



JAEA-Review

2020-021

DOI:10.11484/jaea-review-2020-021

令和元年度 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 FY2019  
(April 1, 2019 - March 31, 2020)

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

February 2021

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

JAEA-Review

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

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

This report is issued irregularly by Japan Atomic Energy Agency.  
Inquiries about availability and/or copyright of this report should be addressed to  
Institutional Repository Section,  
Intellectual Resources Management and R&D Collaboration Department,  
Japan Atomic Energy Agency.  
2-4 Shirakata, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1195 Japan  
Tel +81-29-282-6387, Fax +81-29-282-5920, E-mail:ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2021

令和元年度  
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

(2020年9月2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、令和元年度における大型計算機システムを利用した研究開発の成果を中心に、それを支える利用支援、利用実績、システムの概要等をまとめたものである。

Summaries of Research and Development Activities  
by using Supercomputer System of JAEA  
in FY2019 (April 1, 2019 – March 31, 2020)

HPC Technology Promotion Office

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

(Received September 2, 2020)

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 FY2019, 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 FY2019, as well as user support, operational records and overviews of the system, and so on.

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

## 目 次

1. はじめに.....	1
2. 原子力機構の大型計算機システム環境.....	4
3. 令和元年度における計算機利用実績.....	6
3.1 システム稼働率・コア利用率.....	6
3.2 大型計算機システムの組織別利用実績.....	6
4. 大型計算機システムの利用支援.....	9
4.1 計算機利用における支援.....	10
4.1.1 利用相談.....	10
4.1.2 プログラム開発整備.....	10
4.1.3 プログラム最適化チューニング.....	13
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）.....	15
5. 大型計算機システム利用による研究成果.....	16
5.1 安全研究センター.....	16
5.1.1 BWR 燃料被覆管内複数亀裂の進展による損傷過程の解析.....	16
5.1.2 航空機モニタリングにおける地形影響評価と補正手法の開発.....	19
5.1.3 数値流体力学による水素火炎加速予測に関する研究.....	21
5.1.4 CIGMA 装置を用いた外面冷却時の格納容器内自然対流実験に関する数値解析.....	23
5.1.5 水平配管およびダウンカム内での二液混合に関する LES 解析；OECD/NEA TAMU CFD ベンチマークテスト.....	26
5.1.6 IPRESKA CFD ベンチマーク Step 2 解析.....	28
5.1.7 オープンソース CFD ツールボックス OpenFOAM の並列計算性能の評価.....	31
5.1.8 原子力施設の地震応答解析手法の高度化.....	33
5.1.9 GTN モデルによる亀裂を有する配管の延性破壊シミュレーション.....	35
5.2 J-PARC センター.....	38
5.2.1 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.....	38
5.2.2 鉛標的に対する中性子エネルギースペクトルの不確かさ伝播計算.....	41
5.2.3 J-PARC 中性子実験装置における遮へい体移動による遮へい性能への影響.....	44

5.2.4	J-PARC 非弾性中性子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 .....	46
5.2.5	鉄系超伝導体の第一原理計算.....	49
5.3	原子力基礎工学研究センター .....	50
5.3.1	海洋拡散シミュレーションモデル SEA-GEARN への鉛直拡散係数モデルの導入 .....	50
5.3.2	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....	52
5.3.3	化学輸送モデル GEARN-FDM によるヨウ素 129 の陸域排出量の推定.....	55
5.3.4	DCHAIN 及び PHITS の改良.....	57
5.3.5	PHITS ユーザ入力支援ソフトウェアの作成.....	59
5.3.6	PHITS における分散分析に基づく評価機能の開発.....	62
5.3.7	PHITS による炭素線治療ビームの再現.....	65
5.3.8	PHITS のエラー出力に関する改良.....	67
5.3.9	TOF-PGA を用いた水素測定における試料形状の影響.....	69
5.3.10	中性子共鳴透過分析装置の高度化に向けた解析.....	72
5.3.11	中性子線源を用いた可搬型アクティブ中性子法装置のシミュレーション.....	74
5.3.12	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
5.3.13	ADS 設計のための詳細熱流動解析.....	79
5.3.14	機構論的限界熱流束手法確立のための二相流挙動解析.....	82
5.3.15	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.....	85
5.3.16	界面追跡法に基づく混相流解析手法開発.....	88
5.3.17	原子炉建屋におけるエアロゾル粒子挙動評価手法の開発.....	91
5.3.18	原子炉内移行時の核分裂生成物挙動解析ツール CHASER の開発.....	94
5.3.19	迷路における多重散乱ガンマ線による線量の解析.....	97
5.3.20	ADS 材料の第一原理計算.....	99
5.3.21	合金化と組織制御のための原子・電子シミュレーション.....	101
5.3.22	第一原理計算による SA 時の Cs 吸着挙動評価とウランリン酸化合物の評価.....	104
5.3.23	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.....	107
5.4	先端基礎研究センター.....	109
5.4.1	大規模殻模型計算による原子核の超変形状態の記述.....	109
5.4.2	低次元強相関係の基底状態および励起ダイナミクスの研究.....	112
5.4.3	除染除去土壌再生利用に向けた鉱物の光触媒機能探索.....	115

5.5	物質科学研究センター.....	118
5.5.1	セシウム溶媒抽出のための分子探索.....	118
5.5.2	長距離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.....	121
5.6	高温ガス炉研究開発センター.....	123
5.6.1	MCNP6によるHTTR炉心の3次元中性子束分布計算.....	123
5.7	高速炉サイクル研究開発センター.....	125
5.7.1	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.....	125
5.7.2	高速炉静的機器のクリープ疲労損傷に対する信頼性評価.....	128
5.7.3	SPIRALコードによる低流量条件下における実規模燃料集合体内熱流動解析.....	131
5.7.4	連続エネルギーモンテカルロコードMVPを用いたナトリウム冷却高速炉MOX燃料炉心の核特性の解析.....	134
5.7.5	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.....	136
5.8	敦賀総合研究開発センター.....	139
5.8.1	実験データを用いたハルバツハ配列EMATの磁束の再現シミュレーション.....	139
5.9	燃料サイクル設計部.....	142
5.9.1	CNWG・先進燃料物性計算科学研究.....	142
5.10	炉設計部.....	145
5.10.1	プルトニウム燃焼高温ガス炉設計の二重非均質による自己遮蔽効果.....	145
5.11	廃炉国際共同研究センター.....	148
5.11.1	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).....	148
5.11.2	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).....	151
5.11.3	福島第一原子力発電所廃炉のための詳細核種インベントリデータベースの開発.....	153
5.11.4	JUPITERによるジルカロイ酸化/水素吸蔵評価.....	154

5.11.5	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 .....	156
5.11.6	含水廃棄物等の水分蒸発挙動コードの開発 .....	158
5.12	核不拡散・核セキュリティ総合支援センター .....	160
5.12.1	保障措置検証のための遅延ガンマ線分光法開発 .....	160
5.12.2	福島第一原子力発電所事故で放出された放射性物質の半球規模大気拡散解析 ..	163
5.12.3	レーザー駆動中性子源用のモデレータ開発 .....	165
5.13	システム計算科学センター .....	168
5.13.1	材料機能における核量子効果の計算科学研究 .....	168
5.13.2	コンピュータシミュレーションを使用した超伝導中性子検出器の動作の分析 ..	171
5.13.3	原子力分野での物性計算科学技術の高度化 .....	174
5.13.4	環境中の放射性物質の挙動に関する数値シミュレーション .....	176
5.13.5	不純物元素の粒界偏析に関する分子動力学シミュレーション .....	180
5.13.6	粘土鉱物へのラジウムの吸着構造の解明 .....	182
5.13.7	第一原理計算による原子力材料劣化機構の研究 .....	185
5.13.8	福島第一原子力発電所港湾内の放射性物質動態解析シミュレーション .....	188
5.13.9	水素材料の第一原理分子動力学計算 .....	191
5.13.10	菌類・地衣類代謝物の放射性セシウム錯体形成機構の分子シミュレーション研究 .....	194
5.13.11	原子・分子シミュレーションによる核燃料の物性評価 .....	196
5.13.12	転位と溶質元素の第一原理計算 .....	198
5.13.13	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 .....	200
5.13.14	大規模流体計算の超並列計算技術の開発 .....	203
5.13.15	モニタリングポストの測定結果を使った空間線量率の時間変化の推定 .....	207
6.	おわりに .....	210
	付 録 .....	211
	著者名別 論文索引 .....	213

## Contents

1. Introduction .....	1
2. Supercomputer System of JAEA.....	4
3. Computer Usage Records in FY2019.....	6
3.1 Availability and Utilization Rate .....	6
3.2 Sector Computer Time .....	6
4. User Support of Supercomputer System of JAEA.....	9
4.1 Support for the Use of Supercomputer System of JAEA.....	10
4.1.1 Help Desk.....	10
4.1.2 Program Development and Maintenance .....	10
4.1.3 Program Optimization Tuning .....	13
4.2 Training for Computer Usage Techniques (Tutorials, Seminars) .....	15
5. Research and Development Activity by using Supercomputer System of JAEA.....	16
5.1 Nuclear Safety Research Center .....	16
5.1.1 Analysis of Damage Progress in BWR-fuel Cladding due to Propagation of Multiple Cracks.....	16
5.1.2 Development of Correction Method of Topographical Effect in Aerial Radiation Monitoring.....	19
5.1.3 Hydrogen Flame Acceleration Prediction by Computational Fluid Dynamics.....	21
5.1.4 Numerical Simulation of Unsteady Natural Convection in the Large Containment Vessel (CIGMA) with Outer Surface Cooling.....	23
5.1.5 LES on Two Liquid Mixing in the Horizontal Legs and Downcomer; OECD/NEA TAMU CFD Benchmark Test.....	26
5.1.6 IPRESKA CFD Benchmark Step 2 Analysis.....	28
5.1.7 Parallel Computing Performance of CFD Toolbox OpenFOAM.....	31
5.1.8 Development of Seismic Response Analysis Methods for Nuclear Facilities ...	33
5.1.9 Ductile Fracture Simulation by GTN model for Cracked Pipe.....	35

5.2	J-PARC Center .....	38
5.2.1	Evaluation of Nuclide Production Cross Section for Accelerator-Driven Nuclear Transmutation System .....	38
5.2.2	Propagation of Uncertainty in Lead Spallation Particle Multiplicity to a Neutron Energy Spectrum .....	41
5.2.3	Influence of Shield Removal on Shielding Performance at Neutron Instruments in J-PARC .....	44
5.2.4	Simulating Phonon Cross Section using Density Functional Theory .....	46
5.2.5	Ab-initio Calculations of Iron Based High-Tc Superconductor .....	49
5.3	Nuclear Science and Engineering Center .....	50
5.3.1	Implementing Vertical Mixing Parameterization Model in the SEA-GEARN Radionuclide Dispersion Model.....	50
5.3.2	Detailed Analysis on Plume Dispersion Around Nuclear Facilities using a Local-scale High-resolution Atmospheric Dispersion Model .....	52
5.3.3	Estimation of Terrestrial Emission of Iodine-129 by Chemical Transport Model GEARN-FDM.....	55
5.3.4	Improvement of DCHAIN and PHITS .....	57
5.3.5	Development of PHITS Graphical User Interface: PHACE.....	59
5.3.6	PHITS Development of Estimation Function Based on ANOVA .....	62
5.3.7	Reproduction of Heavy-ion Therapy Beam by PHITS.....	65
5.3.8	Improvement on the Error Messages from PHITS .....	67
5.3.9	Influence of Sample Shape on Hydrogen Measurement by TOF-PGA.....	69
5.3.10	Investigation to Improve Neutron Resonance Transmission Analysis System .....	72
5.3.11	Simulations for a Transportable Active Neutron Device using a Neutron Source .....	74
5.3.12	Development of Numerical Simulation Method for Thermal Fluid Flow Phenomena on Severe Accident Condition in Reactor Pressure Vessel.....	76
5.3.13	Detailed Numerical Studies on Thermal-hydraulics in a Design of ADS System .....	79
5.3.14	Numerical Simulation on Two-phase Flow for Development of Prediction Method of Critical Heat Flux based on a Mechanism .....	82
5.3.15	Development of Numerical Simulation Method of Aerosol Particle Capturing Behavior .....	85

5.3.16	Development of Multiphase Flow Analysis Method Based on Interface Tracking Method .....	88
5.3.17	Development of Evaluation Method of Aerosol Particle Behavior in a Reactor Building .....	91
5.3.18	Development of Analytical Tool CHASER for the Evaluation of Fission Product Behavior during Transportation in a Reactor .....	94
5.3.19	Analysis for Multiple Scattering Gamma Ray Dose in an Entranceway .....	97
5.3.20	DFT Calculation of Materials for ADS.....	99
5.3.21	Atomic and Electronic Structure Calculations for Alloying and Defect Structures.....	101
5.3.22	Evaluation on Cs Adsorption Behaviors during SA and Uranium Phosphate Compounds using First Principles Calculations .....	104
5.3.23	Hydrogen Adsorption and Permeation into Nuclear Materials using First Principles Calculation.....	107
5.4	Advanced Science Research Center .....	109
5.4.1	Description of Superdeformed States in Nuclei with large-scale Shell-model Calculations .....	109
5.4.2	Research for Ground State and Excitation Dynamics in Low-Dimensional Strongly Correlated Systems.....	112
5.4.3	Exploration of the Photocatalytic Function of Minerals for Recycling of Decontamination/Removal Soil .....	115
5.5	Materials Sciences Research Center .....	118
5.5.1	Screening of Molecules for Cs Solvent Extraction.....	118
5.5.2	Simulation Program for Microscopic Magnetization Processes in Magnetic Materials with Long-range Spin Interactions .....	121
5.6	HTGR Research and Development Center .....	123
5.6.1	Calculation of 3D Neutron Flux Distribution in the HTTR Core using MCNP6.....	123
5.7	Fast Reactor Cycle System Research and Development Center.....	125
5.7.1	Advancement of a Computer Program for Sodium-water Reaction Phenomena in a Steam Generator of Fast Reactors .....	125

5.7.2	Structural Reliability Evaluation of Fast Reactor Static Components Against Fatigue-Creep Interaction Damage.....	128
5.7.3	Thermal-Hydraulic Analysis of Full-Scale Fuel Assembly under Low Flow Rate Condition by SPIRAL Code.....	131
5.7.4	Calculation of Core Characteristics for Sodium-Cooled Fast Reactor MOX Fuel Core with the Continuous Energy Monte-Carlo Code, MVP .....	134
5.7.5	Numerical Analysis on Thermal Stratification of Sodium in Rectangular Enclosure with Conjugate Heat Transfer .....	136
5.8	Tsuruga Comprehensive Research and Development Center.....	139
5.8.1	Reconstruction of the Magnetization of Halbach Magnet in EMAT from Experimental Measurements .....	139
5.9	Fuel Cycle Design Department .....	142
5.9.1	Numerical Study of Physical Properties of Advanced Fuel in CNWG .....	142
5.10	Reactor Systems Design Department .....	145
5.10.1	Self-shielding Effect of Double Heterogeneity for Plutonium Burner HTGR Design.....	145
5.11	Collaborative Laboratories for Advanced Decommissioning Science .....	148
5.11.1	Development of a Numerical Simulation for Laser Processing of Fuel Debris at Fukushima Daiichi Nuclear Power Station (1) .....	148
5.11.2	Development of a Numerical Simulation for Laser Processing of Fuel Debris at Fukushima Daiichi Nuclear Power Station (2) .....	151
5.11.3	Development of a Detailed Nuclide Inventory Database for Decommissioning of Fukushima Daiichi Nuclear Power Station.....	153
5.11.4	Calculation of Oxidation and Hydrogen Uptake Behavior by JUPITER.....	154
5.11.5	Validation and Verification for the Multi-physics Models in JUPITER Code .....	156
5.11.6	Development of Drying Simulation Code for Waste Storage .....	158
5.12	Integrated Support Center for Nuclear Nonproliferation and Nuclear Security..	160
5.12.1	Delayed Gamma-ray Spectroscopy Development for Safeguards Verification .....	160

5.12.2	Hemispheric Atmospheric Dispersion Simulation of Radionuclides Released during the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant Accident.....	163
5.12.3	Development of Compact Moderator using a Laser Driven Neutron Source .....	165
5.13	Center for Computational Science & e-Systems.....	168
5.13.1	Computational Studies for Quantum Nuclear Effects in Functional Materials .....	168
5.13.2	Analyzing the Workings of a Superconducting Neutron Detector using Computer Simulations.....	171
5.13.3	Development of Numerical Techniques for Materials in the Research Field of Atomic Energies .....	174
5.13.4	Numerical Simulations of Radioactive Materials in the Environment.....	176
5.13.5	Molecular Dynamics Simulation for Grain Boundary Segregation of Solute Atoms.....	180
5.13.6	Investigation of Adsorption Structure of Radium on Clay Minerals.....	182
5.13.7	First-principles Study of the Degradation of Nuclear Materials.....	185
5.13.8	Simulation for Radioactive Nuclides Transport inside Harbor of Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant.....	188
5.13.9	Ab Initio Molecular Dynamics Simulations of Hydrogen in Materials .....	191
5.13.10	Molecular Simulation Study of Radiocesium Complexation Mechanism with Fungi and Lichen Metabolites .....	194
5.13.11	Atomic Simulations of Physical Properties for Nuclear Fuel .....	196
5.13.12	DFT Calculation of Dislocations and Solute Atoms .....	198
5.13.13	Atomistic Simulations for Microstructural Evolution of Irradiated Materials .....	200
5.13.14	Development of Massively Parallel Simulation Technology for Extreme Scale CFD Simulations.....	203
5.13.15	Estimation of Temporal Changes in Air Dose Rate using Measurement Results of Monitoring Posts.....	207
6.	Conclusion.....	210
	Appendices.....	211
	Author Name Index .....	213

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）。令和元年度に原子力機構の発表した査読付論文の総数は 860 件であった。このうち計算科学技術を利用した論文は 181 件（21.0%）である。この論文数は、全論文の約 20%以上を占めており、原子力機構の研究成果に対する計算科学技術の貢献度の高さを示している。

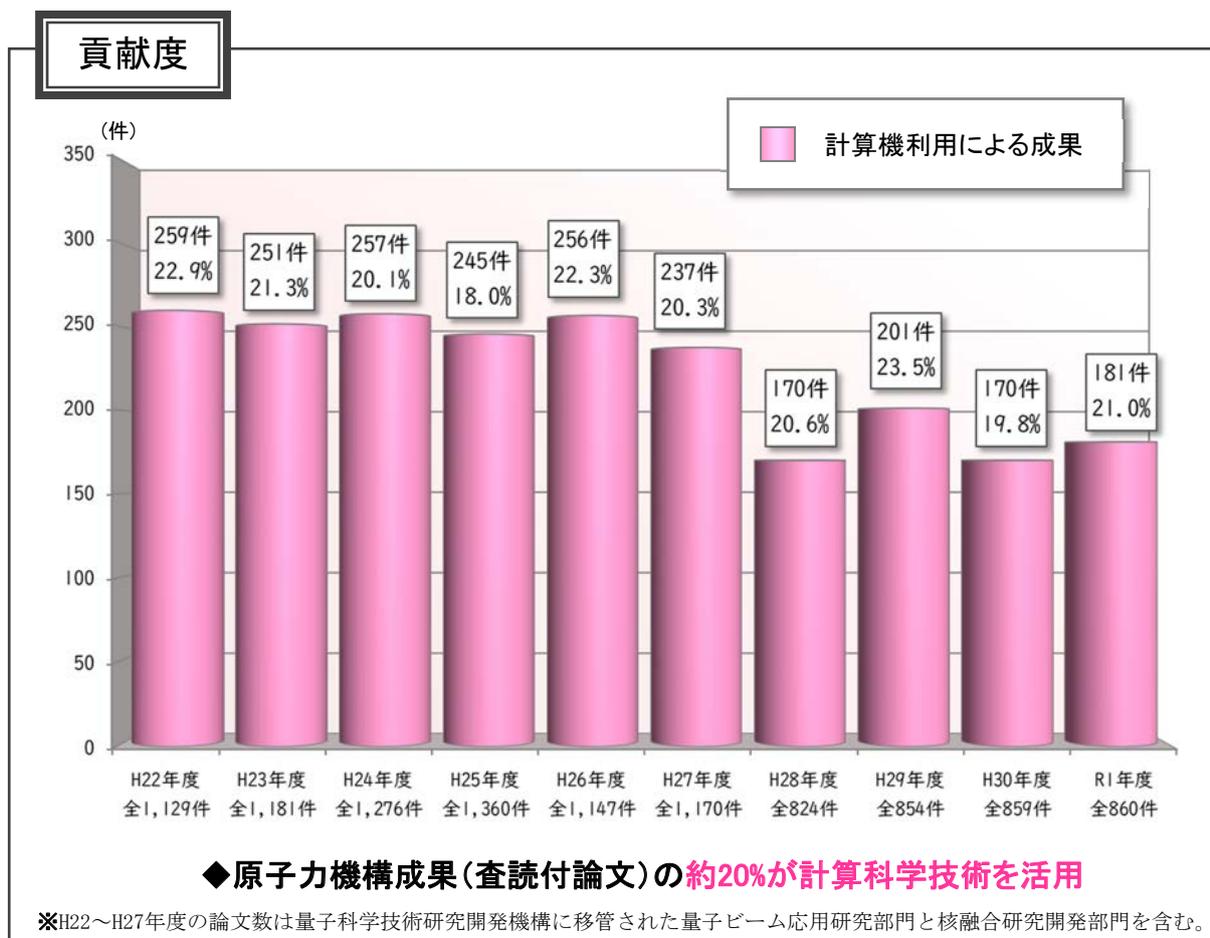


図 1.1 計算科学技術による研究成果創出貢献度 [平成 22 年～令和元年度]  
(原子力機構が発表した査読付き論文における計算科学技術を活用した論文の割合)

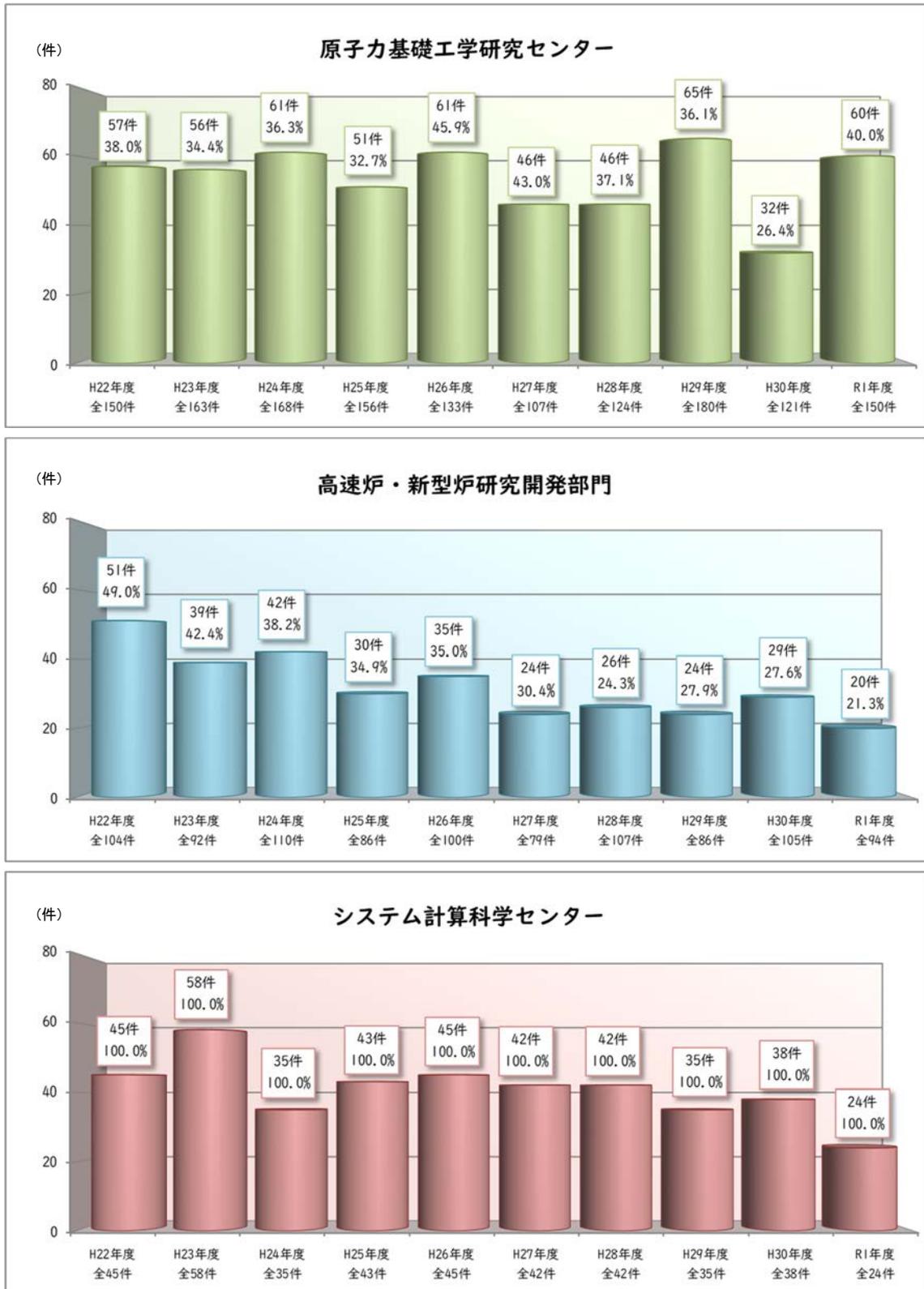


図 1.2 組織別計算科学技術による研究成果創出貢献度 [平成 22 年～令和元年度]

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令和元年度の大型計算機利用成果をまとめたものである。2章に原子力機構の大型計算機システムの更新とその構成概要を、3章に大型計算機システムの利用状況を、4章に大型計算機システムの利用支援について示す。さらに、5章では、原子力機構の大型計算機システムが具体的にどのような研究開発に利用され、どのような成果を創出しているかを示す。

## 2. 原子力機構の大型計算機システム環境

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

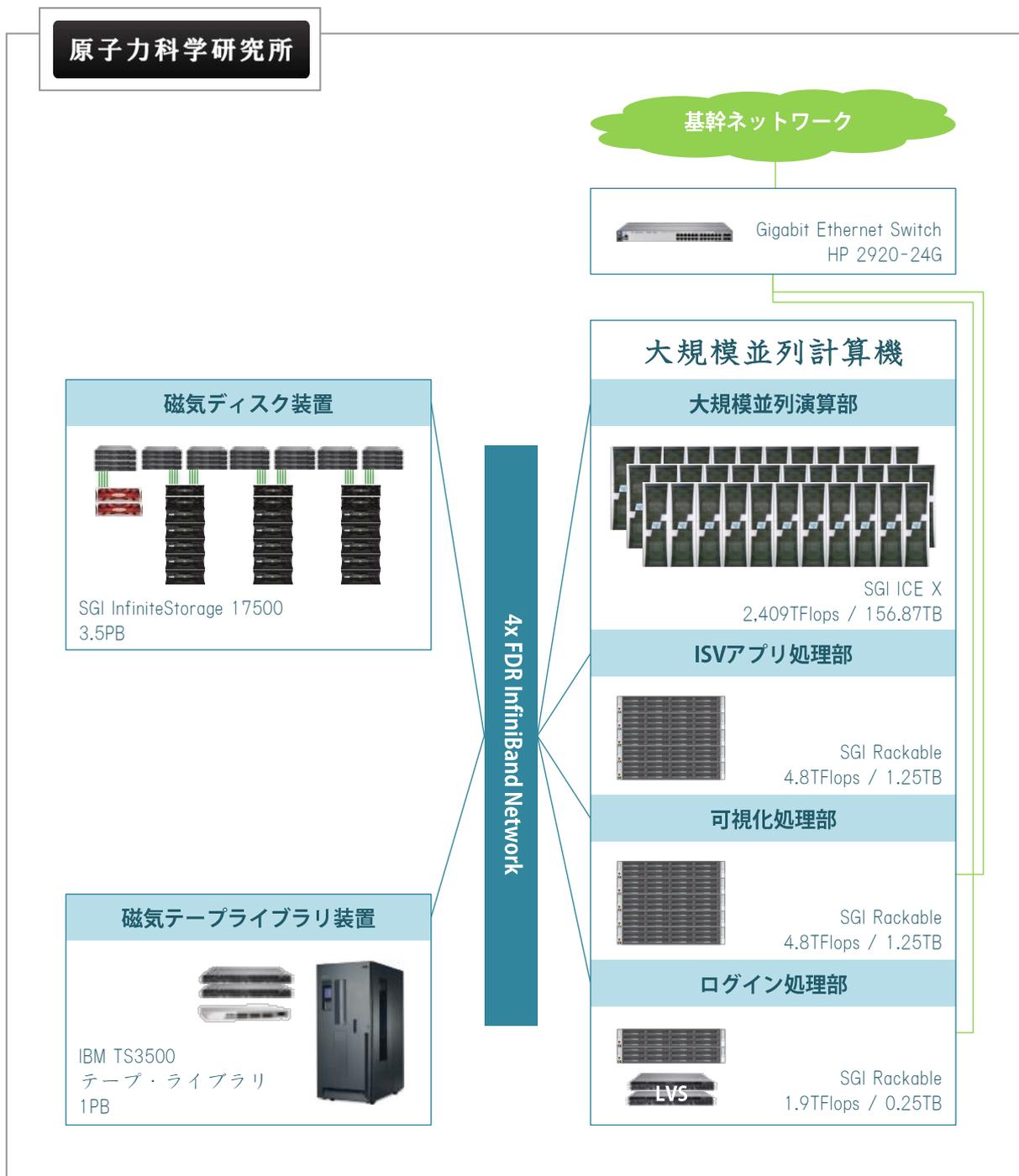


図 2.1 原子力機構スーパーコンピュータシステム

表 2.1 原子力機構スーパーコンピュータシステムの性能(主な仕様)

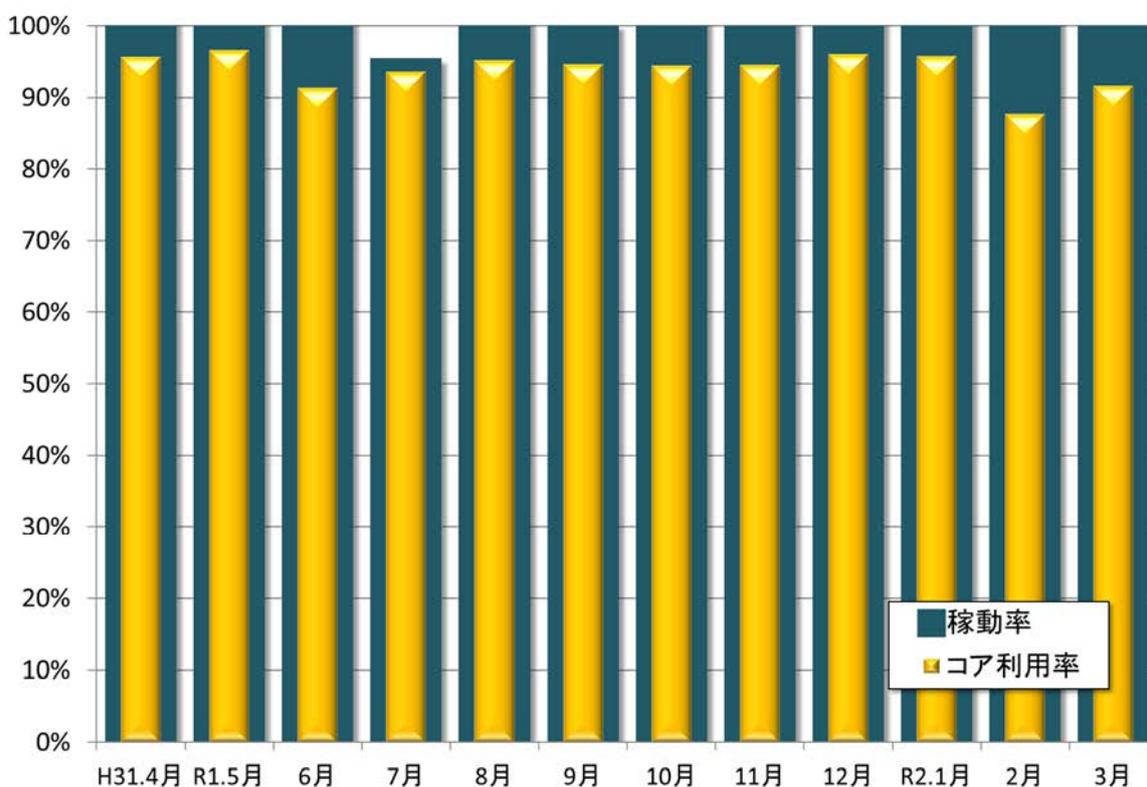
	大規模並列演算部	ISV アプリ処理部	可視化処理部	ログイン処理部
	SGI ICE X	SGI Rackable C2112-GP2	SGI Rackable C2112-GP2	SGI Rackable C2112-GP2
タイプ	スカラ	スカラ	スカラ	スカラ
総演算性能 (TFLOPS)	2,409	4.8	4.8	1.9
コア数	60,240	120	120	48
ノード数	2,510	5	5	2
CPU	Xeon E5-2680 v3 12 コア/CPU	Xeon E5-2680 v3 12 コア/CPU	Xeon E5-2680 v3 12 コア/CPU	Xeon E5-2680 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++

令和 2 年 3 月末 現在

### 3. 令和元年度における計算機利用実績

#### 3.1 システム稼働率・コア利用率

平成 27 年 11 月末から運用開始した原子力機構スーパーコンピュータシステムの中核をなす ICE X は、安定して運用され、年間稼働率は 99% 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）、落雷による計画外停電（9 月）及び臨時保守作業（7 月、9 月、11 月）によるものである。システム全体の年間コア利用率は 4 年のリース期間で最も高い 93.9% 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。



※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)

※コア利用率= (総コア利用時間 / 総コア運用時間) × 100

総コア利用時間: ジョブで利用したコア時間の総合計

総コア運用時間: 実運用時間 × 60,240 コア

図 3.1 ICE X の稼働率・コア利用率

#### 3.2 大型計算機システムの組織別利用実績

原子力機構における ICE X の利用者数は 356 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、安全研究センター、原子力基礎工学研究センター、システム計算科学センター、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 3.2）。



図 3.2 ICE X の組織別利用者数

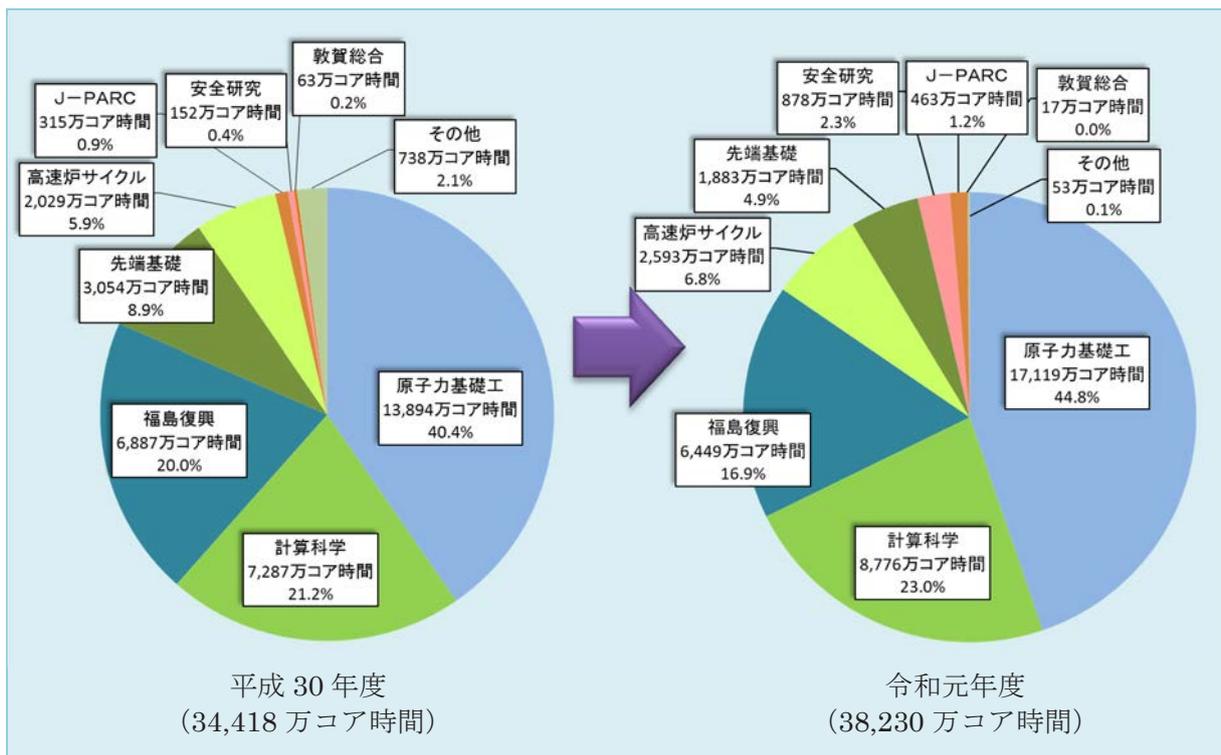


図 3.3 ICE X の分野別コア時間利用実績

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 38,230 万コア時間が利用された。分野別のコア利用時間を図 3.3 に示す。安全研究の利用時間が昨年度に比べて規制庁受託の航空機モニタリングデータ解析や原子炉建屋の 3 次元詳細耐震評価モデルによる地震応答解析

などの計算に使用され約 6 倍増加（152 万→878 万コア時間）した。福島復興では、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 3.1 に示す。

表 3.1 主な ICE X を利用した福島復興に係る対応

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	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 4,320	2,595.2	5.13.4 項
2	過酷時及び定常時における炉心内非定常熱流動事象評価解析手法の開発	原子力基礎工学 研究センター	JUPITER 10,368	1,825.7	5.3.12 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 5,184	1,408.1	5.3.16 項
4	トリチウム等の強い核量子効果を示す物質群の物性解明	システム 計算科学センター	VASP 960	267.5	5.14.1 項
5	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 96	92.5	5.13.8 項
6	過酷事故時の燃料挙動の解析	システム 計算科学センター	VASP 432	59.1	5.13.11 項
7	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 96	33.6	5.3.22 項
8	格納容器内水素移行挙動に関する研究	安全 研究センター	OpenFOAM 432	12.8	5.1.5 項
9	除染除去土壌再生利用に向けた鉱物の光触媒機能探索	先端基礎 研究センター	VASP 2,496	4.5	5.4.3 項
10	福島県における空間線量率に関する解析	システム 計算科学センター	PHITS 432	3.6	5.13.2 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。

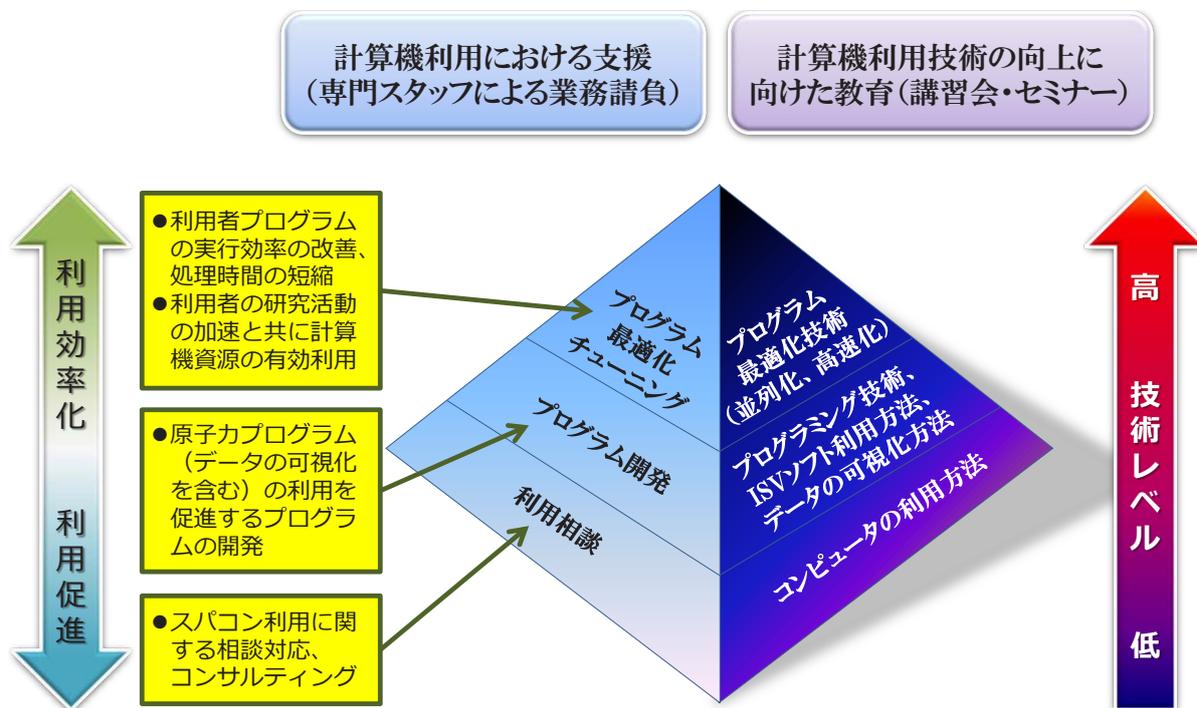


図 4.1 利用支援体制

## 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。

令和元年度の利用相談は、年間 708 件（月平均：59 件）寄せられた（詳細は付録 B に示す）。そのうち約 59%が ICE X の利用、約 8%が可視化（可視化相談・技術支援：56 件、可視化ソフトウェアのインストール支援：31 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。令和元年度は表 4.1 に示す選定要件に基づき、8 件のプログラム開発整備作業を採択・実施した。

表 4.1 プログラム開発整備における選定要件と選定件数

選定要件	選定件数
(P1) 原子力機構内で共通に使用されるプログラム	6 件
(P2) 大規模課題で使用するプログラム	—
(P3) 解析の大規模化等、大規模利用（大規模並列化）が必要なプログラム	1 件
(P4) 大規模データの可視化処理を行なうプログラム	—
(P5) 福島支援等、緊急対応が必要なプログラム	1 件
(P6) ICE X への整備が必要なプログラム	—

令和元年度の主な作業について表 4.2 に示す。原子力機構内で共通に使用されるとして選定したアプリケーションのプログラム開発整備作業では、PHITS ユーザ等が視覚的に各パラメータを理解して入力データを作成できるグラフィカルユーザインタフェース PHACE の開発を実施した。その編集機能においても入力キーワードの補完などの強力な入力補助機能の実装が完了したため、PHITS 入力データ作成の専用ツールとして配布できる見通しが得られた。

表 4.2 令和元年度プログラム開発整備作業 (1/2)

項	作業件名 (選定要件)	作業概要、及び 結果	関連する 成果報告
1	PHITS ユーザ入力 支援ソフトウェア の開発 (P1)	ユーザ数 4,000 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ース (PHACE) の開発を支援。平成 30 年度に開発した Windows 版 PHACE に対し、編集機能の利便性向上のため入力キーワードの補完などの補助機能を追加と Python プログラムの開発環境の構築を実施。これにより、PHITS 入力データ作成のための専用ツールとして配布できる見通しを得た。	5.3.5 項
2	PHITS のエラーメ ッセージ ID 化の整 備 (P1)	応用分野は放射線検出器開発、加速器遮蔽設計、医療応用、線量評価など多岐に渡る PHITS コードの開発を支援。PHITS が出力する 2,885 個所のエラーメッセージに対し、ID を付与し体系化するようコードを修正。これにより、ユーザに理解しやすいエラーメッセージの出力が可能となり利便性が向上した。	5.3.8 項
3	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 一部のパラメータ値を変更しながら複数回の PHITS を実行し、それらのタリー結果を分析するためのシェルスクリプトの作成 ② 複数タリーの結果を分析するための機能の作成 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複数タリーの解析が容易となった。	5.3.6 項
4	含水廃棄物等の水 分蒸発挙動コード の開発 (P3)	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 3 次元化に向けた仕様検討、不飽和充填層の水分挙動及び乾燥過程に重要な水の物性値の温度依存性ならびに蒸気速度の温度速度依存性に係る機能を追加。これにより、コードの 3 次元化に対する知見を得るとともに、保管容器内の長期的な水分蒸発挙動をより詳細な解析が可能となった。	5.11.6 項

表 4.2 令和元年度プログラム開発整備作業 (2/2)

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	DCHAIN 及び PHITS の改良 (P1)	高エネルギー粒子誘導放射能計算コード (DCHAIN-SP) では、xyz メッシュの計算結果を、xy,yz,zx の二次元カラーグラスタープロットで出力する機能を開発。これにより、誘導放射能の空間プロファイルを即座に把握することが可能となった。	5.3.4 項
6	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 (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、ノズルから水を噴射した際の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、過熱領域にノズルから噴出した水を衝突させる条件を設定すると沸騰モデルでは発散し、凝固・融解モデルでは噴流速度によって安定した計算ができる知見を得られた。	5.11.1 項 5.11.2 項
7	海洋拡散シミュレーションモデル SEA-GEARN への鉛直拡散係数モデルの導入 (P1)	海洋中放射性核種移行コード SEA-GEARN に対し、放射性核種の海洋中の分布を計算するために、以下の機能追加を実施。 ① ICEX への移植・開発環境の構築 ② KPP (K-profile parameterization) モデルによる鉛直拡散係数計算プログラムの作成 これにより、海上風や日射量、降水量などを考慮した詳細な放射性物質の海洋中の挙動が計算できる見通しを得られた。	5.3.1 項
8	燃料被覆管中複数き裂の破損影響評価モデルの整備 (P1)	反応度事故時の燃料被覆管の損傷過程を解明する目的として、汎用非線形過度運動解析コード ABAQUS を使用し、BWR (沸騰水型原子炉) 燃料被覆管に複数のき裂を有するモデルの作成と、損傷が開始するひずみ、及び要素が破断する変位に対応するひずみを模擬した損傷解析を実施。これにより、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、BWR 燃料被覆管で従来困難であった析出水素化物の影響に関する定量的な知見を得られた。	5.5.1 項

### 4.1.3 プログラム最適化チューニング

プログラム最適化チューニングでは、大型計算機システムで実行されるプログラムについて、高速化・並列化チューニングを行い、実行効率の改善、処理時間の短縮を実現することで、利用者の研究活動を加速させるとともに計算資源の有効活用を図っている。例えば、チューニングにより、計算時間が 20%短縮されれば、計算機資源が 20%増加した効果をももたらすため、不足する計算機資源をより有効活用する上で重要な施策となっている。並列度の高い大型計算機システムにおいて、その性能を十分に発揮させるためには、並列化メリットを最大限に引き出せるようにプログラムをファインチューニングすることが不可欠である。このチューニングには特に高度な技術を要し、一般の利用者が行うにはハードルは高く、専門スタッフの支援が欠かせない。

プログラム最適化チューニング（高速化・並列化）は、毎年原子力機構内の募集に加え、大型計算機利用委員会にて承認された課題で利用するプログラムにおいて、並列化効率・実行効率の改善の必要があるプログラムを対象に実施している。令和元年度は表 4.3 に示す選定要件に基づき、8 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。

表 4.3 プログラム最適化チューニングにおける選定要件と選定件数

選定要件	選定件数
(T1) 大規模課題で使用するプログラム	3 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	2 件

令和元年度の主な作業について表 4.4 に示す。シミュレーション専門部会利用アプリケーションとして選定した GEARN/WSPEEDI-II 及び LOHDIM-LES（ともに約 500 並列で実行）に対しては、MPI 並列化やスレッド並列化の作業を実施することにより、ともに 100 倍以上の速度向上を得た。これら 2 コードによる計算機資源の有効利用が期待される。

表 4.4 令和元年度高速化・並列化作業（1/2）

項	プログラム名 (選定要件)	高速化・並列化 チューニングの概要	高速化・並列化 チューニングによる 速度向上、及び作業結果	関連する 成果報告
1	大気拡散コード GEARN/WSPEEDI-II (T1)	① MPI 並列化 ② スレッド並列化	306 倍の速度向上 (逐次→4 スレッド×540 並列) を達成。	5.12.2 項

表 4.4 令和元年度高速化・並列化作業 (2/2)

項	プログラム名 (選定要件)	高速化・並列化 チューニングの概要	高速化・並列化 チューニングによる 速度向上、及び作業結果	関連する 成果報告
2	局所大気拡散コード LOHDIM-LES (T1)	① MPI 並列化 ② スレッド並列化	141 倍の速度向上 (逐次→512 並列) を達成。	5.3.2 項
3	燃料集合体熱流動解析 コード SPIRAL (T1)	反復解法ライブラリ AMGS (AMG 法の前処理と CG 法、BiCGSTAB 法)の組込 み	11 倍の速度向上 (256 並列) を達成。	5.7.3 項
4	RKKY 相互作用及び双 極子相互作用するスピ 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 LLEQ_RKKY (T2)	① MPI 並列化 ② スレッド並列化	961 倍の速度向上 (逐次→2048 並列) を達 成。	5.5.2 項
5	改良界面追跡法を用 いた詳細二相流解析 コード TPFIT-LPT (T3)	① MPI 並列化 ② スレッド並列化	12 倍の速度向上 (1 スレッド×4 並列 →24 スレッド×4 並列) を達成。	5.3.16 項
6	最新版の 領域気象モデル WRF (T5)	WRF4.1 を ICEX に移植し 並列性能を調査	22 倍の速度向上 (48 並列→2160 並列) を達 成。	5.3.3 項
7	オープン CFD ソフト OpenFOAM (T5)	OpenFOAM (V3,V6,V1812) の 3 つの バージョンを ICE X に移植 し並列性能を調査	5 倍の速度向上 (1296 並列→5184 並列) を 達成。	5.1.7 項

## 4.2 計算機利用技術の向上に向けた教育(講習会・セミナー)

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

令和元年度の講習会は、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:5回、中級レベル:3回)、延べ121名が参加した(表4.5)。実習による講習会や実機を使って確実な技術習得を指向した。

表 4.5 令和元年度講習会

項	技術レベル	開催日時	開催場所	内容	形式	参加者
1	ISV ソフト 初級	令和元年 5月28, 29日	情報交流棟 104 会議室	STAR-CCM+初級セミナー	講義 実習	18名
2	ISV ソフト 初級	令和元年 6月18日	情報交流棟 104 会議室	新バージョン ANSYS FluentR1 基本操作セミナー	講義 実習	10名
3	可視化 中級	令和元年 8月2日	情報交流棟 104 会議室	可視化講演会	講義	32名
4	利用方法 初級	令和元年 8月6日	情報交流棟 104 会議室	プログラミング講習会	講義	16名
5	ISV ソフト 初級	令和元年 11月26日	情報交流棟 104 会議室	ANSYS Workbench Mechanical 入門セミナー	講義 実習	10名
6	可視化 中級	令和2年 1月24日	情報交流棟 104 会議室	気象系データの可視化講習会	講義 実習	11名
7	ISV ソフト 中級	令和2年 2月4, 5日	情報交流棟 104 会議室	Abaqus/Standard 接触/摩擦解 析セミナー	講義 実習	14名
8	ISV ソフト 初級	令和2年 2月26日	情報交流棟 104 会議室	FieldView の最新機能紹介と ハンズオントレーニング	講義 実習	10名

## 5. 大型計算機システム利用による研究成果

### 5.1 安全研究センター

#### Nuclear Safety Research Center

---

##### 5.1.1 BWR 燃料被覆管内複数亀裂の進展による損傷過程の解析

##### Analysis of Damage Progress in BWR-fuel Cladding due to Propagation of Multiple Cracks

谷口 良徳

燃料安全研究グループ

###### (1) 利用目的:

燃料安全研究グループではこれまで、反応度事故時の燃料被覆管損傷過程の解明を目的として、損傷力学モデルを用いた PCMI (ペレット-被覆管機械的相互作用) 等力学的負荷条件のシミュレーションを実施してきた。PWR (加圧水型原子炉) 燃料被覆管については、その破損の主要因として考えられている被覆管外面亀裂の進展に着目した損傷 (亀裂進展) 解析により実験で観察された破損形態を再現することに成功したが、BWR (沸騰水型原子炉) 燃料被覆管については、その破損過程においてより複雑な空間分布を持つ複数の亀裂が寄与すると考えられ、破損形態を再現するには至っていない。

本作業では、ABAQUS コードを用いて、BWR 燃料被覆管で想定される複数の亀裂の存在を考慮した被覆管のモデルを作成し、その損傷解析を実施することにより、亀裂発生の原因となる析出水素化物の影響に関して、従来困難であった定量的な議論に資する知見を得ることを目的としている。このためには、複数亀裂を考慮した系を対象とした損傷解析を相当ケース数行う必要があり、膨大な計算機資源が必要となるため、原子力機構の ICE X を利用することとした。

###### (2) 利用内容・結果:

損傷解析の前段階として、まず、複雑な空間分布を持つ複数の亀裂を有する被覆管モデル (図 1-1、図 1-2) を作成した。同モデルを用いて、反応度事故条件下でペレットの熱膨張を駆動力として進む被覆管内の損傷 (亀裂進展) 挙動を定性的に再現可能かを検証した。この結果、同モデルにより反応度事故条件下で想定される BWR 燃料被覆管の破損挙動を取り扱えること、また効率的な FEM モデル作成のために今回新たに作成した ABAQUS スクリプト群が ICE X 上で正常に動作することが確認できた。その後、過去、原子炉安全性研究炉 NSRR を用いて実施した反応度事故模擬実験に供した実機燃料 2 ケースを対象として、同モデルの適用による反応度事故時の被覆管損傷解析を行った。図 2 に、同解析中の燃料被覆管における亀裂進展の様子を示す。この解析では、照射後試験で得られた同燃料被覆管破損時の巨視的なひずみ量を拘束条件として、適用した損傷モデルの挙動を決定するパラメータである「損傷が開始する被覆管ひずみ量」及び

「有限要素が破断する変位」の2つについて感度解析を実施した。その結果、実機燃料2ケースの破損時燃料被覆管ひずみ比に対するこれらパラメータの感度は小さいことがわかった。本手法の適用により、反応度事故時のBWR燃料被覆管の破損限界について、今後より定量的な議論が可能となることが期待される。

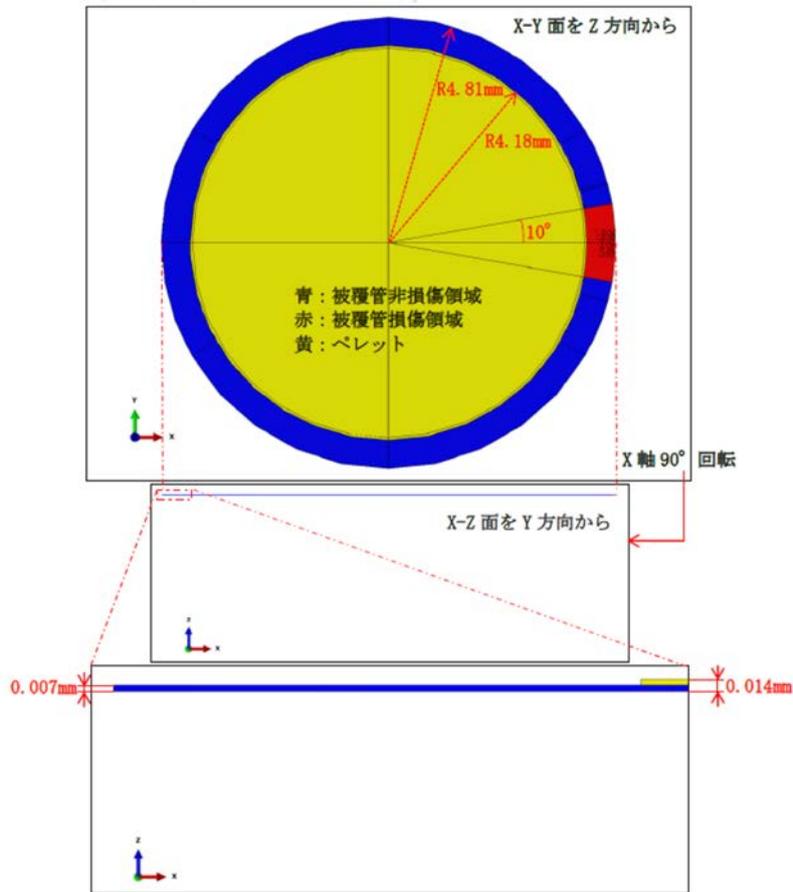


図 1-1 被覆管モデルを含む解析体系



図 1-2 被覆管モデルにおける複数の亀裂の配置例

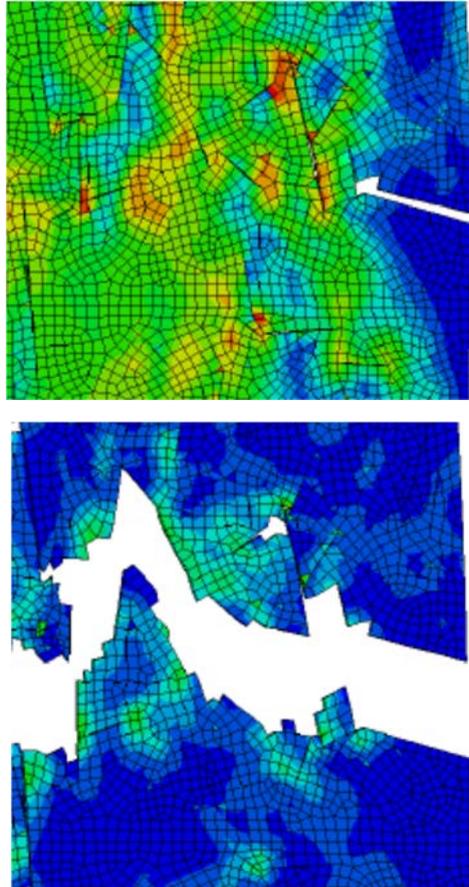


図2 損傷解析中の燃料被覆管における亀裂進展の様子

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) 日本原子力研究開発機構安全研究センター, 原子力施設等防災対策等委託費(燃料設計審査分野の規制研究) 事業成果報告書, 平成 31 年 3 月, 401p.

**(4) 今後の利用予定:**

NSRR を用いて実施した反応度事故模擬実験に供した照射済 BWR 燃料を対象とし、同様の解析を実施する予定である。

また、ABAQUS 解析の解析時間を短縮するために従来使用していた代理モデルについて、その精度向上のため、相当ケース数の ABAQUS 解析を実施する予定である。

これらの解析は、計算機資源を必要とすることが予想されるため、今後も原子力機構の ICE X の利用を予定している。

### 5.1.2 航空機モニタリングにおける地形影響評価と補正手法の開発

#### Development of Correction Method of Topographical Effect in Aerial Radiation Monitoring

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では、測定によって得られたデータを地表面が平坦と仮定したモデルに基づいて、空間線量率や地表面沈着量等へ換算している。しかし、日本では原子力発電所周辺が山になっていることが多く、また、その近隣に居住地域があることが多い。航空機モニタリングそのものの精度に加えて、モニタリング結果に基づいた被ばく線量予測等の精度を向上させるためには地形の影響を考慮したデータ解析手法の開発が必要であると考え、昨年度は地形の影響が測定結果にどの程度の影響を及ぼすかについて、モンテカルロシミュレーション PHITS を用いて評価した。その結果、地形を平坦とした場合と比較して、解析結果に 0.54～5.43 倍の違いがあった。今年度は、地形補正手法を確立するため、起伏地形表面の線源から上空の測定器に入射するフラックスを正確に計算する手法及びパラメータの検討を行った。今回開発する手法は航空機モニタリングで測定される測定点数万～数十万点を迅速に解析することを想定しているため、モンテカルロシミュレーションではなく、解析的な手法を用いることを想定している。手法の検証のため、起伏地形表面線源から測定器に入射するガンマ線線束を PHITS によってシミュレーションする必要があるが、線源領域が広く、線源メッシュ数も膨大であるため、統計誤差を 5%以下に抑えるためには、膨大な粒子数が必要となる。そのため、ICE X の大型計算機大口利用を用いてシミュレーションを実施した。

##### (2) 利用内容・結果:

起伏地形表面上の線源から放出されるガンマ線束を上空の検出器で測定する体系に対して、PHITS を用いてシミュレーションを行った。測定器のある対地高度は航空機モニタリングにおける基準高度である 300 m を中心として、200 m から 400 m までの範囲を評価し

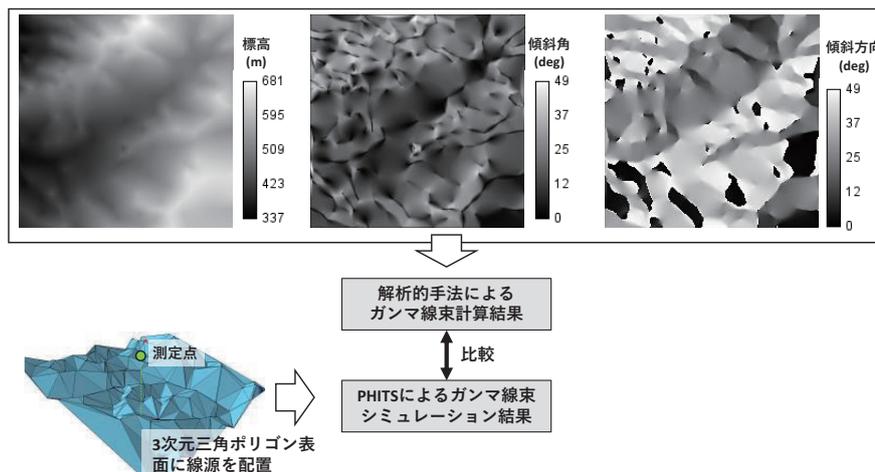


図1 計算及び比較の概念図

た。一方、解析的なガンマ線束の計算では、地形情報として、標高、傾斜、傾斜方向を基に、検出器を見込む立体角を計算して上空の測定器の位置におけるガンマ線束を計算した (図1)。

対地高度ごとの PHITS 及び解析的手法によるガンマ線束計算結果の比較を図 2 に示す。いずれも相関係数が 0.97 以上となっており、高い相関が見られた。しかし、PHITS による計算結果の統計誤差が 5% 以上のものが数点あるため、粒子数を増やして統計精度を高める必要がある。また、解析的手法で算出したガンマ線束計算結果と PHITS による結果と比較すると、相対値が小さく計算される結果となったが、解析的手法で使用しているパラメータ等を最適化することによって、改善される見込みである。本計算結果を基に、今後も地形補正手法の開発を進める。

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

現在のところ、特になし

**(4) 今後の利用予定:**

今後は、PHITS による計算結果の統計精度を高めるための追加計算の実施及び評価値点数を増やすことによって、検討に必要なデータの増強を行う予定である。

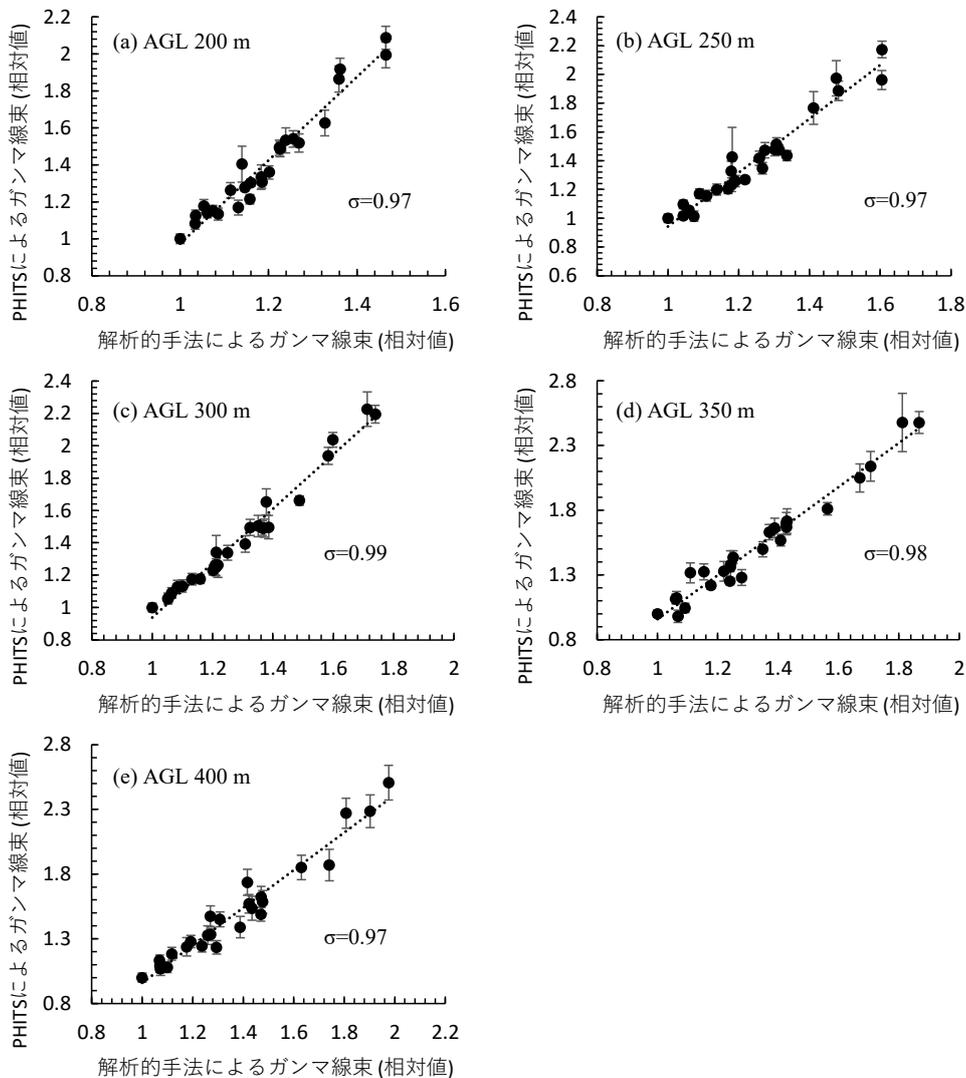


図 2 PHITS と解析的手法によるガンマ線束計算結果 (相対値) の比較

### 5.1.3 数値流体力学による水素火炎加速予測に関する研究

#### Hydrogen Flame Acceleration Prediction by Computational Fluid Dynamics

茂木 孝介、Trianti Nuri<sup>+</sup>、杉山 智之<sup>+</sup>

熱水力安全研究グループ、+ シビアアクシデント研究グループ

##### (1) 利用目的:

東京電力福島第一原子力発電所事故時に生じた水素爆発は、安全研究の分野で水素リスクに再び注目が集まる契機となった。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。

水素リスク評価には、火炎加速、爆轟遷移が生じる条件を予測する必要がある。また爆発による構造物への影響を評価するには、爆燃爆轟遷移を再現することが重要である。水素燃焼実験による評価は小規模かつ単純形状なものに限定されており、実機を対象とした解析に関しては数値流体力学法の活用が期待されている。当該研究グループでは数値流体解析による火炎加速シミュレーションコードを整備してきた。本年度は、国際ベンチマークテスト (ETSON-MITHYGENE ベンチマークテスト) に参加し、整備したコードを用いて解析結果を提供した。各国研究所で開発している計算コードの結果と比較することで、課題抽出に役立てると共に、我々の開発しているコードの検証を行った。

さらに、火炎加速が生じる条件、発生した衝撃波圧力に関する知見を得るため、水素濃度、温度、水蒸気濃度をパラメータとして火炎加速解析を行い、最大速度、衝撃波圧力に関する知見を得た。流れの全体像を把握できることが数値流体解析の利点でもあるため、現象に対する理解が深まることが期待される。既往研究で提案された、実験結果に基づく加速閾値と比較することで、数値流体解析による予測可能性を提言する。

##### (2) 利用内容・結果:

解析対象はフランス ICARE にて実施された ENACCEF2 実験である。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の結果を示す。実験装置は高さ 7.65 m、内径 23 cm 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。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。

OpenFOAM を用いたコード開発を行い、ENACCEF2 実験の解析を行った。乱流モデルには標準 k-ε モデルを採用した。燃焼モデルでは、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。乱流燃焼速度は Gulder のモデルを用いた。図 1 に実験結果 (実線) と解析結果 (一点鎖線) の比較を示す。解析結果は複数の層流燃焼速度モデルを用いた結果を比較している。

全てのモデルは火炎加速を定性的によく再現している。しかし最大速度はモデルによって大きく異なった。Ravi&Petersen (RP) モデルは実験値と比較すると大きく下回った。モデルの依存性は水素濃度によって異なり、水素濃度が小さいほどモデル間で異なる結果となった。Malet(M)の結果は多くの水素濃度で最も良い結果を与えた。

提案されている層流燃焼速度モデルを用いた解析と並行して、より広い条件 (温度、圧力、水素濃度等) に対する層流燃焼速度を化学反応計算を組み込んだ CFD により計算することを試みた。Spherical bomb (図 2 左) を解析対象とし、OpenFOAM の reactingFOAM に必要な化学反応を組み込んで用いた。

温度が高いほど火炎の速度が速くなっていることが見て取れる (図 2 右)。これらの解析結果

より、層流燃焼速度を得ることができた。実験結果との比較による検証が今後の課題である。これらの結果を火炎加速評価に用いることを目指している。

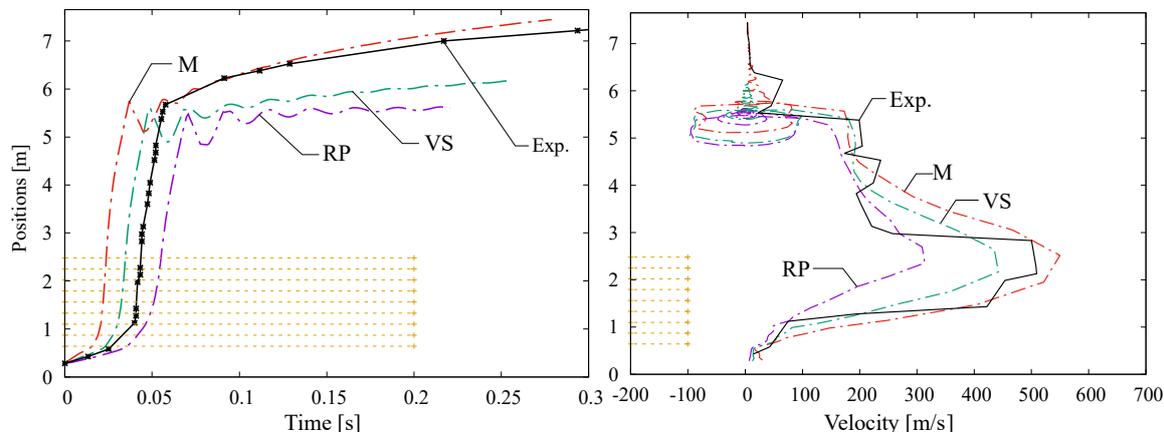


図1 層流燃焼速度モデルの比較。

M: Malet (2005)、RP: Ravi&Petersen(2012)、VS: Verhelst&Sierence(2003).

