリチウム水を水及び重水から分離するため、蒸留等の基本技術が提案され、その実装展開の

ための技術開発が進められてきたが、その効率に大きな課題がある。そこで、最近ではナノ構造を利用した原子レベルの抜本的分離法の開発も考えられているが、原子レベルのダイナミクスを正確に理解する必要があり、第一原理計算等のシミュレーションの重要性が指摘されてきた。本課題では、第一原理計算を用いた分子動力学に対し、更に原子核の量子効果を考慮した経路積分第一原理分子動力学法を準備し、水、重水、トリチウム水の構造の違いを明らかにするシミュレーションを行った。その結果、水、重水、トリチウム水（世界で初めて）の詳細な動径分布関数を取得し、水素、重水素、トリチウムが各々、分子本体から隣接する分子に向けて移動する傾向の違いがあること等を初めて明らかにすることに成功した。この成果は *Journal of Chemical Physics* に掲載された。

② 固体相（超伝導体、イオン伝導体）：

i) **超伝導体**：本研究では、平成 27 年に最も高い超伝導転移温度（約 200K）を示した H_2S に対するシミュレーション研究を進めた。 H_2S は転移温度こそ極めて高いが、その実現には高压条件を必要としており、応用上の難点がある。しかし、その超伝導の起源が含有する水素（H）の振動にあるため核量子効果は最も重要な考慮すべき物理である。本課題では、液体相の研究にて開発した経路積分第一原理分子動力学法を用いて高压下での相転移に対する詳細なシミュレーションを行った。また、高压を必要とせず超伝導転移温度を上昇させるためには、核量子効果を更に先鋭化する必要があることから、核量子性をパラメータとして相転移がどう変化するかについてシミュレーションを行った。結果については論文として取りまとめている。

ii) **イオン伝導体**：リチウムイオン伝導体では、リチウムが輸送されるが、その原子番号は小さいことから核量子効果が重要であるが、これまで全くその効果は考慮されていない。本課題でも液体相の研究にて開発した経路積分第一原理分子動力学法を用いて、リチウムの伝導経路を調べた。量子効果は、それを考慮しない場合と比べて新たな経路にも浸み出すことをもたらし、伝導性を定量的に高精度に調べるためには、上記の手法が欠かせないことを明らかにした。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等)：

査読付き論文

- 1) M. Machida, K. Kato, M. Shiga, “Nuclear quantum effects of light and heavy water studied by all-electron first principles path integral simulations”, *Journal of Chemical Physics*, vol.148, No.10, pp.102324_1-102324_11 (2018).

学会発表

- 2) K. Kato, M. Machida, M. Shiga, “Nuclear quantum Effects of Light and Heavy Water studied by PIMD”, CPIMD 2017 Workshop (2017, November, Tsukuba).
- 3) 加藤幸一郎, 町田昌彦, 志賀基之, “水における原子核量子効果：第一原理経路積分分子動力学法による軽水・重水の構造の比較”, 応用物理学会秋季学術講演会 (2017年9月, 福岡).

(4) 今後の利用予定：

平成 29 年度実施した課題を 30 年度も引き続き継続して行う。

5.12.6 福島第一原子力発電所港湾内の放射性物質動態解析シミュレーション

Simulation for Radioactive Nuclide Transport Inside the Harbor in Fukushima Daiichi Nuclear Power Station

山田 進、町田 昌彦
シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

福島第一原子力発電所（1F）事故発生以来、国・東京電力ホールディングス株式会社（東電）は、港湾への放射性物質の直接漏洩を抑止すべく、様々な対策工事を次々と実施してきたが、事故後7年近く経った今でさえも、港湾内の核種濃度は事故前のレベルには至っておらず、その量は事故当初と比べて大きく減少したが、何らかの放射性核種の流出が続いていることが知られている。本申請における解析では、東電がほぼ毎日公開している港湾内モニタリングデータとメートル単位の格子間隔で実施する大規模並列シミュレーション技術を使って、1F サイトからの放射性核種の流出について、その量とその流出箇所を推定し、可能であれば流出要因をも割り出すことを目標に据える。また、国・東電により実施されてきた様々な対策工事による効果についても評価し、可能な限り、流出を効果的に抑制するための低減策についての提案も行うことを視野に入れて研究を実施する。

また、過去や現状の放射性物質の拡散を評価するだけでなく、様々な条件下での放射性物質が港湾内に流入するシミュレーションをあらかじめ実施し、その動態を予測することで、それに合わせた適切な対策を予め提案することも可能になると考えられ、将来のポテンシャルリスクの評価についても実施する予定である。これらのシミュレーションから得られる情報を適切に利用することで、1F の廃炉作業中に様々なアクシデントが発生しても、影響を最小化することが可能となる一方、外洋への影響を評価することで、福島沿岸での安全な漁業の操業の可否を判断するための情報の1つを提供できると考えられる。

(2) 利用内容・結果:

1F の汚染水による海洋汚染に関する研究では、外洋の影響を考慮したシミュレーションを実施するため、図1のようにメッシュサイズの異なる領域を入れ子に配置したネスティングを用いたシミュレーションコードを開発し、このコードを用いて、放射性物質の流入地点を1F 港湾内および港湾外に設定したシミュレーションを実施した。その結果、図2に示すように港湾内に流入した場合は長時間港湾内に滞留しているが、港湾外に流入すると図3のように短時間で広範囲に拡散することがシミュレーションにより示すことができた。さらに、港湾外に流入させても、その一部は港湾口から港湾内に流入することがシミュレーションにより確認できた。これらの結果から、1F 港湾は放射性物質を滞留させる効果があること、および、港湾外に存在している放射性物質も海水の流れによっては港湾口から港湾内に流入することが確認できた。特に後者の成果は、現在は港湾内に流出している放射性物質濃度が減少しているため、シミュレーションにより港湾内の放射性物質濃度を評価する際には、港湾口から流入する放射性物質の影響も考慮する必要があることを示している。

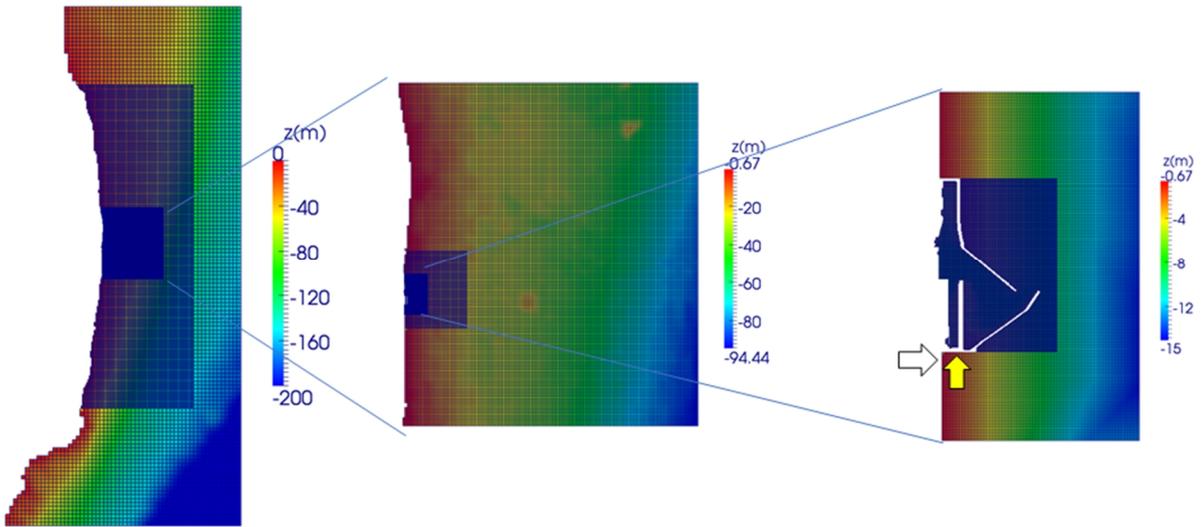


図1 福島第一原子力発電所の港湾を含む領域をメッシュサイズの異なる領域を入れ子構造に配置する。

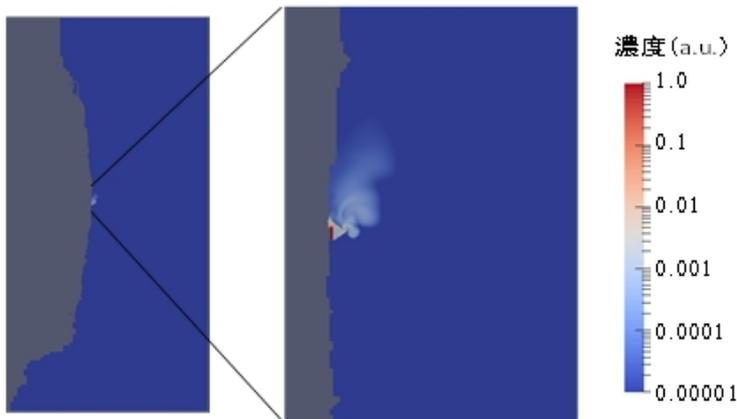


図2 放射性物質が流入する位置を港湾内（開渠部奥）に設定した際の放射性物質の振る舞い。多くが港湾内に滞留していることが確認できる。

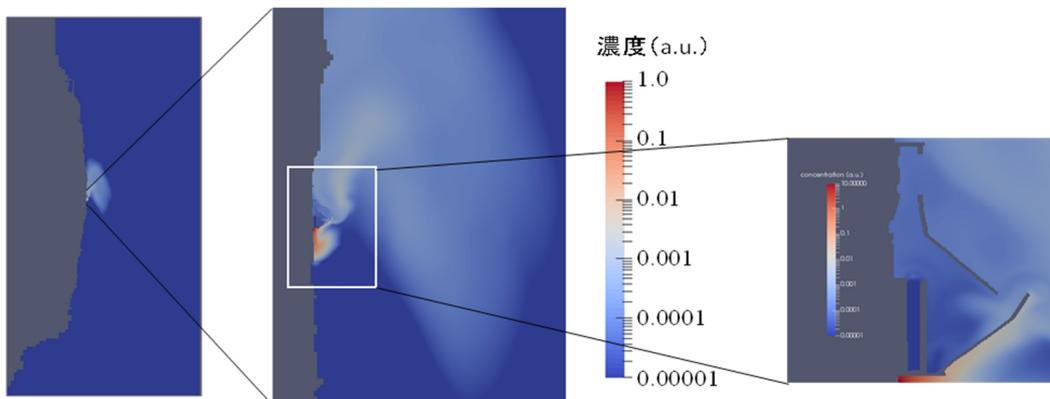


図3 港湾外に流入した場合の濃度分布。港湾内に流入させた場合よりも広範囲に分布していることが確認できるとともに、港湾内にも流入していることが確認できる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

査読付き論文

- 1) S. Yamada, T. Imamura, T. Ina, N. Sasa, Y. Idomura, M. Machida, “Quadruple-precision BLAS using Bailey's arithmetic with FMA instruction; Its performance and applications”, Proc. of IPDPS17 Workshop, pp.1418-1425, 2017.
- 2) S. Yamada, T. Imamura, M. Machida, “Communication avoiding Neumann expansion preconditioner for LOBPCG method: Convergence property of exact diagonalization method for Hubbard model, Advances in Parallel Computing”, vol. 32, pp.27-36, 2018.
- 3) S. Yamada, T. Imamura, M. Machida, “High Performance LOBPCG Method for Solving Multiple Eigenvalues of Hubbard Model: Efficiency of Communication Avoiding Neumann Expansion Preconditioner, Lecture Notes in Computer Science”, vol.10776, pp.243-256, 2018.

