JAEA-Review 2019-017 DOI:10.11484/jaea-review-2019-017



平成 30 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 FY2018 (April 1, 2018 – March 31, 2019)

> 高性能計算技術利用推進室 HPC Technology Promotion Office

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

A-Review

January 2020

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

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

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 研究連携成果展開部 研究成果管理課 〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方2番地4 電話 029-282-6387, Fax 029-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency. Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to Institutional Repository Section,

Intellectual Resources Management and R&D Collaboration Department, Japan Atomic Energy Agency.

2-4 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2020

平成 30 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 高性能計算技術利用推進室

(2019年9月4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30年度における大型計算機システムを利用した研究開発の成果を中心に、それを支える利用支援、利用実績、システムの概要等をまとめたものである。

原子力科学研究所:〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方 2-4

Summaries of Research and Development Activities by using Supercomputer System of JAEA in FY2018 (April 1, 2018 – March 31, 2019)

HPC Technology Promotion Office

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

(Received September 4, 2019)

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 FY2018, 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 FY2018, 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	春の大型計算機システム環境	4
3.	平成 30 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	送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	後システム利用による研究成果	.17
	5.1 安全	全研究センター	.17
	5.1.1	Turbulent Flame Closure モデルを用いた水素燃焼火炎伝播の CFD 解析	.17
	5.1.2	CIGMA 装置内での外面冷却時における高温浮力噴流に関する数値解析	.19
	5.1.3	大型格納容器実験装置 CIGMA 内構造物の容器内流動場に対する影響	.22
	5.1.4	IPRESCA CFD ベンチマーク解析	.24
	5.1.5	航空機モニタリングにおける地形影響評価	,27
	5.2 原子	- 力緊急時支援・研修センター	.28
	5.2.1	モニタリングポストに付着した人工放射性核種による空間放射線量率測定値	
		への影響推定	,28
	5.3 J-PA	ARC センター	.31
	5.3.1	加速器駆動核変換システムのための核種生成断面積の評価	.31
	5.3.2	非弾性 X 線散乱分光技術と密度汎関数理論の融合による格子ダイナミクス研	
		究	.34
	5.4 原子	- 力基礎工学研究センター	.36
	5.4.1	中性子線源を用いた新たなアクティブ中性子法に関するシミュレーション	.36
	5.4.2	高速中性子直接問いかけ法を用いた非破壊測定装置の設計と燃料デブリ内核	
		物質測定への適用性に関するシミュレーション研究	.38
	5.4.3	中性子共鳴透過分析用検出器に用いる遮蔽体の検討	.40
	5.4.4	ガンマ線ビルドアップ係数のレビュー	.42

5.4.5	化学輸送モデル GEARN-FDM によるヨウ素 129 の全球大気拡散シミュレー	-
	ションの妥当性検証	45
5.4.6	局所域高分解能大気拡散モデルを用いた原子力施設周辺の大気拡散詳細解析.	48
5.4.7	眼球形状が標準的な照射場での組織吸収線量に与える影響	50
5.4.8	量子分子動力学モデルを使った原子核·原子核衝突におけるパイオン生成シミコ	L
	レーション	52
5.4.9	環境放射性核種からの外部被ばく線量換算係数の評価	55
5.4.10	PHITS における分析機能の開発	57
5.4.11	PHITS ユーザ入力支援ソフトウェアの作成	59
5.4.12	PHITS の T-DCHAIN タリーの改良	62
5.4.13	第一原理計算による SA 時の Cs 吸着挙動評価とウラン燐酸化合物の評価	64
5.4.14	軽水炉過酷事故下での Cs モデリング挙動	67
5.4.15	炉内熱流動挙動評価を目的とした混相流解析手法の構築	70
5.4.16	機構論的限界熱流束手法確立のための二相流挙動解析	71
5.4.17	過飛散微粒子捕集挙動の予測評価手法の開発に関する研究	74
5.4.18	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	76
5.4.19	ADS 設計のための詳細熱流動解析	79
5.4.20	界面追跡法に基づく混相流解析手法開発	82
5.4.21	スプラッシュ現象に対する JUPITER の適用性評価と課題抽出	85
5.4.22	合金化と組織制御のための原子・電子シミュレーション	88
5.4.23	第一原理計算による原子力材料への水素吸着・侵入機構の研究	91
5.5 先靖	#基礎研究センター	93
5.5.1	低次元強相関系の基底状態および励起ダイナミクスの研究	93
5.6 物質	質科学研究センター	96
5.6.1	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	96
5.7 環境	竟技術開発センター	98
5.7.1	JMTRの廃止措置計画に係る中性子束評価の精度の検証	98
5.8 高温	显ガス炉研究開発センター	.101
5.8.1	高温ガス炉を利用した ^{99m} Tc 製造に関する予備検討	.101
5.8.2	高温ガス炉用3次元動特性解析コードの開発	.104
5.9 高速	速炉サイクル研究開発センター	.107
5.9.1	高速炉蒸気発生器内ナトリウム-水反応現象数値解析コードの高度化	.107
5.9.2	SPIRAL コードによる低流量条件下大型燃料集合体試験解析	. 110
5.9.3	連続エネルギーモンテカルロコード MVP を使用したナトリウム冷却高速炉	
	MOX 燃料炉心の反応率分布解析	. 113

5.1	10 敦貧	貿総合研究開発センター	115
	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	115
5.1	11 炉詞	安計部	118
	5.11.1	多重リサイクルによる商用高温ガス炉の環境負荷低減	118
5.1	12 廃炊	戸国際共同研究センター	121
	5.12.1	福島廃炉推進のためのレーザー利用デブリ溶融シミュレーション解析手法の)
		開発(1)	121
	5.12.2	福島廃炉推進のためのレーザー利用デブリ溶融シミュレーション解析手法の)
		開発(2)	124
	5.12.3	含水廃棄物等の水分蒸発挙動コードの開発	126
	5.12.4	JUPITER コードの溶融要素過程解析モデルに対する妥当性検証解析	128
5.1	13 核7	下拡散・核セキュリティ総合支援センター	131
,	5.13.1	遅発ガンマ線分光システムの実用的開発	131
5.1	14 シス	ステム計算科学センター	134
,	5.14.1	粒界リン偏析過程の分子動力学シミュレーション	134
,	5.14.2	材料機能における核量子効果の計算科学研究	137
,	5.14.3	転位と溶質元素の第一原理計算	140
,	5.14.4	原子力分野での物性計算科学技術の高度化	143
,	5.14.5	原子・分子シミュレーションによる核燃料の物性評価	146
	5.14.6	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	148
	5.14.7	メタダイナミクス法による高温水中糖アルコール脱水反応機構の解明	151
	5.14.8	森林内有機分子とセシウムの選択的錯体形成機構のシミュレーション研究	154
	5.14.9	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	156
,	5.14.10	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	159
,	5.14.11	ライブラリ公開のための連立一次方程式ソルバの整備	162
	5.14.12	第一原理計算による原子力材料劣化機構の研究	164
,	5.14.13	大規模流体計算の超並列計算技術の開発	167
	5.14.14	可視化用粒子データを用いた In-Situ 可視化システムによる階層型データの)
		可視化	171
	5.14.15	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	174
6.	おわり	に	177
付	録		178
著	者名別	論文索引	180

Contents

1.	Introduct	ion	1
2.	Supercomputer System of JAEA4		
3.	Compute	r Usage Records in FY2018	6
	3.1 Ava	ilability and Utilization Rate	6
	3.2 Sec	tor Computer Time	7
4.	User Sup	port of Supercomputer System of JAEA1	0
	4.1 Sup	oport for the Use of Supercomputer System of JAEA1	1
	4.1.1	Help Desk1	1
	4.1.2	Program Development and Maintenance1	1
	4.1.3	Program Optimization Tuning	4
	4.2 Tra	ining for Computer Usage Techniques (Tutorials, Seminars)1	6
5.	Research	and Development Activity by using Supercomputer System of JAEA1	7
	5.1 Nuc	clear Safety Research Center1	7
	5.1.1	CFD Analysis of Hydrogen Flame Propagation with Turbulent Flame	
		Closure Model	7
	5.1.2	Numerical Simulation of a Buoyant Heated Air Jet in Large Containment	
		Vessel CIGMA with Outer Surface Cooling	9
	5.1.3	Influence on Flow Field by Obstacles in the Large Containment Vessel	
		Facility CIGMA	2
	5.1.4	IPRESCA CFD Benchmark Analysis	4
	5.1.5	Topographical Effects in Radiological Aerial Measurement	7
	5.2 Nuc	clear Emergency Assistance and Training Center2	8
	5.2.1	Effect of Artificial Radionuclide Deposited on Monitoring Post on Measured	
		Value of Ambient Dose Rate	8
	5.3 J-P.	ARC Center	1
	5.3.1	Evaluation of Nuclide Production Cross Section for Accelerator-driven	
		Nuclear Transmutation System	1
	5.3.2	Lattice Dynamics Investigation Via Inelastic x-ray Spectroscopy and	
		Density-functional Theory	4
	5.4 Nuc	clear Science and Engineering Center	6
	5.4.1	Simulations for a New Active Neutron Method using a Continuous Neutron	
		Source	6

5.4.2	Simulation Study on Design of Nondestructive Measurement System using
	Fast Neutron Direct Interrogation Method and on its Application to
	Nuclear Materials in Fuel Debris
5.4.3	Study of Shield for Neutron Detector for Neutron Resonance Transmission
	Analysis
5.4.4	Reviews of Buildup Factors for Gamma-rays
5.4.5	Validation of Global Atmospheric Dispersion Simulation of Iodine-129 by
	Chemical Transport Model GEARN-FDM
5.4.6	Detailed Simulations of Plume Dispersion around Nuclear Facilities using
	a Local-scale High-resolution Atmospheric Dispersion Model
5.4.7	Influence of Eye Shape on Tissue Absorbed Dose in Standard Radiation
	Fields
5.4.8	Application of Quantum Molecular Dynamics Model for Simulation of Pion
	Production from Nucleus-nucleus Collision
5.4.9	Evaluation of Dose-conversion Coefficients for External Exposure to
	Radionuclides Distributed in Environments
5.4.10	Development of Analysis Function in PHITS
5.4.11	Development of PHITS Graphical User Interface: PHACE59
5.4.12	Improvement of T-DCHAIN Tally in PHITS
5.4.13	Evaluation on Cs Adsorption Behavior during SA and Uranium Phosphate
	Compounds using First Principles Calculations
5.4.14	Cs Modelling Behavior under LWR Severe Accident67
5.4.15	Development of Multiphase Simulation Method for Thermal-hydraulics
	Behavior in a Reactor
5.4.16	Numerical Simulation for Establishment of Evaluation Method of Critical
	Heat Flux Based on Mechanism71
5.4.17	Development of Numerical Simulation Method of Aerosol Particles
	Behavior
5.4.18	Development of Numerical Simulation Method for Thermal Fluid Flow
	Phenomena on Severe Accident Condition in Reactor Pressure Vessel
5.4.19	Detailed Numerical Studies on Thermal-hydraulics in a Design of ADS
	System
5.4.20	Development of Multiphase Flow Analysis Method Based on Interface
	Tracking Method
5.4.21	A Numerical Study of Applicability and Problems of JUPITER for a Splash
	Phenomenon
5.4.22	Atomic and Electronic Modeling for Alloying and Defect Textures
5.4.23	Hydrogen Absorption and Penetration Mechanism into Nuclear Material
	using First Principle Calculation91

5.5	Adv	vanced Science Research Center93
5.5	.1	Research for Ground State and Excitation Dynamics in Low-dimensional
		Strongly Correlated Systems
5.6	Ma	terials Sciences Research Center96
5.6	.1	Simulation Program for Microscopic Magnetization Processes in Magnetic
		Materials
5.7	Wa	ste Management and Decommissioning Technology Development Center98
5.7	.1	Verifying Accuracy of Neutron Flux Evaluation on JMTR Decommissioning
		Plan
5.8	НТ	GR Research and Development Center101
5.8	.1	Feasibility Study of ^{99m} Tc Production at the High-temperature Gas-cooled
		Reactor
5.8	.2	Development of Three-dimensional Reactor-kinetics Code for HTGRs104
5.9	Fas	st Reactor Cycle System Research and Development Center107
5.9	.1	Advancement of a Computer Program for Sodium-water Reaction
		Phenomena in a Steam Generator of Fast Reactors
5.9	.2	Analysis of Large-scale Fuel Assembly Experiment under Low Flow Rate
		Condition by SPIRAL Code
5.9	.3	Calculation of Reaction Rate of Sodium-cooled Fast Reactor MOX Fuel
		Core using the Continuous-energy Monte Carlo Code MVP113
5.10	Tsu	uruga Comprehensive Research and Development Center
5.1	0.1	Simulations of the In-service Inspection of FBR Components using
		Methods based on Eddy Currents
5.11	Rea	actor Systems Design Department
5.1	1.1	Reduction of Environmental Burden for a Commercial-scale HTGR by
		Multi-recycling
5.12	Col	laborative Laboratories for Advanced Decommissioning Science
5.1	2.1	Development of a Numerical Simulation for Laser Processing of Fuel
0.1		Debris at Fukushima Dajichi Nuclear Power Station (1)
5.1	2.2	Development of a Numerical Simulation for Laser Processing of Fuel
	. –	Debris at Fukushima Daiichi Nuclear Power Station (2)
5.1	2.3	Development of Drying Simulation Code for Waste Storage
5.1	2.4	Validation and Verification for the Melting and Eutectic Models in
		JUPITER Code

JAEA-Review 2019-017

	5.13 Inte	egrated Support Center for Nuclear Nonproliferation and Nuclear Security131
	5.13.1	Practical Development for a Delayed Gamma-ray Spectrometry System131
	5.14 Cer	nter for Computational Science & e-Systems134
	5.14.1	Molecular Dynamics Simulation of Grain Boundary Phosphorus
		Segregation Process
	5.14.2	Computational Studies for Quantum Nuclear Effects in Functional Materials
	5.14.3	First-principles Calculations of Interaction between Dislocation and Solute
	011110	Elements
	5.14.4	Development of Numerical Techniques for Materials in the Research Field of Atomic Energies 143
	5.14.5	Atomic Simulations of Physical Properties for Nuclear Fuel
	5.14.6	Numerical Simulation of Radioactive Materials in the Environment
	5.14.7	The Elucidation of Reaction Mechanism of Suger Alcohol Dehydration in
		Hot Pressurized Water with Metadynamics Calculations
	5.14.8	Simulation Study of Selective Cesium Complexation Mechanism by
		Organic Matter in Forest
	5.14.9	Atomistic Simulations for Microstructural Evolution of Irradiated
		Materials
	5.14.10	Simulation for Radioactive Nuclides Transport Inside Harbor of
		Fukushima Daiichi Nuclear Power Station159
	5.14.11	Maintenance of Linear Equation Solvers for Publishing as Subroutine
		Library
	5.14.12	First-principles Study of the Degradation of Nuclear Materials164
	5.14.13	Development of Massively Parallel Simulation Technology for Extreme
		Scale CFD Simulations
	5.14.14	Visualization of Hierarchical Data with In-Situ Visualization System using
		Particle Data
	5.14.15	Development of Real-time Wind Simulation based on Lattice Boltzmann
		Method174
6.	Conclusio	on177
Ap	pendices	
Au	thor Name	e Index

This is a blank page.

1. はじめに

日本原子力研究開発機構(以下「原子力機構」)では、福島第一原子力発電所事故への対応、原 子力の安全性向上研究、核燃料サイクルの研究開発、放射性廃棄物の処理・処分技術開発といっ た分野の研究開発などを重点的に実施している。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、原子力機構においても従来から多くの研究 開発に計算科学技術が用いられている。特に、大型計算機システムは計算科学技術を駆使した研 究開発を進めることで大型実験施設に頼らないイノベーション創出に貢献が期待される重要イン フラとして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 30 年度に原子力機構の発表した査読付論文の総数は 859 件であった。このうち計算科学技術を利用した論文は 170 件(19.8%)である。この論文数は、全論文の約 20%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 21~30 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 21 年度~30 年度]

大型計算機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・新型炉研究開発部門、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。

本報告は、原子力機構における平成 30 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

	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++

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)

平成 30 年 3 月末 現在

3. 平成 30 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 ICEXは、安定して運用され、年間稼 働率は 97%を達成した(図 3.1: 紺の棒グラフ)。トラブルによる運用の停止はなく、運用の停止 は、年度切替え作業(4月)、原科研構内全域停電作業(7月、12月)、及びシステム保守作業(12 月)によるものである。



※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 :運転可能時間- (システムダウン時間+保守時間) 総コア運用時間:実運用時間×60,240 コア

※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



コア利用率

システム全体の年間コア利用率は92.6%と高率を達成した。(図3.1: 橙の棒グラフ、詳細な利 用実績は付録 A に示す)。ジョブ運用のコア利用率向上の対策として、これまでに一般利用者用 ノード(年間 100 万ノード時間の制限有り)のプロセッサの割当変更による実行順序の制御など を実施(平成28年8月、平成29年7月)した。このプロセッサ割当の見直しの効果が奏功し、 一般利用者用ノードの月間コア利用率は 54.6% (平成 28 年 4 月~平成 29 年 7 月) から 68.4% (平成 29 年 8 月~平成 30 年 6 月)まで向上が図れた。平成 30 年度には、一般利用者用ノード のコア利用率をさらに向上すべく、夜間休日の時間帯に一般利用者用ノードの一般クラスと会話 型クラスの空いているノードを他クラスに割当てる制御を追加した(表 3.1)。このような改善活動の取り組みにより、一般利用者用ノードの月間コア利用率(図 3.2)は80%台(平成 30 年 7 月 ~ 平成 31 年 3 月)を達成した。

	対策日	対策内容
1	平成 30 年 5 月	ー般利用者用ノードをより効果的に活用するため、一般クラス(p432, p216) に割当てている 90 ノードを夜間休日の時間帯 (19:00~翌8:00) に限り、 課題クラス (h5184, h432) に割当てる制御を追加
2	平成 30 年 6月	一般利用者用ノードと課題利用者用ノードの会話型クラスをより効果的に 活用するため、会話型クラス(t432,t48)に割当てている20ノードを夜間 休日の時間帯に限り、他クラス(h432,p432,p216,p48)に割当てる制御を 追加

表 3.1 ジョブ運用の改善活動



図 3.2 一般利用者用ノードの月間コア利用率

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 ICEX の利用者数は 316 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 3.3)。

JAEA-Review 2019-017



図 3.3 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 34,418 万コア時間が利用さ れた。分野別のコア利用時間を図 3.4 に示す。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 3.4 ICE X の分野別コア時間利用実績

JAEA-Review 2019-017

表 3.2 主な ICE X を利用した福島復興に低	係る対応
----------------------------	------

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	3,030.1	5.4.18 項
2	除染除去土壌中粘土鉱物によ るセシウム吸着脱離挙動の評 価	システム 計算科学センター	VASP 9,792	1,693.4	5.14.6 項
3	溶融燃料落下挙動の評価手法 開発	原子力基礎工学 研究センター	TPFIT 4,000	1,184.5	5.4.20 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	335.6	5.14.2 項
5	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	192.9	5.14.5 項
6	SA 時のセシウム(Cs)吸着挙 動の評価	原子力基礎工学 研究センター	VASP 240	118.4	5.4.13 項
7	Cs modelling behavior under LWR severe accident	原子力基礎工学 研究センター	VASP 2,400	117.2	5.4.14 項
8	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	77.6	5.14.10 項
9	炉内熱流動挙動評価を目的と した混相流解析手法の開発	原子力基礎工学 研究センター	TPFIT 1,792	56.3	5.4.15 項
10	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	51.3	5.4.9 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 30 年度の利用相談は、年間 761 件(月平均:約63 件)寄せられた(詳細は付録 B に示す)。 そのうち約 61%が ICE X の利用(467 件)、約 11%が可視化(88 件)に関するものである。

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 30 年度は表 4.1 に示す選定要件に基づき、10 件のプログラム開発整備作業 を採択・実施した。

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	4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うプログラム	2 件
(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

表 4.1 プログラム開発整備における選定要件と選定件数

平成 30 年度の作業について表 4.2 に示す。大規模データの可視化処理対応が必要であるとして 選定した「JUPITER における分散データ可視化環境整備」と、「TPFIT における入出力機能の改 良」では、オープンソース、スケーラブル、かつマルチプラットフォーム対応の可視化ソフトと して広く利用されている ParaView で可視化できるように機能追加を行った。これにより、両プ ログラムのオープンソース化により大学や研究機関で多くの研究成果の創出が見込まれる。

孜 4.2 十成 50 十反 / ロ / ノム 囲 光 笠 慵 下 未 (1)	表 4.2	式 30 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	JUPITER における 分散データ可視化 環境整備 (P4)	炉内の溶融物移行進展挙動の典型的進展と非典型的進展の違いを詳細解析する多層多成分 3 次元熱流動解析コード JUPITER の開発を支援。JUPITER の可視化用バイナリデ ータ出力部の処理を拡張し、VTK XML フォーマットのデー タとして出力できるようプログラムを作成。 これにより、HPCで人気のある ParaView で単一PC での可 視化が困難であった大規模並列計算による並列可視化が可能 となった。	5.4.18 項
2	TPFIT における入 出力機能の改良 (P4)	軽水炉安全性の向上に向け、事故時を含む炉内熱流動挙動を 評価する界面追跡法に基づく詳細二相流解析コード TPFIT の開発を支援。TPFIT の出力結果の STL 形式データを VTK フォーマットに変換するツールを作成。 これにより、TPFIT の出力結果を HPC で人気のある ParaView で可視化が可能となった。	5.4.20 項
3	PHITS ユーザ入力 支援ソフトウェア の開発 (P1)	ユーザ数 2,000 名を超える汎用モンテカルロ計算コード (PHITS)の利用において、多くの入力ファイルのパラメー タ等を視覚的に理解して入力できるグラフィカルユーザイン タフェイス (PHACE)の開発を支援。平成 29 年度に開発し た Windows 版 PHACE に対し、物質、及び面データと連動 した領域 Cell 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、構成するセルの形質定義を記述することが可 能となり、PHACE の PHITS インプット作成機能が一層強 化され利便性が向上した。	5.4.11 項
4	PHITS における分 析機能の開発 (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。計算条件の変化が計算結果 への影響を分析するため、以下の機能追加を実施。 ① 変更するパラメータの情報を読み込むための新規コマン ド varfile の作成 ② 粒子輸送計算を複数実行するための修正 これにより、計算条件の一部を変化させた場合の粒子輸送計 算を複数回実施するために、シェルスクリプト等の外部プロ グラムを用意する必要がなくなり解析が容易となった。	5.4.10 項

表 4.2 平	「成 30 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
5	含水廃棄物等の水 分蒸発挙動コード の開発 (P1)	吸着材保管容器内の水素ガス挙動、及び残水蒸発の過程を解 析可能な2次元含水廃棄物等の水分蒸発挙動コードの開発を 支援。解析対象の実時間が長くなるため、複数回の継続計算 が出来るように、リスタート計算機能を追加。 これにより、保管容器内の長期的な水分挙動シミュレーショ ンを進めることが可能となった。	5.12.3 項
6	RKKY 相互作用す るスピンをもつ磁 性体における微視 的磁化過程シミュ レーションプログ ラムの作成 (P3)	磁性体における局在スピン間における長距離相互作用するラ ンダムネスを含む磁性体における磁化過程を解明するため、 空間2次元、及び3次元におけるランダウ=リフシッツ方程 式を用いたシミュレーションを作成。 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、長年にわたって未解 決な問題が残るグラス状態に関する基礎的な知見が得られる ようになった。	5.6.1 項
7	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)	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加熱面上液相挙動や金属材料溶融挙 動を模擬した評価解析を実施。 これにより、液膜厚さの違う液体が沸騰し蒸発する過程や金 属が加熱により溶融する過程を詳細に把握することが可能と なり、プレス公開した実験結果の再現計算ができる見通しを 得られた。	5.12.1 項 5.12.2 項
8	PHITS の [T-DCHAIN]タリ ーの改良 (P1)	 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。 ① PHITS の[T-DCHAIN]のxyzメッシュ出力ルーチン作成 ② DCHAIN-SP のxyzメッシュ入力ルーチン作成 これにより、PHITS> DCHAIN-SP の継続計算が可能とな り、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。 	5.4.12 項

- 孜 4.4 - 十成 50 十反 / ロノ / ハ囲 光雀 囲 上未 (5/)	表 4.2	平成 30 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
9	高温ガス炉用三次	超高温ガス炉(VHTR)の研究開発を ICE X で実施する目的	5.8.2 項
	元動特性解析コー	として、汎用流体解析コード STAR-CCM+を使用し、高温工	
	ドの開発	学試験研究炉(HTTR)の燃料棒1本の解析モデルの作成と、	
	(P1)	1 本の燃料棒周りの温度変化、及び冷却材の流れを模擬した	
		評価解析を実施。	
		これにより、STAR CCM+ の 3D CAD モデラー機能を用い	
		た解析モデルの作成、及び作成した解析モデルの計算での結	
		果、燃料棒周りの温度変化と冷却材の流れに対する挙動を確	
		認でき、炉心全体の安全性評価に適用できる見通しを得られ	
		た。	

4.1.3 プログラム最適化チューニング

プログラム最適化チューニングでは、大型計算機システムで実行されるプログラムについて、 高速化・並列化チューニングを行い、実行効率の改善、処理時間の短縮を実現することで、利用 者の研究活動を加速させるとともに計算資源の有効活用を図っている。例えば、チューニングに より、計算時間が 20%短縮されれば、計算機資源が 20%増加した効果をもたらすため、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30年度は表4.3に示す選定要件に基づ き、6件のプログラム最適化チューニング作業を採択・実施した。

選定要件	選定件数
(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	1件
(T3) 原子力機構内で共通に使用されるプログラム	2 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

表 4.3 プログラム最適化チューニングにおける選定要件と選定件数

平成30年度の作業について表4.4に示す。大型計算機システムのユーザの裾野拡大や有効活用 を図るため ICE X への整備が必要として選定した「大気拡散シミュレーションコード (GEARN-FDM)」において、自課室PCクラスタにおける解析対象(5年間分)の実行時間は約 60時間を費やしていたが、OpenMPによるスレッド並列化によりICE X の実行上限時間内(12 時間)で実行することが可能となった。これにより、過去の様々な気象条件に対する拡散解析の 分析により、事象の把握が効率的にできる見通しが得られた。

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	大気拡散シミュレーシ ョンコード GEARN-FDM (T1)	 ① 多重ループ内if文の削除 ② 関数呼出し回数の削減 ③ スレッド並列化 	7.0 倍の速度向上 (逐次→24 スレッド並列) を達成。	5.4.5 項
2	改良界面追跡法を用い た詳細二相流解析コー ド TPFIT (T1)	 ① スレッド並列化 ② MPI 通信コストの最適 化(26 方向→6 方向) 	 1.2 倍の速度向上 (10,240MPI 並列→ 5,120MPI×2 スレッド並 列)を達成。 	5.4.20 項
3	燃料集合体熱流動解析 コード SPIRAL (T1)	<i>キャッシュヒット</i> ミスの削 減	1.03 倍の速度向上 (1,024MPI 並列)を達成。	5.9.2 項
4	多相流溶融凝固解析コ ード JUPITER (T3)	 ① ベクトル化の促進 ② 演算量の削減 ③ 関数呼出しのインライン化 	1.09 倍の速度向上 (800MPI 並列 x 12 スレッド)を達成。	5.4.18 項
5	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 (T3)	 スレッド並列化 乱数発生ルーチン gaussrandの最適化 	 1.31~3.84 倍の速度向上 (ランダムモデルの6本、 ノンランダムモデルの6本) を達成。 	5.6.1 項
6	粒子・重イオン挙動解 析コード PHITS (T3)	スレッド間の競合状態の最 適化(CRITICAL セッショ ン・ATOMIC 演算の排除、 及びリダクションの利用)	1.31~5.50 倍の速度向上 (チュートリアルの5種類) を達成。	5.4.7 項

表 4.4 平成 30 年度高速化·並列化作業

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 30 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 7 回開催(初 級レベル:3回、中級レベル:4回)、延べ 76 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。

項	技術レベル	開催日時	開催場所	内容	形式	参加者
1	利用方法 初級	平成 30 年 7 月 30 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	19名
2	可視化 初級	平成 30 年 8月7日	情報交流棟 104 会議室	ParaView 講習会(初級編)	講義 実習	11 名
3	ISV ソフト 中級	平成 30 年 9 月 26 日	情報交流棟 104 会議室	STAR-CCM+ の混相流に関する 応用機能セミナー	講義 実習	2名
4	ISV ソフト 初級	平成 30 年 10 月 30 日	情報交流棟 104 会議室	ANSYS プリ入門セミナー (SpaceClaim コース)	講義 実習	11名
5	ISV ソフト 中級	平成 30 年 11 月 27 日	情報交流棟 104 会議室	ANSYS Workbench Mechanical 接触解析操作実習セミナー	講義 実習	9名
6	可視化 中級	平成 31 年 1 月 25 日	情報交流棟 104 会議室	初級・中級者向け AVS/Express 講習会	講義 実習	7名
7	ISV ソフト 中級	平成 31 年 3 月 27,28 日	情報交流棟 202 会議室	Abaqus 伝熱/熱応力解析セミナー	講義 実習	17名

表 4.5 平成 30 年度講習会

5. 大型計算機システム利用による研究成果

5.1 安全研究センター

Nuclear Safety Research Center

5.1.1 Turbulent Flame Closure モデルを用いた水素燃焼火炎伝播の CFD 解析

CFD Analysis of Hydrogen Flame Propagation with Turbulent Flame Closure Model

茂木 孝介 熱水力安全研究グループ

(1) 利用目的:

福島第一原子力発電所における水素爆発以降、シビアアクシデント時の水素安全対策への関心 が一層高まっている。水素リスク対策のさらなる高度化には、水素の発生・移行・燃焼の各プロ セスの正確な予測が必要不可欠である。事故のシナリオ予測・現象解明・評価モデル構築を詳細 に行うツールとして Computational Fluid Dynamics (CFD) が期待されている。安全研究の分 野で用いられる CFD では、RANS モデルと簡略化された燃焼モデル(化学反応の効果を簡略化) を用いることが多い。予混合火炎の CFD 手法では、Turbulent Flame Closure (TFC) モデル が近年注目されている。TFC モデルは未燃ガスで 0、既燃ガスで 1 となる反応進行係数を用いて 火炎を表現し、その輸送方程式を解くことで計算を簡略化する。しかし、簡略化により定量予測 が困難であり、モデルの高度化が求められている。本研究では様々な燃焼速度モデルの違いが火 炎伝播に与える影響を調査した。

(2) 利用内容·結果:

ENACCEF2 実験は、欧州技術支援機関ネットワーク(ETSON)の MITHYGENE プロジェ クトの一環で実施された水素爆燃ベンチマークテストである。乱流や初期水素濃度が、予混合水 素火炎の加速に与える影響を予測するための、CFD コードの性能評価を目的としている。実験 装置は高さ 7.65m、内径 23cm の円筒状密閉容器で、水素と空気の予混合ガスを封入し、装置の 下端で着火させる。水素濃度は 13%を用いた。円筒内に備えられた環状障害物により乱流が発 生し、火炎を加速させる。図1に ENACCEF2 の計算系を示す。



図1 ENACCEF2 計算体系

同実験の解析を目的として OpenFOAM®を用いたコード開発を行った。乱流モデルには標準 k-ε モデルを採用した。TFC モデルでは、進行係数の輸送方程式を閉じるために層流燃焼速度と 乱流燃焼に関するモデル式を必要とする。層流燃焼速度として、Verhelst&Sierens の式、乱流 燃焼速度式として Gülder の式を採用して計算を行った。

図 2 に計算で得られた水素予混合火炎伝播の様子を示す。(i) 反応進行形数、(ii) 乱流運動エ ネルギーを示している。火炎の先端が障害物に到着した時刻を to とし、0.001 秒ごとの時間進展 を示している。

火炎が障害物に到達すると急加速する。燃焼による膨張によって生じる圧力波が障害物付近の 乱流運動を促進し、増強した乱流が燃焼の反応速度を増加させる。このようなポジティプフィー ドバックループが形成されることで、火炎加速が生じている。



図2 反応進行形数と乱流運動エネルギーの時間進展

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 茂木孝介、Trianti Nuri、松本俊慶、杉山智之、丸山結、"燃焼速度モデルを用いた水素火 炎伝播の CFD 解析"、日本原子力学会 2019 年春の年会、水戸、2019.
- K. Motegi, N. Trianti, T. Matsumoto, T. Sugiyama, Y. Maruyama, "CFD Analysis of Hydrogen Flame Acceleration with Burning Velocity Models", NURETH-18, Portland, 2019.

(4) 今後の利用予定:

乱流が十分に発達した条件では、今回採用した計算手法を用いて、実験の良い予測が可能であ ることがわかった。一方で乱流が十分に発達していることを仮定したモデルでは、火炎加速にお ける初期段階(層流―乱流遷移)を正しく再現できるか疑問である。今後は汎用性の高い計算コ ードの開発を目指して、遷移を含む計算条件で手法の検証を行う。

5.1.2 CIGMA 装置内での外面冷却時における高温浮力噴流に関する数値解析

Numerical Simulation of a Buoyant Heated Air Jet in Large Containment Vessel CIGMA with Outer Surface Cooling

> Ari Hamdani 熱水力安全研究グループ

(1)利用目的:

Gas density stratification build-up and its propagation/erosion, which is regarded as a benchmark of hydrogen behavior in a severe accident, were experimentally and numerically studied by using buoyant jet in the containment vessel. The experimental investigation was performed in the large containment vessel called CIGMA (Containment InteGral effects Measurement Apparatus), and the numerical analysis was performed using the data of those experiments. Numerical analysis was carried out in order to know the detailed effects of external cooling on the fluid flow and thermal characteristics in the test vessel. The numerical simulation was performed using Computational Fluid Dynamics (CFD) code OpenFOAM. The numerical simulation was performed with non-uniform fixed wall temperature and various air jet inlet temperatures.

(2) 利用内容·結果:

I. Experimental Facility and Procedure

The CIGMA containment vessel is a cylindrical vessel with the inner diameter is 2.5 m, and the total height is 11 m. The inner diameter of the vertical injection nozzle is 83.1 mm (d), and its length is approximately 20d. External cooling in the CIGMA vessel consists of the upper pool, upper jacket, and lower jacket. The test vessel of the CIGMA facility was preheated by injection of heater air before cooling the vessel by water. After the preheating of the test vessel was completed, heated air with a mass flow rate of 50 g/s was injected into the vessel. The pressure inside the test vessel was maintained to be 101 kPa absolute by venting of the injected air at the bottom of the vessel (sump outlet).

II. Numerical Simulation

The present simulation was carried out using the open source code OpenFOAM in order to investigate the thermal mixing and stratification processes inside the vessel. An unsteady Reynolds Averaged Navier Stokes (U-RANS) approach and buoyantPimpleFoam solver were chosen to simulate the buoyant heated jet. A standard k- ϵ turbulence model was used. Figure 1 shows the numerical model and its mesh. The fluid domain was discretized by structured hexahedral mesh. Table 1 shows a summary of boundary and initial conditions.

JAEA-Review 2019-017



(a) 3D model domain (b) Detailed grid (c) Cross cut of the mesh

Figure 1 Model Geometry and Mesh Grid on Nozzle Exit
--

Boundary	Parameter	Run ID	
		JT-AJ-10 (Case 1)	JT-AJ-12 (Case 2)
Inlet	Temperature (°C)	143	335
	Velocity (m/s)	10.82	15.75
	Pressure (Pa)	Zero gradient	Zero gradient
Outlet	Temperature (°C)	Zero gradient	Zero gradient
	Velocity (m/s)	Outflow	Outflow
	Pressure (Pa)	Static pressure = 0	Static pressure = 0
Wall	Temperature (°C)	Fixed	Fixed
	Velocity (m/s)	No-slip	No-slip
	Pressure (Pa)	Zero gradient	Zero gradient
Initial	Temperature (°C)	32	52
condition	Velocity (m/s)	0	0
	Pressure (Pa)	101650	101700

Figure 2 represents a cross-section temperature contour of experimental and numerical simulation. From Fig. 2, we can see that thermal stratification is observed. The comparison between experimental (left side) and numerical (right side) for the average temperature contour was made at t = 100 s. Qualitatively agreement has been shown for case 1 and case 2. The discrepancy of temperature at the elevation below 3 m is mainly due to the initial temperature condition for CFD at t = 0 s was uniform. However, it is observed from the experimental data that the temperature was initially stratified at t = 0 s. The stratification was developed because the containment vessel was preheated before cooling the vessel by water at t = 0 s.



Figure 2 Cross-section temperature contour comparison of experiment vs simulation at t = 100 s, (a) case 1, (b) case 2.



Figure 3 Comparison of radial jet profiles at 1.9 m downstream nozzle exit, (a) normalized vertical velocity, (b) normalized r.m.s vertical velocity

The dimensionless radial profile of the mean vertical velocity is compared with well known experimental data reported in the literature, as shown in Fig. 3 (a). Figure 3 (b) shows the dimensionless radial profiles of the rms of the vertical velocity components for case 1 and 2. It can be seen that CFD predictions for both case 1 and case 2 are reasonably well with self-preservation.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- Ari Hamdani, et al., "CFD Analysis of the CIGMA Experiments on the Heated Jet Injection into Containment Vessel with External Surface Cooling", 18th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-18), Portland, Oregon, USA, August 18-23, 2019.
- 2) Ari Hamdani, et al., "Numerical Simulation of a Buoyant Heated Air Jet in Large Containment Vessel CIGMA with Outer Surface Cooling", AESJ Fall Meeting, Toyama, Japan, September 11-13, 2019.

(4) 今後の利用予定:

Further investigation on the thermal mixing and stratification would be done with high-temperature steam jet injection. Therefore, the steam jet condensation model on CFD method should be developed and validated with experiments result.

5.1.3 大型格納容器実験装置 CIGMA 内構造物の容器内流動場に対する影響

Influence on Flow Field by Obstacles in the 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における格納容器内熱水力挙動の評価手法の高精度化 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および蒸気凝縮挙動に着目した実験を行っている。また実験と並行して、 数値流体力学(Computational Fluid Dynamics: CFD)を用いた解析手法の高度化も実施して いる。

原子炉格納容器は非常に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生 じる。そのため格納容器内熱流動挙動を高精度に評価する上で、CFD 解析は有力なツールとな る。また、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:

CIMGA 装置は直径 2.5m、高さ約 11m の容器からなる大型実験装置である。CIGMA 試験部 内には温度計測用の熱電対およびガス濃度計測用のガスサンプリング配管が設置されている。こ れらの熱電対、サンプリング配管は厚さ 4mm、高さ 50mm の金属板(以下「フラットバー」) により容器内に固定されている。フラットバーは容器内 10 箇所の高さ位置に、容器を横断する ように設置されている。本研究ではこのフラットバーが容器内流動に与える影響を検討するた め、CFD による解析を実施した。CFD 解析にはオープンソースの CFD コード OpenFOAM®を 用いた。

本解析ではフラットバーのみを模擬し、熱電対やサンプリング配管は考慮しなかった。噴流条 件および外面冷却による自然対流条件の解析を行ったが、ここでは、噴流条件のみの結果を示す。 解析対象は空気噴流とし、室温大気圧空気中に7.65m/sで空気を噴出させる。容器底部に出口部 を設定した。図1が解析で模擬したフラットバーおよび噴流を供給するためのノズルの模式図で ある。噴流は容器中央のノズルから上部に向かって噴出する。

解析において乱流モデルとして SST k-omega モデルを適用した。解析に用いたメッシュは OpenFOAM®に実装されている SnappyHexMesh により作成した。フラットバーの厚さは 4mm で、容器直径に対して非常に薄いため、八分木法によりフラットバー周囲のメッシュを細分化し た。ジェットはノズルから上部へ噴出するため、ノズル出口より上部にあるフラットバーのみを 考慮し、解析に用いるメッシュ数を削減した。平均のメッシュ幅は 50mm、フラットバー近傍で は 2.3mm である。

図2に噴流放出から1000秒における容器内流速分布を示す。フラットバーはこれらの分布図 において、紙面垂直方向に設置されており、赤点で示す部分に相当する。噴流はノズルから放出 され、鉛直上向きに幅を増大させながら、フラットバーを横切り、容器頂部に衝突している。 噴 流の速度分布はほぼ左右対称となっており、フラットバーの流れ場に対する大きな影響は陽には 観察されなかった。詳細は示さないが、外面冷却による自然対流の条件でもほぼ同様の結果であ った。

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 30 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 CIGMA 容器内構造物の模式図



(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:

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、格納容器熱水力挙動評価手法の高精度化を進めていく。

5.1.4 IPRESCA CFD ベンチマーク解析

IPRESCA CFD Benchmark Analysis

岡垣 百合亜 熱水力安全研究グループ

(1) 利用目的:

欧州の研究ネットワークである NUGENIA の枠組みで実施されている IPRESCA 計画は、ソ ースターム計算強化を目的としたシビアアクシデント時のプールスクラビングに係わる国際プ ロジェクトである。このプロジェクトで実施されている数値流体力学(CFD)ベンチマーク解析 に参加し、界面追跡法(Volume of Fluid (VOF)法)を用いた気泡塔解析を行った。VOF 法は、 格子数が界面の解像に直結するため、非常に多くの格子を必要とし、長時間の計算となる。この ため、大規模並列処理できる ICE X を利用した。

(2) 利用内容·結果:

解析体系を図1に示す。計算体系は、室温20°Cにおける $0.02 \times 0.02 \times 0.08 \text{ m}^3$ の水(密度 1000 kg/m²、動粘性係数 1.004e-6 m²/s、表面張力 0.07 N/m) で満たされた領域を対象とし、底部の 円形オリフィスから空気(密度 1.2 kg/m³、動粘性係数 1.512e-5 m²/s)の単一気泡を注入する 様子を解析する。オリフィスの直径は 0.004 m、空気の注入速度は 0.2 m/s であり、重力加速 度を 9.81 m/s² とした。座標系は、図1に示すように、原点をオリフィスの中心、水平方向を x軸、鉛直方向を y 軸、主流方向を z 軸とした。CFD コードは OpenFOAM®を使用し、ソルバ は VOF 法、時間刻みは自動時間刻み (Courant 数は 0.5)、乱流モデルを使用せず、用いた計 算格子数は 566 万セルであった。

IPRESCA ベンチマークには 6 機関が参加した。参加機関において用いた計算手法及び計算 コード並びに事前に提出した解析結果のうち、比較結果として示された気泡離脱頻度^{IID}を表 1 に示す。気泡離脱頻度は、空気の注入体積流量とオリフィスから離脱する際の気泡平均体積の 比で表され、注入体積流量は境界条件であるため、離脱時気泡平均体積に依存する。本解析で は、離脱時気泡平均体積は 1.8e-7 m³であった。比較結果から、参加機関の間で、気泡離脱頻 度に大きなばらつきが見られる。図 2 に主流方向の平均ボイド率(空気の体積率)分布を示す。 高さが上昇するにつれボイド率は減少し、高さ 0.02-0.07 m において約 0.2 となる。参加機関 の結果^{III}は、高さ 0.02-0.07 m でのボイド率は 0.1-0.3 の間に分散しており、原子力機構の結果 はそれらの平均的な結果を示した。また、定性的には S の結果が 0.04 m までは原子力機構に 最も近いとみられる。図 3 に本解析のボイド率 0.5 等値面分布を示す。気泡注入直後の気泡形 状は、球形に近い形状(アスペクト比 1.37、平均気泡体積 1.77e-7 m³)であるのに対し、気泡 が上昇 するにつれて扁平な楕円体となり(アスペクト比 1.58-1.85、平均気泡体積 1.73e-7-1.75e-7 m³)、回転しながららせん状に上昇する。体積から算出した気泡の等価球形気 泡径は約 7e-3 m、気泡上昇速度は平均 0.25 m/s であり、単一気泡の挙動を調査した先行研究 ²¹ の実験結果と良好に一致した。図 4 にノズル下流 z=0.03 m、0.07 m における水平方向のボイ
ド率分布の比較結果^[1]を示す。原子力機構の結果は、*z* = 0.07 m の方がグラフの傾きはわずか に小さく、G2 を除き、他の機関でもそのような傾向が見られた。これは、上昇による気泡形状 の変化や気泡運動の影響によるものと考えられる。

- [1] Dehbi, A., Summary of Benchmark for CFD of globule hydrodynamics, 3rd meeting of the IPRESCA project, Frankfurt/Main, Germany, 27-28 June 2019.
- [2] Clift, R., et al., Bubbles, Drops, and Particles, Academic Press, 1978, p.172.