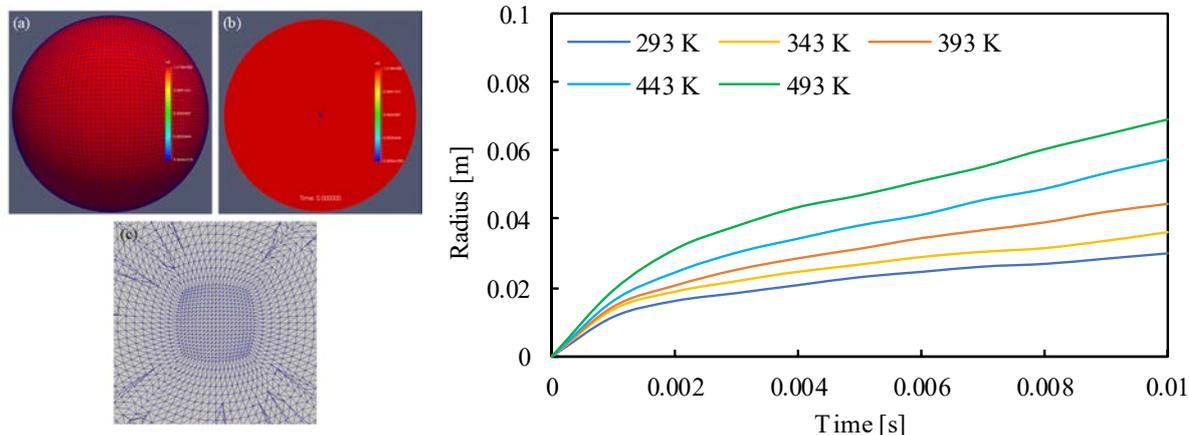


図2 計算に用いたメッシュ(左)と、各温度に対する火炎面位置の時間発展(右)

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) K. Motegi, N. Trianti, T. Matsumoto, T. Sugiyama, and Y. Maruyama, “CFD Analysis of Hydrogen Flame Acceleration with Burning Velocity Models”, Proceedings of 18th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-18), Portland, U.S.A., August 2019, pp.4324-4335.
- 2) N. Trianti, K. Motegi, T. Sugiyama, Y. Maruyama, “Computational Study on the Spherical Laminar Flame Speed of Hydrogen-Air Mixtures”, Proceedings of 2020 International Conference on Nuclear Engineering (ICONE 2020) (Internet) online, U. S. A., August 2020, ICONE2020-16841.

**(4) 今後の利用予定:**

OECD/NEA で実施されている福島第一原子力発電所原子炉建屋及び格納容器内情報の分析 (ARC-F) プロジェクトにおける事故解析活動に参加し、本研究で開発したプログラムを同発電所で実際に起こった水素爆発の解析に適用する。漏洩した水素濃度の分布、発生した火炎形態や圧力負荷に関する知見を得る。

## 5.1.4 CIGMA 装置を用いた外面冷却時の格納容器内自然対流実験に関する数値解析

## Numerical Simulation of Unsteady Natural Convection in the 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:

In the case of a severe accident, natural convection plays an important role in the atmosphere mixing of nuclear reactor containments. The present study, aims at the transient 3D numerical simulations of natural convection of air around a cylindrical containment with unsteady thermal BCs at the vessel wall. A 3D model was simulated with OpenFOAM®, applying the URANS model. The  $k-\omega$  SST showed a better prediction compare to other turbulence models. The accuracy of the predicted temperature and pressure were improved when the heat conduction on the internal structure was considered in the simulation. Hence, the conjugate heat transfer in the internal structure inside the containment vessel must be modeled accurately.

## (2) 利用内容・結果:

*I. Experimental Procedure of CC-PL-26*

The test vessel of the CIGMA facility was preheated by injection of heater air. The heated air injection was stopped after the pressure and temperature attain a specific initial condition. The temperature and pressure inside the vessel were monitored to ensure that the quasi-steady-state was reached before the surface cooling was initiated. The surface cooling the vessel by subcooled water was started at  $t = 300$  s. The coolant water was poured into the upper pool and stopped when the top flange of the vessel was fully flooded by water. Temperature and pressure inside the containment vessel were monitored and recorded for about 4000 seconds. Then the experiment was stopped when there was no significant change in pressure and temperature. Table 1 shows the experimental conditions.

Table 1. Experimental conditions.

Parameter	Run ID: CC-PL-26B	
Average air temperature inside the vessel	T (K)	450
Average air pressure inside the vessel	P (kPa)	185
Cooling region	-	upper pool, middle jacket
Average water temperature in the upper pool and middle jacket	T (K)	303
Initiation of water injection into upper pool and middle jacket	$t$ (s)	300
Timespan of the experiment	$t$ (s)	4000

**II. Numerical Simulation**

The numerical simulation was performed by OpenFOAM. An unsteady Reynolds Averaged Navier Stokes (U-RANS) approach was chosen, and the chtMultiRegionFoam solver was used in the simulation. In order to investigate the effect of the internal structure on the heat transfer, i.e., flat bar, two turbulence models are used to investigate the conjugate heat transfer in the CC-PL-26 test. Four different simulations are performed as below

- CHT\_SKE : standard k-ε model with a conjugate heat transfer
- nonCHT\_SKE : standard k-ε model without a conjugate heat transfer
- CHT\_SSTKO : SST k-ω model with a conjugate heat transfer
- nonCHT\_SSTKO : SST k-ω model without a conjugate heat transfer

A 3D model domain is shown in Figure 1 (a). The flanges, nozzles, and solid walls were not discretized in order to simplify the model geometry and also for ease in making hexahedral cells. The flat bar was the only internal structure that was discretized in the present analysis. The flat bar's walls were modeled as no-slip boundaries with conduction heat transfer.

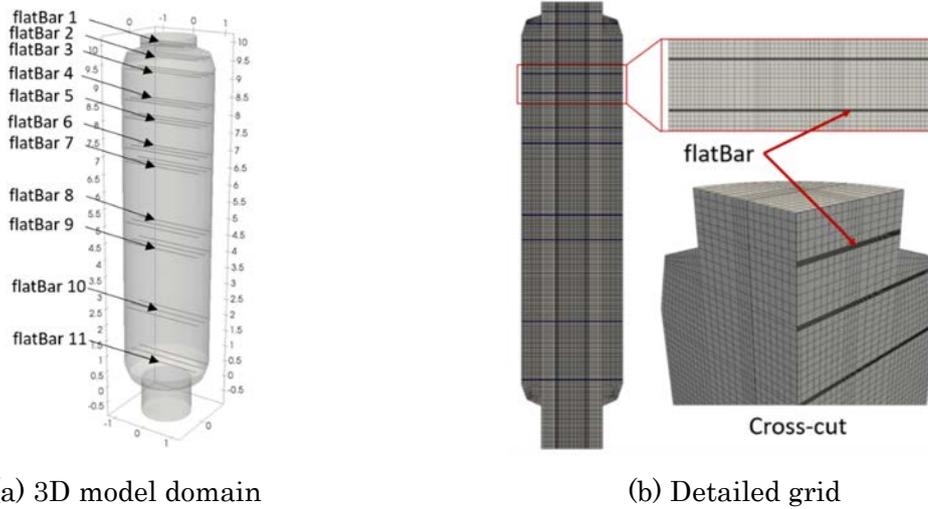


Figure 1. 3D model geometry and mesh.

Table 2. Boundary conditions.

Run ID: CC-PL-26B		
Boundary name	Boundary condition CHT model	Boundary condition nonCHT model
<b>Fluid region</b>		
wall	$\mathbf{u} = 0, T = \text{Dirichlet}$ (time dependent)	$\mathbf{u} = 0, T = \text{Dirichlet}$ (time dependent)
fluid to solid interface	$T_f = T_s, -\kappa_f \nabla T_f = \kappa_s \nabla T_s$	none
<b>Solid region</b>		
flatBar ends	$\nabla T = 0$	none
solid to fluid interface	$T_f = T_s, -\kappa_f \nabla T_f = \kappa_s \nabla T_s$	none

The summary of boundary conditions is described in Table 2. Numerical simulation with two different boundary conditions (BC's) was carried out. First, the conjugate heat transfer (CHT) between the solid (flat bars) and the fluid interfaced is modeled, i.e., CHT model. Second, the solid (flat bars) regions were not modeled, i.e., nonCHT model.

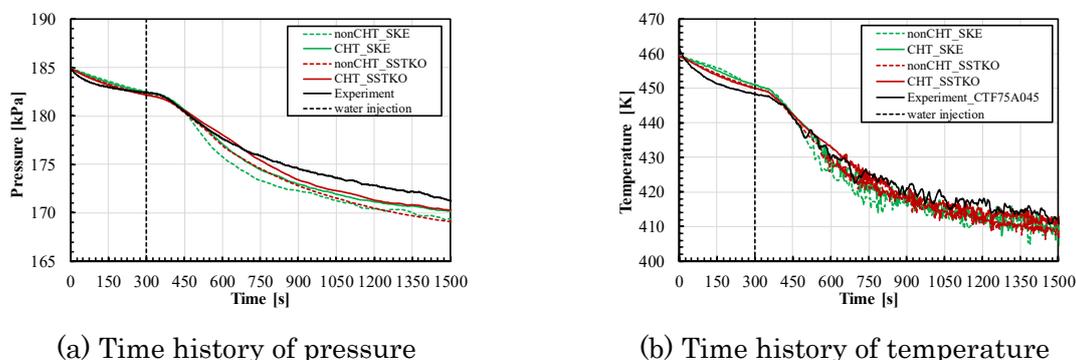


Figure 2. Time history of pressure and temperature as measured (black line) and numerically predicted by means of different turbulence models with CHT (solid lines) and without CHT (dash lines).

Figure 2 shows the comparison of measured and predicted pressure and temperature. It can be observed in Fig.2 that conjugate heat transfer on flat bars has a significant influence on the overall predicted pressure and temperature. Two turbulence models, *i.e.*, standard  $k-\epsilon$  and SST  $k-\omega$  model with a conjugate heat transfer, show a relatively small discrepancy at  $t=1500$  s, and its mean deviation is about 0.6%. The mean deviation of pressure at  $t=1500$  s without conjugate heat transfer is approximately 1.2%. Therefore, the accuracy of predicted temperature and pressure is improved when the internal structure is considered in the model.

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等) :**

- 1) Ari Hamdani, et al., “Unsteady Natural Convection in a Cylindrical Containment Vessel (CIGMA) With External Wall Cooling: Numerical CFD Simulation”, *Energies*, vol.13, Issue 14, 2020, pp.3652\_1-3652\_22.

**(4) 今後の利用予定 :**

The solid flanges were not modeled in the present analysis. Therefore, all solids region should be modeled to confirm the uncertainty of the wall's temperature. Furthermore, a consideration of all heat transfer mechanisms in calculations of temperature, *i.e.*, conduction, convection, and radiation heat transfer model, will also be assessed in the future work.

### 5.1.5 水平配管およびダウンカマ内での二液混合に関する LES 解析; OECD/NEA TAMU CFD ベンチマークテスト

#### LES on Two Liquid Mixing in the Horizontal Legs and Downcomer; OECD/NEA TAMU CFD Benchmark Test

安部 諭  
熱水力安全研究グループ

#### (1) 利用目的:

近年、OECD/NEA が主催する国際 CFD ベンチマークテストでは流体混合現象が広く取り扱われている。「TAMU Cold-leg CFD ベンチマーク」と題された、第 5 回目のベンチマークテスト (IBE-5) は、テキサス A&M 大学 (TAMU) で実施された実験を対象として実施された。この実験では、加圧水型原子炉 (PWR) のコールドレグと圧力容器のダウンカマを模擬したジオメトリ内での、密度の異なる 2 種類の液体間混合現象の可視化計測が実施された。これは、原子炉事故時に緊急時炉心冷却系 (ECCS) 作動時に、コールドレグとダウンカマ壁が急速に冷却されることで生じる加圧熱衝撃 (PTS) に関連する基礎実験である。

本報告では、オープンソースコードの OpenFOAM を用いて実施した、本ベンチマークテストに関する Large-Eddy Simulation (LES) 解析の概要を示す。

#### (2) 利用内容・結果:

図 1 に本 CFD ベンチマークテストの解析対象を示す。実験装置は、直径 5.7 cm、長さ 1.6 m のコールドレグを模擬した水平パイプと、それで接続された二つの容器で構成される。図面左はリザーバータンク (直径 0.34 m) で、もう一方は PWR のダウンカマを模擬するために環状

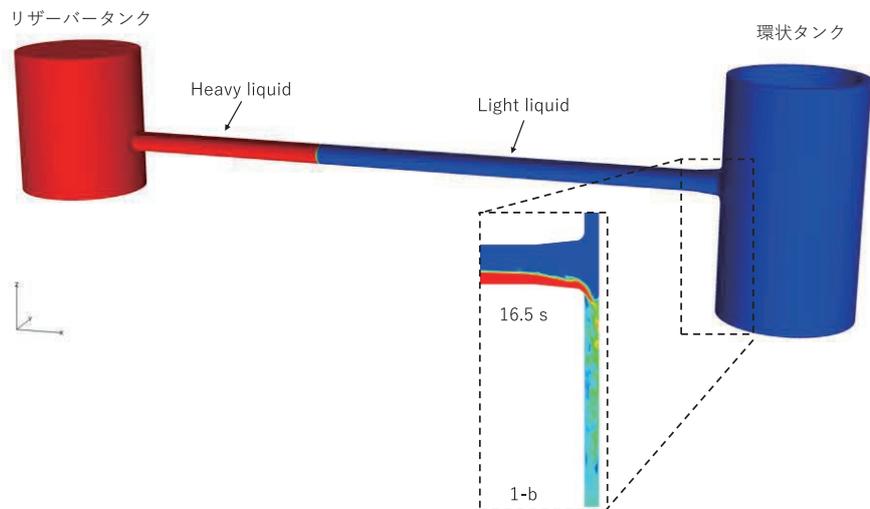


図 1 解析対象、および(1-b) heavy liquid の濃度コンター

タンク (内径 0.305 m、外径 0.343 m) となっている。本報告では、リザーバータンクと水平パイプの接合部中心を座標の原点とした。作動流体は、NaCl と純水の混合物である heavy liquid (密度 1064.7 kg/m<sup>3</sup>) とエタノールと純水の混合物である light liquid (密度 956.54 kg/m<sup>3</sup>) が用いられ、初期条件としてリザーバータンクは heavy liquid、環状タンクは light liquid で満たされた。実験における流体計測手法、初期条件、結果の詳細に関しては、[1]を参考にされたい。

LES 乱流モデルは、壁近傍のサブグリッドスケール (SGS) 乱流粘性係数に関する減衰関数の必要がないことから、複雑形状内での流れ場の解析に有用な Wall-Adapting Local Eddy-viscosity (WALE) モデル[2]を採用した。本報告記載の解析メッシュ数は、およそ 370

万メッシュとなった。図 1 (1-b) に解析開始から 16 秒のダウンカマと結合部での濃度コンターを示す。二流体間には密度差があるため混合が抑制され、パイプ下部に heavy liquid、上部に light liquid が分離して存在している。ダウンカマに到達した heavy liquid の濃度は、可視化断面内では急速に低下していることが分かる。これは、heavy liquid のプルームが水平方向に大きく広がっていること、激しい乱流混合が生じていることを示唆している。次に、図 2 に  $z=0.162$  m での鉛直方向の平均速度分布 ( $W_{\text{mean}}$ )、および速度変動強度 ( $W_{r.m.s}$ ) に関する実験結果との比較を示す。平均速度に関して、ダウンカマ内壁近傍ではプルームの下降速度が過大予測されているものの、概ね良い一致を示している。乱流変動強度に関しては、両壁近傍において過少予測されている。この原因の一つとして、壁面近傍のメッシュ解像度不足が挙げられる。本解析で使用したメッシュでは、摩擦速度、第一格子点および粘性係数で無次元化した格子解像度  $\Delta x^+$  が外壁近傍では 3.6、内壁近傍では 2.3 程度であった。一般的に、LES 解析の場合  $\Delta x^+ < 1$  にする必要があるので、メッシュ解像度が不足している可能性を示唆している。

- [1] D. Orea, R. Vaghetto, T. Nguyen, Y. Hassan, “Experimental measurements of flow mixing in cold leg of a pressurized water reactor”, *Annals of Nuclear Energy*, Vol. 140, 2020, 107137.
- [2] F. Nicoud, F. Ducros, “Subgrid-Scale Stress Modelling Based on the Square of the Velocity Gradient Tensor”, *Flow, Turbulence and Combustion*, Vol. 62, 1999, pp.183-200.

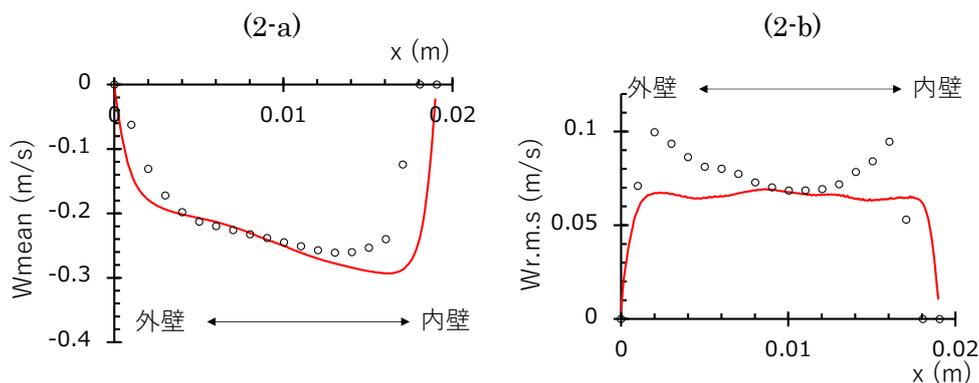


図 2 実験結果との比較 (2-a) ダウンカマ内での鉛直方向速度分布、(2-b) 速度変動強度

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) S. Abe, Y. Okagaki, M. Ishigaki, Y. Sibamoto, “LES-WALE simulation on two liquid mixing in the horizontal legs and downcomer; the open-test condition in the TAMU-CFD benchmark (IBE-5)”, *Virtual CFD4NRS-8 : Computational Fluid Dynamics for Nuclear Reactor Safety - OECD/NEA Workshop*, online, November 2020.

### (4) 今後の利用予定:

本年度の結果を踏まえ、今後はさらに高解像度での LES 解析を実施する。そのためには、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 ICEX およびその後継機の利用を予定している。

## 5.1.6 IPRESKA CFD ベンチマーク Step 2 解析

### IPRESKA CFD Benchmark Step 2 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 IPRESKA 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研究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、Coupled Volume of Fluid with Level Set (S-CLSVOF) 法) を用いた気泡塔解析を行った。界面追跡法は、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。そのため、大規模並列処理できる ICE X を利用した。

#### (2) 利用内容・結果:

計算は、Abe ら<sup>[1]</sup> によって行われた実験を対象とした。計算体系は、図 1 に示すように室温 25°C で  $0.5 \times 0.5 \times 1.3 \text{ m}^3$  の領域に水深 1.1 m まで水 (密度  $997 \text{ kg/m}^3$ 、動粘性係数  $8.9 \times 10^{-7} \text{ m}^2/\text{s}$ 、表面張力  $0.072 \text{ N/m}$ ) で満たされた水プールである。底部の円形オリフィスから空気 (密度  $1.2 \text{ kg/m}^3$ 、動粘性係数  $1.6 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ ) を注入する様子を解析する。オリフィスの直径は  $6 \times 10^{-3} \text{ m}$ 、注入する空気の流量は  $8.5 \text{ L/min}$  (Weber 数 2000) であり、重力加速度を  $9.81 \text{ m/s}^2$  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-2.2.x を使用し、ソルバは界面追跡法 (VOF 法、S-CLSVOF 法)、時間刻みは自動時間刻み (最大 Courant 数は 0.5)、乱流モデルを使用せず、計算格子は格子収束性を確認した 1478 万セルの六面体格子を用いた。

図 2 にボイド率 (気相の体積率) 0.5 等値面分布を示す。注入された空気は気泡塊 (globule、平均気泡体積 VOF:  $1.5 \times 10^{-5} \text{ m}^3$ 、S-CLSVOF:  $1.2 \times 10^{-5} \text{ m}^3$ ) を形成後、小気泡に分裂し、気泡群 (swarm) を形成した。平均気泡体積から算出した気泡径 (球体積相当直径) は両ソルバにおいて、約  $0.03 \text{ m}$  であった。気泡群の小気泡は分裂、合体を繰り返しながら、回転、蛇行するように上昇し、水面に達すると気泡は消滅した (気泡アスペクト比 (長軸  $a$ /短軸  $b$ ) VOF: 1.6-2.1、S-CLSVOF: 1.9-2.2、気泡面積から算出した平均気泡径 ( $d_B$ ) VOF:  $5.2 \times 10^{-3}$ - $1 \times 10^{-2} \text{ m}$ 、S-CLSVOF:  $3.8 \times 10^{-3}$ - $6.8 \times 10^{-3} \text{ m}$ )。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より、VOF 法では  $9.5 \text{ Hz}$ 、S-CLSVOF 法では  $13.9 \text{ Hz}$  であった。空気の注入流量が  $0.7 \text{ L/min}$  を超える条件では、気泡が離脱する際に合体・衝突・干渉など複雑な挙動が生じることが Zhang ら<sup>[2]</sup> によって報告されており、可視化画像においても複数の気泡の合体が確認された。また、気泡が離脱してから次の気泡が離脱するまでを一周期とした場合、可視化画像から得た離脱周期は VOF 法では約  $4.8$ - $16.7 \text{ Hz}$ 、S-CLSVOF 法では約  $5.3$ - $33.3 \text{ Hz}$  となり、ばらつきが見られた。

図 3、4 に各平均気泡径ごとの平均気泡アスペクト比及び気泡上昇速度を示す。本解析結果は、

高さ $z = 0.1 \text{ m}$  ごとのアンサンブル平均であり、エラーバーはその標準偏差である。この結果を用いて、単一気泡相関式やシビアアクシデント解析コード MELCOR のプールスクラビングモデル SPARC-90 による結果<sup>[1]</sup>との比較を行った。VOF 法による気泡アスペクト比は Wellek らの相関式と良く一致し、S-CLSVOF 法の気泡アスペクト比は Okawa らと Wellek らの予測値の間に位置した。Okawa らの相関式は、ノズルからの気泡離脱時に気泡形状が歪む影響を考慮したもので、Wellek らの相関式の上限として推奨されている。従って、S-CLSVOF 法は気泡アスペクト比の予測において、妥当な結果を示しており、気泡離脱時の気泡変形を正確に予測していると思われる。一方、S-CLSVOF 法による気泡上昇速度は、実験よりも大きく予測した。気泡塊の成長速度の影響によるものと考えられるが、より詳細な検討が必要である。

図 5 に $z$ 軸上の各高さにおける時間平均ボイド率分布を示す。上昇するにつれてボイド率は減少し、Abe らによる実験<sup>[1]</sup>において報告されているように、 $z = 0.3 \text{ m}$  付近で気泡流動は swarm に遷移したことが確認できる。また、VOF 法、S-CLSVOF 法共に、単一気泡の挙動を調査した先行研究<sup>[2]</sup>の実験結果と良好に一致し、globule から swarm までの流動遷移を伴う気泡流において、正確にボイド率を予測可能であることを示した。

[1] Y. Abe, K. Fujiwara, S. Saito, T. Yuasa, A. Kaneko, “Bubble dynamics with aerosol during pool scrubbing”, Nuclear Engineering and Design, Vol.337, 2018, pp.96-107.

[2] L. Zhang, M. Shoji, “Aperiodic bubble formation from a submerged orifice”, Chemical Engineering Science, Vol.56, 2001, pp.5371-5381.

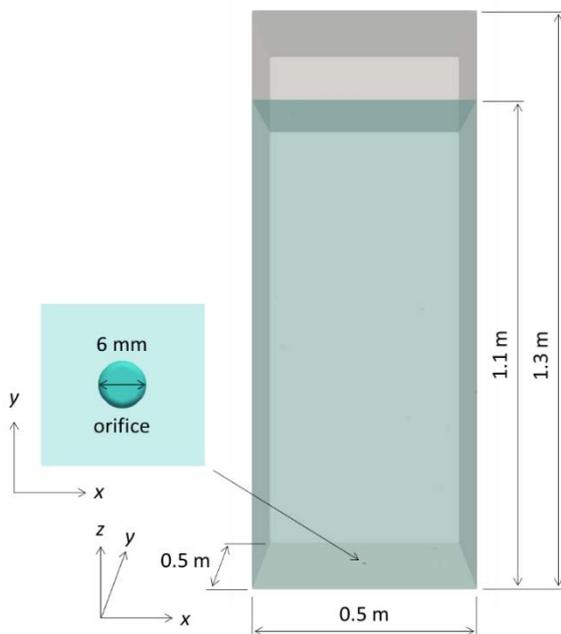


図 1 計算体系

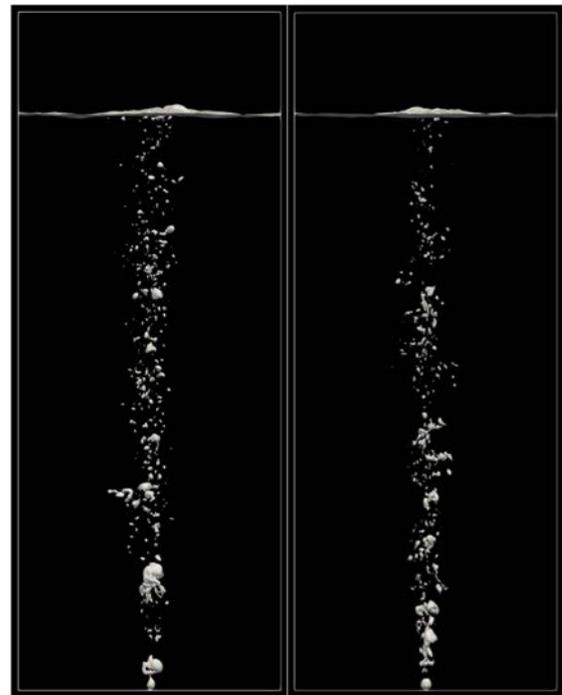


図 2 ボイド率 0.5 等値面図 (10 秒)

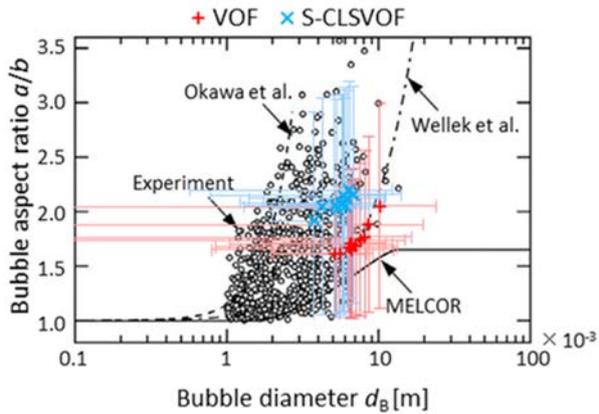


図3 気泡アスペクト比<sup>[1]</sup>

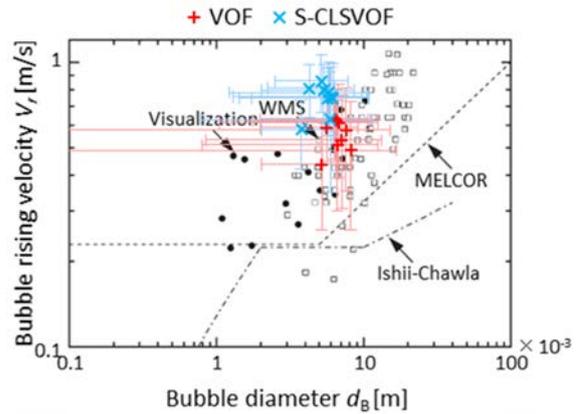


図4 気泡上昇速度<sup>[1]</sup>

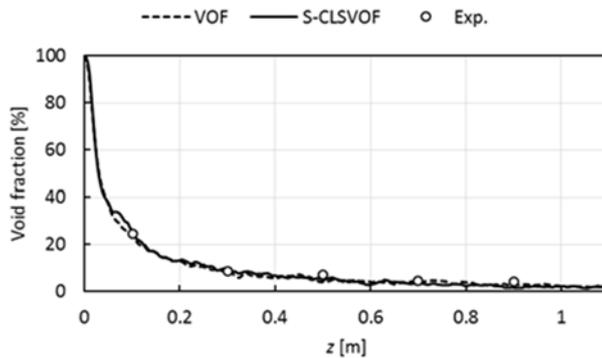


図5 z軸上における時間平均ボイド率

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) Y. Okagaki, Y. Sibamoto, S. Abe, “Numerical study on bubble hydrodynamics with flow transition for pool scrubbing”, Virtual CFD4NRS-8 : Computational Fluid Dynamics for Nuclear Reactor Safety - OECD/NEA Workshop, November 2020, 12p.

**(4) 今後の利用予定:**

今後は、解析結果の検討及び CFD ベンチマーク Step 3 解析 (Euler-Lagrangian 解析を用いた単一気泡中のエアロゾル粒子挙動評価) を行う予定である。

## 5.1.7 オープンソース CFD ツールボックス OpenFOAM の並列計算性能の評価

### Parallel Computing Performance of CFD Toolbox OpenFOAM

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、格納容器内における水素挙動および蒸気凝縮挙動等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、解析モデルの開発・検証も実施している。

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となる。

シビアアクシデント時の格納容器内では水蒸気凝縮が生じるため、その解析では相変化モデルを考慮する必要がある。そのため、我々の研究グループでは、コードの改造が容易なオープンソースの CFD ツールである OpenFOAM®を使用し、水蒸気凝縮モデルを実装し解析を進めている。令和元年度は今後の実機スケールの大規模 CFD 解析の実現可能性を検討するため、OpenFOAM の並列計算性能の評価を行った。

#### (2) 利用内容・結果:

現在、OpenFOAM は CFD Direct 社および ESI-OpenCFD 社によりそれぞれ開発がなされている。並列性能評価においては CFD Direct 社が開発元である OpenFOAM 3（2015 年 11 月公開）、OpenFOAM 6（2018 年 7 月公開）と ESI-OpenCFD 社が開発元である OpenFOAM V1812（2018 年 12 月公開）の 3 つのバージョンを比較した。

計算対象として、OpenFOAM に含まれている気液二相流解析用のチュートリアルである damBreak を使用した。このチュートリアルでは液柱が重力により崩壊する過程を解析する。チュートリアルに含まれている入力ファイル（blockMeshDict）を修正し、メッシュの総セル数がそれぞれ 1100 万（10M）、4400 万（44M）、1 億（100M）である 3 つのメッシュを作成し、解析に用いた。並列数は計算規模に応じて、162～10368 とし、MPI により並列化した。異なる並列数を用いて、設定した物理時間に到達するまでの計算時間を計測し、並列性能を算出した。

ここでは、OpenFOAM V1812 で、44M セルおよび 100M セルのメッシュを用いた結果についてのみ示す。図 1、図 2 に各並列数における計算実行時間および並列化効率を示す。並列化効率は、（最小並列数での計算時間）÷（各並列数での計算時間）の比を（各並列数）÷（最小並列数）で除した値により求めた。最小並列数は 44M セルの計算では 648、100M セルの計算では 1296 とした。44M セルでは、5184 並列まで計算速度が向上した。使用メモリに関して、44M セルでの並列実行で 1 プロセル当たり 124～204MB と少なく、計算データ規模に対して、並列

数が多すぎる可能性がある。一方、100Mセルでは、並列化効率は低下するものの10368並列が最速であり、計算データ規模を更に大きくすれば並列性能が向上する可能性がある。

ここでは結果を示さなかったが、OpenFOAM 3は高並列数（600並列以上）での性能が低く、並列数を増やすに従い、実行時間が増大した。一方、OpenFOAM 6の並列性能はOpenFOAM V1812とほぼ同程度であった。以上からOpenFOAMのバージョンアップに伴い、並列計算性能が大きく向上していることが確認できた。また、OpenFOAMによる大規模計算実行のための見通しが得られた。

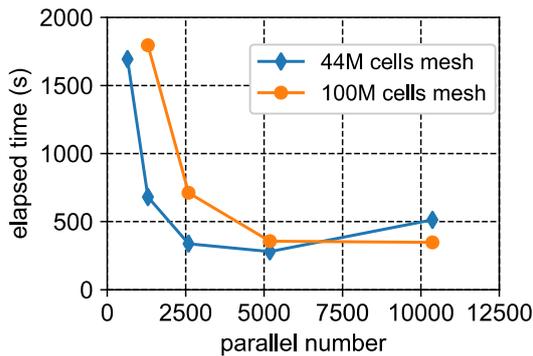


図1 計算実行時間

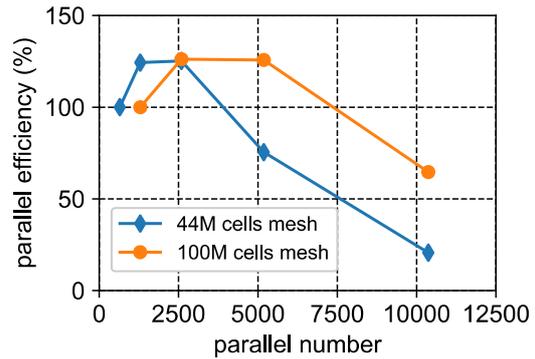


図2 並列化効率

謝辞

OpenFOAMの並列性能評価において、高性能計算技術利用推進室 根本俊行氏、並びに、桧山一夫氏には多大な協力を頂きました。感謝の意を表します。

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

なし

**(4) 今後の利用予定:**

当研究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、OpenFOAMを用いた格納容器内熱流動解析の検討を行い、熱流動挙動評価手法の高度化を進めていく。

## 5.1.8 原子力施設の地震応答解析手法の高度化

### Development of Seismic Response Analysis Methods for Nuclear Facilities

西田 明美、崔 炳賢  
構造健全性評価研究グループ

#### (1) 利用目的:

これまでに、3次元詳細耐震評価モデルを用いた地震応答解析のための要素技術の一つとして、構造物を構成部品単位で独立して扱い、部品間の連成を考慮することで巨大施設の全体解析を可能とする技術を提案し、組立構造解析コード **FIESTA** にて実現している。本研究の目的は、実地震による観測記録と解析結果の比較を通して、原子炉建屋の3次元詳細耐震評価モデルによる地震応答解析結果の妥当性を確認することで、中長期計画の令和元年度計画「原子炉建屋及び機器・配管の健全性評価手法の高度化を継続する。」の達成に資することにある。

#### (2) 利用内容・結果:

当グループでは、3次元詳細耐震評価モデルを用いた地震応答解析手法の標準化に係る研究開発の一環として、3次元詳細耐震評価モデルを用いた地震応答解析のための標準的解析要領の整備を進めている。この標準的解析要領（案）に沿って作成した原子炉建屋の3次元詳細耐震評価モデルの妥当性を評価するために、機構内施設を対象として原子炉建屋の3次元詳細耐震評価モデルを作成し、3月11日に発生した東北地方太平洋沖地震時の地震波を入力とした応答解析を実施した。原子炉建屋の3次元耐震評価モデルの例を図1に示す。応答解析結果と地震観測記録や従来手法による計算結果との比較を実施し、図2に示すように主要な卓越周期の成分に良好な一致が得られたことで、標準的解析要領（案）の有用性を確認することができた。

本成果の意義は、実地震による観測記録と解析結果の比較を通して、原子炉建屋の3次元詳細耐震評価モデルによる地震応答解析結果の妥当性を確認することで、年度計画である原子炉建屋の健全性評価手法の高度化の達成に貢献したことにある。また、本研究成果の一部は、当グループで受け入れている特別研究生の指導のためにも活用された。

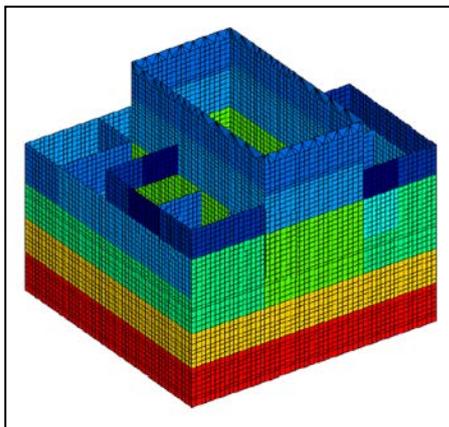


図1 原子炉建屋の3次元詳細耐震評価モデルの例

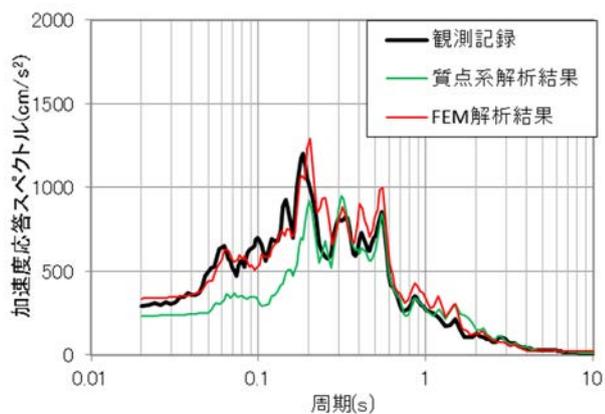


図2 3次元詳細解析結果と観測記録、従来法（質点系解析結果）との比較の例

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

論文 (査読付き) : (1 件)

- 1) B. Choi, A. Nishida, K. Muramatsu, T. Takada, “Evaluation of the Effects of Differences in Building Models on the Seismic Response of a Nuclear Power Plant Structure”, Journal of Japan Association for Earthquake Engineering, Vol.20(2), 2020, pp.2\_1-2\_16.

口頭発表・講演等 : (3 件, 内招待講演 1 件)

- 2) B. Choi, A. Nishida, T. Shiomi, K. Muramatsu, T. Takada, “Uncertainty of different modeling methods of NPP building subject to seismic ground motions”, Proceedings of 25th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-25), Charlotte, U.S.A., 2019, 8 p., USB Flash Drive.
- 3) A. Nishida, B. Choi, H. Yamano, T. Ioit, T. Takada, “Development of seismic counter measures against cliff edges for enhancement of comprehensive safety of nuclear power plants, Part 8; Identification and assessment of cliff edges of NPP structural system”, Proceedings of 25th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-25), Charlotte, U.S.A., 2019, 9 p., USB Flash Drive.
- 4) A. Nishida, “Reliability enhancement of seismic risk assessment of NPP: Study on standardization of seismic response analysis method for reactor building using three-dimensional model”, The 25th International Conference on Structural Mechanics in Reactor Technology (SMiRT-25), Charlotte, U.S.A, 2019 (招待講演) .

**(4) 今後の利用予定:**

地震の震源や大きさ、対象サイトの震度等が異なる様々な実地震に対する観測記録と 3次元詳細耐震評価モデルを用いた解析結果の比較を行うことで、3次元詳細耐震評価モデルを用いた地震応答解析のための標準的解析要領の妥当性確認を継続する予定である。

### 5.1.9 GTN モデルによる亀裂を有する配管の延性破壊シミュレーション

#### Ductile Fracture Simulation by GTN model for Cracked Pipe

真野 晃宏

構造健全性評価研究グループ

##### (1) 利用目的:

近年、設計上の想定を超える地震等の事象に対して、原子炉機器の現実的耐力を評価することが求められている。そのため、大きな荷重により生じる、機器の大変形を伴う延性破壊の評価が重要となっている。特に、亀裂を有する機器が大きな荷重を受けた場合には、亀裂の進展を含めた機器の延性破壊挙動の予測が必要である。延性破壊の予測方法として、損傷力学に基づく Gurson-Tvergaard-Needleman (GTN) モデルを用いた有限要素解析が有用な手法の一つである。このモデルは、変形に伴い材料中で微視的なボイドが発生・成長・合体することを材料の損傷とみなすモデルである。有限要素解析においては、ボイドによる損傷の程度に応じて材料の降伏曲面を縮小させ、降伏曲面が極めて小さくなった要素を削除することで亀裂の進展を模擬する。ただし、汎用有限要素解析ソフト Abaqus に実装されている GTN モデルでは、材料の損傷を評価する上で重要なボイドの合体を陽解法でしか考慮できない。そのため、適切な時間刻みを設定しないと精度の良い解析結果が得られないという課題がある。そこで当研究グループでは、確実に精度の良い解析結果を得るため、ボイドの合体を考慮可能な GTN モデルをユーザサブルーチン UMAT で定義し、陰解法による有限要素解析を可能とするとともに、亀裂を有する配管における延性破壊挙動の評価に対する適用性を確認した。

GTN モデルに基づく有限要素解析は強い非線形性を伴う解析であり、陰解法による収束解を得るには、多数の繰り返し計算が必要なため、非常に多くの計算時間を要する。そこで、計算時間を短縮しつつ、陰解法による精度の良い解析結果を得るため、大型計算機 ICE X を利用して Abaqus 2018 を用いた解析を実施した。

##### (2) 利用内容・結果:

解析対象は亀裂を有する配管の 4 点曲げ試験<sup>[1]</sup>であり、図 1 は試験の模式図を示す。配管の外径は 114.3 mm、板厚は 8.6 mm である。この試験では、負荷ローラーを一定の速度で動かし、亀裂が開くように配管に曲げ変形を加えたことで、亀裂の延性進展を発生させた。試験を模擬するために作成した解析モデルは、図 2 に示すとおり、およそ 9 万節点、8 万の 6 面体一次完全積分要素で構成される 1/4 モデルである。亀裂の先端近傍においては、応力分布等の勾配が急であることから、解析精度の向上のために 0.5 mm の長さで要素を細分化した。Abaqus 2018 及び UMAT で定義した GTN モデルを用いて、材料の損傷に関するパラメータを最適化するためのパラメトリックな有限要素解析を実施し、亀裂を有する配管の延性破壊挙動解析への適用性を検討した。

本解析により得られた負荷荷重と負荷ローラーの変位の関係を、試験結果とともに図 3 に示す。この図より、解析結果（赤線）と試験結果（黒点）がよく一致することが確認できる。また、

GTN モデルに基づく有限要素解析により、負荷可能な最大荷重及びそれ以降の負荷荷重と変位の関係を推定できることを示した。本解析で得られた、亀裂を導入した配管断面における亀裂の進展の様子を図 4 に示す。図中の赤色の領域は、延性亀裂進展が発生した領域を表しており、変位の増加につれて亀裂が配管の周方向に進展する様子及び板厚中央部において亀裂進展が先行する様子を確認できる。この傾向は試験の観察結果と一致している。また、配管外表面における亀裂の進展量について、解析結果は試験観測値と一致することも確認した。以上により、GTN モデルに基づく有限要素解析について、亀裂を有する配管の 4 点曲げ試験における延性破壊挙動の評価への適用性を確認することができた。

- [1] 三浦直樹、藤岡照高、鹿島光一、宮崎克雅、菅野智、石渡雅幸、“き裂を有する配管の動的破壊評価法の開発”、電力中央研究所 研究報告書、1997、報告書番号 T47。

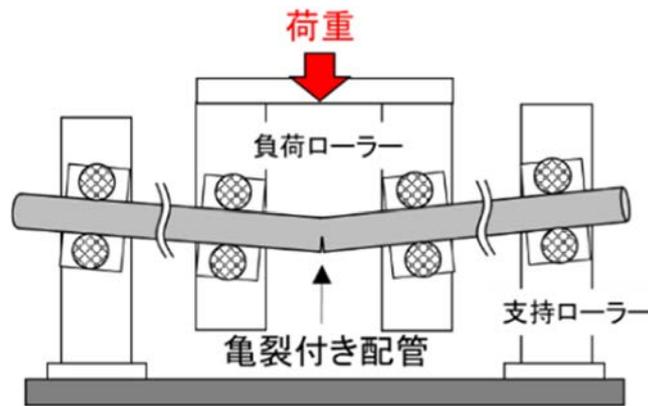


図 1 配管 4 点曲げ試験の模式図

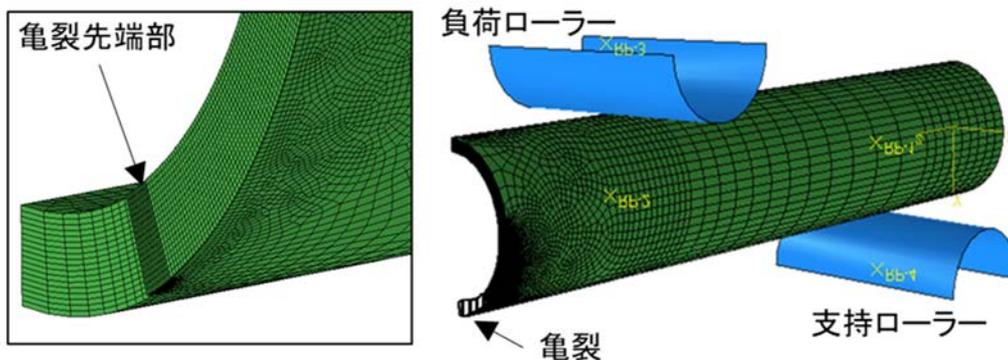


図 2 モデル化した配管 4 点曲げ試験

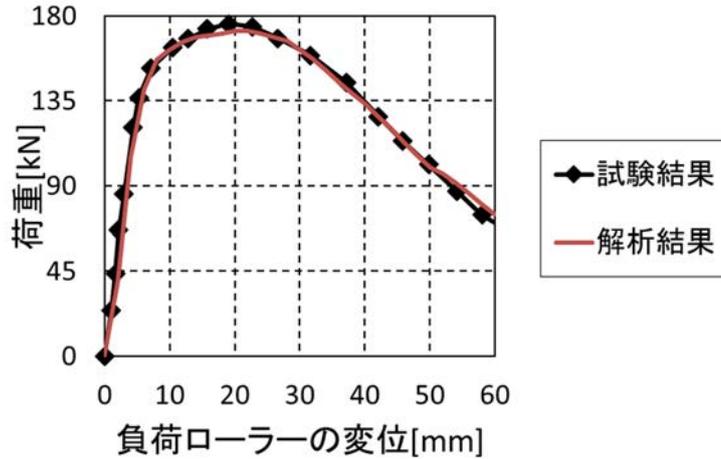


図3 負荷荷重と負荷ローラーの変位の関係

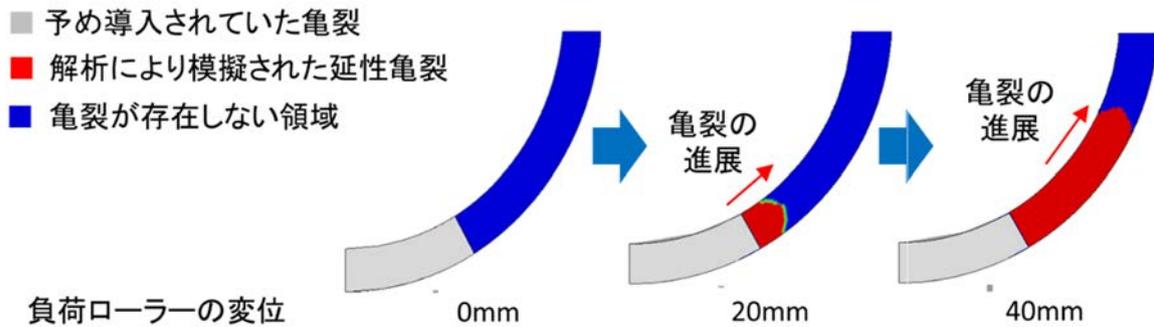


図4 有限要素解析による亀裂進展シミュレーション

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) A. Mano, R. Imai, J. Katsuyama, Y. Li, “Benchmark analysis for ductile fracture simulation; Analysis by Japan Atomic Energy Agency”, Asian Pacific Congress on Computational Mechanics 2019 (APCOM2019), Taipei, Taiwan, December 2019.

**(4) 今後の利用予定:**

令和元年度は、GTN モデルに基づく有限要素解析により、亀裂を有する配管における亀裂の進展を伴う延性破壊を模擬できることを確認した。今後はさらに複雑な破壊挙動、例えば、複数の亀裂の合体を伴う延性破壊挙動を対象に、解析を通じて GTN モデルの適用性を確認する予定である。

## 5.2 J-PARCセンター J-PARC Center

### 5.2.1 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、核破碎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。陽子による核破碎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、他研究機関の 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:

今年度 J-PARC において実施した核種生成断面積測定では、鉄を含めた軽核種～中重核種を標的として用い、これら薄膜状の試料を積層したものに 0.4, 1.3, 2.2, 及び 3.0 GeV エネルギーの陽子を照射した。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、照射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。本稿では  $^{nat}\text{Fe}$  (平均質量数 = 56) に関してのみ紹介する。

PHITS 及び INCL++コード [2]を用い核内カスケードモデル (INCL-4.6 [3], INCL-6.0, Bertini) 及び蒸発過程を記述するモデル (GEM [4], ABLA07) をそれぞれ用いて数値計算を行った。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。これにより当セクション所有の共有計算機で約 1 年程度かかると見積もられた計算が ICE X を用いることにより数か月以内で完了した。さらにスパコン占有サービスを利用し並列計算が行えない INCL++プログラムによる INCL-6.0/ABLA07 モデルを用いた計算を行った結果、前年度よりも効率的に計算を進めることができ全体の計算時間の短縮に繋がった。

軽核種 ( $^7\text{Be}$ ,  $^{22}\text{Na}$ ) 生成断面積において、Bertin/GEM モデルが全体にわたり実験値とよく一

致しているが、 $^{24}\text{Na}$  生成断面積では 1 GeV 以上の領域で 50%過小評価していた。一方、 $^{41}\text{Ar}\sim^{48}\text{Sc}$  生成断面積においては、INCL-4.6/GEM モデルが実験値とよく一致していた。INCL-6.0/ABLA07 による計算は、全体を通して概ねよく一致していた。しかし、図 1 に示すように標的核近傍核種 ( $^{48}\text{Cr}\sim^{55}\text{Co}$ ) の生成断面積では実験値とよく一致するものもあるが、計算値が最大 3 倍過大評価、もしくは 0.5 倍過小評価している傾向が見られた。

図 2 において質量数 55 の核種が生成される断面積（すなわち核子を 1~2 個放出する反応）を数値計算と比較すると、INCL-4.6 以外は実験値の 20%以内で評価しているが INCL-4.6 は 50% 過大評価していることが分かった。核データライブラリ JENDL-HE/2007 [5]とも比較検討を行ったが、標的核近傍核種を含め全体を通して実験値と倍半分以内でよく一致していた。しかし軽核種以外の生成断面積で、評価モデルの切り替えエネルギー（250 MeV）での不連続が見られた。

これらの結果から、軽核種生成では Bertini/GEM、中重核種生成では INCL-4.6/GEM、INCL++/ABLA07 は全核種にわたり実験値をよく再現していることがわかった。一方標的核近傍核種生成では INCL-4.6/GEM が反応をうまく記述していないということが明らかとなり、この点を改良することで核データの高度化に繋がると考えられる。

- [1] T. Sato, et al., “Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02”, J. Nucl. Sci. Technol. Vol.55 (6), 2018, pp.684-690.
- [2] D. Mancusi, et al., “Extension of the Liège intranuclear-cascade model to reactions induced by light nuclei”, Phys. Rev. C 90, 2014, 054602.
- [3] A. Boudard, et al., “New potentialities of the Liège intranuclear cascade model for reactions induced by nucleons and light charged particles”, Phys. Rev. C87, 2013, 014606.
- [4] S. Furihata, “Statistical analysis of light fragment production from medium energy proton-induced reactions”, Nucl. Instrum. Meth. B, Vol.171 (3), 2000, pp.251-258.
- [5] Y. Watanabe, et al., “Status of JENDL High Energy File”, J. Korean Phys. Soc. 59(2(3)), 2011, pp.1040-1045.

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) H. Matsuda, et. al, “Measurement of nuclide Production Cross Section for  $^{nat}\text{Fe}$  Irradiated with 0.4 – 3.0 GeV Proton in J-PARC”, J-PARC symposium, Tsukuba, Japan, 2019.

### (4) 今後の利用予定:

今後も様々な核種生成断面積を J-PARC において測定し、計算との比較検討を行う計画がある。また遮蔽計算や他の実験の数値計算も行う計画であり、スパコン占有サービスも活用し大型計算機の利用を継続する予定である。

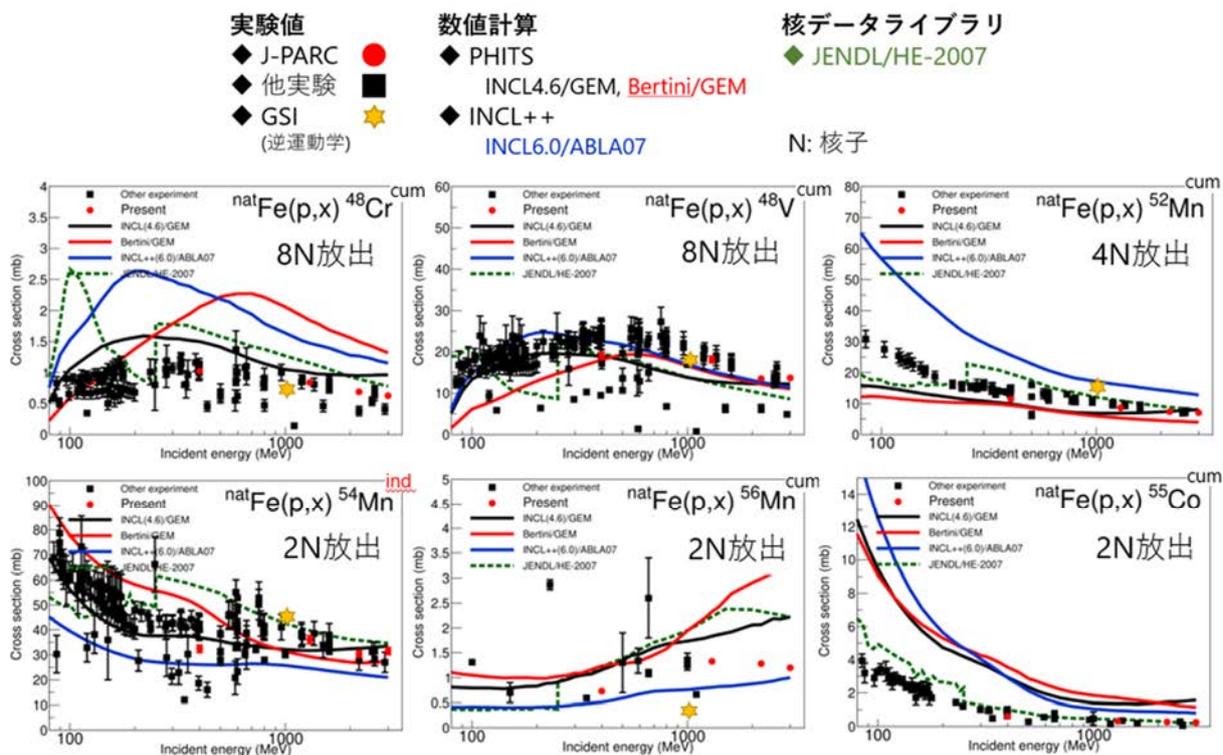


図1 標的近傍核種の生成断面積

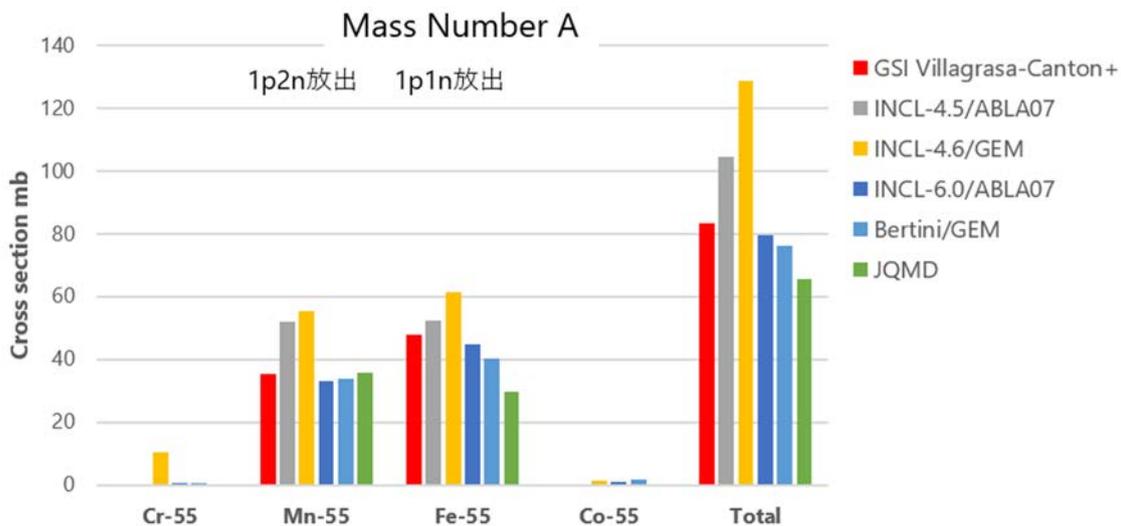


図2 質量数 A=55 核種の生成断面積

## 5.2.2 鉛標的に対する中性子エネルギースペクトルの不確かさ伝播計算

### Propagation of Uncertainty in Lead Spallation Particle Multiplicity to a Neutron Energy Spectrum

岩元 大樹

施設利用開発セクション

#### (1) 利用目的:

モンテカルロ粒子輸送計算コード PHITS は、高エネルギー加速器、核破砕中性子源施設及び加速器駆動核変換システム (ADS) の核設計および遮蔽設計に重要な役割を果たしている。高エネルギー核反応 (核破砕反応) で生成される中性子 (核破砕中性子) の情報は、施設の核的性能評価や遮蔽設計に直接的な影響を与えるため、モンテカルロ粒子輸送計算コードによる高精度の評価が重要であり、中性子エネルギースペクトルに対しては不確かさを含めて評価する必要がある。

粒子輸送計算による中性子エネルギースペクトルの不確かさは、ランダムサンプリング法による不確かさ伝播計算により求めることができる。しかしながら、これを満足できる統計精度で中性子エネルギースペクトルの不確かさを得るには膨大な粒子数とランダムサンプルを用いた計算機資源を必要とする。そこで、原子力機構の ICE X を利用することで、短期間のうちに目的とする中性子エネルギースペクトルの不確かさを求めることができた。以下ではその結果について記載する。

#### (2) 利用内容・結果:

図 1 に、本シミュレーションの体系を示す。シミュレーションでは、縦 15 cm×横 15 cm×厚さ 20 cm の鉛標的に 500 MeV の高エネルギー陽子ビームを入射したときに発生・放出する中性子の各測定角度におけるエネルギースペクトル評価値の不確かさをランダムサンプリング法により求めた。

本シミュレーション結果を図 2 に示す。この図は、核破砕反応の計算で重要なパラメータとなる「粒子多重度」の評価の不確かさをもとにランダムサンプルを多数用意し、これを用いて、30 度方向の検出器で検出される中性子エネルギースペクトル  $\psi$  および粒子多重度に起因する  $\psi$  の不確かさ

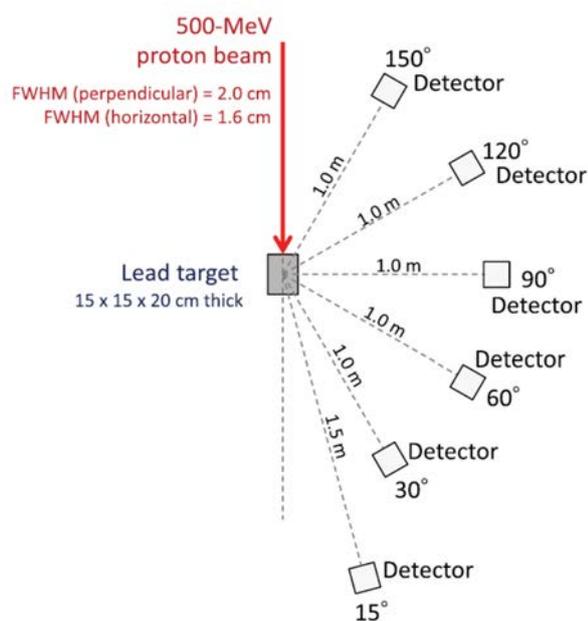


図 1 シミュレーション体系

$\delta\psi$ を求めたものである。ここでは評価結果のエネルギー構造を見るため、大きく 4 つのグループ ( $\psi_1, \psi_2, \psi_3$ および $\psi_4$ ) に分けて示している。この図より、サンプル数 $N$ を増やすほど中性子エネルギースペクトルおよびその不確かさの評価値が収束していくことがわかる。ランダムサンプルを用いない通常の粒子輸送計算では、1回のシミュレーションを行うが、ランダムサンプリング法では、評価値が収束するまでランダムサンプルを用いて計算を行わねばならず、膨大な計算コストを要する。本研究では、 $\psi$ および $\delta\psi$ が十分収束する $N = 800$ までランダムサンプリングを行った。原子力機構のICE X を利用することで、短期間のうちに $\psi$ の不確かさを評価できた。

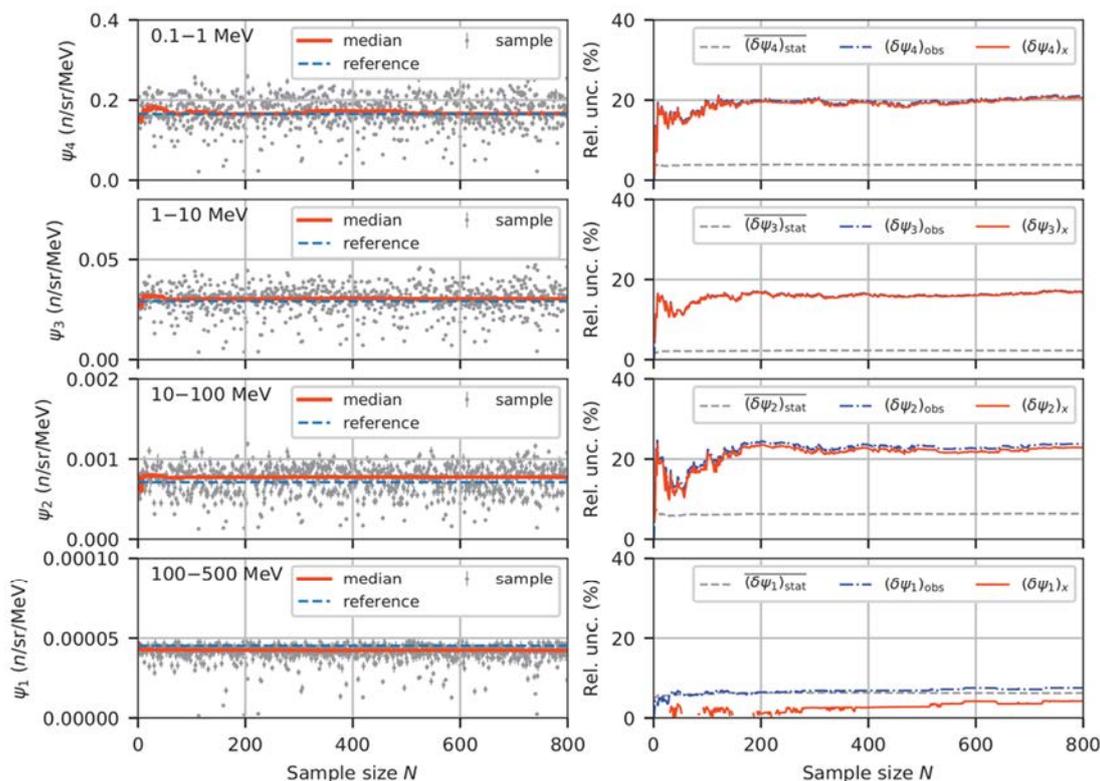


図 2 ランダムサンプル数による中性子エネルギースペクトル $\psi$ および粒子多重度に起因する $\psi$ の不確かさの収束

図 3 に、図 1 のシミュレーション体系における各検出器位置における中性子エネルギースペクトルを、ランダムサンプリングによる解析によって求めた不確かさおよび実験値とともに示す。通常、モンテカルロ粒子輸送計算を用いた解析は、統計的な不確かさのみを評価することができるが、本手法を用いることにより、統計的な不確かさに加えて粒子多重度に起因する不確かさを評価することに成功した。本成果を本年度中に学術論文誌に提出し、査読付き論文として公開することができた。

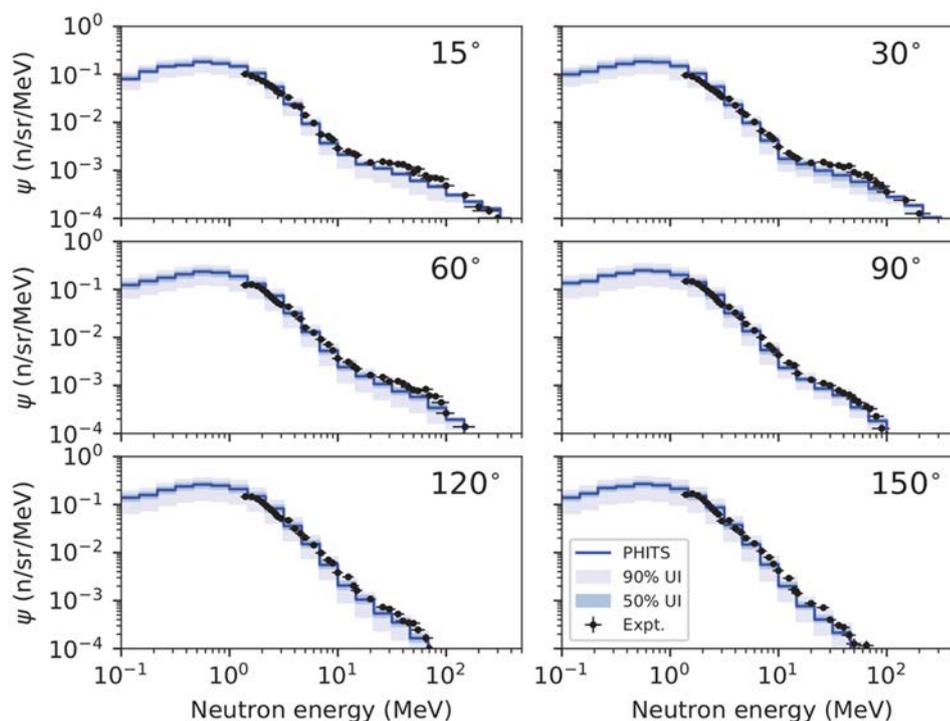


図3 500 MeV陽子入射による厚い鉛標的から生成される各測定角度における中性子エネルギースペクトルの計算値と実験値との比較。薄い青色の帯は、ランダムサンプリングにより得られた粒子多重度に起因する中性子エネルギースペクトルの不確かさを示す。

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) H. Iwamoto, S. Meigo, “Estimation of uncertainty in lead spallation particle multiplicity and its propagation to a neutron energy spectrum”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, Vol.57, Issue 3, 2020, pp.276-290.