学会発表

- 4) 町田昌彦, 山田進, 渡辺将久, “福島第一原子力発電所港湾を含む沿岸域における放射性核種の環境動態”, 日本原子力学会「2017年秋の大会」(北海道大学), 2017年9月13日.
- 5) 町田昌彦, 山田進, 渡辺将久, “福島第一原子力発電所港湾内の放射性核種の環境動態: 沿岸域を含めた環境影響評価の取り組み”, 日本原子力学会「2018年春の大会」(大阪大学), 2018年3月28日.

(4) 今後の利用予定:

今回のシミュレーションで港湾外から海洋に流入した物質が港湾内に流入することが確認できた。このことは、排水路等を経由して港湾内に流入する量が減少している現状においては、港湾内での動態を評価するためには、この量も考慮する必要がある。そのため、河川経由で海洋に流入した物質の港湾への影響をシミュレーションにより評価する予定である。

5.12.7 転位と溶質元素の第一原理計算

First-principles Calculations of Interaction between Dislocation 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:

現在、稼働 35 年を超える軽水炉の圧力容器鋼脆化がその運転継続の可否を決める重要な要素となっている。規制庁の脆化予測には経験的パラメータを用いた式が用いられているが、この予測式において経験的パラメータをより理論的根拠のある値に置き換え高精度化することが求められている。しかし、その詳細観察や実験は不可能であり、原子スケールの計算科学の力を用いて初めて明らかにできる。脆化においては、不純物元素および格子欠陥が塑性変形に与える影響が重要な要素であり、モデル化の鍵となる。我々は本課題において、この影響を大規模な第一原理計算を用いて転位と不純物の相互作用を解明することで精度よく求める手法を開発・整備している。

本年度はこれまで行ってきた不純物元素との相互作用の計算を発展させ、原子炉の照射脆化に対しより強い影響を与える欠陥クラスタと転位の相互作用を第一原理計算により評価する手法を確立する。こうして得られる相互作用の詳細により、原子炉材料の脆化予測式を機構論的に検証し精度を向上させることができる。

(2) 利用内容・結果:

本年度は二種類ある欠陥クラスタ、格子間原子ループとボイドのうち、計算が単純であるボイドについて計算を行った。また最終目標の鉄における計算は計算量が増加するため、同じ金属特性を持ち計算がより高速に行えるタングステンを対象として計算を行い、計算負荷に余裕を持たせたうえでどの程度のサイズの計算まで実行可能か、またそのサイズの計算で十分か、という点を明らかにすることを主眼とした。またタングstenは核融合材料として照射実験が多数行われているため計算結果を実験と比較して検証することも容易である。

本年度はベースとなる転位については二つのタングstenの刃状転位を周期境界条件を用いてセルに配置し、転位同士が十分離れ、かつ転位線方向にも十分な長さを持つ系を 918 原子で構成し、これを第一原理計算に用いた。具体的なサイズは $4\langle 111 \rangle \times 6\langle 110 \rangle \times 3\langle 211 \rangle$ である。こうして作成した転位配置に空孔クラスタを加えた場合のエネルギーを計算し、空孔クラスタが転位の移動を阻害する強さを評価した。この結果を図 1 に示す。従来は電子顕微鏡で見えないようなクラスタは硬化に影響が少ないと仮定して計算が行われてきたが、実際には影響が完全には無視できないことが分かった。硬化への影響が欠陥サイズの大小により異なる直線で表される原因は、転位が欠陥から外れる時の二本の転位が平行か否かによって異なるメカニズムで外れるのが原因である。

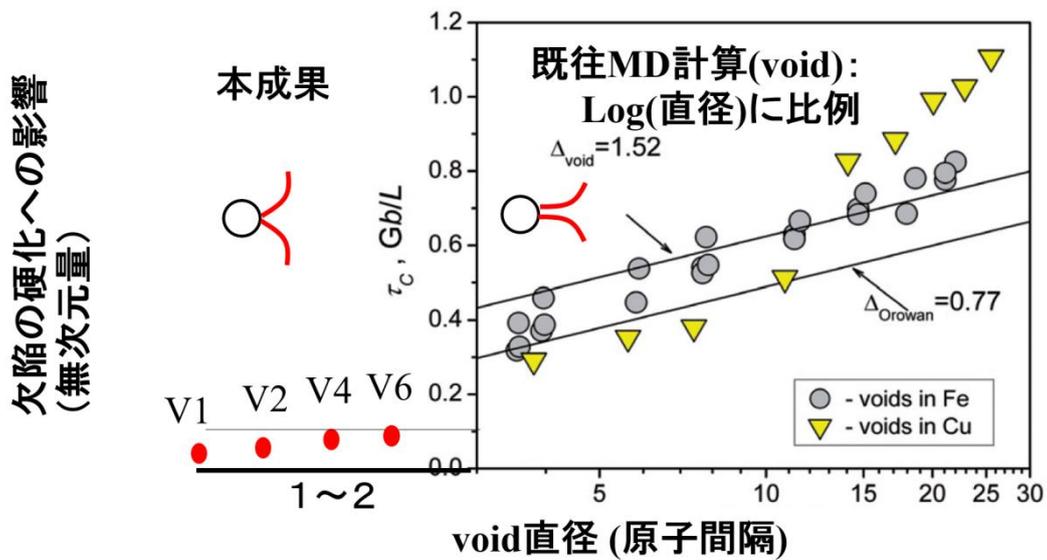


図1 小型の空孔クラスターの硬化への影響とサイズ依存性
既往研究は Osetsky and Bacon, Philosophical

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

招待講演

- 1) M. Itakura and M. Yamaguchi, “First-principles calculation of interaction between carbon atom and screw/edge dislocation in bcc iron”, 6th ESISM workshop “Fundamental Issues of Structural Materials”, (Kyoto, Japan), Feb.27-28 2018.

基調講演

- 2) 板倉充洋, 山口正剛, “BCC 鉄の転位と炭素の第一原理計算”, 日本金属学会 2018 年春期講演大会 公募シンポジウム S1 プラストンの材料科学 V, (千葉工業大学), 3.19-21 2018.

論文

- 3) M. Wakeda, T. Tsuru, M. Kohyama, T. Ozaki, H. Sawada, M. Itakura, S. Ogata, “Chemical misfit origin of solute strengthening in iron alloys”, Acta Materialia, vol.131, No.1, pp.445-456.

(4) 今後の利用予定:

今後は軽水炉圧力容器の脆化で問題とされている銅原子の析出の影響、また現在開発が行われている加速器駆動未臨界炉の材料である T91 鋼の脆化モデリングを基礎工学部門と連携し行っていく予定である。

5.12.8 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、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、欠陥エネルギーの評価や MOX 燃料の物性値推算等を行うための第一原理計算を行った。

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の物性を精度良く再現できるシミュレーション手法を確立することが極めて重要である。そのため、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、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の比熱の評価、第一原理分子動力学による二酸化トリウム的高温物性の評価などに成功してきた。今年度は、第一原理計算に基づく欠陥エネルギーの評価と MOX 燃料の物性値評価を目的とした。

(2) 利用内容・結果:

これまで、我々は定比組成の二酸化プルトニウムの電子状態や熱物性値を第一原理計算で評価してきた。しかしながら、二酸化プルトニウムでは不定比組成の PuO_{2-x} の存在が知られており、酸素空孔の性質を理解することが、燃料物性を評価する上で重要と考えられる。そこで、本研究では、酸素空孔や粒子間酸素の生成エネルギー及び移動エネルギーを、第一原理計算を用いて評価した。生成エネルギーの評価においては点欠陥の電荷を考慮するために、系の電子数を制御して評価を行った。結果として酸素空孔、粒子間酸素はそれぞれ+2 価、-2 価が比較的安定であることがわかったが、フェルミエネルギーによってはそれ以外の価数をとることも発見した。これらの計算結果を用いて Frenkel 欠陥の生成エネルギーを評価したところ、4.58 eV となり実験値 (~3 eV) より若干大きいものの、近い値を得た。また、酸素欠陥の移動エネルギーの計算では、空孔の場合は隣接サイトへの移動、格子間粒子の場合は隣接格子上酸素を格子間に押し出す移動が最も安定であり (図 1)、この経路を用いて移動エネルギーを評価した。これらの評価が可能になったことによって、欠陥濃度と酸素分圧の関係や欠陥の拡散係数などを定量的に評価することが可能となり、燃料開発への指針となることが期待できる。

一方、今年度は Special Quasirandom Structure (SQS) を用いた MOX ($\text{Th}_x\text{Pu}_{1-x}\text{O}_2$) の物性評価も行った。その結果、格子定数は Vegard 則にのっとり、 x に対して線形であることを確認した。また、室温以上では Th と Pu は全固溶になることも分かった (図 2)。これらの結果は測定値と一致しており、この手法が十分信頼できるものであると確認できた。また、この手法は燃料デブリ中に含まれるウラン・ジルコニウム酸化物の物性評価にも応用可能である。