図1 解析体系

公王 参加阅因(2) 前开 1 四(前开 1				
	参加機関(国)	手法	計算コード	気泡離脱頻度 [Hz]
	JAEA (日本)	界面追跡法(VOF)	OpenFOAM	14.3
	J (日本)	界面追跡法(VOF)	STAR-CCM+	19
	G1 (ドイツ)	二流体モデル	ANSYS CFX	NA
	G2 (ドイツ)	界面追跡法(VOF)	OpenFOAM	17.4
	C (中国)	界面追跡法(VOF)	ANSYS Fluent	10
	S (スイス)	界面追跡法(VOF+Level Set)	ANSYS Fluent	13.7

表1 参加機関の計算手法、計算コード及び気泡離脱頻度[1]



図2 主流方向の平均ボイド率の比較[1]





図 4 ノズル下流 z=0.03 m、0.07 m における水平方向の平均ボイド率の比較 (左:z=0.03 m、右:z=0.07 m)^[1]

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) Y. Okagaki, Y. Sibamoto, CFD benchmark calculation in JAEA, 3rd meeting of the IPRESCA project, Frankfurt/Main, Germany, 27-28 June 2019.

(4) 今後の利用予定:

今後は、解析結果の検討及び第二段階の CFD ベンチマーク解析(詳細は未定)を行う予定である。

5.1.5 航空機モニタリングにおける地形影響評価

Topographical Effects 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、計数率を地上1mにおける空 間線量率に換算している。計数率から空間線量率換算の際に地形を平坦とみなして解析が行われ

ている。しかし、日本の国土の多くを山地が 占めており、日本国内における航空機モニタ リングを行う際には地形の影響は無視でき ない。そこで、実地形と平坦な地形における ガンマ線フラックスを比較することによっ て、地形の影響度を評価する。

(2) 利用内容·結果:

福島第一原子力発電所から 80km 圏内で 無作為に評価点を設定し(図 1)、これらの 地点における対地高度 300m でのガンマ線 フラックスを計算した。評価点の数値標高モ デル(DEM)から三角ポリゴンマップを作 成し、各三角を面線源として、粒子輸送コー ド PHITS を用いてフラックスの計算を行っ た。平坦な地形のフラックスに対する実地形 のフラックスの比を用いて評価を行った。そ の結果、フラックス比は最小 0.54、最大 5.43 となり、地形によって異なることがわかった (図 2)。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等): なし



図1 実地形線源の作成概要



図2 フラックス比の頻度分布

(4) 今後の利用予定:

今後も大型計算機を使用して、様々な条件に対して同様の計算を実施し、地形影響を補正する 手法を開発する予定である。

5.2 原子力緊急時支援・研修センター Nuclear Emergency Assistance and Training Center

5.2.1 モニタリングポストに付着した人工放射性核種による空間放射線量率測定値への影響推定

Effect of Artificial Radionuclide Deposited on Monitoring Post on Measured Value of Ambient Dose Rate

平岡 大和 緊急時対応研究グループ

(1)利用目的:

原子力施設周辺の地域にはモニタリングポスト(以下、MP)が設置されており、空間線量率 を監視している。原子力災害時には、空間線量率に応じた公衆への防護措置を実施することが定 められており、主に MP の測定値により判断する。しかし、施設から放出された人工放射性核種 が MP の屋根表面に付着した場合、空間線量率測定値に影響を与える可能性がある。

本研究は、適切な防護措置実施のため MP に人工放射性核種が付着した場合においても、正確 な空間線量率の評価を実現させることが目的である。本研究では、MP 及び周辺の地表に付着し た人工放射性核種による影響を模擬するため、モンテカルロ計算を行う PHITS コードを利用し た。解析では、線源となる半径 100m 規模の地表体系を用意し、MP の NaI(TI)検出器に侵入す る γ線を取得した。この検出器の検出領域である NaI(TI)結晶は直径が 2 インチでしかなく、十 分な統計量を得るには大量のヒストリーを計算する必要があった(本件ではヒストリー数 10¹¹ 程度の計算を実行)。そのため、大型計算機の利用が必要不可欠であった。

(2)利用内容·結果:

図1及び図2に計算体系を示す。PHITS コードを用いて、半径100mの水平な地表の中心に MPを配置する体系を作成した。本件のMPは、核燃料サイクル工学研究所のものをモデルとし た。地表面及びMP 屋根表面を線源領域とし、¹³⁷Cs, ¹³⁴Cs 及び¹³¹I をそれぞれ一様に分布させ た。モンテカルロ計算から NaI(Tl)結晶領域での γ 線のエネルギーフラックス $\phi_i(E)$ [/cm²/decay] を取得し、核種iによる空間線量率 D_i [Gy/s]を(1)式により求めた。

$$D_{i} = S\sigma_{i} \int \phi_{i}(E)A(E) dE$$
(1)

ここで、Sは線源面積[cm²]、 σ_i は核種iの面積当たりの放射能[Bq/cm²]、A(E)は変換係数[Gy cm²] を表す。次に、3 核種全てについて空間線量率 D_i [Gy/s]を足し合わせ、空間線量D[Gy/s]を得た。

$$D = \sum_{i} D_{i} \tag{2}$$

最後に、(3)式に示す空間線量率比Rを定義し、空間線量率測定値の内で MP 屋根由来の空間線量率が占める割合を求めた。

$$R = \frac{D_R}{D_R + D_G} \tag{3}$$

ここで、*D_R*は MP 屋根表面由来の空間線量率[Gy/s]、*D_G*は地表面由来の空間線量率[Gy/s]を表す。 原子力事故により MP と地表に人工放射性核種が付着してからの経過時間と空間線量率比*R*との関係を求めると図3に示す結果となった。ただし、*σ*_iの初期値は福島第一原子力発電所事故時の値とし、時間経過に伴って物理減衰させた。この結果から、原子力事故からの経過時間に依らず、MP 屋根由来の空間線量率は測定値全体の内0.44の割合を占めることが示された。



図1 計算体系の全体像



図2 MPと検出器の内部構造



図3 空間線量率比Rと経過時間の関係

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) H. Hiraoka, T. Hokama, M. Munakata, "Influence of artificial radionuclide deposited on a monitoring post on measured value of ambient dose rate", Proc. ICONE27, ICONE27-2303, 2019.

(4) 今後の利用予定:

図3の通り、空間線量率比Rは0.44となると示された。しかし、実際の測定値による空間線量 率比は、MP周辺の木に付着した人工放射性核種等の影響によって0.44より小さい値を取るこ とが分かっている。したがって、今回求めた空間線量率比は実用的な値ではなく、過大評価され たものであると言える。今後は、MP周辺の構造物や地形等もモデリングし、より実環境に近い 体系を利用して実用的な空間線量率比の算出を目指す。そのため、今後も大型計算機による支援 は必要であり、利用を続ける予定である。

5.3 J-PARCセンター J-PARC Center

5.3.1 加速器駆動核変換システムのための核種生成断面積の評価

Evaluation of Nuclide Production Cross Section for Accelerator-driven Nuclear Transmutation System

> 松田 洋樹 施設利用開発セクション

(1) 利用目的:

原子力機構が計画する加速器駆動核変換システム (ADS) では 1.5 GeV に加速した 30 MW の 陽子ビームを液体鉛ビスマス標的に入射し、核破砕反応で発生した中性子によりマイナーアクチ ノイドを核変換させる。陽子による核破砕反応で鉛ビスマスから発生した放射性核種の取扱いは 長期間の運転において重要となる。放射性核種の定量評価のためには高精度な核種生成断面積が 必要であり、他の研究期間の ADS で想定する 0.4 – 3.0 GeV の陽子ビームを用いた核種生成断 面積測定を J-PARC において行っている。測定対象核種は鉛及びビスマスだけでなく、計算モデ ルと体系的に比較検討するために軽核から重核にわたる幅広い核種を対象としている。

得られた実験値を PHITS [1]コード等を用いた計算値と比較検討するために、大型計算機 ICE X を用いて核種生成断面積の計算を行った。

(2) 利用内容·結果:

平成 30 年度 J-PARC において実施した核種生成断面積測定では、炭素及びベリリウムを標的 として用い、これらの板状の試料を積層したものに 0.4, 1.3, 2.2, 及び 3.0 GeV のエネルギーを 持つ陽子を照射した。ゲルマニウム検出器を用いて、照射した試料のガンマ線スペクトルを測定 し生成核種の放射能を評価した後、陽子数及び試料数密度で除することで核種生成断面積を得 た。

PHITS 及び INCL++コード [2]を用い核内カスケードモデル(INCL-4.6, INCL-6.0, Bertini) 及び蒸発過程を記述するモデル(GEM, Gen.GEM, ABLA07)の組み合わせを変えて計算を行っ た。幅広いエネルギー領域で細かい間隔で高精度に計算する必要があったため ICE X により計 算を実施した。当セクション所有計算機で1ヶ月程度かかると見積もられた計算が ICE X を用 いることで1日~2日以内で完了した。

測定した実験と計算の比較を図1及び図2に示す。⁹Be(p,x)⁷Be 生成断面積を図1に示すが、 いずれの計算も実験の約 0.2~0.5 倍となり過小評価していることが分かった。一方図 2 の natC(p,x)⁷Be 断面積においては、PHITS 計算値(INCL-4.6/Gen.GEM)が 0.7 GeV 以上で実験 値を再現していた。INCL++による計算は、鉛やビスマスなどの重核種を標的とする ⁷Be の生成 断面積では実験をよく再現するものの[3]、軽核種を標的とする本実験結果に対し全エネルギー 領域において約 1.5~2 倍の過大評価を示した。この原因の一つには、重核種を標的とする場合 において ⁷Be はフラグメンテーションで生成するのに対し、軽重核の場合には直接過程で生成さ れ、軽核種に対するこの過程の記述に問題があると考えられる。

7Be は natC 及び 9Be 標的では直接反応によって生成されるため GEM と Gen.GEM の差はほぼ 全く見られなかった。しかし重核の断面積では脱励起過程で生成された蒸発核種、蒸発残留核種、 及び核分裂核種の断面積が異なり Gen.GEM を用いた計算が実験値を再現していた [5]。

計算の他に核データライブラリ JENDL-HE/2007 [6]とも比較検討を行った。軽核種のライブラ リーとして格納されている C の natC(p,x)7Be 反応において実験値をよく再現していた。

これらの結果から 0.7 GeV 以上のエネルギー領域において PHITS (INCL-4.6/Gen.GEM) は natC(p,x)7Be の実験をよく再現するが、全領域にわたり INCL++は過大評価、PHITS (Bertini モデル) は過小評価であった。一方 ${}^{9}Be(p,x)$ 7Be 反応ではいずれの計算も過小評価を示し、実験 値を再現するためにはモデルの改良が必要であることが分かった。



- [1] T. Sato, et al., Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02, J. Nucl. Sci. Technol. 55, pp.684-690 (2018).
- [2] Boudard, et al., New potentialities of the Liège intranuclear cascade model for reactions induced by nucleons and light charged particles, Phys. Rev. C87, 2013, p.014606.
- [3] D. Mancusi, et al., Extension of the Liège intranuclear-cascade model to reactions induced by light nuclei, Phys. Rev. C 90, pp. 054602 (2014).
- [4] S. Furihata, Statistical analysis of light fragment production from medium energy proton-induced reactions, Nucl. Instrum. Meth. B 171(3), pp.251-258 (2000).
- [5] H. Matsuda, et al., Measurement of nuclide production cross section for lead and bismuth with proton in energy range from 0.4 GeV to 3.0 GeV, ND2019, Beijing, 2019.
- [6] K. Shibata, et al., JENDL-4.0: A New Library for Nuclear Science and Engineering, J. Nucl. Sci. Technol. 48(1), pp.1-30 (2011).

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 松田洋樹 他、"J-PARC における 0.4GeV-3.0GeV 陽子を用いた核種生成断面積測定(II) 軽 核種における核種生成断面積"、日本原子力学会 2019 年春の年会、水戸、2019.

(4) 今後の利用予定:

今後も様々な核種の生成断面積を J-PARC において測定し計算と比較検討を行う計画である ため、大型計算機の利用を継続する予定である。

5.3.2 非弾性 X 線散乱分光技術と密度汎関数理論の融合による格子ダイナミクス研究

Lattice Dynamics Investigation Via Inelastic x-ray Spectroscopy and Density-functional Theory

村井 直樹

中性子利用セクション

(1) 利用目的:

J-PARC や SPring-8 に代表される大規模量子ビーム施設の登場により、従来の実験技術では 困難であった物性測定が次々と可能となった。特に先進的な非弾性分光器の登場によって、格子 やスピンの動的構造(フォノンや磁気励起)の極めて高効率かつ精密な測定が可能となりつつあ る。その一方、得られた実験結果を如何に解釈し、その中から重要な情報を抽出するという問題 は依然残されたままである。本研究課題では J-PARC や SPring-8 に導入された最新鋭の非弾性 分光装置を用いたフォノン研究の解析の場面に第一原理計算手法を導入することで、実験データ の解析や測定の効率化を目指す。こういった試みは海外の大型量子ビーム施設においては積極的 になされている一方、我が国は大きく水をあけられている。本研究では特に、鉄系超伝導体等の 所謂、非従来型超伝導体に着目し、フォノン分散やその寿命を先端的な非弾性分光装置を駆使す ることで高精度に決定する。密度汎関数理論(DFT)に基づくフォノン分散や電子格子相互作用 の評価を行い、実験結果との定量比較を行う。本研究課題を通して、国内の大規模量子ビーム施 設から先導的な研究成果の発信を目指す。

(2) 利用内容·結果:

2018年度の主たる研究課題は、「鉄系超伝導体の格子ダイナミクス研究」である。以下、得られた結果について述べる。

申請者は SPring-8 に設置された高分解能非弾性 X 線散乱を用いて、鉄系超伝導体 FeSe のフ オノン測定を行った。得られた実験データを解析するために、密度汎関数摂動理論(以下、DFPT) を用いたフォノン計算を実施した。計算には第一原理計算プログラム QUANTUM ESPRESSO に実装された DFPT コードを利用した。交換相関汎関数として一般化勾配近似(Generalized Gradient Approximation GGA)を採用した。一般的に、第一原理フォノン計算は大きな計算コ ストを要するため、大型計算機の利用は不可欠である。

申請者はまず、非磁性状態の FeSe のフォノン分散構造を DFPT により計算した。図1(a) に 示すように、非磁性状態における FeSe のフォノン計算結果は比較的エネルギーの低い音響フォ ノンを再現するものの、20~30 meV 付近の光学フォノンのエネルギーを大きく過大評価してし まうことが判明した。次のステップとして、スピン偏極状態における FeSe のフォノン分散の計 算を行い、磁性のフォノン分散への寄与を評価した。図1(b)に示すように、磁気秩序の寄与は光 学フォノンに顕著に現れ、そのエネルギーを大きくソフト化させることが分かる。実験結果との 一致は非常に良く、鉄系超伝導体のフォノン分散構造を理解する上で磁性の寄与を考慮すること は不可欠であると言える。また本研究課題では、DFPT によるフォノン計算の結果を元に、中性 子・X線の散乱強度(格子の動的構造因子 S(Q, E))を計算するプログラムを作成した。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。



図1 非弾性X線散乱実験から得られた鉄系超伝導体 FeSe のフォノン分散とDFPT による第一 原理フォノン計算との比較。(a): 非磁性状態(b): 磁気秩序相におけるフォノン計算結果 に対応する。〇は実測点、強度スケールはX線散乱強度を表す。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 村井直樹、福田竜生、中島正道、河村光晶、石川大介、田島節子、Alfred Q. R. Baron、「高 分解能非弾性 X 線散乱を用いた FeSe の格子ダイナミクスの研究」、2019 年日本物理学会 秋季大会.

(4) 今後の利用予定:

上記の内容は論文化を進めている。今後は、分光装置固有の分解能関数の寄与を取り除くこと でフォノンの線幅の評価を徹底し、フォノン分散曲線だけでなく電子格子相互作用の実験・第一 原理計算間の定量比較を行う予定である。

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

5.4.1 中性子線源を用いた新たなアクティブ中性子法に関するシミュレーション

Simulations for a New Active Neutron Method using a Continuous Neutron Source

米田 政夫 原子力センシング研究グループ

(1) 利用目的:

アクティブ中性子法は、測定対象物の外部から中性子を照射して反応を誘発させ、放出される 中性子を測定することで核物質の検知や計量を行う手法である。代表的なアクティブ中性子法と してダイアウェイ時間差分析技術(DDT法: Differential Die-away Technique)と呼ばれる方 法がある。DDT 法は高感度な核物質測定が可能であるという特長を有しているが、高価な中性 子発生管を用いる必要があるうえ、中性子発生管には長期使用時のビーム安定性に懸念がある。 そこで、中性子発生管に代わって中性子線源(Cf-252)を用いた新たなアクティブ中性子法の研 究開発を進めている。この新しい手法はDDT法より低コストでビームの安定性にも優れている。 本手法は中性子線源を回転させて照射するものであり、そのシミュレーションには高い計算機能 力を要するため、大型計算機(ICEX)を用いた解析を実施した。

(2) 利用内容·結果:

新たなアクティブ中性子法(以下、回転照射法)は、中性子線源を測定対象物の近傍で高速回転(数千 rpm)させ、それと同時に中性子カウント数の推移を測定し、中性子カウントのピーク前後の値を比較することにより核物質を検知する手法である。回転照射法の実証装置案イメージを図1に示す。図1は中心高さにおける水平断面である。中性子線源を格納したアルミニウム製円盤は直径32cmであり、中性子線源の回転半径は15cmである。この円盤を核物質入りポリエチレン容器の近傍で回転させ、He-3検出器で時間スペクトルを求める。He-3検出器は、前後にポリエチレンを配置し、更にその外側にカドミウムを配置している。これは一般に中性子検出器バンクと呼ばれるものであり、核分裂中性子を効率的に検出するために、このような構造となっている。シミュレーションには、モンテカルロコードである MVP を、核データにはJENDL-4.0を使用した。

円盤の回転速度が 5000 rpm 時の時間スペクトル結果を図 2 に示す。これは中性子線源が半周 した時の、1 µ 秒毎の中性子カウント数の推移を示している。3000 µ 秒でピークとなっているの は、この時間に中性子線源が最も容器に接近したことによる。0 から 3000 µ 秒の間は、中性子 線源が容器に近付いていく状態であり、 3000μ 秒以降は容器から遠ざかる状態となる。図 2 から、 3000μ 秒以降の値がそれ以前に比べて高くなっていることが分かる。例えば、線源位置が中心位置(ピーク位置と一致)から対称となる 2500μ 秒と 3500μ 秒を比較した場合、前者では約 1.85E-7 であるのに対して、後者では約 1.90E-7 と値が高くなる。ピーク位置前後のカウント積分値から核物質検知を判断することが可能であり、図 2 の場合では、約 12 分間の測定で核物質を検知できることが分かった。



図1 装置の水平断面イメージ

図 2 対象物に核物質を含む場合のシミュレーション 結果(中性子線源の回転速度 5000rpm)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 米田政夫、藤暢輔、中性子線源を用いた新たなアクティブ中性子法に関する研究開発、第 39回日本核物質管理学会年次大会、東京、2018.

(4) 今後の利用予定:

大型計算機(ICE X)を用いて、回転照射法等のアクティブ中性子法に関する解析を進めていく。

5.4.2 高速中性子直接問いかけ法を用いた非破壊測定装置の設計と燃料デブリ内核 物質測定への適用性に関するシミュレーション研究

> Simulation Study on Design of Nondestructive Measurement System using Fast Neutron Direct Interrogation Method and on its Application to Nuclear Materials in Fuel Debris

> > 前田 亮

原子力センシング研究グループ

(1)利用目的:

今後、福島原子力発電所事故で発生した燃料デブリに含まれる核物質の計量管理が必要になる と考えられる。燃料デブリには使用済み燃料(SF: Spent Fuel)だけでなく、ステンレス(SUS) やコンクリート、制御棒(CR: Control Rod)など様々な物質が含まれており、その中の核物質 量を非破壊で正確に測定することは非常に困難である。

我々のグループでは、放射性廃棄物ドラム缶に含まれる核物質を非破壊で測定する技術とし て、高速中性子直接問いかけ(FNDI: Fast Neutron Direct Interrogation)法を開発してきた。 本研究では FNDI 法を使用した燃料デブリ測定システムを設計し、燃料デブリに含まれる核物質 測定への適用性をモンテカルロシミュレーションにより評価した。

評価のためには、様々な組成の燃料デブリに対して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、FNDI 法のシミュレーションでは十分な統計精度を得るために多くの計算 資源を必要とするため大型計算機を利用した。

(2) 利用内容·結果:

FNDI法では測定試料に対して中性子を照射し、試料 内に含まれる核物質の核分裂反応を誘発する。この核 分裂反応で発生した核分裂中性子を測定することで核 物質量を測定することができる。また、FNDI法では後 述する中性子消滅時間と核分裂中性子計数の関係を利 用することで測定試料の組成の影響を低減することが 可能であるため、燃料デブリのように複雑な組成を持 つ試料であっても正確に測定することが可能である。

図 1 に設計した測定装置を示す。水中でのデブリ取 り出しを想定し、装置も水中設置とした。中央に燃料 デブリキャニスタを収納する穴があり、それを挟むよ



図1 燃料デブリ測定システム

うに中性子発生管と中性子検出器バンクが配置されている。測定の際はキャニスタに対して中性子 発生管から 1×10⁹ neutron/s の強度で中性子を放出し、10 分間の測定を行う。シミュレーション では評価を簡易化するために、燃料デブリはキャニスタ内に均質に完全に混ざり合った状態で分布 していると仮定し、その体積を変えずに原子数密度を変えることでデブリ中に含まれる SF、SUS、 コンクリート、CR の分量を変化させた。デブリの組成は、全てのケースにおいて水が 50vol%含 まれているとして、SUS が 15vol%含まれている 場合、コンクリートが 15vol%含まれている場合 に対して SF 量を 2.5、12.5、25、50vol%、CR 量を 0、0.06、0.3、0.6、1vol%と変化させた。

図 2 に水 50vol%、SF 25vol%、SUS15vol%、 CR 0vol%の条件での中性子計数の時間変化の シミュレーション結果を解析結果と共に示し た。解析の際はシミュレーション結果に対して 以下の式でフィッティングを行った。

 $N(t) = A_{d}e^{-t/T_{d}} + A_{f}e^{-t/T_{t}} + C_{1},$ ここで、N(t)は単位時間当たりの中性子計数、t は経過時間、第一項は問いかけ中性子成分、第 二項は誘発核分裂中性子成分、C₁はバックグラ ウンド成分である。図 2 の青線のフィッティン グ結果は核分裂中性子成分を表しており、その 減衰時定数 T_tを中性子消滅時間、その面積を核 分裂中性子計数と定義した。

図 3 に中性子消滅時間と核分裂中性子計数の 関係を示した。各プロットが各組成におけるシ ミュレーションの解析結果に対応しており、プ ロットの色が SF 量、形状が制御棒量、白抜き /黒抜きがコンクリート/SUSの違いを示して いる。両者の間には SF 量毎の直線的な相関が 確認されている。つまり、本研究において設計



図 2 中性子計数の時間変化のシミュレー ションと解析結果の一例



図3 中性子消滅時間と核分裂中性子計数

した燃料デブリ測定システムにおいても、この相関を利用することで測定対象の組成の影響を低 減でき、デブリ内の核物質量を正確に測定することが可能であることが確認できた。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) M. Maeda, K. Furutaka, M. Kureta, A. Ohzu, M. Komeda, Y. Toh, "Simulation study on the design of nondestructive measurement system using fast neutron direct interrogation method to nuclear materials in fuel debris", J. Nucl. Sci. Technol, Vol.56, 7, pp.617-628 (2019).
- 2) 前田亮、古高和禎、大図章、米田政夫、藤暢輔、"高速中性子直接問いかけ法用高速応答中 性子検出器バンクの開発"、日本原子力学会 2019 年春の年会、水戸、2019.

(4) 今後の利用予定:

今後も FNDI 法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有り、その利用を予定している。

5.4.3 中性子共鳴透過分析用検出器に用いる遮蔽体の検討

Study of Shield for Neutron Detector for Neutron Resonance Transmission Analysis

> 土屋 晴文 原子カセンシング研究グループ

(1)利用目的:

近年、核セキュリティ及び核不拡散分野において非破壊で核物質を測定する技術が重要となっ てきている。しかしながら、高線量核燃料中の核物質を測定するときには、燃料自身が発する大 量のガンマ線や中性子が背景雑音となり、高精度な測定を妨げる可能性が想定される。この困難 を乗り越える一つの手段として、外部より中性子を照射して測定試料中の核物質を測るアクティ ブ中性子測定法がある。

アクティブ中性子測定法の一つに、中性子共鳴透過分析法がある。この手法は従来、断面積や 共鳴パラメータなどの核データの精密測定に使われていたが、本研究グループでは、中性子共鳴 透過分析法を核物質測定に適用するために、DT 中性子発生管を用いた小型の中性子共鳴透過分 析システムの開発を行っている。この小型システムで使われる検出器の遮蔽やコリメータなどの 材質や形状を核物質測定用に最適化し、システムの性能を最大限に向上させる。

(2) 利用内容·結果:

図 1 に中性子共鳴透過分析法の 概念図を示す。システムは中性子 源、中性子飛行管、検出器部から構 成されている。DT 中性子発生管は





10 us の間、14 MeV 中性子を全方位 (4π) に射出する。減速材に射出される。射出された 14 MeV 中性子の一部は減速材に入射し、小型システムを用いた核物質測定のために適した低エネルギー (およそ数+ eV 以下) に減速され、真空の中性子飛行管を通り測定試料に照射される。試料と 反応することなく、試料を通り抜けた中性子は、後段のコリメータなどを通過後、検出器で捉え られる。その計測スペクトルから、試料中の核種の同定及びその含有量を知ることができる。

システムは長さ 17m×幅 5m×高さ 5m の部屋に設置される予定である。DT 中性子発生管か ら射出された 14MeV 中性子は減速材のみならず、周囲の壁や天井、床などでも反応する。その 結果、大量の中性子やガンマ線が部屋の中に発生することが予測される。こうした中性子やガン マ線が測定の背景雑音となり、核物質測定を妨害するおそれがある。そこで、DT 中性子発生管 で 14MeV 中性子を発生させた後、部屋の中で中性子やガンマ線が時間的にどのような振る舞い をするのかを調べた。なお、以下では、中性子に着目した結果のみを示す。図 2 に 14MeV 中性 子を射出した後、システムを含む部屋全体の中性子強度 (>0.3eV) の時間変化を調べた結果を 示す。中性子を照射した直後から 10 us の間 (図 2(a)) に、部屋の中で中性子が増加する様子が わかる。その後、時間が経つにつれて、検出器遮蔽体内の中性子が消えていく様子もわかる (図 2(b)-(d))。

JAEA-Review 2019-017

部屋の中で発生した中性子が測定に影響を与えないようにするには、中性子検出器の周囲を遮 蔽体で覆う必要がある。本研究では、遮蔽体としてポリエチレンや鉛を考えている。図3に、ポ リエチレンの厚みを変えた時に、検出器位置における中性子の強度を調べた結果を示す。これよ り、ポリエチレンの厚みを20cm、あるいはそれ以上にすることで周囲から飛来する中性子やガ ンマ線の影響を十分に低減できることがわかった。



図 2 部屋全体の 0.3 eV 以上の中性子強度の時間変化: (a) 0-10 us (b) 10-200 us (c) 200-400 us (d)-400 – 600 us



図3 ポリエチレンの厚みを変化させたときの 0.3 eV 以上の中性子強度の時間変化

(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:

実際に測定する試料に対して中性子ビームを照射し、中性子検出器で得られる計測スペクトル をシミュレーション (PHITS) により導出する。それにより、検出器の遮蔽のみならず、減速 材の配置や形状、コリメータの形状や材質などまで含めてシステム全体の最適化を進めて、シス テムの性能をさらに向上させる。

5.4.4 ガンマ線ビルドアップ係数のレビュー

Reviews of Buildup Factors for Gamma-rays

松田 規宏 炉物理標準コード研究グループ

(1)利用目的:

一般社団法人日本原子力学会放射線工学部会に設置された「簡易遮蔽解析コードレビューワー キンググループ」(以下、「WG」という。)では、簡易遮蔽解析及びそのために用いられる計算 コードの持続的な改良・発展に資するために、これらのレビューを実施している。

本研究では、ガンマ線ビルドアップ係数 Buildup Factor(以下、「BF」という。)のレビュー を実施するため、粒子・重イオン輸送計算コード PHITS [1](正確には、PHITS に組み込まれ た EGS5 [2]、以下、「EGS(PHITS)」という。)を用いて、半無限媒質中におけるガンマ線の挙 動シミュレーションを行った。

(2) 利用内容·結果:

BFとは、線源から放出され、媒質と一度も衝突・散乱することなく評価点まで到達する非衝突のガンマ線の線量に対する散乱線を含む全ガンマ線の線量の比であり、次式で表される。

$$B(E_0, x) = \int_0^{E_0} R(E) I(x, E) dE / R(E_0) I(x, E_0)$$

ここで、 E_0 はガンマ線の入射エネルギー、x は線源からの距離、 $B(E_0, x)$ は BF、R(E) は求め る物理量に対する応答関数、I(x, E) はエネルギーE のガンマ線の線束である。

この、BF を用いた点減衰核法は、バルク遮蔽の評価(厚い遮蔽体を透過した後の線量等に基づく必要遮蔽厚又は線量等の評価)において極めて有用な手法であり、モンテカルロ法計算コードを用いた詳細な遮蔽設計法が発展した今日においても広く使用されている。

BF のレビューでは、これまでの BF 研究の歴史及び BF の基礎となる光子断面積ライブラリ の特徴をまとめるとともに、モンテカルロ法計算コードによる BF の計算方法について解説し、 光子断面積ライブラリの違いが BF の計算結果に与える影響を調査した [3]。

干渉性散乱 (Coherent scattering) を考慮したときの BF を EGS(PHITS)で計算した。BF の 計算結果を図 1 に示す。干渉性散乱の考慮は一般的で、EGS(PHITS)では、この取り扱いオプシ ョンがデフォルトで有効になっている。干渉性散乱は、散乱後のエネルギーが変わらず、散乱角 度は前方方向が中心になるため、これを考慮したときの全ガンマ線の線量にはわずかな変化しか 与えない。しかしながら、計算コード上では「衝突(散乱)イベント」として取り扱われるため、 BF の定義通りに非衝突ガンマ線の線量を評価するタリーを設定すると、BF 標準の値 [4]との間 で大きな差異を生じることがわかった。BF 標準の値と一致させるためには、BF の式の定義の ように、分母を入射エネルギー E_0 と同じエネルギーのガンマ線による線量とする必要がある。 この計算結果は、タリーにおいてエネルギー群を E_0 以上に指定することで得られる。



図1 鉄のBF(文献値[4]とEGS(PHITS)を用いた計算結果)

モンテカルロ法計算コードで BF を計算する際によく用いられる計算体系(点等方線源を媒質の中心に配置する球状の体系、BF 標準の計算体系 [4])についてもレビューを実施した。一般的な RI 線源と遮蔽体の関係は図 2 b)に近いものであるが、BF の計算をする際には、図 2 c)に示す体系(無限平板の遮蔽体と一様な平行線源で構成される体系)も用いられる。



図2 BFの計算に用いた体系

図2a)、b)及びc)の計算体系を用いたBFの計算結果を図3に示す。

この図から、図2a)の計算体系を用いた計算結果は、BF標準(球状の体系)と一致した結果 を与えることがわかる。図2b)の計算体系を用いた BFの計算結果は、点線源から遮蔽体の端 までの距離を増加させることにより、図2c)の計算体系を用いた計算結果に近づくことがわか る(図2b)の点線源からの距離が ∞cm)。計算体系による BFの違いは、点線源からの距離、 すなわち、立体角の違いによるものと理解できる。

上記の結果を含む EGS(PHITS)を用いた BF の計算結果に基づいて、BF のレビューを実施した。WG の活動で実施した BF のレビューは、WG の活動報告書 [3]にまとめた。



図3 鉄のBF(文献値[4]とEGS(PHITS)を用いた計算結果) (カッコ内の距離は、点線源から遮蔽体の端までの距離を示している。)

- 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 K. Niita, "Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02," J. Nucl. Sci. Technol. 55, pp.684-690 (2018).
- H. Hirayama, Y. Namito, Alex F. Bielajew, Scott J. Wilderman and Walter R. Nelson, "The EGS5 code system," SLAC-R-730 and KEK Report 2005-8 (2005).
- [3] 平成 29 年度 簡易遮蔽解析コードレビューワーキンググループ 活動報告書、一般財団法人 日本原子力学会 放射線工学部会、93p. (2018).
- [4] 一般財団法人日本原子力学会、γ線ビルドアップ係数:2013、AESJ-SC-A005、360p. (2013), ISBN: 978-4-89047-371-7.
- (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
- 平成 29 年度 簡易遮蔽解析コードレビューワーキンググループ 活動報告書、一般財団法人 日本原子力学会 放射線工学部会、pp.20-50 (2018). http://www.aesj.or.jp/~rst/H29_WG_report.pdf

(4) 今後の利用予定:

モンテカルロ法計算コードによる深層透過問題の計算(BFの計算を含む。)には、大型計算機 による支援が必須であり、今後も利用を予定している。

5.4.5 化学輸送モデル GEARN-FDM によるヨウ素 129 の全球大気拡散シミュレーショ ンの妥当性検証

Validation of Global Atmospheric Dispersion Simulation of Iodine-129 by Chemical Transport Model GEARN-FDM

> 門脇 正尚 環境動態研究グループ

(1) 利用目的:

環境や公衆を対象とした、使用済核燃料再処理施設や原子力事故に由来する放射能の影響評価 において、大気中へ放出される核種の動態に係る理解は極めて重要である。特に大気中の放射性 ョウ素は無機ガス態、有機ガス態、粒子態として存在しており、他の放射性核種と比較して複雑 多様である。しかしながら、大気中の放射性ヨウ素の動態に係る理解は十分ではなく、放射性ヨ ウ素の大気拡散解析に対する不確定性が大きいことが課題となっている。

本研究グループでは、大気中の放射性ヨウ素の動態理解を目的として、ヨウ素 129 を対象とし た化学輸送モデル GEARN-FDM の開発を進めてきた。本モデルは大気中のヨウ素循環に影響す る大気輸送、大気沈着、不均一反応、光化学反応、ガス相反応の諸過程を考慮した全球 3 次元の 大気拡散モデルとして設計されている。ところで、本モデルの開発時に課室の計算機を用いて予 備実験を実施したところ、ガス相反応を数値的に解くためのアルゴリズムに膨大な計算機資源を 要することが判明した。そこで、システム計算科学センターの協力のもと、逐次モデルであった GEARN-FDM を並列化し原子力機構の ICE X を利用することで、本モデルを用いたシミュレー ションの省計算時間を達成した。本稿では、GEARN-FDM のモデル検証の結果について記載す る。

(2) 利用内容·結果:

本シミュレーションは全球を対象とした。シミュレーション期間は 2007 年から 2009 年の 3 年間とし、2007 年と 2008 年をスピンアップ期間、2009 年を解析対象期間とした。シミュレー ション開始時におけるヨウ素 129 に係るガス態と粒子態の大気濃度を全球で 0 Bq/m3 とし、海 洋及び陸域からの自然起源ソース及びラアーグ(仏)、セラフィールド(英)、マヤク(露)の使 用済核燃料再処理施設からの人為起源ソースを考慮した。

図1と図2に北米及びヨーロッパにおける降水中ヨウ素129濃度の比較を示す。北米におけ る降水中ヨウ素129濃度は、ヨーロッパにおける降水中ヨウ素129濃度と比較して約1~2桁低 いことが既往研究から知られている。本モデルで計算された北米及びヨーロッパの降水中ヨウ素 129濃度は既往研究の観測値を良好に再現した。さらに、ヨーロッパの各観測地点間における降 水中ヨウ素129濃度の地域差についても、本モデルは整合的な結果を得た。図3に日本におけ る粒子態のヨウ素129の大気中濃度の時系列の比較を示す。日本国内における観測の粒子態のヨ ウ素129の大気中濃度には冬季極大、夏季極小の季節変動が見られる。本モデルで計算された冬 季の濃度は夏季のそれよりも高く、観測値と同様の季節変動を示した。さらに、1月~4月は六 ヶ所再処理工場の影響のためにモデル結果は観測結果を過小評価していたが、5月以降のモデル 結果の濃度は観測結果のそれと定量的に一致しており、本モデルの妥当性を確認することができ た。



図1 北米における観測結果(白)とモデル結果(灰)の降水中ヨウ素 129 濃度の比較。 25-75%範囲、外れ値、中央値、平均値を箱、ドット、箱内横棒、×印でそれぞれ示す。



図2 ヨーロッパにおける観測結果(白)とモデル結果(灰)の降水中ヨウ素129濃度の比較。 25-75%範囲、外れ値、中央値、平均値を箱、ドット、箱内横棒、×印でそれぞれ示す。



図3 日本における粒子態のヨウ素 129 大気中濃度の時系列の比較。濃度は月間値。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) M. Kadowaki, H. Terada, T. Suzuki, "Numerical analysis of seasonal change of iodine-129 deposition in Japan using a global atmospheric iodine transport model", 2018 joint 14th Quadrennial iCACGP Symposium and 15th IGAC Science Conference, 2018.