**(4) 今後の利用予定:**

今後は、モンテカルロ粒子輸送計算コードを用いて ADS の遮蔽設計を実施する予定である。大規模な詳細モデルでのモンテカルロ計算のため、今年度と同程度あるいはそれ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。

### 5.2.3 J-PARC 中性子実験装置における遮へい体移動による遮へい性能への影響

#### Influence of Shield Removal on Shielding Performance at Neutron Instruments in J-PARC

原田 正英、吉田 亨\*、武田 和雄\*、仁井田 浩二\*  
 中性子利用セクション、\*RIST

##### (1) 利用目的:

J-PARC の物質・生命科学実験施設では、2020 年 4 月現在、21 台の中性子実験装置が設置され、様々な中性子実験に使用されている。これらの中性子実験装置の遮へい体は、1MW 陽子ビーム入射により核破碎中性子源で発生する中性子ビームを受け入れても十分遮へい性能を担保できるように、計算評価をもとに、遮へい体を設計・設置した。この計算評価は、ハッチや出入扉を除き、全中性子実験装置に遮へい体が設置されている条件で行っているため、運転中は、遮へい体を外すことができない。しかし、近年、機器の老朽化や出力の増強による保守作業のために、運転時でも中性子実験装置の遮へい体を外す必要が生じた。そのため、本研究では、遮へい体を外すことにより生じる遮へい性能の影響評価を行うことを目的とした。線量評価では、全中性子実験装置の遮へい体がモデル化されており、21 台分の計算を行う必要があるため、膨大な計算時間が予想され、大型計算機の利用が必須である。

##### (2) 利用内容・結果:

計算評価では、PHITS コード[1]を利用した。全中性子実験装置を考慮した計算モデルを構築し、中性子実験装置毎にダクトソースを用い中性子を発生させ、実験装置の遮へい体外側の中性子及びガンマ線の線量を評価した。当該中性子実験装置以外の前置き遮へい体（上流から 12m まで遮へい体）から下流側の上部遮へい体を外した計算モデルとし、当該中性子実験措置のみ中性子を発生させた。すべての中性子実験装置で計算を行い、線量を合算した。図 1 に、第 1 実験ホール部の中性子実験装置の計算モデルの 3 次元図を示す。図 2 は、実際の中性子実験装置（BL02）の上部遮へい体を外した計算モデルの例を示す。前置き遮へい体から下流側の上部遮へい体が外されていることがわかる。

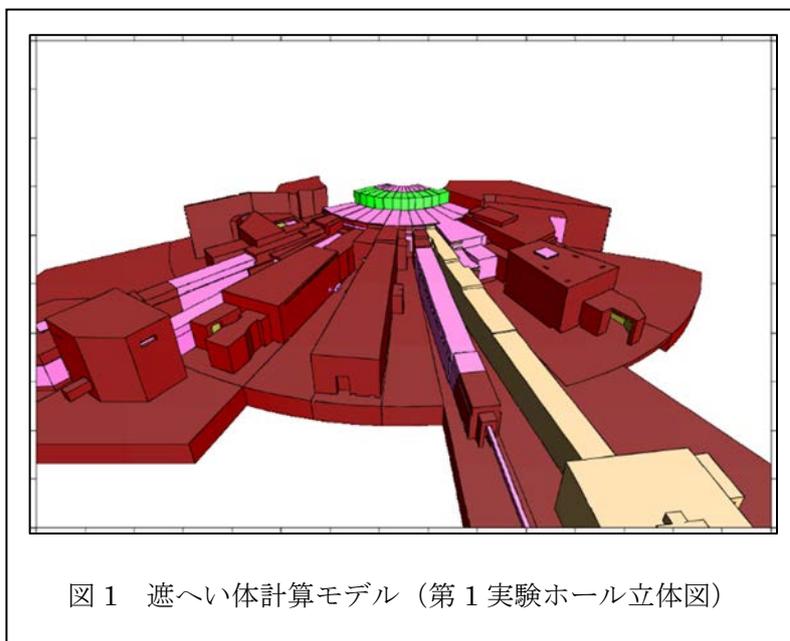
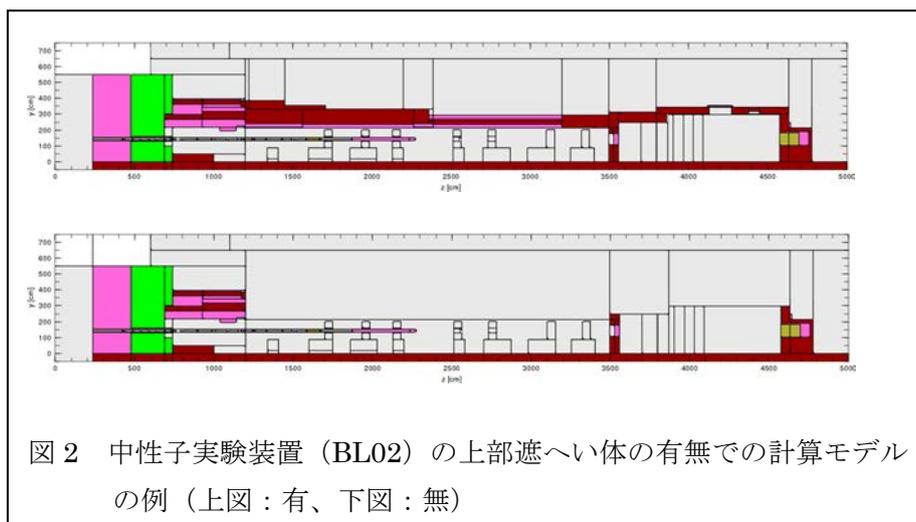


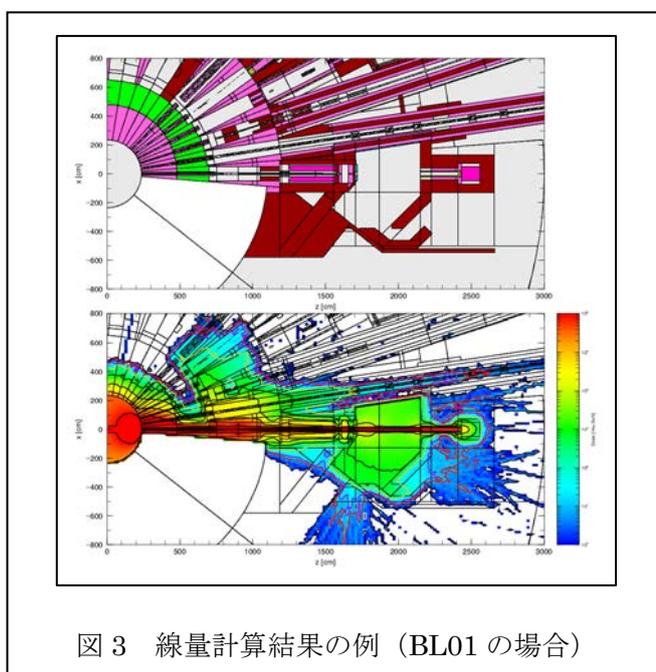
図 1 遮へい体計算モデル（第 1 実験ホール立体図）

図 1 に、第 1 実験ホール部の中性子実験装置の計算モデルの 3 次元図を示す。図 2 は、実際の中性子実験装置（BL02）の上部遮へい体を外した計算モデルの例を示す。前置き遮へい体から下流側の上部遮へい体が外されていることがわかる。



計算結果の例を、図3に示す。図3では、BL01以外の上部遮へい体が、前置き遮へい体から下流に向かって、全て取り外した計算モデルを構築して、BL01に中性子ビームを入れた場合の線量分布を示している。

計算の結果、前置き遮へい体から下流側の上部遮へい体を外した場合は、線量が高くなり、常時立入区域としての線量を担保できないことが分かった。そのため、上部遮へい体を外す位置を前置き遮へい体から下流側に変更する必要があると、さらなる計算評価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”, Journal of Nuclear Science and Technology, Vol.55, Issue 6, 2018, pp.684-690.

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

現時点ではなし

(2020年度に実施予定の追加計算を含めて、学会発表を行う予定である。)

**(4) 今後の利用予定:**

本評価の結果、上部遮へい体設置条件を変更した追加の計算が必要であり、2020年度も継続して計算評価を進める予定である。

## 5.2.4 J-PARC 非弾性中性子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

### Simulating Phonon Cross Section using 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な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注目し、フォノン分散構造の決定だけではなく、その寿命の定量的な評価を目指す。密度汎関数理論 (DFT) の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ことで、過去の研究で見過ごされてきた非従来型超伝導体における電子格子相互作用の役割の解明を目指す。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が期待される。

#### (2) 利用内容・結果:

本研究課題で必要となるフォノン分散構造、及び電子格子相互作用の評価には、Quantum ESPRESSO に実装されている密度汎関数摂動理論 (DFPT) を用いる。申請者は該当の計算コードを用いて、鉄系超伝導体 FeSe の第一原理フォノン計算を行い、非弾性 X 線散乱実験から得られた実測のフォノン分散構造との定量比較を行った。その結果、FeSe のフォノンのバンド構造を正確に再現するためには、磁気秩序を考慮することが不可欠であることが明らかになった (図 1)。常圧下では FeSe は磁気秩序を示さないため、一見すると観測事実と矛盾する結果である。しかし、鉄系超伝導体一般の特異な電子状態を反映した結果として、以下のように理解出来る。

まず、スピン非偏極状態の DFT/DFPT においては、軌道のエネルギーや占有率がスピニアップ (↑)・ダウン (↓) 間で同じになっており、それは鉄の 3d 軌道が常に ↑↓ 同じ数で占有された非磁性状態に対応する。しかしながら、FeSe で実現している非磁性相は、鉄の 3d 軌道の占有数が ↑↓ で異なっておりローカルな磁気モーメントが存在するものの、それらが動的に揺らぐことで正味の磁気モーメントとしてはゼロとなった状態と考えられる。これら 2 つのケースは、『非磁性』という意味においては同じであるが、フェルミ面上の状態密度が両者で大きく異なるため、

レスポンス（フォノン分散）や原子間力に大きな違いが現れる。実際、FeSe は常圧下では磁気秩序を示さないものの、顕著なスピン揺らぎの存在が非弾性中性子散乱実験で観測されている。つまり、動的に揺らぐ局所的なスピンのある瞬間におけるスナップショットの計算を、比較的エネルギーの低い反強磁性状態を代表点として実行すれば、動的磁性のフォノンへの影響を（ある程度）取り込んだ形で計算することが可能である。この解析から、鉄系超伝導体のような強いスピン揺らぎを内包した磁気不安定性近傍の格子ダイナミクスに関する新たな知見が得られたと言える。

非弾性散乱分光手法は近年、著しい発展を遂げ、上記のように実験・理論間の直接比較が可能になりつつある。J-PARC や SPring-8 の先端的な分光手法と DFT に代表される第一原理計算手法とを融合することによって、本研究成果が得られたという点を強調したい。また、図 1 に示すように、第一原理フォノン計算を用いた中性子や X 線の散乱強度の評価も可能となるため、実験効率を最適化するような実験条件の検討も可能となる。そういった散乱強度の評価手法の開発・改良を申請者は進めており、今後は J-PARC のユーザー実験の支援にも利用する予定である。

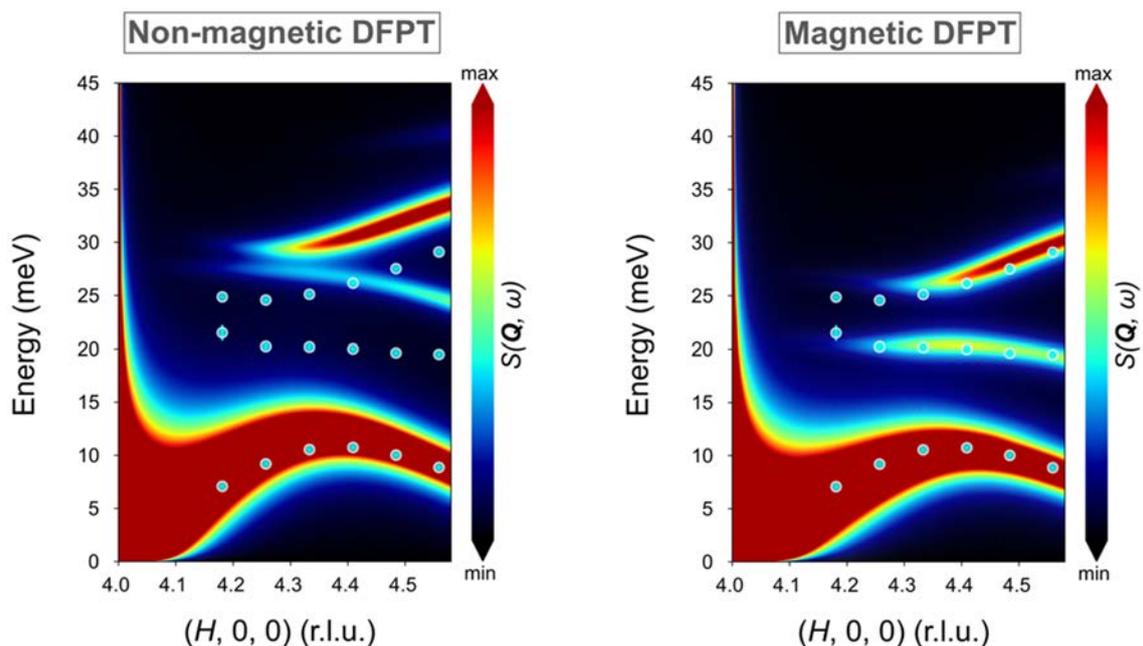


図 1 鉄系超伝導体 FeSe の第一原理フォノン計算と実験結果との比較  
 水色の丸は実測点に対応する。実験を行う運動量空間上で有意な散乱強度を持つモードを同定するために、計算されたフォノン・ブランチに動的構造因子の重みをつけて描いている。鉄系超伝導体のフォノン構造は鉄サイトのスピン状態から強い影響を受けるため、ある種の磁気秩序下における第一原理計算を行うことで実験結果は再現される。

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

論文

- 1) N. Murai, T. Fukuda, M. Nakajima, M. Kawamura, D. Ishikawa, S. Tajima, A. Q. R. Baron, “Lattice dynamics in FeSe via inelastic x-ray scattering and first-principles calculations”, Phys. Rev. B, Vol.101, Issue 3, 2020, pp.035126\_1-035126\_6.

(上記の論文中の計算は全て、原子力機構の大型計算機 SGI ICE X でおこなわれたものである。大型計算機利用が謝辞にも明記されている。)

学会発表

- 2) 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”、日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜、2019.
- 3) N. Murai, T. Fukuda, M. Nakajima, M. Kawamura, D. Ishikawa, S. Tajima, A. Baron, “Phonon spectroscopy in FeSe using high-resolution inelastic x-ray scattering”, APS March Meeting 2020, Denver, U.S.A., March 2020.

**(4) 今後の利用予定:**

これまで実験・理論間でフォノンの周波数の比較を行ってきたが、今後はそれに加えて電子格子相互作用に起因するフォノンの線幅の評価を行う。特に、磁気秩序の電子格子相互作用への影響の評価を目指す。

## 5.2.5 鉄系超伝導体の第一原理計算

### Ab-initio Calculations of Iron Based High- $T_c$ Superconductor

鈴谷 賢太郎

中性子利用セクション

#### (1) 利用目的:

物質の示す性質は原子配列に大きく依存する。特に磁性と物質の構造安定性との関係を正しく理解し予想する事は非常に重要である。近年の密度汎関数理論 (DFT) の発展により、経験的パラメータを用いる事なく個体の電子状態を第一原理的に決定することも可能となりつつある。本研究では典型的な鉄系超伝導体をターゲットに磁性の有無によって構造特性がどのような影響を受けるのかを検証した。

#### (2) 利用内容・結果:

本研究では擬ポテンシャル法と平面波基底を用いた第一原理 DFT コード Quantum ESPRESSO を用いた計算を行った。特に、典型的な鉄系超伝導体 FeSe の安定な結晶構造に対する磁性の有無を調べた。一般化密度勾配近似による PBE 汎関数を用いたウルトラソフト型擬ポテンシャルを用いた計算を行った。磁性の構造特性への影響を調べるため、非磁性状態とストライプ型の反強磁性状態での構造最適化を行なった。簡単のため、格子定数は実験値に固定し、Se の原子座標のみを最適化した。表 1 はその結果である。磁性の有無によって Se の原子座標は非常に大きな影響を受けていることがわかる。より重要な点は、実験値に近い Se の原子座標は反強磁性型の磁気秩序下でのみ再現されるという点である。この結果から、構造特性の正確な再現には磁性の寄与を考慮した計算を行うことが不可欠である事が分かる。

表 1 FeSe の Se 位置の計算値に磁気秩序が及ぼす影響

Exp. は実験から決定された Se の原子座標、DFT(NM)、DFT(AFM) はそれぞれ非磁性状態、ストライプ型反強磁性秩序状態における DFT から得られた Se の原子座標の理論値を表す。計算結果は交換相関汎関数や擬ポテンシャルの種類に影響を受けるが、どのような計算条件を用いても磁気秩序下における計算結果は非磁性状態の結果に比べて実測の原子位置をより良く再現する。

	Exp.	DFT (NM)	DFT (AFM)
$Z_{se}$	0.2656	0.2407	0.2615

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

#### (4) 今後の利用予定:

今回の研究で行ったような解析を他物質等でも行う予定である。

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

---

### 5.3.1 海洋拡散シミュレーションモデル SEA-GEARN への鉛直拡散係数モデルの導入 Implementing Vertical Mixing Parameterization Model in the SEA-GEARN Radionuclide Dispersion Model

上平 雄基  
環境動態研究グループ

#### (1) 利用目的:

環境動態研究グループでは海洋拡散シミュレーションモデル SEA-GEARN の開発を行ってきた。SEA-GEARN は多数の粒子を放射性核種に模擬し、海流による移流・拡散や放射性崩壊を考慮することで、海洋中の放射性核種濃度を計算するコードである。環境動態研究グループでは、SEA-GEARN を使用した海洋シミュレーションを実施、予め計算された海況場（主に海水流速）を入力、そして他機関より受信した海況場を入力することで放射性核種の海洋中の移流・拡散を計算している。放射性核種の海洋中の分布を計算するためには鉛直拡散係数が必要となるが、現在は一定値を仮定して計算を行っている。このため、より高精度な鉛直拡散係数を計算するモデルとして KPP (K-profile parameterization) モデルを導入することで従来の SEA-GEARN では考慮できなかった詳細な鉛直拡散を表現可能とした放射性物質の海洋中の予測精度の向上を図る。なお、本作業は平成 31 年度スーパーコンピュータ利用に係るプログラミング支援作業によって実施されたものである。

#### (2) 利用内容・結果:

今回導入した鉛直拡散係数モデル KPP モデルでは、混合層と呼ばれる海表面近傍に存在する海水が活発に混ざり易い層の鉛直拡散効果を考慮することができる。鉛直拡散係数を計算するために必要な変数は海表面風速、日射量、降水量、水深、海表面流速、海水水温、海水塩分であり、これらは予め計算されたデータを入力値として用意する。導入した鉛直拡散係数モデルによる日本近海の混合層内の鉛直拡散係数の計算結果を示す（図 1）。傾向としては全体的に夏季よりも冬季の方が高い値を示し、黒潮の南側で高い値が出現している。この結果から、従来までは一定値を仮定していた鉛直拡散係数は空間的、時間的な変動性を有することが分かり、鉛直拡散係数モデルを導入することで、より現実的な海洋の乱流構造を考慮した海洋拡散シミュレーションが可能となった。

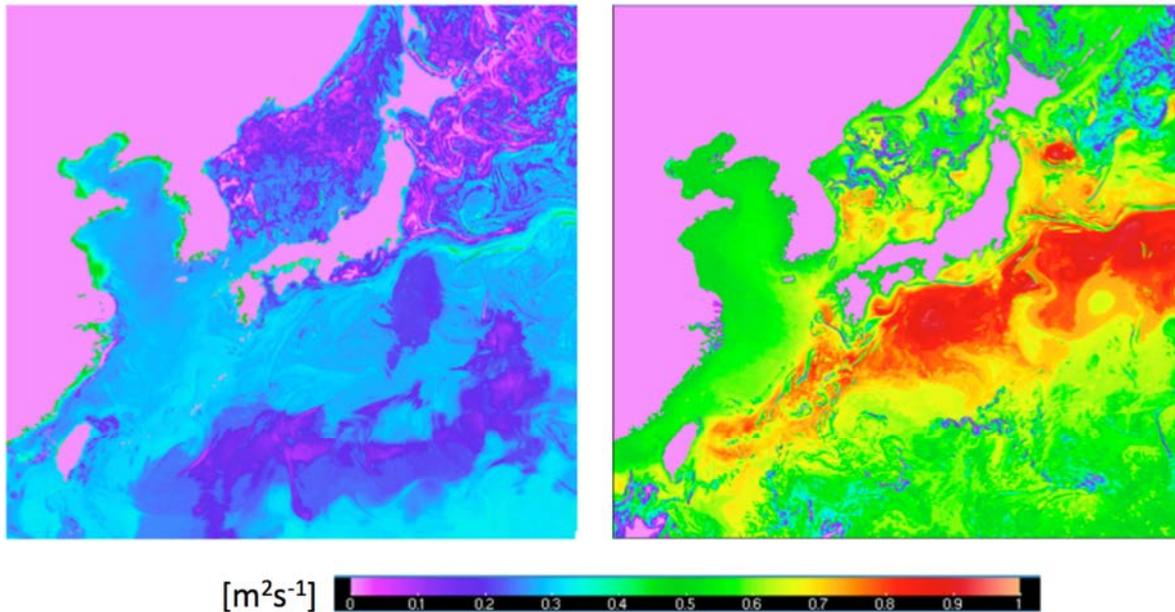


図1 混合層内の鉛直拡散係数（左図：2010/8/1、右図：2011/1/1）

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

なし

**(4) 今後の利用予定:**

本作業によって高度化した SEA-GEARN を環境動態研究グループが開発した緊急時海洋環境放射能評価システム STEAMER (Short-Term Emergency Assessment system of Marine Environmental Radioactivity) に導入することにより原子力施設等から放出された放射性物質の海洋中移行の予報精度向上、及び海洋拡散メカニズムの詳細な解析が期待できる。

### 5.3.2 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 Analysis on Plume Dispersion Around Nuclear Facilities using a Local-scale High-resolution Atmospheric Dispersion Model

中山 浩成  
環境動態研究グループ

#### (1) 利用目的:

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。しかしながら、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われたものである。そのため、計算対象時間は 10 分程度、計算領域は数 100 m~1 km 程度とすることが多く、比較的短い時間で拡散計算を行うことができた。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。また、実際の気象状況は、高低気圧の移動や前線の通過等に伴う一時的な静穏状態、風速場の急変や強い鉛直シアなどが生じることがあり、時間的に変化する。こういった複雑な地表面被覆形態を精緻に解像し、時間的に変化する現実的な気象状況に対しては、計算技術やコストの問題もあり未検証であった。

そこで、本研究では LOHDIM-LES 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での高分解能大気拡散シミュレーションの再現計算を行った。気象状況が時間変化する条件下での空気中濃度の測定値と比較することで、モデルの検証を詳細に行うことを目的とする。また、建物影響の著しい局所域スケールでの大気拡散予測精度の向上のために、振動方程式を用いたデータ同化手法を新規に開発し、気象観測値との比較検証により妥当性を検証することを目的とする。

今年度は、以下の 2 つの研究テーマに取り組み、「大口課題：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」として大型計算機を利用し、地表面形状を精緻に解像して大規模詳細計算を行うために計算機ノードを 50 台以上使用して多数の試験計算・再現計算を実施した。

- (a) 六ヶ所村再処理施設を対象にした現実気象条件下での局所域大気拡散の再現計算
- (b) 局所域大気拡散予測精度の向上のためのデータ同化手法の開発と検証

## (2) 利用内容・結果:

### (a) 六ヶ所村再処理施設を対象にした現実気象条件下での局所域大気拡散の再現計算

2017年度後期の最適化作業にて高速化された LOHDIM-LES コードを用いて、六ヶ所村再処理施設を対象にした局所域大気拡散計算を行った。地表面形状は、数値標高・数値表面データを用いて精緻に解像した。計算領域は、水平方向に 5 km、鉛直方向に 1 km とした。計算格子は、水平方向に 5 m、鉛直方向に 2.5 m・20 m としてストレッチをかけている。樹木群は陽的に解像し、抗力係数・葉面積密度・瞬間風速を用いて乱流効果を表現している。

現実的な気象条件下での大気拡散計算を行うために、施設内で取得された気象観測値を LOHDIM-LES の入力・境界条件に与えた。また、排気塔高さ付近に実際の放出量を与えた。計算対象期間は、2008年6月18日 6:00-12:00 とした。なお、計算条件として、熱的影響のない中立気象条件を仮定した。周辺のモニタリングポストによる空気中濃度の実測値と比較すると、濃度の出現時刻・消失時刻やピーク値などを良好に再現している時間帯が見られたが、一方で濃度の出現を全く表現できない時間帯も見られた。今回の計算条件では流れの浮力効果を考慮しなかったため、局所的に発生するサーマルプルームによるトレーサガスの地表面への着地などを再現できなかったためと思われる。今後は熱的效果を考慮して、より現実的に気象状況を再現し、大気拡散計算を行う必要がある。本計算手法の確立により、平常時における放射性核種の環境放出について厳密な動態予測および詳細環境評価が可能となり、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。

### (b) 局所域大気拡散予測精度の向上のためのデータ同化手法の開発と検証

データ同化手法とは、流体運動方程式に気象観測値と計算値との誤差にある係数を乗じたものを外力項として加え、現実の状況に近い結果を出させるように計算値を修正していく技術である。これまでの手法は主に広域スケールを対象とした気象モデルのために開発されたものであり、通常用いられる観測値も 10 分から 1 時間程度の間隔で時間平均化されている。そのため、従来の手法では、係数を大きくすると観測値と一致した平均風速値は得られるが、瞬間的に変化する乱流スケールの短周期風速変動は減衰する。一方、係数を小さくすると短周期変動性状は維持されるものの計算値を観測値に近づけることはできない。そのため、短周期変動性状を考慮して計算値を観測値に近づけられるデータ同化手法はこれまで存在しなかった。

そこで、振動方程式を使用して短周期風速変動性状を維持しつつも平均風速の観測値を LES モデルに融合するデータ同化手法を新たに開発した。この新規手法は、観測値と計算値の誤差により構成される振動方程式中の振動項と係数を乗じて時間積分し、それを流体運動方程式中の外力項として加えるものである。試験計算として、京都市街地で気象観測により得られた風速値を用いてデータ同化を行った。図 1 は、従来手法（上段）および新規開発手法（下段）によるデータ同化した瞬間風速場を表している。従来手法では、観測による時間平均値に近づいてしまったために、データ同化領域より乱流変動が急速に減衰しているのが分かる。一方、新規手法では、振動方程式の活用により乱流変動が減衰することなくデータ同化することができた。これらにより、本新規手法は乱流変動性状を維持しつつ平均風速の観測値に近づけられることを実証した。局所域拡散予測精度の向上につながる研究成果を生み出すことができた。

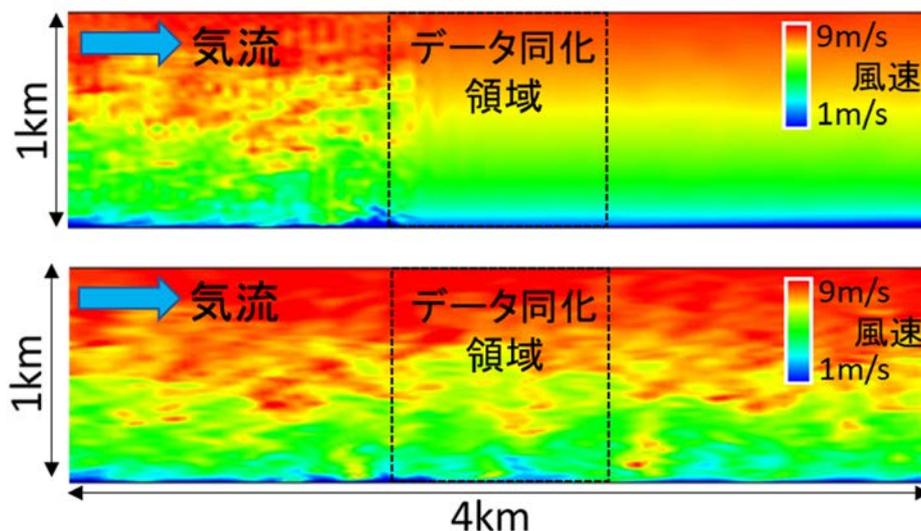


図1 データ同化による瞬間風速場（上段：従来法、下段：新規手法）

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等)：**

査読付きジャーナル

- 1) H. Nakayama, T. Takemi, “Development of a Data Assimilation Method Using Vibration Equation for Large-Eddy Simulations of Turbulent Boundary Layer Flows”, Journal of Advances in Modeling Earth Systems, Vol. 12, Issue 8, e2019MS001872.

プロシーディング

- 2) H. Nakayama, T. Takemi, “Development of the data assimilation method suitable for large-eddy simulation model using the vibration equation”, Proceedings of 19th International Conference on Harmonisation within Atmospheric Dispersion Modelling for Regulatory Purposes (HARMO-19), Bruges, Belgium, June 3-6, 2019, 5p., USB Flash Drive.

口頭発表

- 3) 中山浩成、佐藤大樹、古田禄大、永井晴康、“大気放出された放射性核種の濃度分布と放出量をγ線画像から推定する手法開発(2) 大気中核種濃度分布の計算”、日本原子力学会 2020年春の年会、2020.

**(4) 今後の利用予定：**

六ヶ所村再処理施設を対象にした現実気象条件下での局所域大気拡散の再現計算に新規開発したデータ同化手法を組み込み、大型計算機による大規模詳細計算を行い、より高い精度での拡散予測手法の確立を目指す。

### 5.3.3 化学輸送モデル GEARN-FDM によるヨウ素 129 の陸域排出量の推定

#### Estimation of Terrestrial Emission 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:

稼働が予定される国内の使用済核燃料再処理施設から管理放出される放射性物質のひとつに放射性ヨウ素 129 (129I) がある。再処理施設に起因する大気中の 129I の環境影響評価をするうえで、129I の大気中濃度のバックグラウンド値の把握は重要である。国内の再処理施設以外の 129I は、主に国外の使用済核燃料再処理施設に由来する。再処理施設から放出された 129I は大気中を移流し、陸域や海洋へ沈着する。沈着した 129I は大気中へ揮発し、再び輸送される。海洋からの 129I の揮発は安定ヨウ素の研究に基づいて推定が行われてきた。しかしながら、陸域からの 129I の揮発の分布やそのフラックスに関する知見は乏しく、129I のバックグラウンド値の理解に対する不確実性が大きいことが課題である。

本研究グループでは、大気中の 129I の動態理解を目的として開発した化学輸送モデル GEARN-FDM を用いて、現在の陸域からの 129I の揮発フラックスとその分布の推定を試みた。現在までに稼働した/している使用済核燃料再処理施設から放出された 129I の陸域沈着をシミュレートするには、大気中の 129I 循環に影響する諸過程の解くための長期間の気象場計算が必要となる。課室の計算機では膨大な計算機資源を要するため、本研究グループが用いる気象モデルを原子力機構の大型計算機で利用できるよう、システム計算科学センターに協力を依頼した。本稿では、予備試験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。129I の陸域エミッション推定の予備試験として、気象モデルによるシミュレーション期間を 2006 年から 2010 年の 5 年とし、2006 年をスピンアップ期間、2007 年から 2010 年の 4 年間をエミッション推定に用いた。本推定では、1940 年代以降に稼働した大規模な使用済核燃料再処理施設（マルクール、ラアーグ、セラフィールド、マヤク、セヴェルスク、チェレズノゴルスク、ハンフォード、サバンナリバー）に着目し、各施設からの大気放出に起因する 129I の沈着分布を推定し、それらに基づいて現在の陸域の 129I の揮発フラックスを推定した。

図 1 に着目した再処理施設からの 129I の年間沈着量の全球分布を示す。予備試験では 2007 年から 2010 年の 4 年間の気象場に対して、129I の沈着量をシミュレートし、算術平均を年間沈着量とした。図 2 に得られた年間沈着量に基づいて推定された現在の陸域の 129I の揮発フラックスを示す。本推定では、年間沈着量から各再処理施設の稼働期間中の総沈着を計算し、陸域からの安定ヨウ素の揮発の時定数を用いることで、現在の 129I の揮発フラックスを推定した。現在の 129I の陸域全球揮発フラックスは 1.7 GBq/y と概算され、既往研究で推定された 1.0-2.2

GBq/y のそれと良い一致を示した。今後、1940 年代から現在までの気象場を計算し、本手法を用いることでより正確な揮発フラックスが推定されると考えられる。

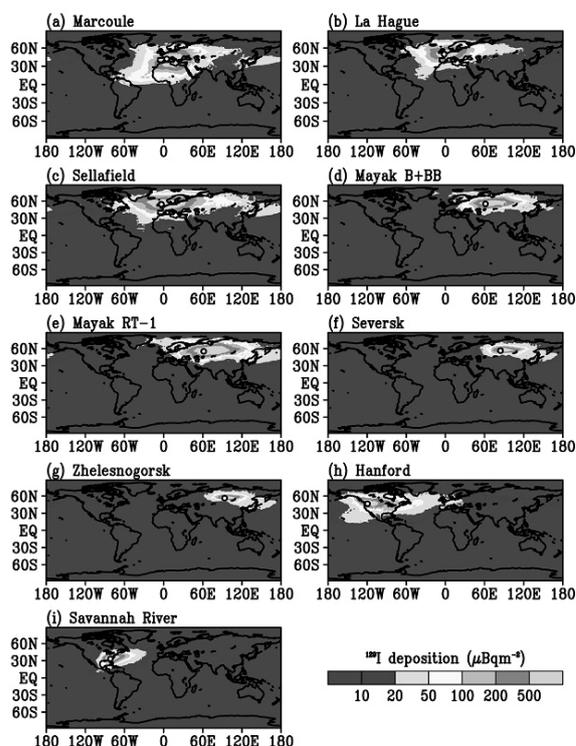


図1 使用済核燃料再処理施設からの大気放出による  $^{129}\text{I}$  の年間沈着量分布 (a)マルクール、(b)ラアグ、(c)セラフィールド、(d)および(e)マヤク、(f)セヴェルスク、(g)チェレズノゴルスク、(h)ハンフォード、(i)サバンナリバー

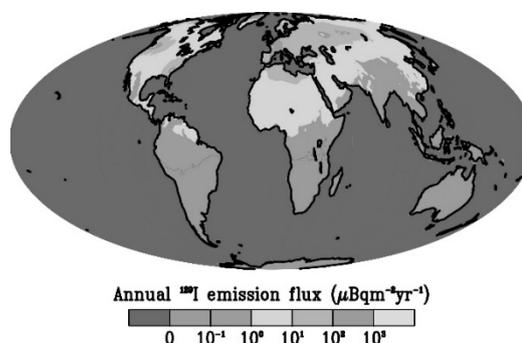


図2 本研究で推定された、陸域からの現在の  $^{129}\text{I}$  の年間揮発フラックス分布

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) M. Kadowaki, H. Terada, “An estimate of the global budget of atmospheric iodine-129 during the 2000s with a global transport model”, American Geophysical Union 2019 Fall Meeting (AGU 2019), San Francisco, U.S.A., 2019.

### (4) 今後の利用予定:

気象モデルで1940年代から現在までの気象場の長期計算を実施し、シミュレートされた気象場を用いて  $^{129}\text{I}$  の陸域からの揮発フラックスを推定する。また、本モデルを1F事故解析に適用し、事故時に大気中へ放出された放射性ヨウ素の放出源情報を再推定する。本モデルで考慮する大気中のヨウ素化学反応の数を増やし、大気中の  $^{129}\text{I}$  のより詳細な動態の理解に向けた数値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が必要となることから、今後も原子力機構のICE X およびその後継機の利用を予定している。

### 5.3.4 DCHAIN 及び PHITS の改良

#### Improvement of DCHAIN and PHITS

安部 晋一郎  
放射線挙動解析研究グループ

##### (1) 利用目的:

粒子・重イオン輸送計算コード PHITS には、高エネルギー粒子誘導放射能計算コード DCHAIN-SP の入力ファイルを作成する[T-DCHAIN]タリーが実装されている。DCHAIN-SP では、計算を行う幾何形状の種類として領域メッシュ (reg) に加えて xyz スコアリングメッシュ (xyz) が使用可能である。PHITS には描画ソフトウェア ANGEL が内蔵されており、xyz スコアリングメッシュの計算結果を xy, yz, zx の二次元カラークラスタープロット図で出力する機能が備わっている。一方、現状の DCHAIN-SP は、放射能や崩壊熱を時間の関数でプロットした図を作成できるが、xy, yz, zx の二次元カラークラスタープロット図を出力する機能は備わっていない。

そこで、本開発では DCHAIN-SP の xyz メッシュの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。また、DCHAIN-SP の計算で得られる誘導放射能の情報を PHITS の線源情報の形式で出力する機能の開発を行う。

##### (2) 利用内容・結果:

ANGEL は、数値データファイルと必要最低限の命令 (ANGEL 言語) で構成された簡単なインプットファイルから、グラフを EPS (Enhanced PostScript) ファイル形式で作成する。そこで、DCHAIN-SP の xyz スコアリングメッシュの計算結果について、ANGEL で処理可能な形式に整理したファイルとして出力する機能を作成した。また、出力する二次元カラークラスタープロットの種類を指定するために、DCHAIN-SP に新たなパラメータ “iplotmode” を追加した。これにより、1 回の DCHAIN-SP の実行で、最大で xy, yz, zx の二次元カラークラスタープロット図 3 枚を同時に出力することが可能となった。

新規作成した機能の応用例として、1 辺 10 cm の立方体のコンクリートに 100MeV の陽子をビーム電流 0.1  $\mu$ A、ビーム半径 0.5 cm で 10 分間照射した後、50 分冷却したときの誘導放射能の時間変化を計算した。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 で得られた冷却中の誘導放射能の空間分布の時間変化をそれぞれ示す。陽子が照射された箇所が強く放射化されている一方、陽子の届かない深い領域でも二次中性子によって放射化されることが確認できた。また、50 分間の冷却で誘導放射能が全体的に 2 桁程度減少することもわかった。更に、100MeV の陽子のコンクリート中における飛程に相当する深さ 4.3 cm 程度の放射能に関しては、照射直後は周辺と大差ない放射能となっているが、50 分間の冷却後は周辺と比べて放射能が高くなることがわかった。

以上のように、DCHAIN-SP の xyz スコアリングメッシュの計算結果を二次元カラークラス

タープロットで出力可能となった。これにより、放射能の空間分布を一目で把握することが可能となり、加速器施設や原子炉などの誘導放射能の計算における PHITS の利用拡大が期待される。

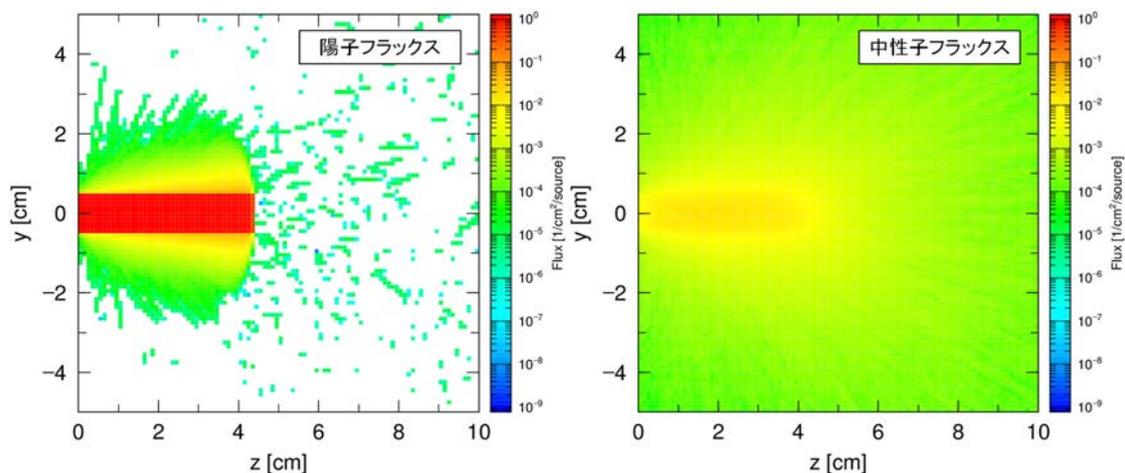


図1 コンクリート中の陽子および中性子フラックスの空間分布  
(y 軸：上下方向、z 軸：深さ方向)

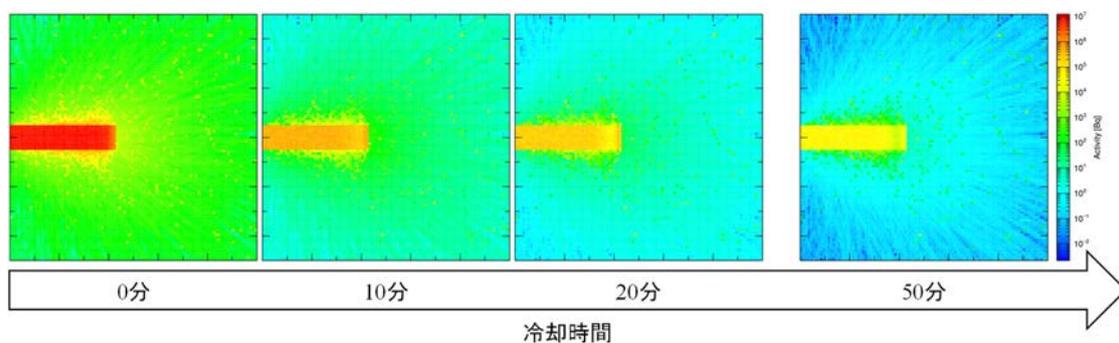


図2 コンクリート中の誘導放射能の空間分布の時間変化

**(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。DCHAIN-SP で計算された誘導放射能の情報を PHITS の線源情報の形式で出力する機能が完成すれば、PHITS と DCHAIN-SP による放射能の逐次計算が可能となる。

### 5.3.5 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、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ている。そこで、ユーザーが各パラメータを用意に理解して入力できる PHITS 入力支援のためのテキストエディタ PHACE 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 30 年度までに 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]セクション等のデータ専用入力フォーム等を開発した。本年度は、これら入力フォームの基盤となる、Windows 及び Mac 環境に対応可能なプログラム開発言語 Python による PHITS 専用テキストエディタ PHACE の開発を行った。具体的には、Python プログラムの開発環境の構築とテキストエディタのプログラムの作成を実施し、テキストエディタとして基本的な機能を備えた PHACE の実行ファイルを作成した。本年度は以下の条件による環境下でプログラムの開発、PHACE の実行ファイルの作成、及び動作確認を行った。

- |                 |                         |
|-----------------|-------------------------|
| ● 動作環境 (OS)     | Microsoft Windows 10    |
| ● ハードウェア        | Microsoft Windows 搭載 PC |
| ● 開発言語          | Python                  |
| ● 開発環境 (ソフトウェア) | Python3.7/3.4, wxPython |

図 1 に、テキストエディタ PHACE の表示例を示す。図 1 の①～④は、それぞれ、①「ファイル保存」、「コピー」、「検索」等のテキストエディタとしての基本機能や PHITS の計算機能等を含む「メニューバー」、②いくつかの基本機能のショートカットボタンを含む「ツールバー」、③コメント文と色分け可能な PHITS 入力データ編集用テキストエディタ、及び④開いているファイルの場所やカーソルの行及び列数を表示する「ステータスバー」を示す。

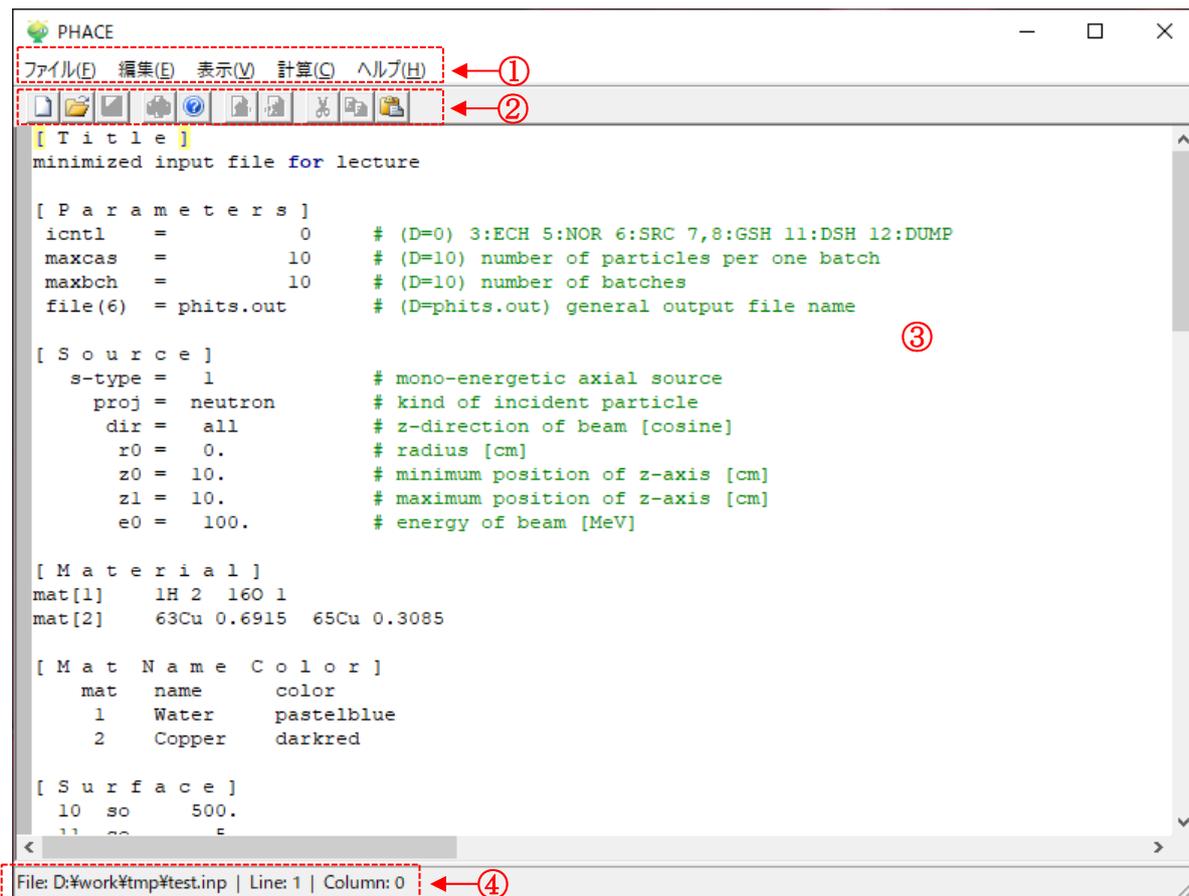


図 1 PHITS 専用テキストエディタ PHACE の表示例

図 2 に「メニューバー」の「計算」の表示例と「PHITS の設定」の画面を示す。PHITS の実行は、「PHITS の実行」ボタンをクリックする、またはショートカットキーを設定することで可能になる。「PHITS の設定」画面の①～④は、それぞれ、①PHITS 実行ファイルが置かれているディレクトリのパスを指定する「PHITS 実行ファイルのパス」、②PHITS 実行ファイル名を指定する「PHITS 実行ファイル名」、③実行時に任意の機能を付与する「PHITS 実行時のオプション」、及び④作業場所を示す「ワークディレクトリ」を示す。PHACE で PHITS を実行するとき、これらの設定が必要となる。



図 2 「メニューバー」の「計算」の表示例（左）と「PHITS の設定」の画面（右）

今年度の開発により、テキストエディタとして基本的な機能をもつ PHITS 専用テキストエディタ PHACE が完成し、PHACE 上で PHITS の実行が可能となった。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) を正しく読み込み、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) 岩元洋介、“PHITS の開発の現状”、医用放射線シミュレーション研究会 2019、つくば市、2019 年 8 月。

### (4) 今後の利用予定:

今後は、PHITS 専用テキストエディタ PHACE に、パラメータ等の説明表示機能、平成 30 年度までに開発した[material]、[cell]、[surface]セクション等のデータ専用入力フォームの機能等を追加し、動作環境 (OS) に依存しない PHACE を作成する予定である。

### 5.3.6 PHITS における分散分析に基づく評価機能の開発

#### PHITS Development of Estimation Function Based on ANOVA

橋本 慎太郎

放射線挙動解析研究グループ

##### (1) 利用目的:

粒子・重イオン輸送計算コード PHITS は、任意の形状や物質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ため、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、計算条件（インプット）を少し変更した場合の計算結果（アウトプット）への影響を系統的に分析したい、というユーザーの要望が多くなっている。例えば物質の密度に誤差が含まれる場合、その誤差が輸送計算の結果に与える影響を評価することは、結果の信頼性を定量的に示す上で重要な役割を果たす。誤差の影響を調べるためには、その誤差の範囲で密度を変化させながら輸送計算を実行すれば可能である。しかし、スクリプト等の外部プログラムを用意する必要があるため、多くのユーザーが容易に評価できない状況である。

そこで我々は、原子力機構の大型計算機 ICE X を利用し、計算条件の一部を変化させながら複数回の輸送計算を実行するためのスクリプトを開発した。また、track タリーの複数の結果から分散分析に基づいた系統的な不確かさを評価する機能を PHITS に実装した。これらにより計算条件の変化が結果に与える影響を系統的な不確かさとして容易に評価可能となる。

##### (2) 利用内容・結果:

2019 年度は、計算条件が変わった場合の輸送計算の結果を分析するための機能を開発した。この機能は専用スクリプト autorun.bat (Windows 用) や autorun.sh (Mac, Linux 用) を使うことで利用でき、2020 年 3 月にリリースされた PHITS version 3.20 のパッケージに実装された。例えば物質の密度に誤差が含まれる場合、本機能を利用することで、誤差の範囲で密度を変化させた輸送計算を複数回実行し、密度の誤差が計算結果に与える影響を分析することが可能となる。開発した分析機能は次のような流れで利用する。

- PHITS の輸送計算の入力情報をまとめたインプットファイル（ここでは phits.inp とする）を用意
- 専用スクリプトのためのインプットファイル（ここでは autorun.inp とする）を用意
- autorun.inp を入力ファイルとして、専用スクリプトを実行

上記の例示で、2 種類のインプットファイル（phits.inp と autorun.inp）に不備がなければ、専用スクリプトの実行により自動的に PHITS の輸送計算が実行され、分析結果をまとめたファイルが出力される。

続いて、各インプットファイルの作成方法と専用スクリプトの動作について紹介する。

## I. 輸送計算のインプットファイル (phits.inp)

輸送計算の情報をまとめた `phits.inp` (ファイル名は変更可能) では、変化させたい数値をユーザー定義定数  $ci$  ( $i = 1, \dots, 99$ ) により指定する。また、`[parameters]` セクションにおいて分析機能スクリプトの利用を示す `icntl=16` とする。更に、分析機能を利用したいタリーセクションに、次のような `anatally` サブセクションを設定する。

```
anatally start
  manatally = 1
  sfile = track_a.out
anatally end
```

`Anatally` サブセクションは、`anatally start` と `anatally end` で挟んだ領域で設定する。ここで、`manatally` は分析内容を決めるオプションであり、`manatally=1` の場合は、計算条件  $ci$  の変化がタリー結果に与える影響を分散分析 (ANOVA; analysis of variance) に基づき系統的な不確かさとして評価する。`sfile` は分析結果を出力するファイル名である。

## II. 専用スクリプトのインプットファイル (autorun.inp)

専用スクリプトを実行する際に使用するインプットファイル `autorun.inp` (ファイル名は変更可能) は次の形式で作成する。

```
file=phits.inp
set:c1
c-type=1
nc=3
0.0 1.0 2.0
```

`file=`の後に、輸送計算の情報をまとめた `PHITS` のインプットファイル名を指定する。`set:`の後に、そのインプットファイル内で変化させたい計算条件  $ci$  の情報を記載する。`set:c1` の次の行から、`e-type` 等のタリーのメッシュタイプと同じ形式で、 $ci$  のデータを指定できる。上の例では、 $c1$  の値を  $0.0$  から  $2.0$  まで  $1.0$  きざみで変化させることを意味しており、各  $c1$  の値を使って合計 3 回の輸送計算を実行する。

## III. 専用スクリプトの動作

専用スクリプトを実行すると、各輸送計算の結果を出力するための `outfiles` フォルダを作成する。更にその中に `/1/`, `/2/`, `/3/`, ... という名前のフォルダを  $nc$  個作成し、各  $ci$  の値を使って計算した `PHITS` の結果を各フォルダに移動させる。 $nc$  回 (本例では 3 回) の輸送計算が終了すると、`outfiles` フォルダにある計算結果を読み込みながら分散分析を行い、その結果を `anatally` サブセクションの `sfile` で指定したファイルに書き出す。分析結果として、通常のタリー結果の平均値と統計誤差  $\sigma_{stat}$  に加え、系統的な不確かさ  $U_{syst}$  と全不確かさ  $U_{tot}$  が出力される。これらの関係は次の通りである。

$$(U_{tot})^2 = (U_{syst})^2 + (\sigma_{stat})^2$$

ここで、統計誤差  $\sigma_{stat}$  は、統計的不確かさ  $U_{stat}$  とモンテカルロ法の試行回数  $N$  を用いて、 $(\sigma_{stat})^2 = (U_{stat})^2/N$  により計算される。

また、sfile で指定したファイルには、次のよう出力される。

```

h: n          z          y1(all),hh0l  dy1=[y1*y21]
# z-lower     z-upper     all          r.err
0.0000E+00   1.0000E+00   4.1156E+02  0.0017  0.0015  0.0009
1.0000E+00   2.0000E+00   4.0919E+02  0.0012  0.0000  0.0012
.....

```

all の列にタリー結果の平均値が出力され、その右側に全不確かさ  $U_{tot}$ 、系統的な不確かさ  $U_{syst}$ 、統計誤差  $\sigma_{stat}$  が、順に平均値に対する相対値で出力される。なお、試行回数が少ない場合は系統的な不確かさの推定値が負となり、その場合は 0 と出力される。

図 1 に今回開発した機能を利用して求めた結果の例として、100 MeV 中性子をコンクリート遮蔽材に照射した場合の実効線量の深さ分布を示す。ここでは、コンクリート中の水の量を 0, 0.2, 0.4 g/cm<sup>3</sup> と変化させ、その影響を系統的な不確かさとして評価した。統計誤差は十分小さく、系統的な不確かさを誤差棒で示している。図より、深くなるにしたがい、不確かさが大きくなっていることがわかる。

本開発により、計算条件の変化が PHITS の計算結果に与える影響を系統的な不確かさとして評価することが可能となる。現在、PHITS の国内外のユーザー数は 4,000 名を超えており、本機能を通じて、研究開発の更なる進展が期待される。

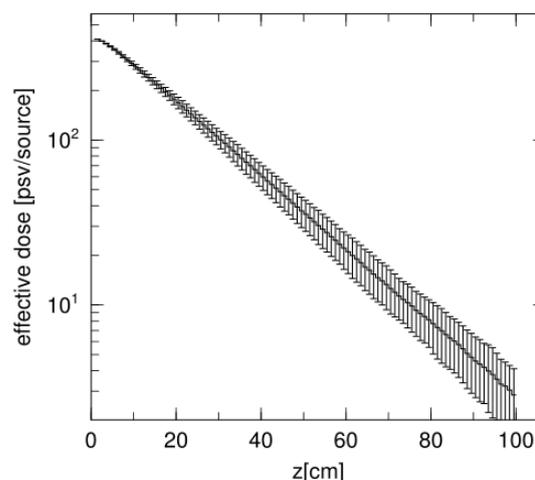


図 1 100 MeV 中性子を照射した場合のコンクリート中の実効線量

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) S. Hashimoto, T. Sato, “Estimation method of systematic uncertainties in Monte Carlo particle transport simulation based on analysis of variance”, J. Nucl. Sci. Technol., Vol.56 (4), 2019, pp.345-354.
- 2) S. Hashimoto, T. Sato, “Total cross section model with uncertainty evaluated by KALMAN”, 2019 International Conference on Nuclear Data for Science and Technology (ND2019), Beijing, China, 2019.

### (4) 今後の利用予定:

今後は、track 以外のタリーについても系統的な不確かさを評価できるよう機能の拡張を行う。また、計算条件を変えながら PHITS の輸送計算を複数回実行する機能を発展させ、計算結果が特定の値となるようなインプットを決定する最適化機能の開発も進める。

### 5.3.7 PHITS による炭素線治療ビームの再現

#### Reproduction of Heavy-ion Therapy Beam by PHITS

古田 琢哉

放射線挙動解析研究グループ

##### (1) 利用目的:

重粒子線（炭素線）治療は従来の放射線治療よりも腫瘍部への線量の集中性が良く、生物学的効果比が高いなどの優位性を持っている。一方、複合粒子である炭素をビームとして使用するため、核反応によって生成する二次粒子による発がんリスクの評価が要求される。この評価では、二次粒子の輸送を正確に模擬する必要があり、モンテカルロ輸送計算コードを利用したシミュレーションが有効となる。そこで、PHITS コードを中核とした炭素線治療の線量評価システムの開発を進めている。このためには、まず炭素線治療のビーム体系を再構築した PHITS シミュレーションによって得られる照射ビームが実際の治療ビームの性質（深さ線量分布等）を再現することを確認する必要がある。そこで、水ファントムに炭素線の SOBP (Spread-Out Bragg Peak、拡大ブラッグ・ピーク) ビームを入射する単純照射体系を構築し、実測値と比較することで、PHITS のシミュレーション精度の検証を実施した。

##### (2) 利用内容・結果:

本線量評価システムでは量子科学技術研究開発機構の重粒子線がん治療装置 HIMAC での炭素線 SOBP ビームを模擬することを想定している。SOBP ビームは図 1 に示すように、ワブラーマグネットと散乱体によって照射野を形成し、リッジフィルターによってビーム軸方向に均質な線量分布を形成する。加えて、各種コリメーターおよびレンジシフターによって、患者の腫瘍に合わせた線量分布を形成する。

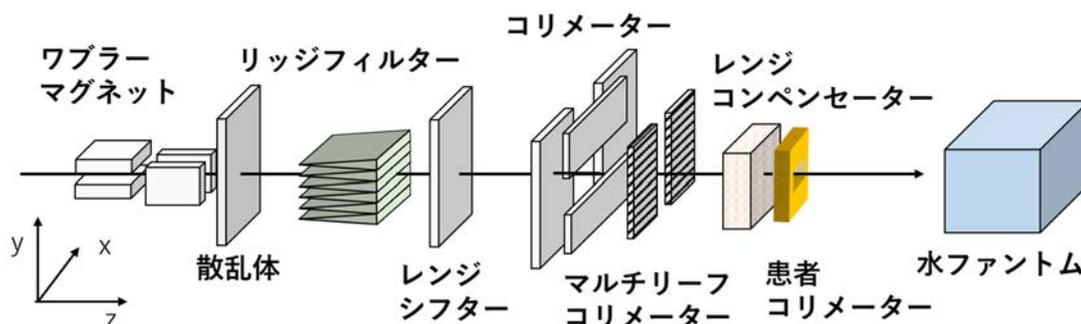


図 1 炭素線 SOBP のビーム体系

これらの体系を治療計画装置のデータ等を基に PHITS の仮想空間内に構築し、シミュレーションにより水ファントムへの炭素線照射の輸送計算を実行した。計算結果を電離箱線量計による

実測値と比較するため、線量計の有感領域に相当する水ファントム中央 5 mm 直径の円柱領域の物理線量を 0.5 mm 刻みで計算し、深さ線量分布を導出した。物理線量を計算する各領域の体積が小さいため、モンテカルロ放射線輸送計算で十分な統計精度を得るためには 1 億粒子程度の入射炭素線の輸送計算が必要で、膨大な計算量を要することから ICE X を用いて計算を実施した。

図 2 は結果を実測値と比較したもので、物理線量の分布では SOBP 領域 ( $z = 12 \sim 20 \text{ cm}$ ) においても平坦な線量分布にならず、炭素線の生物効果比を加味した後に平坦な線量分布が得られるように調整されている。PHITS の計算結果は SOBP 領域の手前 ( $z < 12 \text{ cm}$ ) から SOBP 領域に至るまで、実測値の物理線量分布を非常に良く再現することに成功した。さらにブラックピーク後 ( $z > 20 \text{ cm}$ ) の領域の物理線量は水の構成元素と炭素線の衝突で生じた 2 次粒子の寄与による分布だが、この領域においても PHITS の計算結果は実測値を良く再現できることがわかった。シミュレーションでは実測値再現のためのパラメータ調整等を行っておらず、本成果は PHITS に含まれる炭素線治療シミュレーションに必要な阻止能計算モデルや 2 次粒子生成の核反応モデルの妥当性を検証したことに相当する。

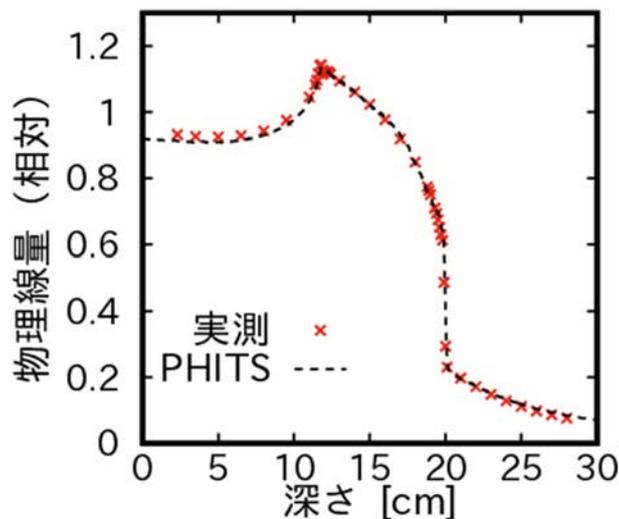


図 2 水ファントム内の深さ線量分布の比較

**(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:**

炭素線治療の線量評価システムの開発を令和 2 年度以降も継続する予定であり、このシステムのテストに今後も大型計算機を利用して研究開発を進める予定である。

### 5.3.8 PHITS のエラー出力に関する改良

#### Improvement on the Error Messages from PHITS

佐藤 達彦

放射線挙動解析研究グループ

##### (1) 利用目的:

原子力機構が中心となって開発している PHITS は、中性子・陽子・光子・電子・重イオンなど様々な放射線の挙動を解析可能な汎用計算コードである。PHITS は、モンテカルロ計算コードであるため、そのヒストリー数に応じて計算精度が向上し、ICE X などスパコンを用いることにより、従来の PC ではできなかった大規模な計算が可能となる。一方、PHITS は、そのソースコードが約 100 万行にも及ぶ巨大なコードであり、ユーザーが指定した条件が間違っていた場合や、プログラム実行中に問題が生じた場合などに出力されるエラーメッセージは数千にもなる。したがって、PHITS 実行時にエラーメッセージが出力されても、それが具体的にどのファイルの何行目から出力されていたかを探し出すのは多大な労力であり、効率的な開発の妨げとなっていた。そこで、本研究では、各エラーメッセージが出力されるファイル名・サブルーチン名・行番号を自動的に書き出すプログラムを開発し、PHITS に実装する準備を整えた。本研究は、原子力コードのプログラム開発整備作業の一環として実施した成果である。

##### (2) 利用内容・結果:

開発を開始した当初は、1つ1つのエラーに手動で ID 番号を付けていくことを考えたが、エラーメッセージの数が膨大なため現実的でないことが分かった。そこで、自動で PHITS のソースファイルからエラー出力部分を検出し、そのエラーメッセージが出力されるファイル名・サブルーチン名・行番号を書き出すプログラムを開発した。また、そのプログラムを用いて開発段階の PHITS ソースファイルを書き換え、エラーの発生箇所が出力されることを確認した (図 1)。これらの成果は、次期リリースバージョンの PHITS に反映する予定である。

```
[tatsu@nightingale errid]$ phits_Linlfort < lec01.inp
ID = L:313/R:read00/F:read00.f
ID = L:22126/R:param/F:read02.f

***** Error Message from Input File *****

Error Line          5 :
error = Unknown parameter

-----

job termination date : 2020/05/28
                    time :   23:30:20

END
[tatsu@nightingale errid]$
```

図 1 間違いを含む PHITS の入力ファイルを実行した場合のサンプル結果。ID = L:313/R:read00/F:read00.f は、「read00.f」というファイルにあるサブルーチン「read00」の 313 行目でこのエラーが発生したことを意味している。

上記改良などの成果により、PHITS は国内外で幅広く普及が進み、令和元年度の国内及び国外新規ユーザー数は、それぞれ約 500 名及び約 400 名となった。この数は、令和元年度における機構外への全プログラム提供件数の 9 割以上を占有するものである ([http://ccse-intra.jaea.go.jp/library/teikyou\\_r01/index.html](http://ccse-intra.jaea.go.jp/library/teikyou_r01/index.html))。また、大学等における講義での利用を念頭においた教育版 PHITS も、2013 年からの累積ユーザー数が 30 機関に到達した。図 2 に、PHITS を公開した 2010 年から 2020 年 3 月末までの国内 PHITS ユーザー数の変化を示す。さらに、PHITS は数多くの論文にも引用されており、2019 年における被引用回数は 125 回であった (Web of Science 調べ)。

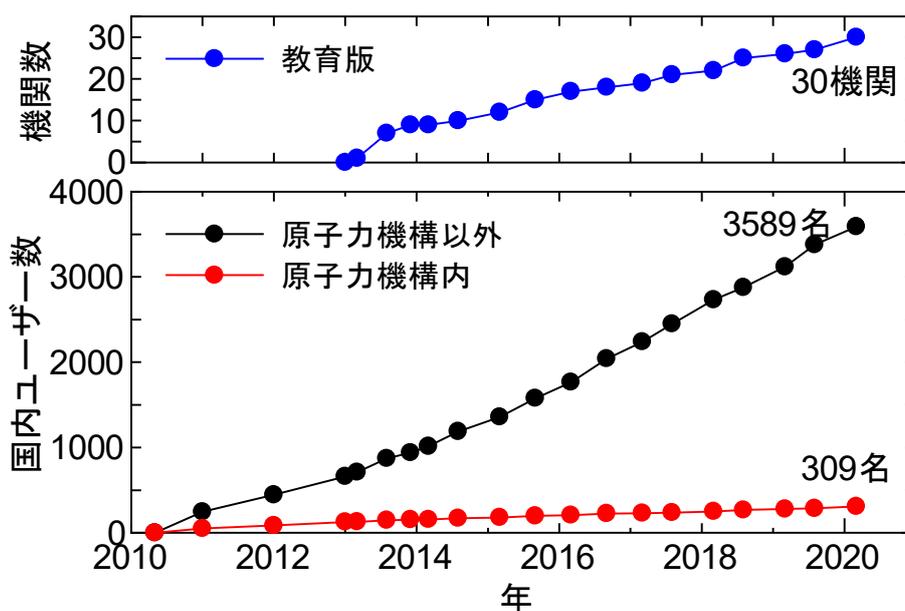


図 2 2010 年から 2020 年 3 月末までの PHITS 国内ユーザー数及び PHITS 教育版登録機関数の変化

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) 佐藤達彦、甲斐健師、松谷悠佑、“PHITS の概要とその応用”、基礎物理学研究所研究会「放射線の生体影響解明への分野横断による挑戦」、京都、2019 年 5 月。
- 2) 佐藤達彦、“PHITS コードの概要とマイクロドジメトリへの応用”、日本学術振興会 放射線科学とその応用 第 186 委員会第 31 回研究会、名古屋、2019 年 5 月。

**(4) 今後の利用予定:**

PHITS の利用範囲は、原子力分野のみならず、理学・工学・医学など多岐に渡っており、原子力コードが他分野にも応用できることを示した極めて貴重な例である。一方、ユーザー数の増加に伴い、その高速化やユーザー利便性の向上に対する要望が多数寄せられている。今後は、原子力コードの高速化作業を利用して PHITS の高速化を行うとともに、プログラム開発整備作業を利用して、PHITS 計算入力ファイルの作成支援ツールの開発を実施したいと考えている。

### 5.3.9 TOF-PGA を用いた水素測定における試料形状の影響

#### Influence of Sample Shape on Hydrogen Measurement by TOF-PGA

前田 亮

原子力センシング研究グループ

##### (1) 利用目的:

即発 $\gamma$ 線分析 (PGA) は、測定試料に中性子を照射し試料中で核反応が起きた際に発生する即発 $\gamma$ 線のエネルギーと数を測定することで、試料中に含まれる元素 (核種) とその量を分析する手法である。PGA は分析の確度が高い、軽元素にも適用可能、非破壊でバルク試料の分析が可能等の特長を持つ非常に強力な分析技術である。

大強度陽子加速器施設 (J-PARC) に設置された中性子核反応測定装置 (ANNRI) では、冷中性子から熱外中性子までの広いエネルギー領域の中性子を利用した PGA が可能である。冷中性子は一般的に熱中性子より反応確率 (反応断面積) が大きく、熱外中性子も共鳴を持つ核種においては熱中性子より反応断面積が大きいものが多い。ANNRI では、これらの中性子を利用することで熱中性子のみを利用した PGA より高効率な測定が可能である。さらに ANNRI では中性子の飛行時間と距離からそのエネルギーを決定する飛行時間法 (TOF) と PGA を融合させた TOF-PGA が実施できる。TOF では一般的に応答が早いシンチレータなどの検出器が使用されるが、長い飛行距離をとることで応答速度の劣る Ge 半導体検出器でも実施可能である。しかし、中性子源から離れるため十分な統計量を得ることが難しくなる。ANNRI では J-PARC で得られる大強度パルス中性子と高効率 Ge 半導体検出器を利用することで、十分な飛行距離と統計精度を両立した TOF-PGA システムを実現している。TOF-PGA では入射中性子のエネルギーを測定しながら PGA 行うため、入射中性子エネルギーごとの即発 $\gamma$ 線スペクトルを測定することができる。これにより、共鳴を持つ核種では、その共鳴エネルギーと一致するように入射中性子エネルギーを限定したスペクトルを解析することで、他の核種による妨害 $\gamma$ 線の影響を低減することができる。

PGA の測定感度 (物質当たりの $\gamma$ 線計数) は中性子エネルギースペクトルに依存する。そのため、試料中に水素のような中性子散乱断面積の大きい物質が含まれている場合は、試料中でスペクトルが変化して測定感度が変わってしまう。これは、試料中に含まれる核種の量が同じでもそれ以外の核種の量が違う場合に、異なる定量結果が得られる可能性があることを意味する。つまり、試料の核種構成に依存する測定感度を補正しない限り、分析の確度が低下してしまうことになる。従来の PGA では熱中性子を利用するため中性子散乱によるエネルギー変化は無視できる。しかしながら、中性子の散乱により試料中の飛行経路長が変化するため、散乱断面積が大きい核種の多寡によって試料中の見かけの中性子束と測定感度が変わってしまう。Mackey 等は球形の試料を使用すれば散乱による飛行経路長の変化が小さくなり、散乱成分の割合が大きい試料であっても感度変化を大きく低減できると報告した。一方で、冷中性子、熱外中性子を利用する TOF-PGA では散乱による中性子エネルギーの変化も考慮する必要があり、球形の試料を使用

するだけでは感度変化を抑えることはできないと考えられる。そこで、本研究では熱外から冷中性子を利用した TOF-PGA 測定における測定感度に対する入射中性子エネルギーと試料形状の影響を評価した。感度変化は即発  $\gamma$  線を放出する核種であれば評価できるため、本研究ではアクリル試料中の中性子散乱の影響を水素の測定感度変化により調べた。また、感度変化の補正法の確立のためには、実験からは容易に得ることが出来ない物理現象をシミュレーションにより押さえる必要があるため、その実験の再現性も評価した。この際、シミュレーションでは複数の試料形状、複数の入射中性子エネルギースペクトル、複数の異なる核データを利用して合計 100 ケース以上の計算を行う必要があるため大型計算機を利用した。

## (2) 利用内容・結果:

水素を用いた感度評価では入射中性子エネルギーを 5 meV (冷中性子)、25 meV (熱中性子)、1 eV (熱外中性子) とし、試料としてアクリル製の厚さ 0.5、1.0、1.5、2.5、3.5、4.5 mm (重さ各 59.7、118.8、180.5、294.8、412.8、534.2 mg) の 1 cm 角の板状試料、および直径 4.8、5.6、7.9、9.5 mm (重さ各 67.2、106.8、313.7、540.6 mg) の球状試料を使用した。図 1 にアクリル試料中の水素に対する感度変化の実験結果及びシミュレーションによる計算結果を示した。図中の点は実験結果、実線はシミュレーション結果を表しており、入射中性子エネルギーにより色分けしている。また、横軸は試料の重量、縦軸は水素原子当たりの  $\gamma$  線計数で表される水素測定感度である。なお、水素測定感度は比較のために各エネルギー、各形状の最小試料の値で規格化している。

熱中性子入射時は板状試料で測定感度が最大 10%程度変化しているのに対し、球状試料での変化量は最大 3%とほとんど一定である。また、板状試料では 294.8 mg までは感度が上昇し、それ以上重くなると感度が減少している。これは 294.8 mg までは散乱により試料中での中性子の飛行経路が長くなることで試料全体の見かけの中性子束が増加する。しかし、それより重く(厚く)になると遮蔽効果の方が大きくなり、試料の深部まで侵入する中性子が減少することで試料中の平均中性子束が減少するためである。一方、球状試料では一様に散乱されるため、中性子の飛行経路長の変化は相殺される。そのため、中性子束はほとんど変化せず感度もほぼ一定となる。このように板状試料において感度が特定の厚さで極大になり、球状試料において感度が一定になるという傾向は Mackey 等の報告と一致している。

冷中性子入射時は、球状、板状共に試料が大きくなると感度が 15%程度減少し、熱外中性子入射時は板状試料で 24%、球状試料では 16%感度が上昇する。これは以下のような現象に起因している。熱中性子より低いエネルギーを持つ冷中性子では、散乱により水素原子の熱運動からエネルギーを得る上方散乱が多くなり中性子のエネルギーが増加するが、水素の (n, $\gamma$ ) 反応断面積は中性子エネルギーが低いほど大きいため反応確率が低下し測定感度も減少する。逆に熱中性子より高いエネルギーを持つ熱外中性子では、下方散乱が多くなり中性子のエネルギーが減少するため反応確率と測定感度が上昇する。

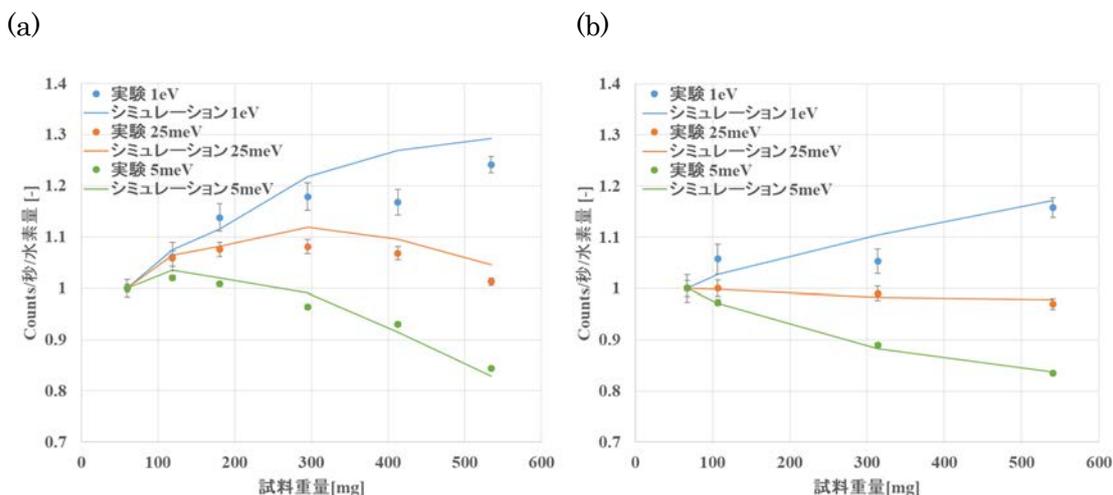


図1 (a) 板状試料、(b) 球状試料の実験とシミュレーションによる水素測定感度の計算結果

また、実験結果とシミュレーションによる計算結果を比較すると、板状、球状両方の試料で両者は概ね一致していた。これにより、中性子散乱によるエネルギー変化量や中性子散乱回数などの測定感度変化に関わる有用な物理量をシミュレーションにより得られることが確認された。今後、シミュレーションを用いて感度変化に関わる物理現象を定量的に把握しながら、その補正法を開発する。

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等) :**

- 1) 前田亮、常山正幸、瀬川麻里子、藤暢輔、中村詔司、木村敦、“TOF-PGA を用いた水素測定における試料形状の影響”、日本原子力学会 2019 年秋の大会、富山、2019.