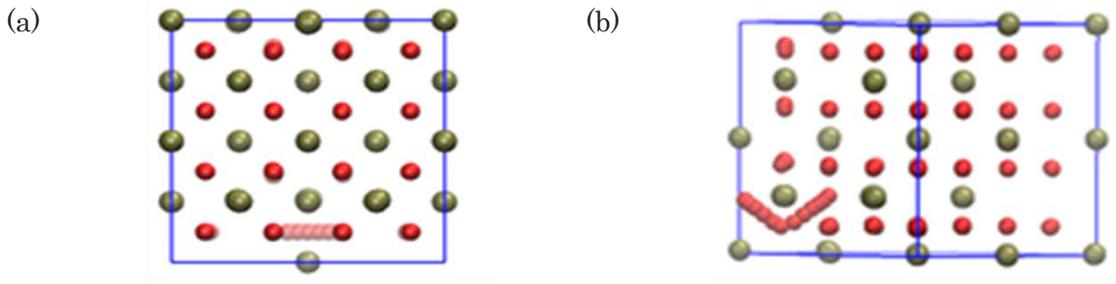


図1 酸素欠損(a)と格子間酸素(b)の移動経路

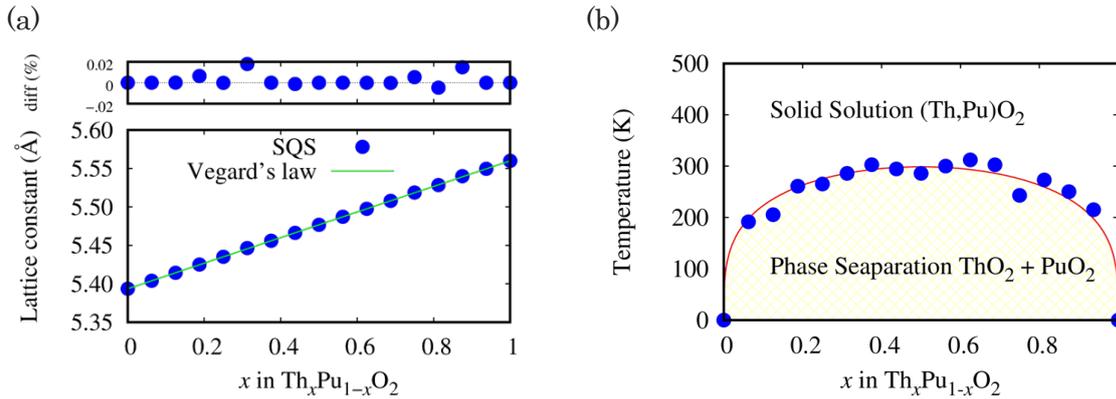


図2 $\text{Th}_x\text{Pu}_{1-x}\text{O}_2$ の格子定数(a)と相図(b)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文発表

- 1) M. Kato, H. Nakamura, M. Watanabe, T. Matsumoto, M. Machida, “Defect chemistry and basic properties of non-stoichiometric PuO_2 ”, Defect and Diffusion Forum, vol.375, 2017, pp.57-70.

国際会議

- 2) H. Nakamura, M. Machida, “A First-Principles Study on Point Defects in Plutonium Dioxide”, ACTINIDES 2017, 仙台, 2017年7月.

国内会議

- 3) 中村博樹, 町田昌彦, “二酸化プルトニウムの点欠陥に関する第一原理計算”, 原子力学会 2017年秋の大会, 北海道大学, 2017年9月.
- 4) 中村博樹, 町田昌彦, “第一原理計算による $(\text{Th,Pu})\text{O}_2$ の機械的物性評価”, 原子力学会 2018年春の年会, 大阪大学, 2018年3月.

(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、他のアクチノイド化合物や MOX 燃料などに応用するとともに、メソスケールの物性評価手法の開発も行う予定である。

5.12.9 原子力分野での物性計算科学技術の高度化

Development of Numerical Techniques for Materials in the Research Field of Atomic Energies

永井 佑紀、山田 進、町田 昌彦
シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

① 自己無撞着場による超高精度超並列物性評価コードの作成

第一原理計算を用いたシミュレーションは産業界を始めとして非常に広い範囲で用いられており、高速なシミュレーションコードの開発は重要である。特に、格子欠陥や不純物等の物性への影響を調べるためには、実空間での大規模シミュレーション技術が有効である。シミュレーションにおいては、電子密度等を自己無撞着に安定かつ高速に計算する必要がある。本年度においては、昨年度に引き続き、動的な揺らぎを数値的に正確に取り込むことのできる動的平均場理論 (DMFT) および連続時間量子モンテカルロ法を用いて、動的な揺らぎを自己エネルギーに取り込んだ自己無撞着計算を実行する。そして、これまでの年度で開発してきた超伝導体に対する量子物性シミュレーションコードを拡張する形で、格子欠陥や不純物が存在する非一様な超伝導体の電子物性を可能な限り正確に高速に計算するコードを開発する。その際、これまでの自己無撞着計算に関する知見を動員することで、大並列計算を安定に実行できるコードを開発する。本開発コードを用いることで、超伝導転移温度や自己無撞着計算動的超伝導秩序変数などが計算可能になり、様々な系の物性評価が可能となる。

② 自己学習モンテカルロ法による超並列計算コードの作成

近年、ディープラーニングを始めとする機械学習を用いた手法が非常に進展し、自動運転や AI 基、カスタマーの好みの自動評価によるオススメ機能の実装など、産業界のみならず人々の生活を変える勢いで大きく発展している。また、これらの機械学習による手法は、物性科学や材料工学の分野にも適用できることが知られ始めており、機械学習を利用した高精度シミュレーション技術開発の需要は極めて高い。本年度においては、近年マサチューセッツ工科大学 (MIT) Fu グループと申請者 (永井) が共同で開発中である自己学習モンテカルロ法 (SLMC) に着目し、その超並列計算コードを開発する。SLMC 法とは、モンテカルロ法における次の配置を機械学習によって決める手法であり、高速かつ極めて高い採択確率を誇り、物性科学のみならず広範囲への応用が期待されている手法である。本手法の大規模並列化は未だなされておらず、その並列コードの開発とパフォーマンス測定には高い需要がある。機械学習と超並列計算を組み合わせることで、これまでできなかった規模のシミュレーションを実施できると考えられる。モンテカルロ法は原子力機構内で実施される様々なシミュレーションで用いられている汎用的な手法であるため、SLMC 法の並列コード開発は有用であると考えられる。

③ 量子系シミュレーションコードの大規模並列化と超伝導および磁性材料の機能発現機構の解明

エネルギー機能材料である超伝導体や磁性体の発現機構を解明するためには、超伝導体などの量子効果の強い物理モデルのエネルギーを表現する行列の固有状態（固有値と固有ベクトル）を計算する必要があるため、大量の計算機資源（メモリ、CPU 時間）を利用した固有値計算を必要とする。これまでに、比較的単純な電子模型であるハバード模型にして、密度行列繰り込み群（DMRG）法や厳密対角化法と呼ばれる基底状態付近の固有状態を計算する手法の並列化・高速化を行い、精密な計算を可能としてきた。平成 29 年度は、より複雑な相互作用（長距離、軌道間、リング型など）を持つ電子模型に対してシミュレーションを実施する。これらにより超伝導、磁性の発現機構に対するより詳細な理解が効率的に得られることが期待される。また、超伝導体と絶縁体が層状になっているジョセフソン素子における量子的な振る舞いを対象にしたシミュレーションも実施予定である。さらに、計算機の大規模化に伴った計算回数の増加により、計算誤差の累積が無視できなくなってきたため、大規模計算に対する 4 倍精度の演算を用いた固有値ソルバの計精度を調査するとともに、実際に量子問題に適用し、その有効性を確認する。これにより得られた並列化・高精度化等の知見は、量子計算だけでなく、他の大規模シミュレーションにも利用できるため、大規模な計算機資源の有効利用に資する成果が期待できる。

(2) 利用内容・結果:

① 自己無撞着場による超高精度超並列物性評価コードの作成

昨年度から ICE X 向けに開発してきた固有値問題の高速解法である縮約シフト共役勾配法（RSCG 法）を大規模並列計算用のチューニングが終わり、銅酸化物高温超伝導体のナノ構造に対する自己無撞着超伝導秩序変数計算を実施した。その結果、低温領域に時間反転対称性の破れた新奇な超伝導相が存在することを明らかにした。

② 自己学習モンテカルロ法による超並列計算コードの作成

銅酸化物高温超伝導体や重元素化合物などの強相関電子系において適用可能な自己学習連続時間量子モンテカルロ法の大規模並列計算用コードを開発した。その際、大規模並列計算の各 CPU コアにおける異なるマルコフ連鎖モンテカルロ法の結果を学習データとし、それらの全情報を効率的に集め効果的に学習するコードを開発した。そして、このコードを、動的なゆらぎを数値的に正確に取り込むことのできる動的平均場理論における連続時間量子モンテカルロ法ソルバとして利用した。その結果、超並列計算と機械学習の組み合わせによって、非常に高速にシミュレーションを実行できるようになった。

③ 量子系シミュレーションコードの大規模並列化と超伝導および磁性材料の機能発現機構の解明

平成 29 年度は、比較的単純な電子模型であるハバード模型を対象にして、厳密対角化法と呼ばれる基底状態付近の固有状態の計算の高速化を実施した。この計算は LOBPCG 法と呼ばれる

反復アルゴリズムで固有値を求めており、適切な前処理を用いることで収束性が向上する。そこで、ハバード模型の物理的性質を考慮し、大規模な並列計算機において効率的な並列化計算が可能な前処理方法を提案し、実際にこれまでの方法よりも短時間で固有値を求めることができることを ICE X での大規模並列計算により確認した。また、計算機では、無理数を有限桁の有理数で表現して演算を行っているため、計算 1 回ごとに誤差が生じている。この誤差は非常に小さいが、計算機の大規模化によって、これまで以上の計算回数のシミュレーションが可能になったため、問題によっては誤差が累積し精度低下を引き起こすことが報告されている。この問題を回避するため、ベイリーのアルゴリズムを用いた高精度の基本演算ルーチンを開発した。さらに、それらを組み合わせて実際に大規模固有値計算を行い、高速かつ高精度で計算できることを確認した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

査読付き論文

- 1) Y. Nagai, Y. Ota, and K. Tanaka, “Time-reversal symmetry breaking and gapped surface states due to spontaneous emergence of new order in d-wave nanoislands”, Phys. Rev. B, vol.96, No.6, 060503(R) (2017).
- 2) Y. Nagai, H. Shen, Yang Qi, Junwei Liu, and Liang Fu, “Self-learning Monte Carlo method: Continuous-time algorithm”, Phys. Rev. B, vol.96, No.16, 161102(R) (2017).
- 3) Y. Nagai, Y. Ota, and K. Tanaka, “Time-reversal symmetry breaking phase and gapped surface states in d-wave nanoscale superconductors”, Journal of Physics: Conference Series, vol.969 (2017).
- 4) S. Yamada, T. Imamura, T. Ina, N. Sasa, Y. Idomura, M. Machida, “Quadruple-precision BLAS using Bailey's arithmetic with FMA instruction; Its performance and applications”, Proc. of IPDPS17 Workshop, pp.1418-1425 (2017).
- 5) S. Yamada, T. Imamura, M. Machida, “Communication avoiding Neumann expansion preconditioner for LOBPCG method: Convergence property of exact diagonalization method for Hubbard model”, Proc. of ParCo2017, pp.27-36 (2017).