(4) 今後の利用予定:

ガス相反応で取り扱う化学反応の数を増やし、大気中の放射性ヨウ素に係るより詳細な動態解 析を実施予定である。また、1960年代から現在までの期間を対象としたヨウ素 129 動態の再現 シミュレーションや原子力施設近傍を対象とした放射性ヨウ素の高空間分解能シミュレーショ ンを実施する際には今以上の計算機資源を必要とすることが予想される。今後も原子力機構の ICE X 及びその後継機の利用を予定している。

5.4.6 局所域高分解能大気拡散モデルを用いた原子力施設周辺の大気拡散詳細解析

Detailed Simulations of Plume Dispersion around Nuclear Facilities using a Local-scale High-resolution Atmospheric Dispersion Model

> 中山 浩成、小野寺 直幸 環境動態研究グループ

(1)利用目的:

大気の運動を数値的に予測する際、主に、気象モデルや計算流体力学モデルなどが用いられる。 気象モデルは、数 km~数 10km の計算格子で数 10km~数 1000km の広域スケールの気象状 況を予測するためによく用いられる。しかしながら、地形に準拠した一般座標系の採用や計算格 子サイズの問題により、個々の建物を精緻に解像できないため、建物周辺に形成される非一様性 の強い乱流の表現ができない。一方、計算流体力学モデルは、上述の広域スケールの気象状況の 再現は難しいものの、数 m 程度の高分解能計算格子で乱流スケールの現象を詳細に再現すること ができる。

そのため、申請者は、非定常乱流現象の再現に優れた Large-Eddy Simulation (LES) と呼ば れる乱流モデルに基づく局所域高分解能大気拡散モデル(LOcal-scale High-resolution atmospheric DIspersion Model using LES: LOHDIM-LES)の開発を行っている。このモデル では、建屋施設の配置形態や局所的地形起伏を精緻に解像することにより、気流・乱流場及び物 質拡散場において建物・地形影響を陽的に表現することが可能であり、施設近傍における核種濃 度を詳細に解析できる。そのため、これまでの検証は、地形影響を含まない建物スケールといっ た限定的な範囲において、時間的に変化しない一定気象条件下での大気拡散を取り扱った室内風 洞実験を対象に行ってきた。しかしながら、原子力施設は局所的に地形起伏を有する所に立地し、 その周辺は樹木群に囲まれていることが多いため、建物に加え樹木群や地形の影響を考慮するこ とも必要である。

そこで、本研究では ICE X を用いて、六ヶ所村再処理施設から放出される放射性核種を対象 に、数 km 四方の局所域スケールの地表面被覆状況を精緻に解像した高分解能大気拡散シミュレ ーションの試験計算を行い、詳細環境評価が可能な計算手法の確立を目的とする。

(2) 利用内容·結果:

2017 年度後期の最適化作業にて高速化されたコード及び建築構造物群・樹木群・地形起伏な どの局所域スケールの地表面被覆状況を精緻に解像できる数値標高モデル(DEM: Digital Elevation Model)・数値表面モデル(DSM: Digital Surface Model)データを用いて、大気乱流 中の物質拡散の試計算を行った。

計算領域は 5km×5km×1km とし、DEM・DSM データを用いて 3km 四方の六ヶ所村再処 理施設の地表面被覆状況を再現した。計算格子は、水平方向に 5m、鉛直方向には 2.5m-20m の 不等間隔としている。緑色の部分は樹木群を表し、抗力係数・葉面積密度を用いて抵抗力として 与えている。建物・地形効果は境界埋め込み法を用いて表現している。その周辺には、短い助走 空間で効率的に風の乱れを作り出すために小さい障害物を配置させ、大気乱流状態を作り出した。トレーサガスは高さ150mの排気塔より単位放出量で1時間連続的に放出させた。今回は試験計算としているため、気象条件は熱的影響のない中立状態を仮定、平均風向は北風を基準にして1時間で360°時計回りで回転する仮想条件とした。計算時間は1.5時間とし、最初の30分を十分に発達した乱流状態を作り出すためのスピンアップ時間とした。計算タイムステップは0.05秒とした。

図 1 に瞬間拡散場を示す。排気塔から放出されたトレーサガスは、下流に向かうにしたがい 徐々に拡がっていき、1.5km 程度離れたところにある樹木群の所に着地し、取り込まれていく様 子が分かる。



図1 トレーサガスの瞬間拡散場(単位放出量計算による仮想計算であるため、 実際の汚染状況を示すものではない。)

このような数 km 四方の局所域スケールの地表面被覆状況を高分解能計算格子により精緻に 解像して大気拡散の大規模高解像度数値シミュレーション解析を行った研究例は国内外含めて 見られず、本研究は極めて新規性が高いといえる。本モデルにより、敷地スケールにおいて建物・ 樹木・地形形態を区別して放射性核種による汚染評価を詳細に行うことが可能となり、原子力施 設周辺住民の理解と安心の醸成に資することができる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) H. Nakayama and T. Takemi, "Large-eddy simulation studies for predicting plume concentrations around nuclear facilities using an overlapping technique", Int. J. Environment and Pollution, Vol. 64, Nos. 1/3 (2018).

(4) 今後の利用予定:

令和元年度の研究計画は、気象シミュレーションモデルや気象観測などにより得られた気象デ ータの詳細入力による現実気象条件下での大規模高解像度大気拡散シミュレーションを実行し、 モニタリングポストで得られた実測データと比較検証を行う予定である。

5.4.7 眼球形状が標準的な照射場での組織吸収線量に与える影響

Influence of Eye Shape on Tissue Absorbed Dose in Standard Radiation Fields

(1)利用目的:

人の眼球には多様性があるにもかかわらず、こ れまでの眼球に対する線量計算シミュレーショ ンでは、ほぼ全ての研究で標準的な一つのモデル が採用されてきた。そこで、本研究では、大型計 算システム ICE X を利用して、モンテカルロ放 射線輸送計算コード PHITS により、眼球の大き さや変形が線量計算に与える影響を解析する。こ の解析では、新たに開発した大きさ及び変形が可 能な数値眼球モデル (図 1)を ICRP Publication 110の標準ボクセル人体ファントムの頭部に埋 め込んだ体系を作成し、いくつかの理想的な照射 条件で計算シミュレーションを行い、組織吸収線 量への眼球の形状変化の影響を解析する。





図1 解析関数眼球モデル

(2) 利用内容·結果:

本研究では、数値眼球モデルのパラメータを調整し、5 種類(標準、大型、小型、近視形状型、 遠視形状型)の形状を用意した。単色のエネルギーの電子(0.5~8 MeV の 16 点)、光子(0.01 ~10 MeV の 13 点)及び中性子(10⁻⁵~100 MeV の 20 点)を7 種類の幾何条件(前方-後方: AP、右側方: RLAT、後方-前方: PA、回転: ROT、右 45 度、下 45 度及び上 45 度)で各形 状の眼球モデルへ照射した。眼球内の代表的な組織として水晶体、毛様体、網膜、視神経を選定 し、各組織に対する吸収線量の統計誤差が10%以下になるように、電子、光子及び中性子の発 生粒子数を 3×10⁷個、3×10⁸個及び 10⁸個に設定した。

図2に得られた計算結果の一例として、5種類の眼球モデルに対するAP照射条件下の眼球内 組織(水晶体、毛様体、網膜、視神経)の吸収線量を示す(電子:図2上、光子:図2中、中性 子:図2下)。放射線を一様照射した場合、組織の深さ位置が吸収線量の影響因子となり得る。 解析により、放射線のエネルギー増加に伴う吸収線量の変化傾向は大きく、眼球内前方に位置す る組織(水晶体、毛様体)と後方に位置する組織(網膜、視神経)の二つに分類されることがわ かった。眼球の大きさや形状の変化に対する吸収線量の影響は、透過性の弱い電子照射の場合、 眼球の変形に伴い、組織の深さ位置が変化するため、顕著に確認された。これに対し、光子線や 中性子線では電子線に比べて、広範囲にエネルギーを付与するため、眼球の大きさや変形による 影響が小さいことがわかった。



図2 各種放射線を正面照射した際の眼球内組織の吸収線量

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 古田琢哉、D. El Basha、S. S. R. Iyer、C. M. Correa Alfonso、W. E. Bolch、"線量評価に 用いるサイズおよび形状の変更が可能な数値眼球モデルの開発"、日本原子力学会 2019 年 春の年会、水戸、2019.
- 2) T. Furuta, D. El Basha, S. S. R. Iyer, C. M. Correa Alfonso, W. E. Bolch, "Development of a scalable and deformable stylized eye model and its application to the standard radiation exposure geometries", ICDA-3, Lisbon, 2019.
- 3) T. Furuta, D. El Basha, S. S. R. Iyer, C. M. Correa Alfonso, W. E. Bolch, "Dosimetric dependence of ocular structures on eye size and shape for external radiation fields of electrons, photons, and neutrons", J Radiol Prot., Vol.39, No.3, pp.825-837, 2019.

(4) 今後の利用予定:

今後は、本研究のアプローチを眼球内組織に線量を集中させる放射線治療の状況に適用し、眼 球サイズ及び形状の違いが与える影響について解析する。これにより、標準的な眼球を想定した 現状の治療計画が抱えるリスク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 度良く計算する際、大型計算機の使用が必須となるため、今後も本システムを利用して、引き続 き研究を行っていく予定である。

5.4.8 量子分子動力学モデルを使った原子核-原子核衝突におけるパイオン生成シミュ レーション

Application of Quantum Molecular Dynamics Model for Simulation of Pion Production from Nucleus-nucleus Collision

> 小川 達彦 放射線挙動解析研究グループ

(1)利用目的:

原子核同士の衝突反応を記述する計算模型 QMD (Quantum Molecular Dynamics) は、反応 だけではなく核の状態を記述する目的でも使用できることが知られている。特に近年、中性子星 や中性子過剰核などの性質を調べる基礎研究のために、中性子・陽子が集合し相互作用する系(核 媒質)を QMD によって再現する計算が世界的に行われている。

QMD モデルと核媒質を確率的な分布を持つ物体として計算する BUU (Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck) モデルの開発者による国際会議 Transport では、様々な国や地方で開発されている QMD モデルと BUU モデルにより、パイオンの生成が対称エネルギー(中性子・陽子の数のバ ランスが 1:1 からずれると発生するエネルギー)の強さによりどれくらい影響を受けるか計算を 行った。原子力機構が研究・開発を行っている JQMD (QMD モデルの一つ) もその比較に参加 するために、以下の計算を行った。

(2) 利用内容·結果:

1) 計算条件

計算は、核子当たり 270MeV で入射する Sn-124 と標的である Sn-132 が 4fm の衝突パラメー タで反応するものとし、70fm/c の間の時間発展を記録する。核子を含め計算中に登場するあら ゆるバリオンは 40mb の弾性散乱断面積を持ち、核子+核子⇔核子+Δ粒子の双方の反応断面積 を考慮する。断面積の範囲内に核子同士が接近したらその瞬間に反応や散乱を起こし、また新し い運動量で運動を続ける。また、Δ粒子は寿命に応じて崩壊し、核子とパイオンを生じる。

核子の初期状態は、Sn-132 や Sn-124 に対応する数の陽子・中性子を、原子核半径、フェル ミ運動量を満たすように、乱数を用いて配置した。デフォルトの JQMD では、その初期状態か ら時間発展させて崩壊しないかチェックする安定性判断用アルゴリズムも存在するが、本研究で 使ったバージョンでは核の反応に注目するものであり、安定性は重要でないため排除した。

核子間に働く強い相互作用や電磁気力などの遠隔相互作用は散乱とは別に扱い、全く考慮しない場合と、核子密度に応じて対称エネルギーのポテンシャルを 3 通りのパラメータで変化させる、合計 4 パターンを試した。なお、JQMD 以外の計算は、各コードの開発者が提供したデータである。

2) 計算結果

まず相互作用を考慮しない場合で、核子やム粒子などの運動を調べた。図1は核衝突前の初期

状態で、核子の密度分布をプロットしたものである。この時点でコード間に多少の違いがみられ、 IQMD-IMPやSMASHコードでは球対称性や体積当たりの均一性が他のコードより低いことが 見て取れる。



図1 初期状態の核子密度分布。本計算に参加したコードのうち、6コードの計算値

この状態から核は相互に接近し、反応を起こす。図2は反応によって生じたム粒子やパイオン が、時間に伴って増減する様子を示している。コード間で絶対量が2倍程度異なり、ム粒子とパ イオンの相対比も1:1程度から2:1程度と差がみられる。相対比については計算の手順に大きく 影響されるとみられ、例えばJQMDでは 粒子の運動(ム粒子の生成を含む)→ム粒子が核子 とパイオンに崩壊→パイオンが核子に吸収されム粒子に変化→粒子の状態の記録の順番で計算 を行うため、パイオンは吸収された直後の少ない状態が記録される。コードによってこのタイミ ングが異なっていることが、差の原因の一端となっている。





図 2 Sn-126 と Sn-132 の衝突による Δ 粒子・パイオンの数の時間発展

ここまでの計算に、核子間の相互作用を加えたバージョンで計算を行った。図3はその計算に よって得られたΔ粒子とパイオンの数の時間変化である。実線と破線は対称エネルギーポテンシ ャルの密度に対する依存性を異なるパラメータで記述した結果である。



図3 相互作用を含む計算で得られたム粒子とパイオンの時間変化。JQMD が最も相互作用の違いに対する粒子量の影響が大きく、粒子の数そのものは RVUU と TuQMD を除きほぼ同数となっている。

本研究では様々な QMD や BUU コードを用いて、原子核-原子核衝突の ム粒子やパイオンの 生成量を計算する研究に対して、JQMD を用いた計算で参加した。計算の手順によって差があ るように見えてしまうことや、それを除いても JQMD は対称エネルギーのポテンシャルによっ て ム粒子やパイオンの比が、他コードより強く影響されることが明らかになった。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- Ying-Xun Zhang, Yong-Jia Wang, Maria Colonna, Pawel Danielewicz, T. Ogawa et al., "Comparison of heavy-ion transport simulations II: Collision integral in a box", Phys. Rev. C, 97, pp.034625_1 - 034625_20 (2018).
- 2) T. Ogawa, T. Sato, S. Hashimoto, K. Niita, "Cluster formation in relativistic nucleus-nucleus collisions", Phys. Rev. C, 98, pp.024611_1 024611_15 (2018).
- 3) T. Ogawa, T. Sato, S. Hashimoto, K. Niita, T. Kamae, "Integrated Simulation of Fragmentation, Evaporation, and Gamma-decay Processes in the Interaction of Cosmic-ray Heavy Ions with the Atmosphere using PHITS", KnE Energy, S.1, pp.391-398, (2018).

(4) 今後の利用予定:

JQMD は 3 年前のアップデートで幅広く精度改善したが、αや重水素など軽荷電粒子の生成 について実験値と数倍の差が発生していることから、改善を行う予定である。特に、反応領域か ら飛び出した重水素など、核子密度が低い状況での核子間束縛を再現することが鍵とみられる。

5.4.9 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 29 年度は、放射性雲からの外部被ばく線量を 迅速に評価するため、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 を用いて大気 中に配置した単位放射能を持つ⁸⁵Kr、¹³¹I、¹³²I、¹³³I、 ¹³²Te、¹³⁴Cs、¹³⁶Cs および¹³⁷Cs からの線量寄与割合

(応答関数)を計算し、そのデータベースを構築した。 また、応答関数データベースを参照することで、迅速 に線量評価を実施できるコードを開発した。平成 30 年度は、PHITS を用いて放射性雲による地上の線量 分布を解析し、開発したコードの精度検証を行った。

PHITSの計算は、ICEXの432演算コアを利用し



図 1 市街地を模擬した計算体系に おける LOHDIM-LES による ¹³⁷Cs の大気拡散計算の結果

MPI 並列で実施した。放射性雲の分布には、原子力機構が開発する局所域大気拡散モデル LOHDIM-LES の計算結果を用いた。図1にLOHDIM-LES による大気拡散計算の結果を示す。 線源核種は ¹³⁷Cs とし、240m×240m×150m の計算領域内に 24m×24m×24m のコンクリー ト製構造物を格子状に配置し、市街地を模擬した。図2に、応答関数を用いたコードと PHITS による地上 1m 高さにおける周辺線量当量 H*(10)の分布図を示す。両者は、線量分布図におい て同様の傾向を与えることが確認された。また、応答関数を用いたコードの計算時間は、ICE X 上での PHITS の計算時間に比べ約 10,000 倍速いことが分かった。さらに詳細な検証のため、y =0 および x =-25 における線量分布を比較した。図3 にその結果を示す。応答関数と PHITS に よる計算結果は、非常に良く一致していることが分かる。しかし、x =-120 から-50 の領域にお いて計算値間の不一致がみられた。これは、応答関数を用いたコードにおいて、構造物の端部を 通過する側方からの線量寄与を適切に減衰できていない理由による。

平成 30 年度に進めた ICEX 上での大規模並列計算から得られた PHITS の詳細解析結果によ

り、応答関数を用いた線量評価コードの問題点を確認することができた。今後は、線量評価コー ドにおいて遮蔽物による線量低減の取り扱い方法を改善し、この問題を解決する予定である。



図 2 応答関数(左)と PHITS(右)による地上 1m 高さにおける周辺線量当量の分布の計算結果。
 定図中の点線は、y=0 および x=-25 の直線を示す。



(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.
- 2) D. Satoh, H. Nakayama, T. Furuta, "A computer code for dose estimation from external exposure to radioactive plume", 3rd International Conference on Dosimetry and its Application (ICDA-3), Lisbon, Portugal, 2019.

(4) 今後の利用予定:

令和元年度(平成 31 年度)は、放射性雲からの外部被ばく線量評価コードを、実際の環境に おける線量評価に応用する。その際の精度検証では、実測値との比較とともにモンテカルロ法に 基づく PHITS による詳細解析との比較が不可欠となる。この目的を達成するためには、大型計 算機システムの演算能力が必要である。

5.4.10 PHITS における分析機能の開発

Development of Analysis Function in 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3次元体系における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。幅広いエネルギー領域にある多様な放射線を取り扱 うことができることから、放射線施設設計や医学物理計算、放射線防護研究などの様々な分野で 利用されている。

近年の強いユーザーの要望として、計算条件(インプット)を変更させた場合の計算結果(ア ウトプット)への影響を分析する機能の開発が挙げられる。しかしながら、PHITSの設計思想 は、1つのインプットに対し1つのアウトプットを求めるものとなっており、上記の要望を満た すためには、個々の目的に応じたシェルスクリプト等の外部プログラムをユーザー自身で用意す る必要があった。

そこで、我々は原子力機構の大型計算機 ICE X を利用し、インプットの一部を変化させた場合の粒子輸送計算を複数回実施し、その結果を処理する分析機能の開発を進めた。本機能を利用することにより、インプットの変化がアウトプットに与える影響を容易に分析することが可能となる。

(2) 利用内容·結果:

分析機能の開発は、インプットの変化を指定するコマンド(命令)の開発とアウトプットの処 理方法を指定するコマンドの開発の2段階に分けて進めている。平成30年度は前者について開 発を行い、主に次の2点のアルゴリズムを追加した。

- 変更するインプットの情報を読み込むための新規コマンド\$VARの追加
- 粒子輸送計算を複数回実施するための新規のループ計算の追加

このうち、新規コマンド\$VAR は、PHITS のインプットファイルの最初に

\$VAR: {varfile.inp}

という形式によって使用し、別ファイルとして用意した varfile.inp (名称変更可能)を読み込む。 varfile.inp には、

```
set: v1
v-type = 4
vmin = 10
vmax = 100
vdel = 10
```

のように、変数 v1 に関するメッシュの情報を set:コマンドと v-type サブセクションにより与える。変数として定義した v1 を使用する際は、例えば

```
[source]
s-type = 1
```



のように、PHITS の
[source]セクションにおけるe0の入力の際に使用できる。この場合、入射エネルギーe0を最小値 vmin(10 MeV)から最大値 vmax(100 MeV)で変化させながら、合計 nv=(100-10)/10+1=10 回の輸送計算を実施することを意味する。変数 v1の数字



ループ計算の概念図

は1から99まで指定することができ、同時に複数の変数を変化させることも可能である。

インプットを変えながら輸送計算を複数回実施するために、従来の1バッチあたりのヒストリ 数 maxcas のループ計算と全バッチ数 maxbch のループ計算の間に、新規に nv のループ計算を 追加した。図1にこれらのループ計算の概念図を示す。計算の流れとしては、変数 v1 を vmin から変化させながら、各々 maxcas 回の輸送計算を実行し、それぞれの計算結果を与える tallyresult_i.out (i=1,...,nv)を出力させる。nv のループ計算が終わった段階で nv 個の結果を分 析処理し、例えばタリー結果の v1 に関する依存性を図示する。ここまでが1バッチの計算とな り、以降はこの一連の計算を最大 maxbch 回繰り返す。また、PHITS が特徴としてもつバッチ 処理を踏まえた計算時間のコントロールは従来と同様であり、統計量不足時の再開始計算や逆に 統計量が十分な場合の中断処理も使用可能である。

本開発により、入力情報の変化が PHITS の計算結果に与える影響を容易に分析することが可能となる。現在、PHITS の国内外のユーザー登録数は 4,000 を超えており、本機能の実装時には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) 佐藤達彦、岩元洋介、橋本慎太郎、小川達彦、古田琢哉、安部晋一郎、甲斐健師、Tsai Pien、 松田規宏、岩瀬広、PHITS コード開発の現状、日本原子力学会 2019 年春の年会、水戸、 2019.

(4) 今後の利用予定:

現在は変数 v1 によるタリー結果の変化を図示する機能のみであるが、今後はアウトプットの 処理方法を指定するコマンドの開発を行い、結果の分散や系統的不確かさを評価し図示する機能 について拡張を進める。また、本機能を発展させることにより、計算結果が特定の条件を満たす ようなインプットの値を決定する最適化機能の開発も予定している。

5.4.11 PHITS ユーザ入力支援ソフトウェアの作成

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 4,000 名を超え、コードの応用分野は、放射線検出器開発、加速器遮蔽設計、医療応用、線量 評価等多岐にわたる。一方で、PHITS ユーザーは多くの入力ファイルのパラメータ等をマニュ アルにより理解し、テキスト形式で入力ファイルを作成する必要があるため、特に初心者にとっ ては PHITS の利用の敷居が高いという印象が持たれる。そこで、ユーザーが視覚的に各パラメ ータを理解して入力できるグラフィカルユーザーインタフェイス(GUI)による PHITS 入力フ ァイル作成支援ソフトウェア PHACE(PHits graphical user interfACE)の開発を行う。本作 業により作成されたツールを用いることで、PHITS ユーザーが容易にパラメータ等を理解して、 視覚的に入力ファイルを作成できるようになる。そのため、新規ユーザーの PHITS に対する理 解促進に貢献し、ユーザー数の更なる拡大が期待される。また、既存の PHITS ユーザーに対す る入力支援も可能となる。

(2) 利用内容·結果:

平成 29 年度に引き続き、PHITS 入力データの物質を定義する[material]セクション、体系の 領域を定義する [cell]セクション、計算体系の面を定義する[surface]セクション、物質の表示色 を定義する[mat name color]セクションの入力補助のため、データ用の専用入力フォームを作成 及び追加する作業を実施した。開発及び動作条件は、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[®] 10
- 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

平成 29 年度は、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、及び図例表示機能の追加を行った。平成 30 年度では、[Cell]データ専用入力フォームを作成し、これを平成 29 年度版 PHACE に追加し た。[Cell]セクションは、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 セルの定義(セル番号、物質番号、密度、面番号等)を記述する。[Cell]データ専用入力フォー ムは、PHITS インプットに記述される、これらセルの定義情報をより簡便に作成するための入 力フォームである。図1に、[Cell]データ専用入力フォームの表示例を示す。

セルの構成	- 物質 密度
セル番号 名前 LIKE	
前除 面↓ セル↓ 更新↓ 編集1 1 (4) (4) (4) (7) (4) (4) (4) (7) (4) (4) (4) (7) (4) (4) (4) (7) (4) (4) (4) (7) (7) (7) (4) (7) (7) (7) (7) (7) (7) (7) (7)	000100 0 -10 #102 #103 #104 #105 #106 000101 - 1 10 000102 1-10 -11 12 #106 000103 1-10 -21 #106 000104 1-10 -22 #106 000106 2 -8.93 -19 20 -21 (6)

図1 Cellデータ専用入力フォーム

図1中の①と②はセルの番号及び名前を入力する欄である。③はセルを満たす物質の番号を指定 するためのボックスである。図2のようにボックス右端にある「▼」ボタンを押すと[material] セクションで登録済みの物質番号がプルダウンメニューとして表示され、リストから対象の物質 番号を選択できる。



図2 物質番号指定ボックス

図1中の④はセル構成要素編集ボックスであり、セルを構成する面やセルとそれらの接続条件を 編集するためのGUIである。セルの面番号を追加する場合、図3のようにGUI上部の面番号を 選択するボックスにおいて、[surface]セクションで指定された面番号を選択し追加できる。



図3 面番号選択コンボボックス
図1中の⑤はセル内の密度を指定する入力欄であり、密度の単位をプルダウンメニューから選択 できる。⑥はセルデータ表示/操作ボックスであり、④において登録されたセルデータを表示及 び操作するための GUI である。

これまでの開発により[material]、[cell]、[surface]及び[mat name color]セクションの入力デ ータの連動が可能となり、プルダウン等によるパラメータの選択や、パラメータの説明表示が可 能となった。また、今回作成した PHACE が PHITS のパッケージに含まれる例題の入力ファイ ル (phits/lecture/basic/lec01/input/lec01-end.inp)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) 佐藤達彦、岩元洋介、橋本慎太郎、小川達彦、古田琢哉、安部晋一郎、甲斐健師、Tsai Pien、 松田規宏、岩瀬広、PHITS コード開発の現状、日本原子力学会 2019 年春の年会、水戸、 2019.

(4) 今後の利用予定:

近年 PHITS 講習会において Mac を使用するユーザーが増えており、Windows ユーザーのみ ならず、Mac ユーザーに対する PHACE の開発が望まれている。今後は、これまで開発した [material]、[cell]、[surface]、[mat name color]セクション等のデータ専用入力フォーム等を活 用して、動作環境(OS)に依存しない、入力支援が可能な PHITS 専用のテキストエディタを 作成する予定である。

5.4.12 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 の入力ファイルを自動的に作成できる[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、セル番号を指定する 領域メッシュ (reg)、直方体の空間を細分化する xyz スコアリングメッシュ (xyz)、円柱の空間 を細分化する r-z スコアリングメッシュ (r-z) の3つの手法が選択可能である。このうち、xyz メッシュおよび 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、 現状の[T-DCHAIN]タリーは xyz メッシュおよび r-z メッシュに対応していない。そこで、本開 発では、[T-DCHAIN]タリーで、これらのメッシュを使用できるように PHITS を改良する。ま た、本開発で改良した PHITS が出力する DCHAIN-SP の入力ファイルを読み込むためのルーチ ンを開発する。

(2) 利用内容·結果:

従来の[T-DCHAIN]タリーは、指定した各セル番号における構成元素の個数および割合の情報 を出力する。一方、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、そのため、現状の仕様を適用した場合は個々の領域の構成元素数および割合 の情報を出力するため、ファイル容量が膨大になる恐れがある。

そこで、[T-DCHAIN]タリーにて xyz メッシュまたは r-z メッシュを指定した場合は、マテリ アル数および各マテリアルの元素数、元素記号、原子数密度からなるデータ群を出力し、続いて xyz メッシュ数および、各領域での中性子束、体積、各マテリアルが占める体積のデータ群を出 力するように改良した。また、DCHAIN-SP の入力ファイル読み込みルーチンにて、前述の情報 を読み込む機能を新たに開発した。これにより、DCHAIN-SP の入力ファイルが膨大になること を回避できた。

上記の改良に加え、[T-DCHAIN]タリーおよび DCHAIN-SP に新たなパラメータ"mtscore"を 追加した。ここで、"mtscore"の値が 0 のときは、従来通り全てのマテリアルが DCHAIN-SP に て考慮され、"mtscore"の値が 1 以上の場合は、マテリアル番号を指定した値のマテリアルのみ が DCHAIN-SP で考慮される。これにより、例えば、空気とコンクリートを含む領域において、 コンクリート中の誘導放射能だけを抽出し計算することを可能とした。

改良した機能の応用例として、1辺10cmの立方体のコンクリートに100MeVの陽子ビームを ビーム電流 0.1µA で 10 分間照射したときの放射能の時間変化を計算した。PHITS の [T-DCHAIN]タリーでは、コンクリート立方体を1つのセルとした reg メッシュ形式および、深 さ方向 (z 軸) に関して幅 1cm でメッシュを区切った xyz メッシュ形式の2条件で DCHAIN-SP の入力ファイルを作成した。各ファイルを用いて DCHAIN-SP の計算を行い、両計算結果が合 致することを確認し、開発した機能の妥当性を検証した。図1に PHITS で得られた陽子フラッ クスおよび中性子フラックスの空間分布、図2に DCHAIN-SP で得られた各深さにおける誘導 放射能の時間変化をそれぞれ示す。100MeVの陽子のコンクリート中における飛程が 4.3cm で、 それに相当する深さ以降では誘導放射能が急激に減少することがわかった。

以上のように、PHITS 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ともに、 DCHAIN 入力ファイルの作成に要する時間も短縮化された。そのため、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。



図2 コンクリート中の各深さにおける誘導放射能の時間変化

(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:

今後も PHITS 及び DCHAIN-SP の改良を進める予定である。PHITS の一般的なタリーでは、 xyz スコアリングメッシュ(xyz)の計算結果を xy, yz, zx の二次元カラーク ラスタープロット で出力する機能が備わっている。しかし、現状の DCHAIN-SP にはその機能が備わっていない。 そこで、DCHAIN-SP において計算結果を二次元カラークラスタープロットで出力できるように DCHAIN-SP を改良する。

5.4.13 第一原理計算による SA 時の Cs 吸着挙動評価とウラン燐酸化合物の評価 Evaluation on Cs Adsorption Behavior during SA and Uranium Phosphate Compounds using First Principles Calculations

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に向けた取り組みや軽水炉 シビアアクシデント(SA)の発生に対する対処のため、軽水炉 SA 時の核分裂生成物(FP)の 放出・移行挙動の評価手法の高度化が進められている。そのために、炉内環境にあるセシウム(Cs) やヨウ素(I)等の 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・発熱源となりえる 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 の化学吸着挙動に関する事象 や Cs が構造材に化学吸着した炉内状況の把握は十分ではない。そこで、Cs 化学吸着挙動のメ カニズムを解明し、それに基づき炉内状況に影響する Cs の挙動をモデル化する必要がある。Cs は構造材の表面で Si と Cs・Si・O 系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・Si・Fe・O 系化合物の存在が示唆されている。 これらの化合物には種々の組成があり各々特性が異なるため、化学吸着プロセスにおいて生成す る確からしい化合物を特定することは重要である。

また、放射性廃棄物の処理処分に係る技術開発における廃棄物の性状評価や環境動態挙動の一 環として、埋設処分されたウラン化合物の長期移行挙動の評価が求められている。このため、埋 設処分されたウラン化合物の中でも重要なウラン燐酸鉱物の生成環境や生成メカニズム・安定性 を明らかにすることが重要である。そこで、ウラン燐酸鉱物の安定性や電子状態の評価を行う必 要がある。

本課題では、第一原理計算を用いて、炉内環境における Cs の化学形や Cs 局所構造と結合状態の詳細の評価に有用である硬 X 線光電子分光法(HAXPES)の解析手法を構築する。この HAXPES で得られる知見、さらに、X 線吸収微細構造(XAFS)等で得られる知見に基づき、 有限温度の安定性に関する結果、及び、ラマン分光法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。また、ウラン燐酸鉱物の安定性や電子状態の評価を 行うため、構造不明である人形石の構造を検討するとともに、ウラン燐酸鉱物の安定性や電子状態を第一原理計算で評価する。

本研究で扱う手法は量子論的な第一原理計算のアプローチであることから、吸着した Cs の局 所構造や結合状態に対して非経験的な手法で詳細な知見を得ることができる。この非経験的な解 析に基づき、Cs の吸着挙動の基礎となる Cs の化学形や Cs 局所構造と結合状態の評価が可能と なる。この評価に基づき、Cs の挙動をモデル化して Cs の放出・移行挙動の予測手法の構築を進 めることで、燃料デブリ取り等の 1F の廃止措置に対して有効な情報を提供することが可能とな る。また、人形石の構造を検討しウラン燐酸鉱物の安定性や電子状態の評価を非経験的手法で評 価することにより、生成環境や生成メカニズム・安定性の評価の基礎を構築することができる。

(2) 利用内容·結果:

①DFT 計算による Cs 化合物の HAXPES スペクトル解析手法の構築

1Fの廃炉においては、主な放射線源・発熱源となる Cs の炉内における分布と性状の評価が重要である。そこで、高温で炉内構造材と化学反応を生じて吸着する Cs 化学吸着現象に着目し、 その挙動を解明するための研究を行っており、Cs 化学吸着により生成した Cs 化合物の性状を HAXPES 等により評価している。

HAXPES スペクトルには化合物の物理化学状態に関する多くの情報が含まれるため、その解 析手法の構築は重要であるが、特に価電子エネルギー領域で寄与が大きい Cs 5p 成分に相当する スペクトルは、スピン軌道相互作用により Cs 5p1/2 と Cs 5p3/2 の各成分に相当するピークの一部 が重なっており、解析が困難である。そこで、DFT 計算を用いた HAXPES スペクトルの解析 手法のため、この Cs 5p 成分に相当する 2 つの重なったピークを分離するスキームを構築した。

DFT 計算による HAXPES スペクトルの解析は、各軌道成分の状態密度(DOS) にイオン化 断面積を乗じることによって理論的にスペクトルを求め、これらを実験により得られたスペクト ルと比較することにより行う。DFT 計算により求めたスピン軌道相互作用がある場合のスペク トルは、測定結果と同様にピークの分離が現れるが、各ピークに相当する成分の寄与を評価でき ないため、このままでは物理化学状態の解析が不可能である。そこで、それぞれの成分に起因す るピークは、スピン軌道相互作用を考慮せず計算した Cs 5p 成分(ピークが分離しない結果が得 られる)のエネルギーをシフトさせたものの強度を調整して重ね合わせることにより表されると 仮定し、それぞれの成分の比とエネルギーのシフト量を最小二乗法によりスピン軌道相互作用を 考慮した計算結果にフィッティングすることにより決定するスキームを考案した。本スキームを

用いて、代表的な Cs 化学吸着化合物である CsFeSiO₄のHAXPES測定結果の解析を行った。 なお、DFT 計算には WIEN2k コードを用いた。

図 1 に本スキームを用いて求めた CsSiFeO4 の価電子域のHAXPES スペクトルを測定結果と 比較して示す。計算により求めたスペクトルは、 Cs 5pのピークよりも低エネルギー側の6.5eV付 近の小さいピークで表される微細構造も含めて 測定結果を良く再現していることから、本スキー ムは CsSiFeO4 ピークの解析に有効であると考 えられる。すなわち、本スキームで Cs 5p1/2 と Cs 5p3/2 の成分を分離して評価することにより 化学状態の詳細な解析が可能となった。



図 1 CsFeSiO₄の価電子域の HAXPES スペクトルの測定結果と計算結果

②人形峠域のウラン燐酸化合物の構造評価

人形峠周辺にはウラン鉱床が多く存在しており、主要なウラン鉱物として、酸化帯では燐灰ウ ラン石(二次鉱物)等、非酸化帯では人形石(一次鉱物)等がある。燐灰ウラン石等のウラン燐 酸化合物の生成挙動に関する知見や関連する熱力学的データ(溶解度等)は十分でなく、現在で も研究が継続されている。これらのウラン燐酸化合物の生成挙動は、埋設処分されたウラン燐酸 化合物の長期移行挙動に影響するため、人形石や燐灰ウラン石の生成メカニズムの解明は重要で ある。このメカニズムの解明の一環として、人形石や燐灰ウラン石の安定性の評価を行う。安定 性評価の第一段階として、結晶構造の詳細が明らかでない人形石の構造を検討した。

燐灰ウラン石の構造については結晶構造が報告されている。一方、人形石は格子定数が報告さ れているが、結晶構造の詳細は明らかではない。そこで、人形石の結晶構造の検討を DFT 計算 により行った。計算コードは、VASP コードを用いた。人形石の構造の詳細は明らかでないため、 Mg₄(SO4)₃(OH)₂・H₂O を基にして、人形石の組成である UCa(PO₄)₂・2H₂O となるように、初期

構造のモデルとして U₂Ca₂(PO₄)₄·4H₂O で構 成される単位格子を作成して計算を実施した。

人形石について既報値と本モデルにより計 算した結晶格子を表 1 に示す。格子定数は± 10%程度の差であり、体積は2%程度の差であ った。一方、既報の結晶格子は直方晶に対して 計算結果は三斜晶であった。既報値と計算結果 を比較すると、格子定数はやや大きな差があっ たが、体積の差は小さく、単位格子の構成は U₂Ca₂(PO₄)₄·4H₂O であると考えられる。

表1 人形石の結晶格子

	計算結果	報告値	
a	$0.622~\mathrm{nm}$	0.678 nm	
b	$1.347~{ m nm}$	1.21 nm	
с	$0.583~{ m nm}$	0.638nm	
α	82°	90°	
в	93°	90°	
Y	87°	90°	
体積	$0.512~\mathrm{nm^3}$	$0.523~\mathrm{nm^3}$	

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

査読付き論文

 C. Suzuki, T. Yaita, S. Suzuki, J. Pacold, A. B. Altman, S. Minasian, T. Tyliszczak, 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, 127, pp.169-177 (2019).

学会発表

2) 鈴木知史、逢坂正彦、中桐俊男、"人形峠地域における環境研究(3)人形峠ウラン鉱物の安定 性評価"、日本原子力学会 2018 年秋の年会、岡山、2018.

(4) 今後の利用予定:

SA時における Cs 吸着挙動の解明の一環として、種々の Cs-Si-O 系化合物と Cs-Si-Fe-O 系化 合物等の標準物質の HAXPES の測定結果に対して構築した解析手法を適用するとともに、解析 手法を改良する。また、ウラン燐酸化合物の安定性の評価のため、構造不明な人形石の構造を解 明する。さらに、解明した構造に基づきウラン燐酸化合物の安定性と電子状態の評価を進める。

5.4.14 軽水炉過酷事故下での Cs モデリング挙動

Cs Modelling Behavior under LWR Severe Accident

Miradji Faoulat 性能高度化技術開発グループ

(1)利用目的:

This research project is related to the decommissioning work of Fukushima Daiichi Nuclear Power Station (1F) and the occurrence of light water reactors (LWR) severe accident (SA). Fundamental research of the fission product (FP) release / transport behavior under LWR SA conditions to elucidate the chemical behavior of FP can be conducted by specifying the chemical form of FP such as cesium (Cs) and iodine (I) in the furnace environment. Among FP, it is important to elucidate the chemisorption behavior of Cs into reactor coolant system (RCS) and primary containment vessel (PCV) regions, which could be subject to Cs chemisorption processes due to Cs mid-term irradiation onto these structural materials. Regarding the computational part, we combine computational chemistry and material science (crystallography) to evaluate fundamental properties of substances in the context of an LWR SA. From the electronic structures, using Density functional theory (DFT), several physicochemical properties of the system could be derived. This provides valuable information on a material's chemical makeup, polymorphic form, defects or disorder. It also sheds light on how solids perform under environmental changes such as temperature, pressure, and stress conditions for evaluation of Cs mechanisms under LWR SA.

The objective of my research is to determine chemical and physical properties of Cs substances, including thermodynamic and kinetic parameters. The outcome of my research focused on the improvement of Cs chemical modelling under conditions relevant to LWR SA.

(2)利用内容·結果:

DFT can usually provide accurate answers for large systems such as clusters and solids. For atoms and molecules, the results from DFT often rival those from ab-initio quantum chemistry, partly because larger basis sets can be used. Coupled-Cluster Singles-and-Doubles (CCSD) methodology is the most accurate, widely applicable approach for the correlation problem in molecules. DFT and CCSD methodologies allowed to bring relevant results in the studies described hereafter, using among other the VASP and Gaussian codes.

(1) Thermodynamic Properties and kinetic parameters of Ruthenium in LWR SA conditions

The review of thermodynamic data of ruthenium (Ru) oxides reveals large uncertainties in some of the standard enthalpies of formation, motivating the use of high-level relativistic correlated quantum chemical methods to reduce the level of discrepancies. The reaction energies leading to the formation of Ru oxides RuO, RuO₂, RuO₃, and RuO₄ have been calculated for a series of reactions. The most suitable method for Ru compounds is the use of TPSSh-5%HF for geometry optimization, followed by CCSD for the calculation of the total electronic energies. This methodology yields very accurate standard enthalpies of formations of all species, which are either in excellent agreement with the most reliable experimental data or provide an improved estimate for the others. The developed methodology was used to reduce the discrepancies of Ru oxyhydroxides thermodynamic data and predict the new ones. The highly accurate ab initio thermodynamic data of the Ru-O and Ru-O-H systems were used as input data of thermodynamic equilibrium calculations to derive the speciation of gaseous Ru species in the temperature, pressure and concentration conditions of LWR SA. Reaction mechanisms of Ru species with potential air radiolysis products from SA conditions (nitrous and nitrogen oxides) were then derived to explain Ru transport mechanisms in SA like conditions.

(2) Evaluation of fundamental properties of Cs silicates by first principles calculations

Theoretical calculations were conducted in order to provide the unknown thermochemical properties of Cs-Si-Fe-O systems for the establishment of Cs chemisorption model based on the mass transfer theory using VASP code. This method was applied to obtain the geometric, electronic and energetic properties of target species. Phonon calculations in the harmonic approximation were performed to derive the thermodynamic data. The computational methodology was validated by calculating the thermal properties of Cs₂Si₄O₉ revealing a good agreement with the literature data as shown in figure 1.

To compute the fundamental data of $CsFeSiO_4$, several configurations were investigated with only one available in the literature. These calculations allowed to predict the polymorphous behavior of our substances, not known by literature, confirmed in our last experimental measurements. Indeed, as one could see in figure 2, $CsFeSiO_4$ was derived within two crystal structures by the DFT calculations. The last experimental measurements obtained in 2019 showed two curves, following each one of the DFT derived crystal structures. These calculations predict and elucidate accurately our target properties.





Figure 1 Heat Capacity of Cs₂Si₄O₉ substance obtained by DFT calculations compared with experimental PPMS measurements.