**(4) 今後の利用予定:**

今後は様々な水素密度や様々な核種を含む試料の測定結果の補正法開発のため、多くの計算条件でモンテカルロシミュレーションを行う予定であり、より多くの計算資源を必要とするため大型計算機の利用を予定している。

### 5.3.10 中性子共鳴透過分析装置の高度化に向けた解析

#### Investigation to Improve Neutron Resonance Transmission Analysis System

土屋 晴文

原子力センシング研究グループ

##### (1) 利用目的:

近年、核セキュリティや核不拡散分野において使用済核燃料やデブリなどの高線量物質に対する計量管理やマイナーアクチノイドの定量分析など非破壊分析技術開発の重要性が高まっている。パルス中性子ビームを利用した中性子共鳴透過分析法（Neutron Resonance Transmission Analysis：以下、NRTA）は、非破壊分析技術の一つで高線量物質に適用できる技術である。しかし、既存の NRTA 測定システムは、主に学術的な研究用途に資するため、大強度ビームを必要とする。そのため大型の加速器を利用し設備が大規模となり、適用先が限定される。そこで、システム全体を小型化することにより既存の施設を含めて適用先を拡充するため、重水素・トリチウム中性子発生管（以下、DT 発生管）を中性子源として用いた小型の NRTA 測定システムの研究開発を進めている。本研究では、小型 NRTA システムを利用して核物質測定の精度向上や迅速化を達成するために、装置設計を最適化することが目的である。

##### (2) 利用内容・結果:

NRTA 測定システムを用いて核物質やマイナーアクチノイドなどを精度よく測定するために、背景雑音の低減化が重要となってくる。NRTA の測定システムでは、中性子源で発生させた中性子をコリメータで絞って試料に照射し、試料から透過してくる中性子を信号として捉える。そのため、コリメータ開口部以外から飛来する中性子やガンマ線を検出器にできるだけ入射させない仕組みを構築しなければならない。そこで、中性子検出器周囲の遮蔽、コリメータ開口部のサイズ、中性子源からの中性子の飛行距離などの最適化が必要となる。これらのパラメータを変更しつつ、大型計算機を用いたシミュレーションを実施し、令和元年度には以下のような成果を得た。

##### <小型 NRTA 測定システム用中性子検出器に用いる遮蔽体の部材やサイズの決定>

図 1 に示すような小型 NRTA 測定システムでは、中性子源で発生し、測定試料を通り抜けて飛来する透過中性子（図 1 の実線水色矢印）のみを検出器で捉えることが理想である。しかし、実際には中性子源で発生した中性子は、周囲の壁や天井などの周辺環境で反応し背景雑音となる中性子やガンマ線を生じさせる（図 1 の赤色破線矢印）。こうした背景雑音は中性子検出器の周囲を遮蔽体で囲うことにより、できるだけ検出器への侵入を低減させる必要がある。そこで、遮蔽体として用いる部材やサイズに関してシミュレーションを用いて検討した。中性子遮蔽体として、中性子吸収剤を含有したボロン入りポリエチレンやフッ化リチウム入りポリエチレンを検討した。その結果、フッ化リチウム入りポリエチレンがボロン入りポリエチレンと比べるとガンマ線雑音を抑えながら中性子の遮蔽に有効であることがわかった。加えて、ガンマ線遮蔽体として

は、鉛を用いることとした。遮蔽体の厚みのパラメータを変更して背景雑音の低減効果を調べた結果、フッ化リチウム入りポリエチレン 20 cm 以上及び鉛 5 cm 以上を用いることで、十分に背景雑音を低減できることが分かった。

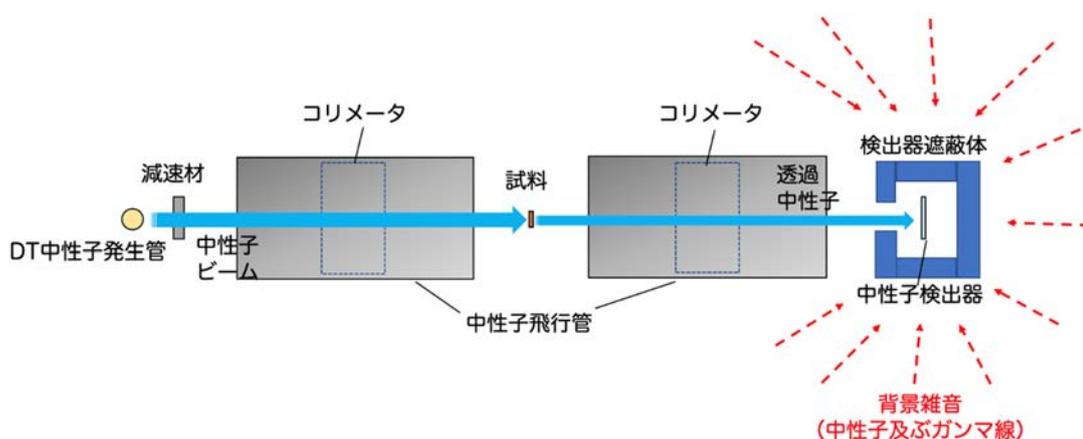


図 1 小型 NRTA システムの概要と透過中性子や背景雑音の飛来の様子

#### <中性子飛行距離をより短くした体型でのコリメータや遮蔽体の最適化>

NRTA システムをより小型にして核物質の迅速測定を可能とするため、コリメータや検出器遮蔽の強化についてシミュレーションで検証した。その結果、飛行距離をおよそ 1/2 にして、ボロン入りポリエチレンを用いたコリメータや遮蔽を追加で配置することにより、より迅速に核物質の測定が可能であることが分かった。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

#### (4) 今後の利用予定:

令和元年度までに大型計算機を利用して実施したシミュレーション (PHITS) で得た結果を利用して、NRTA 測定システムを設計し、令和 2 年度にシステムを製作する。製作予定の NRTA 測定システムを用いて核物質を測定した際に、どのようなスペクトルが得られるのかを導出するとともに、NRTA 測定システムの特徴 (測定精度、測定時間など) を評価していく。

### 5.3.11 中性子線源を用いた可搬型アクティブ中性子法装置のシミュレーション Simulations for a Transportable Active Neutron Device using a 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、核物質を含む測定対象物に外部から中性子を照射し、そこで発生する核分裂中性子を測定すること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、中性子発生管を用いる DDA (Differential Die-Away) 法と呼ばれる手法がある。この DDA 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一方で、D-T 管等の非常に高価な中性子発生管を用いる必要があるため、高価であり装置が大型になってしまう短所がある。そこで、低コストで可搬性を有する新たなアクティブ中性子法である回転照射法と呼んでいる手法を考案し、その研究開発に取り組んでいる。この手法では、対象物近傍で中性子線源を高速回転させ、回転動作と同期した中性子計測を行う。対象物に核物質を含む場合、中性子計測の時間分布形状に変化が生じ、その変化を調べることで核物質を検知する。回転照射法の研究開発には、様々な情報を得ることができるシミュレーションは非常に有効である。DDA 法の中性子線源の位置は一点であるが、回転照射法では中性子線源を円周上に無数に移動させる必要があることから、そのシミュレーションには DDA 法に比べて高い計算機能力を要する。このことから、本シミュレーションに大型計算機 (ICE X) を用いた。

#### (2) 利用内容・結果:

回転照射法のシミュレーションモデルを図 1 に示す。中性子線源は直径 31cm のアルミニウム製円盤の外周部に設置し、線源の回転半径は 15 cm である。核物質として U-235 を 14 g 含む 3.4% の濃縮ウランとした。この核物質を直径 12 cm、高さ 30 cm の円筒形状のポリエチレン容器の中央部に設置した。中性子検出器として直径 2.4 cm、長さ 30 cm の He-3 検出器を 7 本積み重ねたものを使用し、その前後にポリエチレン及びカドミウムを配置した。カドミウムを配置する理由は、熱中性子を遮蔽することで核分裂中性子を効率的に検出するためである。シミュレーションには、モンテカルロコードである MVP を、核データには JENDL-4.0 を使用した。計算のヒストリー数は約 2000 億である。

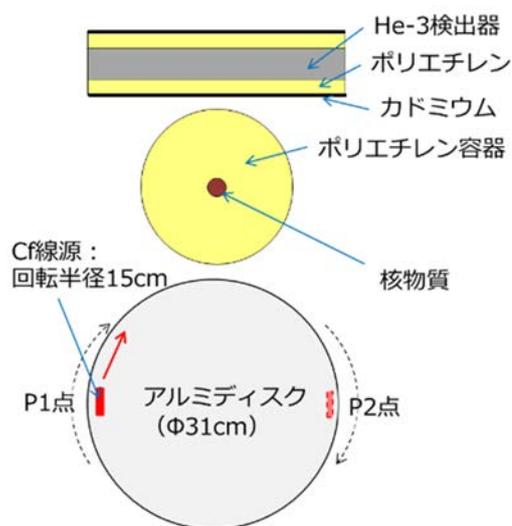


図 1 シミュレーション体系

中性子線源の回転速度が 1000 rpm の時のシミュレーション結果を図 2 に示す。核物質がある場合を赤線で、核物質が無い場合（核物質を空気に置換）を黒線で示す。両ケースは似た分布形状となっており、特にピーク位置前後で対称となっていることが分かる。例えば、12500  $\mu$  秒時点と、それと対称位置になる 17500  $\mu$  秒時点での値は、ほぼ同じになっている。ここで注意すべき点は、グラフの高さだけで核物質の検知を判断することができないことである。グラフの高さは核物質を含む測定対象物の組成に大きく依存する。図 2 において、赤線だけの結果から核物質を含むことは判断できない。

同じ測定体系で、中性子線源の回転速度を 5000 rpm とした場合のシミュレーション結果を図 3 に示す。核物質を含まない結果は、1000 rpm 時と同様にピーク前後の値はほぼ同じとなっている。一方、核物質を含む結果は、ピーク後（3500  $\mu$  秒）の値はピーク前（2500  $\mu$  秒）より明らかに高くなっている。これは中性子線源を高速回転させることで、核分裂中性子の残存効果が大きくなったためである。この結果から、中性子線源を高速回転した場合にピーク前後の分布に差異が生じることを明らかにし、この差異から核物質を検知できることが分かった。

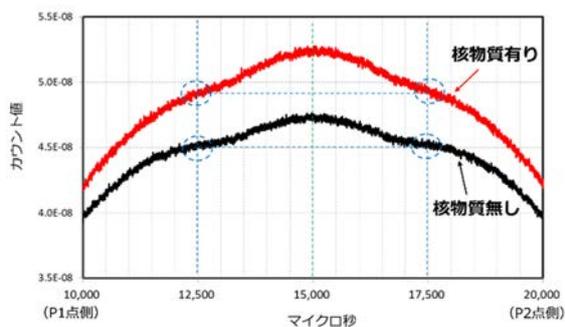


図 2 回転速度 1000 rpm の結果

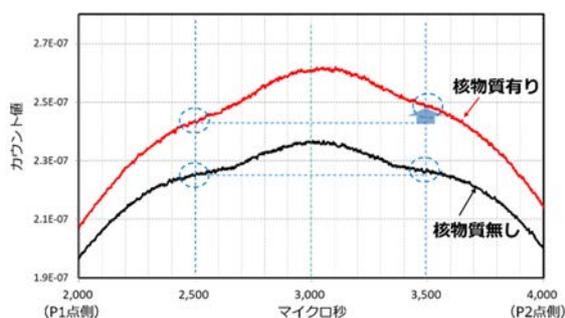


図 3 回転速度 5000 rpm の結果

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) M. Komeda, Y. Toh, “Conceptual study on a novel method for detecting nuclear material using a neutron source”, *Annals of Nuclear Energy*, Vol.135, 2020, pp.106993\_1-106993\_6.
- 2) 米田政夫、藤暢輔、“中性子線源を用いた可搬型アクティブ中性子法装置に関する研究開発”、日本原子力学会 2019 年秋の大会、富山、2019.

**(4) 今後の利用予定:**

大型計算機 (ICE X) を用いて、回転照射法等の核物質測定手法の研究開発に取り組んでいく。

### 5.3.12 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、小野寺 直幸  
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、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の高度化を行い、その有効性の確認を実施した。また、SA 解析コードの溶融進展挙動解析の予測精度向上に資するために、**JUPITER** と **SAMPSON** の連成解析フレームワークの構築を行った。なお、本課題は大口課題 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」により実施されたものである。

##### (2) 利用内容・結果:

###### <化学反応モデルの高度化>

単純な算術平均で与えていた異種成分界面での溶質拡散係数に対し、有効拡散係数を導入した。これにより、異なる拡散係数を持つ成分が界面において同様の拡散速度で拡散する非物理的な問題が解決した。従来よりも物理的に正しい溶質拡散挙動を扱うことが可能になった。

###### <JUPITER 妥当性検証>

溶質拡散モデルの妥当性検証として、制御棒/チャンネルボックス反応要素試験解析を実施した。試験体及び計算体系を図 1 に示す。

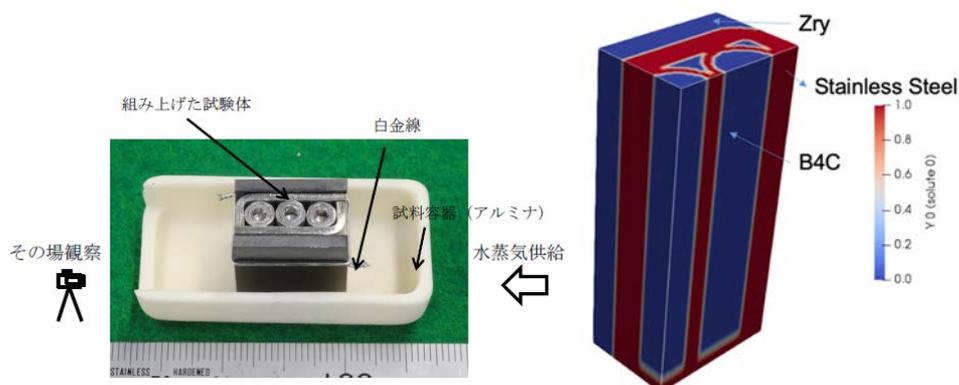


図 1 試験体（左）及び計算体系

試験体を 1523K で加熱し、試験後の最終的な熔融状況と計算結果とを比較した結果を図 2 に示す。計算結果における赤色領域は液相、青領域は固相を表す。実験結果の制御棒の SUS 以外はすべて熔融している結果に対し、計算結果においても同様の結果を得た。これにより、SUS-B4C 溶質拡散モデルの妥当性を確認することができた。

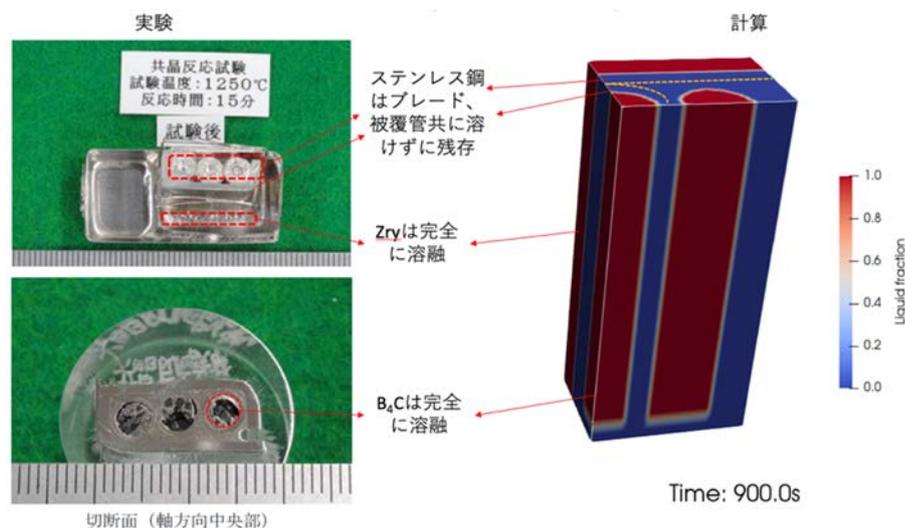


図 2 実験と解析における熔融状況の比較

### <JUPITER-SAMPSON の連成解析>

SA 解析コード SAMPSON との連成解析を通じた事故進展予測の精度向上に資することを目的として、多相多成分詳細熱流動解析コード JUPITER に化学反応モデルを導入し、燃料棒挙動解析を実施した。本解析手法では、SAMPSON から JUPITER へ炉心入口・出口の圧力・温度・水素濃度・流体速度、崩壊熱、輻射伝熱量などのデータが移行される。SAMPSON と JUPITER では空間解像度が異なるため、何らかの補間を行う必要がある。ここでは、SAMPSON から送られた粗いデータを多項式近似して JUPITER に与えることにし、このためのデータコンバータを新たに開発した。本データコンバータを導入した JUPITER を用いて、BWR 燃料棒 1 本を対象とした予備解析を行った。図 3 に示すように燃料棒は半径 5.5 mm、被覆管厚さ 0.8 mm であり、対称性を仮定して 1/4 領域を対象とした。領域長は、水平方向 (x, y) 6.875 mm、高さ方向 (z) 3,700 mm とし、格子分割数はそれぞれ 30, 30, 3,700 である。初期及び境界条件としては、1F の 1 号機を対象とした SAMPSON による電源喪失後 17,000 秒後のデータを上述のデータコンバータにより与えた。図 4 に、図 1 中の矢印の方向から見た各種物理量の高さ方向分布のうち、変化が顕著な 2.2 m~2.5 m の領域を可視化して示す。下流側への酸化発熱量の増加に伴い、水素濃度及び酸化膜厚さも増加傾向にあることが分かる。このように、SAMPSON から JUPITER へデータを移行させた場合でも、解析が問題なく実行できることを確認した。今後は、残された JUPITER から SAMPSON へのデータ移行に関する機能などの開発・導入を進める。

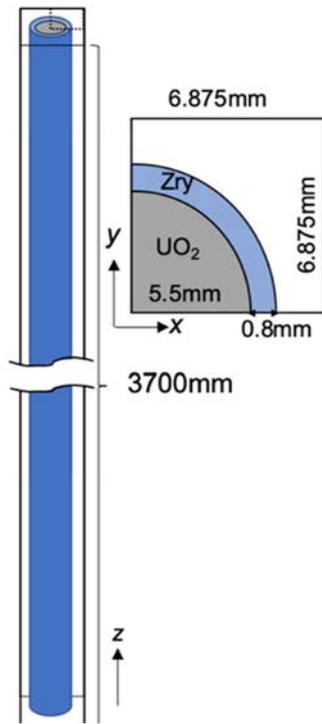


図3 計算体系

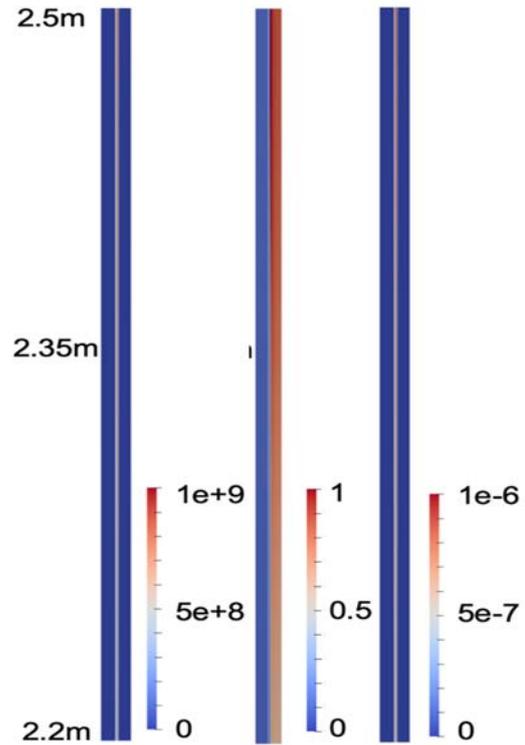


図4 左から、酸化発熱量 [W/m<sup>3</sup>]、  
水素濃度 [-]、酸化膜厚さ [m]

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) A.Ono, S. Yamashita, T. Suzuki, H. Yoshida, “Numerical simulation of two-phase flow in 4x4 simulated bundle”, Mech. Eng. J., Vol. 7, Issue 3, 2020, pp.19-00583\_1- 9-00583\_12.
- 2) N. Onodera, Y. Idomura, S. Uesawa, S. Yamashita, H. Yoshida, “Locally mesh-refined lattice Boltzmann method for fuel debris air cooling analysis on GPU supercomputer”, Mech. Eng. J., Vol. 7, Issue 3, 2020, pp.19-00531\_1-19-00531\_10.
- 3) S. Yamashita, T. Tou, M. Tanaka, Y. Nagae, M. Kurata, H. Yoshida, “A melting process simulation code for fuel assembly based on CFD and material science models”, Material Science for Severe Accident and Fukushima-Daiichi Decommissioning Workshop 2019, Fukushima, Japan, 2019.

**(4) 今後の利用予定:**

今年度は、共晶反応モデルの高度化や JUPITER-SAMPSON 連成解析フレームワークを構築し、機能確認解析を実施した。今後は、更なる妥当性検証を進めると共に、JUPITER-SAMPSON 連成解析の有効性の確認も進めていく。

### 5.3.13 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、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、過酷事故時炉内容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、ADS ビーム窓周りの詳細な熱流動場計算をビーム窓やノズル形状などをパラメータとして行い、ビーム窓周りの流動場と温度分布に関する詳細な解析を実施することにより成立性の高い ADS 設計に貢献することを目的とする。

##### (2) 利用内容・結果:

ビーム窓の冷却性へ及ぼす影響因子として、ノズル形状の影響を調べた。計算条件を表 1 に示す。今年度は、ビーム窓内部の温度分布は計算コストの都合上対象外としたため、ビーム窓最薄部 2 mm 厚部分を解像する必要が無い。従って、比較的少ない格子点数で解析することが可能となった。

パラメータは、表 2 及び図 1 に示す合計 5 ケースのノズル形状とした。LBE の流れ方向に Z 軸、水平方向を x, y 軸とした。

表 1 計算条件

MPI 並列数	4×12×12 = 576
セル数 (1 プロセス)	62×23×78 = 111,228
セル数 (全体)	248×276×936 = 64,067,328
重力	鉛直下方向 9.8 m/s <sup>2</sup>
体系のサイズ [m]	0.62×0.69×2.34 (+0.1 m)
OpenMP スレッド並列数	4 (相並列数 2,304)
メッシュ幅 [mm]	2.5×2.5×2.5
拡散方程式安定化係数	0.01
CFL 数	0.3
発熱分布	PHITS データを補間

表 2 ノズル形状

ケース	ノズル上端位置 [mm]	基本形状	内径 [mm]	肉厚 [mm]	追加の形状
ケース 0	1400	円筒	159	20	なし
ケース 1	1600	円筒	159	20	なし
ケース 2	1400	円筒	195	20	なし
ケース 3	1400	円筒	159	20	先端を 45°にカット
ケース 4	1400	円筒	159 (底面)	20	先端を細くする

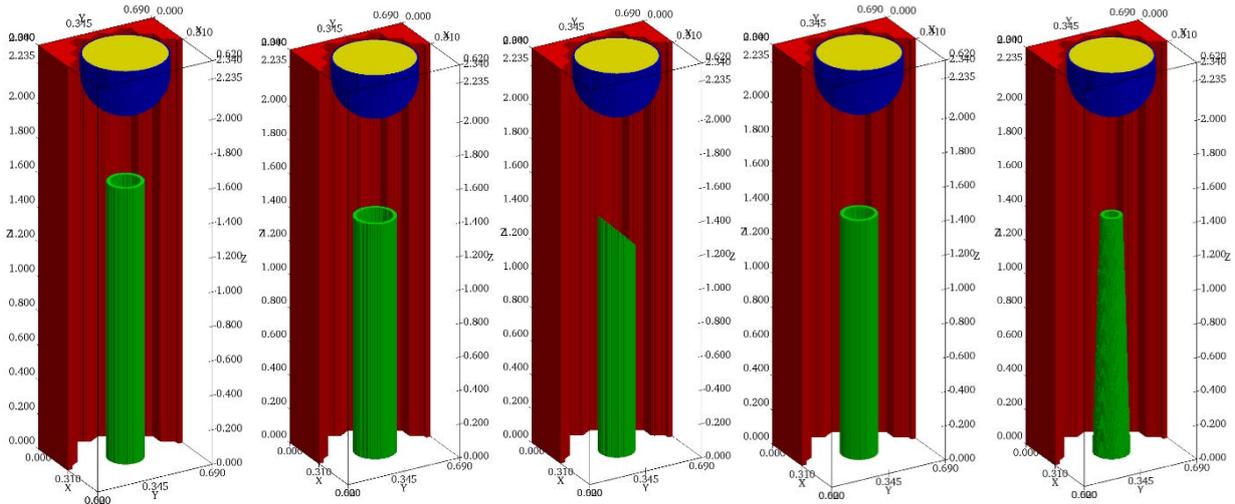


図1 各ケースのノズル形状（左からケース0、1、2、3、4）

ノズル内部で鉛ビスマスが流速約 2 m/s、ノズル外部で約 0.16 m/s で流入する。ビーム窓及びノズルの T91 鋼である。初期温度は 573 K、上面の境界条件は速度に関して流出、温度に関して断熱である。下面の境界条件は速度に関して流入、温度に関して等温 (573K) である。その他境界面では、滑り無し境界及び断熱境界とした。図2、図3は各ケースにおける Y-Z 断面の Z 方向速度分布及び温度分布である。なお、図3の温度分布について、ケース3、4は現在計算中であるため結果は載せていない。

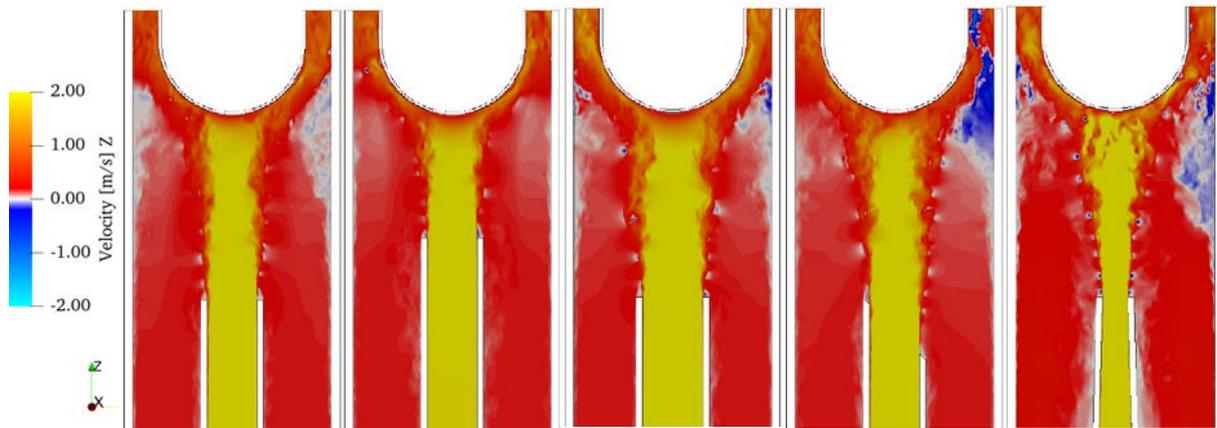


図2 Y-Z 断面の Z 方向速度分布（左からケース0、1、2、3、4）

図2の流動場に対するケース0と比較した結果、ケース1では、ノズル先端とビーム窓先端の距離が近いので、ノズルから出た流れは比較的乱れることなくビーム窓に到達する。ケース2では、ノズル径が大きいので、ビーム窓先端から分岐した下流側の流れは比較的速い傾向にある。ケース3では、ノズルを斜め方向にカットすることにより、ビーム窓部の流れ場が左右非対称になる。ケース4では、絞りによる流速の加速効果により、ビーム窓先端及び下流方向の流速が増加する傾向にあることが分かった。

図3の温度場に対するケース0との比較では、ケース1において、ビーム窓先端との距離が短い  
ため、窓近傍の温度分布の乱れによる攪拌効果が小さい。ケース2は、ノズルから流出する速  
い流れのビーム窓へ接する面積が広いいため、比較的高温部が少ない傾向にあることが分かった。

ノズル形状をパラメータとしたLBE流動場に着目した3次元非定常流解析を実施。流動場及  
び温度場共にノズル形状に応じた分布を示すことが確認された。(ケース1:ビーム窓近傍での  
乱れ小、ケース2:流量大による冷却効果増、ケース3:左右非対称分布、ケース4:流速加速  
効果によるビーム窓近傍の流速増加)ノズル形状の違いによる流動挙動の変化がビーム窓温度分  
布へ影響を与えることを示唆。今後熱応力解析を含めた本パラメータの感度解析を実施予定。

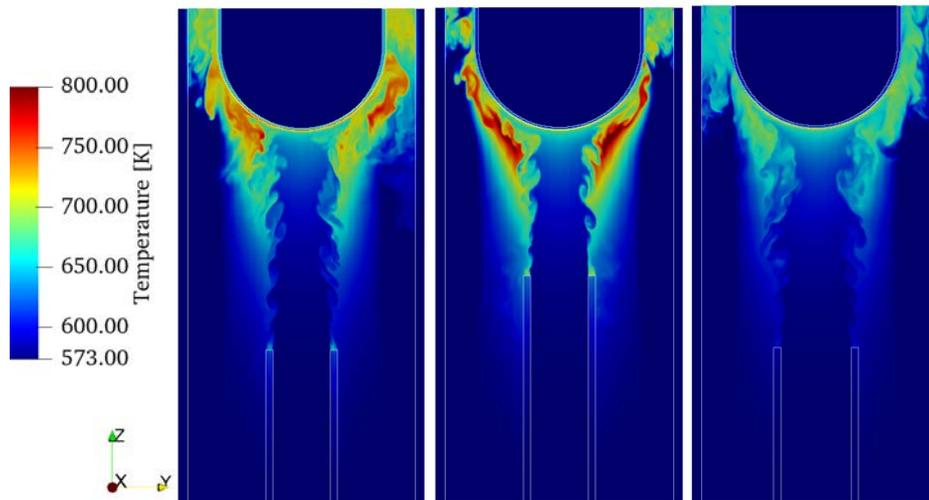


図3 Y-Z断面温度分布(左からケース0、1、2)

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) 山下晋、吉田啓之、菅原隆徳、“ADS ビーム窓周りの詳細熱流動解析(1)JUPITERによる大規模非定常流解析”、日本原子力学会 2019年秋の大会、富山、2019.
- 2) 渡辺奈央、菅原隆徳、西原健司、“ADS ビーム窓の熱流動構造連成解析システムの構築”、日本原子力学会 2020年春の年会、2020.

**(4) 今後の利用予定:**

手法としての有効性を示すことを目的として、JUPITERと他の解析モデルと詳細な比較を行うと共に、熱流動技術開発グループと筑波大学との共同研究で実施される模擬ビーム窓周りの流動実験結果との比較による妥当性検証を行う。また、不等間隔格子を導入し、より大規模な体系の流動解析を実施する予定である。

### 5.3.14 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 on Two-phase Flow for Development of Prediction Method of Critical Heat Flux based on a Mechanism

小野 綾子、鈴木 貴行、吉田 啓之  
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 (CHF)」について、機構論的な予測手法の開発に向けた研究に取り組んでいる。また、事故時の過渡的事象における詳細な炉内出力分布の評価などを目的とした 3 次元詳細核熱カップリングコードの開発に着手している。両プロジェクトにおいては、3 次元詳細二相流解析を評価の中に組み込む必要がある。そのために、評価手法の中核をなす候補の一つである界面追跡法に基づく詳細熱流動解析コード JUPITER の二相流解析への発展・改良を行う必要がある。

本研究で発展させた JUPITER により、CHF 予測に不可欠な流路内の気泡サイズや速度の詳細情報を与えることにより、CHF の機構論に基づいた予測が可能となることが期待される。また、3 次元詳細核熱カップリングコードシステムの一つとして JUPITER を用いて時空間的に詳細な気液分布をあたえることができれば、事故時のような予測が難しい事象についても精緻な予測が可能となることが期待される。このように、実規模の燃料集合体への詳細二相流解析においては、大規模並列計算が必要となることからスーパーコンピュータを用いる必要がある。

平成 31 年度 (令和元年度) の達成目標は、オリフィスからの空気吹き出しによる沸騰状態をシミュレーションすることや、実規模バンドル体系への二相流解析を実施することであった。オリフィスからの気泡の吹き出しの方法やオリフィスなどの配置など各種パラメタについて、気泡運動の運動方程式と生長式を考慮して決定し、シミュレーションを行った。実規模バンドル体系での二相流解析においては、4×4 バンドルにおいて燃料長さ 3 m の体系において、気泡流からチェーン流領域までの条件で計算をし、文献を用いて実験結果と比較を行った。

##### (2) 利用内容・結果:

###### <大規模二相流計算に適合する簡易沸騰モデルの開発>

従来の VOF 法における伝熱面からの発泡シミュレーションにおいては、あらかじめおいた気泡核から発泡を開始し、相変化によって気泡を生長させる。この場合、数十  $\mu\text{m}$  程度のメッシュサイズが最低限要求される。よって、実機燃料集合体規模での二相流解析において核からの発泡を含む気泡シミュレーションは現実的ではない。そこで、熱流動技術開発グループでは、伝熱面から離脱する数ミリ程度の合体気泡の挙動に着目した簡易沸騰モデルを検討した。別途、熱バランスや気泡運動の方程式から検討した気泡の生長時間、離脱気泡体積等を参考に、オリフィスから蒸気を注入することで、合体泡の挙動を模擬した。発泡開始時刻および場所はランダムとし乱数を用いて与えている。図 1 に試解析 (途中経過) を示す。現状、計算時間が枯渇したため途中

経過を示すが、オリフィスからの蒸気吹出しにおいても計算が発散することなく進捗しており、大規模体系への適用可能性の見込みを得た。

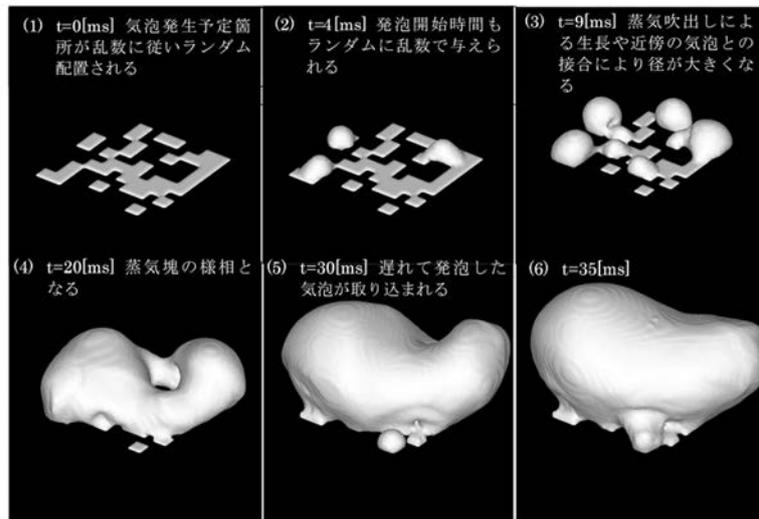


図1 簡易沸騰モデルによるプール沸騰現象の模擬の試み

<実機バンドル体系への二相流解析>

実機燃料集合体における CHF を機構論に基づいて評価するために必要となるサブチャンネル内を通過する合体気泡径やその速度を詳細に得るために界面追跡法に基づいた計算コードで二相流解析を実施した。体系は 4×4 バンドルを対象とした。気相見かけ速度をパラメタとした 3

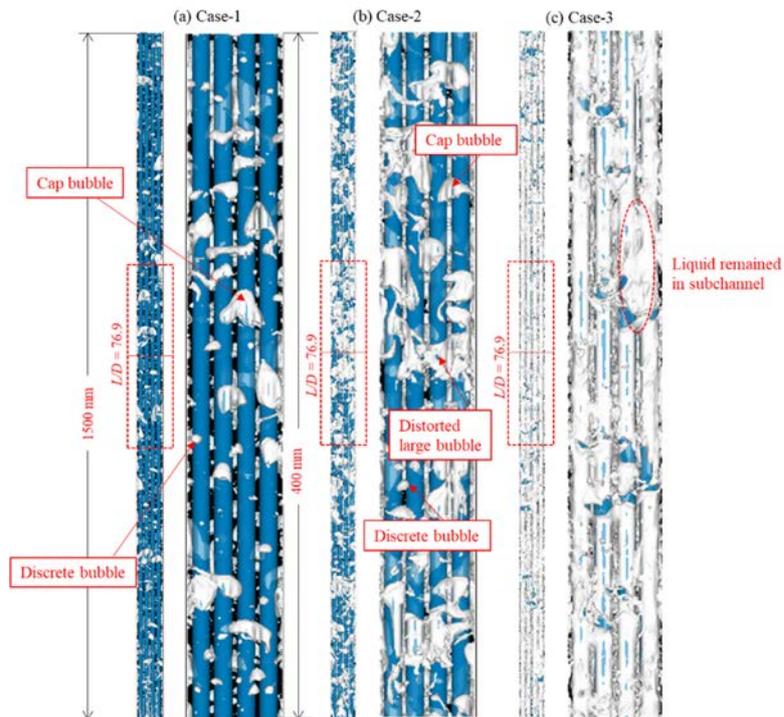


図2 4×4 バンドル内の詳細二相流動解析結果

ケースの解析を行った（図 2）。気相見かけ速度での条件は、気泡流、スラグ流、チェーン流であるが、一番気相速度の大きい Case-3 では環状流のような結果が得られた。これは、バンドル体系下部での気相注入時に、1 オリフィス当たりの気相速度がバンドル体系下部で瞬時に気相接合が起こったことが原因の一つとして考えられる。次年度は、下部からの注入方法も含めて検討を行う。

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

**論文雑誌投稿（査読有）**

- 1) A. Ono, S. Yamashita, T. Suzuki, H. Yoshida, “Numerical simulation of two-phase flow in 4x4 simulated bundle”, Mechanical Engineering Journal, Vol.7, No.3, 2020, pp.19-00583\_1-19-00583\_12.

**国際会議における論文発表（査読有）**

- 2) A. Ono, S. Yamashita, T. Suzuki, H. Yoshida, “Study on the two-phase flow in simulated LWR fuel bundle by CFD code”, Proceedings of 18th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-18), Portland, U.S.A, 2019, pp.666-677, USB Flash Drive.

**国際会議における口頭発表（査読無）**

- 3) A. Ono, S. Yamashita, T. Suzuki, H. Yoshida, “Numerical simulation of two-phase flow in 4x4 simulated bundle”, Proceedings of 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27), Tsukuba, Japan, 2019.

**講演発表及び口頭発表**

- 4) 小野綾子、山下晋、鈴木貴行、吉田啓之、“機構論的流動解析手法による軽水炉燃料集合体内の大規模二相流シミュレーションの試み”、日本原子力学会 2019 年秋の大会、富山、2019.
- 5) 小野綾子、山下晋、鈴木貴行、吉田啓之、“スぺーサグリッド付き 4×4 バンドル内における詳細二相流動解析”、日本原子力学会 2020 年春の年会、2020.

**(4) 今後の利用予定:**

OECD/NEA で提供しているベンチマーク用スぺーサグリッド付き軽水炉（加圧水型炉）燃料集合体の単相流流動試験データを用いて JUPITER の検証を進めるとともに、同体系において気液二相流解析を実施し、加圧水型炉で沸騰が生じた場合のスぺーサグリッドの影響などについて研究を行う。また、同時にその解析結果の妥当性検証を行い、プロジェクトにある核熱カップリングコードへ搭載する。また、今年度試みた簡易沸騰モデルを発展させ、大規模燃料集合体解析に適用し、機構論的限界熱流束予測手法構築へ発展させる。

### 5.3.15 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 Particle Capturing 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:

東京電力株式会社福島第一原子力発電所事故では、ベントなどにより放射性エアロゾルが環境に放出され、帰宅困難地域が拡大するなど甚大な被害がもたらされた。事故以降、放射性エアロゾルの環境への放出を大幅に低減させる装置の改良・設計がさらに求められるようになった。その装置として、スプレーや液中へのガス吹き込みによる気中から液中へのエアロゾル粒子捕集装置があるが、それらの設計・改良などには、気液二相流の解析ならびにエアロゾルを構成する微粒子挙動の解析の実現が必要である。

本課題では、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次元二相流動場解析コードTPFITを使用するとともに、気液界面を介した微粒子挙動の予測手法をTPFITに導入することにより、エアロゾル粒子捕集挙動予測手法を開発する。本解析では、マイクロからナノスケールの微粒子挙動を詳細に再現することが重要であることから、高解像度での流動場の再現が必須であり、大型計算機の利用が必要である。

##### (2) 利用内容・結果:

###### ① 気液界面への沈着挙動の予測精度向上

前年度において、予測評価手法の構築としてTPFITにラグランジュ粒子追跡法の組込み作業を実施し、別途実施している単一液滴周りのエアロゾル粒子挙動可視化実験で確認された粒子挙動のうち、「液中侵入」と「界面未到達」を再現することができた。しかし、実験で計測された「界面沈着」については再現することはできなかった。本年度では、その原因を特定し、気液界面への沈着挙動の予測精度向上に努めた。

本課題では、気液界面に作用する表面張力が粒子に影響を与えていると考え、図1のように粒子位置ならびに粒子の接触角（粒子の濡れやすさ）に対する表面張力項（中江ら、*鑄造工学*、Vol.75 (2003), pp.545-551.）を粒子の運動方程式に追加した。

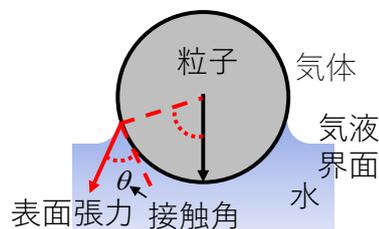


図1 粒子の濡れやすさの影響

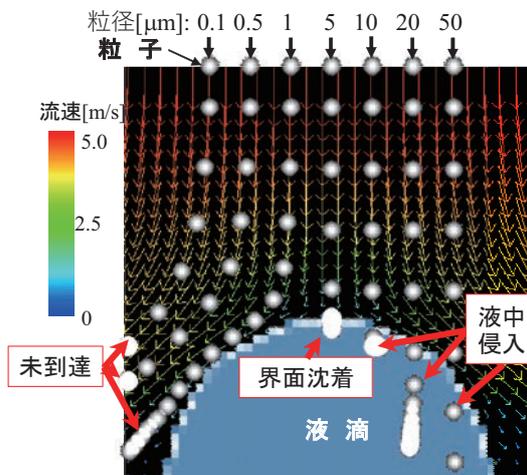


図2 粒子径ごとの飛散微粒子挙動解析結果 (30ms ごとの粒子画像の重ね合わせ)

この項を追加したときの単一液滴周りのエアロゾル粒子挙動の解析結果が図 2 である。解析体系は、可視化試験と同様に半球状の液滴の上部からエアロゾル粒子を含んだ気流を吹き付けた体系である。図は各粒径の粒子挙動を 30 ms ごとに重ね合わせた画像である。今年度に追加した粒子への表面張力項により、粒径 5 mm のように界面沈着を再現することができるようになった。本結果により実験で確認された挙動は全て再現できるようになった。

### ② 単一液滴周りのエアロゾル粒子挙動可視化実験との比較

開発を進めている本手法の妥当性を検証するため、実施している単一液滴周りの飛散微粒子挙動可視化実験との比較を実施した。図 3 は液滴中心からの飛来位置とストークス数 (粒子の慣性力の大きさを表す指標) に対する粒子挙動を示した図である。本解析結果は実験と同様にストークス数が大きいときは液中侵入しやすく、小さいときは界面沈着しやすい結果となった。また、

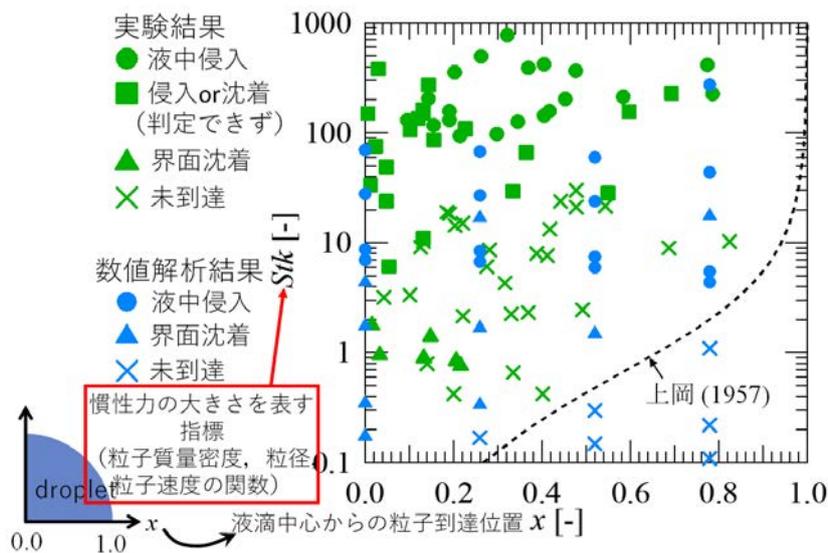


図 3 エアロゾル粒子挙動可視化実験との比較

液滴中心から外れるほど、界面に到達できず捕集されにくくなる傾向が確認された。しかしながら、実験ではストークス数 30 [-] 以下において、界面に到達できていない粒子が多数確認されているものの、解析ではその領域においても液中侵入や界面沈着が見られ、実験と解析で一致していなかった。

図中の破線は、液滴より上流をポテンシャル流と仮定したときのストークス数に対する粒子の捕集限界位置の計算結果 (上岡、日本機械学会論文集、Vol.23 (1957), pp.309-313.) である。その破線より液滴中心側の粒子は液滴に捕集されるとしている。本解析結果においても破線より液滴中心側の粒子は捕集されており、既存結果と一致した。

以上より、本解析手法は、既存計算結果との一致は確認できたものの、可視化実験結果とは一部不一致な点があり、改善が必要と考えられる。

### ③ 実機への応用に向けた解析

実機への応用に向けた解析として、単一ノズルによるエアロゾルの液中への吹き込みの解析を開始した。計算体系は水で満たした容器の下端中心の 3 mm × 3 mm の正方形ノズルから空気を 3 m/s 速度流入し、粒子 (粒径 4 μm、質量密度 2000 kg/m<sup>3</sup>) をノズル出口から一定した時間間隔で供給する体系である。エアロゾルを液中に吹き込むことでガス中のエアロゾル粒子が液中に

移行することは実験で確認されているが、本解析でも液中に移行することを確認した。

さらに実機への応用に向けた解析として、フィルタベント機器の一つであるベンチュリスクラバの気液二相流挙動と粒子挙動解析を開始した。実験では気流によって自動吸引された水が噴霧されるとともにベンチュリスクラバ内壁に液膜が形成されることが確認されているが、本解析でも確認された。また、エアロゾル粒子が水と接触し、気中から液中に移行することも確認された。このように、実体系解析が可能になったことから、多様な事故状況に応じた捕集装置の数値実験が可能となり、最適な運転方法の提示が期待できる。また、捕集性能の高性能化のための最適設計の提案も期待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):

#### 投稿論文発表 (査読有)

- 1) S. Uesawa, H. Yoshida, “Observation of aerosol particle behavior near gas-liquid interface”, Mechanical Engineering Journal, Vol.7, No.3, 2020, pp.19-00539-1-19-00539-9.

#### 国際会議における論文発表 (査読有)

- 2) 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, Tsukuba, Japan, 2019, 5p.
- 3) N. Horiguchi, N. Miyahara, S. Uesawa, H. Yoshida, M. Ohsaka, “Development of Evaluation Method for Aerosol Particle Deposition in a Reactor Building Based on CFD”, Proceedings of 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27), ICONE27-2158, Tsukuba, Japan, 2019, 8p.

#### 講演発表及び口頭発表 (査読無)

- 4) H. Yoshida, S. Uesawa, H. Naoki, M. Naoya, Y. Ose, “Numerical Simulation of Capturing behavior of Small Particles through Gas-Liquid Interface”, Proceedings of 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27), ICONE27-2277, Tsukuba, Japan, 2019.

### (4) 今後の利用予定:

本解析手法は、既存計算結果との一致は確認できたものの、可視化実験結果とは一部不一致な点があり、改善が必要と考えられる。今後は、不一致な点の原因究明を進めるとともに、実験と解析ともにデータの拡充を行い、妥当性検証を進める予定である。また、エアロゾルの液中吹き込み解析ならびにベンチュリスクラバ解析の妥当性検証を実施するため、実験結果との比較を実施し、妥当性を担保する予定であり、今後も大型計算機の利用を予定している。

### 5.3.16 界面追跡法に基づく混相流解析手法開発

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

吉田 啓之、鈴木 貴行、堀口 直樹、上澤 伸一郎

熱流動技術開発グループ

#### (1) 利用目的:

本課題では、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、炉心熔融時の複雑な熱流動現象を適切にモデル化し、解析コードに反映する必要がある。本研究では、これまで気液二相流を対象に開発してきた詳細解析手法を、熔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、熔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、熔融燃料落下時の熱流動挙動を予測する数値モデルを構築する。本年度は、平成30年度までに改良・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侵入挙動解析を実施し、侵入させるジェットの物性値や連続相である水深をパラメータとし、液体ジェットの着底後の挙動や微粒化径の詳細な把握を進めた。また、燃料集合体内二相流に適用し、スパーサなどの影響について検討を行った。

#### (2) 利用内容・結果:

##### 浅水プールにおけるジェットブレイクアップ挙動の評価

昨年度に引き続き、筑波大学で実施された浅水プール内液体ジェット侵入挙動実験の実験解析を行った。解析体系の幅、奥行き、高さはそれぞれ 220.0,200.0,50.0[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、射出される液体ジェットの物性値には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。境界条件は上部のノズル部以外を自由流出、ノズル部には流入条件を与えた。側面は壁面境界条件、底面は接触角の働く固体壁とした。ここで、底面上で作用する接触角については筑波大学の実験で計測

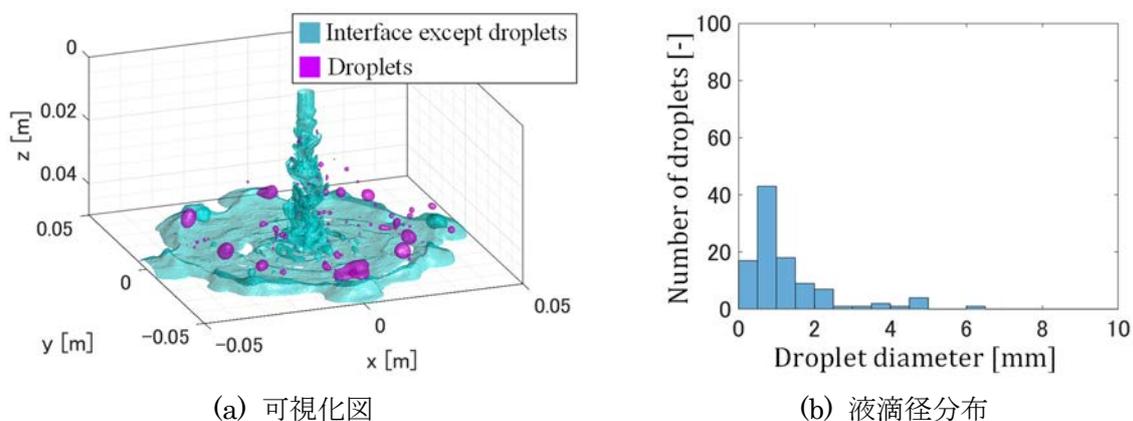


Fig.1 液体ジェット侵入挙動解析結果

された 133[° ]を使用した。

解析結果の一例として、時刻 250 ms 経過時の界面形状の可視化図を Fig.1(a)に示す。なお、可視化処理により液滴と判定された界面については異なる色で表示している。図より、微粒化物とそれ以外の界面が適切に分別できていることが分かる。Fig.1(b)には分別された液滴の体積から求めた液滴径分布を示す。筑波大学で実施された実験結果と同様に、約 1 mm でピークを取り、径が大きくなるにしたがって個数が減少する傾向が確認できる。今後は各種パラメータの影響について評価を実施し、実験結果との詳細な比較を行う予定である。以上、今年度は解析結果からの微粒化物径の推定を実施した。なお、この結果は今後のシビアアクシデント解析コードの高度化に向けた重要な成果である。

### 燃料集合体内二相流挙動の評価

必要な空間解像度と解析精度を確保した上で効率的な計算を実施するため、STAR-CCM+による单相流解析結果を気泡流解析の境界条件として用い、TPFIT による二相流解析を行った。Fig.2 に单相流解析で使用した、PWR 燃料集合体を模擬した 5×5 ロッドバンドルの計算体系を示す。解析では、ベーンの有無をパラメータとした。また、Fig. 2 中赤線で示される部分が気泡流解析領域であり、圧力は 15.4 MPa、格子サイズは各方向とも約 0.5 mm、サブチャンネル中心部から蒸気を注入することで系内に気泡流を形成させた。気泡流挙動の一例を Fig.3 に示す。ベーン無しに対してベーン有りの条件では形成される気泡径が大きく、これはベーンにより流路断面内に作られる流れによって、サブチャンネル中心部に気泡が集まったことによる。

低減速軽水炉 RBWR 内のスパーサが二相流挙動に与える影響を評価するため、RBWR 燃料集合体を簡易に模擬した円管流路条件に対して TPFIT を適用して解析を実施した。解析では、スパーサの有無や流路のサイズなどをパラメータとした。解析体系の一例を Fig.4 に、同条件を用いた解析結果の一例として円管流路内の二相流可視化結果を Fig.5 にそれぞれ示す。スパーサを簡略模擬した周囲の二相流挙動を TPFIT により評価することができることを確認した。

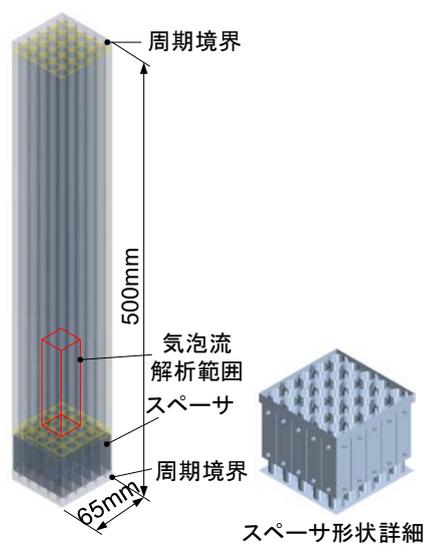
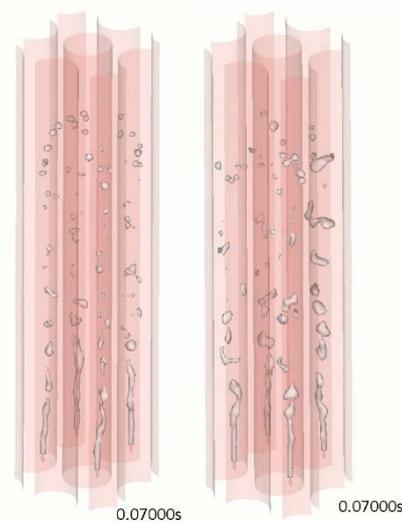


Fig.2 Numerical domain



(a) Without vane (b) With vane

Fig.3 Bubble behavior (t=0.07s)

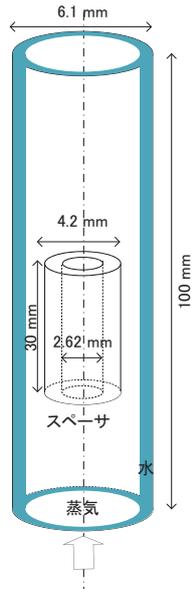


Fig.4 Numerical domain

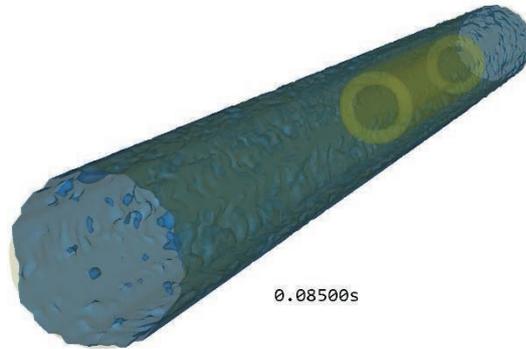


Fig.5 Simulated annular dispersed flow

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 講演発表及び口頭発表

- 1) T. Suzuki, H. Yoshida, N. Horiguchi, S. Yamamura, Y. Abe “Numerical Simulation of Liquid Jet Behavior in Shallow Pool by Interface Tracking Method”, 2020 International Conference on Nuclear Engineering and ASME 2020 Power Conference (ICONE-POWER 2020), online, U. S. A., August 2020.
- 2) 吉田啓之、鈴木貴行、堀口直樹、山村総太、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(7)詳細解析による微粒化物径分布の評価”、日本原子力学会 2020 年春の年会、2020.
- 3) 吉田啓之、小野綾子、岡野匡哲、牧野泰、“界面追跡法に基づく数値シミュレーションによる PWR 燃料集合体内気泡挙動の評価”、日本原子力学会 2019 年秋の大会、富山、2019.
- 4) H. Yoshida, A. Ono, “Numerical Simulation of Bubble Behavior in PWR Rod Bundle by Interface Tracking Method”, 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27), Tsukuba, Japan, 2019.
- 5) T. Suzuki, H. Yoshida, F. Kimura, Y. Abe, “Numerical Simulation of Liquid Jet Behavior in Shallow Pool by Interface Tracking Method”, 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27), Tsukuba, Japan, 2019.
- 6) H. Yoshida, S. Uesawa, Y. Ose, “Numerical Simulation of Capturing behavior of Small Particles through Gas-Liquid Interface”, 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27), Tsukuba, Japan, 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、相変化機能を追加した解析コードの開発のため、大型計算機を利用する予定である。

### 5.3.17 原子炉建屋におけるエアロゾル粒子挙動評価手法の開発

#### Development of Evaluation Method of Aerosol Particle Behavior in a Reactor Building

堀口 直樹

熱流動技術開発グループ

##### (1) 利用目的:

原子力発電所のシビアアクシデントにおいて放射性物質を含むエアロゾル粒子は格納容器から原子炉建屋へ流入し、一部は壁面へ沈着し残りは環境へ放出される。建屋内への粒子沈着は微量として無視されてきたが、福島第一原子力発電所事故の廃炉作業において沈着した粒子から無視できない放射線量が生じ作業の妨げとなっていることから、シビアアクシデント時の原子炉建屋内エアロゾル粒子移行挙動の評価が重要である。しかし MAAP 等シビアアクシデント解析コードによる評価では簡易な物理モデルの使用や原子炉建屋構造の再現性の低さから予測不確かさに問題がある。そこで課題担当者は数値流体力学 (CFD) 解析を用いた原子炉建屋内エアロゾル粒子挙動評価手法を開発しており、本手法は数十メートル規模の原子炉建屋内で浮遊する数マイクロメートルの粒子挙動を数値解析的に評価することで、シビアアクシデント解析コードの結果の定量的な補完を目指す。これまで商用 CFD 解析ツール ANSYS Fluent をベースに開発・改良を進めており、原子炉建屋構造及び内部空間の高解像度化と長い実時間の解析実施が必要と明らかになった。しかし Fluent は低い並列数のため高解像度での長い実時間の解析が困難、原子炉建屋構造データが非互換で大規模計算可能な機構オリジナルコードへの流用が不可能といった問題がある。

本課題では、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大規模計算が可能な 3 次元熱流動解析コード JUPITER 等を用いて、原子炉建屋内粒子挙動評価手法開発における解析体系の高解像度化と長い実時間の解析を実施する。この解析実施のためには、大型計算機の利用及び大口利用課題の承認が必要である。

CFD 解析を用いた原子炉建屋内エアロゾル粒子挙動評価手法の開発によりシビアアクシデント解析コードの不確かさが低減することは、福島事故の廃炉作業の加速だけでなく他原子炉建屋の放射性物質閉じ込め性能予測による効果的なシビアアクシデント対策への波及も期待できる。

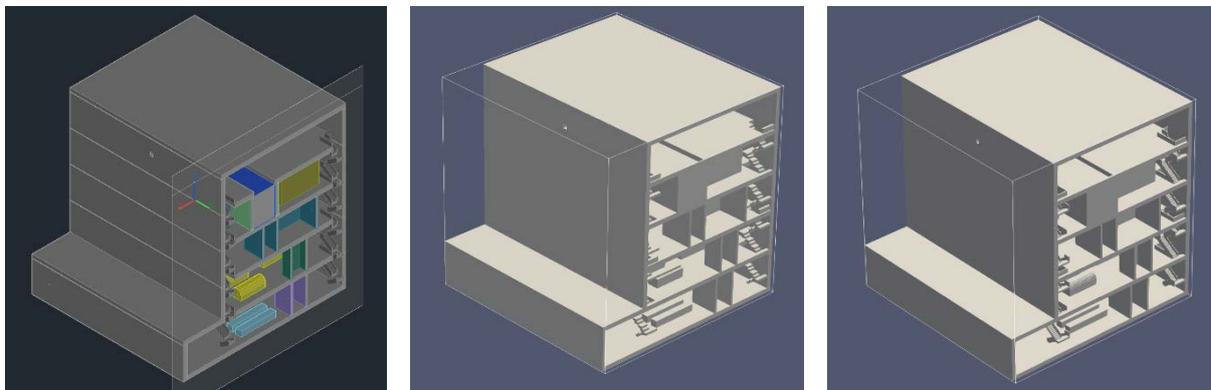
##### (2) 利用内容・結果:

###### ① CAD データ適用および高解像度化による原子炉建屋内構造の再現性向上

大規模計算による原子炉建屋内エアロゾル粒子挙動の評価に向けて、今年度に別途作成した原子炉建屋の CAD データを JUPITER に読み込み原子炉建屋を模擬した解析体系の構築と、原子炉建屋の中でも比較的細かな構造を持ちエアロゾル粒子の移行経路の一つでもある階段部分の形状の再現を目的とした。

Fig. 1 に作成した CAD データとこれを JUPITER に読み込み構築した解析体系を示す。

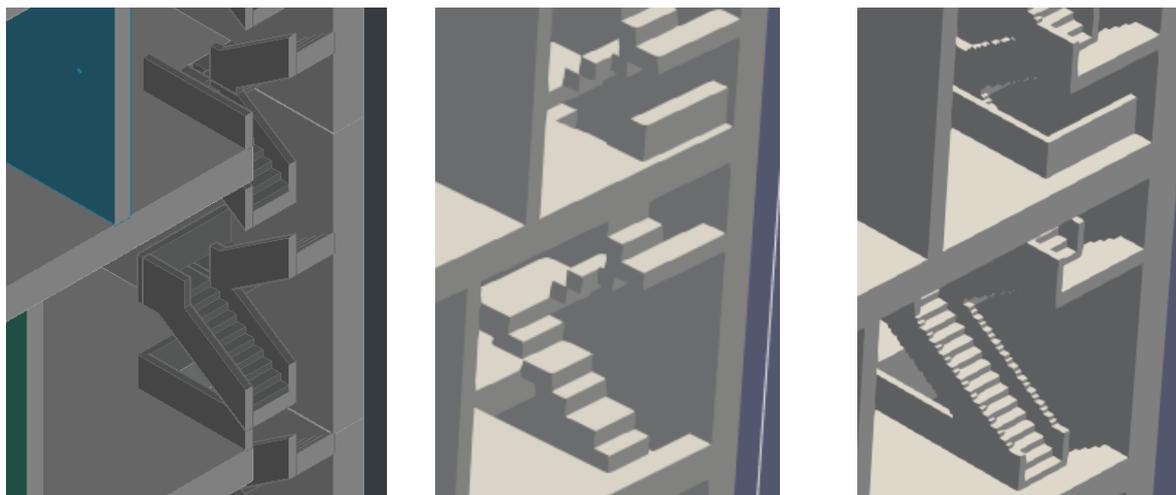
(a) は CAD データ、(b) は解像度 0.5 m/cell の解析体系、(c) は 0.1 m/cell のものであり、原子炉建屋の一部外壁を取り外して内部の様子を確認できるようにした。CAD データは原子炉建屋地上 1~5 階部分の外壁や区画等と中央にある格納容器のコンクリート躯体を模擬している。(b) 解像度 0.5 m/cell の場合、全体的には建屋構造を再現できているように見られたが、比較的細かい構造でエアロゾル粒子移行経路にもなる階段部分は、意図しない部分に隙間ができて十分に再現できなかった。そこで解像度 0.1 m/cell に高解像度化した結果、(c) に示す通り階段部分を再現できた。また、過去の JUPITER の解析事例を踏まえて本解析に要するコア数を計算した結果、(b) 解像度 0.5 m/cell は 48 コア、(c) 解像度 0.1 m/cell は 6000 コアとなり、(c) の解析実施には大口利用課題で承認されるキュークラス h5184 や h10368 が必要であることを確認した。



(a)-i 全体図\_元データ (CAD)

(b)-i 全体図\_0.5 m/cell

(c)-i 全体図\_0.1 m/cell



(a)-ii 拡大図\_元データ (CAD)

(b)-ii 拡大図\_0.5 m/cell

(c)-ii 拡大図\_0.1 m/cell

Fig. 1 原子炉建屋構造の再現性確認結果

**② 原子炉建屋内流動場解析の検証**

原子炉建屋内の粒子挙動解析の前段階として、①で構築した解析体系を用いて原子炉建屋内流動場解析を実施し、解析が動作することを確認した。これまでの解析結果から、実時間 1 時間分の流動場解析の達成には 1 か月程度必要との予測結果を得た。

以上より、解析体系の高解像度化を実施し計算時間の長時間化に努めた。

**(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) N. Horiguchi, N. Miyahara, S. Uesawa, H. Yoshida, M. Ohsaka, “Development of Evaluation Method for Aerosol Particle Deposition in a Reactor Building Based on CFD”, Proceedings of 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27), ICONE27-2158, Tsukuba, Japan, 2019.
- 2) 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, Tsukuba, Japan, 2019.