国際会議 7 件

プレスリリース

- 1) 永井佑紀, “自ら学習し複雑な現象の本質を抽出可能にするモンテカルロ法の開発—機械学習による量子シミュレーションの高速化—”, 2018 年 1 月.

(4) 今後の利用予定:

機械学習とスーパーコンピュータを利用した物性計算技術をさらに進展させるため、自己学習モンテカルロ法のさらなる効率化高速化を目指す。

5.12.10 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:

平成 23 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 29 年度は、放射性セシウムを強く吸着すると予想されているがその構造が明らかになっていない、粘土鉱物のエッジ構造の詳細を明らかにすることを目的とした。また、除染による除去土壌の長期貯蔵の安全性に深く関係する、粘土鉱物に吸着された放射性セシウムが崩壊した際の核変化が、粘土鉱物からの放射性セシウムの脱離を引き起こす可能性について評価することを目的とした。

本研究により、粘土鉱物のエッジ構造が明らかになれば、粘土鉱物による放射性セシウム吸着現象について理解が深まり、それらの化学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と期待される。また、放射性セシウムの崩壊による核変化がもたらす粘土鉱物からの放射性セシウムの脱離の可能性評価については、これまで評価されておらず、中間貯蔵施設や最終処分場における除染除去土壌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:

今年度は、密度汎関数法を用いて、粘土鉱物のエッジ構造の詳細を調べた。また、粘土鉱物に吸着した放射性セシウムが崩壊によって核変化を起こした際に、粘土鉱物に吸着された他の放射性セシウムが粘土鉱物内にとどまるか否かを評価した。平成 29 年度の研究成果として得られた概要は、以下のようにまとめられる。

1. 粘土鉱物エッジにおける水素結合ネットワークの形成による水分子の安定吸着

本研究では、放射性セシウムが強く吸着すると推測されている、粘土鉱物のエッジについて、密度汎関数法を用いて原子レベルの構造を評価し、以下を明らかにした。

- ・ 水分子はエッジに吸着しているが、共有結合を形成しているわけではない (図 1)。
- ・ 水分子は水素結合のネットワークを形成することで、エッジに吸着している (図 1)。

上記の結果から、水分子が粘土鉱物のエッジに吸着する原因が、水素結合のネットワーク形成によるものである事が明らかになった。この結果に基づき、エッジにセシウムイオンが近づいた場合に、吸着した水分子の脱着を含めたエッジの構造変化について、より大規模なシミュレーション研究を計画している。

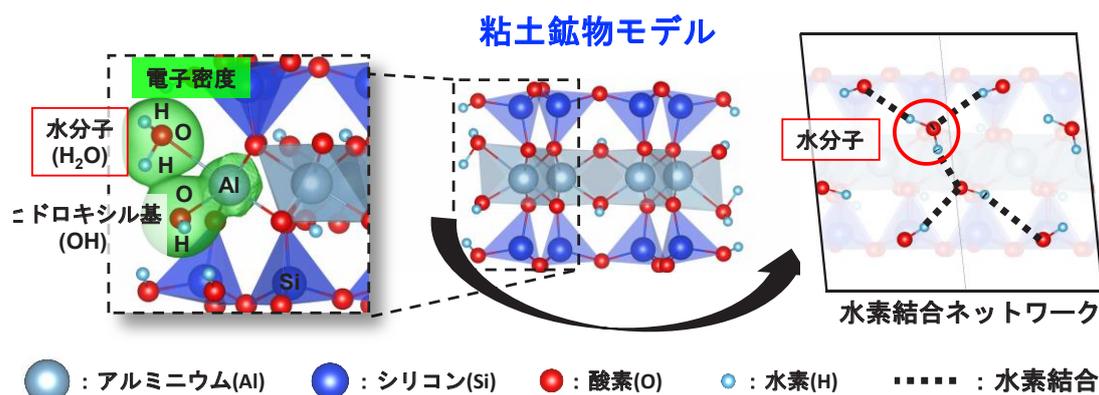


図 1 粘土鉱物のエッジモデル (電子密度と水素結合ネットワーク)

2. 放射性セシウムの崩壊/核変化による粘土鉱物に吸着している放射性セシウムの安定性

本研究では、粘土鉱物に吸着した放射性セシウム ^{137}Cs が崩壊により $^{137}\text{Cs}^+ \rightarrow ^{137}\text{Ba}^{2+}$ という核変化を起こした場合を考える。元々は $^{137}\text{Cs}^+$ を吸着した状態で粘土鉱物全体の電荷が中性であったものが、この崩壊により、 $^{137}\text{Ba}^{2+}$ が突如粘土鉱物内に現れ、電荷が中性でなくなってしまう。そのため、粘土鉱物全体の電荷を中性に保つために、粘土鉱物からは +1 価のイオンが放出されると予想される。セシウムを吸着した粘土鉱物の中には主にカリウムとセシウムが存在するが、それらのうちのどのイオンが最も粘土鉱物から放出されやすいかを、密度汎関数法を用いて評価した。その結果、元々粘土鉱物の層間に対してはカリウムの方がセシウムよりも少しだけ安定なため、セシウムは粘土鉱物から脱離しやすい事がわかった。(図 2)

上記の結果から、放射性セシウムを含む土壌を長期貯蔵する場合はセシウムの崩壊に起因するセシウム漏洩の可能性も考慮する必要があると考えられる。しかし、上記は静的なエネルギー評

価の結果であり、正確な評価のためには、カリウムとセシウムの粘土鉱物内の拡散係数の違い等の評価が必要であり、これが今後の課題である。

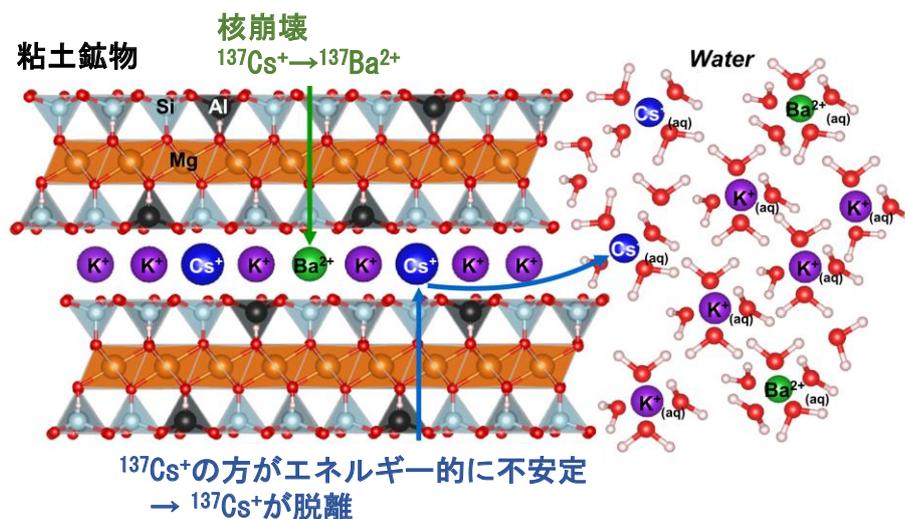


図2 核崩壊 $^{137}\text{Cs}^+ \rightarrow ^{137}\text{Ba}^{2+}$ による粘土鉱物からのセシウム脱離

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

【国内学会】

- 1) 奥村雅彦, “粘土鉱物によるセシウム吸着現象の原子スケールシミュレーション研究”, 2017年度日本地球化学会年会, 東京, 2017年9月14日(招待講演)。

【国際会議】

- 2) M. Okumura, M. Machida, T. Kogure, “Ab-Initio Numerical Study of Halloysite”, 16th International Clay Conference, Granada, Spain, July 17-21 2017.

【査読付き論文】

- 3) M. Okumura, M. Sassi, K. Rosso, and M. Machida, “Origin of 6-fold coordinated aluminum at (010)-type pyrophyllite edges”, AIP Advances, vol.7, No.5, pp.055211_1-055211_9, 2017.
- 4) M. Sassi, M. Okumura, M. Machida, and K. Rosso, “Transmutation effects on long-term Cs retention in phyllosilicate minerals from first principles”, Physical Chemistry Chemical Physics, vol.19, pp.27007-27014, 2017.

(4) 今後の利用予定:

これまでに、粘土鉱物の一部分をモデル化して詳細な計算を行い、粘土鉱物の部分のセシウム吸着挙動の理解が進んだ。今後は、より大規模なモデルを計算可能なシミュレーション手法を開発し、粘土鉱物全体の振る舞いを明らかにしていく予定である。

5.12.11 大規模流体計算の超並列計算技術の開発

Development of Massively Parallel Simulation Technology for Extreme Scale CFD Simulations

井戸村 泰宏、真弓 明恵、伊奈 拓也⁺²、ユスフ アリ⁺¹、山田 進⁺²
 高度計算機技術開発室
⁺¹ 情報システム利用推進室
⁺² シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

過酷事故時の燃料溶融複雑系解析や新型炉設計のための熱流動解析等、原子力分野の流体シミュレーションは取り扱う事象がますます複雑化、大規模化しており、エクサスケール計算機を駆使した大規模計算が必要不可欠となっている。しかしながら、アクセラレータ、あるいは、メニーコアプロセッサに基づく最先端スーパーコンピュータを活用する上で、従来の CPU と大きく異なるアーキテクチャのメニーコアプロセッサを使いこなす技術、メニーコアプロセッサがもたらす演算加速によって顕在化する通信のボトルネックを解決する計算手法等の新たな計算技術開発が課題となっている。こういった背景から、本研究では、原子力機構における最大規模の流体計算コードである 3 次元多相多成分熱流動解析コード JUPITER を対象として、90%以上の計算コストを占め、かつ、超並列計算におけるスケーラビリティのボトルネックとなっている圧力ポアソン方程式の行列ソルバの高度化に向けた研究開発を推進してきた。昨年度に省通信共役勾配 (CACG) 法ソルバを開発し、高いスケーラビリティを達成したが、CACG 法ソルバは数値誤差により数値不安定になりやすい問題があった。この問題を解決するために、省通信反復行列ソルバのアルゴリズム改良に取り組んだ。また、今年度は非対称行列向けに省通信一般化最小残差 (CA-GMRES) 法ソルバを新たに開発し、移流計算の差分・陰解法に適用した。

(2) 利用内容・結果:

CG 法ソルバに代表されるクリロフ部分空間解法では、反復毎に疎行列ベクトル積 (差分計算) を実行して単項基底 ($x, Ax, A^2x, \dots, A^{s-1}x$) を生成し、それを直交化してクリロフ部分空間を構成しながら解ベクトルを探索する。これを並列処理するには差分計算のための袖通信と直交化処理に含まれる内積のための縮約通信を反復毎に処理する必要がある。ここで、袖通信は局所的な 1 対 1 通信となり、通信隠蔽手法によるコスト削減も可能であるのに対し、縮約通信は短メッセージ長の大域的な集団通信となり、特に、大規模な計算環境における同期処理のコストを削減することが難しい。この問題を解決するために、省通信アルゴリズムでは s ステップ法と呼ばれる数学的に等価なアルゴリズムの書き換えによって s 回分の反復計算を通信なしに実行し、その後、袖通信や直交化処理をまとめて行うことによって、通信回数を $1/s$ に削減する。しかしながら、悪条件の大規模問題においては、直交化せずに生成する s 本の基底ベクトルが最大固有値の固有ベクトルに近づいてしまうために、有限精度の数値計算では打ち切り誤差の影響を排除できず、基底ベクトルの線形独立性が失われ、収束特性が悪化、あるいは、アルゴリズムが破綻する場合は

ある。昨年度に取り組んだ JUPITER の圧力ポアソンソルバ（約 14 億格子、2 次中心差分、7 点ステンシル）の問題では、省通信ステップ数 s が 4 以上になると CACG 法ソルバが破綻していた。このような差分・陰解法で取り扱う行列の条件数は解析対象、問題規模、現象の非線形発展に依存するため、実問題の解析では省通信ステップ数の数値安定限界に対して十分なマージンが必要となるため、 $s=3$ が数値安定限界となる CACG 法ソルバを実問題に適用することは難しい。

この問題を改善するためにチェビシェフ基底省通信共役勾配 (CBCG) 法ソルバを新たに開発した。CBCG 法ソルバでは基底ベクトルをチェビシェフ多項式 T_j に基づく基底 ($T_0(A)x, T_1(A)x, \dots, T_{s-1}(A)x$) によって生成し、 $|T_j(A)| < 1$ となるように固有値分布をシフト・規格化することで直交化せずに基底ベクトルの線形独立性を向上する。図 1 に単項基底に基づく CACG 法ソルバとチェビシェフ基底に基づく CBCG 法ソルバの収束特性の比較を示す。どちらのソルバでもブロック・ヤコビ前処理を用いている。CACG 法ソルバの場合には $s=4$ で破綻するのに対し、CBCG 法ソルバの場合には $s=40$ 以上まで良好な収束特性を維持できる。また、CACG 法ソルバでは $s=4$ でいきなり破綻するが、CBCG 法ソルバでは $s=40$ 以上で徐々に収束特性が悪化し始める。これらの収束特性の違いは、実用上極めて重要となる。

計算量に関しては CG 法ソルバに比べて CACG 法ソルバで約 2 倍、CBCG 法ソルバで約 3 倍に増大するが、メモリアクセス数は大きく変化しないため、計算コストの増大は 10~30% に抑制される。一方、通信に関しては省通信ステップ数を $s=3$ から $s=10$ 以上に拡張できるため、通信コストを大幅に削減することが可能となる。従来の汎用 CPU 環境である ICE X では、演算処理が遅く、通信コストが相対的に小さいため、CBCG 法ソルバによる速度向上は得られなかったが、最先端メニーコア環境である Oakforest-PACS における 2,000 ノードを用いたベンチマークテストでは、CBCG 法ソルバにより CG 法ソルバ、CACG 法ソルバに比べてそれぞれ 38%、17% の高速化を達成し、ロバスト性と処理性能の向上を両立することに成功した。

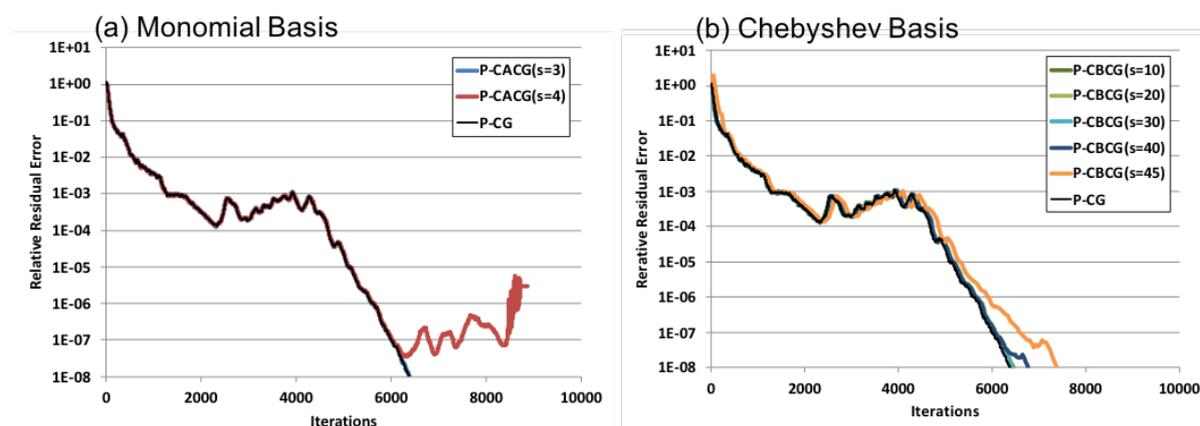


図 1 JUPITER の圧力ポアソン方程式（2 次中心差分、格子数 $N_x \times N_y \times N_z = 800 \times 500 \times 3,540 \sim 14$ 億格子）における前処理付 (P-) CG 法ソルバ、P-CACG 法ソルバ、P-CBCG 法ソルバの収束特性比較。全てのソルバでブロック・ヤコビ前処理を適用し、800MPI プロセスの並列処理を実行。

これまでの研究ではポアソン方程式の対称行列向けに CG 法系のソルバを開発してきたが、省通信アルゴリズムをさらに幅広い問題に適用するために、今年度は CA-GMRES 法ソルバを新たに開発した。このソルバ開発では、CA-GMRES 法ソルバにおいて演算数とメモリアクセス数を約 30%削減する改良アルゴリズムを提案した。プラズマ流体解析コード GT5D における移流計算の差分・陰解法を用いて、Oakforest-PACS、1,280 ノード上で実施したベンチマークテストでは、90%以上の縮約通信を削減することに成功した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

研究論文 (査読付き)

- 1) S. Yamashita, T. Ina, Y. Idomura, H. Yoshida, “A numerical simulation method for molten material behavior in nuclear reactors”, Nuclear Engineering and Design., vol.322, pp.301-312 (2017).
- 2) Y. Idomura, T. Ina, A. Mayumi, S. Yamada, T. Imamura, “Application of a preconditioned Chebyshev basis communication-avoiding conjugate gradient method to a multiphase thermal-hydraulic CFD code”, Lecture Notes in Computer Science, vol.10776, pp.257-273 (2018).
- 3) Y. Idomura, T. Ina, A. Mayumi, S. Yamada, K. Matsumoto, Y. Asahi, and T. Imamura, “Application of a communication-avoiding generalized minimal residual method to a gyrokinetic five dimensional Eulerian code on many core platforms”, 8th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems (ScalA@SC17, Denver, USA, Nov.12-17, 2017).

国際会議

- 4) Y. Idomura, “Status of fusion sub-project under Post-K project”, 3rd US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on Innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing (Kashiwa, Japan, Aug.7-8, 2017).
- 5) Y. Idomura, “Computational challenges towards strong scaling gyrokinetic Eulerian codes at Exa-scale”, The Platform for Advanced Scientific Computing Conference (PASC17), (Lugano, Switzerland, Jun.26-28, 2017).

(4) 今後の利用予定:

今年度開発した CBCG 法ソルバによりスケーラビリティと数値的なロバスト性を両立することに成功し、JUPITER のような悪条件の大規模問題に省通信アルゴリズムを適用し、高効率計算を実現する見通しが得られた。また、CA-GMRES 法ソルバの開発により、省通信アルゴリズムの適用範囲が大きく広がった。今後はより通信性能と演算性能のギャップが大きいアクセラレータ環境において省通信アルゴリズムの有効性を実証するとともに、省通信アルゴリズムを汎用的に利用できるように、PARCEL ライブラリへの省通信アルゴリズムの整備を継続する。

5.12.12 In-Situ PBVR を利用した流体解析向け可視化機能の開発

Development of Visualization Function for Fluid Analysis using In-Situ PBVR

河村 拓馬、井戸村 泰宏、野田 智之
高度計算機技術開発室

(1) 利用目的:

スーパーコンピュータの性能向上に伴ってシミュレーションの規模も増大を続けており、テラスケールからペタスケール、そしてエクサスケールへと成長している。可視化は結果データから科学的知見を得るのに不可欠な技術として広く利用されているが、大規模な結果データを手元の PC に転送して可視化を行う手法は、転送時間の増大や PC のメモリ不足を引き起こし、適用が困難になった。

ペタスケール程度のシミュレーションに対しては、ストレージに出力されたデータに対して、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。しかしながら、エクサスケールのシミュレーションではストレージへのデータ出力自体が大きなボトルネックとなることが懸念されている。

計算実行時に同環境を用いて可視化画像を生成する In-Situ 可視化は、エクサスケールのシミュレーションに対しても確実な可視化が見込める手法である。しかし従来の In-Situ 可視化には以下に示す問題があり、十分な解析ができていなかった。

1. ステンシル計算で用いる領域分割が、可視化処理のためのデータ領域構成やデータ探索に伴う大域的通信を生じさせるため、可視化処理のコストがシミュレーション処理のコストを圧迫する。
2. In-Situ 可視化では、バッチ処理投入前に視点位置、色、不透明度等の可視化パラメータを設定するため、可視化の失敗がしばしば発生する。
3. マルチフィジックスシミュレーション向けの多変量向け可視化技術の開発が不十分。

本研究では、粒子ベースボリュームレンダリング (PBVR) に基づく可対話的な In-Situ 可視化フレームワーク (In-Situ PBVR) によってこれらの問題にアプローチしている。PBVR は、シミュレーションの結果データを可視化用粒子データに変換し、物理値の空間分布を描画する可視化手法である。可視化用粒子データのサイズは画像解像度から計算され、十分な画質を得るのに数十 MB が必要になると判明している。このため、大規模データに対して相対的に小さいサイズの可視化用データで可視化が可能である。昨年度は、In-Situ PBVR フレームワークを開発し、上記問題の 1 と 2 を解決した。多相多成分熱流動解析コード JUPITER による原子炉の燃料溶融シミュレーションに In-Situ PBVR を適用し、3,456 コアまでのストロングスケーリングを確認した。