Figure 2 Heat Capacity of CsFeSiO₄ substances obtained by DFT calculations compared with experimental PPMS measurements.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

[Peer review journals]

- <u>F. Miradji,</u> C. Suzuki, E. Suzuki, S. Nishioka, K. Nakajima, M. Osaka, M. Barrachin, T.M.D Do, K. Murakami, M. Suzuki, "Modelling of cesium chemisorption under nuclear power plant severe accident conditions", The 9th European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR) 2019 Congress, Prague 18-20 March 2019.
- 2) <u>F. Miradji</u>, C. Suzuki, K. Nakajima, M. Osaka, "Cesium chemisorbed species onto stainless steel surfaces: an atomistic scale study", J. Phys. Chem. Solids, 2020. (Submitted) doi:10.1016/j.jpcs.2019.109168.

[Oral communications]

- 3) <u>F. Miradji</u>, C. Suzuki, E. Suzuki, S. Nishioka, K. Nakajima, M. Osaka, M. Barrachin, T.M.D Do, K. Murakami, M. Suzuki, "Modelling of cesium chemisorption under nuclear power plant severe accident conditions", The 9th European Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR) 2019 Congress, Prague – Czech Republic 18-20 March 2019.
- 4) <u>F. Miradji</u>, E. Suzuki, S. Nishioka, C. Suzuki, K. Nakajima, M. Osaka, T.M.D Do, Yuji Ohishi, Hiroaki Muta "Comparative study of Cs silicates properties between DFT calculation and experimental data", Atomic Energy Society of Japan 2018 Fall Meeting, Sep. 2018, Okayama – Japan.
- 5) <u>F. Miradji</u>, C. Suzuki, K. Nakajima, M. Osaka, "Structural and thermal properties of Cs-Fe-Si-O systems under LWR severe accident by DFT calculations", High Temperature Material Chemistry (HTMC- XVII), Jul. 2018, Ekaterinburg Russia.
- 6) <u>F. Miradji</u>, C. Suzuki, K. Nakajima, M. Osaka, "Quantum modelling of Cs substances in the case of LWR severe accident", Atomic Energy Society of Japan (AESJ) 2018 Annual Meeting, Mar. 2018, Osaka Japan.

[Poster]

7) <u>F. Miradji,</u> C. Suzuki, K. Nakajima, M. Osaka, "Quantum modelling of Cs substances in the case of LWR severe accident", Collaborative Laboratories for Advanced Decommissioning Science (CLADS) Fall Meeting, Feb. 2018, Tomioka – Japan.

(4) 今後の利用予定:

なし

5.4.15 炉内熱流動挙動評価を目的とした混相流解析手法の構築

Development of Multiphase Simulation Method for Thermal-hydraulics Behavior in a Reactor

永武 拓、吉田 啓之、鈴木 貴行

熱流動技術開発グループ

(1)利用目的:

原子炉内の熱流動挙動は、定格運転時や事故時を含む過渡事象などの原子炉の状態にかかわら ず、設計、安全性評価に重要である。多様な条件に対して、熱流動挙動の評価を考えた場合、何 らかの数値解析の適用が必要とされる。汎用性や設計精度の向上を考えた場合、CFD に基づく 熱流動挙動の評価が求められるが、特に原子炉内で発生する様々な混相流挙動に対しては、これ を現実的に評価できる手法は確立されていない。そこで本課題では、原子炉内のような大規模な 系に対して、CFD に基づく混相流挙動解析手法を開発することを目的とする。

(2)利用内容·結果:

5×5 模擬燃料集合体及び模擬上部タイプレートにおける二相流挙動解析を実施した。計算に は、構造物を模擬することを目的としたポーラスモデルを導入した ACE3D コードを使用し、境 界条件として模擬燃料集合体下部より空気、上部よりスプレイ水を流入させた。この際、空気流 入速度を変化させることにより模擬燃料集合体における二相流挙動の違いを観察した。空気流速 が低い場合は、上部からのスプレイ水が下部の燃料集合体内部へ落下しているが、空気流速が増 加するに従い落水量が減少し、上部タイプレート部において蓄水が起きている様子が解析され、 これは実験で見られた現象と定性的に一致した。また、空気流速に対する下部への落下する水の 量は定量的に実験結果と解析結果が一致した。これにより、燃料集合体の上部タイプレートにお ける二相流挙動を定性的に再現可能であることを確認した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 T. Nagatake et.al., Study of CCFL Two-Phase Flow at Upper Tie Plate of Fuel Bundle to Evaluate Spray Cooling Capability in Spent Fuel Pool, ICAPP2018, Charlotte, USA, 2018, pp.414-420, USB.

(4) 今後の利用予定:

今回の結果を踏まえ、コードの改良を実施後改めて使用する予定である。

5.4.16 機構論的限界熱流束手法確立のための二相流挙動解析

Numerical Simulation for Establishment of Evaluation Method of Critical Heat Flux Based on Mechanism

小野 綾子、吉田 啓之、鈴木 貴行 熱流動技術開発グループ

(1) 利用目的:

熱流動技術開発グループでは、軽水炉安全性の向上およ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た研究を立ち上げた。本研究では、長年の間、機構論的な評価が 難しかった課題に対して、近年急速な発展を遂げている三次元詳細二相流解析を評価手法の中に 組み込むことで、従来研究とは異なるブレークスルーを生み出す。そのためには、予測評価手法 の中核をなす界面追跡法に基づく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が必要である。

本研究により、機構論的な限界熱流束予測手法の確立が可能となれば、軽水炉の燃料集合体を はじめとする超高熱流束機器の設計と安全評価における大型モックアップ試験に関わる費用の 低減に大きく寄与するほか、事故時の過渡事象における燃料集合体まわりの熱流動挙動に関わる 予測をすることができるようになり、解析による高精度な安全評価が可能となることが期待さ れ、研究開発の意義は大きい。

(2) 利用内容·結果:

<TPFIT を用いた気泡挙動解析>

平成 30 年度の研究として、実験で観察およ び計測することが困難な微細な気泡挙動につ いて、TPFITを用いた数値実験を行った。限界 熱流束は、気泡下に存在する液膜の蒸発による 消耗によって発生するという説があり、複数の 研究者によってその液膜を見積もる物理モデ ルが構築されてきた。そのうちの一つに、気泡 接合時に気泡の間に存在する液体が合体泡内 に取り込まれるというモデルがある。しかしな がら、気泡同士が接合するときに液体が取り込



図 1 オリフィスからの蒸気吹き出し時の 気泡の接合

まれるというコンセプトは実験的に証明されていないため、本研究では数値シミュレーションを 用いてこの可能性について検討を行った。解析では、図1に示すように断熱条件とし相変化を考 慮せず、気泡の生長はオリフィスからの蒸気の吹き出しで模擬した。解析のパラメータとして、 圧力、オリフィス間隔、蒸気吹き出し速度を選んだ。圧力値や蒸気吹き出し速度は、気泡の形状 を変化させることが分かった。図2に示すように4つの気泡が接合した後に気泡の内部には液体 が取り込まれていることがわかった。また、気泡形状が半球から球形に近づくほど取り込まれる 液体体積が増えるということ、図3で示すようにオリフィス間距離が大きくなることで取り込ま れる液体体積が増えるという、モデルの傾向を定性的に再現した。



図 2 接合時に蒸気泡の内部に取り残される液体



図3 液体取込み量とオリフィス間距離

<TPFIT を用いた 4×4 バンドル解析>

モデルによる限界熱流束の判定に必要となる物理量を得るために、**TPFIT**を用いた実機相当のバンドル解析を実施する。原子力機構にある高圧試験ループに設置されている 4×4 バンドル 試験体を解析対象とする。4×4 バンドル試験装置には、ワイヤメッシュセンサが取り付けられ、 ピン間のボイド率を計測することができる。

本研究では、スペーサグリッドからワイヤメッシュセンサが設置してある場所までの450mm について TPFIT で気泡流解析を行った。蒸気はバンドル下部に設けたオリフィスから注入する こととした。水の流れと並行に蒸気を注入すると界面のせん断力が大きくなり、計算が破綻しや すくなることがわかった。そのため、蒸気注入は、水の流れに対して垂直方向に行うこととした。 図4に解析結果を示す。気泡がバンドルにそって流れていく様子が解析された。図5で示すよう に、実験で得られる予定であるボイド率分布と比較できるように解析データの処理方法を確立し た。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

国際会議における論文発表(査読有)

- 1) A. Ono, T. Suzuki, H. Yoshida, Numerical study on effect of pressure on behavior of bubble coalescence by using CMFD simulation, Proceedings of 26th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-26) (2018).
- 2) A. Ono, T. Suzuki, H. Yoshida, Numerical study on effect of nucleation site density on behavior of bubble coalescence by using CMFD simulation code TPFIT, Proceedings of 12th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal-Hydraulics, Operation and Safety (NUTHOS-12) (2018).

講演発表及び口頭発表(査読無)

3) 小野綾子、吉田啓之、鈴木貴行、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、吹田、2018.

- 4) 小野綾子、鈴木貴行、吉田啓之、TPFIT による 4×4 模擬燃料集合体内二相流動解析、日本 原子力学会 2018 年春の年会、吹田、2018.
- 5) A. Ono, S. Yamashita, T. Suzuki, H. Yoshida, Numerical simulation of two-phase flow in 4×4 simulated fuel bundle, International Conference on Nuclear Engineering (ICONE27), 2019.

(4) 今後の利用予定:

今後は、より実機に近い大規模な計算体系で燃料集合体二相流解析を実施し、過去のバンドル を含む二相流実験の論文で公表されているデータと比較することで、解析手法の妥当性を検討す るほか、蒸気の吹き出しによる沸騰模擬を行い、大規模体系における沸騰機能の追加について検 討を行う。



図4 バンドル内二相流解析結果



図5 解析結果から算出したボイド率分布

5.4.17 過飛散微粒子捕集挙動の予測評価手法の開発に関する研究

Development of Numerical Simulation Method of Aerosol Particles Behavior

上澤 伸一郎、吉田 啓之、鈴木 貴行、堀口 直樹 熱流動技術開発グループ

(1)利用目的:

燃料デブリを機械的又はレーザー等により高温で切削する場合、多量の飛散微粒子が発生する と予測されており、閉じ込め管理が必要である。本課題では、廃炉工程で発生する放射性飛散微 粒子の効果的な閉じ込め、捕集方法を検討する上で必要と考えられる、微粒子のフィルタ等によ る捕集に至るまでの飛散ならびに捕集挙動の予測評価手法を構築し、様々な飛散微粒子の性状や フィルタの構造に対して本予測評価手法を適用することで、放射性飛散微粒子捕集の効率化に貢 献する。具体的には、微粒子の性状(質量、粒径、速度など)に対して本予測手法を適用するこ とで微粒子の挙動を把握するとともに、繊維フィルタによる捕集、スプレイ(液滴)による捕集、 汚染ガスの液中吹き込みによる捕集などの固体界面や気液界面における飛散微粒子の捕集挙動 を明らかにする。本課題においては、界面近傍の計算が重要であることから、課題担当者が所属 する熱流動技術開発グループが独自に開発した、界面追跡法に基づく3次元流動場詳細解析コー ド TPFIT を使用する。また、放射性微粒子は比較的微小であるとともに、捕集するフィルタも 微細であり、高い解像度が求められることから、大型計算機の利用が必要と考えられる。

本研究開発によって構築された放射性微粒子の飛散挙動と捕集挙動の予測評価手法は、放射性 飛散微粒子の閉じ込めの観点から廃炉工程作業の指針になるとともに、放射性飛散微粒子の閉じ 込め技術の最適化に貢献できると考えられる。また、本研究で開発する手法は、詳細な二相流解 析手法を、これまで適用されていなかった微細な条件に拡張するものであり、また、実験と解析 を並行して実施することによる解析コードの検証など、研究開発としての意義も大きい。

(2) 利用内容·結果:

廃炉工程で発生する放射 性飛散微粒子の効果的な閉 じ込め、捕集方法を検討す る上で必要と考えられる、 繊維フィルタや気泡、液滴 などの気液界面による捕集 に至るまでの飛散ならびに 捕集挙動の予測評価手法を 構築した。



図1 計算体系と解析結果の一例

気液界面における粒子挙動の解析の一例を図1に示す。解析体系として、1mm×1mm×1mmの領域の下部に試験体系を再現した直径770µmの半球状の液滴を設置した。計算領域上部を流入条件、下部を滑り無し条件、それ以外の面を圧力一定の流出条件とした。流動が準定常に到達した後、異なる粒径の微粒子を一斉に計算領域に流速と等しい初速度で液滴に向けて放出した。

流入境界の速度は 5 m/s である。粒子の密度には CsI 粒子の密度を用いた。粒径は、0.1 μm、0.5 μm、1 μm、5 μm、10 μm、20 μm、50 μm である。

図1右側の画像は、図1左側の解析体系で得られた粒子挙動の30µs時刻の重ね合わせ画像で ある。背景に流速分布と液滴の液体率を表示してある。粒径0.1µmから1µmの比較的小さい 粒子は液滴の気液界面に到達できず、捕集できていないことがわかる。粒径5µmの粒子は気液 界面に沈着した。粒径10µm、20µm、50µmのさらに大きい粒子は、液滴内部まで侵入し、液 滴内部で捕集された。このように粒径によって飛散微粒子の挙動は大きく異なる。また、これら の粒子挙動の解析結果は、解析と同様な液滴周りの粒子挙動可視化試験においても確認されてお り、本解析は定性的に妥当であることも確認された。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

国際会議における論文発表(査読有)

- 1) S. Uesawa, N. Miyahara, N. Horiguchi, H. Yoshida, M. Ohsaka, "Observation of Aerosol Particle Behavior Near Gas-Liquid Interface", Proceedings of 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27), ICONE27-1972, 2019.
- 2) H. Yoshida, S. Uesawa, H. Naoki, M. Naoya, Y. Ose, "Development of Numerical Simulation Method For Small Particles Behavior in Two-phase Flow by Combining Interface and Lagrangian Particle Tracking Methods", Proceedings of the 11th Korea-Japan Symposium on Nuclear Thermal Hydraulics and Safety (NTHAS11), N11P0064, 2018.

講演発表及び口頭発表(査読無)

- 3) 上澤伸一郎、宮原直哉、堀口直樹、吉田啓之、逢坂正彦、格納容器及び原子炉建屋内におけるエアロゾル粒子沈着量評価手法の開発(6)粒子挙動直接観察によるエアロゾル粒子沈着挙動の検証、日本原子力学会2019年春の年会、水戸、2019.
- 4) 上澤伸一郎、宮原直哉、堀口直樹、吉田啓之、逢坂正彦、格納容器及び原子炉建屋内におけるエアロゾル粒子沈着量評価手法の開発(5)濡れ面におけるエアロゾル粒子挙動の可視化 計測、日本原子力学会2018年秋の大会、岡山、2018.
- 5) 吉田啓之、上澤伸一郎、堀口直樹、宮原直哉、小瀬裕男、界面追跡法に基づく界面でのエア ロゾル粒子捕集挙動解析手法の開発、第23回動力・エネルギー技術シンポジウム講演論文 集、B233、2018.
- 6) 上澤伸一郎、堀口直樹、宮原直哉、吉田啓之、気液界面でのエアロゾル粒子捕集挙動の可視 化計測、第23 回動力・エネルギー技術シンポジウム講演論文集、B234、2018.

(4) 今後の利用予定:

本解析結果が定性的に妥当な結果であることが確認できたものの、定量的な評価が未だ十分に 検証できていない。また解析の解像度依存性などが確認できておらず、今後検証を進める予定で ある。それらの検証後、気泡や液滴によるスクラビングや繊維フィルタに対する飛散微粒子挙動 の解析を実施する予定であり、今後も大型計算機の利用を予定している。

5.4.18 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、永武 拓、上澤 伸一郎 熱流動技術開発グループ

熱流動技術開発グループでは、不確かさの多い過酷事故時の炉心溶融物移行挙動を計算するた めの多相流溶融凝固解析コード JUPITER を開発している。本課題では、福島支援の一環として、 既存の SA 解析コードが想定している事故時の典型的な事故進展シナリオでは対応できない非典 型的シナリオ(水蒸気枯渇条件など)を考慮するため、化学反応モデルとして、共晶反応モデル 及び Zry の水蒸気酸化反応モデルを組込むことを目的とする。なお、本課題は大口課題:「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:

(1) 利用目的:

<共晶反応モデルの構築と導入>

図1左に計算体系を示す。CAD データより、BWRの制御棒、チャ ンネルボックス、燃料棒の一部を 入力データとして作成し、中性子 吸収材(B4C)と制御棒シース (SUS)界面での液相化過程解析 を行った。領域は縦横高さが、45、 17.5、100mmで、格子解像度は、 120×320×690である。BとCの 初期溶質濃度を標準的な B4C の重 量比である 78.3%、21.7%と設定 し、拡散方程式により求めた各溶



図1 計算体系(左)と制御棒内部の液相化(右)

質濃度と熱力学データベースから融点を評価した。図1右は、Paraviewの分散データ可視化環 境により可視化した制御棒での共晶溶融物の分布状況である。拡散により溶質濃度が変わること で融点が低下し、制御棒シースと中性子吸収材被覆管界面で共晶溶融物が生じている。図1右の 筋状の溶融物は実験でも確認されており、解析によりおおむね妥当な結果が与えられていると言 える。

JUPITER で水蒸気酸化反応現象を扱うために、温度履歴に応じた酸化膜厚さ、反応熱、水素 生成を解析できるモデルを導入した。導入に当たり、従来非構造格子でしかモデル化されていな かった酸化反応界面進展の管理に対し、Level-set 関数を用いることにより JUPITER に適合で きるように改良した。これにより JUPITER により水蒸気酸化反応が扱えるようになった。図2 における解析体系において、機能確認計算を実施した。1mm×1mm 四方の2次元領域に左半分 にZry、右半分に水蒸気雰囲気を仮定し、酸化界面厚さの発展を解析した。図3は、既往解析結 果、図4は、JUPITERの結果である。図4より、JUPITERの結果は既往結果と同様の結果と

なり、酸化反応モデルは適切に機 能していることを確認した。以上 より、共晶による溶融挙動が解析 できるようになったこと、及び Cartesian グリッドでの酸化反応 モデルの基礎が完成し、物理化学 的・材料科学的知見に基づく溶融 移行挙動の推定に目処がたったこ とは、過酷事故時炉内構造物の機 構論的な溶融物進展挙動評価にお いて重要な進展であると言える。





図3 既往解析結果



図4 JUPITER 解析結果

<化学反応モデルに対する妥当性検証>

異種金属界面間での各成分の溶質の拡散に伴う融点低下を表す共晶反応モデルの妥当性を検 証するために、HofmannのZr-Fe 共晶反応実験解析を行った。図5は実験体系と解析体系であ り、中心に円柱状のステンレスを配置し、その周囲にZircaloy-4を配置している。周囲温度を 1000℃、1100℃、1150℃、1200℃で加熱し、反応界面の厚さの時間変化を実験結果と比較した。 結果を図6に示す。図より、いずれの温度においても、解析結果は実験結果と良好な一致を示す ことを確認した。以上より、化学反応モデルである共晶モデルの妥当性を確認できたことは、機 構論的な化学反応モデルを含む溶融物移行挙動予測につながる重要な成果である。



(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

査読付論文

- 山下晋、多田健一、吉田啓之、須山賢也、"燃料デブリ分布と再臨界予測における多相多成 分詳細流体解析手法と連続エネルギーモンテカルロコードとの連成解析"、日本原子力学会 和文論文誌、Vol.17、pp.99-105, (2018).
- 2) S. Yamashita and H. Yoshida, "Development of numerical simulation method to evaluate molten material behaviors in nuclear reactors: Estimation of fuel debris distribution in the pedestal", Proc. ICONE-26, (2018).
- 3) S. Yamashita and H. Yoshida, "Development of Numerical Simulation Method to Evaluate Molten Material Behaviors in Nuclear Reactors", Proc. NUTHOS-12, (2018).
- 4) P. Chai, S. Yamashita, Y. Nagae and M. Kurata, "Validation and verification for the melting and eutectic models in jupiter code", Proc. ERMSA2019, (2019).
- 5) S. Uesawa, S. Yamashita, M. Shibata and H. Yoshida, "Free convective heat transfer experiment to validate air-cooling performance analysis of fuel debris", Proc. NTHAS11, (2018).

講演発表及び口頭発表

- 6) 山下晋、永江勇二、倉田正輝、吉田啓之、"シビアアクシデント時の燃料破損・溶融過程解 析手法の高度化(1)(その2)炉内構造物の溶融移行挙動詳細解析コード整備"、日本原子 力学会2018年秋の大会、岡山、2018.
- 7) 山下晋、永江勇二、倉田正輝、吉田啓之、"シビアアクシデント時の燃料破損・溶融過程解 析手法の高度化(2)(その2)溶融移行挙動詳細解析コード整備"、日本原子力学会2019年 春の年会、水戸、2019.

(4) 今後の利用予定:

平成 30 年度は、共晶反応モデルや JUPITER に適合した酸化膜成長モデルを組込み、機能確 認解析を実施した。今後は、その更なる妥当性検証を行うと共に、3 次元大規模体系へ拡張し、 水蒸気流量や酸化膜厚をパラメータとして、溶融事象進展に対する感度解析を実施する予定であ る。

5.4.19 ADS 設計のための詳細熱流動解析

Detailed Numerical Studies on Thermal-hydraulics in a Design of ADS System

> 山下 晋、小瀬 裕男、永武 拓、菅原 隆徳 熱流動技術開発グループ

(1)利用目的:

ADS システムにおけるビーム窓周りの熱流動解析はこれまでに、定常流れを仮定した計算し か行われていない。一方、代表的な流速、長さ、LBE の物性値からレイノルズ数を求めると数 百万程度に達し、流れ場は非定常な乱流状態であることから、ビーム窓周りの温度分布には依然 として不確かさが存在する。従って、信頼性の高い ADS 設計を行うために、流れの非定常性を 考慮した詳細な流動場解析が重要である。本課題は、原子力機構が開発する、過酷事故時炉内溶 融物移行挙動解析手法である JUPITER を用いて、ADS ビーム窓周りの詳細な熱流動場計算に おいて格子解像度の影響と流れ場の傾向を調べることを目的とする。

(2) 利用内容·結果:

<格子解像度の影響>

基準解像度を、ビーム窓最薄部を2格子で解像できる約0.8mm とし、その半分の0.4mmの2 ケースで依存性を調べた。図1~4 はそれぞれ0.8mm 幅と0.4mm 幅の格子点による速度ベクト ル場及び温度場の解析結果である。図より、格子幅が小さくなると、より小さい渦構造が現れて いることが確認できる。また、ビーム窓の温度は、図3黒丸領域内に示すように、ビーム先端か ら若干下流方向に位置する箇所で最も高温になった。これは、既往解析結果と同様な傾向であり、 本解析は概ね妥当であると考えられる。



図1 0.8 mm 格子幅における *t*=11, 12, 13, 14 での速度ベクトル分



図 2 0.4 mm 格子幅における t = 11, 12, 13, 14 での速度ベクトル分



図 3 0.8 mm 格子幅における t = 11, 12, 13, 14 での温度分布



図 4 0.4 mm 格子幅における *t* = 11, 12, 13, 14 での温度分布



図6 各位置における水平断面温度分布 t=4s

<大規模3次元解析>

3 次元解析では、図 5 に示すように、縦横高さそれぞれ 620mm×685mm×1,100mmの領域 長に対し、格子点数を 776×864×1,380 = 925,240,320 点の格子を用いた。LBE の発熱分布は PHITS による解析結果を与え、t=0から 2.4 秒まで発熱なしで流れ場を発達させ、その後から 発熱を与えて温度場を計算した。図 6 は、加熱開始後からおよそ 1.6 秒経過した時点での図 5 に おける a, b, c, d における水平断面温度分布である。図より断面位置がノズル先端領域に近づく につれ、強い 3 次元性が現れていることが分かる。即ち、径方向だけでなく周方向の時空間的な 温度変動の影響も考えられるため、従来の 2 次元を仮定した解析では不十分であることを示唆す るものである。

本解析は、直交直線等間隔格子を用いた解析であり、約10億点を用いた解析はICEXで10,368 コアを用いた計算でもt=4.0sまでの計算で半月程度を要した。このような解析は、平均値や乱 流統計量を算出するために、長時間平均をする必要があるため、高速な計算手法が重要となる。 また、着目する対象としては、ビーム窓先端部が主であるため、計算時間の短縮ならびに効率的 な計算のために、ビーム窓周囲のみに格子を集中させることができる局所細分化格子の導入や GPUによる高速計算が有効であると考えられる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

查読付論文

1) S. Yamashita, T.Sugawara, H. Yoshida, "Development of numerical simulation method to evaluate detailed thermal-hydraulics around beam window in ADS", Proc. ICONE-27, ICONE27-1972, 2019.

(4) 今後の利用予定:

平成 30 年度は、JUPITER を用いて ADS ビーム窓周りの非定常流れ場の格子依存性と、詳細 な流れ場解析によりその傾向を調査した。今後は、ビーム窓の冷却性に大きな影響を及ぼすと想 定されるノズル形状やビームトリップなどをパラメータとした解析を実施する。計算規模は、平 成 29 年度と同様に 10 億点規模の大規模計算になることが想定されるため、ICE X を継続して 使用する。

5.4.20 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、界面追跡法に基づく詳細二相流解析コード TPFIT の発展・改良を行うとともに、 別途取得する実験データを用いての検証を行った。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、これまでに改 良・機能追加を行った解析手法を用いて、浅水プール内液体ジェットの侵入挙動解析を実施し、 接触角および格子解像度をパラメータとしてジェット着底後の液膜挙動評価を実施した。なお、 本解析は、大型計算機利用課題(大口利用)として実施したものである。また、本解析結果は、 福島第一原子力発電所の炉内状況把握への適用を通じた廃炉への支援も目的とした。

(2) 利用内容·結果:

浅水プール内液体ジェット侵入挙動解析の解析体系を図1に示す。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 200,200,50[mm]である。計算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 5[mm])を設置した。液

実験と同様にグリセリ ン水溶液 (34wt%)を用 い、ノズルからの射出速 度は 2.0 [m/s]とした。ま た、解析では接触角をパ ラメータとし、45 および 133[⁹]の 2 パターン実施 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

体ジェットの物性値は



図1 計算体系

入条件を与えた。側面は壁面境界条件、底面は接触角の働く固体壁の条件とした。格子解像度の 影響評価のため、解像度を変えて2ケース実施した。解析は、平成30年度プログラム高速化・ 並列化作業で得られた TPFIT Ver. 1.71 を用いた。格子解像度が粗いケースでは[*x,y,z*]= [400,400,100]=1600 万格子、*x,y,z*方向の並列数は[*x,y,z*]=[10,10,10]とし、計 1000 並列で解析 を行った。また、高解像度解析では[*x,y,z*]=[800,800,200]=1億 2800 万格子、*x,y,z*方向の並列 数は[*x,y,z*]=[20,20,10]とし、計 4000 並列として解析を行った。以下の説明では、Case1 は低解 像度、接触角 45°のケース、Case2 は高解像度、接触角 45°のケース、Case3 は高解像度、接触 角 133°のケースとする。



 (a) Case1
 (b) Case2
 (c) Experiment

 図 2 液体ジェットの界面形状の実験結果との比較

 (上図:側面視点、下図:底面視点)

解析結果の一例として、液体ジェットの界面形状を側面と底面から見た時の解析結果を実験結 果と比較して図2に示す。なお、平成30年度プログラム開発整備作業により開発した、可視化 プログラムを利用して可視化した。解析及び実験ともに、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ジェット の芯の部分から微粒化を伴いながら侵入してくる挙動が確認できる。また、ジェットが着底する と薄膜状の挙動を示し、液膜の先端部で巻き上げられた液体ジェットが微粒化する様子が確認で きる。図から、高解像度である Case2 のほうが Case1 と比較して微粒化挙動がよく再現できて いることが確認できる。また、底部からの観測ではジェットの液膜が壁面上に拡がる様子が解析、 実験ともに確認できる。しかしながら、低解像度解析では高解像度解析と比較して微粒化が抑制 される傾向がみられた。図より、液膜が壁面でちぎれる様子が見て取れるが、これらの結果から、 格子解像度による影響が大きいことが示唆された。次に、図 3 に壁面での接触角を 45°とした Case2 および接触角 133°の Case3 の結果を図 2 と同様に示す。射出されたグリセリン水溶液が 微粒化を伴いながら侵入してくる挙動は Case2、Case3 ともに同様であるが、壁面上での拡がり 挙動に大きな差異がみられ、接触角が液膜挙動に大きく影響することが確認された。また、Case3 では底面衝突後の液膜からの微粒化が Case2 と比較して抑制される結果が得られた。また、 Case2, Case3 ともに壁面での液膜進展挙動が円形状にならないことが結果より確認できる。これ らについては、実験結果と比較を行うことや解析コードの修正により対応する予定である。今後 は解像度の影響評価を進めるとともに、射出させる液体ジェットや周囲流体の物性値をパラメー

タとした解析を実施し、実験結果との詳細な比較を実施する予定である。以上、平成 30 年度は 解像度及び接触角の影響評価を実施した。



(a) Case2(b) Case3図 3 接触角の影響評価 (上図:側面視点、下図:底面視点)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

講演

- 1) 吉田啓之、Current Status of Application of CFD Simulation for Improving Light Water Reactor Safety in JAEA (NTHAS11 Keynote Lecture).
- 2) 吉田啓之、「大規模計算による気体と流体が混ざった流れの予測」、日本原子力研究開発機構 新技術説明会.

講演発表及び口頭発表

- 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(5)詳細解析における接触角及び空間解像度の影響、日本原子力学会 2018 年秋の 大会、岡山、2018.
- 4) T. Suzuki, H. Yoshida, Y. Abe, "Development of Numerical Simulation for Jet Breakup Behavior in Complicated Structure of BWR Lower Plenum (9) Evaluation of Effects of Fluids Properties on Jet Shape and Diameter of Fragments" (ICONE-26), 2018.
- 5) T. Suzuki, H. Yoshida, F. Kimura, Y. Abe, "Numerical Simulation of Liquid Jet Behavior in Shallow Pool by Interface Tracking Method" (ICONE-27), 2019.

(4) 今後の利用予定:

これまで、界面追跡法に基づく二相流解析手法開発のため、様々な条件での解析を大型計算機 上で実施してきた。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を遂行するため、大型計算機を利用する予定である。

5.4.21 スプラッシュ現象に対する JUPITER の適用性評価と課題抽出

A Numerical Study of Applicability and Problems of JUPITER for a Splash Phenomenon

吉田 啓之、山下 晋、大川 富雄

熱流動技術開発グループ

(1) 利用目的:

自由界面挙動を含む流体の詳細な挙動の多相多成分流詳細解析コード JUPITER の妥当性検 証を、未だ実施されていない自由界面への流体の衝突によるスプラッシュ現象のような、激しい 運動量変化を伴う現象を対象として実施した。本研究では、電気通信大学及び原子力機構で培っ た技術・経験を組み合わせることで、激しい運動量変化を伴うスプラッシュ現象に対する界面表 現手法の適用性を検討する。さらに、解析結果により得られる詳細な情報を整理することで、ス プラッシュ現象に対する物理的なメカニズムの把握や、JUPITERの課題を抽出する。

(2) 利用内容·結果:

本研究では、試験流体が水の場合において、実験から得られた Deposition (二次液滴が発生 しない)、Crown Splash only、Crown Splash & Collapse Splash の3つの様相の再現を行った。 表1に解析条件を示す。ここで、各条件は、実験で求めた相関式より、3つの様相それぞれにな る衝突 Weber 数: *We*、Ohnesorge 数: *Oh、h**を求め、これに等しくなるように設定した。

ケース名	Deposition	Crown only	Crown & Collapse
試験流体	水	水	水
解析時間[s]	0.015	0.015	0.015
解析領域[mm]	15×15×7.5	15×15×5.0	15×15×5.0
境界条件(底面)	ノンスリップ壁	ノンスリップ壁	ノンスリップ壁
境界条件(その他)	流出	流出	流出
メッシュ数	600×600×300	600×600×200	600×600×200
メッシュ幅[µm]	25	25	25
液滴液膜距離[mm]	2.5	2.5	2.5
液膜厚さ[mm]	0.6	0.45	0.45
液滴直径[mm]	2.6	1.5	1.5
液滴初速[m/s]	1.79	3.8	4.4
h^*	0.23	0.3	0.3
We	146	300	400
Oh	0.00217	0.00272	0.00272

表1 数值解析条件

図1に "Deposition"の数値解析結果を示す。図1より、衝突後、Crown が生成、成長し、崩壊していく過程を確認することができた。



図1 Deposition の解析結果

図2に "Crown only"の数値解析結果を示す。図2より、数値解析においても、Crown Splash の発生を確認することができた。しかし、実験では見られなかった Crown の壁に穴が空く現象 が見られた。これは、メッシュ数が Crown の壁厚に対して足りてないためだと考えられる。



図 2 Crown only の解析結果

図3に "Crown & Collapse"の数値解析結果を示す。図3より、Collapse Splashの発生も確認することができた。しかし、Collapse Splashの発生の様子は実験とは少し異なる。これは、図2でも見られた Crown の壁に穴が空いてしまう現象によるものだと考えられる。



図 3 Crown & Collapse の解析結果

3パターンの解析結果から、実験で得られた液滴・液膜衝突現象を概ね再現できることを確認 するとともに、以下に示す課題が明らかとなった。 一次液滴の変形

現在の条件では、Crown Splash のような非常に小さい液滴を再現するためにメッシュを細か くする必要がある。そこで、解析領域を狭めるために、実験のような自由落下の体系ではなく、 一次液滴に初速を与えている。しかし、この体系だと図4に示すように一次液滴が液膜に衝突す る前に変形してしまう。一次液滴に変形が起こってしまうと、We と Oh の値が変化してしまう ため実験との厳密な比較ができない。



図4 一次液滴の変形

● Crown 壁の穴

数値解析結果では、図5に示すようにCrownの壁に穴が空いてしまっている。この現象は実 験では見られない現象である。この現象は、Collapse Splashの発生の様子に違いを生んでいる と考えられる。よって、Collapse Splashをさらに精度良く再現するためにはこの現象の解決は 必要不可欠であると考えられる。



図 5 Crown 壁の穴

- (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
 - 1) 川合克幸、山下晋、大川富雄、吉田啓之、"液滴・液膜衝突現象の実験観察と数値、解析"、 日本原子力学会 2019 年秋の大会、富山、2019.

(4) 今後の利用予定:

今後は平成 30 年度抽出した課題を解決するために自由界面解析手法並びに解析条件の再検討・改良を実施する。また、Crown の壁に生じる穴について格子解像度の影響を調べるために 更なる大規模解析を実施する必要があるため、引き続き ICE X を利用する。

5.4.22 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:

強さ(強度)と伸び(延性)・破壊に対する粘り強さ(靱性)は構造材料において最も重要な 性質である。ほぼ全ての材料で強度と延性・靱性はトレードオフの関係にあり両立しないが、そ れぞれ特性の機能向上は構造材料における普遍的な課題として多くの努力が重ねられてきた。構 造材料の機能向上には、大きく分けて加工による(I)組織制御と(II)合金化による機能向上が広く 行われてきたが、それぞれ以下のような問題が知られている。(I)変形試験によって変形の力学応 答は連続的に得られる一方、材料内部の欠陥が動的に変化する様子を実験で観察することは困難 である。(II)合金化によって力学特性を非経験的に評価する方法はほとんど知られていないため、 体系的に特性を予測する方法が求められている。

そこで、本研究ではそれぞれの素過程となる欠陥挙動に着目するとともに、スーパーコンピュ ータを活用し、(I)の問題に関して、欠陥挙動を直接解析するための大規模原子シミュレーション 手法を開発する。これにより、これまで個々の欠陥構造の特性のみにとどまっていた原子シミュ レーションを、多結晶の変形などの多様な欠陥 が関連した複雑な欠陥挙動へ応用することが可 能になり、実際の材料の力学応答の関係を明確に理解することが可能になる。また、(II)電子状 態に基づく第一原理計算から材料の力学特性を評価する方法を構築することを目的として研究 を行う。これにより、これまで経験的に行われてきた合金設計に対して、計算科学を利用した戦 略的に設計が可能となり、資源の限られた我が国において希少元素に頼らない代替元素による合 金開発の進展に大きく貢献するものである。

(2) 利用内容·結果:

(I) 大規模原子シミュレーションによる欠陥挙動の解析

中期計画で対象としている熱時効問題では、対象とする材料がステンレス鋼と複雑な組成を持 っため直接解析することは困難であるが、低積層欠陥エネルギーのポテンシャルを用いてツイン の集積による割れへの影響を実験と協力して検討を行っている。また、実験との共同で六方晶金 属の押込み挙動の解析に着手した。

- (II) 合金元素による変形への影響の非経験的評価
- ① 加速器駆動システム (ADS)研究では、窓材の候補として考えられている T91 合金 (Fe-Cr 合金)の粒界での He 脆化挙動を対象として、まず BCC-Fe の界面における He 脆化の準備 計算を行った。純 Fe における<110>傾角粒界として Σ1~99 までの粒界構造を作成し安定性 を評価し、He の偏析サイトの解析を進めている。ただし、窓材の要件として T91 が適さな いとの指摘もあり、候補材の選定の段階にあるため現状の研究動向を注視しつつ、研究を進 める必要がある。

② Mg 合金では、粒界や双晶境界な どの結晶の界面から割れが発生 することがわかっており、界面の 特性にもたらす合金元素の影響 が割れの特性を決めていると考 えられる。このような問題に対し て破壊力学を基本とした理論体 系が古くから知られている。本研 究では、理論に計算科学の結果を 組み合わせて特性を評価する枠 組みを構築するとともに、実験に よる2元系合金の破壊靭性試験と 連携して、合金元素の界面への偏 析やどのようなメカニズムで破 壊に寄与するかを検討した。ここ で、界面構造に起因した特定の評



図1 計算に基づく元素毎の破壊に対する影響の指標



図2 計算による指標と実験の割れにくさとの関係

価にならないために、実験で観察される様々な界面の原子構造を用いて体系的に評価した。 その結果、図1に示すように、Li、Ca、Sn、Pbが負の値を示し、割れを促進する元素であ ることが予測された。それら以外の元素は正の値を示し、特にZrは割れにくくする影響が 強いことがわかる。電子状態の詳細な解析から、このような特徴はMgのp電子と合金元素 のd電子の結合によって生じることを見出し、IIIBやIVB族元素が破壊抵抗を向上する効 果を有することを明らかにした。図2から実験結果と計算には良好な相関が見られ、計算に よって予測されたZrが顕著に靭性を向上させることが確認された。これまでの成果と合わ せて計算科学によって強度、延性、靭性を直接評価することが可能になった。

(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) <u>T. Tsuru</u> and T. Suzudo, "First-principles calculations of interaction between solutes and dislocation in tungsten", Nucl. Mater. Ener., 16, pp.221-225 (2018).
- <u>T. Tsuru</u>, M. Yamaguchi, K. Ebihara, M. Itakura, Y. Shiihara, K. Matsuda, H. Toda, "First-principles study of hydrogen segregation at the MgZn² precipitate in Al-Mg-Zn alloys", Comput. Mater. Sci., Vol.148, pp.301-306 (2018).
- <u>T. Tsuru</u>, H. Somekawa and D. C. Chrzan, "Interfacial segregation and fracture in Mg-based binary alloys: Experimental and first-principles perspective", Acta Mater., Vol.151, pp.78-86 (2018).
- T. Suzudo, <u>T. Tsuru</u> and A. Hasegawa, "First-principles study of solvent-solute mixed dumbbells in bodycentered-cubic tungsten crystals", J. Nucl. Mater., Vol.505, pp.15-21 (2018).

- 5) M. Yamaguchi, K. Ebihara, M. Itakura, <u>T. Tsuru</u>, K. Matsuda, T. Toda, "First-principles calculation of multiple hydrogen segregation along aluminum grain boundaries", Comput. Mater. Sci., Vol.156, pp.368-375 (2019).
- 6) A. Bendo, K. Matsuda, S. Lee, K. Nishimura, H. Toda, K. Shimizu, <u>T. Tsuru</u>, M. Yamaguchi, "Microstructure evolution in a hydrogen charged and aged Al-Zn-Mg alloy", Materialia, Vol.3, pp.50-56 (2018).
- 7) A. Bendo, K. Matsuda, S. Lee, (<u>T. Tsuru</u>, 7th), et al., "Atomic scale HAADF-STEM study of g0 and g1 phases in peak-aged Al–Zn–Mg alloys", J. Mater. Sci., Vol.53, No.6, pp.4598-4611 (2018).
- 8) 戸田裕之、山口正剛、松田健二、清水一行、平山恭介、蘇航、藤原比呂、海老原健一、板倉 充洋、<u>都留智仁</u>、他、水素分配制御によるアルミニウム合金の力学特性最適化、鉄と鋼、 Vol.105, No.2, pp.118-131 (2019).

プレス発表(投稿論文3)に関して)

- 9) 軽量マグネシウム合金候補 シミュレーションで解明、日刊工業新聞 電子版、2018年5月9日.
- 10) 合金素材 机上計算で強度予測 開発の効率化に期待、電気新聞、2018年5月14日.

基調・招待講演(5件)

- 11) <u>T. Tsuru</u>, "Effect of solutes on dislocation core structure and motion", 7th ESISM International Workshop, Jan. 7-9, 2019, Kyoto, Japan. (Invited)
- 12) <u>T. Tsuru</u>, T. Suzudo, M. Itakura, et al., "DFT-based predictions of the effect of solutes on dislocation motion in bcc and hcp alloys", International Symposium on Atomistic Processes of Crystal Plasticity, Oct. 25-27, 2018, Tokyo, Japan.(Invited).
- 13) <u>T. Tsuru</u>, T. Suzudo, M. Wakeda, et al., "First-principles study on effect of Re, Os and 5d solutes on dislocation motion in W alloys", The 10th Korea-Japan Berkeley Symposium, Jun. 20-22, 2018, Pohang, Korea (Invited).
- 14) <u>T. Tsuru</u>, T. Suzudo, et al., "Effect of transmutation products on materials properties in tungsten alloys", The 11th International Workshop on Materials Behavior at the Microand Nano- Scale, Jun. 8-10, 2018, Xi'an, China (Invited).
- 15) 都留智仁、他、「六方晶合金の特異なすべり特性と合金元素の影響に関する研究」、金属学会 2019 年春期(第164回)講演大会、2019 年3月20-22日、東京電機大学東京千住キャン パス(基調講演).