**講演発表及び口頭発表 (査読無)**

- 3) H. Yoshida, S. Uesawa, N. Horiguchi, N. Miyahara, Y. Ose, “Numerical Simulation of Capturing behavior of Small Particles through Gas-Liquid Interface”, Proceedings of 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27), ICONE27-2277, Tsukuba, Japan, 2019.

**(4) 今後の利用予定:**

今後は解析の継続と結果の検証を実施し、次年度は粒子挙動の解析や複数解析コードの比較によるベンチマーク解析を進める予定である。

### 5.3.18 原子炉内移行時の核分裂生成物挙動解析ツール CHASER の開発

#### Development of Analytical Tool CHASER for the Evaluation of Fission Product Behavior during Transportation in a Reactor

三輪 周平、堀口 直樹  
性能高度化技術開発グループ

##### (1) 利用目的:

東京電力福島第一原子力発電所の廃炉や既設軽水炉等の安全性向上のためには、作業員や公衆の被ばく低減・防止等の観点で重要な放射性的核分裂生成物（以下、FP と称す）であるセシウム、ヨウ素等の炉内分布や環境放出量を正確に予測することが必要である。このためには、シビアアクシデント（以下、SA と称す）時に FP が核燃料から放出して压力容器、原子炉冷却系、格納容器等の原子炉内や原子炉建屋を移行する際に、多様な温度、雰囲気等条件下で構造材等とどのような化学反応を起こし、どのような特性や状態（ガスや粒子）になるかという「化学挙動」を評価する必要がある。これは、同じ FP 元素でも化学形態により揮発性等の特性が異なり、放出・移行時の状態が異なることから、炉内分布や環境放出量の予測値が桁違いに変わるためである。しかしながら、FP の炉内分布や環境放出量の予測に使用される SA 解析コードでは、単純形状で均質化した温度、雰囲気条件下での計算であることに加え、FP の化学挙動の取り扱いが過去の経験や推定に基づいており極めて不十分であり、炉内分布や環境放出量の予測値において桁オーダーでの大きな不確かさを生じていると言われている。

このため、局所的な温度、雰囲気等条件変化を考慮した化学挙動の解析を可能とするため、商用 CFD 解析ツール ANSYS FLUENT をベースに、燃料からの FP 放出、エアロゾル粒子の生成・成長、沈着等の各 FP 挙動に対するモデルを組み込むことにより FP 挙動解析ツール CHASER (CFD analysis tool for FP cHemistry And aeroSol bEhavior) を開発した。CHASER は、高い空間解像度、かつ多量の粒子に対して DPM (Discrete Phase Model : 分散相モデル) を用いた解析が必要であるため、大型計算機の利用が必要である。

##### (2) 利用内容・結果:

Table 1 に CHASER のモデル概要を示す。FLUENT のデフォルトのモデルに加え、核燃料から放出されて沈着に至るまでの FP 挙動を評価可能とするため、FP 放出、気相-固相間の化学反応モデル、凝縮/蒸発に係るモデルを追加している。

令和元年度は、これらのモデルの内、凝縮モデルの検証を行った。検証は、Fig. 1 に示すように、直管状の加熱炉から成る高温領域から低温領域までの FP の化学挙動を再現可能な実験装置 TeRRa の体系にて CsI を蒸発させて低温領域に移行させた実験を解析することにより行った。CsI を入れたるつぼの近傍の壁温度を約 1273 K とし、壁温度を 1000 K~700 K に線形的に低下させ、2 NL/min の水蒸気を含んだアルゴンガスフローにより CsI を蒸発、移行させた。解析の

結果、Fig. 1 に示すように加熱炉軸方向の温度勾配により、壁近傍の温度が相対的に低くなった。また、壁近傍において CsI の凝縮速度は増加した。これは、壁近傍における温度低下により CsI の飽和蒸気量が低下することで凝縮が促進されることを表しており、本凝縮モデルが正常に機能していることを示している。

Table 1 CHASER のモデル概要

モデル		追加	概要
熱水力挙動			質量保存式、運動量保存式、エネルギー保存式
FP 放出		○	アレニウス式型の蒸発速度
化学反応	気相中		アレニウス式型の各化学反応速度定数を用いた化学反応計算
	気相－粒子	○	
	気相－沈着物、壁鋼材	○	
	沈着物－壁鋼材	○	
粒子生成		○	飽和蒸気量に対する超過分を凝縮量に設定し、初期粒子径に生成量を算出
衝突による粒子成長			物理的な相互作用による凝集
凝縮による粒子成長		○	飽和蒸気量に対する超過分を凝縮量に設定し、粒子径の増加に寄与
粒子追跡			粒子への相互作用に基づく DPM
衝突による沈着			物理的な相互作用による沈着
凝縮による沈着		○	飽和蒸気量に対する超過分を凝縮量に設定し、沈着量を算出
粒子・沈着物の蒸発		○	上記の凝縮の逆

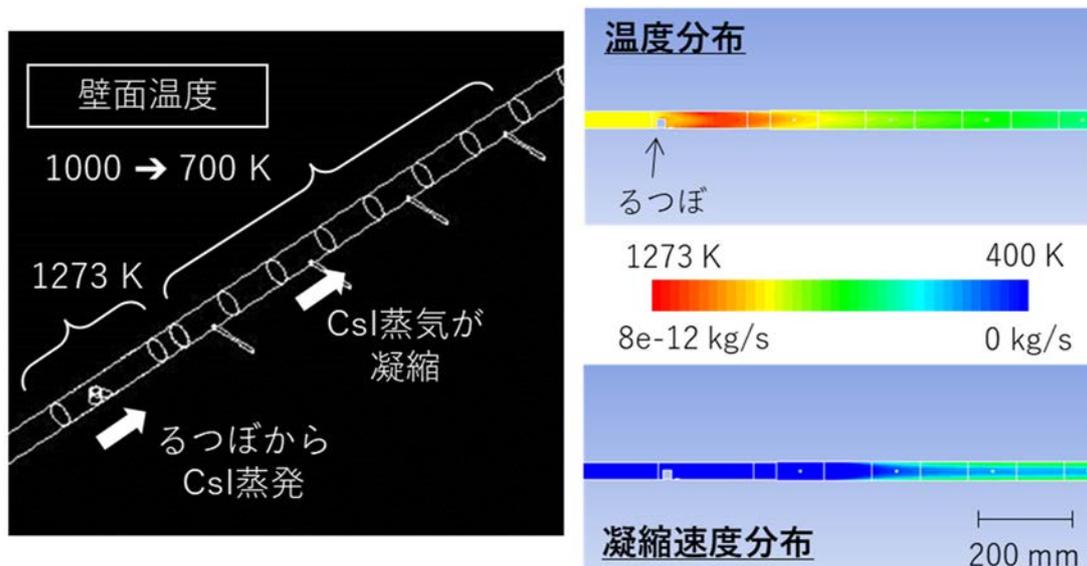


Fig. 1 凝縮による沈着モデル検証のための解析体系と解析結果例

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) S. Miwa, N. Miyahara, K. Nakajima, S. Nishioka, E. Suzuki, N. Horiguchi, J. Liu, F. Miradji, J. Imoto, A. Mohamad, G. Takase, H. Karasawa, M. Osaka, “Development of fission product chemistry database ECUME for the LWR severe accident”, Proceedings of 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27), ICONE27-1993, Tsukuba, Japan, 2019.
- 2) N. Horiguchi, N. Miyahara, S. Uesawa, H. Yoshida, M. Osaka, “Development of evaluation method for aerosol particle deposition in a reactor building based on CFD,” Proceedings of 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27), ICONE27-2158, Tsukuba, Japan, 2019.
- 3) Development Group for LWR Advanced Technology, “Fission Product Chemistry Database ECUME Version 1.1 (核分裂生成物化学挙動データベース ECUME version 1.1)”, JAEA-Data/Code 2019-017, 2020, DOI:10.11484/jaea-data-code-2019-017.

**(4) 今後の利用予定:**

今後も引き続き、ICE X を用いた TeRRa の実験解析を通じて、CHASER に追加したモデルの検証・妥当性確認を進めていく予定である。さらに、開発した CHASER により、様々な体系における FP 挙動評価を進めていく予定である。

### 5.3.19 迷路における多重散乱ガンマ線による線量の解析

#### Analysis for Multiple Scattering Gamma Ray Dose in an Entranceway

松田 規宏

炉物理標準コード研究グループ

#### (1) 利用目的:

簡易計算手法の一つであるアルベド法では、線源から放出された放射線が迷路の壁で散乱して評価点へと至る「放射線の経路」に沿って線量を評価する。評価点に対して設定したアルベド法による代表的な経路による放射線の線量、及びこの経路より複雑な多重散乱による線量の寄与を明らかにすることは、アルベド法による合理的な線量評価の検討において重要である。本研究は、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。) を用いたガンマ線の挙動シミュレーションを実施し、アルベド法の各経路による線量の解析を目的とする。

#### (2) 利用内容・結果:

ベンチマーク問題には、Terrell の Z 字型ダクトにおける実験[3]を設定した。問題を単純にするため、第 2 屈曲部の中心を評価点とした。線源と評価点の関係を図 1 に示す。また、第 1 の散乱面を迷路の北壁に設定したときの 2 回アルベド散乱の経路の例 (北壁→西壁、→床/天井、→南壁) を図 1 中に示した。図 1 に示した矢印は代表的な経路の一例で、実際の解析では第 2 の散乱面となる西壁、床/天井、南壁を複数の領域に分割した。

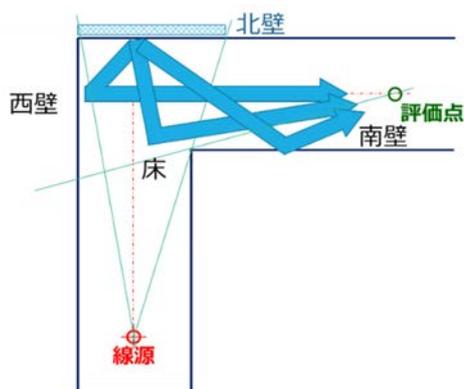


図 1 ベンチマーク問題における線源と評価点の位置関係

第 1 の散乱面を北壁に設定したときの計算結果を紹介する。このとき、評価点における多重散乱込みの線量の計算結果は 2.74 mR/h であった。1 回及び 2 回アルベド散乱による線量の計算結果 (北壁→評価点、→西壁、→床、→南壁) を図 2 に示す。

第 1 の散乱面を北壁に設定したときの計算結果は、1 回アルベド散乱が 1.49 mR/h、2 回アルベド散乱の北壁→西壁が 0.093 mR/h (= 0.063 + 0.023 + 0.007)、北壁→床が 0.215 mR/h (= 0.002 + 0.019 + 0.041 + 0.064 + 0.047 + 0.031 + 0.011)、北壁→南壁が 0.268 mR/h (= 0.053 + 0.088 + 0.087 + 0.040) であった。図による数値の記載は省略するが、2 回アルベド散乱の北壁→天井の計算結果は、線源及び評価点との関係が北壁→床と面対象であるため、北壁→床の計算結果とほぼ同じ値 0.213 mR/h (= 0.002 + 0.018 + 0.040 + 0.064 + 0.048 + 0.030 + 0.011) であった。このとき、3 回以上のアルベド散乱による線量は、評価点における多重散乱込みの線量の計算結果から 1 回及び 2 回アルベド散乱の線量の計算結果の和を差し引いた値 0.461 mR/h (= 2.74 - (1.49 + 0.093 + 0.215 + 0.213 + 0.268)) となる。

アルベド法による合理的な線量評価の検討に資するため、EGS(PHITS)を用いたガンマ線の挙動シミュレーションを実施し、アルベド法の代表的な経路 (2 回アルベド散乱まで) に対する線量

評価を行った。線量の計算結果は、第1の散乱面を北壁に設定したときの計算結果（図2）で示したように、アルベド法の経路と対応がつく形でまとめた。2回アルベド散乱以上の散乱経路を設定することは計算ケースの増加につながるため、今後は、安全側の評価結果を与える代表的な経路の設定や多重散乱成分に対する補正係数について検討し、合理的な線量評価の方法について議論を進める予定である。

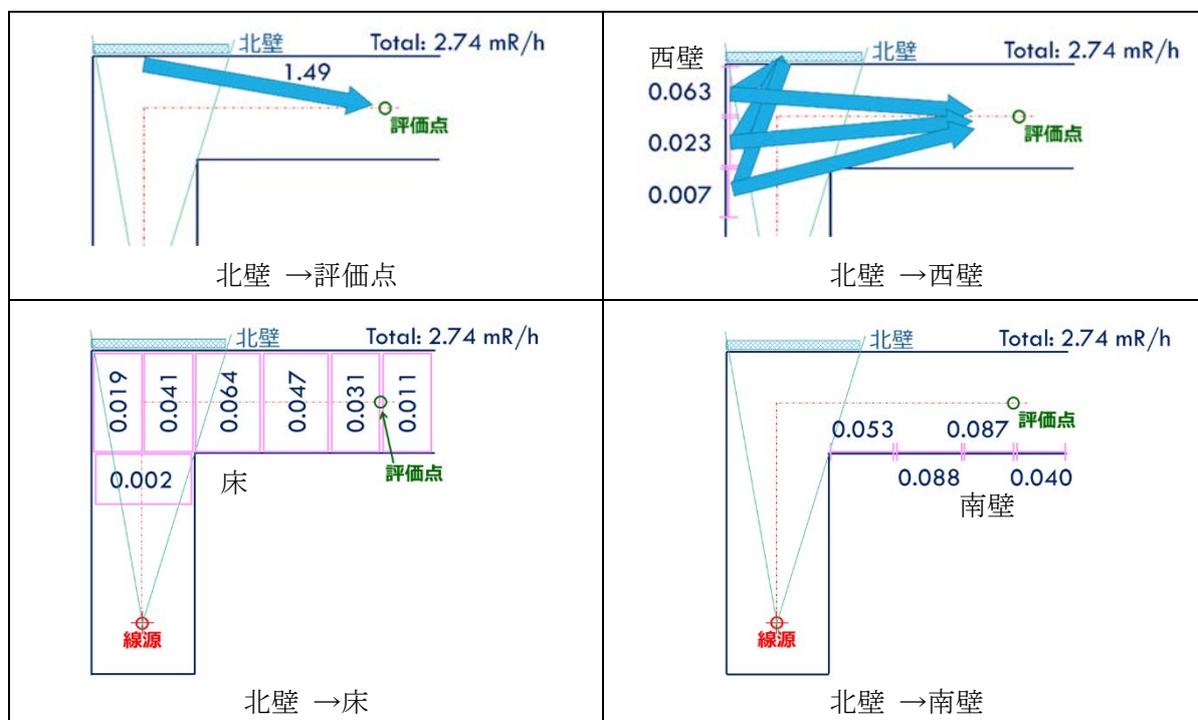


図2 第1の散乱面を北壁に設定したときの1回及び2回アルベド散乱による線量の計算結果（図中の数値は mR/h 単位）

- [1] T. Sato, Y. Iwamoto, S. Hashimoto, T. Ogawa, T. Furuta, S. Abe, T. Kai, P. E. Tsai, N. Matsuda, H. Iwase, N. Shigyo, L. Sihver, K. Niita, “Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02”, J. Nucl. Sci. Technol. Vol.55, Issue 6, pp.684-690 (2018).
- [2] H. Hirayama, Y. Namito, A. F. Bielajew, S. J. Wilderman, W. R. Nelson, “The EGS5 code system”, SLAC-R-730 (2005) and KEK Report 2005-8 (2005).
- [3] C.W. Terrell, A.J. Jerri, R.O. Lyday, “Radiation streaming in ducts and shelter entrance Way”, ARF-1158A02-7, Armour Research Foundation (1968).

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) 松田規宏、和田亜由美、延原文祥、平尾好弘、“アルベド法による合理的な迷路の線量評価手法の策定(6) モンテカルロ法による多重散乱の解析”、日本原子力学会 2020年春の年会、2020.

**(4) 今後の利用予定:**

モンテカルロ法計算コードによる迷路のガンマ線挙動シミュレーションには、大型計算機による解析が必須であり、今後も利用を予定している。

### 5.3.20 ADS 材料の第一原理計算

#### DFT Calculation of Materials for ADS

阿部 陽介、板倉 充洋<sup>+</sup>、山口 正剛<sup>+</sup>、鈴木 知明<sup>+</sup>、都留 智仁  
照射材料工学研究グループ

<sup>+</sup> 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

#### (1) 利用目的:

金属材料の機械的特性、特に降伏強度と破壊靱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。

基礎工燃料・材料工学ディビジョンとシステム計算科学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。2019年度から軽水炉・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る。候補材料としてマルテンサイト鋼とオーステナイト鋼が上がっており、どちらも Cr 元素を多く含み第一原理計算において磁性の問題を解決する必要がある。本課題ではこの問題の解決を目指す。

#### (2) 利用内容・結果:

鉄原子同士は強磁性的に相互作用しており、不純物がない場合は全ての磁性スピンの同じ方向を向いている状態が実現される。一方 Cr 原子は鉄原子と反強磁性的に相互作用するため、鉄中に固溶した Cr 原子は鉄と逆方向のスピンをもつ。また、Cr 同士も反強磁性的に相互作用するため、鉄中で複数の Cr 原子が接近した場合にどのような磁性状態が実現されるのかは自明でない。場合によってはスピンの三次元的な方向を向いた状態が実現される可能性があるが、そのような状態の計算には通常のスピンの場合と比較して4倍の計算時間が必要となる。図1にそれぞれの計算手法と必要な計算時間の概略を示す。本年度は鉄中に複数の Cr 原子が存在する場合に三次



図1 クロム 10%鉄合金における磁性の扱いの概略

元的なスピンまで取り扱う計算を行い、通常のスピンの場合と結果を比較してその効果を評価し、物性の計算においてスピンの三次元的な扱いが必要かどうかを決定することを目的とした。

計算対象としては鉄 128 原子からなる系で 1~4 個の原子を Cr で置換し、あらかじめ三次元的なスピンの向きを初期配置として与えた後に波動関数と原子位置の最適化を行った。その結果、最も三次元的なスピンが実現される可能性の高いケースである、4 つの Cr 原子が隣接し 4 面体を形成している場合 (図 2) を含め、すべてのケースでスピンの Z 成分しかもたず、X、Y 成分は初期値に関わらず 0 に収束するという結果を得た。

この結果から、クロム含有量が 10% 程度までの現実の ADS 材料の計算においてもスピンとしては Z 方向のみを仮定した一次元的な状態で計算を行えばよいことを示している。

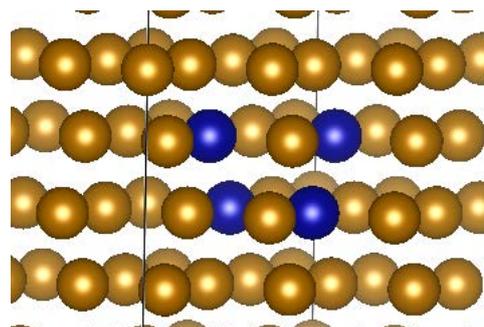


図 2 Cr 4 原子集合体 (スピンの Z 成分以外は 0 であることが確認された。)

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 論文

- 1) Y. Abe, Y. Satoh, H. Abe, N. Hashimoto, S. Ohnuki, “Effects of one-dimensional migration of self-interstitial atom clusters on the decreasing behavior of their number density in electron-irradiated  $\alpha$ -iron”, Philosophical Magazine, Vol.100, No.1, 2020, pp.110-125.

#### 学会発表

- 2) Y. Abe, Y. Satoh, N. Okubo, A. Konno, “Effect of one-dimensional migration of self-interstitial atom clusters on their number density in alpha-iron under electron irradiation”, 19th International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM-19), San Diego, U.S.A., Oct. 2019.
- 3) 阿部陽介、大久保成彰、佐藤裕樹、山下真一郎、“格子間原子集合体の一次元運動に対する照射場影響”、材料照射研究会「Irradiation 3.0 に向けて」、仙台、2020 年 1 月。
- 4) 阿部陽介、大久保成彰、佐藤裕樹、“イオン照射下での格子間原子集合体の一次元運動”、日本金属学会 2020 年春期 (第 166 回) 講演大会、東京、2020 年 3 月。
- 5) 佐藤裕樹、阿部陽介、大久保賢二、谷岡隆志、“試料作製時の熱処理によって導入される不純物が格子間原子集合体の一次元運動に与える影響”、日本金属学会 2020 年秋期 (第 167 回) 講演大会、online、2020 年 9 月。

### (4) 今後の利用予定:

本年度の計算で効率的かつクロム添加の影響を正しく取り込んだ計算手法が確立できたので、今後は照射損傷のモデル化に必要な格子欠陥の生成エネルギーや移動エネルギーを評価していく予定である。

### 5.3.21 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 Structure Calculations for Alloying and Defect Structures

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）は構造材料において最も重要な性質である一方、ほぼ全ての材料では強度と延性はトレードオフの関係にあり、両立することは困難である。材料の力学特性に対する機能向上は、今日まで様々な方法で行われてきたが、ほとんどが経験的な知見に基づくものであり、かつ主要金属元素の物理的性質によって方法が全く異なるため、包括的な理論や方法が確立されていない。しかし、様々な材料の機能向上に関するアプローチを総括すると (1)組織制御と (2)合金化に分けることができ、実用の構造材料では、これらの組み合わせることで機能の向上が図られてきた。構造材料の戦略的な機能向上のためには、このような材料の変形機構を解明し機械特性を正しく評価することが不可欠である。本研究では、これらの組織制御と合金化に基づく材料機能に関して、材料内部の欠陥挙動から力学特性を評価・予測するために、原子・電子シミュレーションを用いた方法と材料設計への応用を目的とする。

##### (2) 利用内容・結果:

本研究では、大型計算機利用課題①（大口利用）として、大規模シミュレーションによる押込み下の組織解析と、第一原理計算を用いた合金化による力学特性に関する研究を行った。以下に、後者の内容に関して得られた成果について示す。

BCC 金属の変形はらせん転位の運動に基づくため、合金元素の影響は弾性ひずみよりも化学的な結合に支配される。ここで、BCC 金属として Fe、V、Nb、Mo、Ta、W をマトリクス元素として考え、置換型をとる多様な合金元素の影響を電子状態から体系的に理解することを検討した。全ての場合を第一原理計算で解析することは困難であるが、転位と合金元素の相互作用のみの計算では、大きな計算リソースを必要とせず、マトリクスと合金元素の情報から、転位運動のエネルギー障壁やマクロな力学特性が特徴付けられると考えた。

ここで、らせん転位の運動は、キンクの形成と移動という熱活性化過程によって生じることから、転位運動に及ぼす局所構造の影響をキンク機構から捉えることに着目する。このとき、電子状態の寄与をキンク機構の活性化エネルギーとして熱活性化過程に導入する。そして、転位の有限温度における運動と力学特性と関連付ける以下の方法を提案した。

1. まず、BCC 合金のマクロな力学特性は、転位運動と力学特性を関係づける Orowan の関係 ( $\dot{\gamma} = b\rho_m \bar{v}$ ) で記述できると仮定する（ここで、 $\bar{v}$  は転位の運動速度）。

2. 転位の運動はキンクの形成と運動の 2 つの熱活性化過程であることから、 $\nu_{km}(\tau^*, c)$  と  $\nu_{km}(\tau, c)$  という振動数の逆数で与えられる。このとき、それぞれの振動数はアレニウス型の関係を用いて活性化エネルギー  $\Delta H_{km}(\tau, c)$  と  $\Delta H_{km}(\tau, c)$  で表される。これらは、外部応力 ( $\tau$ ) と合金元素の濃度 ( $c$ ) の関数となる。また、活性化エネルギーが応力の関数であることを利用して、実際の

塑性ひずみ速度を用いて 1. をことにより解くことにより、マクロな応力と関係づける。

3. 以上の様に熱活性化過程を解析的に記述することが出来ると仮定すると、第一原理計算によって合金元素による活性化エネルギーへの寄与分を計算することで、マクロな力学特性を評価することが可能となる。

例として、W をマトリクスとした場合の転位と合金元素の相互作用を計算した結果を図 1 に示す。図には第 4~6 周期までの遷移金属を合金元素とした場合の相互作用エネルギーを示しているが、周期と族によって大きな傾向を持つことが分かった。このことは、原子半径比の違いによる弾性ひずみよりも電子的な結合が転位との相互作用に寄与するという想定と一致している。さらに、第一原理計算を用いて直線転位の運動のエネルギー障壁を求めたものを、熱活性化過程に関する関係に導入し、合金元素を Re とした場合に対して強度と温度・濃度の関係を図 2 に示す。純金属の場合は温度に依存して降伏応力が低下することが分かる一方、合金系では濃度と温度によって、降伏応力が複雑に変化することがわかる。また、低温では合金元素の濃度が増加するにつれて強度が低下する固溶軟化現象が生じることが確認できる。このように転位運動の熱活性化理論と第一原理計算を組み合わせた解析によって、古典的な理論で理解することが困難な、温度と力学特性の関係を明らかにした (論文 2))。これらの結果は、材料に寄らず適用することが可能であり、計算によって合金設計にかかるコストと時間を大きく削減できることから、今後の元素戦略に基づく材料設計において重要な役割を果たすと考えられる。

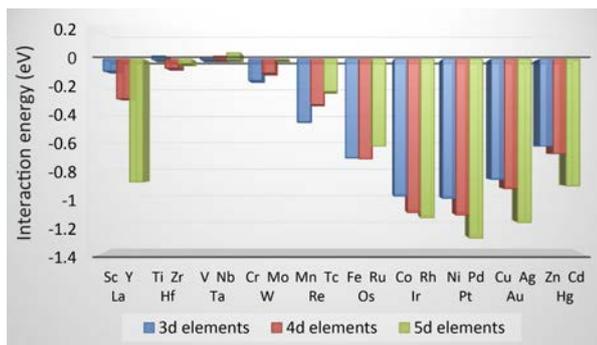


図 1 転位と合金元素の相互作用エネルギー

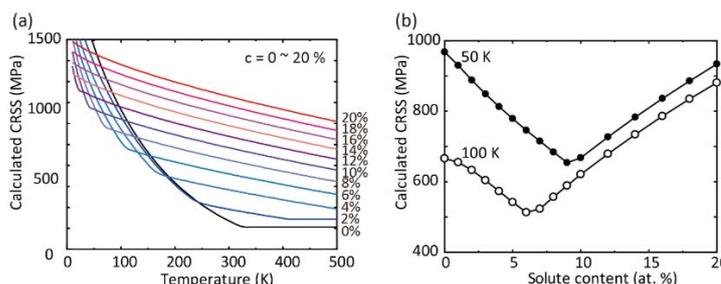


図 2 合金元素の濃度に依存した降伏応力と温度の関係

(a) 強度と温度、(b) 強度と合金濃度

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 投稿論文 (7 報)

- 1) P. J. Yang, Q. J. Li, T. Tsuru, et al., "Mechanism of hardening and damage initiation in oxygen embrittlement of body-centred-cubic niobium", *Acta Mater.*, Vol.168, 2019, pp.331-342.
- 2) A. Bendo, K. Matsuda, A. Lervik, T. Tsuru, et al., "An unreported precipitate orientation relationship in Al-Zn-Mg based alloys", *Mater. Charact.*, Vol.158, 2019, pp.109958\_1-109958\_7.
- 3) 山本晶太、宮嶋陽司、渡邊千尋、門前亮一、都留智仁、三浦博己、"多軸鍛造加工を施した工業用純チタンの変形挙動の結晶粒径依存性とひずみ速度依存性"、*日本金属学会誌*、83 巻 12 号、2019、pp.465-473.

- 4) T. Tsuru, M. Wakeda, T. Suzudo, et al., “Anomalous solution softening by unique energy balance mediated by kink mechanism in tungsten-rhenium alloys”, J. Appl. Phys., Vol.127, 2020, p.025101.
- 5) 都留智仁、“連載講座 マグネシウムの延性・韌性向上のための合金設計：第一原理計算からのアプローチ”、軽金属、Vol.70、2020、pp.73-81.
- 6) T. Tsuru, K. Shimizu, M. Yamaguchi, M. Itakura, K. Ebihara, et al., “Hydrogen-accelerated spontaneous microcracking in high strength aluminium alloys”, Sci. Rep., Vol.10, 2020, p.1998.
- 7) 都留智仁、“第4章 ハイエントロピー合金の力学特性評価のためのモデリング”、「ハイエントロピー合金」、乾晴行（編著）、株式会社内田老鶴圃、2020年、pp.107-158.

#### 受賞（1件）

- 8) 平成30年度日本材料学会学術奨励賞、“欠陥組織と合金化に起因した力学特性の評価に関する原子・電子論的研究”、2019年5月.

#### 基調・招待講演（8件）、国際・国内会議（5件）

- 9) 都留智仁、“BCC合金の転位運動に基づく変形機構と力学特性：第一原理計算と力学モデルによる解析”、日本金属学会 第10回プラストンに基づく変形現象研究会、2020年2月、京都（招待講演）.
- 10) 都留智仁、“原子・電子シミュレーションを用いた欠陥挙動に基づく力学特性”、スパコンプロフェッショナルNo.27、2020年1月、仙台（招待講演）.
- 11) 都留智仁、“第一原理計算による転位構造の計算：転位運動に関する特性の評価”、名古屋大学第13回物質科学談話会、2019年12月、名古屋（招待講演）.
- 12) T. Tsuru, “First-principles calculations of dislocation core structure and motion in high entropy alloys”, The 11th Korea-Japan Berkeley Symposium, November, 2019, Tokyo, Japan (Invited).
- 13) 都留智仁、“第一原理計算による転位運動と温度に依存した変形機構の研究”、金属学会2019年秋期（第165回）講演大会、2019年9月、岡山（基調講演）.
- 14) 都留智仁、他、“第一原理計算によるハイエントロピー合金の転位構造と運動に関する研究”、金属学会2019年秋期（第165回）講演大会、2019年9月、岡山（基調講演）.
- 15) T. Tsuru, et al., “First-principles predictions of dislocation motion in high-entropy alloys”, The 10th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM-10), August, 2019, Xi-an, China (Invited).
- 16) T. Tsuru, T. Suzudo, “First-principles calculations of the motion of screw dislocation around solutes in W alloys”, 6th FMTCP Workshop, June, 2019, Washington, U.S.A. (Invited).

#### (4) 今後の利用予定：

合金設計に関する研究として、希薄合金および高濃度合金にユニバーサルに適用可能な力学モデル、および、欠陥構造解析に対する第一原理計算に基づく短距離秩序構造と力学特性の相関について検討を進める。

### 5.3.22 第一原理計算による SA 時の Cs 吸着挙動評価とウラン磷酸化合物の評価

#### Evaluation on Cs Adsorption Behaviors 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:

人形峠環境技術センターではウラン探鉱から濃縮までの研究開発を実施し、民間企業等への技術移転を行ってきた。そして、平成 13 年度からは廃止措置に必要な施設解体や除染技術の研究開発を行っている。その一環として、ウラン廃棄物の処理処分技術を確立することを目標にした環境研究を実施している。このウラン廃棄物の処理処分に係る技術開発において、廃棄物の性状評価や環境動態挙動評価が重要である。このために、浅い地中に埋設処分されたウラン化合物の長期移行挙動の解明が求められているが、このためには生成される化合物の挙動の予測が必要である。人形峠地域における主要なウラン鉱物は、酸化帯では燐灰ウラン石（二次鉱物）、非酸化帯では人形石（一次鉱物）である。これらのウラン鉱物の挙動の予測には、安定性の評価や生成メカニズムの解明が重要であるが、安定性評価や生成メカニズムに関する熱力学的データ（溶解度等）の知見は十分でないため、現在でも研究が継続されている。人形峠地域の主要ウラン鉱物の中でも、人形石は結晶構造が不明である。ウラン鉱物の安定性や生成メカニズムの評価を行うためには、構造不明である人形石の構造を明らかにするとともに、ウラン鉱物のエネルギーや電子状態を検討することが求められている。そのためには、人形石について結晶構造の妥当性評価を行う必要がある。そこで、過去の粉末 XRD データを基に、結晶構造解析コードと第一原理計算を用いた評価を行った。人形石は複雑な構造のウラン磷酸化合物であり大きな計算資源が必要であることから、この評価には大型計算機を使用した。

また、SA 時に Cs はステンレス鋼（SS）に吸着するが、吸着時に形成される Cs 化合物を評価するためのプログラムを導入して、試計算を行った。

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、人形石の構造を検討しウラン鉱物のエネルギー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。また、SA 時の SS への吸着に際して形成される Cs 化合物を評価することにより Cs の吸着挙動の基礎となる Cs の化学形の評価が可能となる。

##### (2) 利用内容・結果:

今年度は、人形峠ウラン鉱物として構造不明な人形石について、既報の XRD を基にして、XRD 解析コードと DFT 計算により結晶構造の評価を行い、XRD パターンの最大のピークを再現することで今後の構造評価の基礎を定めることができた。さらに、この知見を基にモデル構造の構築を進めリードベルト解析を用いた評価に着手した。また、SS 上に形成される Cs 化合物の評価に関するプログラムを導入して、試計算を実施した。

## ① XRD 解析と DFT 計算による人形石の結晶構造評価

人形峠周辺にはウラン鉱床が多く存在しており、ウラン鉱物の生成挙動は埋設処分されたウラン化合物の長期移行挙動に影響するため、生成メカニズムの解明は重要である。これらのウラン鉱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。このメカニズムの解明のため、ウラン鉱物の安定性評価を進めているが、その第一段階として人形峠の主要なウラン鉱物であり構造が不明である人形石の結晶構造と単位胞の構成について評価を行う。

人形石の組成は  $\text{CaU}(\text{PO}_4)_2 \cdot 1\text{-}2\text{H}_2\text{O}$  であり、単位胞の構成は  $[\text{CaU}(\text{PO}_4)_2 \cdot 1\text{-}2\text{H}_2\text{O}]_3$  であり、格子定数と XRD の測定結果が報告されているが、結晶構造も明らかではない。そこで、既報の XRD を解析コードによる解析と DFT 計算を用いて、人形石の結晶構造の評価を行った。

XRD 解析コードより得られた構造は、DFT 計算より安定構造ではなかった。一方、この構造には、最も散乱強度の大きい U 原子が長軸の b 軸に沿って  $(1/3)b$  の距離の配置であるという特徴があった。そこで、この配置を基に新たにモデル構造を構築して DFT 計算による構造最適化を行い、得られた構造から XRD を計算した。解析から得られた XRD と既報の測定された XRD を図 1 に示す。なお、簡単のためモデル構造の単位胞の構成は結晶水の無い  $[\text{CaU}(\text{PO}_4)_2]_3$  とした。図 1 を見ると最大ピークが再現されおり、他の複数のピーク位置も再現された。さらに、結晶水を含むモデル構造についても検討し同様の結果が得られた。したがって、U 原子の b 軸に沿って  $(1/3)b$  の距離の配置が構造評価の基礎となることと、結晶水の影響が小さいことが分かった。

## ② リートベルト解析による人形石の結晶構造評価

人形峠環境技術センターでは、ウラン廃棄物の処理処分技術を確立することを目標にした環境研究を実施している。浅い地中に埋設処分されたウラン廃棄物中のウランの長期移行挙動評価を行うためには、生成される化合物の予測と安定性評価が重要である。長期的に生成が予測される化合物として人形峠地域の主要なウラン鉱物である人形石があるが、生成メカニズムや結晶構造が明確でない。そのため、これまで過去の粉末 XRD データを基に、結晶構造解析コードと DFT 計算を用いて結晶構造の妥当性評価を進めてきた。これらの評価結果を基に、単位胞中の原子配置の検討のためリートベルト解析に着手した。

人形石の組成は 1-2 個の結晶水を含む  $\text{CaU}(\text{PO}_4)_2 \cdot 1\text{-}2\text{H}_2\text{O}$  であり、既往の格子定数と XRD の

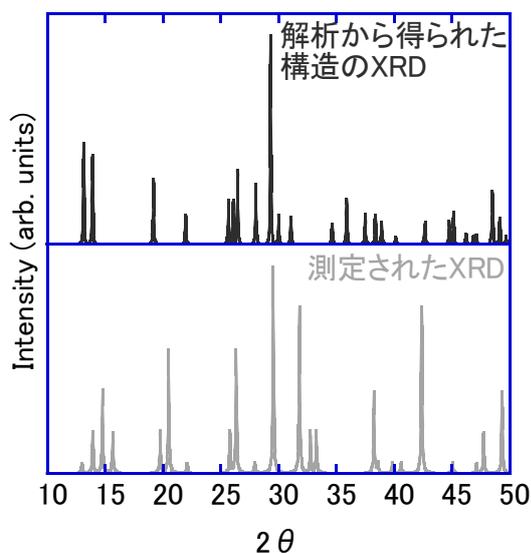


図 1 人形石の XRD の解析結果と既報の測定結果

測定結果から単位胞の構成は $[\text{CaU}(\text{PO}_4)_2 \cdot 1\text{-}2\text{H}_2\text{O}]_3$ と報告されているが、原子配置の詳細は明らかではない。一方、これまでの検討により、人形石の XRD の最大ピークである  $30^\circ$  付近のピークは再現されたが、他のピークの位置と強度は必ずしも再現されていない。詳細な検討のため、Ca や U や P の配置を入れ替えたモデル構造について DFT 計算や XRD 解析コードによる構造評価を実施して原子配置を絞り込み、絞り込んだモデル構造についてリートベルト解析の試計算を行った。なお、結晶水の存在は XRD パターンへの影響が小さいため、モデル構造の単位胞の構成として $[\text{CaU}(\text{PO}_4)_2]_3$ を用いた。

複数のモデル構造について検討を行ったが、その中で Ca や U や P に関し同一元素が近い位置にある構造について、リートベルト解析の試計算を行った。その結果を図 2 に示す。図 2 より主要なピークの位置はほぼ一致した。したがって、この解析により概ね適切な Ca や U や P の配置が得られたと考えられる。しかしながら、強度は必ずしも一致していないため、さらに解析を精緻化し O を含めて原子配置を検討する必要がある。それ以外の強度の不一致の要因としては、結晶水の影響を無視したことが考えられる。

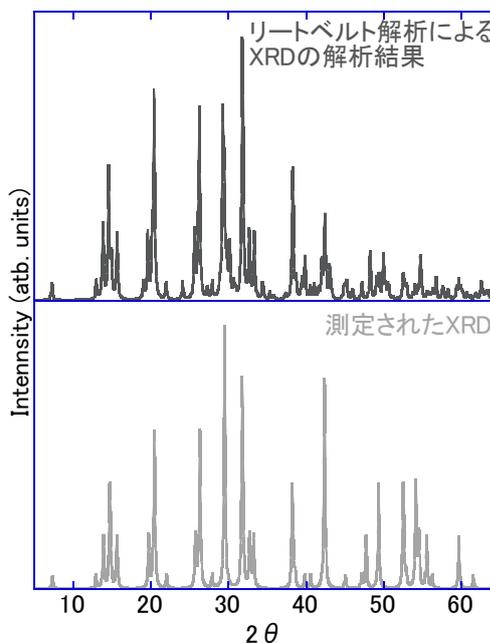


図2 人形石の XRD の解析結果と既報の測定結果

### ③ SA 時の Cs 吸着挙動評価

SA 時の Cs 吸着挙動評価の一環として、有用な評価手法である高エネルギー光電子分光法 (HAXPES) の解析のため、光イオン化断面積の計算のための原子状態計算プログラムを導入し試計算を実施した。また、SA 時 SS に吸着する可能性のある Cs 化合物で結晶構造が未確定な  $\text{Cs}_2\text{Si}_4\text{O}_9$  の結晶構造を XRD より解明するため、XRD 解析コードの試計算を実施した。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 鈴木知史、逢坂正彦、中桐俊男、“XRD 解析と DFT 計算による人形石の結晶構造評価”、日本原子力学会 2019 年秋の大会、2019、富山。
- 2) C.Suzuki, M. Osaka, T. Nakagiri, “Evaluation on the crystal structure of ningyoite using XRD analysis and DFT calculation”, P Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA+MC2020), Japan, May 2020, No.315847.

### (4) 今後の利用予定:

今後は、Cs 化合物のラマン分光スペクトルについて、理論計算を実施する予定である。

## 5.3.23 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 Adsorption and Permeation into Nuclear Materials using First Principles Calculation

五十嵐 誉廣

防食材料技術開発グループ

## (1) 利用目的:

水素脆化は鋼中に侵入した水素によって金属結合が弱体化されることで起こる現象である。水素脆化は例えば燃料被覆管で発生する可能性が示唆されており、もし発生した場合は重大事故に繋がる可能性がある。また、水素脆化は原子力材料のみならず高強度鋼を用いている一般材料にとっても対策が望まれる現象であることから、材料の健全性を確保する観点から水素脆化の評価および予測は社会的ニーズが大きい。本研究では、溶液中に含まれる金属イオンが鉄への水素侵入に及ぼす影響とその原理を理解することを目的として、第一原理計算を用いた鉄表面の電子状態解析を行った。本研究の発展によって、実験で得られている溶液中イオンの種類と腐食量の関係について基礎メカニズムの解明に繋がること、そして計算科学的な立場から腐食抑制に繋がる添加物の提案がなされることが期待できる。本件では、電子状態解析に第一原理計算を行うため多くの計算資源が必要であり、大型計算機による支援が必要であった。

## (2) 利用内容・結果:

本研究では、溶液中に含まれる金属イオンが鉄鋼表面に与える影響を評価するため、第一原理計算と溶媒近似を組み合わせた Quantum ESPRESSO + ESM-RISM ハイブリッド

解析法を用いた。解析する元素は実験で用いた鉄鋼の主成分である鉄単体、金属イオンの種類は  $\text{Na}^+$ 、 $\text{Mg}^{2+}$ 、 $\text{Zn}^{2+}$  とした。解析に用いた原子数は鉄原子 80 個 + 金属イオン 1 個、 $\text{NaCl}$  溶液を近似溶媒として、解析モデルの表面電子状態解析を行った (図 1)。解析の結果、溶液中金属イオンの吸着電位は  $\text{Na}^+ \sim \text{Mg}^{2+} < \text{Zn}^{2+}$  の順番であり、実験で得られた腐食抑制の傾向と綺麗な相関があった (図 2)。表面近傍の差電子密度を解析した結果、吸着電位の大きかった  $\text{Zn}^{2+}$  は表面の鉄原子との間に電子密度の増加が見られた (図 3)。これは、結合に寄与する電子が増加し強結合状態であることを示している。以上の結果から、腐食および水素透過を抑制する効果がある金属イオンを含有する溶液では、金属イオンが鉄表面に対して結合しやすい傾向があることから鉄表面に保護層が形成、その結果腐食および付随する水素透過が抑制されることが示唆された。

本研究は大型計算機大口利用課題「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」にて SGI ICE X を利用して行われた。

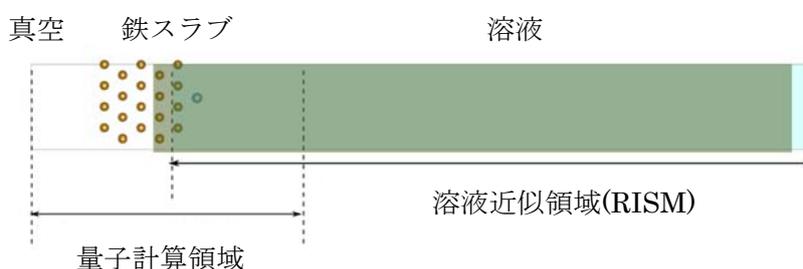


図 1 シミュレーション概要図

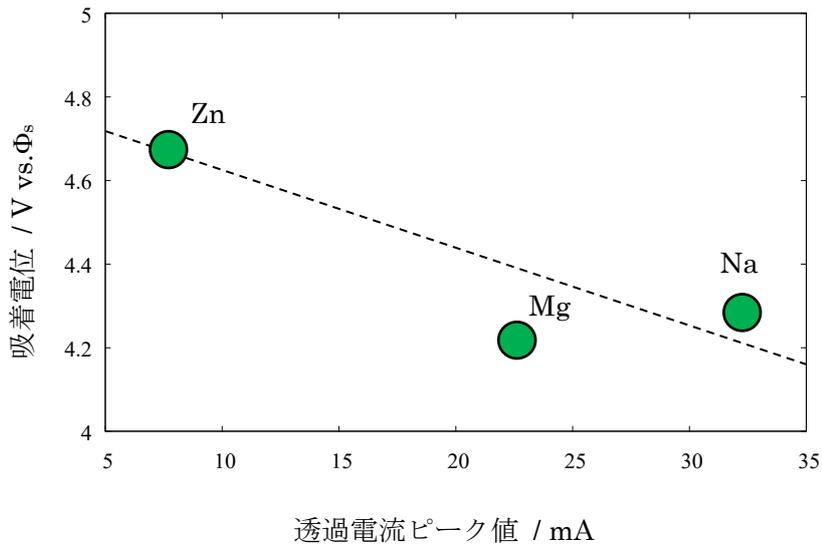


図2 実験による透過電流ピーク値とシミュレーションによる吸着電位の比較

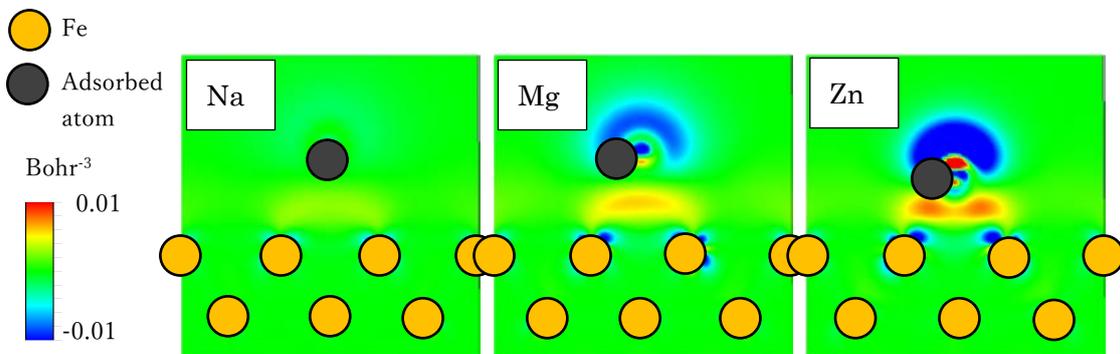


図3 吸着原子近傍の差電子密度のコンター図

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) 五十嵐誉廣、“金属腐食現象に対するマイクロ・マクロ計算科学的アプローチ”、東北大学金属材料研究所・計算材料学センター「スパコンプロフェッショナルNo.21」セミナー、東北大学金属材料研究所、仙台、2019（招待講演）。
- 2) 五十嵐誉廣、大谷恭平、入澤恵理子、小松篤史、上野文義、山本正弘、加藤千明、“計算科学手法を用いた金属腐食研究”、2019年電気化学秋季大会、山梨、2019（招待講演）。

**(4) 今後の利用予定:**

これまでの研究は溶液中金属イオンのみに着目し、その影響を解析してきた。一方で実現場における腐食対策として、溶液中に別途腐食抑制剤を挿入する対策がとられている。しかし、腐食抑制剤どうしや含有金属イオンとの相乗効果の基礎メカニズムについては明確になっていない。今後はそれらの影響について大型計算機を用いた解析を行う予定である。

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

### 5.4.1 大規模殻模型計算による原子核の超変形状態の記述

#### Description of Superdeformed States in Nuclei with large-scale Shell-model Calculations

宇都野 穰

先端理論物理研究グループ

#### (1) 利用目的:

原子核の束縛エネルギー（質量）、励起準位構造などの基本的な性質は、その一粒子準位（殻構造）によって支配されていることが知られている。例えば、核子がある軌道までを完全に占有し、その次の軌道との間に大きなエネルギー差がある場合、核子は閉殻構造をとり、極めて安定となる。こうした閉殻構造をとる核子の個数は歴史的に魔法数と呼ばれ、閉殻構造ゆえにその基底状態の形状は球形であることがよく知られている。

ところが、魔法数付近の原子核には、励起エネルギーの低い状態として、変形した状態が系統的に出現することも以前からよく知られている。球形と変形という2つの異なる形状をもつ状態がほぼ等しいエネルギーをもつことから、こうした現象は変形共存と呼ばれる。

今世紀の初頭、大型ゲルマニウム検出器によるガンマ線分光実験の進展に伴い、変形状態の理解が進んできた。例えば、カルシウム 40 は陽子数、中性子数ともに 20 の魔法数をもつものにも関わらず、励起エネルギーが 3 MeV 程度にある通常の大変形状態に加え、長軸と短軸の長さの比が 2 に近い超変形バンドも励起エネルギー 5 MeV から始まることがわかった。また、こうした大きな変形状態は、カルシウム 40 だけでなく、陽子、中性子数が 18,20,22 の原子核に系統的にあることもわかった。

このような超変形状態の励起エネルギーが低いことは、単純な独立粒子描像では理解できず、そのメカニズムに大いに興味もたれている。こうした現象を定量的に記述するには、大規模殻模型計算と呼ばれる、量子化学の配置間相互作用法に対応する数値計算が最も有効であるが、この計算は巨大な次元数の行列を対角化する必要があるため、限られた範囲内でしか使われてこなかった。本研究では、共同研究者が開発した大型計算機用の殻模型計算コード KSHELL を用い、カルシウム 40 近傍の超変形状態を系統的に記述することを目的とした。

#### (2) 利用内容・結果:

カルシウム 40 近傍の変形状態を記述するためには、図 1 に模式的に表すように、sd 殻に加え、pf 殻の一部をバレンス殻として計算に取り入れなくてはならない。本研究では、全ての sd 殻軌道 ( $d_{5/2}$ ,  $s_{1/2}$ ,  $d_{3/2}$ ) の他に、 $f_{7/2}$ ,  $p_{3/2}$  軌道を取り入れた殻模型計算を行った。殻模型計算では、こ

のバレンス殻内の全てのスレーター行列式を基底ベクトルにとってハミルトニアン行列を対角化するが、何の制約もしないとハミルトニアン行列の次元は大きすぎて数値計算が不可能になるため、本研究では、sd 殻から pf 殻へ 6 核子までの励起を取り入れた、制限された模型空間による計算を行った。模型的考察から、この制限された模型空間でも、カルシウム 40 の超変形状態以外の変形状態は適切に記述できると考えられる。この設定のもと、<sup>36,38,40</sup>Ar, <sup>40,42</sup>Ca, <sup>44</sup>Ti の 6 核種の変形バンドの計算を正パリティ状態、スピン 16 まで系統的に行った。その典型的なハミルトニアン行列の次元は 10<sup>9</sup> 程度であり、各行あるいは列あたりの非ゼロ行列要素が 1,000 程度の疎行列となるため、ランチョス法による固有状態の計算が有用となる。

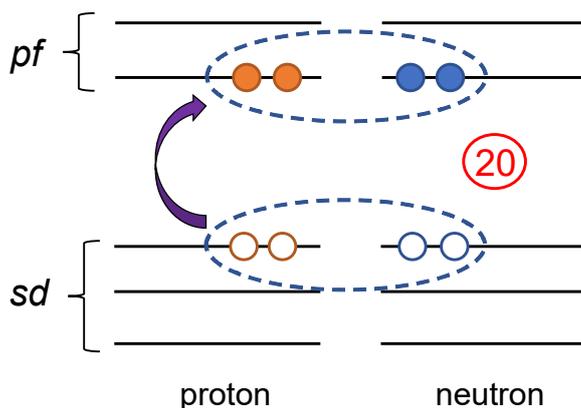


図 1 本研究で考慮する変形状態の典型的配位

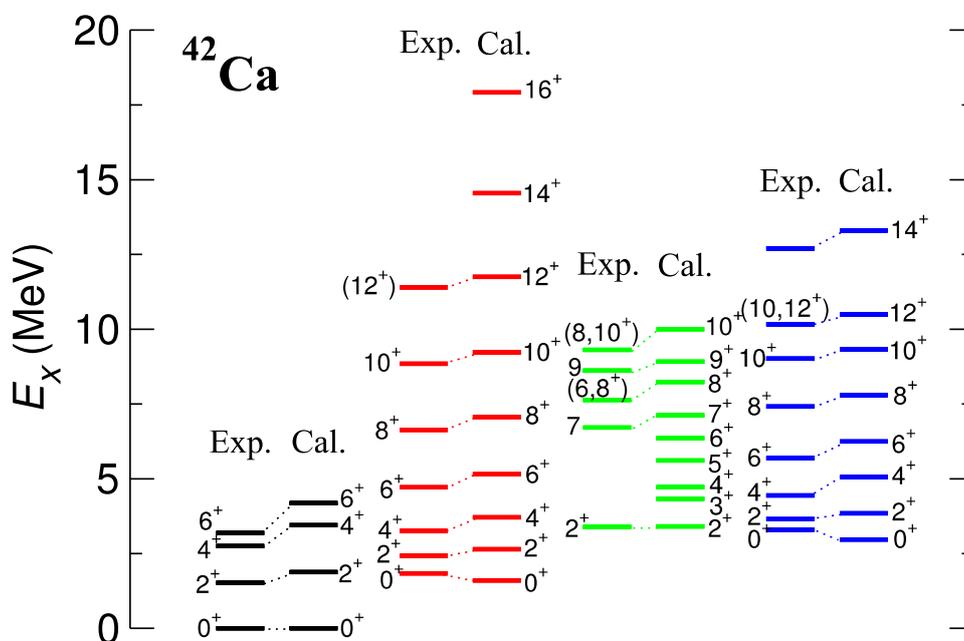


図 2 カルシウム 42 のエネルギー準位の計算値 (Cal.) を実験データ (Exp.) と比較したもの。赤、緑、青で示したバンドは、それぞれ 6 粒子 2 空孔バンド、そのガンマバンド、4 粒子 2 空孔バンドを表す。

図 2 に、一例として、カルシウム 42 の計算結果と実験データを比較した。これまで、実験では、赤で示された超変形した 6 粒子 2 空孔バンドが確立されていたが、他の準位の性質は明らかになっていなかった。本研究では、そのほかに、緑で示された準ガンマバンド（変形が非軸対称であることによるバンド）と、青で示された 6 粒子 2 空孔バンドよりは変形の小さな 4 粒子 2 空孔バンドが存在する結果が得られた。実験的にはこれらのバンド構造は確立されていなかったが、本研究では計算結果に基づき、図 2 のバンドアサインメントを提案した。これらの準位が全てバンド構造をもつとすると、カルシウム 42 は、従来わかっていたような単純な球形・変形共存核ではなく、多様な変形状態が混在する、多重変形共存核となる。多重変形共存核は、鉛とニッケルの一部の原子核とカルシウム 40 くらいしか知られておらず、この計算の予言が正しいかどうかは今後のガンマ線分光実験などで明らかにされるものと期待される。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 宇都野穰、市川隆敏、清水則孝、大塚孝治、“ $^{42}\text{Ca}$  における非軸対称超変形状態と多重変形共存”、日本物理学会 2019 年秋季大会、山形、2019 年 9 月。
- 2) 宇都野穰、清水則孝、井手口栄治、青井考、“ $^{40}\text{Ca}$  の E0 遷移の大規模殻模型計算とその解釈”、日本物理学会第 75 回年次大会、名古屋、2020 年 3 月：会議は現地開催中止になったが、講演概要原稿をもって発表は成立している。

### (4) 今後の利用予定:

本研究に関しては現在論文を投稿中であり、理論研究としてはひと区切りついたが、関係する実験との共同研究が複数予定されており、それに必要な計算は引き続き進める。大規模殻模型計算については、r 元素合成過程に関わるテーマで令和 2 年度からの科研費を獲得したため、その研究を行うために大型計算機を利用する。

## 5.4.2 低次元強相関系の基底状態および励起ダイナミクスの研究

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

大西 弘明、杉本 貴則、森 道康  
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:

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。特に、磁気励起スペクトルの運動量・エネルギー依存性を精密に計算でき、J-PARCの中性子散乱実験で観測される磁気励起スペクトルの実験結果と直接比較して、スピン物性の発現機構を有効多体模型に基づいて微視的に議論することができる。

しかし、幅広い運動量・エネルギー領域でのフルスペクトルを計算するには、運動量とエネルギーについてのスキャンのため、ひとつのパラメータセットに対して数千程度（システムサイズ×エネルギーメッシュ数）の独立した計算を実行することになり、膨大な計算量を要することがネックとなっている。また、高い計算精度を保つには繰り込みで残す状態数を大きくしなければならず、大容量メモリと長時間実行が必要となる。

本研究では、こうした数値計算上の困難を大型計算機を活用した大規模並列計算により克服する。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。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。

#### (2) 利用内容・結果:

近年、最近接強磁性  $J_1$  と次近接反強磁性  $J_2$  の交換相互作用が競合するフラストレート強磁性鎖において、強磁場中で二つのマグノンが束縛対を形成するスピン四極子（スピンネマティック）状態が実現することが理論的に見出され、注目されている。しかし、スピン四極子は磁場や中性子・原子核のスピンと直接結合しないため、スピン状態を調べるのに通常用いる中性子散乱や核磁気共鳴などの実験手法で直接検出することが難しい。そのため、間接的に、スピンネマティック状態が実現している兆候を捉えるという観点での研究が進展している。本研究では、スピンネマティック状態の特性を励起ダイナミクスの観点で明らかにするために、スピン励起スペクトル（二体スピン相関）、スピン四極子励起スペクトル（四体スピン相関）、スピン八極子励起スペクトル（六体スピン相関）の系統的な解析を行なっている。これまで特に、中性子散乱実験で測定

されるスピン励起スペクトルの異方性を観測することで、スピンネマティック状態の間接的証拠が得られることを示してきた [H. Onishi, “Magnetic excitations of spin nematic state in frustrated ferromagnetic chain”, J. Phys. Soc. Jpn., Vol.84, Issue 8, 2015, pp.083702\_1- 083702\_4 (Editors' Choice)]. スピンネマティック状態の直接的証拠を得るには、スピン四極子のギャップレス励起を観測する必要があるが、スピン四極子を直接検出する実験手法は発展途上で、スピンネマティック状態の直接的証拠を見出す有効な手段を確立することが重要な課題となっている。

本研究では、スピン四極子の励起を観測できる有力な実験手法として、共鳴非弾性 X 線散乱 (Resonant Inelastic X-ray Scattering, RIXS) に着目する。RIXS では、入射光と反射光の分極をうまく制御することでスピン四極子の光学遷移を観測できることが、対称性に基づく現象論で予言されている。しかし、現象論では具体的な散乱過程の寄与が検討されておらず、実験との対応は明らかでない。そこで、これまで遂行してきたスピン四極子励起スペクトルの研究を進展させて、スピン四極子励起スペクトルおよび RIXS スペクトルの解析を行う。両者を比較して、RIXS スペクトルにおいてスピン四極子励起が支配的になる条件を解明し、スピンネマティック状態を特徴付けるスピン四極子の励起を RIXS で直接検出するための処方箋を与えることを目指す。

今年度は、その出発点として、スピン四極子励起スペクトルの解析に取り組んだ。フラストレート強磁性鎖物質  $\text{LiCuVO}_4$  の低磁場での RIXS 実験と比較するために、低磁場での磁場依存性について詳細な解析を行った。図 1 にスピン四極子励起スペクトルの計算結果を示す。 $\text{LiCuVO}_4$  を想定して、交換相互作用の XXZ 異方性を導入している。図は (運動量  $q$ , エネルギー  $\omega$ ) 空間でのスペクトル強度分布をカラープロットで示している。一見して、スピン励起スペクトルのスピノンのようなスペクトル強度分布とは大きく異なっている。磁場依存性を詳細に追うと、スペクトル強度分布が磁場とともに変化していく様子が見て取れる。運動量固定でエネルギー依存性を見ると、運動量が小さい領域でスペクトル強度が磁場とともに増大していることが分かる。これらの結果は  $\text{LiCuVO}_4$  の RIXS 実験と整合している。しかし、実験ではより顕著な磁場依存性が観測されており、その要因について考察している段階である。現在、磁場方向依存性や、スピン四極子の他の成分についても解析を進めるとともに、RIXS スペクトルを解析するための計算コードを開発中である。

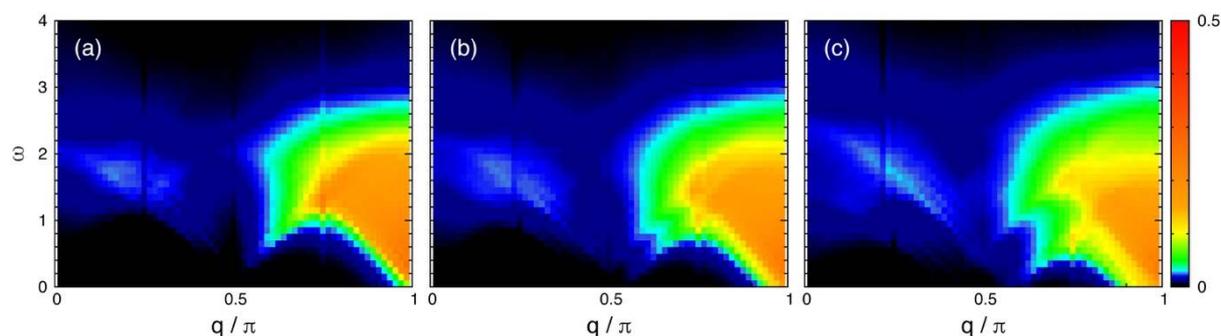


図 1 フラストレート強磁性鎖のスピン四極子励起スペクトル  $Q_{x^2-y^2}$  成分. (a)  $h=0$  (ゼロ磁場), (b)  $h=0.154$ , (c)  $h=0.299$ .  $J_1/J_2=-1$ ,  $\Delta=0.8$  (交換相互作用の XXZ 異方性),  $N=64$  サイトの計算結果.

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

## 学術論文

- 1) K. Sasaki, T. Sugimoto, S. Sota, T. Tohyama, “Magnetic excitations in magnetization plateaux of a frustrated spin ladder”, Phys. Rev. B, Vol.101, Issue 14, 2020, pp.144407\_1-144407\_9.
- 2) H. Miyazaki, T. Sugimoto, K. Morita, T. Tohyama, “Magnetic orders induced by RKKY interaction in Tsai-type quasicrystalline approximant Au-Al-Gd”, Phys. Rev. Materials, Vol.4, Issue 2, 2020, pp.024417\_1-024417\_7.
- 3) T. Sugimoto, K. Morita, T. Tohyama, “Cluster-Based Haldane States in Spin-1/2 Cluster Chains”, Phys. Rev. Research, Vol.2, Issue 2, 2020, pp.023420\_1-023420\_7.
- 4) H. Onishi, “Magnetic excitations and transport properties in frustrated ferromagnetic chain”, J. Magn. Magn. Mater. Vol.479, 2019, pp.88-90.