しかし、JUPITER のアップデートにより、これまでの溶融物移行解析だけでなく、デブリ空冷解析が可能になり、In-Situ PBVR の可視化機能を強化する必要が発生した。空冷解析から得られる乱流データは広範な空間スケールを含み、In-Situ PBVR の現状の可視化機能で描画する流速や温度に対するカラーコンターでは、流れの特性を的確に表現できず、十分な解析機能を提供することができなかった。

このような背景から、In-Situ PBVR の可視化機能を高度化して流れ場、および、温度、圧力等の多変量ボリュームデータの解析に適用可能な可視化手法を開発する。これを JUPITER による大規模シミュレーションに結合し、デブリ空冷解析の結果を可視化する。

(2) 利用内容・結果:

流れ場の特徴を抽出するという要請に応えるためには、速度勾配テンソルの第 2 不変量によって乱流の渦構造を可視化する必要があった。そこで、これまでの In-Situ PBVR で提供してきた多変量向けの可視化機能であるボリュームデータ合成機能と伝達関数合成機能に加えて、物理値の微分値を利用できるように機能を拡張した。

従来の可視化では、一つの物理値に対して色・不透明度の関数（伝達関数）を割り当て可視化してきた。In-Situ PBVR で提供するボリュームデータ合成は、シミュレーションで利用する物理変数と x,y,z 座標の各変数を、ユーザ入力の代数式を利用して合成可能な機能である。この機能は入力された代数式を文字列処理して、数式の各演算子に紐付けられた関数を順次呼び出すことで、任意の代数式を計算可能であり、シミュレーション実行時のボリュームデータ合成が可能になる。伝達関数合成は、同様の数式処理アルゴリズムを用いて複数の伝達関数を合成する機能である。これにより様々な物理変数を合成表示し、空間中の分布を比較し相関を把握することができるようになる。図 1 に伝達関数合成・ボリュームデータ合成を行う GUI を示す。

これまでの代数式では四則演算や初等関数の利用を許していたが、それらに加えて微分演算子を計算できる機能を追加した。微分値はサンプリングされる各粒子位置に対して、構造格子においては中心差分で計算し、隣接格子をたどるのにコストのかかる非構造格子においては各格子内部の補間関数の勾配で計算するようにした。計算された微分値は数式処理によってこれまでの四則演算や初等関数と組み合わせて利用できる。

開発したシステムを JUPITER に結合し、微分演算子を利用した不変量解析を、バッチ処理時に対話的に実行可能であることを示した。ボリュームデータ合成機能と微分演算子を利用して、代数式として速度勾配テンソルの第 2 不変量を入力し、渦中心を抽出する伝達関数を作成した。図 2 には抽出した渦中心と温度場の伝達関数を合成し、2 変量の相関を確認できる可視化結果を示す。また ICE X を利用し、6,144 コアまでの強スケーリングを実施した。図 3 に結果を示す。微分演算機能を追加しても処理の並列性能を損なうことなく強スケーリングを達成した。更に、可視化処理のコストを計算処理の割り程度に抑えることに成功した。

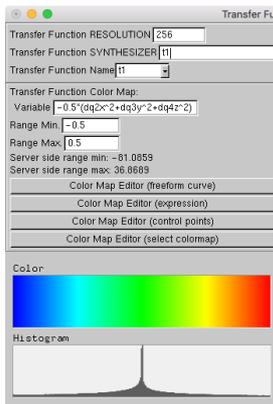


図1 伝達関数合成（上部）
とボリュームデータ
合成（下部）

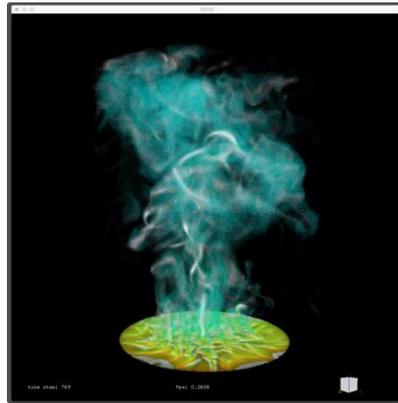


図2 渦中心（白のチューブ）
と温度場の合成可視化
結果

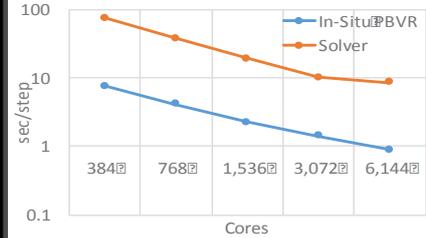


図3 ストロングスケーリング
試験の結果

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文

- 1) T. Kawamura, T. Noda, Y. Idomura, “Performance Evaluation of Runtime Data Exploration Framework based on In-Situ Particle Based Volume Rendering”, Journal of Supercomputing Frontiers and Innovations, vol 4, No. 3, pp. 43-54, 2017.

国際会議

- 2) T. Kawamura, T. Noda, Y. Idomura, “Cross-platform In-Situ Visualization System for Runtime Data Exploration based on PBVR”, Workshop of In Situ Visualization (WOIV17) held on ISC17, Frankfurt, Germany, 22 June, 2017.

招待講演

- 3) 河村拓馬, “PBVR による大規模シミュレーションの対話的遠隔可視化”, 第7回計算力学シンポジウム, 日本学術会議, 12/7, 2017.

受賞

- 4) 第28期可視化情報学会論文賞受賞.

(4) 今後の利用予定:

システム計算科学センターでは原子力災害時の放射性物質の環境放出への対策として、階層型格子を利用した流体シミュレーション (City LBM) による汚染物質の移行挙動の予測を目指している。しかし、現状の In-Situ PBVR は JUPITER の計算で使用する直交格子と非構造格子のサポートしていないため、階層型格子を利用した City LBM への適用が困難である。今後は、大規模な階層型格子に対して適用可能な可視化用粒子データを生成する新しいアルゴリズムを開発し、ICE X 上で最適化を行う。モンテカルロ法による可視化用粒子データの生成処理は要素独立に実施可能であるため、階層型格子に対しても高いスケーラビリティが見込まれる。

5.12.13 格子ボルツマン法に基づく実時間風況解析ソフトウェアの開発

Development of Turbulent Wind Simulation using Lattice Boltzmann Method

小野寺 直幸、井戸村 泰宏、伊奈 拓哉⁺、ユスフ アリ⁺

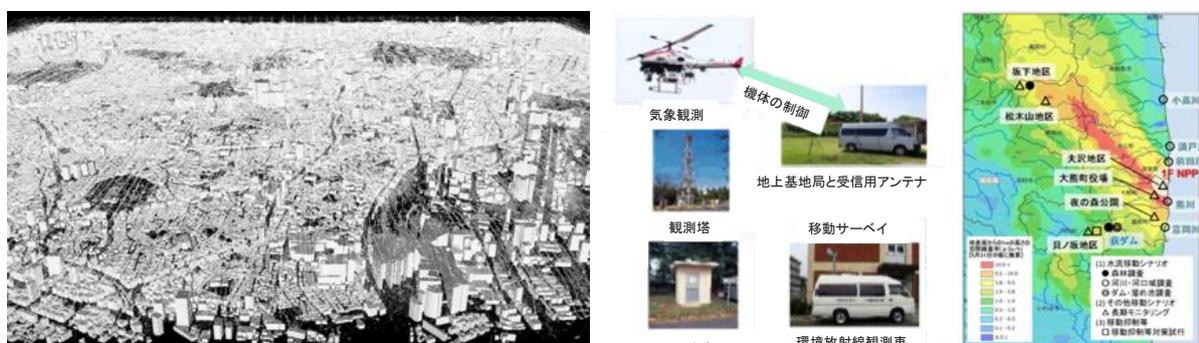
高度計算機技術開発室

+ 情報システム利用推進室

(1) 利用目的:

放射性物質の拡散予測シミュレーションは社会的関心が非常に高く、迅速性および正確性が求められている。日本における予測システムとして、緊急時環境線量情報予測システム (SPEEDI) やその世界版 (WSPEEDI) が開発されている。これらは観測されたデータを基に、放射性物質の拡散挙動を予測できるが、広域を対象とした解析手法であるため、都市部を対象として数メートル解像度の詳細解析は困難である。また、人が生活する路地や建物等を含んだ高解像度の実時間解析を実施するためには、計算機性能を最大限に引き出すことが可能な新たな解析手法の開発が必須となる。本課題では、メニーコアのスーパーコンピュータに適した格子ボルツマン法を用いて汚染物質の拡散予測手法を構築することで高速な解析が実現され、環境モニタリングとの融合解析に発展することが可能となる (図 1)。

本研究により、流体解析手法として比較的新しい解析手法である格子ボルツマン法の気流解析へ適用例が示される。これにより、従来手法では解析が困難であった、複雑形状を含んだ並列計算が実現可能となり、工学分野の数値流体計算の発展に貢献できる。本課題では、計算とメソスケールモデルや観測結果とのデータ同化も同時に進めており、今後の数値解析で重要となるデータ駆動型のアプリケーションの発展に貢献できる。次世代のスーパーコンピュータに適した風況予測シミュレーションの構築により、将来的にはリアルタイムの計算と観測の連携が期待される。以上より、本課題は環境動態解析の高度化といった原子力分野の発展に貢献できるだけでなく、他の工学分野の発展に対して大きな意義がある。



東京都心1m 解像度10km 四方気流計算の可視化
(格子数 10080 × 10240 × 512, GPU数 4032)

JAEA: 福島県における放射性核種の環境中移動調査・研究 より抜粋
<https://fukushima.jaea.go.jp/initiatives/cat01/pdf/project.pdf>

図 1 格子ボルツマン法による気流解析と環境モニタリングの融合解析のイメージ図

(2) 利用内容・結果:

放射性物質の拡散予測として、複雑な構造物に起因する風環境や吹き溜まりを再現など、人が生活するスケールでのホットスポットの予測が重要となる。本課題では、大規模計算に適している格子ボルツマン法に対して、マルチスケールの解析を可能とする AMR (Adaptive Mesh Refinement) 法、および高レイノルズ数の乱流解析を可能とする Cumulant モデルの導入を実施することで、広域および局所の融合解析が可能な拡散予測手法を構築した。産業技術総合研究所 (産総研) の風洞実験に対する検証計算を行った結果、AMR 法を適用することで全ての領域を細かな格子で計算するのと比較して AMR 法の Lv.3 の格子を用いた解析で 10% 以下のメモリ使用量で解析可能であること、および風洞内の速度分布等を再現可能であることが示された。