国際・国内会議(4件)

16) <u>T. Tsuru</u>, M. Itakura, M. Yamaguch, T. Suzudo, M. Wakeda, S. Ogata, D. C. Chrzan, "Effect of solutes on dislocation motion in dilute hcp and bcc alloys", The 9th international conference on Multiscale Materials Modeling, Oct. 25-Nov. 2, 2018, Osaka, Japan. 他 3 件.

(4) 今後の利用予定:

合金設計に関する研究として、マトリクス元素と合金元素の電子状態に基づき転位構造が支配 される要因を包括的に検討する。また、ADS研究として、フェライト鋼を対象とした脆化機構 について検討を進める。

5.4.23 第一原理計算による原子力材料への水素吸着・侵入機構の研究

Hydrogen Absorption and Penetration Mechanism into Nuclear Material using First Principle Calculation

五十嵐 誉廣

防食材料技術開発グループ

(1)利用目的:

腐食による材料劣化は原子力機器の健全性を損なうため、現象のメカニズムを理解し適切な対応を行うことが重要である。これまで、さまざまな実験解析により腐食メカニズムの解明や腐食予測手法の開発がなされてきている。特に近年の実験機器の性能向上によりナノスケールの観察が可能となり、腐食現象の基礎メカニズムの理解が可能となってきた。しかしそのような高性能な実験装置を用いたとしても得られるデータは限定的であり、腐食現象の本質的なパラメータである水溶液中金属の電位や反応速度を詳細に得ることは非常に難しく、基礎メカニズムの理解には原子スケールの計算科学的手法が必要不可欠である。本テーマでは、腐食素反応の一つである金属表面水素の化学反応に着目し、水素吸着による表面電位変化を計算科学的に測定するための技術開発に資することを目的とする。

(2) 利用内容·結果:

鉄中に水素が吸着・侵入したときの表面電 位変化の原因を解明するため、第一原理計算 ソフトウェア「Quantum ESPRESSO」を用 いて表面電位解析を行った。特に表面吸着水 素の割合(表面被覆率)が表面電位変化に及 ぼす影響を明確にするため、解析系の拡大を 行った。これまでの解析で、水素吸着による 表面電位変化の傾向について表面方位ごとの 違いは見られなかったため、表面方位を

(110)に限定し3×3,5Layer 45 原子からな る鉄スラブ系に対して表面電位解析を行っ た。解析の結果、図1に示すように裸の鉄表 面への水素原子の吸着については、吸着率 50%程度までは表面電位の上昇がみられ、そ れ以降は電位が低下した。しかしその絶対値 は最大で0.15V程度であり、実験測定で見ら れる電位低下の原因とは考えづらい。酸化被 膜を模擬した酸素原子吸着面に対する水素原 子の吸着については、吸着率10%程度から1V



図1 水素の表面吸着率と電極電位の関係

程度の電位低下が見られた。また、図 2 に示すように吸着率 30%を超えると表面がエネルギー 的に不安定となり、水分子として離脱することが分かった。本解析で得られた電位低下の値は実 験測定で得られる値と比べると絶対値が大きいが、本解析は欠陥のない非常にきれいな酸化被膜 を仮定しており基準となる電位が大きめに出ることが予想されることから、本解析によって得ら れた電位低下の値は妥当であると考えられる。本研究成果は、原子力機構・システム計算科学セ ンターの大型計算機 ICE X を用いて行われた。



図2 水素吸着率と原子配置の関係

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) T. Igarashi, A. Komatsu, M. Yamaguchi, K. Ebihara and F. Ueno, "Computational Analysis on Relation between Iron Surface Condition and Surface Potential Change", 19th Asian Pacific Corrosion Control Conference, Nov. 2018, Thailand (国際会議・概要に 査読あり).
- 2) 五十嵐誉廣、大谷恭平、上野文義、"金属への水素透過機構に関する計算科学アプローチ"、 日本鉄鋼協会「鉄鋼材料への腐食誘起水素侵入」研究会シンポジウム、日本鉄鋼協会第177 回春季講演大会、東京、2019.

(4) 今後の利用予定:

2018年度に得た知見をもとに、2019年度は表面吸着種(金属カチオン種)の存在と水素透過 との関係についての研究を進める。本研究テーマは水溶液中における水素透過現象であることか ら溶液近似第一原理計算手法を採用し、溶液の存在による静電効果を考慮したときの水素透過現 象について機構解明を試みる。本計算については、2018年度同様に大型計算機を用いて行う予 定である。

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

5.5.1 低次元強相関系の基底状態および励起ダイナミクスの研究

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

> 大西 弘明、杉本 貴則、森 道康 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、低次元強相関系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、スピンが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。

低次元強相関系では、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。本研究で適用する行列 積状態変分法・密度行列繰り込み群法は、低次元強相関系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いて、スピン四極子(スピンネマティック)、八極子、十六極子と一連の多極子状態が実現することが理論的に示され、注目されている。そこでの特異な磁気励起を解明するために、磁気励起スペクトル(二体スピン相関)と四極子励起スペクトル(四体スピン相関)を平成29年度まで解析してきた。平成30年度はより高次の多極子に枠を広げて、



図 1 フラストレート強磁性鎖の八極子励起スペクトル (a) J₁/J₂=-3, h=0.188 [八極子相], (b) J₁/J₂=-3, h=0.186 [八極子相], (c) J₁/J₂=-2, h=0.665 [四極子相] 八極子励起スペクトル(六体スピン相関)の解析コードを 整備して新たに計算に着手した。八極子相では磁場に依ら ず波数πの位置がギャップレスになる(図 1(a),(b))のに 対して、四極子相では束縛エネルギーに相当するエネルギ ーギャップが生じる(図 1(c))。相互作用パラメータ・磁 場依存性の系統的な解析、高分解能を得るための大きいサ イズでの解析を継続して遂行中である。

(b) スピンネマティック状態のスピン伝導・熱伝導のメカ ニズムを視覚的に捉えるアプローチとして、マグノン対の 波束の伝播ダイナミクスを解析した。この際、密度行列繰 り込み群で通常用いる自由境界条件では端の効果で磁化 構造が誘起されて一様な基底状態が得られないため、周期 境界条件を適用できるように工夫した。

図2は、時刻ゼロで生成したマグノン対の波束が時間と ともに伝播していく様子を表している。マグノン対波束の 伝播速度は、四極子励起スペクトルの分散関係で決まる群 速度で与えられる。飽和磁場近傍では、ギャップレスモー ドの底広フッラット構造を反映して、マグノン対波束は局 在構造を保って初期位置にとどまる(図2(a))が、磁場が 小さくなるにつれて、ギャップレスモードは底狭の線型構 造へと変化するため、伝播速度は次第に速くなる(図2(b))。 また、全マグノン対密度は一定の値に収束していくことを 見出した。これは、マグノン対がコヒーレンスを保って伝 播してスピン伝導・熱伝導に寄与することを示唆する。

(c) スピンネマティック状態でのスピン伝導の輸送特性を 明らかにするために、スピン伝導度のゼロ周波数成分であ るスピンドルーデ重みの温度・磁場依存性を数値的に調べ た(論文2)。図3に示すように、磁場を印加すると、スピ ンドルーデ重みは一旦増加してピークを生じた後減少す



図2 フラストレート強磁性鎖で
 のマグノン対密度の時間
 発展. 横軸は位置, 縦軸は
 時刻, m は磁化, J₁/J₂=-1



3.3 シノスドレード風磁圧頭の スピンドルーデ重み D_sの 磁場 h 依存性, T は温度, J₁/J₂=-1

ること、そのピーク構造は特に低温で顕著に現れることを見出した。この低温での振る舞いは、 絶対零度でスピンネマティック状態が発現する前駆現象として理解でき、スピンネマティック状 態で形成されるマグノン対がスピン輸送に寄与することを示唆している。

(d) 新規量子スピン系物質 K₂Cu₃O(SO₄)₃に代表される、スピン・クラスタが量子的相互作用に より結合した物質の低温磁気状態を明らかにするため、実験と理論の共同研究を行った。その結 果、このような物質で、トポロジカルに保護された量子計算素子への応用が期待される、(クラ スタ単位) ハルデン状態が実現していることが確かめられた。さらに、この共同研究で得られた アプローチを拡張することで、より自由度の高い系で、クラスタ単位ハルデン状態を構成できる ことを理論的に明らかにした。この拡張により、通常はゼロ磁化で発現するハルデン状態を有限 磁化で発現することができるようになり、また他の自由度との結合を考えることにより、新たな スピンの分数化機構を見出すことができる。ハルデン状態の発現領域やその量子自由度を変更することは、新規量子素子への応用可能性が増すだけでなく、スピン伝導度や熱伝導度などの輸送特性にも新しい方向性を与えると期待できる。このような可能性を模索するため、現在、実験研究者と共同して、K₂Cu₃O(SO₄)₃以外の物質探索に取り組んでいる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学術論文

- 1) H. Onishi, "Magnetic excitations and transport properties in frustrated ferromagnetic chain", J. Magn. Magn. Mater. 479, pp.88-90 (2019).
- 2) T. Tohyama, M. Mori, and S. Sota, "Dynamical density matrix renormalization group study of spin and charge excitations in the four-leg t-t'-J ladder", Phys. Rev. B 97, pp.235137_1 235137_7 (2018).
- 3) T. Sugimoto, M. Mori, T. Tohyama, and S. Maekawa, "Magnetic phase diagram of frustrated spin ladder", Phys. Rev. B 97, pp.144424_1 144424_10 (2018).
- 4) H. Onishi, "Dynamical quadrupole structure factor of frustrated ferromagnetic chain", Physica B 536, pp.346 349 (2018).

国際会議

- 5) M. Mori, "Thermal Hall effect by phonons in a rare-earth garnet and a spin liquid system", New excitations in Spintronics 2019, Connemara, Ireland, 2019.
- 6) H. Onishi, "Magnon-pair excitation and transport in spin nematics", New excitations in Spintronics 2019, Connemara, Ireland, 2019.
- 7) H. Onishi, "Magnetic excitations of spin nematic state in frustrated quantum spin system", Universal Physics in Many-Body Quantum Systems, Tokai, Japan, 2018.
- 8) M. Mori, "Phonon Hall effect by extended cluster multipoles", Universal Physics in Many-Body Quantum Systems, Tokai, Japan, 2018.
- 9) M. Mori, "Temperature dependence of spin stiffness in ferri-magnet", Joint European Magnetic Symposia, Mainz, Germany, 2018.
- 10) H. Onishi, "Magnetic excitations and transport properties in frustrated ferromagnetic chain", Joint European Magnetic Symposia, Mainz, Germany, 2018.

(4) 今後の利用予定:

フラストレート強磁性鎖の磁気特性と輸送特性に関して、八極子相など高次の多極子まで含め た包括的な理解を目指して、八極子励起スペクトルと波束ダイナミクスの系統的な解析を進める とともに、有限温度密度行列繰り込み群法をスペクトル計算に拡張するための技術開発を行い、 有限温度でのスピン伝導と熱伝導度を解析する。また、準周期系における構造誘起臨界性の発現 機構やその結果として現れる物性異常に関する解析を行う予定である。

5.6 物質科学研究センター

Materials Sciences Research Center

5.6.1 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対して有用性が高い。

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長距離相互作用である RKKY 相互作 用や双極子相互作用を取り入れて行うためのプログラムを作成した。RKKY 相互作用する系に おいては、非磁性体原子によるランダム希釈系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、磁区パターンに対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2次元及び3次元系について調べている。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対するランダウ=リフ シッツ方程式を数値的に解くプログラムを高速 化することで、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ので、磁気スキルミオンな どのトポロジカルな磁気バブルについて調べて いる。交換相互作用、双極子相互作用、磁気異方 性、外部磁場、温度などの値によって、トポロジ カル数が1のスキルミオン、反スキルミオンのほ か、トポロジカル数が、2や3のスピン構造が出 現する。その他、スキルミオン2つからなるスキ ルミオン分子や反スキルミオン2つからなる反ス



図 1 スキルミオン、反スキルミオン、ト ポロジカル数 2 のスピン構造、スキ ルミオン分子を含む例。色凡例は面 直方向の磁化の成分の値を表す。

キルミオン分子なども現れる。図1に2次元薄膜系における、スキルミオン、反スキルミオン、 トポロジカル数2のスピン構造、スキルミオン分子を含む例を示す。色凡例は面直方向の磁化成 分の値を表す。これらのスピン構造の各点での磁化の向きを表したのが、図2である。色は図1 と同様の面直方向の磁化の成分の値を表し、各点での矢印は、面内方向の磁化の向きを表している。


図 2 上段左から、(a)スキルミオン、(b)反スキルミオン、下段左から、(c)トポロジカル数 2 の スピン構造、(d)スキルミオン分子。色は図 1 と同様で、面直方向の磁化の成分の値を表 し、各点での矢印は、面内方向の磁化の向きを表している。

(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次元強磁性体の基底状態II」、日本物理学会2018年秋 季大会.
- 2) 横田光史、「双極子相互作用を含む 2 次元強磁性体における様々なトポロジカル数を持つ磁 気バブル」、日本物理学会第 74 回年次大会.
- 3) T. Yokota, "Numerical Investigation of Magnetic Bubble Types in a Two-Dimensional Ferromagnetic System with Dipole-Dipole Interactions", Journal of the Physical Society of Japan, Vol.88, pp.084702_1 084702_6, 2019.

(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、RKKY 相互作用をするランダム希釈系、交換相互 作用などにランダムネスを含む場合、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。

5.7 環境技術開発センター Waste Management and Decommissioning Technology Development Center

5.7.1 JMTR の廃止措置計画に係る中性子束評価の精度の検証

Verifying Accuracy of Neutron Flux Evaluation on JMTR Decommissioning Plan

> 井手 広史 廃止措置準備室

(1) 利用目的:

JMTRの廃止措置において、原子炉内の機器・構造物等が放射化された放射化汚染物を評価するため、原子炉内外の中性子束分布を明らかにする必要がある。これまで、JMTRの燃料は、高 濃縮(93%)から、中濃縮(45%)、低濃縮(20%)と順次低減化された。このため、各濃縮度 の燃料で中性子束を比較し、最大となった高濃縮度の燃料を用いて評価することとした。

廃止措置期間中は汚染状況調査の中で放射化物をサンプリングし計算の妥当性を確認する予定であるが、今回は評価した中性子束が妥当であることを確認するため、照射キャプセルに装荷していたフルエンスモニタにより中性子束の評価精度が確認された計算モデルと中性子束の比較を行った。中性子束の評価には、モンテカルロコード MCNP を用いた。

なお、本評価にあたっては、照射キャプセルを模擬した複雑な体系で、かつ計算結果の相対誤 差の低減に多大な時間を要するため大型計算機による評価が必要であった。

(2)利用内容·結果:

JMTR における照射キャプセルの中性子束の評価精度は、高速中性子束(1MeV<E)においては±約10%、熱中性子束(E <0.683eV)においては±約30%である¹⁾。今回は、図1に示す 廃止措置計画認可申請に必要な放射化評価に用いる計算モデル(以下「廃止措置計算モデル」という。)の中性子束と図2に示すJMTR 第163サイクルの計算モデルの中性子束とを比較した。 比較対象とした照射孔はベリリウム反射体領域のI-11、I-12、アルミニウム反射体領域のI-13、 I-14、I-15とした。なお、第163サイクルの照射キャプセル(照射孔:E-8)に装荷していたフ ルエンスモニタの MCNPによる中性子束評価とフルエンスモニタの実測による中性子束評価を 比較(C/E)した結果、高速中性子束は1.02、熱中性子束は1.20であった。評価した計算コー ドのバージョンについては、第163サイクルはMCNP4B、廃止措置計算モデルはMCNP5であ る。

表1及び図3に各照射孔における高速中性子束の比較結果、表2及び図4に各照射孔における熱中性子束の比較結果をそれぞれ示す。廃止措置計算モデルにおける中性子束と第163サイク

ルの中性子束の評価結果を比較した結果、廃止措置計算モデルにおける中性子束が高い傾向となった。これは、廃止措置計算モデルにおいては原子炉構造材等の放射能量の推定が過小とならないように、中性子束が高くなるように燃料を選択したこと、また照射キャプセル等を考慮しない計算モデルとしていることが原因と考えられる。

このことから、今回の中性子東評価は過去のフルエンスモニタの実測値との間接比較である が、廃止措置計算モデルにおいて評価した中性子東は放射能量の推定に利用でき、また安全側に 評価されていることが分かった。

1) N. Takemoto, T. Imaizumi, N. Kimura and K. Tsuchiya, "Survey on effect of crystal texture of beryllium on total cross-section to improve neutronic evaluation in JMTR", International Conference on the Physics of Reactors; The Role of Reactor Physics toward a Sustainable Future (PHYSOR 2014), Kyoto, Japan, 2014, 11p., CD-ROM.

(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:

廃止措置期間中に実施する汚染調査において、原子炉本体等よりサンプルを取り出し放射能量 を測定し、計算結果との比較をすることで評価精度を上げること予定している。また、炉心から 離れた部材の評価については、計算の相対誤差を低減することに多くの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る。今後とも引き続き利用を予定している。

領域	照射孔	廃止措置計算モデル	第 163 サイクル計算モデル	比
		$(/m^{2}/s)$	$(/m^2/s)$	
ベリリウム	I-11	4.98×10^{17}	4.36×10^{17}	1.14
反射体領域	I-12	1.12×10^{17}	9.89×10^{16}	1.13
マルミーウノ	I-13	$3.95 imes 10^{16}$	3.51×10^{16}	1.12
反射体領域	I-14	1.86×10 ¹⁶ 1.54×10 ¹⁶		1.21
	I-15	$8.70 imes 10^{15}$	7.03×10^{15}	1.24

表1 各照射孔における高速中性子束(1MeV<E)の比較結果

表2 各照射孔における熱中性子束(E < 0.683eV)の比較結果

領域	照射孔	廃止措置計算モデル	第 163 サイクル計算モデル	比
		$(/m^{2}/s)$	$(/m^2/s)$	
ベリリウム	I-11	4.20×10^{18}	2.92×10^{18}	1.44
反射体領域	I-12	2.68×10^{18}	$1.96{ imes}10^{18}$	1.37
アルミーウム	I-13	8.77×10^{17}	$5.49 imes 10^{17}$	1.60
反射体領域	I-14	4.63×10^{17}	2.69×10^{17}	1.72
	I-15	2.34×10^{17}	1.43×10^{17}	1.64



図1 廃止措置計算モデル

図2 JMTR 第163 サイクル計算モデル



図3 各照射孔の高速中性子束の比較結果

図4 各照射孔の熱中性子束の比較結果

5.8 高温ガス炉研究開発センター HTGR Research and Development Center

5.8.1 高温ガス炉を利用した^{99m}Tc 製造に関する予備検討

Feasibility Study of ^{99m}Tc Production at the High-temperature Gas-cooled Reactor

Hai Quan Ho、石塚 悦男 HTTR 技術課

(1)利用目的:

The high temperature engineering test reactor (HTTR) has been constructed to establish and upgrade the basic technologies for the HTGRs. Many irradiation regions are also reserved in the HTTR to be served as a potential tool for an irradiation test reactor in order to promote innovative basic researches such as materials, fusion reactor technology, and radiation chemistry and so on. In this study, a new method of 99m Tc production from the natural MoO₃ target was proposed at the HTTR via the (n, γ) reaction. This method is expected to provide a large-scale and stable supply of 99m Tc which are the important factors for future use of the 99m Tc in Japan.

(2)利用内容·結果:

(2.1) Design concept of ^{99m}Tc facility at the HTTR

At the operation mode of 30-MW_{th} power, the inlet and outlet temperatures of the HTTR are 395°C and 850°C, respectively. Therefore, the temperature at the irradiation region varies from around 450°C to 750°C. The high temperature at the irradiation hole makes the HTTR attractive for directly and continuously separating the ^{99m}Tc from $(n,\gamma)^{99}$ Mo using the sublimation method.

The conceptual design of 99m Tc production facility is shown in Fig. 1. A closed system containing MoO₃ powder is inserted in the irradiation hole of the HTTR. During irradiation, the 99m Tc will be formed in a compound of technetium oxide. The helium carrier gas is introduced into the closed system and passes through the MoO₃ target. The sublimation method is based on a lower boiling point of TcO₂ than that of MoO₃. The sublimated TcO₂ is swept out of the reactor to the condenser chamber through the connection pipes. The temperature of condenser chamber is cooled to decrease step-wise from 400 to 320°C, a temperature range at which the condense performance of Tc is the best. After that, the 99m Tc is eluted by a saline solution to make the final 99m Tc solution for medical uses.



Fig. 1. Design concept of ^{99m}Tc facility at the HTTR

It can be seen that with the high temperature at irradiation area of the HTTR, the TcO_2 can be separated directly inside the reactor. In the conventional sublimation method, the irradiated target has to be moved from the irradiation area to external electric heating for a further extraction process. After that, the target is recovered and sent back to the irradiation area for the next cycle. It requires a more complicated facility not only for handling the target but also for radiation protection.

(2.2) Calculation method and results

The reactor core and irradiation facility were modeled using a Monte-Carlo MVP code. Neutronic calculation was performed with a JENDL4.0 nuclear data library to estimate the capture reaction rate of ⁹⁸Mo. Then, the reaction rate of ⁹⁸Mo was used to calculate the production of ⁹⁹Mo and ^{99m}Tc.

In the first step, the position of irradiation MoO₃ target was optimized to obtain as high activity of 99m Tc as possible. As a result, the 4th block is the optimal position of MoO₃ target where the final 99m Tc production could be maximized. Next, the procedure to separate the 99m Tc from irradiated MoO₃ target was also optimized. With 1kg of MoO₃ target, the HTTR could produce 6.8×10^8 MBq/year, about two times larger than 3.0×10^8 MBq of total 99m Tc

demand in Japan in 2017.

In conclusions, this study proposed a design concept of 99m Tc production facility at the HTTR to meet the domestic demand. The foremost advantage of this concept is that 99m Tc is produced and separated continuously. It makes the design of post-processing facility and the other handing procedures become simpler. A drawback of this concept is the relatively short time required for the delivery of 99m Tc elution from the reactor to the hospital, however, this problem can be overcome with the rapid transportation system in Japan.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Hai Quan Ho, H. Ishida, S. Hamamoto, T. Ishii, N. Fujimoto, N. Takaki, E. Ishitsuka, "Feasibility study of ^{99m}Tc production at HTTR using sublimation method", AESJ 2019 Annual Meeting, March 20-22, 2019, Mito (Japan).
- 2) Hai Quan Ho, H. Ishida, S. Hamamoto, T. Ishii, N. Fujimoto, N. Takaki, E. Ishitsuka. "Conceptual design of direct ^{99m}Tc production facility at the high temperature engineering test reactor", Nuclear Engineering and Design, Vol.352, 110174 (2019).

(4) 今後の利用予定:

In future, an additional reserve shutdown system for the HTTR will be considered. The criticality calculation using MCNP6 code will be carried out to estimate the amount of neutron absorber, which is needed to shut down the HTTR in BDBA.

5.8.2 高温ガス炉用3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 熱利用推進グループ

(1)利用目的:

第4世代原子カシステム(GenerationIV)の候補の一つである電力水素併産を目的とした超高温ガス炉(VHTR)の研究開発に資するため、本作業では高温ガス炉用3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)を用いて作成された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も試みる。

(2)利用内容·結果:

1. HTTR の詳細な寸法データから STAR-CCM+®のジオメトリ > パーツを作成

STAR-CCM+®の 3D-CAD モデラー機能を用いることで、HTTR の詳細な寸法データから、燃料棒1本の解析モデルを作成できた(図1)。



冷却材(ヘリウム)領域を透過すると(図2)、黒鉛スリーブ領域(図3)と燃料領域(図4) のパーツを見ることができる。黒鉛スリーブ領域と燃料領域の間は隙間が存在する。

次回、燃料棒 31 本または 33 本を含む燃料体 1 体、または、原子炉圧力容器(RPV)を境界 条件とした、炉心全体の詳細な解析モデルを作成する予定である。

2.1本の燃料棒周りの温度変化および冷却材の流れに対する挙動を評価

STAR-CCM+®のバージョン 12.04.011 を使用し、8 並列で解析した。HTTR の詳細な寸法デ ータから、燃料棒 1 本の解析モデルを作成した後、メッシュを作成した(図 5)。その際、冷却 材(ヘリウム)領域(図 6)、黒鉛スリーブ領域(図 7)、燃料領域(図 8) 各々に対して、最適 なメッシュを作成した。その後、4 つの熱ソースの設定値を用いて解析を行った。その結果、燃 料棒周りの温度変化および冷却材の流れに対する挙動を確認できた。なお、今後論文等へ投稿す るため、二重投稿を避けるためにも本報告書に解析結果を掲載できない。



図5 解析領域全体メッシュ図



図6 冷却材(ヘリウム)領域メッシュ図



図7 黒鉛スリーブ領域メッシュ図



図8 燃料領域メッシュ図

3. STAR-CCM+®と他の解析コードを結合し、コード間で両データをやり取りできる方法を確認 STAR-CCM+®と他の解析コードを結合し、コード間で両データのやり取りが可能なことがわ かった。具体的には、STAR-CCM+®の連成シミュレーション(co-simulation)機能(コードに よって適用可能、不可能がある)を利用、または Java の Runtime クラスの exec メソッドを利 用する。

方法 1) STAR-CCM+®の連成シミュレーション (co-simulation) 機能

- ・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。
- 方法 2) Java の Runtime クラスの exec メソッドを利用、Java 実行中に結合コマンドを実行 STAR-CCM+®で数ステップ計算
 - (1) レポート実行/ファイルエクスポート
 - (2) exec メソッドで内製コード実行/ファイルエクスポート
 - (3) STAR-CCM+® 必要物理量インポート
 - (4) 最初(1)へ戻る

(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3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。

5.9 高速炉サイクル研究開発センター Fast Reactor Cycle System Research and Development Center

5.9.1 高速炉蒸気発生器内ナトリウム-水反応現象数値解析コードの高度化

Advancement of a Computer Program for Sodium-water Reaction Phenomena in a Steam Generator of Fast Reactors

(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破損孔が生じると、高 圧の水又は水蒸気が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(図 1)。この反応ジェットが隣接する伝熱管に衝突すると、管壁の 損耗(ウェステージ)や高温化に伴う強度低下を引き起こし、隣接伝熱管が二次的な破損(破損 伝播)に至る可能性が生じる。SGの設計及び安全評価では、伝熱管破損伝播の発生する可能性 を評価することが必要である。本研究では、伝熱管破損時事象を評価する機構論的解析手法(シ ステム)を構築し、実証試験を代替することを最終的な目的としている。

本評価システムの構成要素として、Na-水反応及び圧縮性多成分多相流を対象とする多次元 解析コード SERAPHIM の開発整備を進めている。従来、本コードでは構造格子を用いていたが、 伝熱管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適用を これまで進めてきた。平成 30 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主に実施した。



図1 反応ジェット、隣接管の損傷、及び破損伝播

内堀 昭寛、渡部 晃、柳沢 秀樹 システム安全解析評価グループ

(2) 利用内容·結果:

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 中水蒸気試験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。図 2 に解析対象、解析体系及び解析メッシュを示す。試験では、円筒容器内に、 側板で両端を固定された 43 本の模擬伝熱管が設置されており、容器には最初に Na が充填され ている。最下段にある伝熱管の中央に設けられた模擬破損孔より、高圧の飽和水蒸気が上方へ噴 出する。当初、本解析では計算開始後 0.1~0.2 秒程度で計算不安定が発生し、計算が異常停止 することが判明していたが、平成 30 年度はその原因究明のため、タイムステップ、境界条件の 取り扱い、メッシュ形状、非構造格子特有の計算処理等を変更した複数ケースの解析を実施した。 その結果、メッシュ形状及び非構造格子特有の計算処理の調整が安定化に寄与することを明らか とした。図 3 に、計算安定化後、水蒸気噴出開始から 1.0 秒までの解析結果を示す。噴出した水 蒸気は体系内を上昇し、化学反応により高温領域が形成されている。この高温領域は、注水ノズ ル直上からやや左方向へ傾斜して発達しており、これは試験結果と良好に一致している。

平成 30 年度はさらに、安全審査用簡易解析手法の一つである LEAP-III コードの整備に資す るため、構造格子用 SERAPHIM コードによる管群体系での予備的解析を実施した。簡易解析手 法は、機構論的解析結果を反映した低計算コストのモデル群で構成され、実機での事象進展を対 象に多数ケースの解析を実施可能とするものである。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) A. Uchibori, H. Yanagisawa, T. Takata and H. Ohshima, "Development of Numerical Analysis Method for Tube Failure Propagation under Sodium-water Reaction Accident", NTHAS11, 2018.
- 2) J. Li, S. Jang, A. Yamaguchi, A. Uchibori, T. Takata and H. Ohshima, "The Development of Particle Methods for Simulating Sodium-Water Chemical Reaction", NTHAS11, 2018.
- 3) A. Uchibori, H. Yanagisawa, T. Takata, J. Li and S. Jang, "Advancement of Numerical Analysis Method for Tube Failure Propagation", ATH 2018, 2018.
- 4) A. Uchibori, H. Yanagisawa, T. Takata, A. Kurihara, H. Hamada and H. Ohshima, "Improvement of Steam Generator Tube Failure Propagation Analysis Code LEAP for Evaluation of Overheating Rupture", Journal of Nuclear Science and Technology, Vol.56, No.2, pp.201-209, 2019.
- 5) A. Uchibori, A. Watanabe, T. Takata and H. Ohshima, "Development of Unstructured Mesh-based Numerical Method for Sodium-water Reaction Phenomenon", Nuclear Technology, Vol. 205, No.1-2, pp.119-127, 2019.
- 6) A. Uchibori, H. Yanagisawa, T. Takata, J. Li and S. Jang, "Advancement of Elemental Analysis Model in LEAP-III Code for Tube Failure Propagation under Sodium-water Reaction Accident", ICONE-27, Tsukuba, May 19-24, 2019.
- A. Uchibori, A. Watanabe and T. Takata, "Application of Unstructured Mesh-based Sodium-water Reaction Analysis Code SERAPHIM", NURETH-18, Portland, August 18-23, 2019.

(4) 今後の利用予定:

今後、非構造格子用 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 での解析を実施し、妥当性確認実績の拡充を図る計画としている。また、LEAP-III コードの要 素モデル高度化に資するための解析も実施する予定である。



図2 解析対象、解析体系及び解析メッシュ



図3 解析結果

5.9.2 SPIRAL コードによる低流量条件下大型燃料集合体試験解析

Analysis of Large-scale Fuel Assembly Experiment under Low Flow Rate Condition by SPIRAL Code

吉川 龍志、菊地 紀宏、田中 正暁、吉廣 保⁺ プラントシステム解析評価グループ

+ システム計算科学センター 情報システム管理室

(1) 利用目的:

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。自然循環時は炉心通過流量が大幅に低下し、相対的に浮力の影響が大きくなるこ とから、燃料集合体内の流動場は定格運転時とは大きく異なる。また、自然循環時の炉心部では、 炉心全体で径方向温度分布が平坦化するとともに、燃料集合体内の水平断面温度分布も平坦化す る。そのため、自然循環条件を含む低流量条件時の燃料集合体内の熱流動を精度よく評価するこ とが重要となる。本研究では、燃料集合体熱流動詳細解析コードとして開発を進めている SPIRAL コードを用いて、ナトリウム冷却高速炉の燃料集合体体系における自然循環相当条件で の予測特性の確認、及び熱流動特性評価を実施するものである。また、大規模解析に向けて MPI 並列化されている SPIRAL コードの更なる高速化について検討を行う。

平成 30 年度は、SPIRAL コードの並列化効率向上作業を実施するとともに、仏国のナトリウ ム冷却高速炉実証炉(ASTRID)に係る研究協力の一環として仏 CEA から入手した「低流量条 件下における実機規模燃料集合体ナトリウム試験(GR91 試験)」の試験データを用い、自然循 環相当条件(低流量条件)での燃料集合体体系への SPIRAL コードの妥当性を確認することを 目的とした。

(2) 利用内容·結果:

プログラム高速化・並列化作業として、SPIRAL コードに対して並列化効率、実行性能、実行 効率、使用メモリ量等について性能調査を実施した。256~8192 並列のデータに対する Intel SDE 実行による性能測定結果(表1)は、SPIRAL コードの良好な並列化効率を示している。また、 コンパイラオプション、MPI 通信、OpenMP スレッド並列化、キャッシュヒットミス頻発箇所 改良等高速化手法を適用し性能改善について検討を行い、今後詳細な調査と改良が必要となる項 目をまとめた。

また、大規模解析として、ナトリウムを作動流体とした低流量条件下の燃料集合体試験である GR91 試験(仏国、Super Phenix 炉模擬試験)の再現解析を実施した。図1に解析条件を示す。 解析対象は、燃料集合体領域およびその外側のインターラッパー領域(集合体間のナトリウム槽 を模擬した六角アニュラス流路)、燃料ピン軸方向に対しては、発熱部長を包含できる長さとし てワイヤピッチ 11.5 巻きの範囲である。入口断面(図1の下方の境界断面、流れは下から上) での水力等価直径と断面平均流速に基づくレイノルズ数は1,110 であり、低流量条件での試験を 対象とした。SPIRAL での解析で使用した解析モデルの要素総数は約2,700 万要素であり、2,048 CPU による並列計算を利用して、タイムステップ 10⁻⁵秒で 280 秒までの準定常解析を実施した。 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。また、乱流モデルとして、流体の層流-乱 流遷移特性を良好に再現できる Hybrid 型 k-ɛ/ko-ɛo モデルを採用した。

図2にSPIRALにより得られた発熱上端付近の水平断面における流速と温度の分布を示す。 全体的な傾向として、燃料ピンに巻かれたワイヤスペーサにより発生する旋回流(スワールフロ ー・クロスフロー)の影響によって、流速・温度の分布は非対称となる。また、集合体中心付近 に位置する非発熱燃料ピンの周辺では、局所的に温度上昇が小さい。流速に関して、発熱上端付 近では、浮力の影響によってラッパー管付近よりも集合体中心領域が高流速となる結果が得られ た。六角アニュラス流路では、試験と同様に冷却材流入流量をゼロとしているため、有意な流れ は発生しない。また、温度に関して、試験で計測された温度と解析で予測された温度を比較した 結果、集合体平均冷却材上昇温度 *ΔT*=170.3 °C に対して、温度計測点 75 点の約 70%が *δT*=5 °C (*δTI ΔT*=0.03)以内の温度差、約 90%が *δT*=8 °C (*δTI ΔT*=0.05)以内の温度差に分布しており、解 析は試験の傾向を良好に再現していると判断される。以上によって、SPIRAL コードの低流量条 件下における集合体熱流動評価への適用性を確認した。

コア数	経過時間 (秒)	並列化効率 %	実行性能 (GFLOPS)	コアあたりの 実行性能 (GFLOPS)	コアあたりの 実行効率 %	使用 メモリ量 (GB)	コアあたりの 使用メモリ量 (GB)
256	4821.243	100.00	137.48	0.54	1.34	285.78	1.12
512	2074.273	116.22	325.49	0.64	1.59	299.26	0.58
1024	976.489	123.43	702.33	0.69	1.71	324.98	0.32
2048	472.534	127.54	1467.07	0.72	1.79	315.71	0.15
4096	218.719	137.77	3291.55	0.80	2.01	461.68	0.11
8192	135.122	111.50	5640.03	0.69	1.72	640.97	0.08

表1 SPIRAL コード実行性能の測定結果







図1 解析条件



(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) N. Kikuchi, Y. Imai, R. Yoshikawa, M. Tanaka, "Validation of Subchannel Analysis Code to Thermal-hydraulic Design of Fuel Assembly with Inner Duct Structure of an Advanced Sodium-cooled Fast Reactor", Proc. ICONE27, 2019. (Presentation Only).

(4) 今後の利用予定:

今後も大型計算機を継続して活用し、SPIRAL コードにより低流量条件下における内部ダクト を有する FAIDUS 型燃料集合体内の熱流動特性の詳細を明らかにしていく予定である。また、 種々の燃料集合体試験による妥当性確認解析を進めるとともに、実機評価への適用として、様々 な運転条件下における実機規模燃料集合体内の熱流動特性評価等の大規模解析を実施する予定 である。

5.9.3 連続エネルギーモンテカルロコード MVP を使用したナトリウム冷却高速炉 MOX 燃料炉心の反応率分布解析

Calculation of Reaction Rate of Sodium-cooled Fast Reactor MOX Fuel Core using the Continuous-energy Monte Carlo Code MVP

毛利 哲也、菰田 宏、曽我 彰 炉心解析評価グループ

(1)利用目的:

炉内の中性子反応率分布は基本的な炉心特性であり、燃料集合体内に箔を装荷する等により数 多くの測定が行われている。一方で燃料集合体の上部や下部には、炉心上部機構や炉心支持板と いった炉内構造物の中性子照射量を抑制するために複雑な形状の中性子しゃへい体が設置され ている。決定論的手法では複雑な形状を忠実に模擬することは困難であり、中性子しゃへい体を 透過した先に装荷された箔での中性子反応率は炉心中心部に比べて計算精度に課題があること が多い。

本研究では、中性子しゃへい体透過後の中性子反応率の計算精度向上を目的に、計算時間を要 するが複雑な形状を忠実に模擬することができる連続エネルギーモンテカルロ計算コードであ る MVP コードを用いて計算を実施した。

(2) 利用内容·結果:

燃料集合体下部に設けられている中性子しゃへい体を忠実に模擬した体系を構築し、MVP コードを使用して中性子しゃへい体を透過した先の地点の中性子束を計算した。図1に対象とした 燃料集合体図と MVP コードでの解析体系の一例を示す。この解析で得られた中性子束を基に中 性子反応率を算出して実験値と比較し、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、論文発表等を通じてこれらの結果を随時発信していく予定である。

(4) 今後の利用予定:

今後、反応率分布の評価を継続していく予定である。



燃料集合体(測定用の箔を含む試験用集合体)

図1 MVP での計算体系の例

5.10 敦賀総合研究開発センター Tsuruga Comprehensive Research and Development 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 ナトリウム技術開発グループ

(1) 利用目的:

The simulations aim to validate new multi-frequency eddy currents algorithms coupled with multi-coil ECT sensors to be used in the in-service inspection of steam generator tubes of FBR when sodium adheres to the external surface of tubes after draining of sodium.

(2) 利用内容·結果:

Before the in-service inspection (ISI) of steam generator (SG) tubes for FBR using eddy currents (ECT), hot sodium (above 200 degrees) located on the external tube surface is drained. After sodium draining and cooling to room temperature, layers of sodium still adheres to the SG tube surface, as indicated previously by experimental measurements. In the past it was shown in simple geometries that numerical 2D/3D FEM simulations based on electromagnetic codes developed in our laboratory agreed well with measurements, but based only on the prior knowledge of the sodium layer condition/thickness observed during tests. In more complex 3D geometries, shown in Fig 1, multiple SG tubes are supported by large support plates (SP) and require large scale 3D FEM simulations to simulate the ISI signal from ECT sensors as they scan from inside of SG tubes the tube external surface.



Fig.1 a) Large SP with SG tubes; b) FEM mesh around complex SG tubes structure near tube support plate inspected by c) multi-coil ECT probes



Fig.2 Windows multi-frequency (WMF) schematics and algorithm to suppress SP and sodium signal

Based on the 3D-RFECT electromagnetic code developed in our laboratory and validated through measurements with SG tubes covered by sodium, design of multi-coil ECT sensors (Fig.1c) are possible in which SG tube external surface can be mapped for defects.

Using ICE-X supercomputer and large scale parallel simulations (based on both MPI and OpenMP) with up to 5184 CPU cores the ECT signal at various frequencies of interest can be computed and optimized for multi-coil ECT sensors. In the simulation of the ISI using ECT, the multi-coil ECT sensors move inside and along SG tube. At each position of the sensor a simulation a FEM solution is obtained that is used to integrate the electromagnetic field around ECT detection sensors. Therefore for a 300mm scan length around tube, 600 FEM simulations of 0.5mm sensor movement step are required to simulate ISI signal. Multi-frequency algorithms that combine the ECT signal are validated through combination of signals at two frequencies in order to maximize the signal to noise (S/N) ratio of defect detection (see Fig. 2). Because, in real conditions, after sodium draining it cannot be known the sodium layer accumulation thickness around the SG and SP structure, 3D FEM simulations are used to compute both SP and sodium signal and validate multi-frequency algorithms for worst case scenario.



Fig.3 Windows multi-frequency ECT algorithm applied to experimental measurements to enhance detection of outer SG tube defects (groove OD20%tw): a) before sodium adhering to SP and SG tubes b) after sodium adhering to SP and SG tubes and draining of sodium

The window multi-frequency (WMF) ECT algorithms suppress efficiently both SP and sodium signal and maximize the defect S/N ratio, defect located on the external SG tube surface. Using the 3D FEM simulation solution at each step, further optimized ECT probes coupled with specific multi-frequency algorithms can be therefore validated in specific conditions of FBR SG tubes.