## 国際会議

- 5) H. Onishi, “Spin quadrupole excitation in spin nematics”, 60th REIMEI International Workshop on New excitations for spintronics seen with quantum beams, Sendai, Japan, 2020年2月(招待講演)。
- 6) T. Sugimoto, T. Tohyama, “Critical Behaviors in Quantum Spin Cantor Lattice”, International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (SCES2019), Okayama, Japan, 2019年9月。
- 7) T. Sugimoto, K. Morita, T. Tohyama, “Cluster-Based Haldane States in Quantum Spin Cluster Chains”, 7th Euro-Asian Symposium “Trends in Magnetism”, Ekaterinburg, Russia, 2019年9月(招待講演)。
- 8) H. Onishi, “Dynamical octupole structure factor of frustrated ferromagnetic chain”, 10th Joint European Magnetic Symposia Conference (JEMS 2019), Uppsala, Sweden, 2019年8月。
- 9) T. Sugimoto, K. Sasaki, T. Tohyama, “Magnetic Excitations in Magnetization Plateau Phases in Frustrated Two-Leg Spin Ladder”, Spectroscopies in Novel Superconductors, Tokyo, Japan, 2019年6月。
- 10) M. Mori, “Electronic states of phonon Hall materials”, Research Frontier of Advanced Spectroscopies for Correlated Electron Systems, Sendai, Japan, 2019年6月。
- 11) H. Onishi, “Magnon-pair excitation and transport in spin nematics”, Frontiers of Statistical Physics, Tokyo, Japan, 2019年6月。
- 12) T. Sugimoto, H. Miyazaki, K. Morita, T. Tohyama, “Magnetic orders induced by the RKKY interaction in Tsai-type quasicrystalline Approximants”, 14th International Conference on Quasicrystals, Kranjska Gora, Slovenia, 2019年5月。

**(4) 今後の利用予定:**

フラストレート強磁性鎖のスピネマティック状態の磁気特性に関して、スピン四極子励起スペクトルおよび RIXS スペクトルを解析する。スピン四極子の励起を RIXS で直接検出するための処方箋を与えることを目指す。また、輸送特性に関して、多数のマグノンが束縛されたマグノンクラスターが流れる効果を調べるため、スピン流・熱流相関関数や波束ダイナミクスの解析を行う。

### 5.4.3 除染除去土壌再生利用に向けた鉱物の光触媒機能探索

#### Exploration of the Photocatalytic Function of Minerals for Recycling of Decontamination/Removal Soil

杉田 剛、奥村 雅彦<sup>+</sup>

界面反応場化学研究グループ

<sup>+</sup> 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

##### (1) 利用目的:

2011年の福島第一原子力発電所事故によって多量の放射性セシウムが環境中に放出された。セシウムは土壌中の粘土鉱物に強く吸着するため、長期間表層土壌に留まるが、政府主導の表土剥ぎ取りによる大規模除染によって、現在は一部の住民の帰還が実現している。しかし、除染エリアが広大であったため、大量の放射性除去土壌が残された。この除去土壌は除染現場付近の仮置場から福島第一原子力発電所近辺の中間貯蔵施設に搬入され、現在では、中間貯蔵施設における除去土壌と廃棄物の処理・貯蔵の全工程で運転を開始している。その後、除去土壌は福島県外の最終処分場にて長期保管される予定である。

長期保管における負担を軽減するため、除去土壌からの放射性セシウム除去し、減容することが検討されている。減容の手法としては、土壌中では微細粒子である粘土鉱物への吸着が多いことから、分級によって粘土鉱物を取り除き、セシウム濃度が高いものと低いものに分別する方法が使用される予定である。中間貯蔵施設事業の方針では、「除去土壌等の減容・再生利用に向け、関係機関の連携の下、地元の御理解を得ながら、技術開発や実証事業を実施するとともに、再生利用先の具体化を推進」とされており、効率的な減容化法の開発と共に、有効な再生利用法についても求められている。

分級以外の減容技術開発に関しては、熱処理が最も有望な減容技術と目されている。このような状況の下、申請代表者が属する先端基礎研究センター界面反応場化学研究グループは、粘土鉱物に塩化カルシウム等を加えて約700℃で焼成してセシウムを含まない鉱物と塩化セシウムを生成することに成功し、塩化セシウムを水等で洗浄することによりほぼ100%のセシウムを分離する技術を開発し、これを「セシウムフリー鉱化法（CFM）」と名付けた（図1）。

近年、申請者らによってCFM処理後の鉱物が光触媒として機能することを示唆する実験結果が得られた。すなわち、CFM法は、汚染土壌からのCs除去と、Cs除去後の土壌の機能性材料

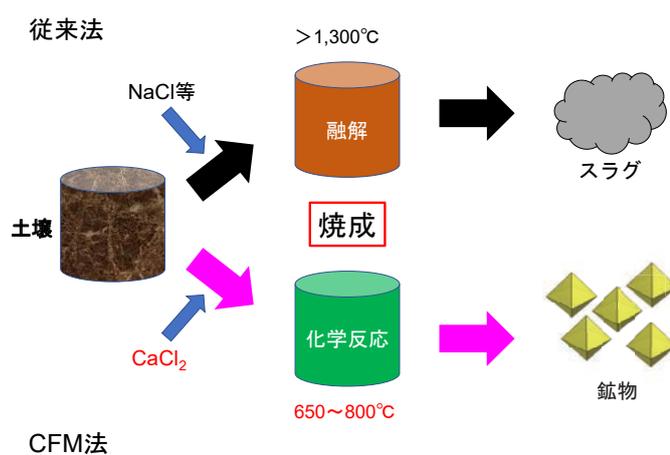


図1 セシウムフリー鉱化（Cesium free mineralization, CFM）法

としての再生利用を可能とする極めて有用な手法である可能性が示された (図 2)。しかしながら、そのようなメカニズムで光触媒反応が起きているのかは不明であった。

光触媒反応のメカニズム究明には、第一原理計算が有効であることが知られており、本申請では、大型計算機による第一原理計算を用いた、ワダライトの光触媒反応のメカニズムの解明を目的とする。この目標が達成された場合、除染除去土壌の減容後生成物の新しい再生利用法を提案できる。これは、国民の大きな負担となっている除染除去土壌が実は有用な機能性材料の原料であることを示しており、世の中に与えるインパクトは計り知れない。さらに、ワダライトは天然でも発見されている鉱物であるため、ワダライトの光触媒メカニズムが解明できた場合、他の天然由来鉱物についても光触媒としての可能性を議論できるようになり、全く新しい天然由来の機能性物質の開発につながる可能性があり、材料科学として強いインパクトを与える可能性がある。上述のように、本研究は福島支援に関する利用に該当する (福島支援①)。本稿では、原子力機構の ICEX を利用し、第一原理計算パッケージ Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) を用いて CFM 処理後鉱物 (ワダライト) の構造決定およびバンド構造評価について記載する (大型計算機利用課題①)。

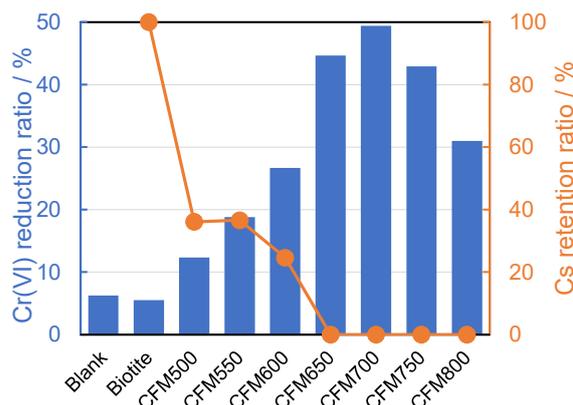


図 2 セシウムフリー鉱化法における焼成温度による生成物のセシウム保持率の違いと光触媒作用による Cr(VI)還元効率

## (2) 利用内容・結果:

本研究では、セシウムフリー鉱化法 (CFM) によって作成した Cs 除去後鉱物 (CFM 鉱物: 主成分はワダライト) における光触媒活性の発現機構について、構造決定および第一原理計算によるバンド計算を通して考察した。図 3 に、計算によって得られたバンド構造を示す。CFM 鉱物は、UV 照射下において Re(VII) ( $E^{\circ} = +0.5 \text{ V}$ ) は還元できず、Rh(III) ( $E^{\circ} = +0.76 \text{ V}$ ) や Cr(VI) ( $E^{\circ} = +1.36 \text{ V}$ ) を還元できたことから、伝導帯の下端は +0.5 から +0.7 の間であると推定していた。図 3 より、Fe の 3d バンドから構成される伝導帯の下端と当初の予測は概ね一致し、ワダライトが半導体として機能することで光触媒活性を発現していると考えた。

しかし、CFM サンプルの半導体特性を裏付けるために行った電気化学測定において、半導体材料に見られる光電流

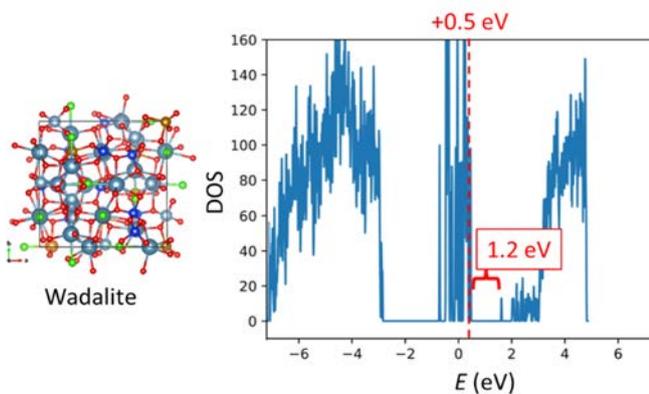


図 3 計算に用いたワダライトの構造と Total DOS

が観測されず（図 4）、CFM 鉱物が半導体特性を有しているという裏付けが得られなかった。これにより、当初予定していた研究計画を大幅に変更せざるを得なかった。具体的には、これまでの研究で得られていた光触媒活性が確実に CFM 処理に起因していることを証明する必要があり、ロット間のバラツキの評価や、原料（Cs 収着黒雲母）や添加塩（CaCl<sub>2</sub>）そのものが光触媒活性を有しないことの確認、溶出イオンの測定など、実験による確認を行った。結果的に、原料や添加塩による光触媒

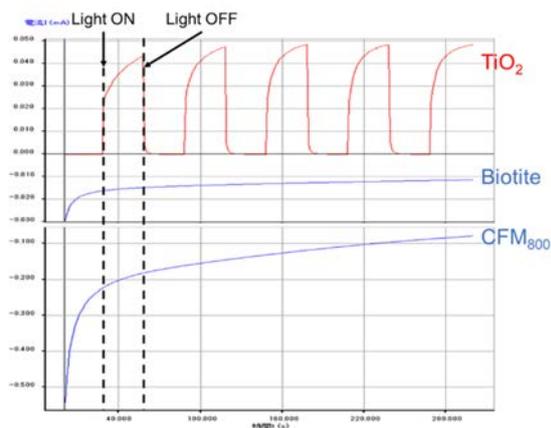


図 4 TiO<sub>2</sub>、黒雲母、CFM サンプルの光電流測

活性は認められず、CFM 処理によって光不活性な鉱物が光触媒材料となることは再度確認されたが、実験に多くの時間を割くこととなり、当該課題の目標達成には至らなかった。

今後は、CFM 処理に用いる粘土鉱物及び添加塩を変化させた場合の最安定構造およびバンド構造の計算を続けると共に、溶出イオンやドーピング効果による影響についても評価する。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

【特許出願中】

- 1) 杉田剛、下山巖、“光触媒の製造方法及び還元方法”、特願 1019-196519、出願日 2019 年 10 月 29 日。

### (4) 今後の利用予定:

今後も CFM 処理後生成物のバンド構造の計算と、光触媒活性部位の解明を進めると共に、CFM 処理後の物質の主たる構造だけでなく、不純物として存在する元素の効果や、溶出イオン等の影響についても考慮する必要があり、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 ICEX 等の利用を予定している。

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

### 5.5.1 セシウム溶媒抽出のための分子探索

#### Screening of Molecules for Cs Solvent Extraction

Simonnet Marie

アクチノイド化学研究グループ

#### (1) 利用目的:

This project aimed at determining the geometry optimization of organic extractants for Cs separation from aqueous streams. The main goal was to get the chemical complexes geometry to analyze EXAFS spectra. Geometric optimization was thus calculated by Gaussian software. Additional molecules were then optimized to compare the metal-ligand and metal-counterion distances, and to better understand the effect of the ligand structure on the overall complex stability.

#### (2) 利用内容・結果:

The basic compound that was used for both experiments and calculation is dioctyloxycalix[4]crown-6 (abbreviated DOC[4]C6) that was extensively studied in the literature.

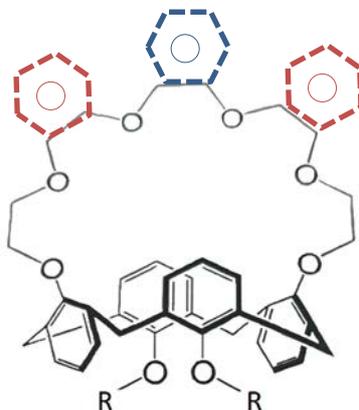


Figure 1 Calixarene crown-ethers used in this study, - C6, -- BC6, -- DBC6

Several functions and basis sets were tested, and all results will be given at the B3LYP-LanL2DZ level.

The effect of slight structural changes was studied by experiments and calculations. Schemes of the different studied molecules are displayed in Figure 1. A benzyl ring was added on top of the crown (Figure 1: blue) to make it more rigid and thus more selective.

Extraction experiments from acidic solutions showed a higher distribution ratio for DOC[4]BC6 than DOC[4]C6 but formation constants determined by UV-Vis showed that the Cs-DOC[4]C6-NO<sub>3</sub> complex is more stable. This was explained by a higher HNO<sub>3</sub> extraction by C6 than BC6, which eventually leads to a decrease in Cs extraction by DOC[4]C6 from acidic media. Geometric optimization showed that in both cases, the nitrate binds in bidentate position. Calculations were also performed in the case of 2 benzene rings addition (Figure 1: red). In that case, the nitrate binds in monodentate position, probably to compensate the shorter Cs-O (crown-ether) distances. Average Cs-O distances are provided in Table 1, and we can observe an increase in Cs-O (NO<sub>3</sub>) distance and a decrease in Cs-O (crown) distance with the addition on benzene rings, probably due to the higher rigidity of the crown-ether ring (shrinking).

Table 1 Average Cs-O distances (Å) of di-octyloxy calix-crown without (C6) and with 1 (BC6) or 2 (DBC6) benzene rings. The numbers in parenthesis represents the number of oxygen atoms considered.

	C6	BC6	DBC6
Cs-O (NO <sub>3</sub> )	3.22 (2)	3.26 (2)	3.30 (1)
Cs-O (crown)	3.42 (6)	3.37 (6)	3.23 (6)

Based on these differences, calculations were then performed to determine whether the shrinking effect of the benzene substitution is mainly due to the shortening of the C-C bond or due to a π-electronic effect. I thus replaced some of the alkyls of the crown-ether ring by alkenes, later written as their chemical form “=n” with n the number of alkenes in the compound (1 or 2). Distances are summarized in Table 2.

Table 2 Comparison of average Cs-O distances (Å) of the alkene extractants (=1, =2) having respectively 1 or 2 alkenes ; nitrate oxygen in the first shell are respectively 1 (mono) and 2 (bi)

	DOC4 (bi)	=1 (bi)	BC6 (bi)	=2 (mono)	DBC6 (mono)
Cs-O (NO <sub>3</sub> )	3.22	3.18	3.26	3.17	3.30
Cs-O (crown)	3.42	3.37	3.37	3.35	3.23

When comparing the alkenes, we can observe that there is little change in the Cs-O (crown) distance. The main change comes from the nitrate shifting from bidentate position to monodentate position, similarly to the benzene substitution previously described. In the case of alkyl substitution on the top of the crown, we can observe that the average Cs-O (crown) are similar for =1 and BC6, showing that the shortening of the C-C bond is the major effect.

The nitrate is also slightly closer to cesium with the alkene compound, maybe due to an easier access (steric effect) or to compensate for the absence of the  $\pi$ -electron. When substituting on the aisles of the crown, once again the nitrate is closer for the alkene than for the benzene substituent. In contrast to the previous case with only one substituent, the Cs-O (crown) distances are about 0.1 Å shorter in DBC6. This shows that the nitrate position is closely related to the size of the crown-ether ring. The complexes with shorter Cs-O (NO<sub>3</sub>) distances are expected to be more stable in apolar diluents as nitrate ions are hardly soluble in such diluents.

In order to investigate the diluent effect, cesium extraction results by DOC[4]C6 were compared in chloroform and 2-nonanone diluents and showed a quite different behavior in laboratory experiment but a quite similar environment by calculation (Table 3). This means that the diluent has probably a direct effect on the solvation, either in the first or second shell, which cannot be accounted for with the SCRF calculation. The difference can also be related to the nitrate ions solvation ability. However, including a few solvent molecules around the ligand yielding a too big system for performing calculation at the same level, it was not attempted.

Table 3 Calculated average distance (Å) to Cs atom, DOC[4]C6

	crown-ether (6 O)	Nitrate (2 O)	Nitrate (1 N)	Alkoxy (2 O)
chloroform	3.43	3.27	3.71	5.59
octanone	3.44	3.27	3.73	5.64

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

Nothing

**(4) 今後の利用予定:**

Another project focuses on Ln-An separation. Gaussian software is also used to optimize the geometry of the complexes, followed by frequency calculations to get the Gibbs free energy. Difference of free energy then provides an estimate of the stability of the complex as compared to the ligand and the metal separately. An estimate of the selectivity can be predicted through the comparison of these differences for several metals, although caution on the results needs to be taken as many additional parameters affect the actual extraction. Calculations for the screening of new molecules for Ln/An separation are currently on-going.

## 5.5.2 長距離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

### Simulation Program for Microscopic Magnetization Processes in Magnetic Materials with Long-range Spin Interactions

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、実験では明らかにしにくい内部の磁区構造などを調べることに對して有用性が高い。

ここでは、局所磁化を表すスピン変数のベクトル性を取り入れたハイゼンベルグ模型に対するランダウ＝リフシッツ方程式を用いたシミュレーションを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 (rkky lle) を並列化し、高速化した。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もできるという特徴がある。また、双極子相互作用はすべての磁性体に存在し、秩序状態に対して重要になることがある。これら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 3 次元的な形状などを調べている。

#### (2) 利用内容・結果:

長距離スピン間相互作用を含むハイゼンベルグ模型について、ランダウ＝リフシッツ方程式を数値的に解くプログラムを高速化することで、3 次元系やランダムネスを含むシステムのシミュレーションが可能になったので、2 次元系における磁気スキルミオンなどのトポロジカルな磁気バブルや厚みを持った 3 次元系における磁気スキルミオンを含む磁区構造について、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、様々な秩序状態が現れる。

図 1 は、3 層からなる系の中

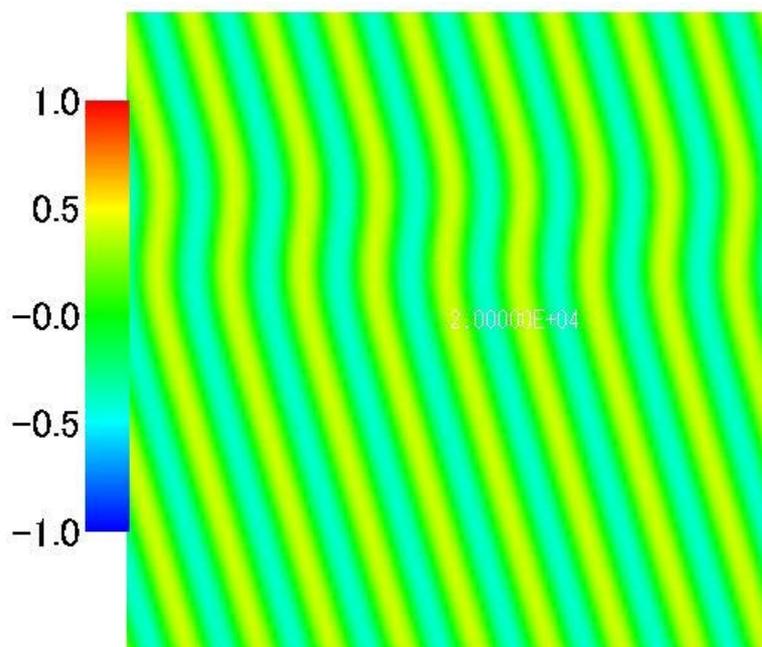


図 1 3 層からなる系の中層のスピンの配置の例。色凡例は面直方向の磁化の成分の値を表す。面直方向のストライプ構造を見ることができる。面直方向の磁化は飽和してはなくて、面内強磁性も共存している。

層のスピンの配置の例を示している。面直方向のストライプ構造を見ることができる。面直方向の磁化は飽和してなくて、面内強磁性も共存している。

図 2 は、17 層からなる系におけるスキルミオンストリングにおいて、ヘリシティーチェンジが見られる例である。左から最下層、中間層、最上層におけるスキルミオンストリングのスピンの向きを表して、それぞれ、反時計回り、ネール型、時計回りというように、ストリング内でヘリシティーチェンジが見られる。

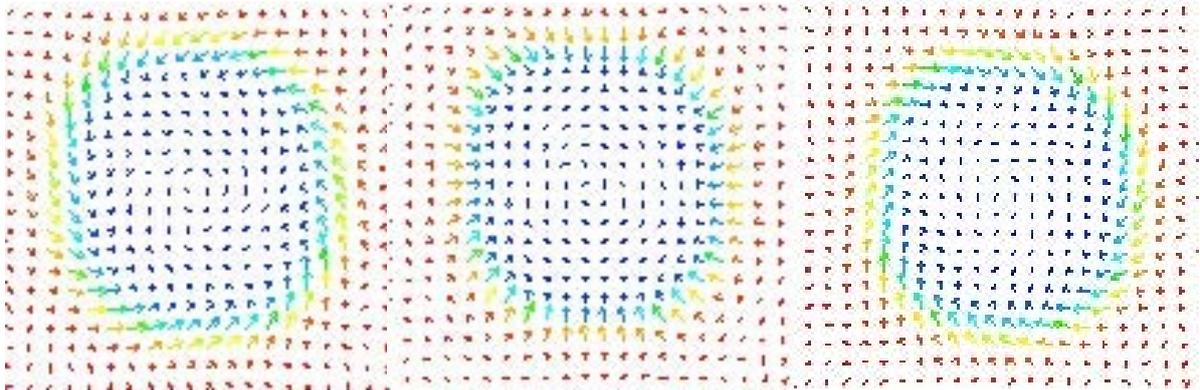


図 2 17 層からなる系におけるスキルミオンストリングにおいて、ヘリシティーチェンジが見られる例。左から最下層、中間層、最上層におけるスキルミオンストリングのスピンの向きを表して、それぞれ、反時計回り、ネール型、時計回りというように、ストリング内でヘリシティーチェンジが見られる。

### (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 次元強磁性体における磁気スキルミオン”、日本物理学会 2019 年秋季大会、岐阜、2019.
- 2) 横田光史、“双極子相互作用を含む強磁性薄膜の基底状態”、日本物理学会第 75 回年次大会、名古屋、2020.
- 3) T. Yokota, “Various Topological Spin Textures in a two-Dimensional Heisenberg Ferromagnet with Dipole-Dipole Interactions”, Journal of the Physical Society of Japan, Vol.89, 2020, pp.014706\_1 - 014706\_6.

### (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、長距離相互作用である RKKY 相互作用や双極子相互作用するランダム希釈系、表面の存在を含む 3 次元系では計算時間が多くかかり、また、多数の計算例が必要となる。これらの計算に対して、大型計算機システムの利用を継続していきたい。

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

### 5.6.1 MCNP6 による HTTR 炉心の 3 次元中性子束分布計算

#### Calculation of 3D Neutron Flux Distribution in the HTTR Core using MCNP6

Hai Quan Ho、石塚 悦男

HTTR 技術課

#### (1) 利用目的:

Calculation of detailed neutron flux distribution in a nuclear reactor is important for understanding:

- ① neutronic behavior of fuel, control rod, burnable poison,
- ② estimating detailed power distribution,
- ③ core optimization and safety analysis.

The purpose of this study is to show the detailed neutron flux distribution of the HTTR using a Monte-Carlo MCNP code with FMESH tally.

#### (2) 利用内容・結果:

##### (2.1) Methodology

The HTTR is a prismatic type of HTGR, containing 30 fuel columns with 5 stacking fuel blocks per each column. The fuel block is a graphite hexagonal block, with 36 cm in width across and 58 cm in height. There are 31 or 33 fuel rods in each fuel block, in which the average enrichment of uranium is about 6wt%. The HTTR also contains 16 columns for control rod guide blocks, 12 for replaceable reflector blocks, and three for irradiation test blocks. The whole core of HTTR was simulated with as much detail

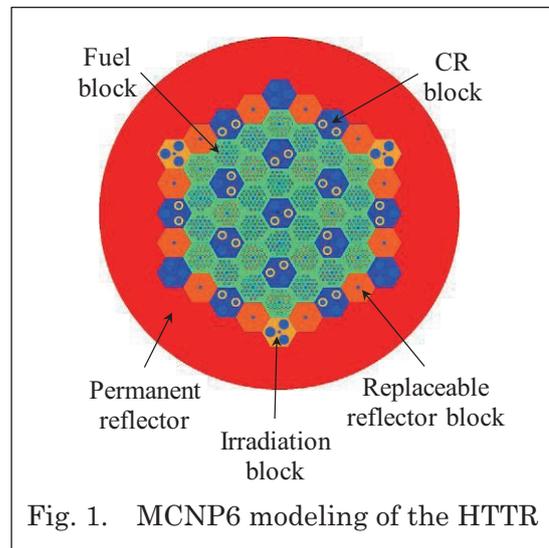


Fig. 1. MCNP6 modeling of the HTTR

as feasibly possible. The MCNP6 modelling of the HTTR is shown in Fig. 1.

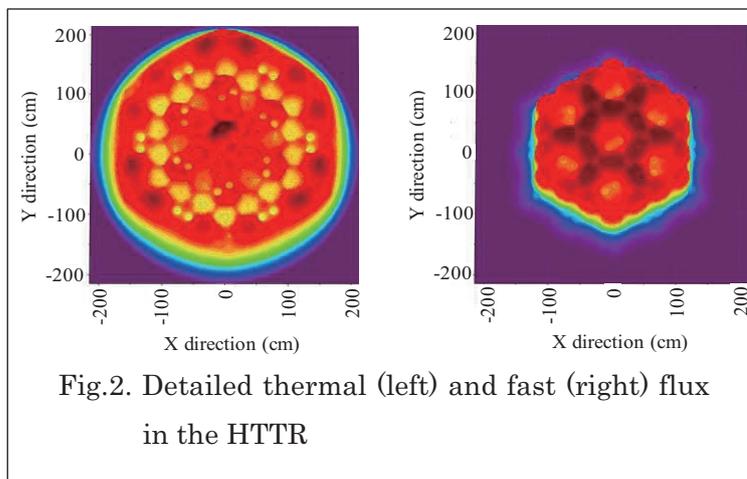
MCNP6 provides the FMESH tally, which allows the user to get the tallies in a very fine mesh. This study used the mesh tallies with dimensions of  $430 \times 430 \times 10$  in x, y and z directions, respectively. The tallies were divided into two energy bins, thermal and fast, using an energy threshold of 2.38 eV. The KCODE option was used for neutronic and criticality calculation.

In this study, the number of neutron histories per cycle and the number of active cycles were 20,000 and 1000 (excluding 50 inactive cycles), respectively, to achieve a small standard deviation in keff. As a result, the neutron flux could be achieved with a relative error of about 1%.

## (2.2) Results

The 3D thermal and fast neutron flux of the HTTR at normal operation are shown in Fig. 2.

It can be seen in Fig. 2 that the thermal flux is highest at the center of the core, followed by at the replaceable blocks. The thermal flux at the fuel



rods is not so high due to less moderation here. According to Fig. 2, the fast neutron flux is only significant in the fuel region. It decreases remarkably at the reflector region and permanent reflector region because of the good moderation of graphite moderator.

In conclusion, this study calculated and constructed the 3D thermal/fast neutron flux for the HTTR using MCNP6 code. The flux could be obtained in detail even for every fuel rod. This result is useful for understanding the neutronic behavior as well as for future core optimization and safety analysis of the HTTR.

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Hai Quan Ho, N. Fujimoto, S. Hamamoto, T. Ishii, S. Nagasumi, E. Ishitsuka, “Calculation of 3D neutron flux distribution in the HTTR using MCNP6”, In: AESJ 2019 Fall Meeting, Toyama, Japan, September 2019.
- 2) Hai Quan Ho , Y. Honda , S. Hamamoto , T. Ishii , S Takada , N. Fujimoto, E. Ishitsuka, “Promising neutron irradiation application at the high temperature engineering test reactor”, Journal of Nuclear Engineering and Radiation Science, Vol.6, Issue 2, 2020, p p.021902\_1-021902\_6, DOI: <https://doi.org/10.1115/1.4044529>.
- 3) E. Ishitsuka, K. Matsunaka, H. Ishida, Hai Quan Ho, T. Ishii, S. Hamamoto, K. Takamatsu, I. Kenzhina, Y. Chikhray, A. Kondo, N. Takaki, N. Fujimoto, “Report of summer holiday practical training 2018; Feasibility study on nuclear battery using HTTR core; Feasibility study for nuclear design”, JAEA-Technology 2019-008, 2019, 12p., (Japanese).

## (4) 今後の利用予定:

Future study will develop a new utility tool coupled with MVP-BURN code to automatically seek the critical control rod position of the HTTR. By using the new tool, the determination of control rod position becomes simpler, the handling time is also reduced.

## 5.7 高速炉サイクル研究開発センター

### Fast Reactor Cycle System Research and Development Center

#### 5.7.1 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

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

#### (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。本年度は、非構造格子用 SERAPHIM コードの妥当性確認実績の拡充を目的として、伝熱管群の存在する体系での Na-水反応試験を解析した。さらに、安全審査用簡易解析ツールの一つである 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継続実施し、前年度から解析条件を拡充した。



図 1 反応ジェット、隣接管の損傷、及び破損伝播

(2) 利用内容・結果:

非構造格子用 SERAPHIM コードの計算安定性や妥当性を確認するため、伝熱管破損時の液体 Na 中水蒸気噴出を模擬した SWAT-1R 試験を対象に解析を実施した。なお、前年度までの検討で得た計算安定化に関する知見を活用し、タイムステップ、境界条件の取り扱い、メッシュ形状等を調整して解析を実施した。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。

図 3(a)に示す通り、注水孔の上方で不足膨張により音速を超える領域が現れている。また、注水孔の上方では水蒸気が主として存在する一方、それより上方には化学反応生成物の水素や水酸化ナトリウム (NaOH) が存在している。また、図 3(b)は解析で得られた温度分布を試験結果と比較したものであり (実験結果の赤点は熱電対の測定点)、解析結果の高温領域は実験結果よりも広く分布している。実験では破損孔から離れた低流速域で Na 液膜が形成され、伝熱管表面の熱電対の一部は液膜温度を計測していることが差異の原因の一つであると考えられる。一方、破損孔に近い伝熱管 A, B の周囲は高流速域であり熱電対はおおむね気相温度を計測しているものと考えられる。伝熱管 A, B の周囲では、実験、解析ともに最高温度まで達し、その温度は同程度であることを確認した。

安全審査用解析ツールの一つである LEAP-III コードの整備として、低計算コストで Na 側の温度分布を評価する解析モデルを開発中である。本モデルでは Lagrange 粒子により反応ジェット挙動を評価する。上記の非構造格子用 SERAPHIM コードにより、複数の条件で予備的な解析を実施し、LEAP-III コードのモデルパラメータ最適化検討及び検証比較に資する解析結果を得た。

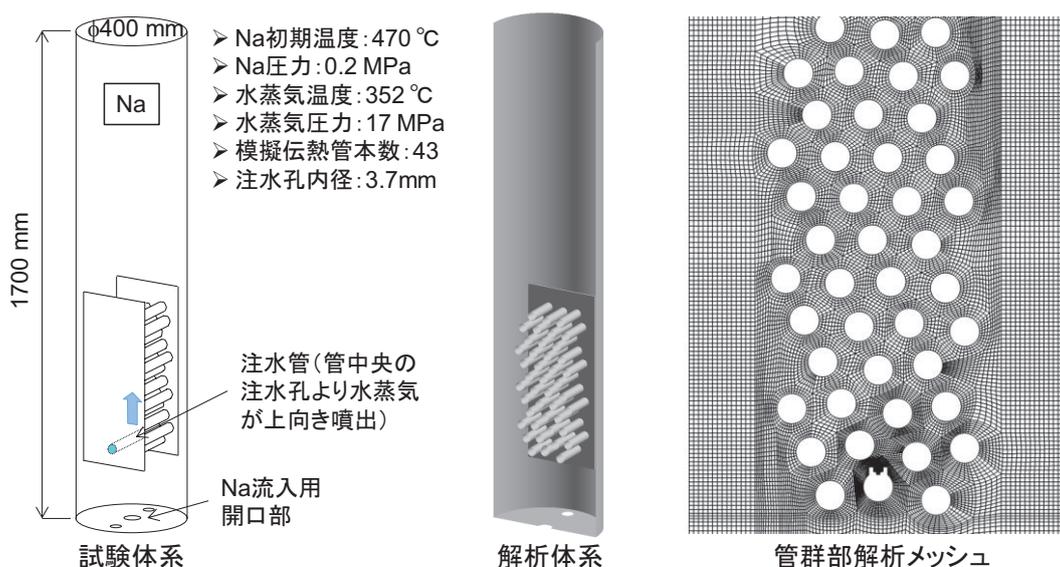
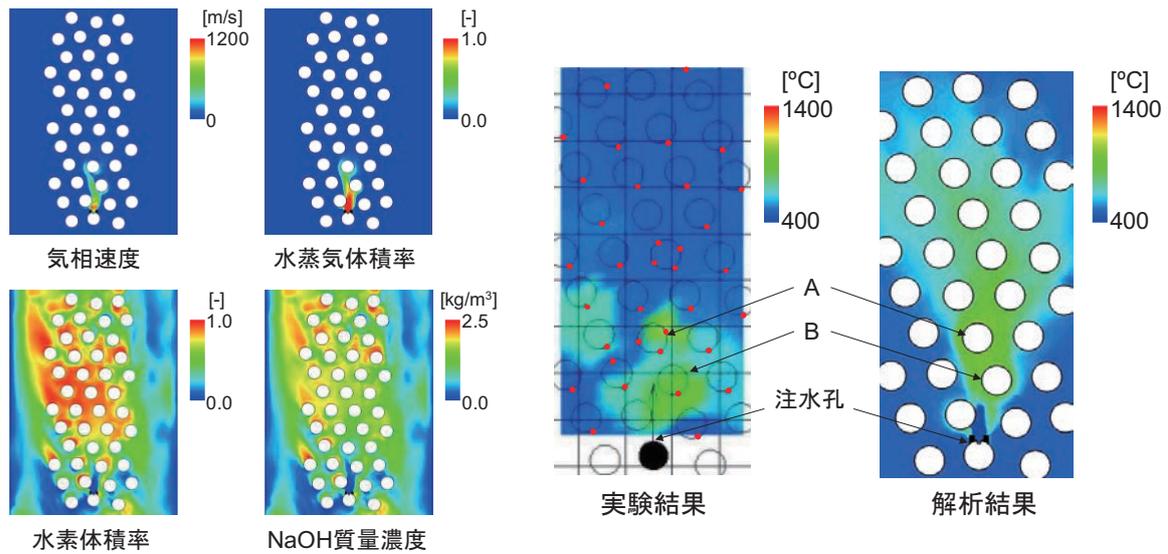


図 2 解析対象、解析体系及び解析メッシュ



(a) 諸量の分布

(b) 温度分布の比較

図3 解析結果

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) A. Uchibori, H. Yanagisawa, T. Takata, J. Li, S. Jang, “Advancement of Elemental Analysis Model in LEAP-III Code for Tube Failure Propagation under Sodium-water Reaction Accident”, 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27), Tsukuba, Japan, 2019.
- 2) A. Uchibori, H. Yanagisawa, T. Takata, J. Li, S. Jang, “Advancement of Elemental Analysis Model in LEAP-III Code for Tube Failure Propagation under Sodium-water Reaction Accident”, Mechanical Engineering Journal, Vol.7, No.3, 2020, pp.19-00548\_1-19-00548\_11.
- 3) 内堀昭寛、柳沢秀樹、高田孝、大島宏之、“伝熱管破損伝播事象に対する数値解析コード LEAP-III の開発”、第 24 回動力・エネルギー技術シンポジウム、東京、2019 年 6 月。
- 4) 内堀昭寛、柳沢秀樹、高田孝、大島宏之、“伝熱管破損伝播事象に対する数値解析コード LEAP-III の開発”、機械学会論文集、Vol.86, No.883, 2020, pp.19-00353\_1-19-00353\_6.
- 5) A. Uchibori, Y. Shiina, A. Watanabe, T. Takata, “Application of Unstructured Mesh-based Sodium-water Reaction Analysis Code SERAPHIM”, Proceedings of 18th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-18), Portland, U.S.A., Aug. 2019, pp.5315-5324, USB Flash Drive.

**(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。

## 5.7.2 高速炉静的機器のクリープ疲労損傷に対する信頼性評価

### Structural Reliability Evaluation of Fast Reactor Static Components Against Fatigue-Creep Interaction Damage

高屋 茂

ナレッジ統合グループ

#### (1) 利用目的:

ナトリウム冷却高速炉の特徴をより生かした合理的な構造設計を実現するために、システム化規格概念が提案されている。同概念では、信頼性（1 から破損確率を引いた値）を指標として予め機器に対する目標値を設定し、当該目標値を達成するようにプラントの特徴を考慮して、材料強度や設計評価手法、検査等の関連する技術項目に関する裕度を配分することにより、関連規格基準類の合理化と、安全性と経済性を両立した構造設計を可能とすることを目指している。既に、米国機械学会圧力容器及び配管規格 Section XI の液体金属冷却炉用維持規格の代替規定（Code Case N-875）の開発に同概念が採用されており、今後の発展も期待されている。一方、システム化規格概念の適用にあたっては、信頼性評価が重要となるが、ナトリウム冷却高速炉の静的機器に対する信頼性評価コードはまだ十分に整備されているとは言えない。このため、当グループでは、ナトリウム冷却高速炉の代表的な損傷メカニズムであるクリープ疲労損傷を対象とした信頼性評価コード REAL-P の開発を進めている。開発コードの検証を目的として、別途独立に開発された信頼性評価コードとの比較を行うために、炉心上部機構を対象とした信頼性評価を実施した。

#### (2) 利用内容・結果:

REAL-P を用いて、ナトリウム冷却高速炉の炉心上部機構を対象とした、クリープ疲労損傷による亀裂発生確率及び亀裂進展確率を評価した。亀裂発生及び亀裂進展に関する解析手順は、日本機械学会 発電用原子力設備規格 高速炉機器の信頼性評価ガイドラインに準拠した。亀裂進展解析については、初期亀裂として深さ 1 mm の全周亀裂を仮定した。各確率は、一様乱数を用いたモンテカルロシミュレーションにより求めた。主な評価条件を表 1、2 に示す。応力については、亀裂発生確率及び亀裂進展確率を高くして、コード間の比較が容易になるように、実際の機器よりも意図的に高く設定していることに注意が必要である。各確率変数の信頼性評価結果への影響を確認するために、また、コード間で結果に差が生じた場合の要因分析に役立てるために、表 2 に示した全ての変数を確率変数とするケース（ケース 1）、応力に関する変数  $\chi$  のみを確率変数として、その他は確定値としたケース（ケース 2）、主に亀裂発生確率に寄与する材料特性に関する変数のみを確率変数としたケース（ケース 3）及び亀裂進展評価式の係数のみを確率変数としたケース（ケース 4）の合計 4 ケースを実施した。また、試行サンプル数は、いずれの場合も  $10^4$  とした。

亀裂発生確率に関する評価結果（亀裂進展評価式の係数のみを確率変数としたケース 4 を除く）を図 1 に示す。応力の評価条件を高く設定していることから、約 8.4 年で亀裂発生の累積確率が 50% に至っている。ケース 2 と 3 では、累積亀裂発生確率が高い範囲で差が見られた。ケ

ース 2 については、確率変数が単一であり、亀裂発生確率分布を解析的に評価可能であるため、累積確率が 5、25、50、75 及び 95% の評価値を合わせてプロットした。解析評価値は、REAL-P の評価値とよく一致していることがわかる。

亀裂進展確率に関する評価結果（30 年後の亀裂進展量の累積確率分布）を図 2 に示す。累積確率が 50% の 30 年後の亀裂進展量は、初期亀裂深さが 1 mm であるのに対し、約  $8.8 \times 10^{-5}$  mm と僅かである。ケース 2 から 4 の累積確率分布に大きな差はなかった。ケース 2 については、図 1 と同様、解析評価値を合わせてプロットしたが、REAL-P の評価値とよく一致しており、REAL-P が意図した通りの解析を実施していることがわかる。

これらの評価結果については、(株) テプコシステムズが開発した GENPEP との比較に供され、クリープ緩和計算における時間刻み等の違いの影響で、評価結果に数%程度の差が認められるものの、いずれのケースについても概ね累積確率分布は一致することが示された。

表 1 評価パラメータ

パラメータ	値	
材料	304SS	
外径 (mm)	1875	
板厚 (mm)	60	
定格運転時の温度 (°C)	530	
冷温停止時の温度(°C)	200	
高温使用時間 (h)	210000	
ピーク熱ひずみ評価用の温度範囲 (°C)	5	
長期一次応力 (MPa)	1	
応力強さ範囲 (MPa)	350	
亀裂に垂直方向 の応力範囲 (MPa)	一次膜応力	0
	一次曲げ応力	0
	二次膜応力	0
	二次曲げ応力	175
シェイクダウン範囲 (MPa)	215	
ひずみ速度 (mm/mm/s)	$1 \times 10^{-8}$	
30 年での運転回数	460	

表 2 確率変数

確率変数	分布型	中央値	対数標準偏差
熱応力増倍係数, $\chi$ (-)	対数正規	1.00	0.078
クリープ破断時間低減係数, $\alpha_R$ (-)	対数正規	1.00	0.560
クリープひずみ増倍係数, $\alpha_c$ (-)	対数正規	1.00	0.800
疲労寿命低減係数, $\alpha_f$ (-)	対数正規	0.10	0.420
クリープ亀裂進展評価式の係数, $C_c$ ( $\text{mm}^{m_c+1} \cdot \text{h}^{m_c-1} / \text{N}^{m_c}$ )	対数正規	$1.59 \times 10^{-2}$	0.422
疲労亀裂進展評価式の係数, $C_f$ ( $\text{mm}^{m_f+1} / \text{N}^{m_f}$ )	対数正規	$6.34 \times 10^{-5}$	0.422

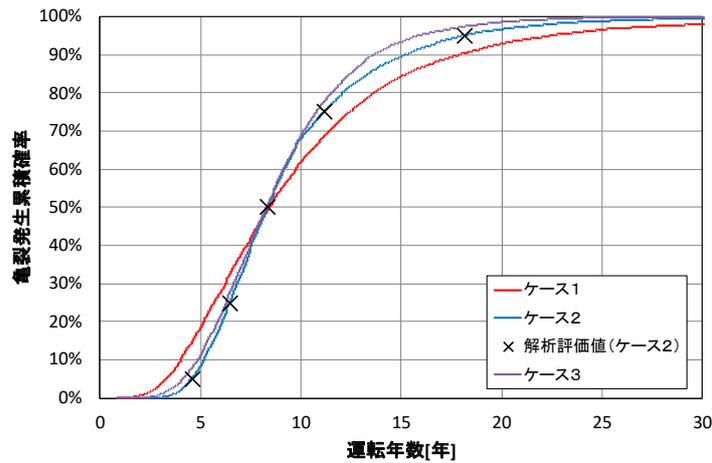


図 1 亀裂発生累積確率分布

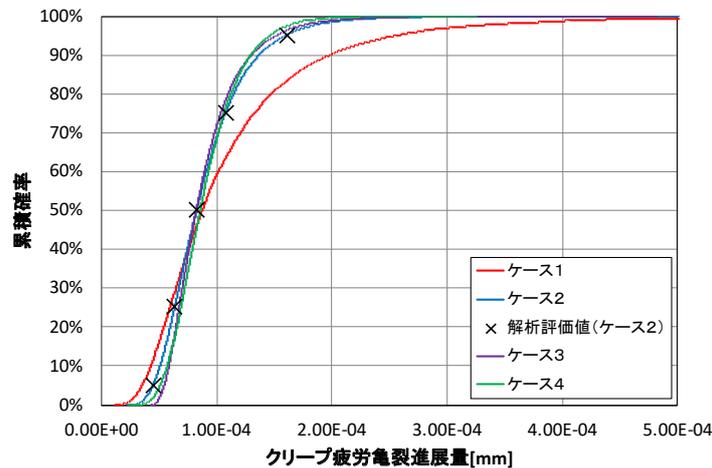


図 2 亀裂進展量累積確率分布

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) S. Takaya, N. Sasaki, T. Okamoto, H. Machida, “Verification Benchmark Analysis of Structural Reliability Evaluation Codes for Fast Reactor Components”, E-Journal of Advanced Maintenance, Vol. 11, No. 4, 2020, pp.124-131, <http://www.jsm.or.jp/ejam/Vol.11No.4/AA/AA165/AA165.pdf>.

**(4) 今後の利用予定:**

今回は、炉心上部機構を対象とした評価を実施したが、今後も、評価対象機器や荷重条件等を変更しながら、高速炉機器の信頼性評価を継続し、開発コード REAL-P の検証に役立てる予定である。

### 5.7.3 SPIRAL コードによる低流量条件下における実規模燃料集合体内熱流動解析

#### Thermal-Hydraulic Analysis of Full-Scale Fuel Assembly under Low Flow Rate Condition by SPIRAL Code

吉川 龍志、菊地 紀宏、田中 正暁、吉廣 保<sup>+</sup>

グループ：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 高性能計算技術利用推進室

##### (1) 利用目的:

安全性を強化したナトリウム冷却高速炉の概念構築に向け、炉心損傷事故時に熔融燃料の早期流出を促進して炉心再臨界を回避するため、燃料集合体の流路内に菱形状の内部ダクトを有する燃料集合体 (FAIDUS) の採用の他に、自然循環を活用した炉心崩壊熱除去システムの採用が検討されている。自然循環時には、浮力が駆動力となり、燃料集合体内の水平断面温度分布が平坦化するとともに、強制循環時に比べ、炉心通過流量が大幅に低下するため燃料集合体内の最高温度は上昇する可能性がある。このため、自然循環条件を含む低流量条件時の燃料集合体内の温度分布を精度よく評価することが重要となる。特に、FAIDUS の設計成立性を確認する上では、様々なプラント運転条件下での集合体内の温度分布に対する内部ダクトの影響について把握する必要がある。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、ナトリウム冷却大型炉で採用される FAIDUS を対象に自然循環相当条件での解析を行い、内部熱流動挙動の把握を目的としている。

令和元年度は、SPIRAL コードの非対称圧力方程式に対して各種解法を適用しその収束性能調査を行うことで高速化を図るとともに、FAIDUS の低流量条件下における解析を実施して流速及び温度分布特性を明かにするとともに、実施済みの高流量条件時の解析結果との比較から流速及び温度分布特性の違いを分析することとした。実規模燃料集合体の解析には要素数が多く、低流量条件下では現象の進展に長時間を要することから、高速 CPU による大規模・長時間（多ステップ）の並列計算が必要であり、大型計算機 (ICE X) の利用が必須である。

##### (2) 利用内容・結果:

まず、プログラム高速化・並列化作業として、SPIRAL コードの非対称圧力方程式解法について双共役勾配安定化法 (BiCGSTAB 法)、一般化積型双共役勾配法 (GPBiCG 法)、代数的多重格子法 (AMG 法) 等の各種解法を適用しその収束性能調査を実施した。汎用のライブラリの「反復解法ライブラリ Lis」と「代数的多重格子法ライブラリ AMGS」の組み込みが行われ、様々な前処理と行列解法の組合せが検証された。AMGS による AMG 前処理と CG 法による組合せが収束性能を大幅に改善した実例として表 1 に示す。

また、大規模解析として、低流量条件下における FAIDUS の熱流動解析を実施した。図 1 に解析体系と要素分割を示す。解析対象は内部ダクト型 255 本燃料ピンの集合体として、燃料ピン軸方向に対しては、燃料コア長 1.000 m を包含できる 1.844 m (ワイヤーピッチ 9 巻き分の長さ) を解析対象とした。図 1 に示すようにラッパー管頂角部 1 箇所内部ダクトを設置した。SPIRAL での解析で使用した解析モデルの要素総数は約 4,600 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  $10^{-4}$  秒で 300 秒までの解析を実施した。境界条件は、冷却材流

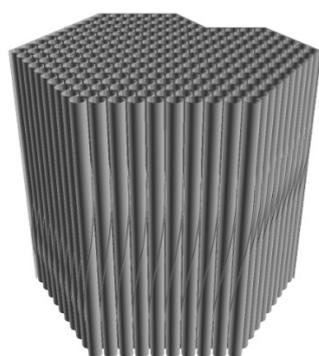
入温度を 395℃として、自然循環時を想定して高流量条件の約 3%となる冷却材質量流量 ( $M = 1.026 \text{ kg/s}$ ) 及び集合体総発熱量 ( $Q = 0.249 \text{ MW}$ ) を設定した。入口境界にはワイヤーピッチ 1 巻き分下流側断面との間で周期境界条件を適用した流速分布を、出口境界はワイヤーピッチ 1 巻き分上流側断面との間で周期境界条件を適用した圧力分布をそれぞれ与えている。壁境界は Non-Slip 条件とした上で低 Re 数効果を加味した壁関数を適用した。また、乱流モデルとして、層流から乱流領域まで伝熱流動特性を良好に再現できる Hybrid 型  $k-\epsilon k\theta-\epsilon\theta$  モデルを採用した<sup>[1]</sup>。

図 2 に低流量条件での燃料コア上端と下端の水平断面におけるサブチャンネル平均軸方向流速分布の比較、及び低流量と高流量条件でコア上端サブチャンネル平均温度分布の比較を示す。流速に関して、低流量条件では浮力の効果により、燃料コア上端において冷却材温度が高い集合体中心側の流速が上昇して、相対的にラッパー管側の流速が低下する結果となる。温度に関して、集合体中心側の流速が上昇することにより集合体径方向の温度勾配は緩和され、高流量条件と比較して、集合体発熱量対流量比を一定にした場合に最高温度は低下して平坦な分布となる結果が得られた。

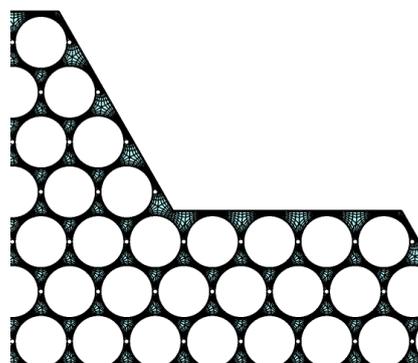
- [1] H. Ohshima, Y. Imai, “Numerical Simulation Method of Thermal-hydraulics in Wire-wrapped Fuel Pin Bundle of Sodium-cooled Fast Reactor”, International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Next Generation Nuclear Systems for Sustainable Development (FR17), Yekaterinburg, Russian Federation, June 26-29, 2017.

表 1 非対称圧力方程式各種解法収束性能の測定結果

	解法	Solve_p+ [sec]	反復回数
Original	ICCG	8.922	8107
	ILU-GPBiCG	88.627	25381
Lis	SSOR-CG	9.066	7965
	ILU(0)-CG	8.753	4306
	SSOR-GPBiCG	90.419	30571
	ILU(0)-GPBiCG	33.947	7643
	AMG-CG	620.051	114605
AMGS	AMG-CG(パラメータ未調整)	146.007	28056
	AMG-CC(パラメータ調整済)	3.323	368

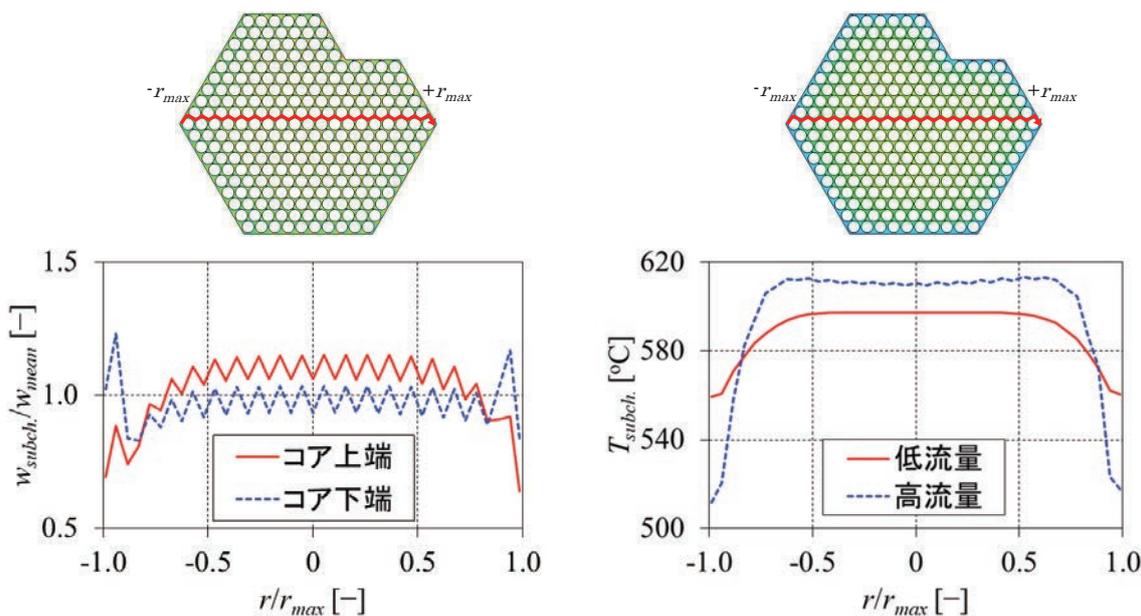


(a) 255 本ピン集合体 (ワイヤー1 巻き)



(b) 水平断面要素分割 (一部)

図 1 解析体系と要素分割



サブチャンネル平均軸方向流速： $w_{subch.}$

サブチャンネル平均冷却材温度： $T_{subch.}$

断面平均軸方向流速： $w_{mean}$

(a) サブチャンネル平均軸方向流速比較  
(低流量条件でのコア上端と下端)

(b) コア上端サブチャンネル平均温度比較  
(低流量と高流量)

図2 解析結果

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等)：**

- 1) R. Yoshikawa, Y. Imai, N. Kikuchi, M. Tanaka, A. Gerschenfeld, “Validation Study of Finite Element Thermal-hydraulics Analysis Code SPIRAL to a Large-scale Wire-wrapped Fuel Assembly at Low Flow Rate Condition”, Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA+MC2020), Japan, 2020, No.3276378, pp.73-80.
- 2) 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”, 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27), Tsukuba, Japan, 2019, ICONE27-2293 (Presentation Only).

**(4) 今後の利用予定：**

燃料集合体熱流動詳細解析コード SPIRAL の妥当性確認と、燃料集合体の径方向熱移行が作用する場合の熱流動現象の把握を目的として、集合体外側にナトリウム流路を有するナトリウム試験体系 (GR91) での集合体外側から除熱される場合の集合体内熱流動解析を実施する予定である。また、今後も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。

#### 5.7.4 連続エネルギーモンテカルロコード MVP を用いたナトリウム冷却高速炉 MOX 燃料炉心の核特性の解析

##### Calculation of Core Characteristics for Sodium-Cooled Fast Reactor MOX Fuel Core with the Continuous Energy Monte-Carlo Code, MVP

谷中 裕、毛利 哲也、滝野 一夫、菰田 宏、曾我 彰  
炉心解析評価グループ

#### (1) 利用目的:

燃料集合体や制御棒集合体といった炉心構成要素を忠実に模擬した全炉心の連続エネルギーモンテカルロ計算は、膨大な計算時間を要するが、近似がほとんどない計算手法であることから、精緻な計算結果を得ることができるとともに、近似を含む手法である決定論的手法の参照解としても期待できる。

本研究では、国際原子力機関の下で実施されている共同研究プロジェクト「中国高速実験炉起動試験の炉物理ベンチマーク」の一環として実施した炉心核特性解析において、決定論的手法の参照解を得るために、大型計算機システムを利用した連続エネルギーモンテカルロコード MVP による計算を実施した。

#### (2) 利用内容・結果:

燃料集合体内の燃料ピン及びラップ管、制御棒集合体内の吸収体ピン等を忠実に模擬した全炉心体系を構築し、各炉心核特性（臨界性、制御棒反応度価値、ナトリウムボイド反応度等）について、MVP コードにて実効増倍率の統計誤差が 0.001% 以下となるまで計算を実施した。なお、核データライブラリは JENDL-4.0 を使用した。図 1 に炉心配置図を、図 2 に MVP コードでの計算体系の一例を示す。

MVP コードにより得られた結果と、決定論的解析手法で得られた計算結果の比較を実施したところ、決定論的解析手法で得られた計算結果と矛盾は見られなかった。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

今後、国際会議等を通じてこれらの結果を随時発信していく予定である。

#### (4) 今後の利用予定:

他の炉心核特性や、核データライブラリを変更した炉心核特性解析を実施する予定であるため、次年度以降も大型計算機システムの利用が不可欠である。

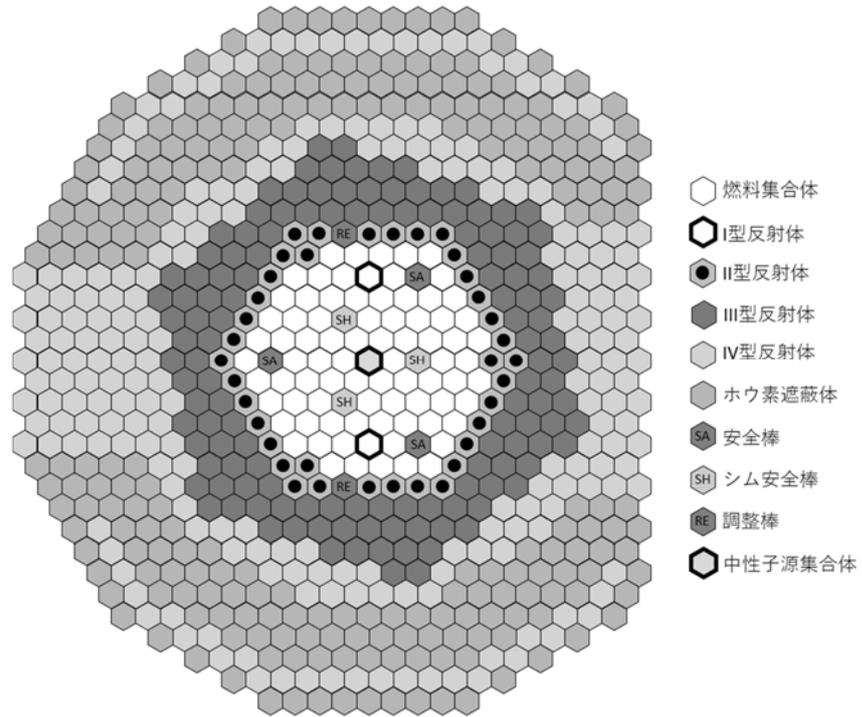


図1 炉心配置図

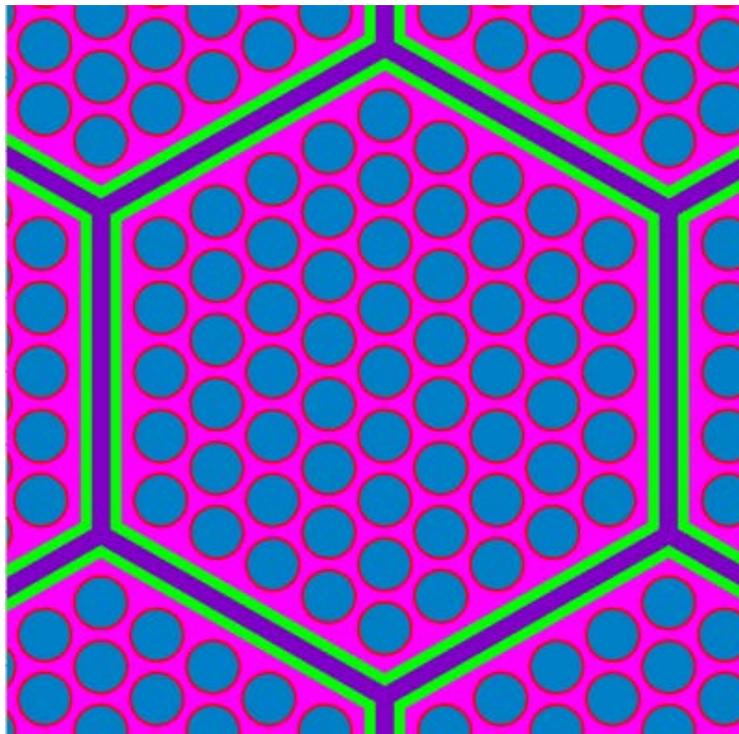


図2 MVPでの計算体系の例（燃料集合体を拡大）

## 5.7.5 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

### Numerical Analysis on Thermal Stratification of Sodium in Rectangular Enclosure with Conjugate Heat Transfer

江連 俊樹、田中 正暁  
プラントシステム解析評価グループ

#### (1) 利用目的:

ナトリウム (Na) 冷却高速炉において考慮すべき重要な熱流動現象の一つに、プレナム部での温度成層化現象が挙げられる。Na 冷却高速炉では、炉停止後の原子炉容器内では炉心部からの低温ナトリウムが上部プレナム部に流入する際に下部に低温領域、上部に高温領域が形成される温度成層化が発生し、成層界面上下に 100℃程度の温度差を生じる可能性がある。このため、炉壁等構造材の健全性確保の観点から、成層界面での温度差や温度勾配、温度揺らぎ等を評価することが重要となる。原子力機構では、本現象を数値解析に基づき評価することを目指した手法構築を進めており、主に原子炉トリップ後の温度成層化を対象にもんじゅ等の実炉や Na 試験を用いた妥当性確認を進めている。一方で、実炉において炉上部プレナム内に冷却器を直接設置するタイプの崩壊熱除去システムを用いる場合では、容器壁や伝熱管壁など構造物を介してその内外面で熱交換がなされつつ容器側で温度成層が発生する。この評価には、熱交換壁と流体側との共役熱伝達の考慮が必要となる。

本研究では、仏国 CEA で実施された共役熱伝達を伴う矩形容器内 Na 温度成層化試験 (SuperCAVNA 試験) を対象に熱流動解析を実施し、数値解析に基づく評価手法の妥当性確認を行うこととする。

#### (2) 利用内容・結果:

図 1 に本研究で解析対象とした SuperCAVNA 試験体[1]を示す。SuperCAVNA は、矩形容器の底面の一方から Na が流入し、容器内部を循環した後、反対側の底面から流出する体系である。流出側の容器壁面は外部流路と接する加熱壁 (ステンレス材) となっており、試験体内部と加熱壁流路間で熱交換がなされ、試験体内に温度成層界面が形成されることが特徴である。本研究で解析対象とした試験条件は表 1 に示す通りであり、ペクレ数 (Pe) が 16,000、リチャードソン数 (Ri) が 0.6 とした。表 2 に主要な解析条件を示す。使用する解析コードは、コード間の比較を行うことを目的として、原子力機構にて整備を進めてきた汎用单相熱流体解析コード (AQUA) および商用 CFD コード (Fluent) の 2 つを用いた。その上で、外部流路と接する加熱壁での共役熱伝達を考慮した 1,800 秒間の非定常解析を行った。数値解析、離散化および乱流モデルは表 2 に示す通りである。また、加熱壁については、試験体内と加熱壁流路間の共役熱伝達の考慮が必要なことから、熱交換壁内部もメッシュを設定して伝熱計算を行っている。壁面から流体への熱伝達は、設置したメッシュの分解能から試験体側 (容器側) については熱伝導とし、加熱流路側には伝熱相関式 (Subbotin 式) を用いた。

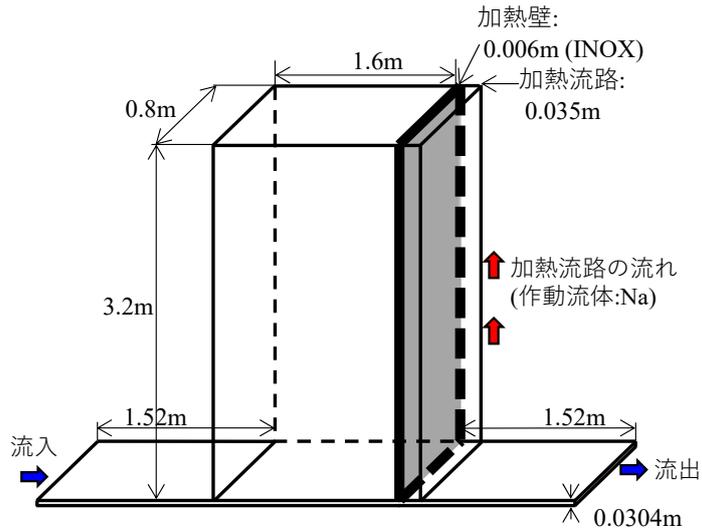


図 1 解析対象 (SuperCAVNA 試験体)

表 1 解析条件 (SuperCAVNA 試験)

流体	Na
構造材	ステンレス (SUS316 相当)
対象とする試験条件	Pe=16,000 Ri=0.6
試験体流入部	速度 : 0.69 m/s
	温度 : 250.0°C
加熱流路入口	速度 : 0.69 m/s
	温度 : 303.1°C

表 2 主要な解析条件

解析コード	AQUA	FLUENT
解析時間	1800 秒 (URANS 解析)	
数値解法	修正 ICE	SIMPLE
離散化手法 (対流項)	運動量方程式	QUICK
	エネルギー方程式	QUICK-FRAM
	乱流に関する各種方程式	UPWIND
乱流モデル	Standard $k-\epsilon$ , RNG $k-\epsilon$	
加熱壁熱伝達	試験体側 : 熱伝導、加熱流路側 : Subbotin 式	

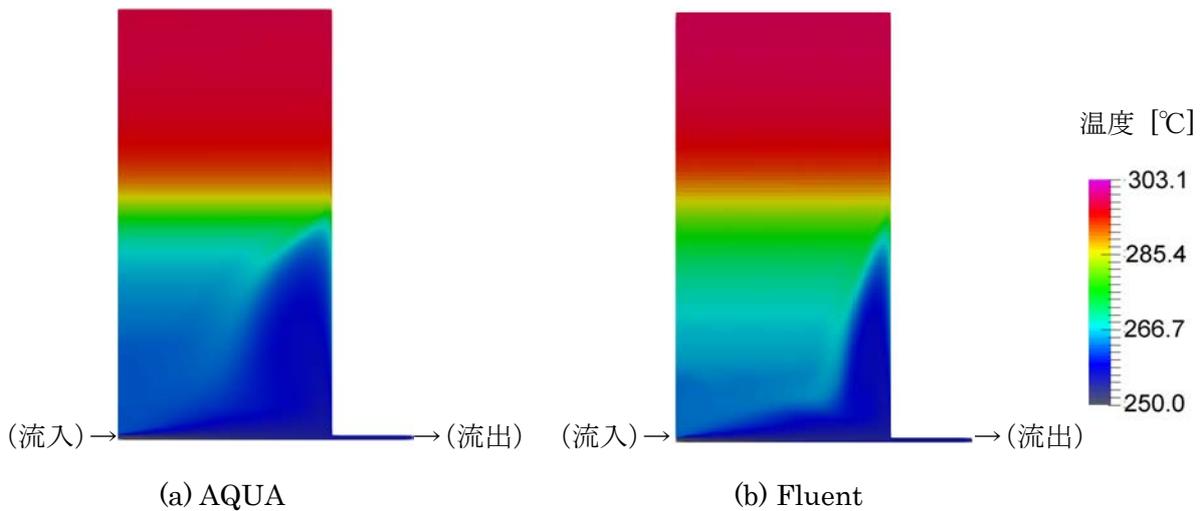


図 2 解析結果の一例（温度分布の比較）

図 2 に解析結果の一例として、解析開始から 1,800 秒後の試験体容器側の瞬時の温度分布を示す。外部流路と伝熱壁については省略している。AQUA、Fluent の両コード共に、試験体の高さ方向の中間部付近を境として、上下方向に温度勾配が見られており、成層界面を良好に再現できていることがわかった。一方で、AQUA による解析結果では、Fluent による解析結果に比べ成層界面下部で温度拡散が大きく、低温領域が広い範囲に分布しており、双方の差異について、現在、検討を進めているところである。

- [1] R. Vidil, D. Grand and F. Leroux, “Interaction of Recirculation and Stable Stratification in a Rectangular Cavity Field with Sodium”, Nuclear Engineering and Design, Vol. 105, 1988, pp.321-332.

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) 江連俊樹、長澤一嘉、田中正暁、“ナトリウム冷却高速炉の温度成層化現象に関する数値解析—共役熱伝達を伴う矩形容器ナトリウム試験を対象とした解析手法の適用性検討—”、日本機械学会 2020 年度年次大会講演論文集、講演番号 S08110、2020、5p.

**(4) 今後の利用予定:**

今後も大型計算機において、Fluent コード等を用いた計算を継続し、今回見られたコード間の解析結果の差異について検討すると共に、温度成層化現象に対する数値解析評価手法の妥当性確認を進めて行く。

## 5.8 敦賀総合研究開発センター Tsuruga Comprehensive Research and Development Center

### 5.8.1 実験データを用いたハルバツハ配列 EMAT の磁束の再現シミュレーション Reconstruction of the Magnetization of Halbach Magnet in EMAT from Experimental Measurements

Mihalache Ovidiu

ナトリウム技術開発グループ

#### (1) 利用目的:

The simulation work is conducted to understand and simulate the In-Service Inspection (ISI) of future Fast Breeder Reactors (FBR) components using a combination of eddy current technique (ECT) with ultrasounds (UT) as in electromagnetic acoustic sensors (EMAT). Higher amplitudes of magnetic flux distributions in EMAT can be obtained using Halbach magnet arrays as shown in Fig. 1. A periodic arrangements of horizontal (H) and vertical (V) block magnets with magnetization oriented perpendicular in each unit block creates a higher magnetic field focused above one surface of Halbach array than a standard periodic permanent magnetic array. However, the performance and accuracy of EMAT signal depends strongly on the performance of the magnet (magnetic field amplitude and uniformity) used to generate ultrasonic waves. Also, the magnetic field of each individual block-magnet is slightly different than the published manufacturer data, resulting in errors in estimating the total magnetic field uniformity and amplitude in Halbach magnet.