図 2 に実験結果の詳細な比較を示す。図上側の垂直および水平断面内の主流方向速度分布においては AMR 法の Lv.3 格子を用いた解析結果を示しており、図下側の汚染物質の濃度分布においては AMR 法の Lv.3 から Lv.5 までの格子を用いた実験値への収束性を示している。主流方向の速度分布において AMR Lv.3 格子を用いた解析において非常に高い精度で実験結果を再現している。また、汚染物質の濃度分布に関しては、発生源を含む領域に対してより高い解像度が必要となるが、AMR Lv.5 格子の結果において、汚染物質拡散の評価基準である FAC2 (解析値が観測値の 1/2~2 の範囲に含まれる) を満たすことおよび実験値への収束性が示された。以上の結果より、開発している CityLBM コードが汚染物質の拡散予測に対して十分な精度を持つことが示された。この研究成果として、査読付き国際会議発表 ICONE26 および SC Asia2018 の Lecture Note に投稿した。

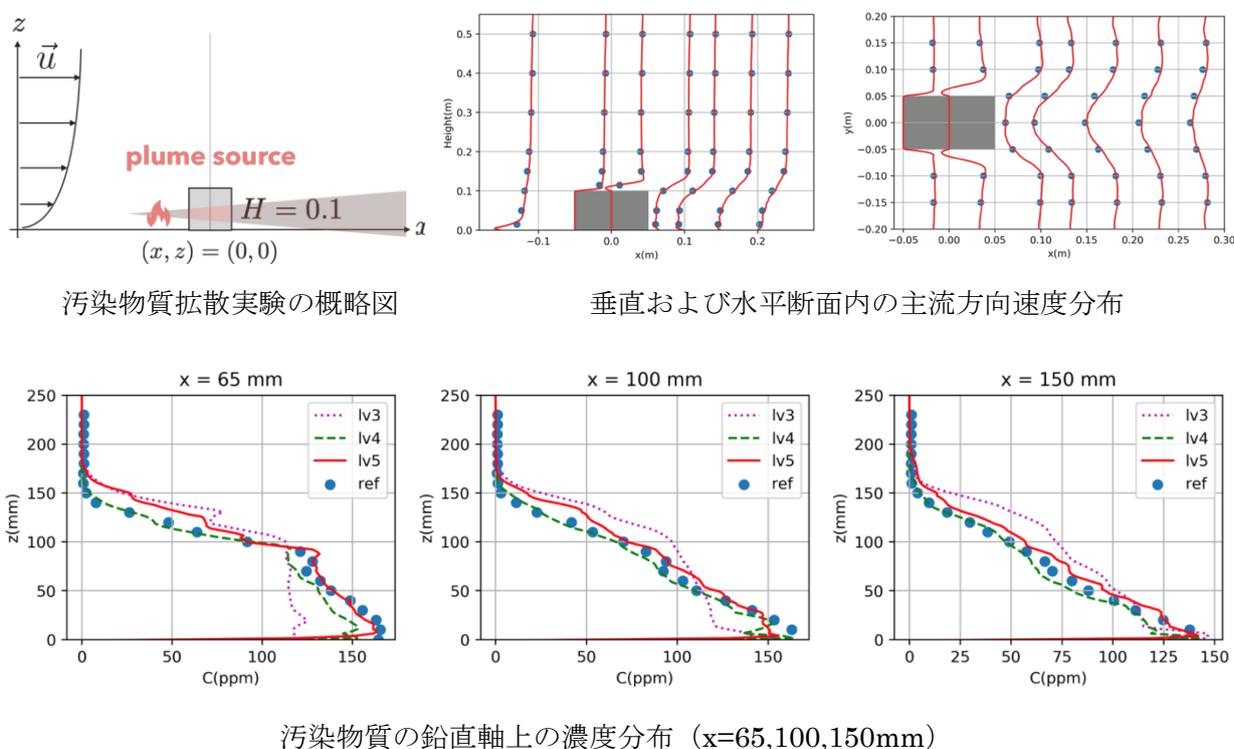


図 2 産総研の風洞実験の概略図と速度分布および汚染物質分布

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**国際会議論文**

- 1) N. Onodera and Y. Idomura, “Acceleration of Plume Dispersion Simulation using Locally Mesh-Refined Lattice Boltzmann Method” , Proc. ICONE 26, UK, (2018).
- 2) N. Onodera and Y. Idomura, “Acceleration of Wind Simulation using Locally Mesh-Refined Lattice Boltzmann Method on GPU-Rich supercomputers” , Lecture Notes in Computer Science, vol. 10776, pp. 128-145, (2018).

国内会議

- 3) 小野寺直幸, 井戸村泰宏, “格子ボルツマン法を用いた物質拡散計算の高速化”, 原子力学会, 2017 秋の年会, 札幌, (2017).
- 4) 小野寺直幸, 井戸村泰宏, “適合細分化格子を用いた格子ボルツマン法による物質拡散解析”, 第 31 回数値流体力学シンポジウム, 京都, (2017).

(4) 今後の利用予定:

今後の利用計画として、CityLBM コードの物理モデル高度化により、解析精度の向上を計画している。物理モデルの高度化として、CityLBM コードでの乱流計算の高精度化のための AMR 法における Cumulant モデルの高度化、都市域内の気流解析で重要となる熱の対流モデルの適用、汚染物質の拡散・沈着に関連している植生キャノピーモデルの導入を検討している。

AMR 法を適用した Cumulant モデルでは、AMR 法の解像度間の物理量の不整合から生じる非物理的な数値振動が問題となる。本研究では、AMR 法の時間・空間補間のアルゴリズムおよび Cumulant モデルのモデル係数の最適化を実施することで、解析精度の向上を目指す。これにより、都市気流解析のような高レイノルズ数の流れに対する高精度な非定常解析が可能となり、予測精度の向上による高い信頼性および格子点数の削減による高速な解析が実現できる。さらに、都市部の熱対流構造および森林等の考慮した物理モデルの導入により、実際の都市や発電所の周囲の環境を再現した解析を予定している。以上の研究により、本解析コードが環境アセスメントの評価等にも適用することが可能となる。

上記の研究は多くの計算資源および計算時間を必要とする研究であり、高性能な計算機が必須である。研究の実現により、計算科学分野および原子力分野の発展に対して貢献することができる。

6. おわりに

本報告集は、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たものである。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する。

平成 27 年 11 月末に本格運用を開始した大型計算機システムは、順調に利用が進み、平成 30 年 2 月のコア利用状況は最高 95.5%を達成するなど高率で推移している。この計算機資源不足を緩和するため、量子科学技術研究開発機構（以下「量研」）との共同調達・共同運用の合理性検討を念頭に置いて、次期大型計算機システムの更新に係る政府調達手続きを開始した。これまでに、資料提供招請手続きが終了し、メーカーから提案された情報に基づき次期大型計算機システムの仕様を再度検討した。調達方法については、量研との共同調達・共同運用の合理性が明確になった。このため、原子力機構と量研は、それぞれの研究開発を効率的かつ効果的に推進するため、次期大型計算機システムを共同で整備し、一体として運用することについて、平成 30 年 4 月に基本協力協定を締結した。今後、システムの整備にあたっては、両機構が共同で設置した仕様策定委員会にて、共同調達に係る仕様等を策定していく。

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 29 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ます。

平成 30 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、坂本 健作

事務局：桧山 一夫、伊巻 頼子

付 録

付 録 A

表 A.1 平成 29 年度大型計算機システムの利用実績

	ICE X		
	バッチ処理 件数	会話処理 件数	コア時間 (h)
4 月	13,907	5,470	36,513,903
5 月	12,381	5,964	41,226,318
6 月	15,422	5,837	39,644,931
7 月	12,574	5,215	38,800,228
8 月	12,517	5,027	42,080,778
9 月	10,302	4,879	39,419,522
10 月	14,672	5,218	41,564,081
11 月	14,930	5,352	39,188,222
12 月	26,984	5,192	41,299,450
1 月	15,499	5,133	42,125,019
2 月	12,580	6,038	38,624,774
3 月	14,687	4,530	42,384,666
合計	176,455	63,855	482,871,892

付 録 B

表 B.1 平成 29 年度利用相談件数(可視化を除く)

	ICE X	Linux	パソコン	ネットワーク	その他 (利用一般)	合計
4 月	56	0	0	5	10	71
5 月	65	1	0	9	7	82
6 月	44	1	1	6	8	60
7 月	72	1	0	0	7	80
8 月	46	0	0	8	5	59
9 月	48	0	2	5	9	64
10 月	37	2	0	7	5	51
11 月	50	0	1	12	7	70
12 月	30	0	2	7	7	46
1 月	32	0	2	15	2	51
2 月	32	0	0	4	8	44
3 月	33	0	0	8	7	48
合計	545	5	8	86	82	726

表 B.2 平成 29 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 (111 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 (4 件)
④ Ensight DR インストール支援 (2 件)
2. 可視化ツール提供等
① AVS/Express Linux 版動画変換ツールの作成支援
② VTK ファイルフォーマットのマニュアル作成支援

著者名別 論文索引

A-Z

Gu Bo	89
Hai Quan Ho	95
Mihalache Ovidiu	122
Miradji Faoulat	69
Nuri Trianti	22
Tao WAN	31

あ

浅川 健一	94
安部 晋一郎	64
阿部 陽介	84

い

五十嵐 誉廣	87
石垣 将宏	18
石川 信行	120
石崎 梓	20
板倉 充洋	144
井手 広史	98
井戸村 泰宏	154, 157, 160
伊奈 拓也	154
岩元 洋介	54

う

上澤 伸一郎	75, 78, 81
内堀 昭寛	112

え

海老原 健一	130
遠藤 章	37

お

大釜 和也	118
大西 弘明	89

小川 達彦	59
奥村 雅彦	151
小瀬 裕男	78
小野 功	125
小野寺 直幸	160

か

河村 拓馬	157
-------	-----

き

菊池 圭一	94
菊地 紀宏	106
北村 竜明	126, 128

こ

米田 政夫	40
菰田 宏	118

さ

佐藤 大樹	52
佐藤 達彦	50
佐藤 允俊	22

し

志賀 基之	136, 139
柴田 光彦	78

す

杉本 貴則	89
杉山 智之	22
鈴木 貴行	75
鈴木 知史	72
鈴木 知明	132

	せ		ま
清野 裕	125	前田 亮	42
	そ	町田 昌彦	139, 141, 148, 151
曾我 彰	118	松田 規宏	45
	た	松田 洋樹	25, 28
高瀬 和之	126, 128	真弓 明恵	154
高松 邦吉	100		
高屋 茂	109	む	
滝野 一夫	115	村井 直樹	36
田中 正暁	106	村崎 穰	98
	つ		
蔡 碧恩	66	め	
都留 智仁	84	明午 伸一郎	25
	な		
永井 佑紀	148	も	
中島 健次	34	森 道康	89
永武 拓	78		
中村 博樹	139, 146	や	
中山 優祐	25	柳沢 秀樹	112
		山口 正剛	134
の		山下 晋	78
野田 智之	157	山田 進	141, 148, 154
		山田 知典	126, 128
は		ゆ	
橋本 慎太郎	57	ユスフ アリ	154, 160
羽成 敏秀	126		
		よ	
ふ		横田 光史	92
深谷 裕司	103	吉川 龍志	106
古田 琢哉	62	吉田 啓之	75
古野 朗子	48		
		わ	
ほ		和田 明	120
堀口 直樹	75	渡部 晃	112

This is a blank page.