Fig. 3a) and Fig. 3b) shows the application of the (WMF) windows multi-frequency ECT algorithm to experimental measurement data from a multi-coil ECT system in two conditions; a) before SG tubes were soaked in sodium and b) after SG tubes were soaked in sodium and then the external area of SG tubes was drained of sodium. The WMF algorithm can therefore be optimized and validated through 3D FEM simulations, but only in the assumption that accurate predictions of ISI signal is computed in intricate 3D geometries requiring therefore large scale simulations for accurate results.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) <u>Ovidiu Mihalache</u>, 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. 59, No. 3, pp.1161-1168 (2019).
- 2) T. Yamaguchi, <u>Ovidiu Mihalache</u>, 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. 59, No. 3, pp. 1469-1477, 2019.

(4) 今後の利用予定:

While until now ISI of SG tubes of FBR was conducted only after sodium drain was drained from external SG tube surface, the next ISI technology will be required also to focus on the no sodium drain condition (when sodium is not drained from the external surface of SG tubes). Therefore, further 2D/3D FEM simulations will be also focus on advanced numerical electromagnetic simulations of new methods/sensors for ISI of FBR SG tubes without sodium drain and validations of method feasibility using large scale FEM simulations for accurate ECT sensor design/optimizations.

5.11 炉設計部 Reactor Systems Design Department

5.11.1 多重リサイクルによる商用高温ガス炉の環境負荷低減

Reduction of Environmental Burden for a Commercial-scale HTGR by Multi-recycling

深谷 裕司 高温ガス炉設計グループ

(1)利用目的:

廃棄物処分における環境負荷低減は原子力発電にとって重要な問題である。一方で、設定目標 により、技術課題の増加、発電原価の増加も懸念されるため、目標を段階的に設定し実現してい くことが重要となる。高速炉および加速器駆動核変換システム(ADS)によるマイナーアクチノ イド(MA)変換の研究が盛んであり、その目標は潜在的有害度の低減である。この指標は、廃 棄物の放射性物質をすべて体内に取り込んだ時の被ばく線量として定義される。福島第一原子力 発電所事故以降、日本学術会議の高レベル廃棄物に関する回答書を契機として、注目された経緯 がある。この指標は、社会的受容性(Public Acceptance : PA)上重要とされるが、実際の安全 性と直接関わりが無いとの指摘があり賛否がある。また、廃棄物の潜在的有害度が天然ウランレ ベルになるまでの期間を 300 年に短縮することが目標とされ、達成するためには、核燃料サイク ル全体の TRU のロスを 0.1%以下にする必要があり、この技術は原子炉の以外に線量・発熱量増 加による課題が発生する。OECD/NEA の高速炉・ADS のワーキンググループでは、軽水炉発電 と比較し多重リサイクルによる MA 変換を実施した場合、3 割程度のコストが増加すると報告さ れている。

これまで、高温ガス炉では、短期、中期シナリオの観点から、現行軽水炉再処理・処分に基づいた最適化、群分離技術を用いた最適化を検討し、採用すべき技術を検討してきた。そして、長期シナリオにおいては、とりうるべきオプションの一つとしては、高速炉・ADS と同様に MA 変換を目指すべきであると考え、検討を始めた。

そこで、本研究では、MA変換による環境負荷低減を行う高温ガス炉の検討を目的とする。

(2) 利用内容·結果:

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

解析は商用高温ガス炉として設計が行われた GTHTR300 を対象とする。詳細な燃焼組成が必要であり、そのために、MVP コードを用い ORIGEN ライブラリを作成した。多くの場合、単

純なセルモデルが用いられるが、Fig.1 に示 すような、特徴的な環状の炉心体系をもつた め、反射体領域の燃焼への影響は無視できな い。そのため、全炉心燃焼解析の結果から ORIGEN ライブラリを作成し、使用済燃料 組成評価に用いている。

本研究では、U232 から U238 を含む組成 を持つ回収ウランの濃縮組成の評価が必要 であり、Matched Abundance-ratio Cascade 理論に基づく、多成分濃縮手法を整備しフロ ントエンドの評価も行っている。

本研究で提案するサイクル概念を Fig.2 に 示す。右側の U 濃縮施設、燃料加工施設、高 温ガス炉、再処理施設の循環が環境負荷低減 のための多重リサイクルであり、FP と Np 及び劣化 U のみが、環境へ排出される。一般 的に、Np は MA に含まれるため、核変換の 対象とされるが、実際は、その 200 万年程度 の長い半減期から、潜在的有害度、公衆被ば









く、崩壊熱の観点からも環境負荷とならない。そのため、本概念では、あえて積極的に廃棄する ことにより、反応度損失を避け、燃焼度及びサイクル長の低下を避け、通常のウラン炉心と同等 の性能を保つ。なお、このサイクルでは、軽水炉からの MA の受け入れも可能である。

一般的に、高速中性子による反応が、MA 変換に有利と言われる。中性子経済に関しては、本 提案では、増殖ではなく、サイクル外部から U235 を供給するため、増殖に割く中性子は必要な く、MA 変換に使える。一方で、高速中性子では、閾値反応により、親物質である程度核分裂し、 これが MA 変換に重要だと言われる。しかし、Am、Cm にも Am242、Am242m、Cm243、Cm245 など核分裂性物質があり、これらまで高次化すれば効率は悪いながらも低減は可能である。さら に、熱中性子炉のほうが、MA 変換に有利な側面もある。MA 変換には平衡状態に、平衡量以上 の MA を添加することにより、余剰分が減少する効果により核変換を実施する。言い換えれば、 MA の平衡量が小さければ、MA 変換能力も高いといえる。上記のような、MA 変換の効率の悪 さにより、熱中性子炉では、炉心設計が成立しないほど MA が蓄積すると考えられがちである。 一方で、MA 発生源の大きさも要因として考えるべきである。Pu、Am、Cm は U238 から高次 化するが、MA 発生源の大きさという意味では、初めに転換される Pu239 の平衡量が指標とな るといえる。以下に、Pu239 のバランス方程式を示す。

$$\frac{dN_{Pu239}}{dt} = N_{U238}\sigma^{c}_{U238}\phi - N_{Pu239}\sigma^{a}_{Pu239}\phi, \qquad (1)$$

平衡状態では、

$$N_{\text{fissile}}(t_{\infty}) = \frac{N_{\text{fertile}}\sigma_{\text{fertile}}^{c}}{\sigma_{\text{fissile}}^{a}},$$
(2)

となり、平衡組成は、



のように、ミクロ断面積の比だけで表現できる。そこ で、ミクロ断面積のエネルギー依存性を利用して、 Pu239の平衡組成のエネルギー依存性を Fig.3 のよう に評価する。高速中性子束では Pu239の平衡量が 10% 程度であるのに対し、熱中性子炉では 1%程度である。 このように、一般的に言われるように、熱中性子炉で は MA が蓄積しやすい核特性がある一方で、その始ま りとなる Pu239 の平衡量が高速炉の 1/10 程度である ため、熱中性子炉でも十分に MA 変換が成立する設計 点が存在することがわかる。



Fig.3 Pu239 の平衡割合

なお、この関係は、多重リサイクル炉心設計の方針にも用いられている。最終的には U235 の 濃縮度を低濃縮ウランの範囲(<20wt%)で最大限に設定し、U235 のみで TRU 蓄積分の反応度 補償を行っている。これは、断面積の大きな Pu 主体の炉心では、スペクトルが硬くなり、TRU 平衡量が増えてしまうため、炉心設計が成立しなかったための対応である。このように、目標と していた環境負荷低減のための多重リサイクル設計が完成した。

提案サイクルでは、高速炉・ADS と同等の環境負荷低減、具体的には潜在的有害度が天然ウ ランレベルになる期間が 300 年へ短縮、高レベル廃棄物の処分場専有面積が、現行再処理・処分 と比較し、1/100 程度が達成できる。これらは、本研究にて、廃棄物発生量、地層中の温度評価 による処分場専有面積の評価により確認している。他に、熱中性子炉特有の固有の安全性が維持 でき、U235 主体の核分裂により大きな遅発中性子割合が保てることによる制御性・安全性の維 持が可能である。また、高温ガス炉は軽水炉と比較し2割程度安い発電原価であることが評価さ れている。現在、軽水炉の発電原価がカーボンオフセットされた火力発電よりも僅かに安い状況 である。上記のように MA リサイクルでは3割程度の経済性悪化が評価されており、火力発電 よりも高価な発電となる懸念がある。火力発電では、排出権取引制度を通して CO₂ 問題が解決 されており、潜在的有害度の 300 年の不利を負う原子力発電が火力発電よりも高価であれば、選 択の余地はない。一方で、高温ガス炉の経済性は高く、再処理・燃料製造で経済性が悪化しても、 火力発電よりも安価で環境負荷低減を伴う発電を行える蓋然性が高い。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 Y. Fukaya, M. Goto, H. Ohashi, "Uranium-based TRU multi-recycling with thermal neutron HTGR to reduce environmental burden and threat of nuclear proliferation", J. Nucl. Sci. Technol., Vol.55, No.11, pp.1275-1290 (2018).

(4) 今後の利用予定:

高温ガス炉の導入を本格的に検討するため、サイクル諸量のデータベース化を予定している。 今後も、大型計算機 ICE X の計算能力に期待する。

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

5.12.1 福島廃炉推進のためのレーザー利用デブリ溶融シミュレーション解析手法の開 発(1)

Development of a Numerical Simulation for Laser Processing of Fuel Debris at Fukushima Daiichi Nuclear Power Station (1)

山田 知典、柴田 卓弥、若井田 育夫、山下 晋+1、北村 竜明+2、坂本 健作+2、高瀬 和之* 遠隔分析技術開発グループ +1 熱流動技術開発グループ +2 システム計算科学センター 情報システム管理室 *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、高線量等の理由により、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

(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、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、レーザーによる水の蒸発や物体の溶融等の現象を明らかにする解析手法の開発が重要とな る。そこで、固相壁面上に液相が一定の厚さで存在する系に対して沸騰及び溶融の解析を行い、 レーザー照射による伝熱面上での沸騰及び溶融現象の検討を行った。

JAEA-Review 2019-017

平成 29 年度実施した「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)」 及び「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)」において、境界条件 や加熱量の影響を評価したことから、本解析では、新たに物体表面を流れる水流速度、物質間の 相変化、3 次元性等が解析に及ぼす影響を評価した。モデルの作成には、ANSYS DesignModeler (形状作成/修正)と ANSYS Meshing(メッシュ生成)を使用した。図1に気相と液相間の相 変化現象として代表的な伝熱面上の沸騰現象(サブクール沸騰)を評価、検討するための3次元 モデル形状を、図2に加熱による固相の溶融現象を評価・検討するための2次元モデル形状を示 す。固相、液相、気相の各相は、それぞれ鋼、水、空気のパラメータを使用した。



図1 3次元モデル形状

図2 2次元モデル形状

液相挙動の3次元解析結果を図3に示す。図3(a)は液相厚さが1.6 mm、図3(b)は5.7 mmの 場合であり、加熱から10ms後の液相の体積割合である。どちらの条件も、向かって左側から右 側に向けて1m/sの速度で水流が加熱面上を流れている。レーザーによる加熱量は5.5 kWであ り、図1の3次元モデル形状で示したように加熱面中央部の直径4 mmの領域に与えている。 結果として、解析領域内に占める液相の体積割合は、液相厚さに依存して大きな値を示すことが 確認できた。





溶融挙動の2次元解析結果を図4及び図5に示す。図4は液相厚さが1.6mmの場合であり、 図5は液相厚さが5.7mmの場合である。水流は液相挙動の解析と同様に向かって左側から右側 に向けて1m/sの速度で加熱面上を流れている。本解析では、レーザーの加熱量を固相に直接与 えていることから、液相厚さに影響を受けず、レーザー照射により金属表面の一部が溶融し、固 相から液相に相が変化した。これにより、水流が加熱面上を右側に向かって流れている場合でも 金属の溶融が安定して計算できることが確認できた。



(a) 液相の体積割合

(b) 密度分布コンター図

図5 金属材料溶融挙動の2次元解析結果(液相厚さ5.7mm)

(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、実際のはつり除去加工と比較・検討を行うために、大型計算機システムを利用して水 流の流入位置や速度を変更した場合の沸騰及び溶融の解析を実施する。

5.12.2 福島廃炉推進のためのレーザー利用デブリ溶融シミュレーション解析手法の開 発(2)

Development of a Numerical Simulation for Laser Processing of Fuel Debris at Fukushima Daiichi Nuclear Power Station (2)

柴田 卓弥、山田 知典、若井田 育夫、山下 晋+1、北村 竜明+2、坂本 健作+2、高瀬 和之* 遠隔分析技術開発グループ

+1 熱流動技術開発グループ

+2システム計算科学センター 情報システム管理室

* 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、高線量等の理由により、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

(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、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、レーザーによる水の蒸発や物体の溶融等の現象を明らかにする解析手法の開発が重要とな る。そこで、固相壁面上に液相が一定の厚さで存在する系に対して沸騰及び溶融の解析を行い、 レーザー照射による伝熱面上での沸騰及び溶融現象の検討を行った。

2018 年度前期に実施した「福島廃炉推進のためのレーザー利用デブリ溶融シミュレーション 解析手法の開発(1)」において、物体表面を流れる水流速度、物質間の相変化、3 次元性等が解 析に及ぼす影響を評価したことから、本解析では、実際のはつり除去加工と比較・検討を行うた めに、水流の流入位置や速度を変更した場合の沸騰及び溶融の解析を実施した。モデルの作成に は、ANSYS DesignModeler(形状作成/修正)とANSYS Meshing(メッシュ生成)を使用し た。図1に沸騰及び溶融モデル形状を示す。気相と液相間の相変化現象として伝熱面上の沸騰現 象及び加熱による固相の溶融現象を評価・検討するためのモデルである。固相、液相、気相の各 相は、それぞれ鋼、水、空気のパラメータを使用した。 実験条件に合わせてノズルから間欠性を持たせた水が噴出する条件を設定して解析を行った。 沸騰現象については、計算開始直後に発散してしまったため、解析条件を細かく調整し、その原 因の調査を実施した。明確な原因は発見できなかったが、複数の現象を同時に解こうとして計算 が複雑になっている可能性が考えられた。溶融現象については、図2に密度分布の結果を示す。 ノズルから間欠性を持たせた水が噴出し、時間経過と共にレーザーの加熱領域に近づく様子が確 認できたが、加熱領域に水が衝突した直後に発散してしまい、短い時間の溶融現象しか確認でき なかった。これまでの解析により、ノズルからの水の噴出が無ければ、安定した計算が実施でき ていることから、溶融現象についても複数の現象を同時に解こうとして計算が複雑になっている 可能性が考えられた。



図2 加熱面上溶融挙動の2次元シミュレーションで得られた密度分布

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

(4) 今後の利用予定:

この結果を受けて、今後は大型計算機を利用して各ステップでの進捗を明らかにしつつ解析を 実施し、最終的に実験との比較・検討を行えるようにする。

5.12.3 含水廃棄物等の水分蒸発挙動コードの開発

Development of Drying Simulation Code for Waste Storage

寺田 敦彦 保管機器健全性評価グループ

(1)利用目的:

含水廃棄物の保管においては、放射線に起因する発熱に加え、水の分解による水素発生や容器 材料の腐食等を踏まえた保管容器の健全性評価が重要である。福島第一原子力発電所の事故で は、事故当初において原子炉冷却のために海水が注入され、それらが原子炉内の冷却水と混合し て放射能汚染水として原子炉内に大量に滞留している。この塩分を含んだ汚染滞留水を削減する ため、滞留水中の放射能源であるセシウムをゼオライトで吸着除去する汚染水処理システムが導 入され、汚染水処理が鋭意行われており、使用済みのセシウム吸着塔(内部にゼオライトを充填) は、中長期にわたってサイト内に保管される計画である。吸着塔保管時に残留する水に含まれる 海水成分の濃度、温度、線量率等の腐食環境は重要な検討項目であるが、これらの環境は塔内水 分量によって変化するため、水分蒸発挙動を把握するコードの開発を進めている。

本研究では、崩壊熱等の発熱による粒子間の自由水の蒸発や容器壁面からの抜熱等による過飽 和水分の凝縮等の相変化、及び毛管圧力による水分移動をモデル化した、長期にわたる容器内の 乾燥過程の予測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と考えた。

(2)利用内容·結果:

セシウム吸着塔を例とした水分乾燥過程の概要を示す。使用されたセシウム吸着塔は、長期保 管前に内部を淡水で洗浄した後、圧縮空気により排水して保管されているが、塔の構造や吸着材 の性状から、内部、特に底部に水分が残留している。ANSYS/FLUENT を用いた定常状態での 熱解析を通して吸着塔内ではセシウムの崩壊熱によって吸着塔中心付近が高温になること、また 後述するセシウム吸着塔を模擬した内部加熱試験を通して底部にある塩分を含む自由水が吸着 塔中心付近に移動する可能性が示唆されている。また、塔内で蒸発した水分は、大気開放された ベント管から流出するか、容器壁面等で凝縮しゼオライト粒子層内を還流するとみられる。これ らの事象の予測に向けて、本コードでは、不飽和粒子層内の水分の運動方程式はダルシー則を適 用し、非線形性の大きい毛管圧力と含水飽和度の関係を Leverett 関数で整理する手法で構築した。

上述した内部加熱試験の体系を基にした解析例を紹介する。図1に解析モデルの概要を示す。 解析モデルは2次元軸対称である。ゼオライトを充填した円筒容器(容積約1.6m³)の底部に高 さ10cmの残水層を設け、ゼオライトが充填された層の中心軸にあるヒータ(熱量:約50W) で内部を加熱する。ゼオライト層上部空間は外部からの空気で常時換気されている。計算では、 初期のゼオライト層内の水分分布について、残水層を飽和領域とし、その上部を一様な含水飽和 度(含水率)で仮定した不飽和領域とした。図2に試験開始から44日後の容器内の含水飽和度、 温度、水蒸気濃度の不飽和領域における各分布を計算した結果を示す。分布の履歴からは、ヒー タ加熱によって、容器中心部の温度が上昇し、中心部、続いて上部の乾燥が進むとともに、容器 壁面近傍では凝縮による水分も含め比較的高い水分分布がみられ、実験結果を概ね再現してい る。また、図2の44日後の容器内の水蒸気、および水分が移動する様相から、速度は非常に遅 いが、乾燥した中心部へ移動した水分が蒸発して浮力によって上昇し、容器壁面、および粒子層 及びその上部空間にて凝縮して、容器壁面に沿って下降した水分が乾燥した中心部に移動する循 環流が形成されている様相が確認できた。



(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) 寺田敦彦、山岸功、日野竜太郎、"廃棄物等の水分蒸発挙動解析コード開発に向けた取組み"、 日本機械学会熱工学コンファレンス 2018、2018 年 10 月 20 日、富山市.

(4) 今後の利用予定:

平成 30 年度の研究にて、リスタート機能の整備等で大型計算機による長期にわたる計算能力 の拡充を図ることができた。今後、セシウム吸着塔内で非軸対称な発熱分布や配管等の内部構造 物を通した乾燥空気による水分乾燥過程への影響を検証するため、コードの3次元化と高速化に よる計算コストの低減を図り、実機の長期的な水分蒸発挙動評価を進める計画である。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。

5.12.4 JUPITER コードの溶融要素過程解析モデルに対する妥当性検証解析 Validation and Verification for the Melting and Eutectic Models in JUPITER Code

チャイ プンフィ 試験技術開発グループ

(1)利用目的:

The framework of JUPITER code has been well developed by Susumu Yamashita. However, it was considered that the Validation and Verification for each physical models are necessary as a preliminary work before the practical application. In last fiscal year, the reliability of the phase change, solute diffusion and radiation models were validated by comparing with the analytical or experimental results. Along with the validation work, light modification for the source code was conducted to improve adaptability and accuracy of the models.

(2)利用内容·結果:

P. Hofmann's experiment was simulated to validate the eutectic reaction model. As it shown in Figure 1-left, a short cylindrical rod of stainless steel was pressed into a Zircaloy capsule and closed gas-tight by a conical Zry plug. The annealing tests were conducted in a tube furnace with flowing argon gas. The specimens were heated up to about 900°C and then placed into the pre-heated furnace which had the desired annealing temperature. The specimens were kept in the furnace for a certain duration time before take it out. The duration time depends on the annealing temperature and the thickness of the pre-oxide layer. The geometry set up in the simulation is shown in Figure 1-right. The scale of the geometry kept consistent with the experiment. An isothermal condition was set for the whole calculation domain. All the boundary condition was set to be insulation. In other word, energy equation is not solved in this simulation. As it shown in Figure 2, generally speaking, good agreement could be observed for the range from 1000°C-1200°C.



Figure 1 Left: Experimental components of a compatibility specimen before being loaded; Right: geometry setup in the simulation.



Figure 2 Comparison of the reaction zone thickness in Zry-4

In addition, radiation heat transfer model was also validated by a series of simulations. Figure 3 shows the calculation of the radiation heat loss of single rod in a vacuum environment. Reasonable results and good agreement with the analytical results could be obtained from the comparison in Figure 3-right. Moreover, the radiation heat transfers between bundles also been calculated and compared with the view factor method (Figure 4). Good agreement suggests the good reliability of JUPTER code on simulating the radiation heat transfer process.



Figure 3 Left: The temperature decrease along the elapsed time; Right: Comparison between the analytical solution and the results predicted by JUPITER



Figure 4 Simulation results for the bundle case by JUPITER code.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) P. Chai, et al., "Validation and Verification for the Melting and Eutectic Models in JUPITER code", Europe Review Meeting on Severe Accident Research (ERMSAR 2019), Prague, Czech republic, March 18-20, 2019. (JUPITER コードの溶融要素過程解析モデル に対する妥当性検証解析).
- 2) P. Chai, et al., "Advanced Multi-Scale Modeling and Experimental Tests on Fuel Degradation in Severe Accident Conditions (2): (No.3) Validation and Verification for the multi-physics models in JUPITER code", Atomic Energy Society of Japan 2019 annual meeting, Ibaraki, Japan, March 20-22, 2019.

(4) 今後の利用予定:

In the next fiscal year, we are planning to continue the validation and verification work for the physical models of JUPITER code, which include the Zry oxidation model, et al. Besides, a series of integrated severe accident simulant experiment would be simulated to evaluating the reliability of JUPITER code on analyzing the reality conditions.

Additionally, I would start the numerical analysis for BWR lower head by STAR-CCM+® software using ICE X. It was a part of job of decommissioning project on evaluating the progression during Fukushima accident.

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

5.13.1 遅発ガンマ線分光システムの実用的開発

Practical Development for a Delayed Gamma-ray Spectrometry System

Rossi Fabiana、Douglas Chase Rodriguez、瀬谷 道夫 技術開発推進室

(1) 利用目的:

The SGI ICE X cluster is used mainly for multiple evaluations using MCNP6 simulations to design a moderator for a practical delayed gamma-ray non-destructive assay system for safeguards verification in actual reprocessing facility.

(2)利用内容·結果:

To ensure that nuclear material (NM) is not diverted, IAEA verifies state declarations of NM through independent verification measurements. When applicable, nondestructive assay (NDA) is used for efficient safeguards verification. In reprocessing facilities, for low radioactivity (LR) NM, such as Pu-nitrate, passive NDA methods are well established for quantitative verification. However, for high radioactivity (HR) NM, like spent fuel solution, no NDA technique for isotopic composition verification has been established yet. Due to the presence of fission products (FP) and minor actinides (MA) in HRNM, the passive NDA techniques for LRNM cannot be applied to these materials. Current verification is done with the use of a combination of hybrid K-edge / X-ray fluorescence densitometry (HKED), to determine the masses of U and Pu elements and isotope dilution mass spectrometry (IDMS) for isotopic compositions of them. However, IDMS is a destructive analysis (DA) technique requiring several days for the sample preparation. JAEA is now developing new NDA techniques to address the HRNM verification. One of them is the delayed gamma-ray spectroscopy (DGS) that can be able to determine the fissile nuclides (U-235, Pu-239 and Pu-241) composition ratios in HRNM. JAEA is collaborating with the European Commission's Joint Research Centre [1] for development studies on DGS and other neutron activation NDA techniques.

DGS focuses on the measurement of high energy gamma rays (above 3 MeV) emitted by decaying of short-lived FPs (SLFP) generated with induced fissions of fissile isotopes of NM

by irradiation of external neutrons. Because the HRNM have very high intensities of low energy gamma-rays (as background) caused by the decay of the long-lived FPs, that overwhelms the detector and masks the gamma signature from the fissile nuclides, we need to suppress the high gamma-ray background by using filters. With the analysis of the spectra in high energy (3 MeV or more) range, it is possible to correlate the measured gamma-ray peaks from the SLFPs with the amount of fissionable nuclides present in the HRNM sample. Each fissile nuclide produces FPs with a unique fission yield (FY) distribution, that changes with the fissile nuclide atomic number and mass as well as the energy of irradiation neutron through the fission cross-section (see Figure 1). To enhance the fission rate in the sample and enhance the signature coming from the fissile nuclides of interest, external neutrons from a neutron source need to be thermalized with some moderator. At the same time, thinking of practical use in current reprocessing facilities, the neutron source should also be compact. Among several neutron sources, neutron generators (NG) and radioactive sources are suitable in term of compactness. However all of them emit neutrons with high energy and need a moderator system.



Figure 1 Fission cross-sections of U-235, U-238, Pu-239 and Pu-241 as from the ENDF/B-VII.1 database [2].

The SGI ICE X is used in particular to perform MCNP6 simulations to design (optimize) the moderator for a deuterium-deuterium NG within a 1 m^3 space (compatible with the
current verification system (HKED) in analytical laboratories of reprocessing plants). MCNP6 is used to evaluate the optimum combination of moderator in term of high thermal flux in the sample, moderator efficiency (thermal-to-fast ratio) and size (Figure 2).



Figure 2 3D representation of a moderator system for a NG. Inner and outer material is HDPE, while the central part is graphite.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) F. Rossi, D. C. Rodriguez, T. Takahashi, M. Seya M. Koizumi, "Delayed Gamma-Ray Spectroscopy for Nuclear Material Analysis (2): Design of a Practical System with DD Neutron Generator", Proceeding of the 60th INMM Annual Meeting, 2019.
- F. Rossi, D. C. Rodriguez, T. Takahashi, M. Seya M. Koizumi, "Delayed Gamma-ray Spectroscopy (2): Design Study of Moderator for a Practical System", Proceeding of the 39th INMM Japan Chapter Annual Meeting, 2018.
- 3) F. Rossi, "Measurement of DG spectrum with PUNITA & Design Study of Moderator for DGS-NDA", Oral presentation, Workshop on Technological Development for Nuclear Non-proliferation and Security, JAEA, Tokai-mura (Japan), 12-15 Mar, 2018.

(4) 今後の利用予定:

In the future the SGI ICE X DGS will be still used to perform Monte Carlo simulations to finalize the practical system.

5.14 システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

5.14.1 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、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 での要因とも考えられる。元素の粒界偏析を左右する量として粒界偏析エネルギーがあり、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の実験デ ータに基づく値からの違いが指摘され、その原因として第一原理計算の精度が疑われている。し かし、これは、最近の第一原理計算の精度や他の計算値の実験値とのよい一致などから妥当では ないと考えらえる。むしろ、違いの原因は、元素の粒界偏析挙動の考え方に起因する可能性のほ うが高いと思われる。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ことが必要である。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:

42Å×97Å×49Å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 6Å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。

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鉄とリンの混合 格子間原子対、侵入型リン原子、空孔とリンの複合体の1つを設定し、構造緩和することで、設 定位置に対するポテンシャルエネルギーを調べた(図2)。この結果から、粒界近傍で各欠陥の エネルギーが大きく変化することが分かった。また、リン原子を含まない粒界領域の表面の揺ら ぎについて定量的に調べた(図3)。これらの結果と、図4の上記欠陥が乖離を起こし、リン原 子が置換型となる位置を比較したところ、それぞれの欠陥においてよい相関がみられた。このこ とから、粒界近傍でリン原子が置換型となり停滞する理由は、粒界領域の熱ゆらぎ及び粒界領域 が作るひずみによるエネルギー変化であると考えられることが分かった。



図1 リン原子を輸送する欠陥の設定位置: 中央の自色粒子が粒界領域に対応する。上下端の白色粒子は表面を表す。 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3 粒界領域の表面の熱ゆらぎ:290℃の場合を表す。



図2 リンと鉄の混合ダンベルの各位置での ポテンシャルエネルギー:赤は<110> ダンベル、緑は<111>ダンベルを表し、 点線は、粒界領域表面の位置を表す。



図 4 リン原子の粒界中央から距離の時間変 化(混合ダンベルの場合):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) K. Ebihara, T. Suzudo, "Atomistic simulation of phosphorus segregation to $\Sigma 3$ (111) symmetrical tilt grain boundary in α -iron", Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 26(6), pp.065005_1 065005_10, 2018.
- 2) K. Ebihara, T. Suzudo, M. Yamaguchi, "Simulation of irradiation-induced grain boundary phosphorus segregation by first-principles-based rate theory model including trapping and detrapping processes", NUMAT2018, Seattle, WA, USA, 2018.10.
- 3) K. Ebihara, T. Suzudo, "Computational Study of Phosphorus Migration to Grain boundary in α -iron", MMM2018, Osaka, 2018.11.
- 4) 海老原健一、鈴土知明、山口正剛、「トラップ・デトラップ過程を考慮した原子レベル計算に 基づくレート理論モデルによる照射誘起粒界リン偏析のシミュレーション」、平成 30 年度材 料照射研究会、京都大学、宇治、2018.11.

(4) 今後の利用予定:

粒界からのデトラップ過程を理解することを目指して、粒界領域内でのリン原子の移動につい て調べることを予定している。

5.14.2 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:

本課題では、原子力分野及び関連する産業界において重要な役割を果たす機能材料の設計に資 する計算科学技術の開発と各機能材料物性に関する新知見の取得を目的とする。原子力分野及び 関連産業界では、様々な機能材料が用いられるが、本課題では、材料中に含まれる元素の質量数 が軽いため、原子核の量子効果が重要な役割を果たす物質群を主たる研究対象とする。その理由 は、質量数が軽い元素が物質内に含まれる場合、原子核の量子効果が物性に重要な影響を及ぼす ため、その量子効果を考慮する最新の計算科学技術を必要とするからである。本課題では、上記 の軽元素を含む物質材料に焦点を当て、2つの物質相(液体相・固体相)に対して、その物性を 高精度にシミュレーションする技術を研究開発する。更に、そのシミュレーション技術を用いて、 特異な物性とそれを利用した革新的新機能の提案を目標とする。また、新たな高精度物性計算科 学技術を進展させることにより、広く材料研究分野の計算科学の発展にも寄与することを目指 す。以下に2つの物質相毎の研究対象を記す。

液体相(水の同位体、トリチウム水):

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、現在ではトリ チウムを除くほぼ全ての核種の分離に成功しており、トリチウムのみの処理が残された唯一の技 術課題と言える。トリチウムの分離に当たっては、水とトリチウム水の巨視的熱力学的特性の違 いは極僅かであるため、それらの特性の違いを利用する分離法(例えば、蒸発熱の僅かな違いを 利用する蒸留法等)では、分離効率を上げることには限界がある。従って、その効率の悪さから、 福島では分離等の技術が活用されていない。しかし、最近のナノ構造に対する研究の進展により、 ナノ構造を利用した原子レベルの分離効率が高いことが指摘されており、その進展において、新 たな突破口を見出すことは、重要な科学的ブレークスルーと言える。本課題では、この視点に立 ち、原子レベルでの研究において不可欠な高精度分子動力学法の開発を進めると同時に、ナノ構 造によるトリチウム分離法の研究開発を目標としたシミュレーション研究を実施する。

従来、水素やトリチウムを高精度に取り扱うためには、核量子効果を考慮する計算科学手法が 必須であることが課題提案者らにより示されてきた(平成 29 年度成果)が、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、 高精度な計算科学技術の研究開発を実施する他、核量子効果に係る新たな知見の取得を目指す。

固体相(超伝導体、イオン伝導体):

常温・常圧で固体相を示す材料は、様々な工学的用途に用いられており、その機能の充実こそ が、原子力分野やその関連産業を進歩させる大きな力となってきた。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。

1) 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 検出器は超伝導を利用しており、その利用範囲は広範囲に及ぶが、その優れた機能を活用するに は、十分な低温に系を冷却する必要があり、超伝導転移温度の上昇がその活用条件を大きく拡大 させうることが分かる。特に、室温での超伝導の実現は原子力分野のみならず、人類の夢であり、 その研究を世界に先駆けて行うことは重要である。本課題では、2015年に最も高い超伝導転移 温度(約 205K)を示した H₂S に着目する。

H₂S は転移温度こそ極めて高いが、その実現には高圧条件を必要としており、未だ応用上の難 点がある。しかし、その超伝導の起源が含有する水素(H)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の恰好な材料であり、高圧条件を必要 としない材料の提案、そして更に常圧且つ室温で超伝導を実現するために必要な材料学的知見を 獲得するのが本課題の目標である。

2) 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 ている先端材料となる。現在、自動車は化石燃料から電気自動車への移行が進みつつあり、性能 の良い固体二次電池を世界に先駆けて開発することは日本産業界の悲願であり、その研究開発に 貢献することは重要な戦略的意義を有する。このように極めて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Li6を燃料と して必要とする核融合分野である。天然のLi元素はLi6とLi7の同位体から構成されるが、核融 合において利用するのはLi6のみであり、Li6のみの選択的収集が求められている。しかし、そもそ もLiは、先進国においては、レアメタルに属する金属元素であり、今後の電気自動車の普及や 様々な電子機器での利用も併せて考えると、その広範囲な需要から価格が高騰することは容易に 想像することができる。従って、大量のLi6確保のため、海水等からLi6の採集を効率的に行う手 段の開発が考えられており、Liイオン伝導体の研究開発は極めて重要な意義を持つ。

(2)利用内容·結果:

液体相(水の同位体、トリチウム水):

水素やトリチウムを含む水分子の挙動を高精度に取り扱うためには、核量子効果を考慮する計 算科学手法が必須である。本課題では、水とその同位体の物性の微妙な違いを明らかにするため、 先ず水分子それ自身の物性を明らかにする研究開発に取り組んできた。水は水分子が互いに水素 結合により相互作用しながら運動する液体であるが、その特異な性質をシミュレーションにより 明らかにすることは難しく、計算化学研究の重要なベンチマーク的対象となっている。特に、最 近では、水の特異な挙動において、水素の核量子効果が重要な役割を果たすことが見出されてお り、本課題では、当該効果に係る新たな知見の取得に成功した。[1][2]

- Yong Lik Chang, T. Sasaki, Jordi Ribas-Ariño, M. Machida, and M. Shiga, "Understanding Competition of Polyalcohol Dehydration Reactions in Hot Water", J. Phys. Chem. B, 123, pp.1662-1671 (2019).
- [2] M. Machida, K. Kato, and M. Shiga, "Nuclear quantum effects of light and heavy water studied by all-electron first principles path integral simulations", J. Chem. Phys., 148, 102324 (2018).

固体相(超伝導体、イオン伝導体):

1) 超伝導体:

本課題では、2015年に最も高い超伝導転移温度(約205K)を示したH₂Sに着目した。その 超伝導の起源としては、含有する水素(H)の核量子効果が重要な役割を果たすが、水素(H) の量子効果により、固体を形成する硫黄(S)の振動にも大きな影響を与えることが分かった。 また、高圧下において、構造上の転移を示すがその転移が量子相転移となることが分かった。

2) イオン伝導体:

本課題では、Liイオン伝導体として最も基本となる Li₂O に着目して、Li のイオン伝導性を 調べることとした。Li イオンの伝導性における同位体効果が効果的に働くかどうかについての 理論的研究を進め、同位体効果が働く場合の条件を定義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):

査読付き論文

- Yong Lik Chang, T. Sasaki, Jordi Ribas-Ariño, M. Machida, and M. Shiga, "Understanding Competition of Polyalcohol Dehydration Reactions in Hot Water", J. Phys. Chem. B, 123, pp.1662-1671 (2019).
- 2) Fedkin Mark, Shin Yun Kyung, Dasgupta Nabankur, Yeon Jejoon, Zhang Weiwei, van Duin Diana, van Duin Adri, M. Kento, F. Atsushi, M. Masahiko, N. Hiroki, O. Masahiko "Development of the ReaxFF Methodology for Electrolyte-Water Systems", J. Phys. Chem. A, 123, pp.2125-2141 (2019).
- M. Machida, K. Kato, and M. Shiga, "Nuclear quantum effects of light and heavy water studied by all-electron first principles path integral simulations", J. Chem. Phys., 148, 102324 (2018).
- 4) S. Ikeda, Y. Tsuchiya, X.W. Zhang, S. Kishimoto, T. Kikegawa, Y. Yoda, H. Nakamura, M. Machida, J. Glasbrenner, H. Kobayashi, "New antiferromagnetic order with pressure-induced superconductivity in EuFe₂As₂," Phys. Rev. B, 98, 100502(2018).

(4) 今後の利用予定:

平成 30 年度に実施した課題を令和元年度も引き続き継続して行う。

5.14.3 転位と溶質元素の第一原理計算

First-principles Calculations of Interaction between Dislocation and Solute Elements

板倉 充洋 シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

金属材料の機械的特性、特に降伏強度と破壊靭性は構造物の安全性に関わる重要な指標である が、炭素などの微量な添加元素や放射線照射による微細な損傷で大きく変化する量でもある。こ うした影響をモデル化し予測することが既存材料の安全性評価や新規材料の設計にとって重要 な要素となるが、そのメカニズムの背景には様々な格子欠陥や不純物元素の間の原子スケールで の相互作用があり、実験による解析では微小な時間・空間スケールでの現象を捉えきれない。こ うした相互作用を定量評価するには大規模な第一原理計算をベースとしたマルチスケールモデ リングが必要となる。

システム計算科学センターと基礎工燃料・材料工学ディビジョンは原子力構造材料の安全性評価と新材料の設計に資するため、金属材料における格子欠陥や不純物元素の計算手法を開発している。2019年度からはこれまでの軽水炉・核融合炉等の材料に加え ADS 材料を対象に加え開発した手法の応用を行っていく予定である。

本課題ではこの中で転位の計算を担当し、主に転位と不純物元素および照射欠陥の相互作用を 第一原理計算で評価することにより材料中における脆化元素の分布、それによる降伏応力の上昇 等を見積もり脆化評価に必要なパラメータを取得することを目的とする。

(2)利用内容·結果:

2018 年度は既往研究が多く実験との比較において有利に研究を進めることができ、かつ玄海 一号機で問題となった銅原子クラスタとの相互作用及び脆化についての評価を行った。2017 年 に九州大学のグループによる銅原子による脆性・延性転移温度の変化についての詳細な実験結果 が発表され、その実験結果の背後にある原子論的な機構を解明することを主眼に計算を行った。 銅原子は鉄より原子半径が大きいため、刃状転位の拡張側に吸着され転位の動きを阻害する。銅 原子および銅原子クラスタの吸着エネルギーおよびその応力依存性を第一原理計算によって評 価することにより、銅原子クラスタが材料の脆化の指標となる降伏応力の脆化にどのような影響 を及ぼすかをメゾスケールのモデルで定量評価することに成功した(図 1)。その結果、実験に おいて観察された銅による転位移動の活性化体積(転位の活性化エネルギーを応力で微分した 量)の急激な上昇が、時効していない材料で少数存在している銅原子の小規模なクラスタが高温 になるほどその寄与が大きくなることが原因であることが分かった。第一原理計算の結果では、 銅一原子あたり刃状転位と 0.2eV 程度の相互作用がある。転位を移動させるために応力をかけた 場合、転位長さ L あたり一つの銅原子と相互作用している場合、相互作用エネルギーの低下は L×応力に比例する。したがって活性化体積はLに比例した量となる。銅原子が複数集まったク ラスタの場合、相互作用はほぼ 0.2eV に銅原子の個数を乗したものとなり、2 個以上のクラスタ は転位の移動障壁である 0.7eV と同等のエネルギー障壁をもつことになる。そして応力を与えな くても障壁エネルギーが高い状態で転位が移動する高温においては銅原子が複数集まったクラ スタの寄与が徐々に大きくなる。時効しない場合、こうしたクラスタの密度は非常に低く、それ ゆえ転位と相互作用する間隔であるLは極端に大きくなる。ここで活性化体積はLに比例する ので、高温ほど活性化体積が高くなり、これは銅のクラスタによる影響であることが定性的に説 明できる。さらに理論的に計算したLの値を用いて活性化体積を評価すると、実験における高温 での値とよく一致することが分かった。



図1 銅を含むフェライト鋼の活性化体積の温度依存性、実験結果と計算による見積もり

さらに炭素原子・窒素原子と鉄のらせん転位・刃状転位の相互作用について系統的に計算を行った結果、これまで特に相互作用が強いという結果が得られていたらせん転位と炭素の相互作用 は、他の組みあわせに対しても特異的に強い結合を示しており、単純な原子半径にとる議論では 説明できない結合であることが判明した。これらの成果は主に金属学会における基調講演および 鉄鋼協会のシンポジウムにおいての基調講演等で公表している。

こうした結果は原子的詳細が観察できない添加元素による材料強度変化のメカニズムを機構 論的に与えるものであるとともに、本課題で開発した計算手法が特に鉄系材料の機械的特性を研 究する上で欠かせないものであることを示している。 (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

■招待講演・基調講演

- 1) M. Itakura, M. Yamaguchi and T. Tsuru, "First-Principles Calculation of Interactions between Edge/Screw Dislocations and Carbon/Nitrogen Atoms in alpha Iron", International symposium on Atomistic Processes of Crystal Plasticity 2018(招待講演).
- 2) 板倉充洋、沖田泰良、ボイドによる転位ピン止め過程の原子論的モデル化、日本金属学会 2018 年秋期講演大会(基調講演).
- 3) 板倉充洋、山口正剛、転位列への固溶元素析出の第一原理計算によるモデル化、日本金属学会 2019 年春期講演大会(基調講演).