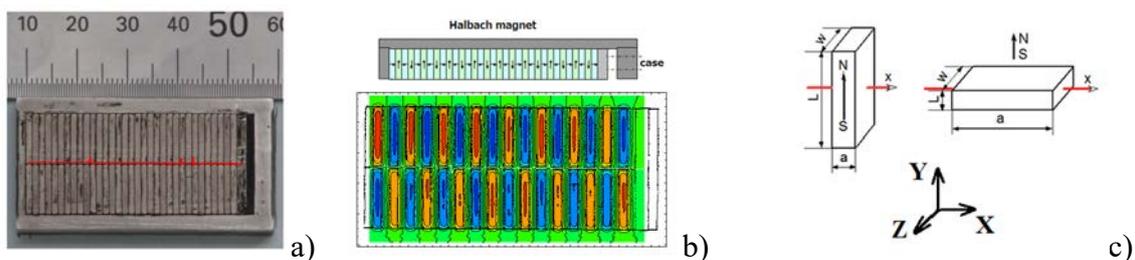


Fig.1. a) Halbach magnet composed of H and V-block magnets in EMAT; b) Distribution of H and V-blocks and magnetic flux density measurement of Halbach magnet; c) Geometry of H and V-block magnets

The present research was focused on reconstruction of magnetization of Halbach magnet in EMAT in order to be able to simulate accurately the magnetic field influence in EMAT sensors. The reconstruction of the magnetization is based on experimental measurements conducted outside of each magnetic block or even all Halbach magnetic structure (after it was assembled). In the algorithm, an iterative procedure starts from an initial magnetization (manufacturer data or zero magnetization) and computes the field (using

theoretical formula based on constant magnetization) to compare with external field measurements. In order to account for the constant magnetization model formula used in the algorithm, each H or V-block magnet is further decomposed in (nx-ny-nz) division blocks (up to 40-40-40). An example of the performance of the reconstructed magnetization  $M_y$  (using ICE-X supercomputer) is presented in Fig. 2 only for one H-block magnet (the error in the external magnetic field computation is near 5% when compared with measurements).

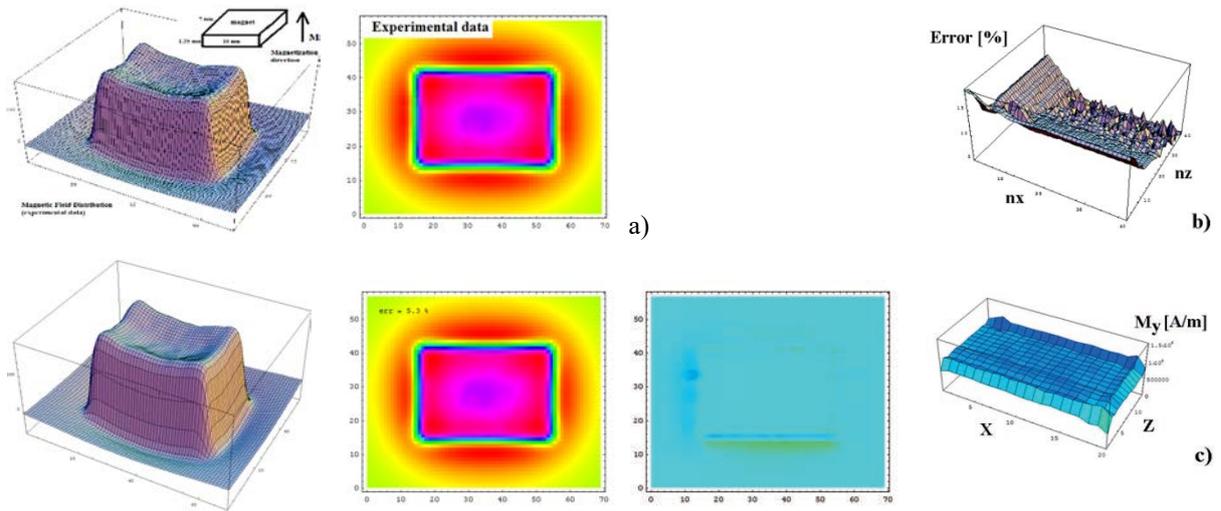


Fig.2. a) 3D plot and contour lines of measurement of magnetic flux distribution above H-block magnet and 3D plot (simulation), contour lines and error (difference to measurements) of magnetic flux distribution above H-block magnet using reconstructed magnetization with a magnet division (nx-ny-nz) of: 40-1-40 ; b) Error; c)  $M_y$  reconstruction

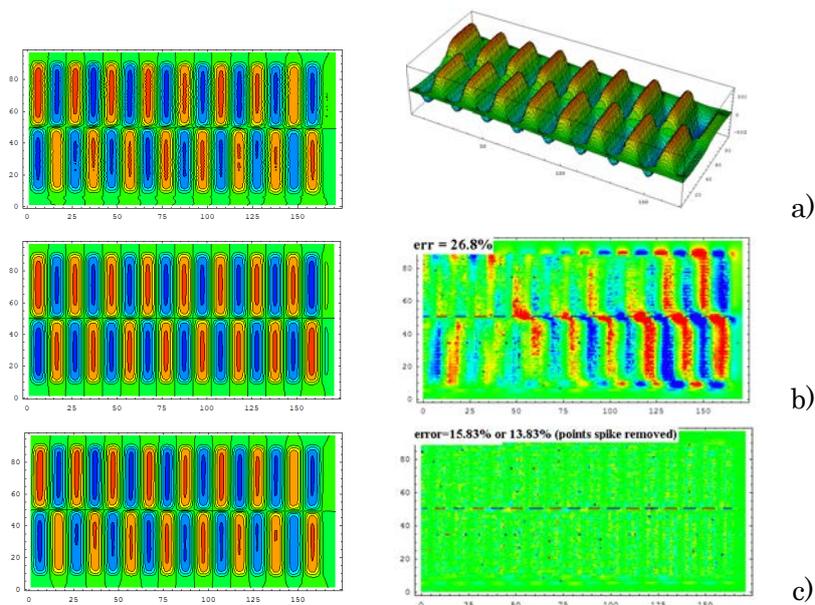


Fig.3. a) Experimental measurements: contour lines and plot of magnetic flux distribution above Halbach magnet (0.45mmlift-off); Reconstructed magnetic field outside of Halbach magnet using b) manufacture data; c) the present algorithm

In the next it was investigated the reconstruction of the magnetization model of Halbach magnet of EMAT, after all H and V-block magnet were assembled (no measurements of each block before assembling), the magnetization is individually reconstructed in each block magnet. The simulations conducted with ICE-X supercomputer enabled a division of up to (40-1-40) of each block magnet (66 unit blocks in Halbach magnet). Fig. 3a shows the external magnetic field measurements and reconstruction using the magnetization model based on either data from manufacturer (Fig 3b) or using the present algorithm (Fig 3c) to determine the right magnetization distribution in each H and V-block magnet.

## (2) 利用内容・結果:

In 2019, the focus was on the developing of a code and benchmarking of the magnetization model for the Halbach magnet. Because the Halbach magnet is composed through a combination on horizontal and vertical magnetic blocks, their magnetization is not uniform resulting in up to 30% difference between simulation models and measurements. Based on experimental measurements outside of individual blocks in Halbach magnet of EMAT, the magnetization model is reconstructed individually for each magnet block and then added in all blocks of Halbach magnet in order to align with measurements. In 2019, the focus was to establish a code that can reconstruct only one component of magnetization (main magnetization component) distributed in the 3D volume of Halbach magnet.

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) O. Mihalache, T. Yamaguchi, "Fast Reconstruction of the Magnetization of a Halbach Magnet in EMAT using Experimental Measurements", *International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics*, vol.64, No.1-4, 2020, pp.905-912.
- 2) T. Yamaguchi, O. Mihalache, "2D Visualization and Optimization of EMAT Signal for Small Defect Detection in Thick Metallic Plates", *International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics*, vol.64, No.1-4, 2020, pp.895-903.

## (4) 今後の利用予定:

In 2020, the research will continue to reconstruct the three components of the magnetization model in Halbach magnet of EMAT. Based on the reconstructed magnetization model of Halbach (using one component), numerical simulations of EMAT will be investigated for focused and far-distance detection/propagation in ISI of metallic structures in FBR.

## 5.9 燃料サイクル設計部 Fuel Cycle Design Department

### 5.9.1 CNWG・先進燃料物性計算科学研究

#### Numerical Study of Physical Properties of Advanced Fuel in CNWG

加藤 正人、町田 昌彦<sup>+</sup>、中村 博樹<sup>+</sup>  
燃料サイクル設計部  
+ システム計算科学センター

##### (1) 利用目的:

日米両政府は、民生用原子力協力に関する二国間委員会の下、日米民生用原子力研究開発ワーキンググループ（CNWG）を発足させた。著者等のグループは、CNWG内の核燃料サイクル研究開発及び廃棄物管理サブワーキンググループに所属し、先進燃料専門家会合を開催し、日米間の研究協力を行ってきた。尚、本研究協力は、5種のタスクに分かれて実施されており、その中には計算科学による協力も含まれている。著者等は、これらのタスクの中で「酸化燃料の基礎物性」と「照射燃料を記述するモデル及びシミュレーション」を担当しており、本大型計算機利用では、前者「酸化燃料の基礎物性」を主たる研究対象とした。

タスク「酸化燃料の基礎物性」に関しては、実験による基礎物性評価の他に計算科学による基礎物性評価が含まれており、実験により得られる基礎物性をミクロな視点から説明することを目標とする。即ち、酸化燃料が示す様々な物理現象の出現機構をミクロなレベルで解明し、その物性を反映し、且つ物性の様々な変化を表現可能とする計算式を導出することにある（得られる妥当な計算式は、酸化燃料の設計、運転時の燃焼効率、シビアアクシデントの評価等、様々な用途に用いられる）。

上記目標を達成するため、具体的には米国ロスアラモス国立研究所のグループが専門とする古典分子動力学と著者等が専門とする第一原理計算を組み合わせ、各々の短所を補うだけでなく、長所を活かす形で研究協力を行っている。これまでに行われた研究協力としては、高温における酸化燃料の比熱の評価において、原子振動からの寄与を古典分子動力学で、電子状態からの寄与を第一原理計算で評価し、各々の成分を足し合わせることで、精密な物性推算に成功した。

その後、平成30年において、ロスアラモス国立研究所で行われた専門家会合では、今後の研究協力として、模擬燃料物質であるフッ化カルシウムの物性値の測定と計算による物性解明及び物性予測を実施することが決められた。尚、フッ化カルシウムを選択した理由は、酸化燃料と同じく、Bredig転移と呼ばれる融点付近の高温状態での比熱の急激な上昇が見られるが、酸化燃料より遥かに低い温度でその転移が起こることから、実験的に観測が容易かつ詳細なデータが取得可能となるからである。従って、得られる詳細なデータと共に、本現象のメカニズムを理解することが主要な目的となる。尚、Bredig転移とは、二酸化ウランを始めとする酸化燃料

で普遍的に発生し、高温での熱物性に劇的な影響を与える現象であることから、燃料の安全性評価のために、その現象の詳細な機構解明が待たれている。

本大型計算機利用申請では、上記フッ化カルシウムの Bredig 転移に焦点を絞り、その現象の発生機構をマイクロなレベルで明らかにする一方、実験から得られた転移に係る観測データを説明することにある。

## (2) 利用内容・結果:

第一原理分子動力学を用いて、 $\text{CaF}_2$  の熱物性値の評価を行なった。シミュレーションの手法としては、VASP コードを用いて、300~2000K の温度に対して等温等圧 (NPT) の分子動力学計算を行い、熱膨張率、エンタルピーや比熱を評価した。この際、システムサイズとしてはユニットセルに対して  $3 \times 3 \times 3$  のスーパーセル (原子数 384 個) の系を用い、タイムステップ 1fs で、平衡に達するまで、およそ 1~4 ps のシミュレーションを行なった。図 1 (左) に格子定数の計算結果と実験値を示した。計算結果は高温領域で若干のずれがあるものの、実験値をよく再現している。また、図 1 (右) に示すように熱膨張率も実験値をほぼ再現した。図 2 にはエンタルピーと比熱の計算結果を示した。比熱はエンタルピーをフィッティングした曲線を微分することで求めた。図 2 (左) の曲線がフィッティング曲線である。図 2 (右) にみられるように 1250K 付近にピークを持つことが分かった。これが Bredig 転移と呼ばれるピークに相当するものであると考えられる。実験で得られるピークは 1400K であるので、実験値より計算値は低い値になった。これは、今回用いた交換相関エネルギー (PBEsol) の選択によるものである可能性があり、より適切な交換相関エネルギーを用いることで改善することが期待される。また、シミュレーション結果において、原子の運動を詳細に調査した結果、温度上昇とともに酸素原子が流動するに伴い、酸素空孔の無秩序化が Bredig 転移と深い関係があるとの結果が得られた。

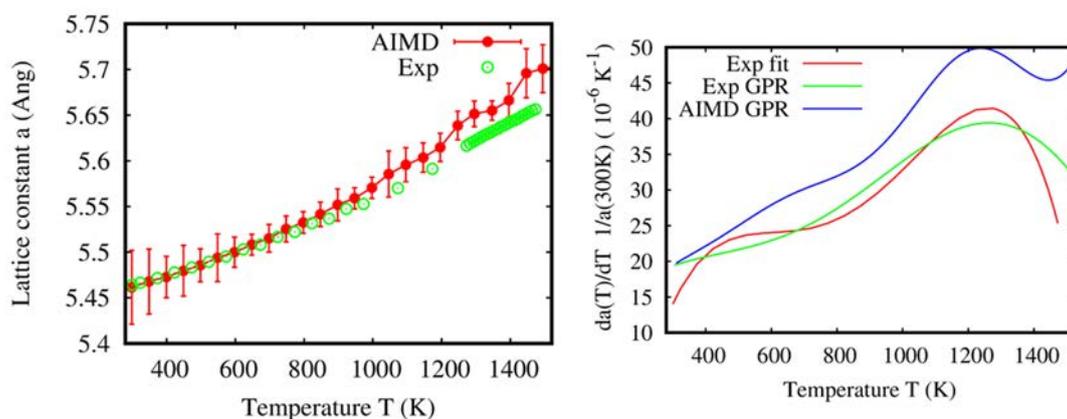


図 1 第一原理分子動力学による  $\text{CaF}_2$  の格子定数 (左図) と熱膨張率 (右図) の温度依存性。EXP は実験結果、AIMD は第一原理分子動力学の結果である。熱膨張率に関しては、格子定数をべき級数 (Exp fit) またはガウス過程回帰 (Exp GPR) で格子定数をフィットし、その微分から求めた。

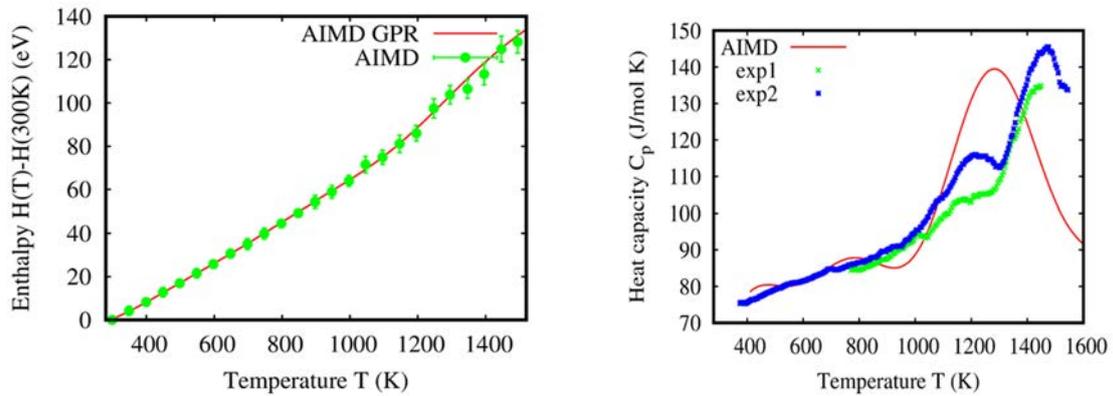


図2 第一原理分子動力学による  $\text{CaF}_2$  のエンタルピー（左図）と比熱（右図）の温度

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

**国際会議**

- 1) R. Tsuchimochi, M. Kato, S. Hirooka, T. Matsumoto, J. White, K. McClellan, “Property measurement of  $\text{CaF}_2$ ” 13th Pacific Rim Conference of Ceramic Societies (PACRIM-13), Ginowan, Japan, October 2019.

**国内会議**

- 2) 加藤 正人、土持 亮太、松本 卓、J. White, K. McClellan, “ $\text{CaF}_2$  の基礎特性の評価, 1 ; 実験的アプローチ”、日本原子力学会 2019 年秋の大会、富山、2019 年 9 月.
- 3) 中村博樹、町田昌彦、加藤正人、“ $\text{CaF}_2$  の基礎特性の評価,2; DFT に基づく高温物性解析”、日本原子力学会 2019 年秋の大会、富山、2019 年 9 月.

**(4) 今後の利用予定:**

今後も本研究を継続していく予定である。特に、第一原理計算の結果を基にした機械学習分子動力学を用いた解析を行い、より詳細な物性計算を行っていく。

## 5.10 炉設計部 Reactor Systems Design Department

### 5.10.1 プルトニウム燃焼高温ガス炉設計の二重非均質による自己遮蔽効果 Self-shielding Effect of Double Heterogeneity for Plutonium Burner HTGR Design

深谷 裕司  
高温ガス炉設計グループ

#### (1) 利用目的:

現在、日本では、約 47t の Pu を所有している。この Pu に対し核不拡散の観点から米国から批判がなされており、原子力委員会もこの事態を重く受け止め、Pu の保有量をこれ以上増やさない方針としている。具体的には、現在、六ヶ所再処理施設の商用稼働が期待されているが、Pu 利用の受け皿が無ければ、稼働の認可が下りても、Pu 増加につながる施設の運転ができないこととなる。そこで、軽水炉 MOX 燃料による Pu 燃焼、いわゆるプルサーマルの本格導入が期待されるが、福島第一原子力発電所事故以来、通常の U 燃料軽水炉ですら、稼働が難しい状況にあり、プルサーマル導入に対するハードルは益々高くなっている。この状況を踏まえ、日本原子力研究開発機構、東京大学、富士電機、原子燃料工業は共同で、プルトニウム燃焼高温ガス炉 CleanBurn の開発を行ってきた。これは、高温ガス炉の高い安全性及び、高い Pu 燃焼能力を利用した、プルトニウム専焼炉である。この燃料では YSZ と呼ばれる非常に科学的に安定な物質でプルトニウムを固化することにより、核拡散抵抗性を高める工夫がなされている。これにより、Pu が YSZ で希釈されることになるが、経験的に、この二重非均質性を緩和させる対応が、余剰反応度を低減させ、より安全に燃焼が可能な炉心設計になることが知られていた。そこで、本研究では、この二重非均質性の緩和が設計性能向上につながる機構論の解明を行うことを目的とする。

#### (2) 利用内容・結果:

本研究では、MOSRA-SRAC コードによる解析を行い、そこで得られた中性子束及び、断面積を利用して厳密摂動論に基づく反応度分解を行い、現象の機構論的解明を行った。MOSRA-SRAC コード自体は、PC でも解析の実施が可能なものであるが、二重非均質体系における燃焼解析機能が整備されておらず、モンテカルロ法に基づく中性子輸送コード MVP の燃焼解析機能を利用した。MVP コードの計算負荷は大きいですが、大型計算機 ICE X の計算能力により実施が可能となった。また、厳密摂動論では、一般的な摂動論と異なり、断面積等の摂動のみでは結果が得られず、摂動後の中性子束も必要とされ、結局、MOSRA-SRAC コードによる解析を多数実施する必要がある。これには、ICE X を用いたバルクジョブ処理機能が有効であり、

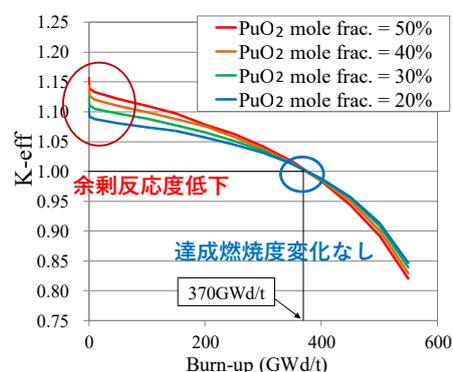


Fig.1 重非均質効果の影響

多数の解析を多くのノードに振り分け、一度に処理することができた。これにより、結果の見通しが良くなり、複雑な機構論的解明を混乱なく実施することが可能となった。

Fig.1 に二重非均質性変更による CleanBurn 炉心の臨界性の影響を示している。モル分率を変化させているが、Fig.2 に示すように、炉心内の Pu インベントリ自身は保存させる。モル分率を下げる場合、粒子 1 個内の Pu インベントリが低下するため、粒子数が増えることとなる。つまり、Fig.1 では、余剰反応度が低下しているが、Pu 自体を減らしているわけではない。しかも、達成燃焼度自体も低下しておらず、安全性のみが向上している。また、設計点によっては、逆に達成燃焼度の増加も期待できるとの報告がある。

臨界方程式は次のように記載できる。

$$L\phi = \frac{1}{k}P\phi, \quad (1)$$

L は欠損演算子、P は生成演算子であり、摂動前後の随伴臨界方程式及び、臨界方程式から、

$$\rho = \frac{\langle \phi^* \left( -\Delta L + \frac{1}{k'} \Delta P \right) \phi' \rangle}{\langle \phi^* P \phi' \rangle}, \quad (2)$$

の関係が近似無しで得られる。これが厳密摂動論と呼ばれる理由である。反応度発生が断面積変化に結びつけられることが分かる。

Fig.3 に BOL におけるモル分率の違いによる反応度を設計に用いられた 30% を基準に評価を行っている。結局、Pu-240 の 1eV における共鳴吸収の自己遮蔽効果の変化のみで、このような大きな反応度変化が発生していることが分かった。Pu-240 の中性子捕獲により、核分裂性核種 Pu-241 が発生するため、BOL における反応度の低下は、EOL においては、緩和され、場合によっては、達成燃焼度増加につながると言える。

そこで、背景断面積に着目したボンダレンコアプローチにより、更なる機構論解明を試みた。Fig.4 に背景断面積と自己遮蔽効果の関係を示す。共鳴ピークに対し中性子束の歪（自己遮蔽効果）が見られるが、背景断面積が大きければ、自己遮蔽効果が小さいことが分かる。これは、次のような関係から理解できる。初めに、注目核種の断面積とそれ以外に分離する。

$$\Sigma_t(E) = N_{iso}(\sigma_{t,iso}(E) + \sigma_0), \quad (3)$$

この、 $\sigma_0$  を背景断面積と呼ぶ。次に、NR 近似から、中性子束は、

$$\phi(E) \propto \frac{W(E)}{\Sigma_t(E)}, \quad (4)$$

同一PuインベントリをPuモル分率と粒子数に振りわける。

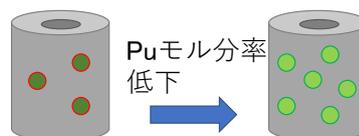


Fig.2 Pu モル分率と燃料粒子数の関係

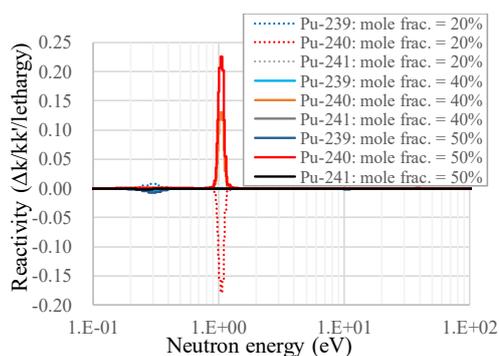


Fig.3 反応度分解の結果

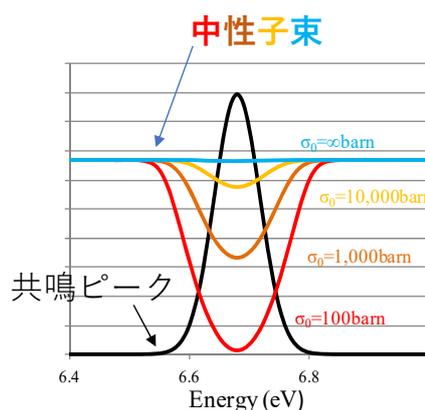


Fig.4 背景断面積と自己遮蔽効果

のように、記載でき、

$$\phi(E) \propto \frac{W(E)}{\sigma_{t,iso}(E) + \sigma_0}, \quad (5)$$

のような形に帰結する。これから、対象核種の共鳴ピークによる自己遮蔽効果と、背景断面積による緩和が直感的に理解できる。最終的に、背景断面積は次のように記載できる。

$$\sigma_{0,n} = \frac{1}{N_n} \sum_{m \neq n} N_m \sigma_{t,m} + \frac{(1-C)\Sigma_e}{N_n}, \quad (6)$$

第 1 は、体積項と呼ばれ、他の核種による吸収を表し、(3)式の定義から導出できるもの。第 2 は表面項と呼ばれ中性子の漏洩の効果を表し、ウィグナーが中性子漏洩を脱出断面積 $\Sigma_e$ として導入したもの。後に、カルビックにより、中性子の再入射の効果をダンコフ補正 $(1-C)$ として、導入し(6)式の形に完成させている。さらに、二重非均質効果に対しては、セジェブが、

$$(1-C)\Sigma_e = \frac{1}{l} \frac{1}{\frac{1}{\alpha} + \left(\frac{1}{1-c} - 1\right)\beta}, \quad (7) \quad \beta = \frac{v_m \Sigma_m}{v_m \Sigma_m + \frac{1}{A} + \frac{1}{1-c} - 1}, \quad (8) \quad c = \frac{\lambda}{\lambda + \lambda_f}, \quad (9)$$

のように、マイクロ領域に理論を拡張させ、高温ガス炉燃料解析を可能とした。なお、(9)式は、レーンが導出した、マイクロ領域のダンコフ係数である。

これらの解析により、更なる機構論的解明に成功した。モル分率を下げ希釈することは、粒子数が増えるが、このことは、表面項の増加、つまり、燃料核からの中性子漏洩の効果を増加させることによる、背景断面積の増加により自己遮蔽効果が緩和し、BOLにおける臨界性の低下につながっていることが、判明した。希釈により粒子数が増え、マイクロのダンコフ係数大きくなり、脱出断面積を小さくする傾向にあるが、分母の個数密度の効果が大きく、希釈により小さくなった個数密度が、結果として、表面項を増大させるという結果が得られた。

このように、経験的に得られていた Pu 燃焼高温ガス炉の核設計の特徴が、機構論的に解明された。このことは、Pu 燃焼高温ガス炉の核設計の信頼性を高めるだけでなく、今後の設計方針に明確な道筋を与えることが期待できる。

近年、モンテカルロ法の普及により、物理現象を考慮せずに、詳細なモデルによる詳細な解が簡便に得られるようになった。そのため、計算ミスによる誤った結果の排除も難しくなっている傾向にある。その意味でも、このような研究は価値があるものと判断する。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Y. Fukaya, M. Goto, H. Ohashi, "Self-shielding effect of double heterogeneity for plutonium burner HTGR", Ann. Nucl. Energ., Vol.138, 2020, pp.107182\_1-107182\_9.

### (4) 今後の利用予定:

高温ガス炉の設計を詳細化するために、設計システムの開発を進める予定である。そのため、大型計算機 ICE X の計算能力に期待するとともに、GUI ライブラリ等の充実、柔軟なジョブシステムの構築を期待する。

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

### 5.11.1 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、山下 晋<sup>+1</sup>、北村 竜明<sup>+2</sup>、坂本 健作<sup>+2</sup>、高瀬 和之<sup>\*</sup>  
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 高性能計算技術利用推進室  
\* 長岡技術科学大学 大学院工学研究科

#### (1) 利用目的:

福島第一原子力発電所の廃炉において、レーザー加工技術は、遠隔操作性、局所加工性等に優れることから燃料デブリ等の取り出し技術の一つとして期待されている。筆者らは、燃料デブリ等の取り出し技術として、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、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が、この現象を評価するためには、物体表面が水流で覆われている条件で起こるレーザーによる水蒸発や物体溶融などの現象を明らかにするとともに、レーザー出力やエネルギー密度などのパラメータを加工対象物に合わせて最適に制御することが必要である。本件は、このレーザーはつり除去技術を確立するための解析手法を開発するものであり、レーザーはつり除去加工基礎過程の半定量的評価を実現し、レーザーはつり除去条件の最適化に資する。

#### (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、筆者らが開発を進めているレーザーはつり除去加工では、溶融物を水の噴射により除去し、回収するため、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。

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。汎用熱流体解析ソフト Fluent の溶融モデルを使用して、固体壁面上に液体が一定の厚さで存在する系に対し金属材料溶融挙動を模擬した解析を行い、レーザー照射による伝熱面上での挙動現象を評価・検討した。

図1に沸騰モデル形状、図2に騰モデル形状の解析領域メッシュを示す。ノズル径は0.4mm、加熱領域径は4mmで、ノズルから加熱領域に向かって水を噴出する、空気領域の周囲境界は圧力出口、鋼領域の周囲境界は壁、水領域の周囲境界は壁、空気と水および水と空気の界面はインターリア境界である。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、検討するためのモデルであり、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た。

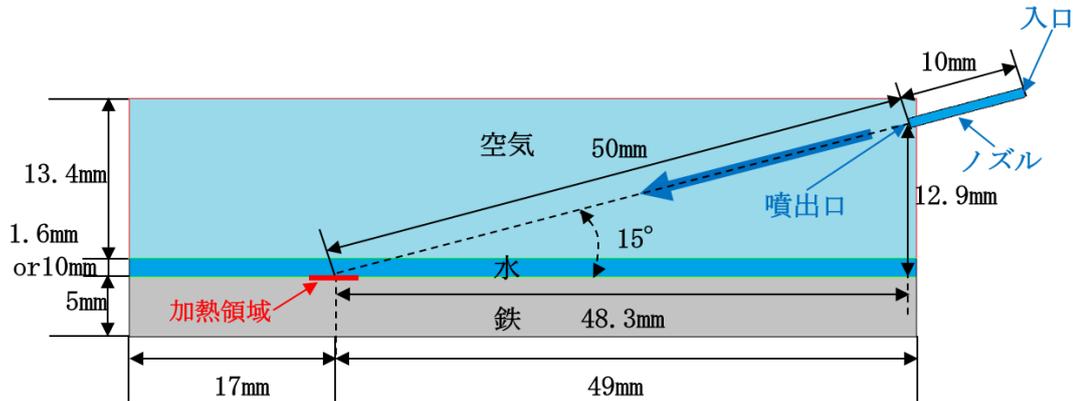


図1 溶融モデル形状（噴流設定）

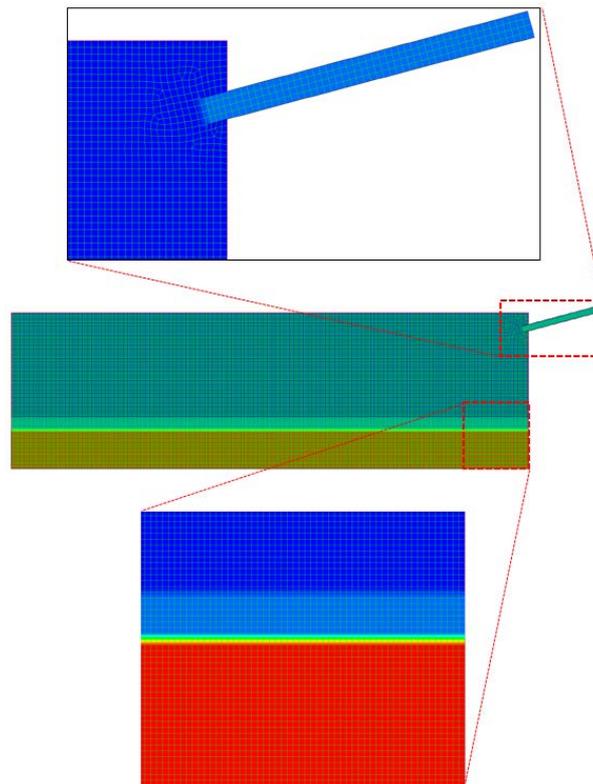


図2 沸騰モデル形状の解析領域メッシュ

凝固・融解モデルで検討を行った結果、溶け方や溶融部分から固相部分への温度勾配の変化などが確認でき、金属の溶融現象の予測が可能になったことは明らかになったが、加熱領域にノズルから

噴出した水を衝突させる条件を設定すると、計算途中で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。そこで、解析条件を細かく調整し、計算を繰り返し実施したことにより、噴流速度が遅い 10 m/s の条件では安定した計算ができることを確認した (図 3, 4)。一方で、水の噴出する流速を 10 m/s、60 m/s、126.9 m/s で計算を実施したが、全ての流速で発散しており、速い噴流に対しては現象を解決することができなかった。発散原因としては、①加熱、金属溶融、噴流等、複数の現象を同時に解こうとするため解析が複雑になる。②噴流条件が無ければ安定した計算が実行できているため、加熱の有無よりも噴流が大きく影響していると考えられる。③遅い噴流では圧力補正で、早い噴流では乱流エネルギー散逸率が原因で発散した。④溶融モデル用に使用したユーザー定義関数が 3 相 (気・液・固) モデルに非対応 (現在 2 相モデルで対応) であること等が原因と考えられる。

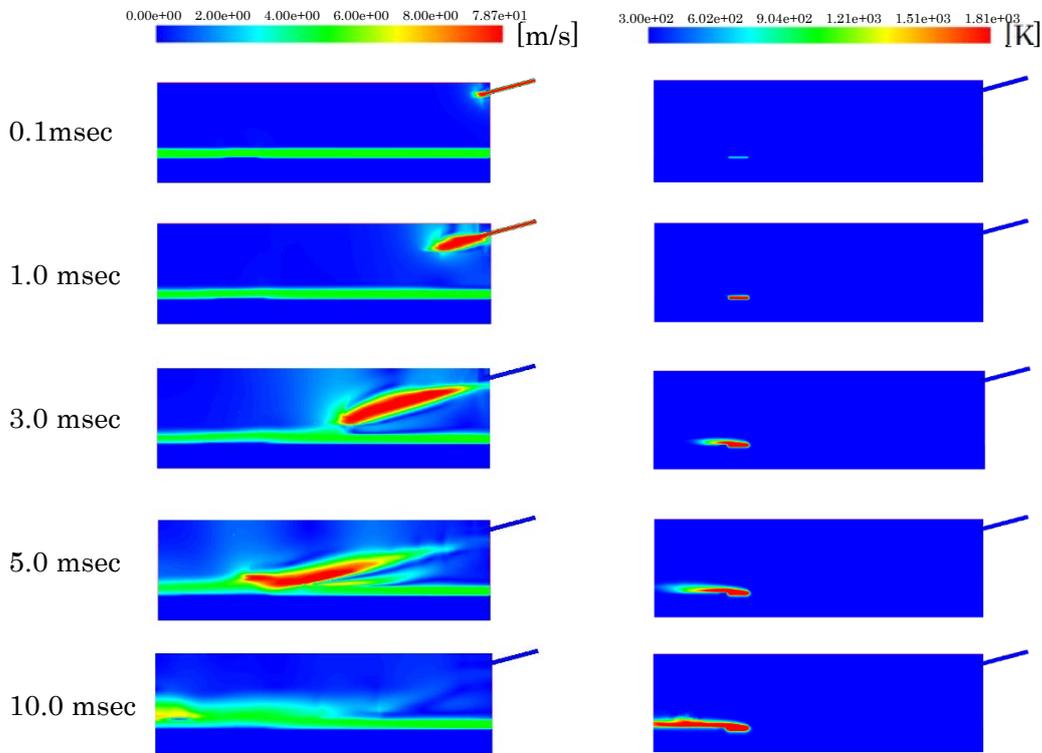


図3 流速コンターズ

図4 温度コンターズ

**(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、相変化が起こる部分でのアスペクト比を 1 になるようにメッシュを調整することや噴流速度に合ったメッシュサイズの設定と圧力と流速の連成手法の調整を行うことで、発散せずに安定した解析を実行できるように改良を進める。

## 5.11.2 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)

山田 知典、柴田 卓弥、山下 晋<sup>+1</sup>、北村 竜明<sup>+2</sup>、坂本 健作<sup>+2</sup>、高瀬 和之<sup>\*</sup>  
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 高性能計算技術利用推進室

\* 長岡技術科学大学 大学院工学研究科

#### (1) 利用目的:

福島第一原子力発電所の廃炉において、レーザー加工技術は、遠隔操作性、局所加工性等に優れることから燃料デブリ等の取り出し技術の一つとして期待されている。筆者らは、燃料デブリ等の取り出し技術として、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、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。本件の目的は、レーザーはつり除去技術を確立するための解析手法開発の一環として、燃料デブリの溶融現象をシミュレーションによって予測できることを確認することである。

#### (2) 利用内容・結果:

燃料デブリはウラン燃料と原子炉構造物が溶融し、複雑に混ざり合って固化した物質であり、固体であるが、内部及び表面を含めて多数の空隙が存在し、そこには水や空気、さらには水の放射線分解によって発生する水素等のガスが閉じ込められる。このような条件を満足するために、本解析では、レーザーが照射される燃料デブリは複数の小さな粒子状物質から成る塊と考えた。これによって、隣り合う粒子状物質間には空隙が形成され、粒子状物質のサイズを変えることで空隙の大きさ（空隙率）を任意に設定することができる。また、個々の粒子状物質に対して材料データを与えることで、燃料デブリ内のウラン燃料や各種原子炉構造物の簡略区別が可能になる。

今年度の目的は、空気等の気体を含有する粒子状の燃料デブリがレーザー照射によって溶融する過程の予測が可能であることを確認することである。直径 1 mm の粒子状をした多数の燃料デブリが、上方から照射されるレーザーによって溶融する現象を想定し、図 1 に示す解析体系を設定した。レーザー照射による加熱は、図 1 に赤丸で示す直径 4mm の照射領域に任意の熱量を一定時間与えることで模擬した。

図 2 はレーザー照射によって燃料デブリの粒子が上端から次第に溶けていく過程であり、時間的に進行する溶融現象を数値的に予測できる見通しが得られた。また、燃料デブリの粒子が溶けて完全に液体状になる際、周囲の気体の一部を液体内部に取り込む現象を確認した。

図 3 に示す解析体系全体では、熱伝導によって隣り合う燃料デブリの粒子に熱が伝わって溶融範囲が拡大する過程及びレーザー照射停止後に固化する過程を予測できることを確認した。

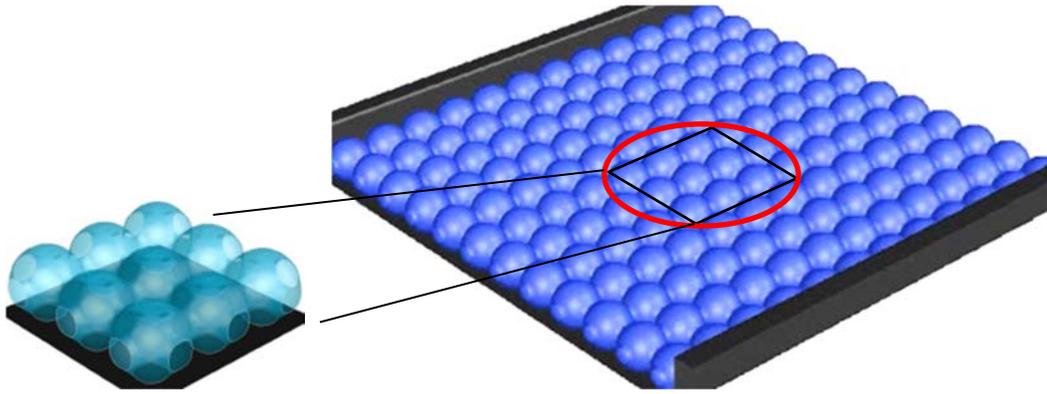


図1 解析体系

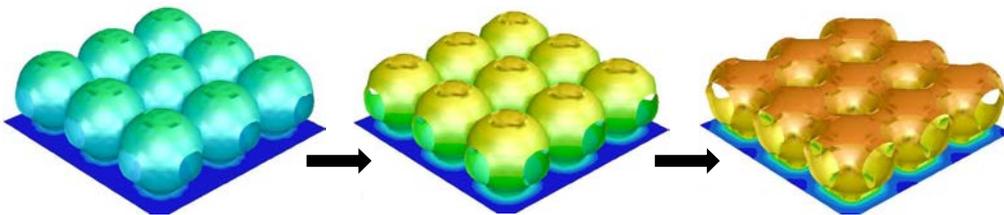


図2 粒子状燃料デブリの上端から溶ける様相

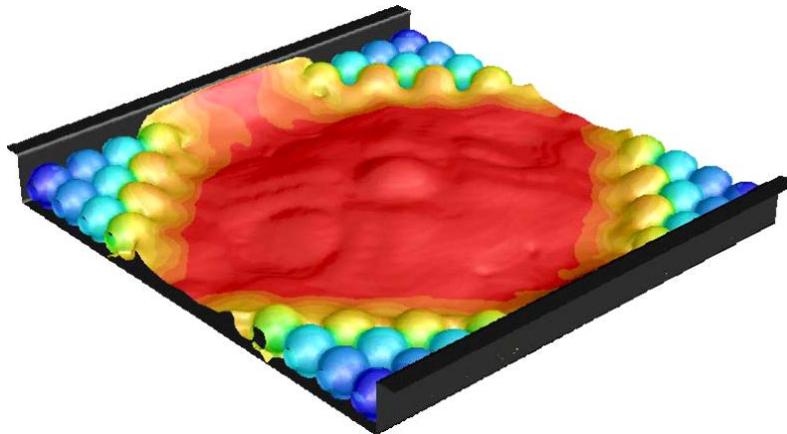


図3 レーザー照射領域外に拡大する溶融範囲

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) Y. Yamazaki, K. Takase, et al., “Basic Study on Melting and Cutting Simulation by a Laser Irradiation”, The 4th International Conference on Science of Technology Innovation 2019 (4th STI-Gigaku 2019), STI-9-43, 2019.

**(4) 今後の利用予定:**

今後も原子力機構の ICE X 及びその後継機を使って、レーザーはつり除去シミュレーションの実現を目指し、本成果をベースに Jupiter コードを使用した解析を行う考えである。

### 5.11.3 福島第一原子力発電所廃炉のための詳細核種インベントリデータベースの開発

#### Development of a Detailed Nuclide Inventory Database for Decommissioning of Fukushima Daiichi Nuclear Power Station

坂本 雅洋、奥村 啓介  
計量管理・線量評価グループ

##### (1) 利用目的:

福島第一原子力発電所（1F）廃炉に向けた研究開発では、原子力基礎工学研究センターにより公開されたデータ（JAEA-Data/Code 2012-018）は 1F 事故時の核種インベントリ推定値として広く利用されている。データは事故後の余裕がない時期に作成されたため、炉心平均のみの評価である。燃料集合体内の可燃性毒物入り燃料やMOX燃料の正確な組成が考慮されていない、炉心軸方向の燃焼度分布やボイド率分布が考慮されていない、構造材中の微量不純物を生成起源とする核種が考慮されていないなど、データには見直すべき点が多々ある。本研究ではそれらを克服した 3 次元の核種インベントリデータベースを新たに作成することを目的とし、今後の詳細な 1F 廃炉研究に適用可能なものとする。大型計算機ではデータベース作成に必須となる計算結果の検証および大規模データ編集システムの開発に利用する。

##### (2) 利用内容・結果:

1F 1～3 号機の燃料集合体をすべて 3 次元モンテカルロ燃焼コードで計算する場合、約 36000 ケースと膨大な数の計算が必要となる。この方法は概ね正確にインベントリを計算できるが、現状にある計算機資源を想定し全ケースが終了するまでの時間を試算したところ約 3.4 年かかることから適用するのは現実的でない。モンテカルロ燃焼計算の結果を良好に再現でき、計算コストができるだけかからない方法として 1F 専用の ORIGEN2 断面積ライブラリを新規に開発し、全ケースを ORIGEN2 により実施する。2019 年度に計算の実行から結果の処理までの大規模データ処理システムの開発がほぼ完了したため、現在、本計算に向けて検証を進めている。新規データベース、大規模データ編集システム、PCV/RPV の内部調査やサンプリングデブリ分析の結果等と組み合わせることで、事故新進展解析、デブリ性状把握、放射能評価、崩壊熱評価、臨界性評価、線量率評価、計量管理などに用いることができる。(図 1)

##### (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:

今後も大型計算機を使用し、インベントリデータベース作成に向けて計算を進める予定である。

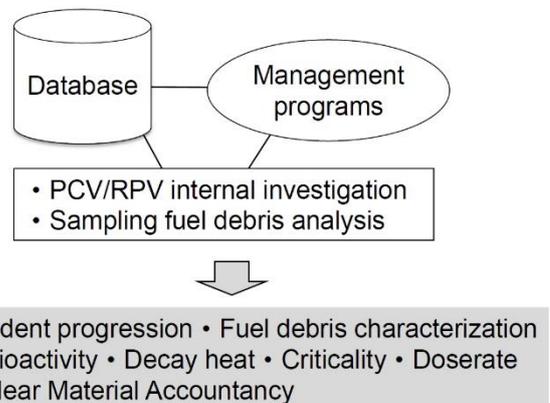


図 1 1F 核種インベントリデータベースの活用

## 5.11.4 JUPITER によるジルカロイ酸化／水素吸蔵評価

### Calculation of Oxidation and Hydrogen Uptake Behavior by JUPITER

永江 勇二、木田 美津子\*

試験技術開発グループ

\* グローバル・ニュークリア・フュエル・ジャパン

#### (1) 利用目的:

経済産業省資源エネルギー庁 令和元年度原子力の安全性向上に資する技術開発事業（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）において、燃料被覆管と燃料ペレットの狭隘な配置での解析体系を構築でき、機構論的に妥当なモデルによる 3 次元多相多成分熱流動解析コード（JUPITER コード）を用いて、被覆管の酸化／水素吸蔵挙動に関わる予備解析を実施した。本コードは、過酷事故時の炉内溶融物の挙動を計算機上に再現し溶融物の移行蓄積過程を精度良く予測すること、並びに炉内構造物溶融挙動の機構論的な解明を目的として開発されている。

#### (2) 利用内容・結果:

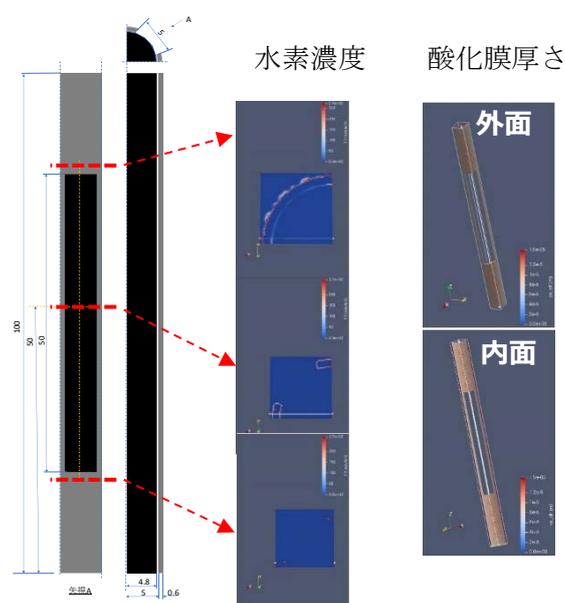
JUPITER コードによる解析において、燃料棒の破損を考慮した開口部を有する試験体に対して解析体系（図 1 (a)）を作成し、高温水蒸気中試験条件を想定した酸化挙動解析を実施した。形状は、解析時間を考慮し、できるだけ簡略化することとし、試験体の長さ方向は開口部を中心に全長 100 mm、径方向は開口部を中心に 1/4 のモデルとした。径方向の寸法は、メッシュ幅 0.2 mm が可能となるよう 0.2 mm の倍数に調整した。解析は、被覆管とペレットの間に 2 メッシュ適用することとし、メッシュ幅を 0.1 mm とした。解析開始時の被覆管、ペレット及び水蒸気の温度を試験の設定温度に合わせて 1300 °C とした。水蒸気の流速は、試験条件にあわせて、流路面積と水蒸気流量から算出した 0.033 m/s とした。

令和元年度は、現行 SA 解析コードに適用されている、水蒸気量に依存しない酸化膜成長速度式により、酸化膜厚さ、及び水素吸蔵量を計算するのに必要となる水素発生量を計算した（図 1 (b)）。約 10 分間の試験では、採取位置で最も下部である被覆管下端からの距離が 100 mm の位置では、被覆管外面に 80  $\mu\text{m}$  程度の酸化膜が観察されている。酸化膜厚さは被覆管下端からの距離と共に小さくなり、開口部がある 300 mm より上側では 10~30  $\mu\text{m}$  程度であった。約 7.67 秒後の解析による酸化膜厚さ（約 12  $\mu\text{m}$ ）は、その後の約 10 分の時間経過を考慮すると、試験による実測値（10~30  $\mu\text{m}$ ）と比較してやや過大評価となっている可能性が考えられる。また、解析では被覆管外面と内面にほぼ同等の酸化膜が生成しているが、試験では内面ではほとんど観察されなかった。

被覆管内外面位置での水素モル分率が高いことが分かる。また、解析開始時には被覆管外面と内面の水素モル分率にほとんど差がないが、時間が経過すると、被覆管上部は外面が、被覆管下部は内面が高くなり、解析終了に近くなると、被覆管下部は内面のみに観測された。一方、被覆

管上部の内面は解析初期から水素モル分率がほぼ同じ値で、外面のみ増加していった。中央部は外面に対して内面がほぼ同じ差分で高い値を示し、時間の経過と共に徐々に増加した。解析終了時の最大値の大きさは、被覆管上部と下部はほとんど同じであったが、中央はその約 4/5 の値であった。周方向の分布をみると、水素モル分率はモデル端部で高くなる傾向がみられ、下部ではそれが顕著であった。上部の被覆管外面位置はモデル端部に限らず、所々に水素モル分率が高い箇所がみられた。

水蒸気量に依存しない、現行 SA 解析コードで用いられている酸化膜成長速度式では、燃料棒内外で酸化膜が成長し、試験データと異なることが明らかとなった。水蒸気量に依存した酸化膜成長速度式の導入が、必要であると考えられる。



(a) 解析体系 (b) 水素濃度と酸化膜厚さ

図 1 燃料棒破損時の酸化／水素化挙動

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) CLADS 試験技術開発グループ：永江勇二、“4.(2)②-2 酸化・水素吸蔵モデルの高度化”、経産省受託事業報告書「令和元年度原子力の安全性向上に資する技術開発事業（シビアクデント時の燃料破損・熔融過程解析手法高度化）、2020 年 3 月、pp.4.(2)②-2\_1～4.(2)②-2\_1\_29.

**(4) 今後の利用予定:**

様々な事故シナリオでの燃料破損・熔融挙動を解析し、事故シナリオの妥当性・蓋然性を確認する必要があることから、今後も大型計算機の利用を予定している。

### 5.11.5 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 Multi-physics Models in JUPITER Code

チャイ プンフィ  
燃料溶融挙動解析グループ

#### (1) 利用目的:

JUPITER code was developed to explore the detailed mechanism of various complex interrelated physical phenomena in the severe accident, and to support the ongoing decommissioning project.

In the severe accident analysis, it is important that the eutectic reaction between the main core materials be studied, because it may take place at elevated temperature, and accelerate the failure of the core structures. To this ends, an original physical numerical model has been developed in JUPITER code to predict the eutectic reactions. The main objective of this work is to test the reliability of the model before the practical application.

#### (2) 利用内容・結果:

Two previous experimental studies were simulated to validate the eutectic reaction model.

1. In the first experiment, the reaction of the binary SUS-Zry system was evaluated and the growth rate of the reaction layer was given. As an example, Figure 1 shows the comparison of the cross-section between one of the experiment and the simulation. As a result, the simulation results were in good agreement with the experimental measurements, especially at low temperature conditions.

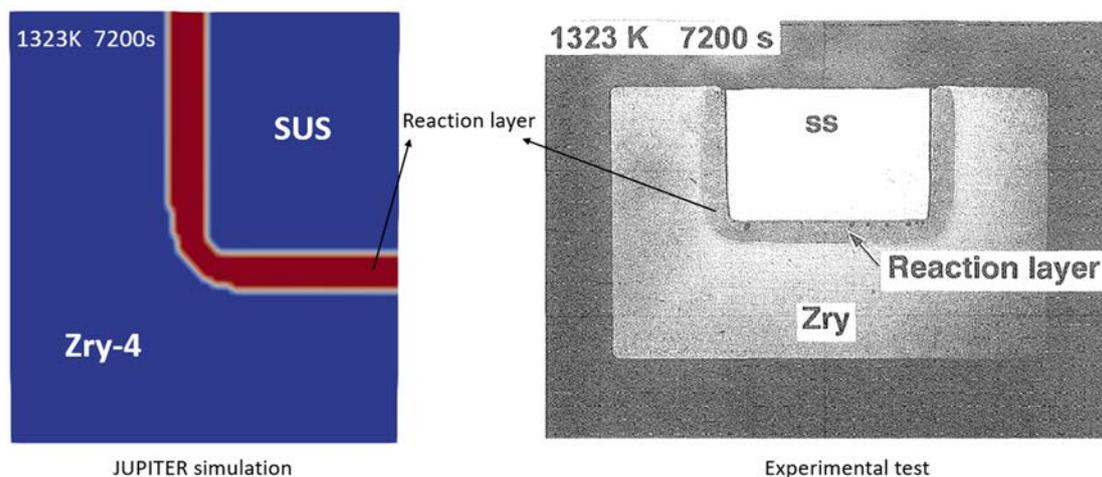


Figure 1. Comparison of the cross-sections between the experiment and numerical analysis.

2. Another series of experimental tests (CRFCBE experiment) were simulated to test the applicability of JUPITER code on predicting the eutectic reaction between the multiple diffusion systems. As an example, Figure 2 shows the comparison of the horizontal cuts between the simulation and the CRFCBE-04 test. As a results, JUPITER code reasonably predicted the reactions in the experiment with and without oxide layers. It could be concluded that JUPITER code is feasible to predict the eutectic reactions in nuclear severe accident.

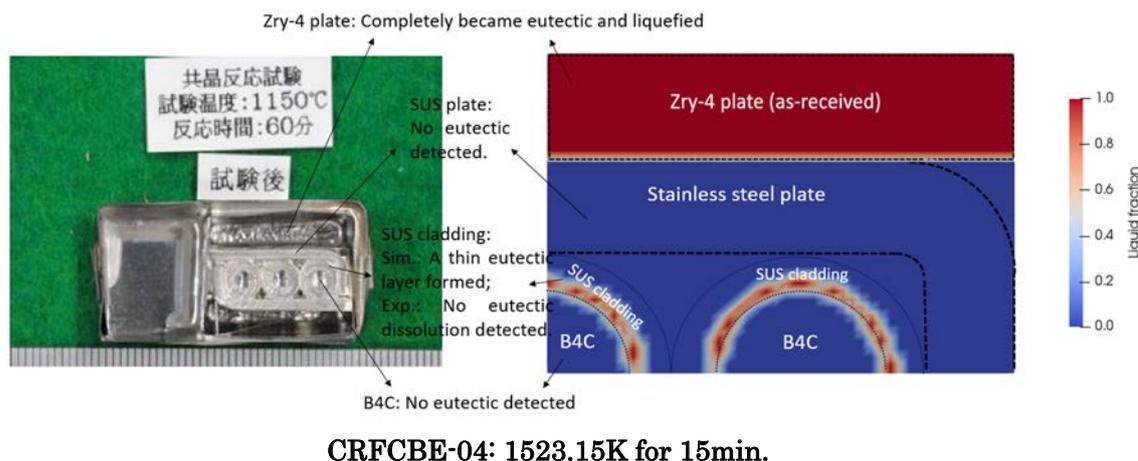


Figure 2. Horizontal cut Comparison between the experimental and simulation result with as-received Zry-4 plates.

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) Chai, P., et al., “Validation and verification for the multi-physics models in JUPITER code”, Proceedings of International Topical Workshop on Fukushima Decommissioning Research (FDR 2019), Naraha, Japan, May 2019.
- 2) Chai, P., et al., “Development and validation of the eutectic reaction model in JUPITER code”, Annuals of Nuclear Energy, Vol.145, 2020, p.107606\_1-107606\_13, <https://doi.org/10.1016/j.anucene.2020.107606>.

**(4) 今後の利用予定:**

Zry oxidation is another important phenomena during the severe accident, which may result in the sudden temperature rising and trigger the failure of the core structure. In the future, we are going to develop the relevant physical model and perform the validation by ICE-X.

### 5.11.6 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、滞留水中の放射線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、2次元モデルを3次元化することで、実機保管容器内での非対称な熱流体挙動の再現性向上を図った。大幅に解析モデルサイズが増大することから、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3次元である。ゼオライトを充填した円筒容器（容積約 1.6 m<sup>3</sup>）の底部に高さ 46 cm の残水層を設け、ゼオライトが充填された層の中心軸とその周囲 8 か所にあるヒータ（総熱量：約 1 kW）で内部を加熱する。ヒータ熱量は、中心と周囲で 2:1 の熱量バランスを企保設定とした実験値を入力値とした。ゼオライト層上部空間は設置された 2 か所の配管で大気開放されている。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 7 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。実験値と同様にヒータ熱量に応じた非対称な温度分布となり、比較的高温となる中心部、続いてヒータ近傍部を中心とした上部の乾燥が緩やかに進むとともに、容器下部や壁面近傍では落水や凝縮による水分も含め比較的高い水分分布がみられる。また、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、頂部配管を通して外部大気に一部漏洩するが、多くは容器壁面、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上部領域に移動する循環流が形成されている様相が確認できた。

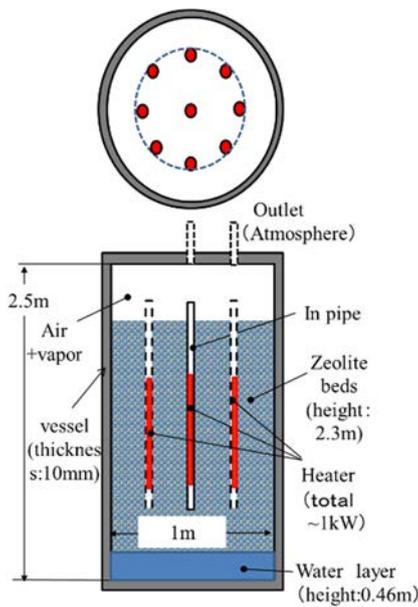


図 1 解析モデルの概要

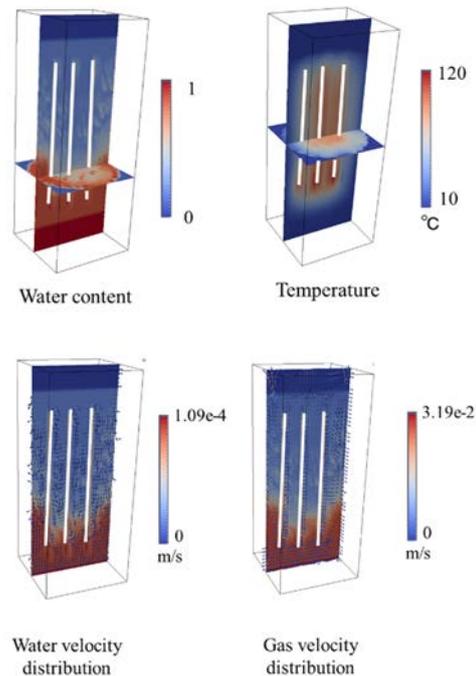


図 2 計算結果（7日後）

**(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、“ゼオライト層の水分乾燥シミュレーション”、日本機械学会熱工学コンファレンス 2019、名古屋、2019 年 10 月。

**(4) 今後の利用予定:**

本年度の研究にて、コードの 3 次元化プログラム開発整備により、セシウム吸着塔やデブリ保管容器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の検証に向けた見通しが得られた。今後、コード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 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

---

### 5.12.1 保障措置検証のための遅延ガンマ線分光法開発

#### Delayed Gamma-ray Spectroscopy Development for Safeguards Verification

Douglas Chase Rodriguez and Fabiana Rossi for the Delayed Gamma-ray Team

核不拡散・核セキュリティ総合支援センター 技術開発推進室

#### (1) 利用目的:

The Delayed Gamma-ray Spectroscopy development using the SGI ICE X cluster focused on generating MCNP simulations to optimize the neutron flux in our instrument designs. Additional work focused on generating delayed gamma-ray spectra for Monte Carlo code development and data comparison.

#### (2) 利用内容・結果:

Nuclear material (NM) quantification is an essential aspect of safeguards verification to ensure that the fissionable material is not diverted to create weapons. Presently, most NM verification is performed using passive non-destructive assay (NDA) techniques that utilize neutron signatures for total fissionable mass and gamma-ray signatures for nuclide ratios (composition). However, passive NDA techniques cannot be applied to highly-radioactive NM like spent fuel due to the intense passive emissions from minor actinides and fission products. To supplement currently implemented active NDA and destructive analysis methods, the JAEA/ISCN is developing Delayed Gamma-ray Spectroscopy (DGS) in order to assist in fissile-nuclide quantification. Described here are works performed with the SGI ICE X cluster over the past year towards this goal, some of which is used for experimental development with our EC/JRC collaborators.

For DGS, the gamma-ray (GR) spectral signature is derived from decaying short-lived fission products (FPs) that is proportional to the fissionable nuclide content. Of key importance is that the observed GR spectrum that is highly dependent on the half-life of the FPs that change during the sample interrogation. A DGS interrogation consists of an irradiation period to generate the FPs and a measurement period to observe the resulting GRs. During the irradiation period, fast neutrons from an external source are moderated into the thermal energy range (<1 eV) to induce fission. Compared to fast neutron (>1 MeV) fission, this thermal neutron flux generates FPs at ~500x the rate from fissile nuclides (U-235, Pu-239, and Pu-241) found in spent fuel. This allows the GRs emitted by the

decaying FPs to be observed through the thick filter required to suppress the intense passive GR emissions from the long-lived FPs (e.g. Cs-137). Consequently, our development consists of both designing a complete instrument to perform the interrogation as well as the analysis of the observed GRs. It must be understood, though, that the instrument is constrained by the analysis to precisely determine the content while the analysis must include basic restrictions due to the instrument's capability.

Toward these goals, two parallel sets of work were performed on the CCSE SGI ICE X cluster. First, we are developing a DGS Monte Carlo (DGSMC) to simulate an interrogation for both predictive Monte Carlo (MC) expectations as well as inverse MC analysis of the measured spectra. Multiple simulations were performed for separate U-235, Pu-239, and Pu-241 samples that would be used in experiments with PUNITA at EC/JRC [1]. These were interrogated with different irradiation-measurement patterns and incorporated the expected ~1-s delay to move the sample between the irradiation and measurement positions. Figure 1 shows the resulting U-235 simulations and the time-dependent differences from the fission product half-lives. For instance, the 3.29- and 3.40-MeV GR peaks from Y-97 (3.75-s half-life) appear more prominently in the 10-s irradiation/measurement interrogation compared to the 300-s irradiation/measurement interrogation. Contrarily, the 3.76-MeV GR peak is produced at roughly the same intensity since it is derived from the longer-lived (10.3-min half-life) Y-95 that builds up over the total interrogation time. These timing differences must be compared to experimental data and subsequently optimized for the final DGS technique. These simulations will be published in a future MC paper as well as for data-MC comparisons.

Once the timing is optimized the minimum source intensity can be determined based on the capability of the instrument. Key to this is the sample irradiator that relies on an optimized moderator to reduce the energy of the neutron from the external source [2]. The CCSE SGI ICE X cluster was used to optimize the moderator design for a potential deuterium-deuterium (D-D) neutron generator in MCNP [3]. Specifically, the goal was to optimize the neutron flux for sufficient fissile fission while suppressing the contribution from fertile nuclides (e.g. U-238) and minimizing the required source intensity for safety. Since our final goal is to install this instrument into a reprocessing plant analytical laboratory, our optimization constraints were: 1) obtain a high thermal flux in the sample space, 2) obtain a high thermal-to-fast ratio, and 3) increase compactness to a maximum of 1 m<sup>3</sup>. A full scan of different inner parameters was performed inside the main graphite body; for instance, sample-source orientation and distance and HDPE thicknesses around the generator and sample. These inner parameters dominated the optimization of the neutron flux in the sample with the outer parameters dominantly optimizing the compactness and slightly affecting the flux. The final design model that will be included in a future publication is shown in Figure 2.

Finally, we used SGI ICE X to also model the neutron flux of our DG Test Instrument that was based on idealized model previously studied on SGI ICE X [4]. Neutron count rate

measurements were performed in PERLA of the EC/JRC using a He-3 detector and incorporated into the MCNP model. A manuscript is presently under internal review for publication.

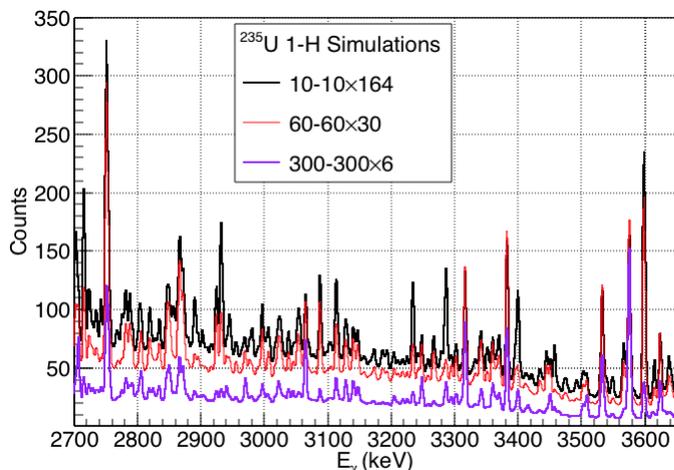


Figure 1. Simulated one-hour interrogations for the noted in the legend labeled for irradiation time and measurement time in seconds, multiplied by the number of cycles.

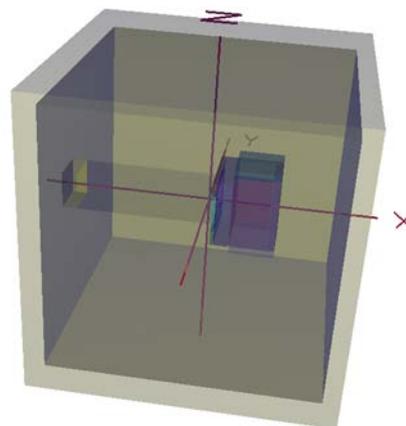


Figure 2. Final model of the optimized graphite and HPDE moderator for a D-D neutron generator.

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等) :**

- 1) D. C. Rodriguez, M. Koizumi, F. Rossi et al., “Utilizing PUNITA experiments to evaluate fundamental delayed gamma-ray spectroscopy interrogation requirements for nuclear safeguards”, *Journal of Nuclear Science and Technology*, Vol.57, Issue 8, 2020, pp.975-988, DOI: 10.1080/00223131.2020.1742812.
- 2) F. Rossi, D. C. Rodriguez, M. Koizumi et al., “Delayed Gamma-ray Spectroscopy for Nuclear Material Analysis (2): Design of a Practical System with DD Neutron Generator”, *Proceedings of INMM 60th Annual Meeting*, Palm Desert, U. S. A., 2019, 7p.
- 3) T. Goorley, M James, T. Booth et al., “Initial MCNP6 Release Overview”, *Nuclear Technology*, Vol.180, 2012, pp.298-315.
- 4) D. C. Rodriguez, F. Rossi T. Takahashi et al., “Model Design of a Compact Delayed Gamma-ray Moderator System Using  $^{252}\text{Cf}$  for Safeguards Verification Measurements”, *Applied Radiation and Isotopes*, Vol.148, 2019, pp.114-125.

**(4) 今後の利用予定 :**

Future work on SGI ICE X will consist of additional MCNP models to optimize other neutron sources for final instrument development and simulations with DGSMC to optimize the interrogation pattern and perform uncertainty analysis.