国際単位系 (SI)

表1. SI基本単位

基本量	SI基本単位	
	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	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質량	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

組立量	SI組立単位	
	名称	記号
面積	平方メートル	m ²
体積	立方メートル	m ³
速度	メートル毎秒	m/s
加速度	メートル毎秒毎秒	m/s ²
波数	毎メートル	m ⁻¹
密度, 質量密度	キログラム毎立方メートル	kg/m ³
面積密度	キログラム毎平方メートル	kg/m ²
比体積	立方メートル毎キログラム	m ³ /kg
電流密度	アンペア毎平方メートル	A/m ²
磁界の強さ	アンペア毎メートル	A/m
量濃度 ^(a) , 濃度	モル毎立方メートル	mol/m ³
質量濃度	キログラム毎立方メートル	kg/m ³
輝度	カンデラ毎平方メートル	cd/m ²
屈折率 ^(b)	(数字の)	1
比透磁率 ^(b)	(数字の)	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

組立量	SI組立単位			
	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 ^(b)	rad	1 ^(b)	m/m
立体角	ステラジアン ^(b)	sr ^(e)	1 ^(b)	m ² /m ²
周波数	ヘルツ ^(d)	Hz		s ⁻¹
力	ニュートン	N		m kg s ⁻²
圧力, 応力	パスカル	Pa	N/m ²	m ⁻¹ kg s ⁻²
エネルギー, 仕事, 熱量	ジュール	J	N m	m ² kg s ⁻²
仕事率, 工率, 放射束	ワット	W	J/s	m ² kg s ⁻³
電荷, 電気量	クーロン	C		s A
電位差 (電圧), 起電力	ボルト	V	W/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻¹
静電容量	ファラド	F	C/V	m ² kg ⁻¹ s ⁴ A ²
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	m ² kg s ⁻³ A ⁻²
コンダクタンス	ジーメン	S	A/V	m ² kg ⁻¹ s ³ A ²
磁束	ウェーバ	Wb	Vs	m ² kg s ⁻² A ⁻¹
磁束密度	テスラ	T	Wb/m ²	kg s ⁻² A ⁻¹
インダクタンス	ヘンリー	H	Wb/A	m ² kg s ⁻² A ⁻²
セルシウス温度	セルシウス度 ^(e)	°C		K
光照射量	ルーメン	lm	cd sr ^(e)	cd
放射線量	グレイ	Gy	J/kg	m ² s ⁻²
放射性核種の放射能 ^(f)	ベクレル ^(d)	Bq		s ⁻¹
吸収線量, 比エネルギー分与, カーマ	グレイ	Gy	J/kg	m ² s ⁻²
線量当量, 周辺線量当量, 方向性線量当量, 個人線量当量	シーベルト ^(g)	Sv	J/kg	m ² s ⁻²
酸素活性化	カタール	kat		s ⁻¹ mol

(a) SI接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはやコヒーレントではない。
 (b) ラジアンとステラジアンは数字の1に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号である数字の1は明示されない。
 (c) 測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。
 (d) ヘルツは周期現象についてのみ、ベクレルは放射性核種の統計的過程についてのみ使用される。
 (e) セ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。セルシウス度とケルビンの単位の間は同一である。したがって、温度差や温度間隔を表す数値はどちらの単位で表しても同じである。
 (f) 放射性核種の放射能 (activity referred to a radionuclide) は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。
 (g) 単位シーベルト (PV, 2002, 70, 205) についてはCIPM勧告2 (CI-2002) を参照。

表4. 単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

組立量	SI組立単位		
	名称	記号	SI基本単位による表し方
粘力のモーメント	パスカル秒	Pa s	m ⁻¹ kg s ⁻¹
表面張力	ニュートンメートル	N m	m ² kg s ⁻²
角速度	ニュートン毎メートル	N/m	kg s ⁻²
角加速度	ラジアン毎秒	rad/s	m m ⁻¹ s ⁻¹ = s ⁻¹
熱流密度, 放射照度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s ²	m m ⁻¹ s ⁻² = s ⁻²
熱容量, エントロピー	ワット毎平方メートル	W/m ²	kg s ⁻³
比熱容量, 比エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	m ² kg s ⁻² K ⁻¹
比エネルギー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	m ² s ⁻² K ⁻¹
熱伝導率	ジュール毎キログラム	J/kg	m ² s ⁻²
体積エネルギー	ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s ⁻³ K ⁻¹
電界の強さ	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ⁻¹ kg s ⁻²
電荷密度	ジュール毎立方メートル	V/m	m kg s ⁻³ A ⁻¹
電表面電荷	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ⁻³ s A
電束密度, 電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² s A
誘電率	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ² s A
透磁率	ファラド毎メートル	F/m	m ³ kg ⁻¹ s ⁴ A ²
モルエネルギー	ヘンリー毎メートル	H/m	m kg s ⁻² A ⁻²
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル	J/mol	m ² kg s ⁻² mol ⁻¹
照射線量 (X線及びγ線)	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	m ² kg s ⁻² K ⁻¹ mol ⁻¹
吸収線量率	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ s A
放射線強度	グレイ毎秒	Gy/s	m ² s ⁻³
放射輝度	ワット毎ステラジアン	W/sr	m ⁴ m ⁻² kg s ⁻³ = m ² kg s ⁻³
酵素活性濃度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	W/(m ² sr)	m ² m ⁻² kg s ⁻³ = kg s ⁻³
	カタール毎立方メートル	kat/m ³	m ³ s ⁻¹ mol

表5. SI接頭語

乗数	名称	記号	乗数	名称	記号
10 ²⁴	ヨタ	Y	10 ¹	デシ	d
10 ²¹	ゼタ	Z	10 ²	センチ	c
10 ¹⁸	エクサ	E	10 ³	ミリ	m
10 ¹⁵	ペタ	P	10 ⁶	マイクロ	μ
10 ¹²	テラ	T	10 ⁹	ナノ	n
10 ⁹	ギガ	G	10 ¹²	ピコ	p
10 ⁶	メガ	M	10 ⁻¹⁵	フェムト	f
10 ³	キロ	k	10 ⁻¹⁸	アト	a
10 ²	ヘクト	h	10 ⁻²¹	ゼプト	z
10 ¹	デカ	da	10 ⁻²⁴	ヨクト	y

表6. SIに属さないが、SIと併用される単位

名称	記号	SI単位による値
分	min	1 min=60 s
時	h	1 h=60 min=3600 s
日	d	1 d=24 h=86 400 s
度	°	1°=(π/180) rad
分	'	1'=(1/60)°=(π/10 800) rad
秒	"	1"=(1/60)'=(π/648 000) rad
ヘクタール	ha	1 ha=1 hm ² =10 ⁴ m ²
リットル	L, l	1 L=1 l=1 dm ³ =10 ³ cm ³ =10 ⁻³ m ³
トン	t	1 t=10 ³ kg

表7. SIに属さないが、SIと併用される単位で、SI単位で表される数値が実験的に得られるもの

名称	記号	SI単位で表される数値
電子ボルト	eV	1 eV=1.602 176 53(14)×10 ⁻¹⁹ J
ダルトン	Da	1 Da=1.660 538 86(28)×10 ⁻²⁷ kg
統一原子質量単位	u	1 u=1 Da
天文単位	ua	1 ua=1.495 978 706 91(6)×10 ¹¹ m

表8. SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

名称	記号	SI単位で表される数値
バール	bar	1 bar=0.1MPa=100 kPa=10 ⁵ Pa
水銀柱ミリメートル	mmHg	1 mmHg=133.322Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1nm=100pm=10 ⁻¹⁰ m
海里	M	1 M=1852m
バイン	b	1 b=100fm ² =(10 ¹² cm) ² =10 ⁻²⁸ m ²
ノット	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネーパ	Np	SI単位との数値的関係は、 対数量の定義に依存。
ベレル	B	
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	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J
ダイン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N
ポアズ	P	1 P=1 dyn s cm ⁻² =0.1Pa s
ストークス	St	1 St=1cm ² s ⁻¹ =10 ⁻⁴ m ² s ⁻¹
スチルブ	sb	1 sb=1cd cm ⁻² =10 ⁴ cd m ⁻²
フオト	ph	1 ph=1cd sr cm ⁻² =10 ⁴ lx
ガリ	Gal	1 Gal=1cm s ⁻² =10 ⁻² ms ⁻²
マクスウェル	Mx	1 Mx=1 G cm ² =10 ⁻⁸ Wb
ガウス	G	1 G=1Mx cm ⁻² =10 ⁻⁴ T
エルステッド ^(a)	Oe	1 Oe _e =(10 ³ /4π)A m ⁻¹

(a) 3元系のCGS単位系とSIでは直接比較できないため、等号「△」は対応関係を示すものである。

表10. SIに属さないその他の単位の例

名称	記号	SI単位で表される数値
キュリー	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq
レントゲン	R	1 R=2.58×10 ⁻⁴ C/kg
ラド	rad	1 rad=1cGy=10 ⁻² Gy
レム	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv
ガンマ	γ	1 γ=1 nT=10 ⁻⁹ T
フェルミ	f	1 フェルミ=1 fm=10 ⁻¹⁵ m
メートル系カラット		1 メートル系カラット=0.2 g=2×10 ⁻⁴ kg
トル	Torr	1 Torr=(101 325/760) Pa
標準大気圧	atm	1 atm=101 325 Pa
カロリ	cal	1 cal=4.1858J (「15°C」カロリ), 4.1868J (「IT」カロリ), 4.184J (「熱化学」カロリ)
マイクロン	μ	1 μ=1μm=10 ⁻⁶ m