■論文

- 4) D. Nakanishi, T. Kawabata, K. Doihara, T. Okita, M. Itakura, K. Suzuki, "Effects of stacking fault energies on formation of irradiation-induced defects at various temperatures in face-centred cubic metals", Philosophical Magazine 98, pp.3034-3047 (2018).
- 5) S. Hayakawa, T. Okita, M. Itakura, M. Aichi, K. Suzuki, "Interactions between clusters of self-interstitial atoms via a conservative climb in BCC–Fe", Philosophical Magazine 98, pp.2311-2325(2018).
- 6) K. Doihara, T. Okita, M. Itakura, M. Aichi, K. Suzuki, "Atomic simulations to evaluate effects of stacking fault energy on interactions between edge dislocation and spherical void in face-centred cubic metals", Philosophical Magazine 98, pp.2061-2076(2018).

(4) 今後の利用予定:

今後は計算対象を鉄クロム合金等に拡張し、反強磁性スピン相互作用をもつクロムの磁性が格 子欠陥や物性に与える影響を評価した後、ADS 炉ビーム窓で使用予定の T91 鋼の劣化挙動につ いて研究を行っていく予定である。

5.14.4 原子カ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:

本課題における研究対象は、物質材料の物性取得のための高精度量子シミュレーション技術 (密度行列繰り込み群法や自己学習モンテカルロ法)の開発であり、シミュレーション技術の主 な適用材料は、超伝導体が中心となる。超伝導現象を説明可能になることは、物性計算技術の最 高精度の大きなマイルストーンであり、物性計算技術を高度化するために必須である。尚、本課 題での開発手法を適用する超伝導体は、超伝導転移温度が極めて高いか、或いはスピントロニク スへの応用が期待されている物質であり、高精度シミュレーション手法開発の需要が高い。また、 大規模シミュレーション課題枠を利用し、平成23年度まで CREST (JST) 受託研究にて開発し てきた密度行列繰り込み群法を広く公開するレベルまで、並列化性能を高め、機能材料研究開発 に資する大規模シミュレーションコードとして機構内外の研究力強化に貢献することも目的と する。

(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

超伝導体へのシミュレーションを通じて、自己無撞着計算を含む固有値問題に対する新しい解 法である RSCG 法が大規模並列計算との親和性が高く高速であることを示すことができた。さ らに、大規模並列計算用チューニングした。これは、RSCG 法が超伝導シミュレーションに限ら ず様々な固有値問題への適用が可能であることを強く示唆する結果である。

また、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厳密対角 化ソルバと機械学習関連技術(スパースモデリング)を組み合わせたソルバを開発し、数値的解 析接続の伴う物理量の高精度計算が可能となるコードを開発した。その結果、これまで見積もる ことができなかった有限サイズ効果を高精度に見積もることが可能となった。これらのコードを 開発したことによって、超伝導体の物性値取得のための手法が整備されたことになり、今後さら なる機構内外の連携が可能となると考えられる。なお、機構内連携として J-PARC センターの中 性子散乱実験の理論的解析を行い成果をあげ、論文がアクセプトされた。さらに、重元素化合物 で実現されていると言われている重い電子系において新しいトポロジー理論と動的平均場理論 を用いて、バルクトポロジカルフェルミアークと呼ばれる現象が現れることを理論的に実証し た。

これらの研究成果を、国際会議5件(うち招待講演1件)および国内会議招待講演で発表した。 また、超伝導研究に関する成果が認められ、平成30年度理事長表彰研究開発功績賞を受賞して いる。

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

機械学習技術を物性分野への導入する一つの手法としての自己学習モンテカルロ法が、確かに 強相関電子系で良いパフォーマンスを得られることをはっきりと確認し、その手法の大規模並列 化が可能であることを示した。さらに、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適用範囲拡大に向けて、機械学習 による有効模型構築をニューラルネットワークによって行う手法を開発した(論文は投稿中)。 これにより、様々な系において自己学習モンテカルロ法が適用可能になる。機械学習や AI など の技術は、原子力や物性分野のみならず様々な科学分野において今後ますます重要になることが 予想される。自己学習モンテカルロ法の大規模並列計算手法の開発によって、原子力機構がこれ らの分野の技術を積極的に利用し研究を推進できることを示すことができた。

これらの研究成果は非常に注目され、国内招待講演3件に発表したほか、分子シミュレーション研究会誌に査読付き日本語論文の投稿を依頼された。また、一般の経済誌(矢野経済研究所: Yano E-Plus)において注目科学技術として取り上げられた。

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

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、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 算する省通信固有値計算アルゴリズムを開発し、ICEXを用いた並列計算により、物理パラメー タによってはこれまでよりも高速に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):

査読付き論文発表

- S. Yamada, T. Imamura, M. Machida, "High Performance LOBPCG Method for Solving Multiple Eigenvalues of Hubbard Model: Efficiency of Communication Avoiding Neumann Expansion Preconditioner", SCFA 2018. Lecture Notes in Computer Science, vol. 10776, pp. 243-256, 2018.
- 2) 永井佑紀、"自己学習モンテカルロ法:機械学習を用いたマルコフ連鎖モンテカルロ法の加速"、分子シミュレーション研究会会誌"アンサンブル", Vol.21, No.1, pp.15-21, 2019(通巻 85 号).
- 3) Y. Nagai and Y. Kato, "Quasiparticle Bound States around Fractional Vortices in s-wave Superconductor", J. Phys. Soc. Jpn., Vol.88, pp.054707_1 054707_8, 2019.
- Y. Nagai, and H. Shinaoka, "Smooth self-energy in the exact-diagonalization-based dynamical mean-field theory: Intermediate-representation filtering approach", J. Phys. Soc. Jpn. Vol. 88, pp.064004_1 - 064004_5, 2019.
- 5) K. Iida, Y. Nagai, S. Ishida, M. Ishikado, N. Murai, A. D. Christianson, H. Yoshida, Y. Inamura, H. Nakamura, D. Kagerbauer, A. Nakao, K. Munakata, K. Kawashima, Y. Yoshida, H. Eisaki, and A. Iyo "Coexistence of neutron spin resonance and long-range magnetic order in EuRbFe₄As₄", Phys. Rev. B, 100, 012506, 2019.

国際会議

- 6) Y. Nagai, "Bulk Fermi arcs in heavy fermion systems", International Workshop on Symmetry & Topology in condensed-matter physics, Tokyo.
- 7) Y. Nagai, "Bulk Topological Fermi arcs in heavy fermion systems", 4th Conference on Condensed Matter Physics (CCMP 2018), Shanghai, China (招待講演).
- 8) Y. Nagai, "Bulk Fermi arcs in heavy fermion systems", New Trends in Topological Insulators (NTTI 2018) and 18th International Conference on Narrow Gap Systems (NGS-18), ルクセンブルグ.
- 9) Y. Nagai, "Time-reversal and/or translational symmetry breaking in d-wave nano-superconductors", 12th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity (M2S 2018), Beijing, China.
- 10) Y. Nagai, "Bulk topological Fermi arcs in heavy fermion systems", American Physical Society March Meeting 2019.

国内会議(招待講演)

- 11) 永井佑紀他、"自己学習モンテカルロ法"、深層学習と物理 2018、大阪大学(招待講演).
- 12) 永井佑紀他、"Self-learning Monte Carlo method with neural networks inspired by machine-learning molecular dynamics", Mini-workshop on Machine Learning in Physics, 東京大学(招待講演).
- 13) 永井佑紀他、"重い電子系における例外点とバルクトポロジカルフェルミアーク"、第10回 トポロジー連携研究会「非平衡系・非エルミート系の新奇量子現象」、京都大学(招待講演), 2018.
- 14) 永井佑紀、"自己学習モンテカルロ法;機械学習を用いたモンテカルロ法の高速化"、第7回 材料系ワークショップ、秋葉原 UDX(招待講演), 2018.

受賞

15) 理事長表彰: 2018 年 10 月研究開発功績賞 永井佑紀 "新奇超伝導体が示す特異な超伝導 状態に関する理論的研究".

その他、一般の経済誌(矢野経済研究所: Yano E-Plus)において注目科学技術として取り上げられた。

(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 モンテカルロ法のアルゴリズム改良とさらなる効率化高速化を目指す。

5.14.5 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、核燃料の構成物質である酸化アクチノイドなどのアクチノイド化合物の物性 を、第一原理計算を始めとするシミュレーションによって、核燃料物性の評価を可能とし、核燃 料開発やシビアアクシデント解析に貢献することである。

二酸化プルトニウムを始めとしたアクチノイド化合物はその取り扱い上の制限から頻繁に実 験を行い、精度の高い物性評価を行なうことは極めて困難である。さらに、高速炉内やシビアア クシデントで想定されるような極限環境での物性実験はほとんど不可能である。そのため、炉内 での燃料挙動を評価するには、そのような環境下で物性を精度良く再現できるシミュレーション 手法を確立することが極めて重要である。この問題を解決するために、我々はシミュレーション 手法として、経験的パラメータを必要としない第一原理計算を採用し、物性評価手法の開発を行 ってきた。さらに、これまでに開発した手法を基にして、マルチスケール手法を用いて、メソス コピック、マクロスコピックシミュレーションへの応用を行い、より現実的な物性評価を目指し ていく。

(2)利用内容·結果:

平成30年度の研究成果としては以下の3項目が上げられる。

1) 第一原理計算による MOX 燃料に対する機械特性の評価

平成 29 年度は MOX 燃料物質(Th,Pu)O₂に対して、SQS 法を用いた第一原理計算を行い、格 子定数や相図を評価した。平成 30 年度はさらにこの物質に対して、第一原理計算を用いて弾性 係数を評価した(図 1)。弾性係数は Th/Pu 比に対してほぼ線形な振舞いを示すことが分かった。



図1 Th_xPu_{1-x}O₂の体積弾性率、せん断弾性率、ヤング率、ポアッソン比
 (左図の矢印は実験値を指している。)

2) 第一原理計算による二酸化ウラン中のポーラロンの評価

二酸化ウラン中のポーラロンを第一原理計算で再現し、その生成エネルギーや電荷分布等を評

価した。ポーラロンは格子の歪みを伴って局在する電子の準粒子である。このポーラロンは高温 領域では比熱や熱伝導率といった熱物性に大きな影響を与えると考えられているが、これまで、 第一原理計算を基にした定量的評価は行われてこなかった。そこで、本研究では、まず、第一原 理計算で二酸化ウラン中のポーラロンが再現可能かどうかということからスタートし、さらにそ の熱物性の評価を目指した。平成 30 年度の成果としては、ポーラロンの再現の成功とその生成エ ネルギーの評価が上げられる。評価した生成エネルギーは 1.9eV となり、観測値と近い値を得た。

3) 燃料溶融物中の粘性に対する固相率の影響評価

燃料溶融物中における粘性の固相率依存性を評価するため、流体と固体を連成したシミュレー

ションを行った。コードとしては CFDEM コードを用い、2 平面間の固相が混ざった 流体に対して、一定の圧力勾配を加えたシ ミュレーションを行い、その速度分布から 粘性を評価した。結果としては、粘性の固 相率依存性はこれまでに知られていた Krieger-Dougherty のモデルとよく一致 した(図 2)。この成果は燃料デブリの性状 把握に寄与できるものであり、東京電力福 島第一原子力発電所の廃止措置に貢献す ることが期待できる。



(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

国際会議 查読付会議録

1) H. Nakamura, M. Machida, "A First-Principles Study on Point Defects in Plutonium Dioxide", Progress in Nuclear Science and Technology, Vol. 5, pp.132-135 ,2018.

国際会議

2) H. Nakamura, M. Machida, "A first-principles study on the mechanical properties of (Th,Pu)O₂", NuMat 2018, Seattle, USA, 2018.

国内会議

3) 中村博樹、町田昌彦、"二酸化アクチニドにおけるポーラロンの第一原理計算"、日本原子力 学会 2019 年 春の年会、水戸、2019.

(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、メソスケールへと拡張し、マルチスケールシミュレーション手法の開 発も行う予定である。

5.14.6 環境中の放射性物質の挙動に関する数値シミュレーション

Numerical Simulation of Radioactive Materials in the Environment

奥村 雅彦、中村 博樹、町田 昌彦 シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

2011年3月11日に起きた東北地方太平洋沖地震に起因する東京電力ホールディングス株式会 社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、除染が行われた多くの地域で避難指示が解除されてい る。しかし、除染による除去土壌は膨大な量になると予想され、その貯蔵のための中間貯蔵施設 や最終処分場の設置が大きな問題となっている。また、今後、地表に沈着した放射性セシウムを 含む土壌は雨などにより、環境中を移行していくと予想され、放射性セシウムの環境動態の解明、 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 30 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 の吸着様態の全体像が明らかになっていない風化雲母粘土鉱物の吸着様態について、これまでの シミュレーション研究の結果をまとめ、吸着現象の統一的な描像を得ることを目的とした。

本研究により、これまで実験的研究では解明が難しかった粘土鉱物全体における原子スケール のセシウム吸着様態の全容を明らかにすることができる。その結果、粘土鉱物のどの部分にどの ように吸着しているかが明らかになるため、除去土壌の減容化技術について、有効な手法を絞り 込むことが可能になり、技術開発の進展に寄与できると期待される。また、吸着/溶出過程の詳 細が明らかになることにより、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。また、粘土鉱物によるセシウム吸着現象に対するシミュレーシ ョン研究の初めての総合的な研究となるため、科学的な観点からも有用な知見となると考えられ る。

(2)利用内容·結果:

平成 30 年度は、これまで行ってきた粘土鉱物の各吸着サイトに関する研究成果を取りまとめ、 粘土鉱物全体の吸着挙動を明らかにし、減容技術開発や長期保管の際のリスク評価について考察 した[1,2,A]。図1に各種吸着サイトの概略図を示す。これらの吸着サイトに対する研究結果から 得られた吸着強度をまとめたものを表1に示す。表1から、ほつれたエッジが粘土鉱物の強い吸 着の原因であることがわかる。また、吸着強度の順序から、基盤表面 → エッジ → 水和した層 間 → ほつれたエッジという順番にセシウムが移行していくことが予想される。これまでの実験 結果から、セシウムは最終的には層間に固定されると予想されており、この研究結果は実験結果 を一部説明することに成功していると言える。また、このことから、層間に固定されたセシウム をイオン交換等で取り出すことは難しいため、セシウム脱離のためには、焼成等によって粘土鉱 物自体を破壊することが必要であることが示唆される。さらに、層間に固定された放射性セシウ ムが ¹³⁷Cs⁺→¹³⁷Ba²⁺と崩壊することにより粘土鉱物全体の電荷中性が崩れ、粘土鉱物から放射性 セシウムが脱離する可能性があることを指摘した。これは、長期保管の際、セシウムが粘土鉱物 に安定に吸着しているように見えても崩壊に起因する脱離の可能性を考慮する必要があること を示唆している。



図1 粘土鉱物の各種吸着サイトとその原子スケールモデル

表1 吸着サイトと吸着エネルギーの関係

基盤表面においてセシウム吸着が起こるか起こらないかは原子構造に依存する。

吸着サイト	基盤表面	エッジ	水和した層間	ほつれたエッジ
吸着エネルギー		9		95
[kJ/mol]	± 0.5	-2	-4	-27

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

[査読付き論文]

<u>M. Okumura</u>, S. Kerisit, I.C. Bourg, L.N. Lammers, T. Ikeda, M. Sassi, K. Rosso and M. Machida, "Progress in understanding microscopic mechanisms of cesium adsorption to clay minerals after the Fukushima Dai-ichi nuclear power plant accident", Journal of Environmental Radioactivity, Vol.189, pp.135-145 (2018).

[解説]

2) 町田昌彦、<u>奥村雅彦</u>、中村博樹、山口正剛、「ミクロ~マクロレベル現象の粒子ベースシミ ュレーション~課題と展望~第2回第一原理原子・分子シミュレーションの現状と原子力 分野での研究進展」、日本原子力学会誌アトモス、Vol.60, No.9, pp.552-556 (2018).

[プレス発表]

3) 土壌粘土粒子の表面ナノ構造とセシウム吸着特性との関係を解明 -最も強い吸着を示すの は「ほつれたエッジ」と呼ばれるナノ構造であることを計算科学で立証-、2018 年 7 月 13 日.

(4) 今後の利用予定:

これまでに、粘土鉱物のセシウム吸着サイトごとにモデル化して詳細な計算を行い、それらの 結果を組み合わせることによって粘土鉱物の全体の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である機械学習分子動力学法を開発し、粘土鉱物 全体のシミュレーションを行い、吸着サイト間の移行等も含めた粘土鉱物全体におけるセシウム の振る舞いを明らかにしていく予定である。

5.14.7 メタダイナミクス法による高温水中糖アルコール脱水反応機構の解明

The Elucidation of Reaction Mechanism of Suger Alcohol Dehydration in Hot Pressurized Water with Metadynamics Calculations

志賀 基之

シミュレーション技術開発室

(1)利用目的:

私たちは、科研費研究に基づき、東京大学新領域創成科学研究科の佐々木岳彦研究室と協力し て、メタダイナミクス計算による高温水中糖アルコール脱水反応メカニズムについて研究してい る。既存の化学工業における化学反応は、様々な有機溶媒や触媒などの有害物質を用いることで 起こされるため、環境汚染を引き起こしかねない。そのため、近年環境に優しいかつ斬新な化学 反応、いわゆるグリーンケミストリーの分野が世界各地から関心を集めている。その背後にある 反応メカニズムを実験だけでは完全に理解できないため、私たちは第一原理計算を用いて解明す る。

(2)利用内容·結果:

本研究では、第一原理計算のメタダイナミクス法により、ソルビトール(SBT)の脱水反応(図 1)を573K、20MPaの水中で起こさせ、反応の自由エネルギー面を解析し、先行の実験研究と 比較した。また、これまで知られていなかった反応メカニズムを解明した。



図1 ソルビトールの脱水反応

ソルビトールの脱水反応経路は、攻撃箇所を考慮すると各々の生成物(1,4-AHSO、2,5-AHSO、1,5-AHSO)に対して2種ずつ考えられる。図2に1,4-AHSOの脱水反応パースの詳細を示している。



図 2 1,4-AHSO の脱水反応パース

原子力機構システム計算科学センターで開発した PIMD コードを用いて、半経験的な DFTB ポテンシャルに基づくメタダイナミクス計算を行い、各反応物が遷移状態に至る自由エネルギー 面を求めた。メタダイナミクス法では、反応座標(CV)で特徴づけられる自由エネルギー面上 に正のガウス関数型ポテンシャルを加算することで、通常の分子動力学法の時間スケールでは起 こらない化学反応を誘起する。CV は想定される反応物への反応経路で定められる。図 3 に 1,4-AHSO6 に対する CV の定義を示した。



図3 CVの定義:二面角Φ (O6-C6-C5-C4)、結合距離の差r (r = r_{03-C3} - r_{06-C3})、 配位数n (O6 に付く水素の個数)

計算誤差を抑えるため、ガウス関数型ポテンシャルを極力小さく設定した(高さが h = 500K, 幅が wo = 10.0°, wr = 0.10 Bohr, wn = 0.10)。その結果、1,4-AHSO6 において自由エネルギー 面への加算値が 30.4 kcal/mol のとき脱水反応が見られた。その遷移状態は CV の値が Φ = 178°, r = 0.0, n = 2.2 であった。各 CV を軸とする自由エネルギー面をプロットすると(図 4)、 浅いポテンシャルの経路(図 4 赤い矢印)が確認でき、遷移状態はこの経路上に存在する。反応 が見られたときの自由エネルギー面への加算値は、活性化エネルギーに相当する。すでに報告さ れているソルビトールの 1,4-AHSO への活性化エネルギーの実験値は 30.35 kcal/mol であり、 計算値 30.4 kcal/mol と極めて良く一致する。



図 4 1,4-AHSO6 の自由エネルギー面

また、遷移状態付近における原子座標の軌跡から、ソルビトールの末端の O 原子 (O6) にプロトンが付加された後に、脱水と五員環の形成 (C6 と O3 の結合) がほぼ同時に起こったことがわかった。ゆえに 1,4-AHSO への反応過程は、ソルビトールの水酸基がプロトン付加されたのち SN2 を経由して五員環を形成し、最後に余剰プロトンを放出することがわかった。以上の反応メカニズムを図5にまとめた。



図 5 1,4-AHSO の反応メカニズム

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- Chang Yong Lik、佐々木岳彦、志賀基之、「メタダイナミクス計算による高温水中多価アル コール脱水反応メカニズムの解明」、第12回分子科学討論会 2018、3E16、福岡国際会議場、 2018 年 9 月 12 日.
- 2) Chang Yong Lik、佐々木岳彦、志賀基之、「メタダイナミクス計算による高温水中多価アル コール脱水反応経路の探索」、第 32 回分子シミュレーション討論会 2018、産業技術総合研 究所、2018 年 11 月 30 日.
- 3) Chang Yong Lik、佐々木岳彦、志賀基之、「高温水中多価アルコール脱水反応の自由エネル ギー計算」、シンポジウム「化学反応経路探索のニューフロンティア 2018」、九州大学、2018 年9月14日.
- Yong Lik Chang, T. Sasaki, Jordi Ribas-Ariño, M. Machida, and M. Shiga, "Understanding Competition of Polyalcohol Dehydration Reactions in Hot Water", J. Phys. Chem. B, 123, pp.1662-1671 (2019).

(4) 今後の利用予定:

実験による活性化エネルギーは算出方法(反応速度論)の選択によって値が大きく変動する。 今後はメタダイナミクス計算によって各反応物の活性化エネルギーを比較することで、今回計算 された活性化エネルギーが実験値に非常に近い値であったことが有意であるかを含めて、反応速 度についてより詳細に調べる。また、本研究では半経験的な DFTB を採用して計算を行ったが、 自由エネルギーの誤差が大きいなどの問題点が考えられるため、第一原理的な DFT など、他の 計算手法を用いて同様の計算を行うことを予定している。

5.14.8 森林内有機分子とセシウムの選択的錯体形成機構のシミュレーション研究 Simulation Study of Selective Cesium Complexation Mechanism by Organic Matter in Forest

数納 広哉 シミュレーション技術開発室

(1)利用目的:

原子力発電所事故などにより環境中に放出された放射性セシウムは、森林に降着し、菌類や地 衣類、樹木などの有機物に取込・蓄積され、これまでキノコなどの菌類、およびウメノキゴケな ど地衣類から放射能が検出されている。森林内の有機物による放射性物質の取込・蓄積過程で大 きな役割を果たしているのが、森林内有機物構成分子と放射性セシウムとの錯体形成である。本 研究では森林内有機物を構成する典型的な分子を調査し、これらの分子とセシウムの選択的な錯 体形成機構について量子化学計算によるシミュレーションを用いた分子論的な解明を行う。キノ コの主要な色素成分であるノルバジオンAや、地衣類の主要な二次代謝物であるウスニン酸など に関して、アルカリ金属カチオンとの錯体分子構造を計算する。また、錯体形成におけるガス相 での反応エネルギーおよび水溶液中での反応自由エネルギーを計算し、選択性を定量的に見積も る。一般的な森林内有機物構成分子はそのサイズが大きいためその量子化学計算遂行のためには メモリ容量が大きくなり、また多くの分子構造候補に関して計算しなければならないことから相 当量の計算実行時間が必要となる。これらの理由から ICE X の利用が必要となった。

(2)利用内容·結果:

本研究では段階的な量子化学計算手法を採用した。第一段階では半経験的量子化学手法 PM6 と多コンポーネント人工力誘起反応(MC-AFIR)法を組み合わせて、錯体の安定構造の候補を 高速にスクリーニングする。この計算は化学反応経路探索プログラム GRRM と半経験的量子化 学ソフト MOPAC を組み合わせて機構内の Linux ワークステーション上で行った。第二段階で はこれらの安定構造候補それぞれに対して密度汎関数理論(DFT)により高精度な最適化計算を 行い、第三段階では連続誘電体モデル(PCM)により溶液効果を考慮する。第二段階、第三段 階の計算では ICE X に実装されている Gaussian16 を用いた。この計算手法により、ガス相中 および水溶液中の錯体の安定構造およびガス相中のエネルギー、水溶液中の自由エネルギーを計 算し、異種錯体同士の安定性を定量的に見積もった。

キノコ成分であるノルバジオン A やバジオン A、および地衣類成分であるシュウ酸やウスニ ン酸、アトラノリン、レカノール酸、キチン、樹木成分であるセキリン C、アガサレジノールな どの分子についてアルカリ金属カチオン錯体の分子構造やガス相エネルギー、水溶液自由エネル ギーの計算を行った。代表的成果として図1にノルバジオン A (NBA⁰) および二重・四重脱プ ロトン状態 (NBA²・NBA⁴) のアルカリ金属カチオン錯体の構造を示す。特に、NBA²のセシ ウム 錯体(d) はカリウム 錯体(e) と比較して分子構造が顕著に異なり、自由エネルギーも 6.3kcal/mol とかなり大きく低下する。これは、セシウム錯体がカリウム錯体よりはるかに安定 な状態にあり、この分子がセシウムに対して選択的錯体形成していることを示している。



図 1 ノルバジオン A (NBA⁰) および二重・四重脱プロトン状態 (NBA²・NBA⁴) のアルカリ 金属カチオン錯体の構造

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文発表

1) <u>H. Suno</u>, M. Machida, "Quantum chemical calculations for the norbadione A complexes with Cs+, K+, and Na+ in gas and aqueous phases", Chem. Phys. Lett. Vol.730, pp.26-31, 2019.

学会発表

2) <u>数納広哉</u>、町田昌彦、土肥輝美、"森林内での菌類有機分子とセシウムの選択的錯体形成機構の理論研究"、日本原子力学会 2018 年 秋の大会、岡山、2018.

(4) 今後の利用予定:

今後はこれまで用いてきた量子化学計算手法を用いて、さらに多くの菌類、地衣類、樹木成分 分子のセシウムカチオンとの選択的錯体形成に関する計算を行う予定である。

5.14.9 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

鈴土 知明 シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

金属材料の機械的特性、特に降伏強度と破壊靭性は構造物の安全性に関わる重要な指標である が、炭素などの微量な添加元素や放射線照射による微細な損傷で大きく変化する。また、将来の 核融合炉のプラズマ対向材では照射欠陥によって核セキュリティ上問題となるトリチウムが材 料内に吸蔵される。こうした影響をモデル化し予測することが既存材料の安全性評価や新規材料 の設計にとって重要な要素となるが、それらの現象は複雑であり様々な格子欠陥や不純物元素の 間の原子スケールでの相互作用より成り立っている。よって、実験による解析ではモデル化に必 要な微小な時間・空間スケールでの現象を捉えきれない。こうした相互作用を定量評価するには 大規模な第一原理計算をベースとしたマルチスケールモデリングが必要となる。

システム計算科学センターと原子力基礎工学研究センターは原子力構造材料の安全性評価と 新材料の設計に資するため、金属材料における格子欠陥や不純物元素の計算手法を開発してい る。令和元年度からはこれまでの軽水炉・核融合炉等の材料に加え加速器駆動核変換システム (ADS) 材料を対象に加え開発した手法の応用を行っていく予定である。

本課題では、現行の軽水炉や ADS・核融合炉で使用される構造材料内で照射によって起こる 原子論的変化の課程で材料劣化に影響を与えるものを切りだしてきて、原子論的な精度の高い計 算機シミュレーションを行うことにより、メソ・マクロスケールの劣化モデルの基礎データを得 ることを主目的とする。また、これらの研究の礎として材料挙動の基礎的な理解を深める必要が ある。特に、材料の塑性変形や破壊などのメカニズムに関して、原子論的な理解が得られていな い。そのため、照射効果の影響をより深く理解するため、それらのメカニズムの計算科学研究を 行う。

(2)利用内容·結果:

A) 核融合炉ではタングステン材が有望なプラズマ対向材料として注目されている。本材料中の照射欠陥は燃料であるトリチウムなどを吸収し、核セキュリティ上の問題となる。一方、タングステン内のレニウムやオスミウムは照射欠陥生成を抑制する効果が観察されている。よってそのメカニズムを理解することは安全性・経済性の観点から重要である。我々はレニウムやオスミウムをタングステンに入れると照射によって生成される格子間原子が空孔と再結合しやすくなることを計算結果から見出し、多くの実験データと合致することも証明した。このメカニズムに基づいて他の元素の合金効果を解析したところ、バナジウムやクロムなども格子間原子が混合ダンベルを作るため(図1)照射欠陥生成を抑制させる効果が期待できることが分かり、今後のプラズマ対向設計に重要な知見となった。



図1 タングステン結晶中のクロム格子間原子。第一原理計算から安定な 格子間原子位置を求めた。

B) リン(P) は鉄鋼材料に微量に含まれているが、粒界に集まってきて粒界の結合を弱くす ることが知られている。母相の原子と同程度の大きな原子であるため、格子間をすり抜けていく ことができないため、どのような経路で粒界に集まってくるのかが謎であった。そこで、粒界近 辺でのリンの安定性を第一原理計算を用いて解析し、同時に行った分子動力学の結果と合わせ て、リンは一度粒界に離れた数 nm 離れたところにトラップされ、その後徐々に空孔や格子間原 子などによって長時間かけて少しずつ粒界内部へと運ばれていくことが分かった。



図2 相分離した Fe-Cr 合金の硬化モデリングのための分子動力学シミュレーション。図中、 赤い点は Fe 原子、青い点は Cr 原子である。中央の線は刃状転位で、これが材料中 を進むのが困難になると塑性変形しにくくなるため硬化がモデル化できる。

C) 原子炉圧力容器の内張には鋳造ステンレス鋼が使われているが、その中に含まれる BCC 相はほぼ Fe-Cr の 2 元合金となっている。この合金は高温で相分離することにより硬化・脆化 する。これまでの硬化現象は経験的な理論式によって表現されてきたが、あまり信頼性が高くな かった。課題申請者と共同研究者らは、この現象を分子動力学(図 2) で再現することに成功し、 確かに相分離によって硬化が進むことの確証を得た。また、相分離指標である短距離秩序パラメ

ータと硬さはユニバーサルな線形関係にあることが明らかになった。この関係は新たに行われた 実験でも確認された。これにより、Fe-Cr 合金の硬化のメカニズムの理解が進み、将来内張材の 健全性評価に応用できると考えられる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 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 calculations with physically realistic damage models", Nature Communications Vol.9, pp.1084_1 1084_8 (2018).
- 2) 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, pp.15-21 (2018).
- 3) T. Tsuru, T. Suzudo, "First-principles calculations of interaction between solutes and dislocations in tungsten", Nuclear Materials and Energy, Vol.16, pp.221-225 (2018).
- 4) 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. Nuclear Materials, Vol.512, pp.450-479 (2018).
- 5) K. Ebihara, T. Suzudo, "Atomistic simulation of phosphorus segregation to $\Sigma 3$ (111) symmetrical tilt grain boundary in α -iron", Modeling and Simulation Materials Science Engineering, Vol.26, pp.065005_1 065005_10 (2018).
- 6) T. Suzudo, T. Onitsuka, K. Fukumoto, "Analyzing the cross-slip motion of screw dislocations at finite temperatures in BCC metals: molecular statics and dynamics studies", Modeling and Simulation Materials Science Engineering, Vol.27, No.6, pp.064001_1 - 064001_15.
- 7) T. Suzudo, "Modeling of Solute effects on radiation damage in W-based Alloys", COSIRES 2018 Shanghai, China, June 2018 (招待講演).
- 8) T. Suzudo, "Computational study of solute effect in Tungsten under irradiation", 14th IWSMT, Iwaki Japan, November 2018(招待講演).

(4) 今後の利用予定:

今後もこれまでの研究を継続していく。タングステン材についは自己格子間原子の1次元運動 が揺らぐことが第一原理計算から予測されている。この揺らぎによって、格子間原子の移動度が 大きく減少することが予測され、長期の微細構造発達への影響を精査する必要がある。また、分 子動力学シミュレーションを駆使して、き裂進展のメカニズム解明を進め、ADS 窓材、軽水炉 圧力容器、核融合炉プラズマ対向材料の脆化研究への応用への礎とする。

5.14.10 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 Nuclides Transport Inside Harbor of 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)の事故直後、歴史上かつてない規模の放射性核種の海洋への大 規模直接漏洩が起こった。その漏洩により、1F港湾内外のモニタリング濃度は極めて高い値を 示した一方、その影響は外洋にも及び、海洋環境への影響が取り沙汰された。尚、海洋は公海と して各国の沿岸に繋がっていることから、国際的関心が極めて高く、その影響を最小限に抑える ことは国の使命として認識されている。

上記の背景の下、国および東京電力ホールディングス株式会社(東電)は、港湾への漏洩を抑 止すべく、様々な対策工事を次々と実施しており、事故後8年近くが経った今では、その量は事 故当初と比べて大きく減少した。しかし、放射性核種によっては港湾内の濃度が未だ十分には低 下しておらず、港湾への流入経路が未だ存在していると考えられている(湾内から湾外へ濃度差 がある状態が続いている)。こうして、シミュレーションにより港湾内への流入箇所および流入 量を割り出すことが求められている。また、港湾の状況を適切に評価できるモニタリング地点を 予測することや、突発的高濃度汚染魚の出現の原因と考えられている濃度の高いホットスポット の発生位置やその濃度を予測することが求められている。計算機シミュレーションは、これらの 課題を解決するために有効な手段であるが、高精度な定量予測のためにはメートル単位のメッシ ュサイズを利用した高精度シミュレーションを行う必要がある。従って、シミュレーションには 大規模並列化が必須となり、その技術開発(並列性能が高く高速に実行できるアルゴリズムの開 発)も同時に実施する。

(2)利用内容•結果:

本研究では、1Fの港湾内の流動場シミュレーションをメートル単位の3次元格子で実施する ため、格子レベルより大きなスケールの複雑な流れについては、直接解く数値計算法であるLES 法(Large Eddy Simulation 法)を採用している。しかし、この方法は膨大な計算量を伴い、高 速に計算するためには、コードを並列化することが必須であり、大規模並列計算コードを開発し てきた。

本コードを用いて 1F 港湾内の流動場を評価したところ、海面と海底の流れが大きく異なり、 海面では開渠部のような港湾奥から港湾口へ向かう流れが、また、海底では港湾口から港湾内へ の流れが支配的になっていることが判明した。こうして、核種拡散を抑制するため、港湾に設置 されているシルトフェンスがない場合は、開渠部奥の排水口から港湾に流入する放射性核種を含 む排水(淡水)の多くが、海水との密度差で海面上を移動し、港湾口へ向かう海面の流れに従っ て、短時間で比較的高濃度なまま、港湾外へ流れ出ることが分かった。その一方、シルトフェン スのモデル化を行い、排水に含まれるトリチウム濃度を境界条件としたシミュレーションを実施 し、その結果、東電がモニタリングしている港湾内の地点でのトリチウム濃度の分布をほぼ再現 し、シルトフェンスに滞留性を向上させる機能があることを確認している。

次に、港湾外からの影響および港湾外からの影響を評価するため、既存コードを拡張し、地形 等を考慮して計算領域を入れ子状に配置し、各領域の格子点数が同等となるよう、外側の領域の メッシュサイズを拡大し、各領域の境界でのデータを適切に交換し、各々の領域を計算するコー ドを開発した。このコードを用いることで、1F 港湾内を数メートルの格子間隔でシミュレーシ ョンし、その情報を用いて数+ km 四方の海域までシミュレーションすることが可能となった。 実際に、降雨により排水に含まれる拡散物質の濃度が一時的に上昇した際のシミュレーションを 実施し、シルトフェンスを設置することで、港湾外への拡散速度が遅くなることを確認した(図 1 参照)。また、排水路を港湾外に設置した状態を想定し、拡散物質の振る舞いを評価した。そ の結果、排水路が港湾内に設置してある場合よりも短時間で外洋へ拡散することが確認できた (図 2 参照)。

(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, M. Machida, Communication avoiding Neumann expansion preconditioner for LOBPCG method: Convergence property of exact diagonalization method for Hubbard model, Parallel Computing is Everywhere, Advances in Parallel Computing, 32, IOP Press, pp. 27-36 (2018).
- S. Yamada, T. Imamura, M. Machida, "High Performance LOBPCG Method for Solving Multiple Eigenvalues of Hubbard Model: Efficiency of Communication Avoiding Neumann Expansion Preconditioner", SCFA 2018. Lecture Notes in Computer Science, vol. 10776, pp. 243-256 (2018).

学会発表

3) 山田進、町田昌彦、操上広志、北村哲浩、福島県浜通りダム湖におけるセシウム動態季節変動の数値解析、日本原子力学会2018年秋の大会、岡山、2018.

報告書等の提出

 メガフロートを固定した際の1F港湾の流動場の変化についてのシミュレーション結果を東 電に報告(2018 年 12 月報告).

(4) 今後の利用予定:

シミュレーションコードの機能の拡張を進めるとともに、様々な条件でのシミュレーションを 実施し、排水が外洋にどのように影響を与えているかの知見を得ることを目指す。また、計算科 学分野の最先端の知見を利用し、シミュレーションコードの高速化・高性能化を目指す。



図1 排水路を港湾外(矢印位置)に設置した際の、流入した物質の港湾周辺における降雨終了 後12時間後の濃度分布。開渠部ロのシルトフェンスの有無により、港湾内に滞留する量 が大きく異なっていることが確認できる。シミュレーションでは、降雨中は排水に単位量 の拡散物質が含まれるが、降雨終了後は含まれていないと想定している。



図2 排水路を港湾外(矢印位置)に設置した際の、流入した物質の港湾周辺における濃度分布。
 図1と同じ条件でシミュレーションを実施している。その結果、降雨中は港湾近くに分布しているが12時間後にはほとんど外洋に拡散することが確認できる。

5.14.11 ライブラリ公開のための連立一次方程式ソルバの整備

Maintenance of Linear Equation Solvers for Publishing as Subroutine Library

山田 進、佐々木 昭雄*、林 圭佐*、田村 智志*
 シミュレーション技術開発室
 *株式会社ヴィジブルインフォメーションセンター

(1) 利用目的:

原子力機構・システム計算科学センターが開発し公開してきた並列数値計算ライブラリ 「PARCEL」は並列計算機の黎明期に開発されたため、そのアルゴリズムの一部は、最先端の並 列計算機のアーキテクチャに適していない。そのため、最先端の並列計算機上で効率的に実行す るためには、そのアーキテクチャに合わせた改良を実施する必要がある。そこで、最先端の並列 計算機である ICE X を利用し、「PARCEL」の連立一次方程式ソルバを最先端の並列計算機のア ーキテクチャに適合するような改良を行い、その改良したソルバの動作確認や性能評価を実施し た。

(2)利用内容·結果:

本利用において以下の項目を実施した。

1) 通信処理の改良

オリジナルのコードでは、行列ベクトル積の並列計算において、受信したベクトルデータを利 用して、各プロセスがベクトル全体を再構築している。そのため、プロセスごとにベクトル全体 を格納するためのメモリ量が必要になる。そこで、メモリの使用量を減らすため、ベクトル全体 の再構築は行わず、受信したベクトルデータの位置と値から直接掛け算を行えるように改良し た。

また、計算領域の分割方法を考慮することで通信と演算を同時に実行する機能を追加した。この機能の有効性を ICE X を用いて評価したが、はっきりとした高速化の効果は確認できなかった。

2) 加法シュワルツ前処理の追加

計算領域の分割方法を考慮した加法シュワルツ前処理の機能を追加した。この際、必要最低限のメモリ量で計算できるように実装した。実際に、開発したコードを ICE X で実行し、テスト 問題に対して前処理が有効に作用し、収束性が向上することを確認した。

3) C 言語で開発した省通信連立一次方程式ソルバの Fortran への移植

これまでに、若干演算が増加するが、通信回数を減少させる「省通信化」と呼ばれる方法を用いて開発された連立一次方程式ソルバを C 言語で開発してきた。このソルバの省通信化されて

いる部分を Fortran に書き直して、「PARCEL」ライブラリのソルバに組み込み、ICE X 上で実行し、正常に動作することを確認した。

4) ライブラリ公開のための整備

各ルーチンで使用する引数の順序ができるだけ同じになるような大域的な修正を実施し、実際 に動作することを ICE X で確認した。また、各ルーチンの機能や引数を説明するマニュアルを 作成した。

以上に記した本利用の成果等を利用して開発された連立一次方程式ソルバ群を公開ライブラ リとして整備し、システム計算科学センターのホームページ^[1]において一般に公開しており、こ のページから連立一次方程式ソルバのソースコードをダウンロードできる。

[1] システム計算科学センター
> 公開ソフトウェア
> 大規模疎行列用連立一次方程式ライブラリ:PARCEL https://ccse.jaea.go.jp/software/PARCEL/

(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

5.14.12 第一原理計算による原子力材料劣化機構の研究

First-principles Study of the Degradation of Nuclear Materials

山口 正剛 シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

本研究は、液体金属脆化などの脆化メカニズムに対して、計算科学を用いて原子・電子レベル から明らかにし、原子炉材料の劣化対策や信頼性に科学的根拠を与えることで原子力分野に貢献 しようとするものである。機構内連携によりすでに加速器駆動未臨界炉(ADS)用ターゲット窓 材料の液体金属脆化機構の把握に関する計算を開始している。液体金属脆化機構と水素脆化機構 には、それらの破壊面形態における類似性から共通性があると言われており、両者を研究するこ とは互いの脆化メカニズム理解に効果的である。また、最近の鉄鋼材料の高強度化により顕著に なったメッキによる溶融亜鉛脆化にも通じるテーマである。

(2)利用内容·結果:

液体金属脆化に関して、図1のような第一原理計算を行った。固体と液体状態とのエネルギー 差は、求める吸着エネルギーに比べると小さいため、脆化をもたらす液体金属に対しては固体単 体の状態をエネルギーの基準とした。そして、液体金属原子が結晶粒界に吸着している場合、固 体中で置換して存在している(溶解状態の)場合、表面に吸着している場合のエネルギーを計算 した。

これまでに計算した液体金属元素はすべて表面吸着しやすいことが分かった。つまり、破面の 安定化をもたらすため、脆性破壊を促進する効果を持つことが分かった。ADS 炉の冷却材であ る鉛(Pb)とビスマス(Bi)も、鉄の表面エネルギーを大きく低下させる効果をもつことがわ かった。しかしながら、液体金属脆化が実用上問題にならないナトリウム(Na)も、鉄の表面 エネルギーを低下させる効果を持つことが分かった。

液体金属脆化機構の未解明課題の1つとして、液体金属脆化の選択性(Specificity)の問題が 知られている。例えば鉄鋼材料は高速炉の冷却材である液体 Na に対してはほとんど脆化を起こ さないが、メッキで用いる溶融亜鉛(Zn)に対して脆化を起こしやすいことが知られ、ADS 材 料(T91鋼)も鉛ビスマス中で脆化を起こしやすいことが知られている。そのような違いがどの ような要因から生じるかは未解明とされているが、その解明のヒントとなりうる結果を得た。

鉄に対する液体金属元素の溶解エネルギーと粒界への吸着エネルギーの第一原理計算結果を 整理すると、実験的に脆化を起こす(Embrittlement)元素と、脆化を起こさない(起こしにく い)(No embrittlement)元素がグラフ上ではっきり分かれ、これらのエネルギーにおける特徴 が脆化現象と密接に関連していることが示唆される。さらに、水素脆化を起こす水素は脆化を起 こすグループ、液体金属脆化を抑える酸素は脆化を起こさないグループに属している。この結果 は、液体金属脆化、水素脆化を含めて、脆性破壊に共通するメカニズムの根本的な特徴に関わる 結果と期待される。 Bcc FeのΣ3(111)粒界、格子、(111)表面にPb原子を配置した原子モデル



図1 計算に用いたセルと液体金属元素の配置

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

査読有論文

- M. Yamaguchi, K. Ebihara, M. Itakura, T. Tsuru, K. Matsuda, H. Toda, "First-principles calculation of multiple hydrogen segregation along aluminum grain boundaries", Comp. Mater. Sci. Vol. 156, pp.368-375 (2019).
- 2) 山口正剛、海老原健一、板倉充洋、都留智仁、「アルミニウムのポア内表面における水素解 離吸着と表面エネルギー低下」、軽金属、Vol.68, pp.588-595 (2018).

解説記事

- 7) 戸田裕之(九大)、山口正剛、他「水素分配制御によるアルミニウム合金の力学特性最適化」、 鉄と鋼、Vol.105, No. 2, pp. 240-253 (2019).
- 4) 町田昌彦、奥村雅彦、中村博樹、山口正剛、「ミクロ~マクロレベル現象の粒子ベースシミ ュレーション~課題と展望~第2回第一原理原子・分子シミュレーションの現状と原子力 分野での研究進展」、日本原子力学会誌アトモス、Vol.60, No.9, pp.552-556 (2018).

招待·依頼講演等

- 5) 山口正剛、「鉄鋼材料の焼戻し脆性及び粒界水素脆性における凝集エネルギー低下説」、第 60回材料強度と破壊総合シンポジウム(日本学術振興会先端材料強度第129委員会)、東京 大学本郷、2018年4月20日.
- 6) 山口正剛、海老原健一、板倉充洋、都留智仁、「アルミニウムのポア内表面における水素解 離吸着と表面エネルギー低下」、軽金属学会第134回春期大会、熊本大学、2018年5月26-27 日.
- 7) 山口正剛、「粒界偏析と粒界破壊に関する第一原理計算」、 材料の組織と特性部会 第5回鉄 鋼科学セミナー「鉄鋼材料におけるマルチスケール不均一性の評価と制御」、フクラシア品 川、2018年8月3日.
- 8) M. Yamaguchi, "Combined analysis of first-principles calculations and fracture mechanics experiments on intergranular embrittlement of a Ni-Cr steel", The Nuclear Materials Conference (Numat2018), Seattle, WA, USA, 14-18 October 2018.

主著講演

- 9) 山口正剛、板倉充洋、志賀基之、「一軸圧縮した LPSO マグネシウム合金の一般化積層欠陥 エネルギー低下」、軽金属学会第 134 回春期大会、熊本大学、2018 年 5 月 26-27 日.
- 10) 山口正剛、海老原健一、鈴土知明、板倉充洋、「鉄の液体金属脆化:第一原理計算」、日本金 属学会 2018 年秋期講演大会、東北大学、2018 年 9 月 19-21 日.
- 11) Multiscale Materials Modelling 2018, (MMM2018) M. Yamaguchi, "Combined analysis of first-principles calculations and fracture mechanics experiments on intergranular embrittlement of a Ni-Cr steel", Osaka, 2018/10/28 11/02.

(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行う。

5.14.13 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、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 ADS 設計のための熱流動解析等、原子力機構の流体シミ 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、ポスト京のようなエクサス 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。また、原子力機構以外でも核融 合分野や様々な産業応用分野においてエクサスケール流体計算技術に対して高いニーズがある。 しかしながら、消費電力の観点から導入が必須となっているアクセラレータ、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、新たな計算技術開発が必 須となっている。上記背景から本研究では以下の課題を解決する計算技術開発に取り組む。

- ・ 従来の CPU と大きく異なるハードウェアアーキテクチャのアクセラレータやメニーコアプ ロセッサの性能を引き出す最適化技術
- アクセラレータや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ボト ルネックを解決する省通信アルゴリズム
- ・ 問題規模の飛躍的拡大に耐えうるマルチスケール計算アルゴリズム

これらの開発技術をJUPITER等の主要な原子力流体計算コードに適用して、エクサスケール 流体シミュレーションを活用した原子力イノベーションの創出に貢献するとともに、開発技術を エクサスケール計算基盤技術として整備することで、原子力機構内外の幅広いエクサスケールシ ミュレーションの発展に貢献する。

(2)利用内容·結果:

以下の3つの課題について平成30年度の成果を説明する。

① 省通信行列ソルバの GPU 移植

3次元多相多成分熱流動解析コードJUPITER で開発した対称行列向けチェビシェフ基底省通 信共役勾配(CBCG)法ソルバを、GPU環境に移植・最適化した。移植にあたってはデータ依 存関係の観点でGPUにおける並列処理がそのままでは難しいブロックヤコビ前処理のアルゴリ ズムを GPU 向けに再構築することで、数万スレッドの GPU環境でも効率的な並列処理を可能 とし、1GPU(P100)/1CPU(Haswell)比で約 5 倍の性能向上を達成した[1]。また、プラズ マ流体解析コード GT5D で開発した非対称行列向け省通信一般化最小残差(CA-GMRES)法ソ ルバについても GPU 環境への移植を完了し、同程度の CPU 比性能向上を達成した(図 1)。



図1 ICEX (Haswell: 480GFlops) と Reedbush (P100 GPU: 5.3TFlops) におけるチェビ シェフ基底省通信 CG 法の処理性能。JUPITER (512×320×2048=3.4 億格子)の圧力 ポアソン方程式の処理時間を 16~64 プロセッサで比較。

② 汎用行列計算ライブラリ PARCEL における省通信行列ソルバの整備

JUPITER で開発した CBCG 法ソルバ、GT5D で開発した CA-GMRES 法ソルバをシステム 計算科学センターが公開しているオープンソース行列計算ライブラリ PARCEL のラインナップ に加えるために、これまで、各コード内の構造格子データ向けに最適化されていたソルバ実装を 非構造向けの CRS 形式、あるいは、帯行列向けの DIA 形式といった PARCEL で採用されてい る汎用データ形式に対して整備した。開発ソルバの精度検証、Intel/Gnu/PGI/Fujitsu 各コンパ イラに対するマルチプラットフォーム対応、他の汎用行列ライブラリとの性能比較、および、マ ニュアル 等のドキュメント 整備を進め、2019 年 3 月にライブラリを公開した (https://ccse.jaea.go.jp/ja/download/parcel.html)。現在の世界標準となっている行列計算ライ ブラリ PETSc との ICEX におけるベンチマークテストの結果、ブロック前処理付 CG 法の処理 時間で約 15%の高速化を達成し、約 50%のメモリ使用量削減を実現した。

③ 省通信マルチグリッド前処理 CG (MGCG) 法ソルバの開発

CG 法をはじめとするクリロフ部分空間法には悪条件の大規模問題になるほど収束特性が悪化
するというエクサスケール計算における致命的な欠点がある。この問題は大規模行列における固 有ベクトルのマルチスケール性(固有値分布)が関係していることから、マルチグリッド法前処 理を導入して収束特性の改善を図った。マルチグリッド法としては、標準的な V サイクルの幾 何的マルチグリッド法を採用し、各ステージのスムーザーとしては複数のアルゴリズムの収束特 性を比較し、前処理付チェビシェフ反復(P-CI)法を採用した。チェビシェフ反復法はガウスザ イデル法のような定常反復法が生成する近似解にチェビシェフ多項式を適用して近似解の精度 を向上するが、この処理には行列の最大固有値の計算が必要となる。P-CI 法の実装にあたり、 各反復で実行される差分計算(SpMV)における袖通信、および、クリロフ部分空間法に基づく 固有値計算(ランチョス法)で実行される All_Reduce 通信がボトルネックとなった。これを解 決するために P-CI 法のみを単精度で実装する混合精度手法により袖通信のデータ量を 1/2 に削 減し、さらに、固有値計算についても省通信ランチョス法を導入して All_Reduce 通信を 1/10 に削減する省通信アルゴリズムを設計した(図 2 左図)。新しい MGCG 法ソルバを JUPITER に適用し、約 900 億格子の超大規模問題の処理性能を Oakforest-PACS 全系を用いて測定した。 この結果、従来の CG 法ソルバに比べて、反復回数が 26,475 反復から 32 反復(1 反復あたり内 部反復 50×7 ステージ×2)に削減され、処理性能を一桁向上することに成功した[2](図 2 右図)。



- 図 2 省通信マルチグリッド前処理付 CG (MGCG) 法の混合精度実装(左)、および Oakforest-PACS における CG 法ソルバと MGCG 法ソルバの性能比較(右)。 JUPITER を用いた燃料集合体(UO₂,Zry,B₄C,SUS,and Air, 3200×2000×14160 =906 億格子)の溶融移行挙動解析における圧力ポアソンソルバの処理コストを 2,000~8,000 ノードで測定した結果を示す。
- [1] Yussuf et al., "Porting a state-of-the-art communication avoiding Krylov subspace solver to P100 GPUs", GTC Japan 2018, Tokyo, Japan, Sep. 13-14, 2018.
- [2] Idomura et al., "Communication Reduced Multi-time-step Algorithm for Real-Time Wind Simulation on GPU-based Supercomputers", ScalA18@SC18, Texas, USA, Nov. 11-16, 2018.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

査読付き原著論文

- 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.
- 2) Y. Idomura, T. Ina, S. Yamashita, N. Onodera, S. Yamada, and T. Imamura, "Communication avoiding multigrid preconditioned conjugate gradient method for extreme scale multiphase CFD simulations", 2018 IEEE/ACM 9th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems (scalA), Dallas, Texas, USA, 2018, pp. 17-24.

国際会議

- 3) Y. Idomura, T. Ina, A. Mayumi, S. Yamada, K. Matsumoto, Y. Asahi, T. Imamura, "Performance evaluation of a modified communication-avoiding generalized minimal residual method on many core platforms", SIAM Conference on Parallel Processing for Scientific Computing, SIAM-PP18, Tokyo, Japan, Mar. 7-10, 2018.
- 4) Y. Idomura, "Computational Challenges Towards Exascale Fusion Plasma Turbulence Simulations", 13th World Congress in Computational Mechanics, New York, USA, Jul. 22-27, 2018.
- 5) Y. Idomura, "Status of GT5D", 4th US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing, Princeton, USA, Jul. 30-31, 2018.
- 6) Yussuf Ali, T. Ina, N. Onodera, Y. Idomura, "Porting a state-of-the-art communication avoiding Krylov subspace solver to P100 GPUs", GTC Japan 2018, Tokyo, Japan (poster), Sep. 13-14, 2018.

(4) 今後の利用予定:

平成 30 年度に整備した PARCEL ライブラリのデータ形式の拡張を図り、さらに広範なアプ リケーションへの対応を目指すとともに、GPU 版行列ソルバの API を構築し、GPU 版 PARCEL として整備する。

5.14.14 可視化用粒子データを用いた In-Situ 可視化システムによる階層型データの可 視化

Visualization of Hierarchical Data with In-Situ Visualization System using Particle Data

河村 拓馬、井戸村 泰宏、小野寺 直幸 高度計算機技術開発室

(1)利用目的:

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、City LBM は非常に大規模かつ演算密度の高いメニーコア計算機向けに開発さ れており、ストレージへのデータ I/O がボトルネックとなっている。この状況下で可視化・解析 を実行するために、巨大な計算結果のストレージへのデータ I/O を避け、スーパーコンピュータ 上でシミュレーションと同時に可視化処理を行う、In-Situ 可視化が必要とされている。

システム計算科学センターが開発している In-Situ PBVR は、計算結果の巨大なデータをサイ ズの小さな可視化用粒子データに変換し、その粒子データを手元の PC に転送し描画することで 遠隔地のデータを可視化する可視化フレームワークである。可視化用粒子データはモンテカルロ 法によって生成され、シミュレーションの領域分割を変えること無く計算される。転送された粒 子データは自由な視点変更が可能であり、ストレージ上のファイルを介することでシミュレーシ ョンと非同期かつ対話的な可視化パラメータ変更が可能である。そしてユーザ入力の代数式によ り In-Situ でボリュームデータを合成する機能と、多変量データを可視化するために複数の色関 数・不透明度関数を合成する機能が実装されている。

In-Situ PBVR はモンテカルロ法を MPI/OpenMP で並列化することで高いスケーラビリティ を達成しているが、ユーザ入力の代数式を計算する数式処理がボトルネックとなり CPU の SIMD 演算を利用できていない。将来のエクサスケールシミュレーションでは、低電力で演算密 度を上げることができるメニーコア計算機が主流になると考えられているため、SIMD 演算の利 用は必須である。平成 30 年度は、数式処理のアルゴリズムを変更し、SIMD 演算を利用できる ように最適化を行い、メニーコア CPU を用いて性能評価を実施する。また、最適化した直交格 子向けの機能を階層型格子に対して拡張し、メニーコアの GPGPU を用いて動作の検証や性能 測定を実施する。

(2)利用内容·結果:

平成 30 年度は In-Situ PBVR の並列粒子生成処理に関して、第一に数式処理のアルゴリズム 変更による SIMD 最適化を行った。第二に、最適化した直交格子向けの手法を拡張し、階層型 格子向けの機能を開発した。

<粒子生成機能の SIMD 最適化>

従来の数式処理においてユーザが入力する数式は中置記法と呼ばれる一般的な記法による数

式であった。中置記法では演算子をオペランド (被演算子)の中間に記述し、さらに括弧によっ て部分式をくくることで演算の優先順位が変化 する。この演算順序を決定するために文字列のス キャンが繰り返し行われるため数式処理は低速 であった。

この問題を解決するために、逆ポーランド記法 を利用した数式処理を導入した。逆ポーランド記 法とは、オペランドの後ろに演算子が配置されて いる記法であり、括弧を使用しない。逆ポーラン ド記法では、用意したスタックに対してオペラン ドをプッシュし、それに対して演算子を作用させ ることで計算が行われるため、数式のスキャンは 一度で完了する。本手法では、ユーザが入力した 中置記法の数式を逆ポーランド記法に変換し粒 子生成に用いる。この変換は、中置記法に対して 木構造を生成し、それを帰りがけ順に探索するこ とで得られる(図1)。そして最先端の SIMD 演 算を利用するために、逆ポーランド記法のスタッ ク領域を SIMD 幅(ベクトル演算が可能なレジ スタのバイト数)に拡張し、演算子の関数をベク トル化することで、SIMD 幅分の粒子を処理でき るように拡張した。

本研究では最適化したコードを ICEX 上で開 発した。そして SIMD 演算の効果を検証するた めに、最先端の SIMD 命令である AVX512 が利 用できる Xeon Phi を搭載したスーパーコンピュ ータ Oakforest-PACS を使用した。実験では In-Situ PBVR を三次元の直交格子に対して固気 液三相の計算モデルを解く熱流動解析コード JUPITER に結合し、問題規模を 240×240× 1,920 (約1億格子) に固定し、ノード数 (コア







数)を24(1,536)から1,536(98,304)まで増加させて処理速度を測定した。実験に用いた粒 子数は約1,000万(~270MB)、画面解像度は1,024×1,024である。図2にシミュレーション、 従来の粒子生成、そして最適化した粒子生成に要する1タイムステップの処理時間を示す。粒子 生成時間は従来手法、提案手法ともに強スケーリングを示すが、提案手法は最適化の効果により 12倍以上高速化し、シミュレーションの3%未満の処理時間を達成した。

<階層格子向け粒子生成機能の開発>

最適化した In-Situ PBVR の粒子生成処理 を階層型格子に拡張した。開発に使用した階層 型流体解析コード CityLBMはGPGPUのメモ リレイアウトの構成に合わせて設計されてお り、リーフと呼ばれる 8³の直交格子が空間に 充填されている。階層格子を構成するデータの 配列は、リーフを構成する 3 次元の情報が 1 次元に並んだ合計 4 次元の配列であり、それ に合わせて粒子生成処理を拡張した。リーフ内 部の処理は開発した直交格子向けの SIMD 化 された手法を適用し、その外側にリーフ処理用 のループを持つ構成になっている。

開発した手法を機構所有の GPGPU クラス タにおける CityLBM による熱流動計算に適 用し、温度場に対して既存の可視化アプリケー ションである ParaView との比較を行った。 ParaView では CityLBM を In-Situ 可視化す ることができず、シミュレーションデータを出





表1 可視化性能の比較。

ネットワーク帯域幅は~11 [MB/sec]

	In-Situ PBVR	ParaView
転送量	$581 \mathrm{MB}$	$5144~\mathrm{MB}$
粒子生成	38 [sec/step]	
転送	52 [sec/step]	456 [sec/step]
画像生成	7.7 [sec/step]	900 [sec/step]

カし実験を行った。図3に In-Situ PBVR および ParaView で温度場を可視化した結果を示す。 この図より In-Situ PBVR は ParaView と同等の結果が得られることが確認できる。表1には In-Situ PBVR の処理時間と、出力したデータを転送し ParaView で可視化するまでの時間を示 している。この比較では In-Situ PBVR により約30倍近く高速に可視化結果を得られている。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

口頭発表

1) 河村拓馬、井戸村泰宏、"In-Situ PBVR の SIMD 最適化"、第46回可視化情報シンポジウム、明治大学駿河台キャンパス、2018年9月14-16日.

国際会議

2) N. Onodera, Y. Idomura, T. Kawamura, S. Uesawa, S. Yamashita, and H. Yoshida, "Fuel debris' air cooling analysis using a lattice Boltzmann method", 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE27), Tsukuba, Japan, May 19-24, 2019.

(4) 今後の利用予定:

今後は都市モデルに適用された CityLBM シミュレーションの汚染物質の発生源を In-Situ 可 視化システム上で操作する、In-Situ ステアリングの技術を開発する予定である。

5.14.15 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 Real-time Wind Simulation based on Lattice Boltzmann Method

> 小野寺 直幸、伊奈 拓也、井戸村 泰宏、中山 浩成⁺ 高度計算機技術開発室 + 環境・放射線科学ディビジョン 環境動態研究グループ

(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) が用いられており、観測されたデータを基に放射性物質の拡散挙動を計算する。申請者が共同研 究を行っている環境・放射線科学ディビジョン環境動態研究グループでは、予測精度の向上に向 けて非圧縮性 Navier-Stokes 方程式に基づく非定常解析手法(LOHDIM-LES)の開発を進めて いるが、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、より計 算機性能を最大限に引き出すことが可能な高速な解析手法の開発が必須となる。本課題では、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、中期計画内の環境動態解析 の高度化に貢献することを目的とする。

本研究を進めることで、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 気流解析への適用例が示され、工学分野の数値流体計算の発展に対して貢献できる。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。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。

(2)利用内容·結果:

平成 30 年度の研究計画として、①「格子ボルツマン法と観測結果および非圧縮性 Navier-Stokes 解析手法(LOHDIM-LES)との詳細な比較」、および、②「格子ボルツマン法へ のデータ同化を用いたメソスケールモデルとの融合と最適化」を予定しており、それに対して、 風洞実験・野外拡散実験に対する検証計算およびマルチスケールの実時間解析の実現のための高 速化手法の開発を実施した。これにより、3 件の査読付き国際会議での採択および 3 件の学会発 表の成果が得られた((3)成果リスト)。

①の「風洞実験との比較」では、部分的に格子解像度を変化することが可能な AMR (Adaptive Mesh Refinement) 法を適用した CityLBM にて産総研の風洞実験の検証計算を行い、従来の定常流体解析手法である RANS 解析および実験値との比較を行った。その結果、風洞内の速度分 布および汚染物質の濃度分布において、RANS に対して高い精度で予測が可能であること、および実験結果を再現可能であることが示された(図 1)。

②の「メソスケールモデルとの融合と最適化」では、広域の汚染物質の実時間拡散解析の実現 に向けて、CityLBM の更なる高速化およびメソスケールでの解析・観測結果との融合手法を構 築した。最新のマルチスケール解析手法であるブロック AMR 法に対して、通信削減手法を提案 することで、東工大の TSUBAME3.0 において 64%の通信量の削減に成功すると共に、1m 解像 度 2km 四方の実時間解析をおよそ 100 台の GPU にて実現できることが示された (図 2)。また、 メソスケール解析との融合においても領域気象モデルである WRF と連携することで、高解像度 な風況解析手法を構築した。

以上の発展により、次世代の大型計算機を用いた実時間汚染物質拡散解析の実現の目処が立 ち、核セキュリティの向上および多くの工学分野への貢献が可能であることが示された。



図1 汚染物質の発生源より後方位置(x=65,100,200,300mm)での鉛直方向の汚染物質濃度。
 CityLBM の解析において、AMR 法の解像度が低い格子(Lv.3)から1次元方向に2倍
 解像度が高い格子(Lv.2)、4倍解像度が高い格子(Lv.3)を用いることで、実験値に収束していることが確認できる。



図2 TSUBAME 3.0 (東京工業大学) における GPU (NVIDIA Tesla P100) を用いて計測した、従来の時間発展法(青四角)と新しい通信削減型時間発展法(赤丸)の計算性能。提案手法の適用により、実時間処理に必要な台数が 400 台から 100 台へと削減された。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) N. Onodera, Y. Idomura, T. Kawamura, S. Uesawa, S. Yamashita, and H. Yoshida, "FUEL DEBRIS' AIR COOLING ANALYSIS USING A LATTICE BOLTZMANN METHOD", Proc. of the 27th International Conference on Nuclear Engineering, 2019.
- 2) N. Onodera, Y. Idomura, Y. Ali, and T. Shimokawabe, "Communication reduced multi-time-step algorithm for the AMR-based lattice Boltzmann method on GPU-rich supercomputers", The first R-CCS International Symposium (Poster), Kobe, 2019.
- 3) N. Onodera and Y. Idomura, "Acceleration of Plume Dispersion Simulation using Locally Mesh-refined Lattice Boltzmann Method", Proceedings of the 26th International Conference on Nuclear Engineering, 2018.
- 4) N. Onodera, Y. Idomura, Y. Ali, and T. Shimokawabe, "Communication Reduced Multi-time-step Algorithm for Real-time Wind Simulation on GPU-based Supercomputers", 9th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems (ScalA) held in conjunction with SC18, 2018.
- 5) 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, "局所細分化格子を用いた格子ボルツマン法へのテンポラルブ ロッキング法の適用", 第23 回計算工学講演会, 名古屋, 2018.
- 6) 小野寺 直幸, 井戸村 泰宏, アリ ユスフ, 下川辺 隆史, "適合細分化格子ボルツマン法によ る熱対流解析", 第 32 回数値流体力学シンポジウム, 東京, 2018.

(4) 今後の利用予定:

CityLBM コードに対して、学際大規模情報基盤共同利用・共同研究拠点(JHPCN)課題で申請している GPU スーパーコンピュータ TSUBAME 3.0 を用いて開発・検証を進めていく。

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、リース期間中、大きなトラブ ルもなく順調に利用が進み、平成 30 年度のコア利用状況は最高 96.0%を達成するなど高率で推移 している。次期大型計算機システムの更新については、量子科学技術研究開発機構との共同仕様 策定委員会において、これまで計 4 回(平成 30 年 5 月、12 月、平成 31 年 3 月、令和元年 9 月) 開催し、システムの全体性能、ソフトウェア機能、ベンチマークテストプログラム等について議 論を重ね最終仕様書を策定した。今後、システムの整備にあたっては、令和 2 年 12 月上旬の運用 開始予定に向けて進めている。

本報告集をまとめるにあたり、高性能計算技術利用推進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30年度における大型計算機システムの利用状況を調査し、利用コア時間の多かった利用者に報告書作成を依頼した。利用者から提出された報告書を編集・校正し、本報告集が完成した。多忙にもかかわらず報告書を作成して頂いた利用者の皆様並びに本報告集作成にご協力を頂いた関係者各位にこの場を借りて感謝申し上げる。

令和元年9月

編集ワーキンググループ リーダー:大谷 孝之 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

		ICE X	
	バッチ処理 件数	会話処理 件数	コア時間 (h)
4月	19,868	5,526	33,754,027
5月	22,627	5,813	41,254,536
6月	47,579	6,243	40,697,135
7月	28,188	5,486	33,950,351
8月	19,681	5,479	42,566,153
9月	18,649	3,983	41,076,990
10 月	13,910	5,046	41,963,240
11 月	16,558	4,726	41,618,125
12 月	12,799	4,211	38,097,277
1月	21,706	5,151	36,974,538
2 月	59,653	5,224	37,502,087
3月	98,277	4,808	42,725,589
合計	379,495	61,696	472,180,048

表 A.1 平成 30 年度大型計算機システムの利用実績

付録B

	ICE X	Linux	パソコン	ネットワーク	その他 (利用一般)	合計
4月	45	0	1	13	8	67
5月	32	0	1	4	5	42
6月	49	0	1	6	11	67
7月	41	0	1	6	11	59
8月	42	0	1	6	13	62
9月	46	0	1	5	8	60
10 月	39	0	1	3	19	62
11 月	43	2	1	4	18	68
12 月	32	0	1	6	6	45
1月	36	2	2	4	6	50
2 月	29	2	1	4	10	46
3月	33	2	0	3	7	45
合計	467	8	12	64	122	673

表 B.1 平成 30 年度利用相談件数(可視化を除く)

表 B.2 平成 30 年度可視化相談件数

1. 🕫	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(88件)	
2	PC 版 MicroAVS インストール支援(16 件)	
3	PC版 AVS/Express インストール支援(6 件)	
4	Ensight DR インストール支援(2 件)	

2. 🖬	2. 可視化ツール提供等	
1	ParaView データ変換ツールの作成支援	
2	可視化処理ガイドの作成支援	
3	可視化ツール ParaView の環境整備	

著者名別 論文索引

A-Z

Ari Hamdani ·····19
Douglas Chase Rodriguez
Hai Quan Ho ·····101
Mihalache Ovidiu ·····115
Miradji Faoulat ······67
Rossi Fabiana ·····131

あ

安部	晋一郎	62
阿部	陽介	88

い

五十嵐	、 誉廣
石垣	将宏
石﨑	梓
石塚	悦男
板倉	充洋140
井手	広史
井戸村	泰宏
伊奈	拓也167,174
岩元	洋介

う

上澤	伸一郎
内堀	昭寛107

え

海老原	健一		·····134
-----	----	--	----------

お

大川	富雄85
大西	弘明
岡垣	百合亜
小川	達彦
奥村	雅彦
小瀬	裕男
小野	綾子
小野╡	産 直幸48, 171, 174

か

門脇	正尚
河村	拓馬

き

菊地	紀宏
北村	竜明121, 124

2

米田	政夫
菰田	宏

さ

坂本 健作
佐々木 昭雄162
佐藤 大樹

l

志賀	基之
柴田	卓弥121, 124

		は
橋本	慎太郎	
林圭	佐	
平岡	大和	ひ
		\$
深谷	裕司	
古田	琢哉	
堀口	直樹	ℓ £ 74, 82
		ŧ
前田	亮	
町田	昌彦	137, 143, 148, 159
松田	規宏	
松田	洋樹	
真弓	明恵	
村井	直樹	む 34
	Hr (I	£
毛利	哲也	
戊不 ※	今川	
秫 泹	小永	
		や
柳沢	秀樹	

柳沢	秀樹
山口	正剛
山下	晋
山田	進
山田	知典121, 124

す

菅原	隆徳
杉本	貴則93
鈴木	貴行
鈴木	知史64
鈴土	知明156
数納	広哉154

せ

瀬谷 道夫……131

そ 曽我 彰 ………113

た

高瀬	和之121, 124
高松	邦吉104
田中	正暁110
田村	智志162

ち

チャイ ラ	プンフィ	
-------	------	--

	2
土屋	晴文
都留	智仁88

	τ
寺田	敦彦126

な

永井	佑紀143
永武	拓
中村	博樹137, 146, 148
中山	浩成48,174

ゆ

ユスフ	•	P	IJ	·	• •	·	• •	•••	•	• •	••	·	•••	•	••	•	• •	•	• •	•	•	••	•	••	• •	••	·	••	•	· ·]	16	57

よ

横田	光史
吉川	龍志
吉田	啓之
吉廣	保

わ

若井田	;	育夫121, 1	124
渡部	晃]	107

_

表 1. SI 基本単位							
甘大昌	SI 基本単位						
本平里	名称	記号					
長さ	メートル	m					
質 量	キログラム	kg					
時 間	秒	s					
電 流	アンペア	Α					
熱力学温度	ケルビン	Κ					
物質量	モル	mol					
光度	カンデラ	cd					

表 2. 基本単位を用いて表されるSI組立単	位の例
AI 立 是 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 さ , 速 度 メートル毎秒	m/s
加 速 度メートル毎秒毎秒	m/s^2
波 数 毎メートル	m ⁻¹
密度,質量密度キログラム毎立方メートル	kg/m ³
面 積 密 度 キログラム毎平方メートル	kg/m ²
比体積 立方メートル毎キログラム	m ³ /kg
電 流 密 度 アンペア毎平方メートル	A/m ²
磁 界 の 強 さ アンペア毎メートル	A/m
量 濃 度 ^(a) , 濃 度 モル毎立方メートル	mol/m ⁸
質量濃度 キログラム毎立方メートル	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	1
比 透 磁 率 (b) (数字の) 1	1
(a) 量濃度 (amount concentration) は臨床化学の分野では	t物質濃度

(substance concentration)ともよばれる。
 (b) これらは無次元量あるいは次元1をもつ量であるが、そのことを表す単位記号である数字の1は通常は表記しない。

表3. 固有の名称と記号で表されるSI組立単位

			SI 租立单位	
組立量	名称	記号	他のSI単位による 表し方	SI基本単位による 表し方
平 面 角	ラジアン ^(b)	rad	1 ^(b)	m/m
立体鱼	ステラジアン ^(b)	$sr^{(c)}$	1 (b)	m^2/m^2
周 波 数	ヘルツ ^(d)	Hz	-	s ⁻¹
力	ニュートン	Ν		m kg s ⁻²
E 力 , 応 力	パスカル	Pa	N/m ²	$m^{-1} kg s^{-2}$
エネルギー,仕事,熱量	ジュール	J	N m	$m^2 kg s^2$
仕 事 率 , 工 率 , 放 射 束	ワット	W	J/s	m ² kg s ⁻³
電 荷 , 電 気 量	クーロン	С		s A
電位差(電圧),起電力	ボルト	V	W/A	$m^2 kg s^{\cdot 3} A^{\cdot 1}$
静電容量	ファラド	F	C/V	$m^{-2} kg^{-1} s^4 A^2$
電気抵抗	オーム	Ω	V/A	$m^2 kg s^{-3} A^{-2}$
コンダクタンス	ジーメンス	s	A/V	$m^{2} kg^{1} s^{3} A^{2}$
磁東	ウエーバ	Wb	Vs	$m^2 kg s^2 A^{-1}$
磁束密度	テスラ	Т	Wb/m ²	$kg s^{-2} A^{-1}$
インダクタンス	ヘンリー	Н	Wb/A	$m^2 kg s^2 A^2$
セルシウス温度	セルシウス度 ^(e)	°C		K
光東	ルーメン	lm	cd sr ^(c)	cd
照度	ルクス	lx	lm/m ²	m ⁻² cd
放射性核種の放射能 ^(f)	ベクレル ^(d)	Bq		s ⁻¹
吸収線量,比エネルギー分与, 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	カタール	kat		s ⁻¹ mol

酸素活性(1) ダール kat [s¹ mol]
 (w)SH接頭語は固有の名称と記号を持つ組立単位と組み合わせても使用できる。しかし接頭語を付した単位はもはや コヒーレントではない。
 (h)ラジアンとステラジアンは数字の1に対する単位の特別な名称で、量についての情報をつたえるために使われる。 実際には、使用する時には記号rad及びsrが用いられるが、習慣として組立単位としての記号である数字の1は明 示されない。
 (a)測光学ではステラジアンという名称と記号srを単位の表し方の中に、そのまま維持している。
 (d)へルツは周期現象についてのみ、ペラレルは放射性核種の統計的過程についてのみ使用される。 セルシウス度はケルビンの特別な名称で、セルシウス温度を表すために使用される。それシウス度とケルビンの
 (a)やレシウス度はケルビンの特別な名称で、温度器や温度開隔を表す整備はどもらの単位で表しても同じである。
 (b)放射性核種の放射能(activity referred to a radionuclide) は、しばしば誤った用語で"radioactivity"と記される。
 (g)単位シーベルト (PV,2002,70,205) についてはCIPM物告2 (CI-2002) を参照。

表4.単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

	S	[組立単位	
組立量	名称	記号	SI 基本単位による 表し方
粘度	パスカル秒	Pa s	m ⁻¹ kg s ⁻¹
カのモーメント	ニュートンメートル	N m	m ² kg s ⁻²
表 面 張 九	リニュートン毎メートル	N/m	kg s ⁻²
角 速 度	ラジアン毎秒	rad/s	$m m^{-1} s^{-1} = s^{-1}$
角 加 速 度	ラジアン毎秒毎秒	rad/s^2	$m m^{-1} s^{-2} = s^{-2}$
熱流密度,放射照度	ワット毎平方メートル	W/m^2	kg s ⁻³
熱容量、エントロピー	ジュール毎ケルビン	J/K	$m^2 kg s^{2} K^{1}$
比熱容量, 比エントロピー	ジュール毎キログラム毎ケルビン	J/(kg K)	$m^{2} s^{2} K^{1}$
比エネルギー	ジュール毎キログラム	J/kg	$m^2 s^2$
熱伝導率	「ワット毎メートル毎ケルビン	W/(m K)	m kg s ⁻³ K ⁻¹
体積エネルギー	ジュール毎立方メートル	J/m ³	m ⁻¹ kg s ⁻²
電界の強さ	ボルト毎メートル	V/m	m kg s ⁻³ A ⁻¹
電 荷 密 度	クーロン毎立方メートル	C/m ³	m ⁻³ s A
表面電荷	「クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ⁻² s A
電東密度, 電気変位	クーロン毎平方メートル	C/m ²	m ² s A
誘 電 卒	コアラド毎メートル	F/m	$m^{-3} kg^{-1} s^4 A^2$
透 磁 率	ペンリー毎メートル	H/m	m kg s ⁻² A ⁻²
モルエネルギー	ジュール毎モル	J/mol	$m^2 kg s^2 mol^1$
モルエントロピー, モル熱容量	ジュール毎モル毎ケルビン	J/(mol K)	$m^2 kg s^{-2} K^{-1} mol^{-1}$
照射線量(X線及びγ線)	クーロン毎キログラム	C/kg	kg ⁻¹ s A
吸収線量率	ダレイ毎秒	Gy/s	$m^{2} s^{3}$
放 射 強 度	ワット毎ステラジアン	W/sr	$m^4 m^{-2} kg s^{-3} = m^2 kg s^{-3}$
放射輝度	ワット毎平方メートル毎ステラジアン	$W/(m^2 sr)$	m ² m ⁻² kg s ⁻³ =kg s ⁻³
酵素活性濃度	カタール毎立方メートル	kat/m ³	$m^{-3} s^{-1} mol$

表 5. SI 接頭語									
乗数	名称	記号	乗数	名称	記号				
10^{24}	э 9	Y	10 ⁻¹	デシ	d				
10^{21}	ゼタ	Z	10^{-2}	センチ	с				
10^{18}	エクサ	E	10^{-3}	ミリ	m				
10^{15}	ペタ	Р	10^{-6}	マイクロ	μ				
10^{12}	テラ	Т	10^{-9}	ナノ	n				
10^{9}	ギガ	G	10^{-12}	ピコ	р				
10^{6}	メガ	М	10^{-15}	フェムト	f				
10^3	+ 1	k	10^{-18}	アト	а				
10^{2}	ヘクト	h	10^{-21}	ゼプト	z				
10^{1}	デカ	da	10^{-24}	ヨクト	v				

表6.SIに属さないが、SIと併用される単位								
名称	記号	SI 単位による値						
分	min	1 min=60 s						
時	h	1 h =60 min=3600 s						
日	d	1 d=24 h=86 400 s						
度	۰	1°=(π/180) rad						
分	,	1'=(1/60)°=(π/10 800) rad						
秒	"	1"=(1/60)'=(π/648 000) rad						
ヘクタール	ha	1 ha=1 hm ² =10 ⁴ m ²						
リットル	L, 1	1 L=1 l=1 dm ³ =10 ³ cm ³ =10 ⁻³ m ³						
トン	t	$1 t=10^3 kg$						

表7. SIに属さないが、SIと併用される単位で、SI単位で

表される数値が実験的に得られるもの								
3	名称		記号	SI 単位で表される数値				
電 子	ボル	ŀ	eV	1 eV=1.602 176 53(14)×10 ⁻¹⁹ J				
ダル	- F	\sim	Da	1 Da=1.660 538 86(28)×10 ⁻²⁷ kg				
統一原	子質量単	単位	u	1 u=1 Da				
天 文	単	位	ua	1 ua=1.495 978 706 91(6)×10 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	Μ	1 M=1852m
バーン	b	$1 \text{ b}=100 \text{ fm}^2=(10^{-12} \text{ cm})^2=10^{-28} \text{ m}^2$
ノット	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネーパ	Np	SI単位しの粉結的な間径は
ベル	В	対数量の定義に依存。
デシベル	dB -	

表9. 固有の名称をもつCGS組立単位

名称	記号	SI 単位で表される数値
エルグ	erg	1 erg=10 ⁻⁷ J
ダイン	dyn	1 dyn=10 ⁻⁵ N
ポアズ	Р	1 P=1 dyn s cm ⁻² =0.1Pa s
ストークス	St	$1 \text{ St} = 1 \text{ cm}^2 \text{ s}^{\cdot 1} = 10^{\cdot 4} \text{ m}^2 \text{ s}^{\cdot 1}$
スチルブ	$^{\mathrm{sb}}$	$1 \text{ sb} = 1 \text{ cd cm}^{-2} = 10^4 \text{ cd m}^{-2}$
フォト	ph	1 ph=1cd sr cm ⁻² =10 ⁴ lx
ガ ル	Gal	1 Gal =1cm s ⁻² =10 ⁻² ms ⁻²
マクスウエル	Mx	$1 \text{ Mx} = 1 \text{ G cm}^2 = 10^{-8} \text{Wb}$
ガウス	G	1 G =1Mx cm ⁻² =10 ⁻⁴ T
エルステッド ^(a)	Oe	1 Oe ≙ (10 ³ /4 π)A m ⁻¹
(a) 3 元系のCGS単位系	とSIではi	直接比較できないため、等号「 🌢 」

は対応関係を示すものである。

表10. SIに属さないその他の単位の例						
名称					記号	SI 単位で表される数値
キ	ユ		IJ	ſ	Ci	1 Ci=3.7×10 ¹⁰ Bq
$\scriptstyle u$	\sim	ŀ	ゲ	\sim	R	$1 \text{ R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{C/kg}$
ラ				K	rad	1 rad=1cGy=10 ⁻² Gy
$\scriptstyle u$				Д	rem	1 rem=1 cSv=10 ⁻² Sv
ガ		$\boldsymbol{\mathcal{V}}$		7	γ	$1 \gamma = 1 \text{ nT} = 10^{-9} \text{T}$
フ	T.		N	"		1フェルミ=1 fm=10 ⁻¹⁵ m
メー	ートル	/系	カラゞ	ット		1 メートル系カラット= 0.2 g = 2×10 ⁻⁴ kg
ŀ				ル	Torr	1 Torr = (101 325/760) Pa
標	準	大	気	圧	atm	1 atm = 101 325 Pa
+1	ы		11	-	cal	1 cal=4.1858J(「15℃」カロリー), 4.1868J
/3	Ц		9			(「IT」カロリー), 4.184J(「熱化学」カロリー)
3	ク			~	u	$1 \mu = 1 \mu m = 10^{-6} m$