## 5.12.2 福島第一原子力発電所事故で放出された放射性物質の半球規模大気拡散解析 Hemispheric Atmospheric Dispersion Simulation of Radionuclides Released during the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant Accident

古野 朗子

環境動態研究グループ

### (1) 利用目的:

2011年3月の福島第一原子力発電所事故により放出されたCs-137の半球規模大気拡散計算を実施し、CTBT国際モニタリングシステムによる観測データと比較した。解析に用いた世界版緊急時環境線量情報予測システム第2版WSPEEDI-IIは、領域気象シミュレーションモデルWRF (the Weather Research and Forecasting model) および粒子拡散モデルGEARNから構成されている。

解析領域を図1に示す。北極を中心としたポーラステレオ図法で、東経135度を基準とした16,000 km四方を27 km格子で区切った。鉛直方向は地上から上空10 kmまでを対象とした。格子数は616×616×28である。GERAN計算における粒子不足による統計誤差を減少させるため、大量の粒子(6時間毎に250万個)をモデル内で仮想放出させた。

このような粒子拡散計算を効率よく実行するため、平成26年度より、大規模並列計算によるシミュレーションを実施してきた。しかしこれまでのWSPEEDI-IIにはMPI並列による粒子分割機能はなく、放出期間を分割した多数ケースのシェルスクリプトによるジョブ実行で対応していた。膨大な手間がかかっていたうえ、人為ミスの可能性もあった。また、リスタート機能もなく、計算が途中で終了した時には再計算を余儀なくされていた。これらの問題を改善するため、平成31年度(令和元年度)のプログラム高速化・並列化支援作業の一環として、粒子分割(MPI並列)による高速化を実施し、リスタート機能も追加した。

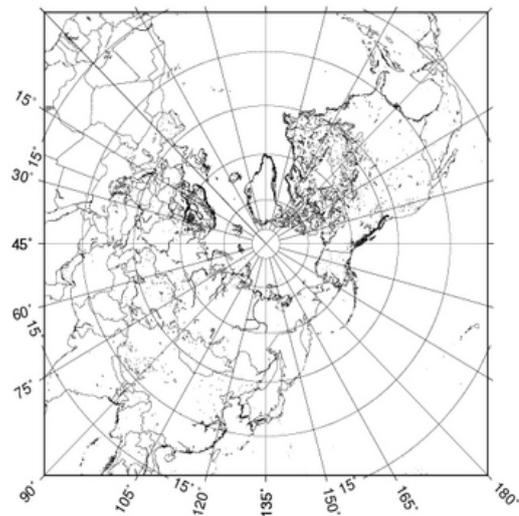


図1 解析領域

### (2) 利用内容・結果:

計算期間は2011年3月11日～4月1日で、<sup>137</sup>Csの放出量にはTeradaの推定放出量[1]を用いた。検証用データには、CTBTOの国際観測網の粒子状核種データのうち、図1の領域内に存在する28地点を選んだ。

<sup>137</sup>Csの24時間平均大気中濃度に関するシミュレーション結果と測定とを比較した結果を図2に示す。図2の斜めの実線は、ファクター10以内で計算できた領域を表す。本研究では、ファクター5以内で計算できた割合は63%、ファクター10以内で計算できた割合は83%と、高い再

現性を示した。また、過大評価あるいは過小評価の傾向を示す Bias は 0.02 であり、どちらの傾向もないことが示された。

高速化作業導入以前は、2011 年 3 月 11 日 00 時～4 月 1 日 00 時（世界時間）までの 20 日間を 80 ケースに分割し、それぞれの計算に約 24 時間～72 時間程度要していた。しかし導入後は、粒子数を変えずに（総数 2 億個）1 つのジョブで全期間通して計算した場合、2160 並列を用いて 3 時間 56 分で計算することができるようになった。

本研究のように、放出継続時間が長く、解析領域が広い場合は、多くの粒子数が必要である。この高速化版 GEARN は、このような計算を効率よく実行するのに大変適している。

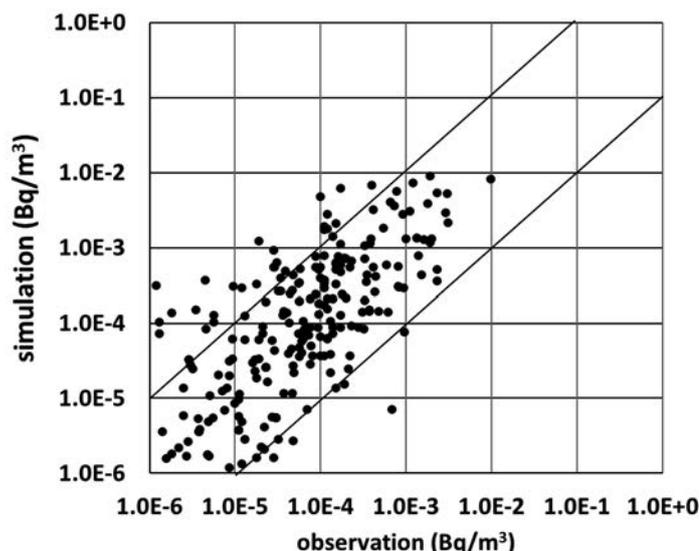


図 2  $^{137}\text{Cs}$  の 24 時間平均大気中濃度に関する計算値と CTBTO 測定値との比較

- [1] H. Terada, H. Nagai, K. Tsuduki, A. Furuno, M. Kadowaki, “Refinement of source term and atmospheric dispersion simulations of radionuclides during the Fukushima Daiichi Nuclear Power Station accident”, J. Env. Rad., Vol.213, 2020, pp. 106104\_1-106104\_13.

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) A. Furuno, H. Terada, K. Tsuduki, M. Kadowaki, H. Nagai, “Hemispheric atmospheric dispersion analysis of radionuclides released from the Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant”, CTBT: Science and Technology 2019 Conference (SnT 2019), Vienna, Austria, June 2019.

**(4) 今後の利用予定:**

Terada (2020) の推定放出量を用いて長距離拡散計算を実施した結果、国外のモニタリングポストのデータと極めてよく一致し、拡散計算および推定放出量の妥当性が示された。しかし、放射性物質が太平洋方向に拡散した 3 月 12 日～14 日、16 日～18 日等の推定放出量に関しては、海表面への沈着量データや表層海水中濃度のデータが限られていることから、まだ改善点が残されている。今後、海洋拡散シミュレーションとのカップリングによる再推定を実施する予定であり、その際は大型計算機を駆使した大規模計算を予定している。

### 5.12.3 レーザー駆動中性子源用のモデレータ開発

#### Development of Compact Moderator using a Laser Driven Neutron Source

李 在洪、伊藤 史哲\*1、小泉 光生、高橋 時音、鈴木 敏\*2

技術開発推進室

\*1 (株) ナイス

\*2 (株) E&E テクノサービス

#### (1) 利用目的:

当センターでは、使用済み核燃料などの高線量核物質を迅速・簡便に検認するためのアクティブ非破壊測定技術開発の一つとして、コンパクトな中性子共鳴透過分析 (NRTA) 測定システムの開発を進めている。そのうち、本研究では、極短パルス中性子源であるため、測定距離をより短くすることができるレーザー駆動中性子源に注目し、レーザー駆動中性子源を用いた短い飛行距離 (約 5 m 以下) での NRTA 技術開発を進めてきた。

レーザー駆動などの中性子源を NRTA に適用するためには、中性子源から発生した高速中性子 (~MeV) を減速材 (モデレータ) により、共鳴エネルギー領域 (1-100 eV) まで減速させる必要がある。その理由で、本研究では大型計算機 (スパコン) を利用して、数値計算によるレーザー駆動中性子源用のモデレータ開発を進めており、本報告書では今までの成果を報告する。

#### (2) 利用内容・結果:

中性子減速材には、水素を多く含む水かポリエチレンが広く用いられる。しかし、高エネルギー中性子においては、水素との反応確率が大きく下がるため、モデレータの構造を分割し、高速中性子を効率よく中・高速へと減速させる上部モデレータ、中・高速中性子を 1-100 eV へと減速させるメインモデレータ (ポリエチレン) で構成することとした。図 1 はモデレータの概念図を示したものである。

数値計算は、モンテカルロ・シミュレーションコード PHITS 及び評価済み核データライブラリ JENDL-4.0 を用いて行った。入射中性子エネルギーは 10 MeV とした。計算体系の概要を図 2 に示す。数値計算では、モデレータに対して 0.5 m 離れた場所に検出器を設置し、検出器の面 (直径 8 cm) を通過する中性子束を計算する。モデレータのエネルギー分解能 ( $\Delta E/E$ ) は、モデレータの表面から放出される中性子の時間分布 ( $\Delta t/t$ ) の情報から得る ( $\Delta E/E=2 \cdot \Delta t/t$  とする)。まずは、エネルギー分解能が約 0.02 以上であれば、十分使用可能であると考えている。

上部モデレータの素材と厚さ(A)は、中性子強度の計算結果を比較し決定した。素材は、鉛 (Pb)、タングステン (W)、ベリリウム (Be)、鉄 (Fe) を候補とし、ポリエチレン (CH<sub>2</sub>) を比較のため、同様に計算した。図 3 は様々な上部モデレータとメインモデレータで減速した中性子束の比較、図 4 は 1-100 eV の中性子強度の比較を示したものである。図 4 は上部モデレータがない時の結果で規格化した相対値である。図 3 と図 4 の結果から、中性子強度が強い順に W、Be、Pb、Fe ということが分かる。厚さ(A)=2 cm の W と CH<sub>2</sub> を比較すると、W の方が約 42% 強度が高い。今回得られた結果から、上部モデレータの有効性が確認でき、厚さ(A)=2~3 cm の W が上部モデレータとして適切であるということが分かった。

メインモデレータは、まず、ポリエチレンの厚さ(B)を変化させ、中性子強度及びエネルギー分解能を評価した。図 5 は 1-100 eV の中性子強度を比較したものであり、モデレータ厚さ(B)=2 cm の時の結果で規格化した相対値である。図 6 は異なる厚さ(b)によるエネルギー分解能の変化を示したものである。図 5 の結果から、厚さ(B)=5 cm の場合が 1-100 eV の中性子エネルギー領域における減速能力が一番良いことを確認した。なお、図 6 から分かるようにエネルギー分解能は、モデレータの厚さ(B)の変化とともに大きく変わることを確認した。本結果から、モデレータ厚さ(B)はエネルギー分解能の重要な因子であることが分かった。今回得られた中性子強度及びエネルギー分解能を考慮し、本研究では、厚さ(B)=4~6 cm のポリエチレンが NRТА 測定に適切であると判断した。

次に、異なるポリエチレン断面積(CxC)に対する中性子強度及びエネルギー分解能の変化を図 7 と図 8 に示す。ポリエチレン断面積を大きくしていくと、その分中性子強度も増えるが、エネルギー分解能はあまり変化しなかった。本結果から、ポリエチレン断面積はエネルギー分解能をあまり考慮せずに済み、実験条件に応じて可能な範囲で大きなものを使用すれば良いことが分かった。

以上の数値計算の結果から、上部モデレータは厚さ(A)=2~3cm の W、ポリエチレンの厚さ(B)=4~6cm であれば、レーザー駆動中性子源（入射中性子エネルギー10MeV 以上）を用いた NRТА のモデレータとして適していると考えられる。

本研究は、文科省核セキュリティ補助金を受けて行った成果である。

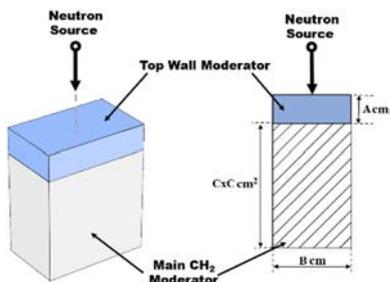


図 1 モデレータの概念図

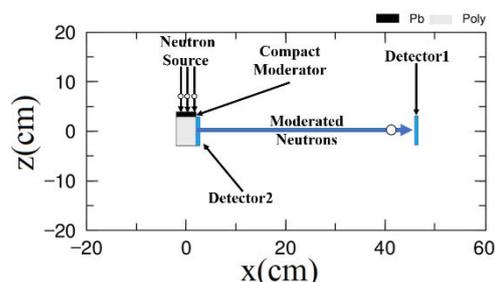


図 2 計算体系の概要図

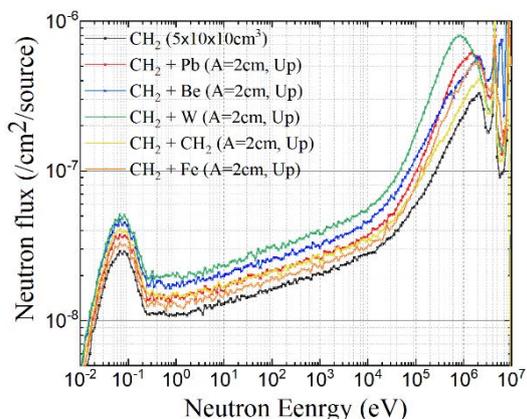


図 3 様々な上部モデレータによる中性子束の変化 (厚さ(A)=2 cm)

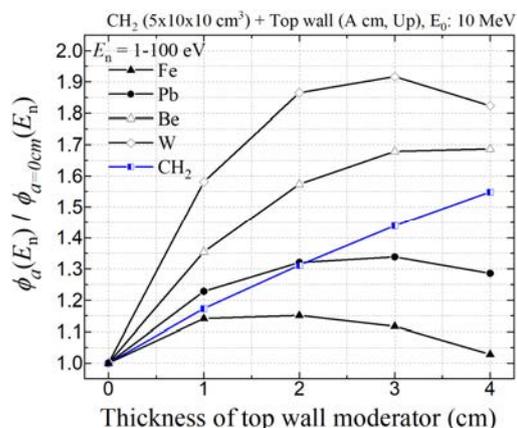


図 4 中性子束の相対強度 (1-100 eV)。強度は上部モデレータがない時の強度と比較した。

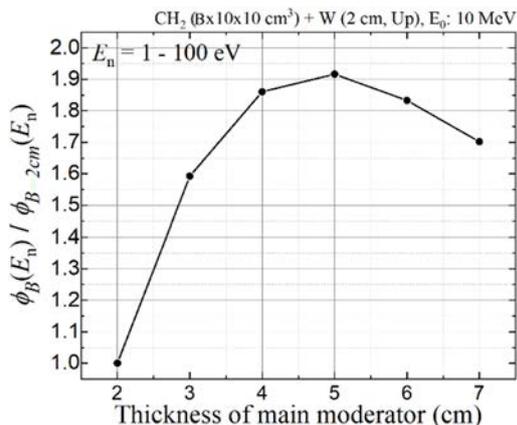


図5 中性子束の相対強度 (1-100 eV)。強度は厚さ(B)=2 cm の強度と比較した。

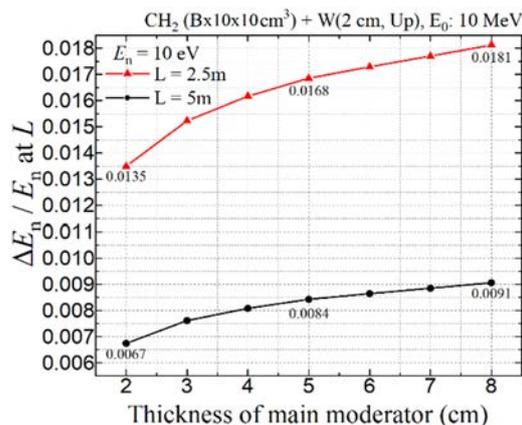


図6 様々な厚さのポリエチレンモデレータによるエネルギー分解能の変化 (10 eV)

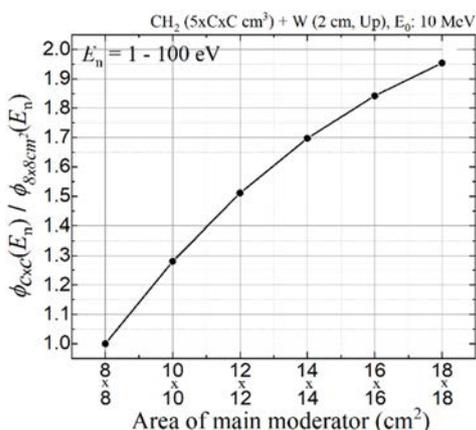


図7 中性子束の相対強度 (1-100 eV)。強度は断面積=8x8 cm<sup>2</sup> の強度と比較した。

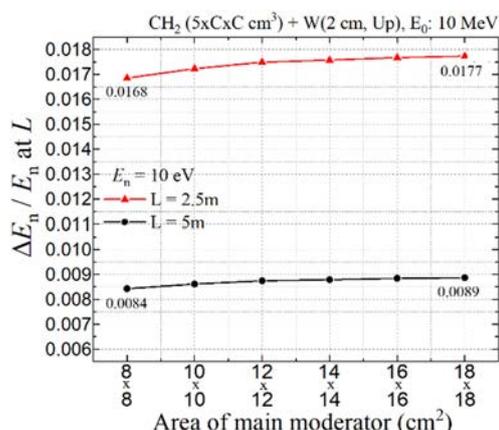


図8 様々な断面のポリエチレンモデレータによるエネルギー分解能の変化 (10 eV)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 李在洪、伊藤史哲、小泉光生、高橋時音、鈴木敏、“レーザー駆動中性子源を用いた核共鳴透過分析技術開発：1)モデレータの開発”、日本原子力学会 2020 年秋の大会、福岡 (オンライン開催)、2020.

(4) 今後の利用予定:

モデレータによって熱中性子まで減速された高速中性子は、モデレータ中の水素に吸収され、2.2 MeV のガンマ線を放出する。その後、放出されたガンマ線は熱外中性子とともに検出器に観測される。その理由で、現在、2.2 MeV のガンマ線の影響を確認することが重要な課題となっており、スパコンを利用して、モデレータによる 2.2 MeV ガンマ線の時間分布を評価する予定である。

## 5.13 システム計算科学センター

### Center for Computational Science & e-Systems

---

#### 5.13.1 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:

本申請では、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が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、主たる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。以下に二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）:

福島第一原発の事故以後、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なる。本研究課題では、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る、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。本研究では、2015年に最も高い超伝導転移温度（約205K）を示した $\text{H}_2\text{S}$ に着目する。 $\text{H}_2\text{S}$ は転移温度こそ極めて高いが、その実現には高压条件を必要としており、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、高压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、トヨタを始めとする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 $\text{Li}^6$ 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 $\text{Li}^6$ と $\text{Li}^7$ 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、 $\text{Li}^6$ のみであり、 $\text{Li}^6$ 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 $\text{Li}^6$ 確保のため、海水等から $\text{Li}^6$ 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）：

トリチウムの分離に当たり、重要となる科学的知見は、水中での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ことで得られる。この目的のためには、核量子効果を考慮する計算

科学手法が必須となる。本研究課題では、水とその同位体（重水素、トリチウム）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の対象となっている。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、本研究課題では、当該効果に係る新たな知見の取得に成功した。

- ① Y. L. Chang, T. Sasaki, J. Ribas-Ariño, M. Machida, M. Shiga, “Understanding Competition of Polyalcohol Dehydration Reactions in Hot Water”, J. Phys. Chem. B, Vol.123, Issue 7, 2019, pp.1662-1671.
- ② M. Machida, K. Kato, M. Shiga, “Nuclear quantum effects of light and heavy water studied by all-electron first principles path integral simulations”, J. Chem. Phys. Vol.148, Issue 10, 2018, pp.102324\_1-102324\_11.

#### 固体相（超伝導体、イオン伝導体）：

##### 1) 超伝導体：

本研究では、2015年に最も高い超伝導転移温度（約205K）を示した $\text{H}_2\text{S}$ 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、その転移が凡そ量子相転移となることが分かった。

##### 2) イオン伝導体：

本研究では、Liイオン伝導体として最も基本となる $\text{Li}_2\text{O}$ 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)：

- 1) H. Suno, M. Machida, “Quantum Chemical Calculations for the Norbadione A complexes with  $\text{Cs}^+$ ,  $\text{K}^+$ , and  $\text{Na}^+$  in gas and aqueous phases”, Chem. Phys. Lett. Vol.730, 2019, pp.26-31.
- 2) Y. L. Chang, T. Sasaki, J. Ribas-Ariño, M. Machida, M. Shiga, “Understanding Competition of Polyalcohol Dehydration Reactions in Hot Water”, J. Phys. Chem. B. Vol.123, Issue 7, 2019, pp.1662-1671.

#### (4) 今後の利用予定：

2020年度も大型計算機（スパコン）を利用し、上記課題について、引き続きシミュレーション研究を実施する。特に、液体相の研究について進展を加速させたい。また、Liイオン伝導体についても、研究対象となる物性が酸化物核燃料物質が示す高温での特異な振る舞いと深く関連することから、研究を進展させることを目標とする。

## 5.13.2 コンピュータシミュレーションを使用した超伝導中性子検出器の動作の分析

### Analyzing the Workings of a Superconducting Neutron Detector using Computer Simulations

Alex Malins、町田 昌彦、The Dang Vu<sup>+</sup>、相澤 一也<sup>+</sup>、石田 武和\*  
 シミュレーション技術開発室  
 + J-PARC センター  
 \* 大阪府立大学

#### (1) 利用目的:

Neutron beams penetrate deeply into matter, which means neutron microscopes can be used to create images of the insides of objects. The current-biased kinetic inductance detector (CB-KID) is a neutron microscope that is being developed in Japan by Osaka Prefecture University, JAEA and J-PARC. To gain insights into how CB-KID operates at the microscopic level and as to how its design could be improved, JAEA created a computational model of CB-KID for the Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS). JAEA's ICEX supercomputer was used for simulating the trajectories and nuclear reactions of radiation particles within the detector. From this we could understand various properties of the detector.

#### (2) 利用内容・結果:

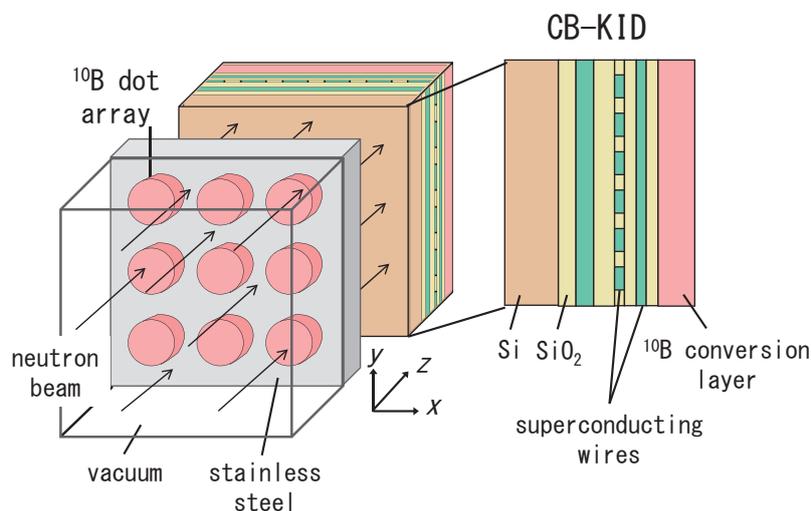


Figure 1. Diagram showing the model of CB-KID created in PHITS and a test sample of  $^{10}\text{B}$  dots.

Fig. 1 shows the CB-KID model created in PHITS. The model contains representations of the important structures in CB-KID for neutron detection. These are the  $^{10}\text{B}$  conversion layer where neutrons are converted into  $^4\text{He}$  and  $^7\text{Li}$  charged particles, and the

superconducting wires where charged particles are detected. Neutron positions are calculated based on these charged particle detection events.

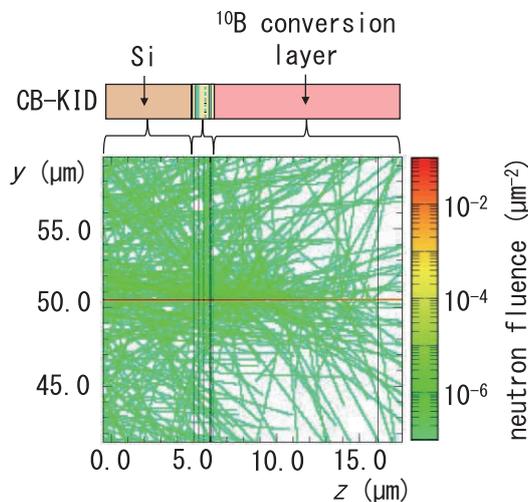


Figure 2. Neutron fluence (number of neutrons per unit area) when a focused neutron beam (red line) is simulated incident on the CB-KID model. Green lines show trajectories of scattered neutrons.

Fig. 2 shows an example of the PHITS simulation results when the CB-KID model was irradiated with a focused neutron beam (red line). The green lines show the trajectories of neutrons that have scattered within the detector. The simulations showed that only  $^4\text{He}$  and  $^7\text{Li}$  charged particles created within the  $^{10}\text{B}$  conversion layer could lead to detectable signals in CB-KID. This means that  $^4\text{He}$  and  $^7\text{Li}$  charged particles created within samples do not contribute noise to neutron microscope images taken with CB-KID. Moreover, the calculations showed gamma rays liberated from neutron- $^{10}\text{B}$  reactions also do not contribute significantly to detection noise in neutron transmission images.

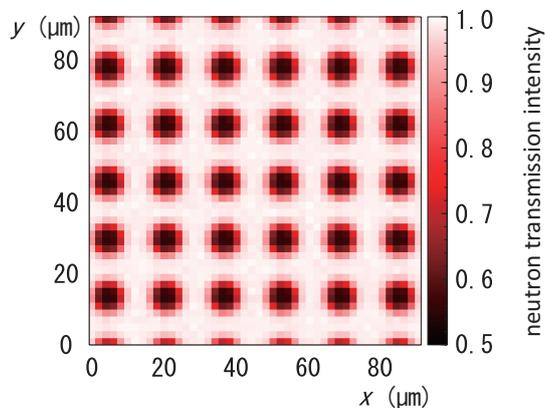


Figure 3. Simulated neutron transmission image of the  $^{10}\text{B}$  dot array shown in Fig. 1.

The computing power of ICEX meant tens of millions of neutron trajectories could be simulated. This enabled the creation of simulated neutron transmission images with CB-KID. An example of this is shown in Fig. 3, which shows a simulated neutron transmission image of a sample containing 6  $\mu\text{m}$   $^{10}\text{B}$  dots. From this image we could understand that sub 10  $\mu\text{m}$  imaging should be feasible with the current CB-KID design.

The model was also used to calculate the detection efficiency of CB-KID as a function of incident neutron wavelength. The calculated detection efficiencies were quite low for thermal neutrons, so it is desirable to find improved designs for the system which will make CB-KID a practical neutron microscope for scientific applications.

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) A Malins, M Machida, TD Vu, K Aizawa, T Ishida, “Monte Carlo radiation transport modelling of the current-biased kinetic inductance detector”, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, Vol.953, 2020, pp.163130\_1-163130\_7, <https://doi.org/10.1016/j.nima.2019.163130>.

**(4) 今後の利用予定:**

We plan to use ICEX to try out new designs for CB-KID with the goals of improving

1. the detection efficiency of the system,
2. the spatial resolution of neutron transmission images taken with CB-KID.

It should be possible to achieve these goals by stacking multiple CB-KID detectors together. As the cost of fabricating CB-KID devices using new designs is high, we will use ICEX to evaluate multiple design options in simulation first and find the best design parameters. This will convey a substantial cost saving and accelerate the development of CB-KID.

### 5.13.3 原子力分野での物性計算科学技術の高度化

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

永井 佑紀、山田 進、町田 昌彦  
シミュレーション技術開発室

##### (1) 利用目的:

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、規模シミュレーション課題枠を利用し、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:

ICE X 向けに開発してきた固有値問題の高速解法である縮約シフト共役勾配法（RSCG法）を大規模並列計算用のチューニングを終え、様々な問題に関して適用し成果を上げている。例えば、銅酸化物高温超伝導体のナノ構造に対する自己無撞着超伝導秩序変数計算を実施し、低温領域に時間反転対称性の破れた新奇な超伝導相が存在することを明らかにした。この新しい超伝導秩序相では高温超伝導体の表面に存在していた電子束縛状態が消失しており、高温超伝導体の多結晶体における超伝導臨界電流の上昇が期待できることがわかった。

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

さらに、新しいアルゴリズムを用いた超高速シミュレーション手法「LK-BdG法」の開発に成功し、計算のオーダーの次数を一つ下げることに成功した。

また大規模並列を想定したハバードモデル用の固有値計算ルーチンを開発した。この固有値計算では行列とベクトルを何度も掛けて固有値および固有ベクトルを求める反復法であり、大規模並列計算ではこの掛け算の通信コストが一番問題になるため、行列の形状を考慮して通信を削減する方法を提案しその効果を確認した。さらに、アルゴリズムを見直し、キャッシュメモリを有効に利用できるように計算をまとめることで、高速化を実現している。

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

## 査読付き論文発表

- 1) Y. Nagai, H. Shinaoka, “Smooth Self-energy in the Exact-diagonalization-based Dynamical Mean-field Theory: Intermediate-representation Filtering Approach”, J. Phys. Soc. Jpn., Vol.88, 2019, pp.064004\_1-064004\_5.
- 2) K. Iida, Y. Nagai, S. Ishida, M. Ishikado, N. Murai, A. D. Christianson, H. Yoshida, Y. Inamura, H. Nakamura, A. Nakao, K. Munakata, D. Kagerbauer, M. Eisterer, K. Kawashima, Y. Yoshida, H. Eisaki, A. Iyo, “Coexisting spin resonance and long-range magnetic order of Eu in EuRbFe<sub>4</sub>As<sub>4</sub>”, Phys. Rev. B, Vol.100, 2019, 014506.
- 3) T. Matsushita, Y. Nagai, S. Fujimoto, “Disorder-induced exceptional and hybrid rings in Weyl/Dirac semimetals”, Phys. Rev. B, Vol.100, 2019, p.245205\_1-245205\_9.
- 4) Y. Nagai, “N-independent Localized Krylov Bogoliubov-de Gennes Method: Ultra-fast Numerical Approach to Large-scale Inhomogeneous Superconductors”, J. Phys. Soc. Jpn., Vol.89, 2020, pp.074703\_1-074703\_6.
- 5) M. Kheirkhah, Y. Nagai, C. Chen, F. Marsiglio, “Majorana corner flat bands in two-dimensional second-order topological superconductors”, Phys. Rev. B., Vol.101, 2020, pp.104502\_1-104502\_9.
- 6) Y. Nagai, M. Okumura, K. Kobayashi, M. Shiga, “Self-learning Hybrid Monte Carlo: A First-principles Approach”, Phys. Rev. B, Vol.102, 2020, 041124.

## 国際会議招待講演

- 7) Y. Nagai, M. Okumura, A. Tanaka, “Self-learning Monte Carlo method; Speedup of the Markov chain Monte Carlo with machine learning”, Quantum Engineering meets Harmonic Analysis, Saskatoon, Canada, August 2019.
- 8) Y. Nagai, “Non hermitian physics in strongly correlated electron systems”, 3rd EPiQS-TMS alliance workshop on Topological Phenomena in Quantum Materials (TPQM 2019), Santa Barbara, U.S.A., October 2019.
- 9) Y. Nagai, “Non-Hermitian effective Hamiltonian for low-energy quasiparticles”, International Conference on Topological Materials Science 2019 (TopoMat2019), Kyoto, Japan, December 2019.

## 書籍

- 10) 長谷川秀彦、今村俊幸、山田進、櫻井鉄也、荻田武史、相島健介、木村欣司、中村佳正、“3章 疎行列の固有値計算”、固有値計算と特異値計算 (計算力学レクチャーコース)、日本計算工学会 (編)、丸善出版、2019年、pp.77-104.
- 11) 橋本幸士、大槻東巳、真野智裕、斎藤弘樹、藤田浩之、安藤康伸、永井佑紀、他、“5章 自己学習モンテカルロ法”、物理学者、機械学習を使う —機械学習・深層学習の物理学への応用—、橋本幸士 (編)、朝倉書店、2019年、pp.74-86.

**(4) 今後の利用予定:**

スーパーコンピュータのリプレースに伴い計算機構成が変更されるため、より計算機の状況にあったアルゴリズムとコーディングを模索する。そして、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予定である。

### 5.13.4 環境中の放射性物質の挙動に関する数値シミュレーション

#### Numerical Simulations 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:

古典分子動力学法と第一原理分子動力学法（密度汎関数法）は有限温度における物理量を評価する際に最も良く用いられている原子・分子スケールシミュレーション手法である。前者は原子（イオン）を古典力学的な粒子とみなし、粒子間力を単純化したポテンシャル（Lennard-JonesポテンシャルやCoulombポテンシャル）によって記述するシミュレーション手法であり、計算コストが低いのが特徴である。しかし、良いポテンシャルパラメーターを見つけるためには膨大な試行錯誤と経験が必要とされており、未知の物質について精度よく物理量を評価することは難しい。一方、後者は、原子核を古典力学的な粒子とみなすが電子を量子力学的に記述する手法であり、一般に経験的パラメーターは含まれないが、計算コストが高いため大きな系や長時間のシミュレーション実行が難しく、有限サイズ効果を取り除いたり統計量を稼いだりするのが困難である。つまり、実験が困難な放射性物質や未知の物質について有限温度の物理量を評価可能なシミュレーション手法は存在しないと云える（表1）。

表1 分子動力学法の比較

	経験的パラメーター	計算コスト
古典分子動力学法	有	低
第一原理分子動力学法	無	高
機械学習分子動力学法	無	低

このように、しばらく有限温度の物理量を評価する決定的な手法がない状況が続いたが、2007年に機械学習分子動力学法が提案され（J. Behler and M. Parrinello, Phys. Rev. Lett. 98, 146404 (2007)）、状況が変わりつつある。この手法は、第一原理計算によって得られた「原子分布と系全体のエネルギーの組み」を多数用意して学習データセットとし、人工ニューラルネットワークによって全エネルギーを個々の構成原子に付随した部分エネルギーに分配する（図1）。この部分エネルギーの振り分けには「部分エネルギーはそれが付随する原子の周辺環境（周辺原子の配置）によって決まる」という仮定が用いられている。よって、第一原理計算で扱える系よりも大きな系を考える際に、大きな系の局所的な原子配置が学習データセットに含まれる局所原子配置と十分に近ければ、良く訓練された人工ニューラルネットワークはその部分エネルギーを良い精度で予言可能である（図1）。そして、人工ニューラルネットワークによって得られた部分エネルギーの和をとることで大きな系の全エネルギーを得ることができる。得られた全エネルギーを原子位置で微分することによって原子にかかる力が得られ、その結果、大きな系における分子動力学が実行可能となる。

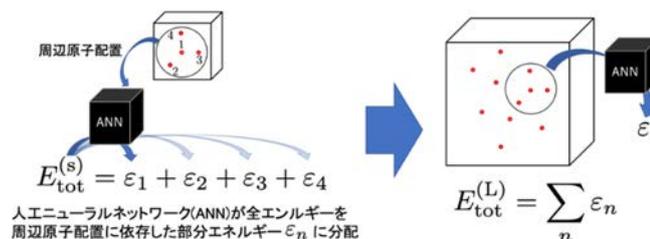


図1 機械学習分子動力学法概略

この部分エネルギーの振り分けには「部分エネルギーはそれが付随する原子の周辺環境（周辺原子の配置）によって決まる」という仮定が用いられている。よって、第一原理計算で扱える系よりも大きな系を考える際に、大きな系の局所的な原子配置が学習データセットに含まれる局所原子配置と十分に近ければ、良く訓練された人工ニューラルネットワークはその部分エネルギーを良い精度で予言可能である（図1）。そして、人工ニューラルネットワークによって得られた部分エネルギーの和をとることで大きな系の全エネルギーを得ることができる。得られた全エネルギーを原子位置で微分することによって原子にかかる力が得られ、その結果、大きな系における分子動力学が実行可能となる。

この手法は、第一原理計算の結果を学習データセットとしているため、経験的パラメーターは含まれていない（表 1）。また、一度よく訓練された人工ニューラルネットワークが得られれば、第一原理計算を実行せずに部分エネルギー及び全エネルギーを計算可能であるため、計算コストも低い（表 1）。つまり、機械学習分子動力学法は実験が困難な放射性物質や未知の物質を含めたあらゆる物質について有限温度の物理量を評価可能なシミュレーション手法である可能性を有している。しかし、この手法は手法自体が発展途上であり、まだ適用例も少ない。さらに、近年、機械学習分子動力学コードが盛んに開発されているが、有用な機能が全て実装されているコードは存在せず、ユーザーの立場からは、不満足な状態が続いている。

このような背景を鑑み、本研究では、1) 機械学習分子動力学コード開発、2) 放射性物質等の物性解明、3) 運用上のノウハウ蓄積、を目的として研究を実施する。

## (2) 利用内容・結果:

### 1.1 機械学習分子動力学法によるコンクリートの物性評価

機械学習分子動力学法では、原子配置を表す“記述子”と呼ばれる量をニューラルネットの入力とし、系のエネルギーを出力とする。この記述子は、2 原子間距離及び 3 原子のなす角度を複数の値で表すものであり、精度の良い計算

のためには 2 原子及び 3 原子の組について原子種を区別する必要がある。通常は、この原子種を区別する記述子を用いるため、機械学習分子動力学法は原子種を多く含む系には適用が難しいとされていた。現在、機械学習分子動力学法の適用対象となる系は主に 1~3 原子系である。

本研究では、福島第一原子力発電所廃炉作業に関連して、放射性セシウムによって汚染されているコンクリートの除染を目的とした、コンクリートの放射性セシウム吸着反応の機構解明を目的として研究を行った。まず、最初の段階として、コンクリート内の固体部分の代表的構造としてよく用いられる“トベモライト”を対象として機械学習ポテンシャルを構築し、分子動力学計算を行った。トベモライトは、Ca、Si、H、O という 4 原子種を含むため、機械学習分子動力学法では扱いづらい系である。さらに、本研究では、通例で 9Å、11Å、14Å と呼ばれる異なるトベモライト構造を研究対象とした（図 2）。これらは、結晶構造が大きいほど水分子を多く含んでいる（水分子の量：14Å>11Å>9Å）。本研究ではこれらの構造についてユニットセルの変形や原子位置の変位を考慮した構造を用意し、第一原理計算を用いて学習データとしての機械学習ポテンシャルを用いて各種物性値を評価したところ、第一原理計算及び実験値と非常によく一致した。その中でも、実験値及び他の分子動力学力場との比較が可能な体積弾性率について表 2 にまとめた。まず、機械学習ポテンシャルは第一原理計算及び実験値をよく再現していることがわかる。一方で、古典力場（IFF、CementFF、C-S-H FF）も実験値をよく再現していることがわかる。一方で、我々の機械学習ポテンシャルを用いた計算で、トベモライト表面のヒドロキシル基から水素イオン（プロトン）が脱離し、水分子との間でプロトンホッピングが起こることが示唆されており、このプロセスはトベモライトへのイオン吸着に大きな影響を与える可能性があるが、古典力場ではこのプロセスを記述することはできない。表 1 に示した ReaxFF は反応分子

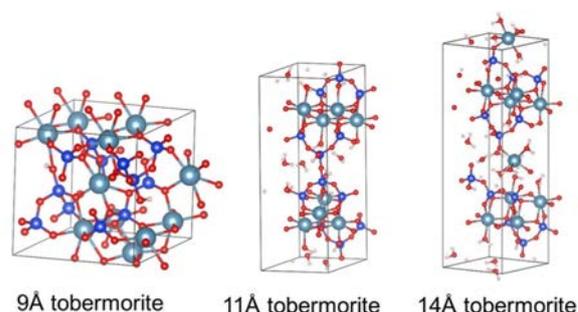


図 2 トベモライトの構造

動力学法であるためこのプロセスを記述可能であるが、表 2 に示した 11Å の体積弾性率を見ると実験値との乖離が大きいことがわかる。従って、現時点では、トベモライト表面におけるプロトン脱離/結合プロセスを記述でき、かつ実験値をよく再現する手法としては機械学習分子動力学法が唯一の方法であることがわかった。

表 2 体積弾性率の比較

	ML	Exp	DFT	IFF	CementFF	C-S-H FF	ReaxFF
11Å	65	69±5	69	71	75	60	103
14Å	51	47±3	48	44	45	42	44

ML が機械学習、DFT が第一原理計算、Exp が実験値、その他は力場の名称  
 \*ML、DFT 以外は R.K. Mishra *et al.*, Cement and Concrete Research 102, 68-89 (2017). を参照

### 1.2 機械学習分子動力学法による二酸化トリウムの高温度物性評価

二酸化トリウムは熱膨張率が低く、融点及び熱伝導率が高いため、次世代の核燃料として期待されている。しかし、その高温物性の全容は不明である。高温物性評価には数値シミュレーションが有効であると考えられるが、古典分子動力学法を用いるには精度の良い力場が必要である一方で、力場が必要ない第一原理分子動力学計算は計算コストが高いため、有限サイズ効果に悩まされる。そこで、本研究では、第一原理計算の精度を維持したまま大きな系の計算が可能な機械学習分子動力学法を用いて、二酸化トリウムの高温度物性を評価した。

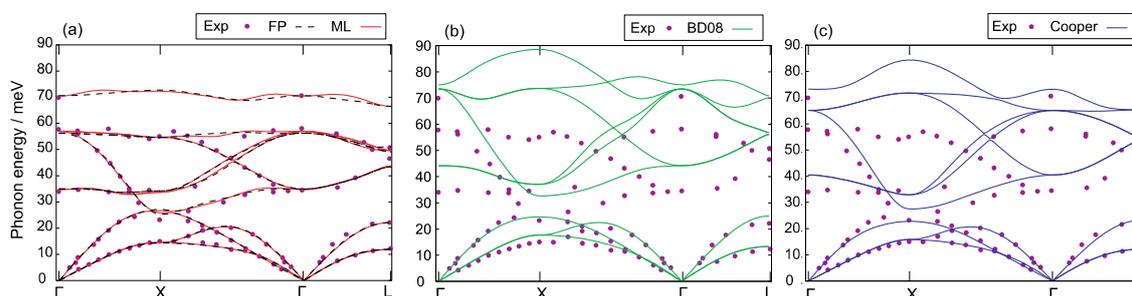


図 3 フォノンの比較

(a) 機械学習ポテンシャル、(b) 古典力場 (BD08<sup>\*1</sup>)、(c) 古典力場 (Cooper<sup>\*2</sup>)  
 \*1 J. Phys. Cond. Mat. 24, 215405 (2012). \*2 J. Phys. Cond. Mat. 26, 105401 (2014).

本研究では、まず、フォノンに着目し、古典力場との比較を行った (図 3)。その結果、エネルギーが高い高額モードについて、古典力場が実験値を再現できない一方で、機械学習ポテンシャルは実験値をよく再現することがわかった。次に、融点よりも下の温度で比熱に異常が現れる “Bredig 転移” に着目した。機械学習分子動力学法と古典分子動力学法で評価した定圧モル比熱を図 4 に示す。図 4 から、Bredig 転移の転移温度は 3090K と見積もられ、実験値 2090-3090K とよく一致している。さらに、この比熱異常の原因を明らかにするために、酸素原子の拡散定数を評価した (図 5)。その結果、比熱異常が現れる 3090K で拡散定数の振る舞いに変化することがわかった。これは、この比熱異常が酸素移動の変化が原因であることを明確に示しており、既存の研究の主張である「比熱異常は超イオン転移である」ことを支持する結果である。

この計算は、二酸化トリウムに機械学習分子動力学法を適用した最初の例であり、申請者が知る限り、機械学習分子動力学法を用いた比熱評価から物性評価を行った最初の計算例である。

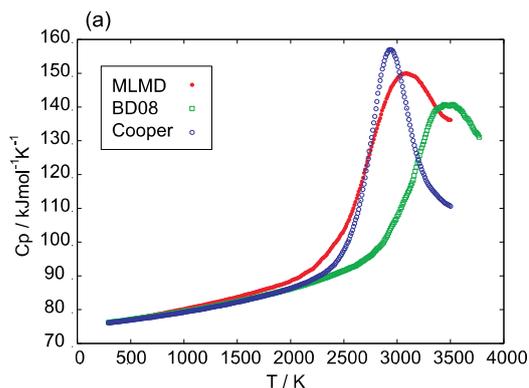


図 4 定圧モル比熱

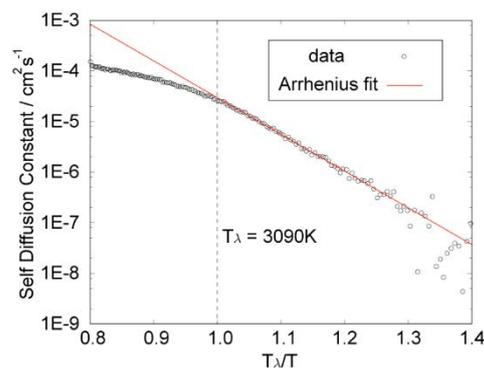


図 5 拡散定数

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 国際会議

- 1) M. Okumura, S. Kerisit, I.C. Bourg, L.N. Lammers, T. Ikeda, M. Sassi, K.M. Rosso, M. Machida, “Addressing Radiocesium Contamination in Fukushima Waste Soil Through the Lends of Systematic Numerical Simulations”, 17th International Conference on the Chemistry and Migration Behavior of Actinides and Fission Products in the Geosphere (Migration 2019), Uji, Japan, September 2019.
- 2) M. Okumura, K. Kobayashi, H. Nakamura, M. Itakura, M. Machida, “AI-Based Advanced MD Simulations for Nuclear Fuel Analysis”, 1st CEA-JAEA Collaboration Workshop on Computational Nuclear Engineering, Kashiwa, Japan, October 2019.

#### 国内学会・研究会

- 3) 奥村雅彦、小林恵太、山口瑛子、“粘土鉱物の機械学習力場の開発”、日本原子力学会 2020 年春の年会、2020.
- 4) 奥村雅彦、“機械学習分子動力学法による二酸化トリウムの高温度物性評価”、第 1 回 AI 研究会、東海村、2019.
- 5) 奥村雅彦、小林恵太、中村博樹、板倉充洋、町田昌彦、“二酸化トリウムの機械学習分子動力学シミュレーション”、日本原子力学会 2019 年秋の大会、富山、2019.

### (4) 今後の利用予定:

今後も、大型計算機を用いて、機械学習分子動力学法について、1) コード開発、2) 応用の両面から研究開発を進めていく予定である。1) 開発については、現在開発中の機械学習分子動力学コードの開発を進め、令和 2 年度末の公開を目指している。大量の学習データを用いた大規模な学習のために大型計算機を利用する必要があり、コードの動作確認やテスト計算に利用する予定である。2) 応用については、これまで二酸化トリウムとコンクリートに注目して計算を行ってきたが、今後は、環境中物質や生体分子等、研究対象を拡充していく予定である。その際、大規模第一原理計算による大量の学習データの作成、学習及び大規模分子動力学計算に大型計算機を使用する予定である。また、新しく導入される大規模計算機は GPU を多く搭載しているため、現在開発中のコードの GPU 対応にも力を入れていく予定である。

### 5.13.5 不純物元素の粒界偏析に関する分子動力学シミュレーション

#### Molecular Dynamics Simulation for Grain Boundary Segregation of Solute Atoms

海老原 健一

シミュレーション技術開発室

##### (1) 利用目的:

鉄鋼材料において、ある種の元素は粒界に偏析し粒界強度を弱めることで脆化を引き起こす。リン(P)はそのような元素の1つであり、その粒界偏析は熱や照射によって促進されることから、原子炉圧力容器などの原子力材料の経年劣化に影響すると考えられる。そのため、異なる温度や照射量に対する粒界P偏析量の評価が重要となる。このことから、申請者は、これまで照射誘起粒界P偏析を計算する拡散レート方程式コードを原子素過程に基づいて開発してきた。しかし、粒界でのP原子のトラップ及びデトラップの機構が明確でないことから、実験で得られるP被覆率を計算コードで評価することができず、便宜的な方法で計算結果と実験値を比較していた。近年、分子動力学シミュレーションを用いて得られた知見に基づき、リンの粒界でのトラップ機構をモデル化し計算コードに取り入れることが可能となった。しかし、デトラップ機構についてはまだ明確にはなっておらず、計算コードでは簡易的なモデルを用いている。よって、デトラップ機構を適切にモデル化し、コードに組み込むためには、分子動力学シミュレーションによるP原子の粒界からのデトラップ機構を考察する必要がある。

この結果が得られることで、原子レベルの考察に基づいた精緻な拡散偏析過程を組み入れた計算コードを作成することが可能となり、原子レベル計算からのボトムアップ的なマルチスケール計算の可能性を示すとともに、粒界リン偏析過程に対する他の要因を浮き彫りにすることが可能と考える。

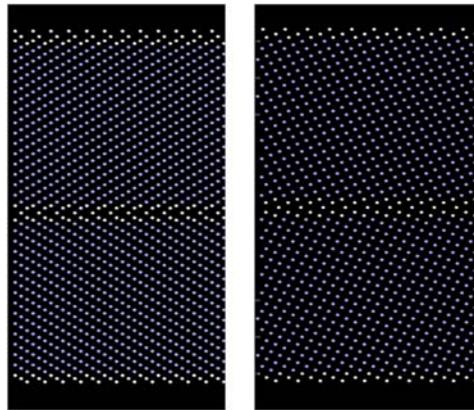
粒界エネルギー及び粒界体積が共に近い値であり比較的大きい二種類のbcc鉄 $\Sigma 3(111)$ 及び $\Sigma 5(0-13)$ の対称傾角粒界内の鉄原子の動き及びその中の安定偏析サイトに置いたリン原子の移動についてLAMMPSを用いてシミュレーションする。このようなシミュレーションでは、熱活性化過程に基づく原子の移動を観察するため、比較的大きな時間ステップでの計算が必要であることから、大型計算機を利用した。

##### (2) 利用内容・結果:

分子動力学シミュレーションによって、粒界エネルギーや粒界体積が共に近い値であり比較的大きなbcc鉄 $\Sigma 3(111)$ 及び $\Sigma 5(0-13)$ の対称傾角粒界領域中(図1)での鉄原子の動きについて考察した。また、各粒界中の安定サイト(偏析サイト)に置いたP原子の挙動について考察した。この結果、 $\Sigma 3$ 粒界中の鉄原子は、600K以上の温度で粒界内を移動するが、 $\Sigma 5$ では、800Kまでほぼ動かないことが分かった。しかし、1つの空孔を加えることで、 $\Sigma 3$ ほどではないが、移動が顕著になった。一方、 $\Sigma 3$ では空孔の影響がほとんど見られなかった。P原子の移動について、 $\Sigma 3$ では、800Kにおいて空孔の有無に係わらず顕著に粒界内と移動するが、 $\Sigma 5$ では、空

孔がある場合のみ顕著に移動することが分かった。また、800Kより低い温度ではあまり顕著な移動が見られなかった。

以上の得られた結果より、リンは、 $\Sigma 3$ において、鉄原子間の隙間サイトを移動し、 $\Sigma 5$ では、主に空子を介して移動すると考えられる。



(a) (b)

図1 (a)  $\Sigma 3(111)$  及び(b)  $\Sigma 5(0-13)$ 対称傾角粒界

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) K. Ebihara, T. Suzudo, “Molecular dynamics simulations of phosphorus migration in a grain boundary of  $\alpha$ -iron”, TMS 2020; 149th Annual Meeting & Exhibition Supplemental Proceedings (TMS 2020), Sun Diego, U.S.A., February 2020, pp.995 -1002, [https://doi.org/10.1007/978-3-030-36296-6\\_93](https://doi.org/10.1007/978-3-030-36296-6_93).
- 2) 海老原健一、鈴木知明、“分子動力学シミュレーションによる BCC 鉄  $\Sigma 3$  (111) 粒界及び  $\Sigma 5$  (0-13) 粒界中のリンの移動に関する考察、令和元年度材料照射研究会「Irradiation 3.0 に向けて」、仙台、2020、pp.196-202.
- 3) 海老原健一、鈴木知明、“粒界領域中におけるリン移動の分子動力学シミュレーション”、日本金属学会 2019 年秋期 (第 165 回) 講演大会、No.214、岡山、2019、<https://confit.atlas.jp/guide/event/jim2019autumn/top>.
- 4) K. Ebihara, T. Suzudo, “Rate theory model of phosphorus grain boundary segregation considering atomistic processes”, 5th International Workshop on Structural Materials for Innovative Nuclear Systems (SMINS-5), Kyoto, Japan, July 2019.

### (4) 今後の利用予定:

今後、粒界内における移動の定量的評価に対して利用することを検討している。

### 5.13.6 粘土鉱物へのラジウムの吸着構造の解明

#### Investigation of Adsorption Structure of Radium on Clay Minerals

山口 瑛子、奥村 雅彦  
シミュレーション技術開発室

##### (1) 利用目的:

ラジウム (Ra) はウランやトリウムの放射壊変により生成する放射性元素であるため、ウラン鉱山周辺の環境汚染問題や核廃棄物の処理問題の解決にあたり、Ra の環境動態の解明は必須である。近年、非人工的な天然環境でも基準値を超える量の Ra が存在することが報告されていることから、Ra の環境動態解明の重要性はさらに高まっている。しかし、Ra に安定同位体が存在せず、一定量あたりの放射能が高いこと、さらに子孫核種のラドンが希ガスのため内部被ばくを引き起こす要因となるといった、Ra の危険性の高さから実験の遂行が難しく、未解明な点が多い。しかし上記のような重要性から、近年、環境中の Ra に関する研究報告例は増加しており、マクロな系での吸着実験や子孫核種の同位体比を用いた分析の結果から、環境中の Ra が粘土鉱物に吸着して固定されることが示唆されている。Ra はアルカリ土類金属であるため環境中で+2価で存在し、移行性が高いと考えられてきたことから、Ra が粘土鉱物に固定されうるといふことは重要かつ新しい知見であり、より詳細に検証すべき知見である。

一方で粘土鉱物は地球表層に広く存在し、陽イオン吸着容量が高いことから、多くのイオンの環境挙動を支配することが知られており、放射性廃棄物の地層処分にも使用される。しかし、粘土鉱物の吸着能は吸着イオンによって異なり、その原因は吸着構造の違い、特に吸着時の水和状態にあることが報告されている。例えば、2011年の福島第一原子力発電所の事故で着目された元素にセシウム (Cs) とストロンチウム (Sr) があるが、両者は正反対の吸着構造を形成し、その結果環境動態も異なることが報告されている。セシウム (Cs) は粘土鉱物に対して脱水和して吸着するため、吸着力が強く、その結果 Cs は土壌表層に残留しやすい。一方で、ストロンチウム (Sr) は水和して吸着するため、吸着力が弱く、その結果 Sr は土壌表層に残留しにくい。従って粘土鉱物に対する吸着挙動を明らかにするには、それぞれのイオンの吸着構造、特に吸着時の水和状態を解明する必要がある。

Cs や Sr など、多くの陽イオンの粘土鉱物に対する吸着構造の解明は分光学的手法を用いた実験やシミュレーションにより行われてきたが、Ra に関しては、上記の取り扱いの難しさから行われていない。そこで本研究では、シミュレーションを用いて Ra が粘土鉱物に吸着した際の水和状態を解明し、その吸着挙動、ひいては環境中での Ra の挙動を解明することを目的とする。この際、大型計算機を利用することで、単位構造あたりの原子数が多い粘土鉱物や、第七周期で電子数の多い Ra の計算を可能にする。また、陽イオン交換容量が特に高いため環境中での挙動に大きな影響をもたらすと考えられる、バーミキュライトやモンモリロナイトといった、2:1型粘土鉱物と呼ばれる粘土鉱物に着目する。粘土鉱物にイオンが吸着する際には複数の吸着サイトが考えられるが、バーミキュライトやモンモリロナイト等の粘土鉱物の場合は層間サイトの寄与

が大きいと考えられるため、本研究では層間への吸着反応を想定する。また、吸着時の水和状態を詳細かつ精密に解明するため、粘土鉱物が存在しない系での水和構造についてもシミュレーションを実行し、粘土鉱物に吸着した際の水和状態と比較する。

これまでに報告されている実験結果に基づくと、Ra は脱水和して粘土鉱物に吸着し、環境中で粘土鉱物に固定されることが予測される。もし予測通りの結果が得られれば、地球表層に広く存在する粘土鉱物を用いて、環境中の Ra を簡便に固定・除去することが可能であることが示唆され、原子力だけでなく環境化学などの分野でも大きなインパクトを与える。

## (2) 利用内容・結果:

粘土鉱物は、一次鉱物と呼ばれる母岩中の鉱物が、地表で風化されることで主に生成する。その際、同形置換と呼ばれる、鉱物中のイオンを同程度のイオン半径を持つイオンが置換する現象が起こる。例えば、ケイ素(Si)イオンをアルミニウム(Al)イオンが置換する。この同形置換によって、粘土鉱物の層に永久電荷と呼ばれる負電荷が形成され、この負電荷が粘土鉱物の

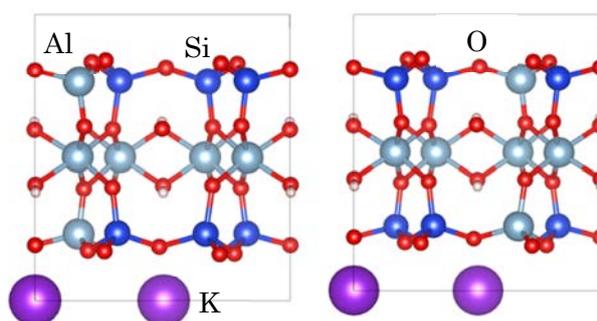


図1 同形置換パターンが異なるモデルの例

最大の特徴である、高い陽イオン吸着能を引き起こす。実際の粘土鉱物に対しては、粘土鉱物全体の元素組成を特定することで、同形置換がどの程度起こっているかは推定することができるが、どの位置の Si 原子が Al に置換されているか、原子レベルで同形置換を調べることは難しい。そのため、同形置換が粘土鉱物にとって重要であると考えられている一方で、原子レベルでの同形置換の違いが粘土鉱物のイオン吸着能に与える影響は評価されてこなかった。そこで今年度の研究では、一定の化学組成を持つ鉱物について、同形置換パターンを変えた 16 種類のモデルを系統的に作成し、それぞれのモデルでの剥離強度を定量的に評価することで、同形置換パターンが吸着能にもたらす影響を調べた。モデルの例を図 1 に示す。この際、モデルは地球上に広く存在する鉱物である muscovite を用い、さらに phlogopite、OH 基を F に置換した muscovite (F-muscovite) と phlogopite (F-phlogopite) についても行った。これらの結果を実験で得られている鉱物間の吸着能の違いと比較し、さらに計算で得られた安定構造について、原子間距離や角度の測定等、詳細な解析を行なった。

剥離強度の計算結果から、実験で得られている鉱物の吸着能の違いが剥離強度の違いと同様に現れることが確認された。また、同形置換パターンが異なると剥離強度が大きく異なることから、異なる同形置換パターンを持つ鉱物の剥離強度を比較した場合、同じ同形置換パターンで比較した場合と反対の結果が得られる場合があることが明らかになった (図 2)。さらに構造解析の結果から、化学組成や同形置換パターンの違いが粘土鉱物の歪みの違いをもたらし、その歪みの違いが剥離強度や吸着能の違いを生み出すということがわかった。これは粘土鉱物の吸着メカニズムを考える上で重要な知見である。

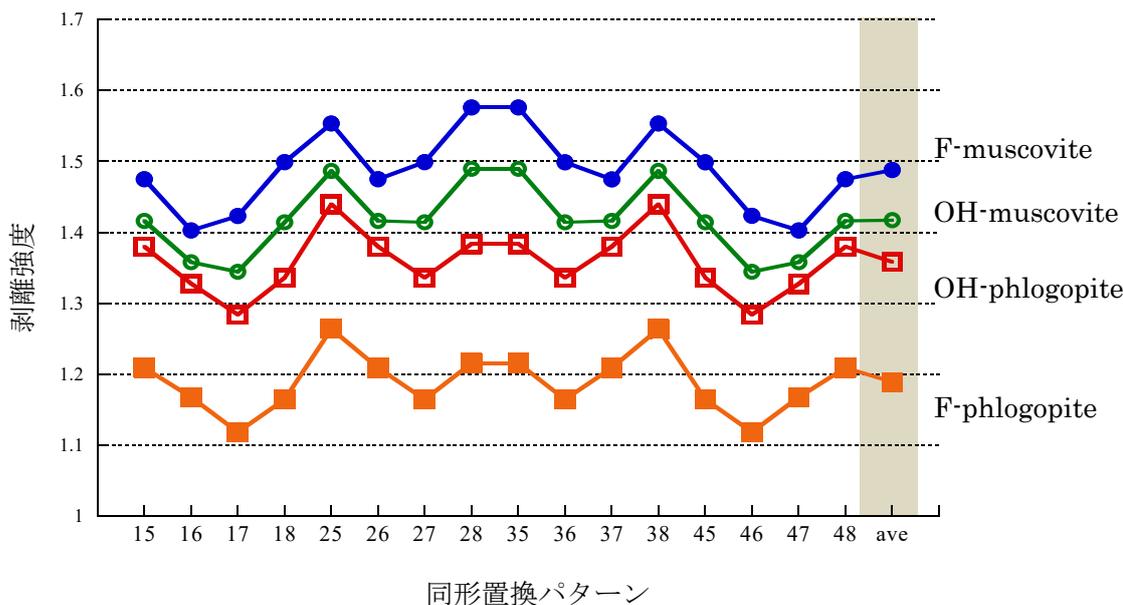


図2 同形置換パターンの違いによる剥離強度の違い  
同形置換パターンの数字は置換した原子のラベル、ave は平均値を示す。

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

国際会議

- 1) A. Yamaguchi, M. Okumura, Y. Takahashi, “Fixation of radium by adsorption on clay minerals based on analyses of core samples around Ningyo-toge uranium mine”, 17th International Conference on the Chemistry and Migration Behavior of Actinides and Fission Products in the Geosphere (Migration 2019), Uji, Japan, September 2019.

受賞 Best poster award

- 2) A. Yamaguchi, “Fixation of radium by adsorption on clay minerals based on analyses of core samples around Ningyo-toge uranium mine”, 17th International Conference on the Chemistry and Migration Behavior of Actinides and Fission Products in the Geosphere (Migration 2019), Uji, Japan, September 2019.

査読付き国際会議論文

- 3) A. Yamaguchi, I. Asano, Y. Kitagawa, C. Meng, A. Nakao, M.Okumura, “Quantitative evaluation of effects of isomorphic substitutions on delamination energies of clay minerals”, Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA+MC2020), Japan, May 2020, No.3292101, pp.127-130.

**(4) 今後の利用予定:**

今年度得られた結果をもとに、適切な粘土鉱物モデルを作成し、粘土鉱物の層間に Ra が存在する系に対してシミュレーションを行う。その際、今年度は考慮しなかった、粘土鉱物の層間中の水も考慮することを目標とする。また、水分子と Ra のシミュレーションも行い、Ra の水和状態解明も行う。両者を比較することで、粘土鉱物に吸着した際の Ra の水和状態を詳細に解明する。

## 5.13.7 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:

システム計算科学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と不純物元素の相互作用に関する計算手法を開発している。今後これまでの軽水炉・核融合炉等の材料に加え ADS ターゲット窓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:

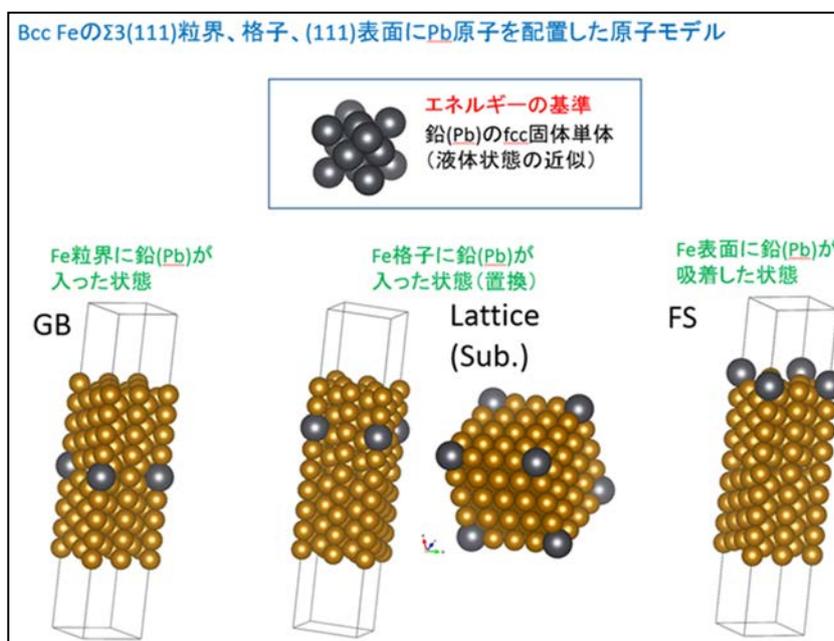


図1 計算モデル

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。すでにアルミと鉄についてはほぼ計算が終了し、脆化に寄与する特徴をつかむことができた。

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。

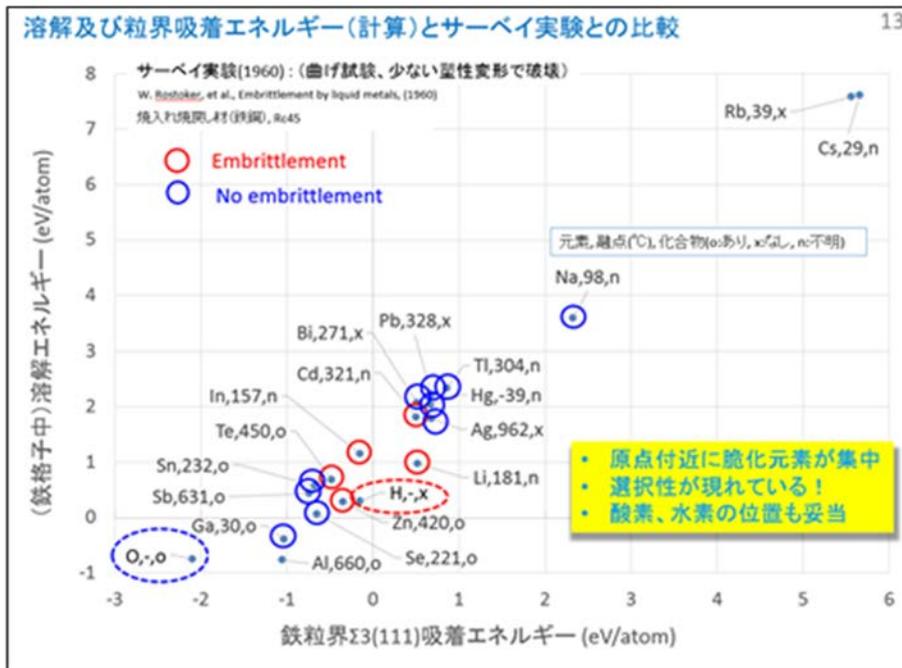


図 2 鉄粒界に対する計算結果

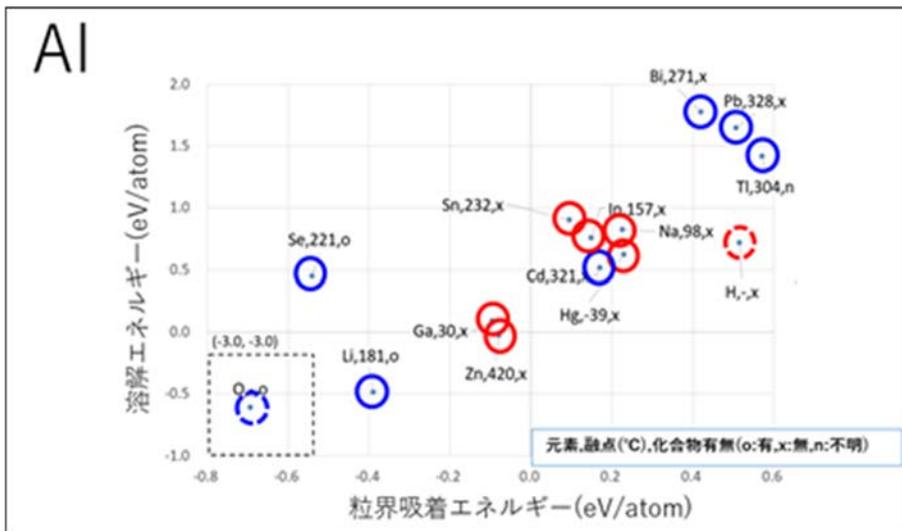


図 3 Al 粒界に対する計算結果

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。

図2、図3はそれぞれ鉄とアルミニウム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したものである。この図中で、実験的に脆化を起こす（Embrittlement）元素は赤○、脆化を起こさない（起こしにくい）（No embrittlement）元素は青○で示している。鉄とアルミニウム双方において、両者がグラフ上ではっきり分かれており、これらのエネルギー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、環境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。恐らくこれは、亀裂先端における液体金属の挙動と関係しているのではないかと考えられ、その原子論的なメカニズムを考察中である。

昨年度に主に得られていた鉄の結果とほぼ同様の結果がアルミニウムに関しても得られていることは大変興味深く、鉄において考察した内容がアルミについても成立し、液体金属一般に適用可能な概念であることが示唆される。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 査読有論文

- 1) T. Tsuru, K. Shimizu, M. Yamaguchi, M. Itakura, K. Ebihara, K. Matsuda, A. Bendo, H. Toda, “Hydrogen-accelerated spontaneous microcracking in high-strength aluminium alloys”, Scientific Reports, Vol.10, 2020, pp.1998\_1-1998\_8.

#### 口頭発表

- 2) 山口正剛、海老原健一、板倉充洋、“液体金属脆化における元素選択性と水素脆化：第一原理計算”、日本鉄鋼協会 CAMP-ISIJ 「高強度鋼の水素脆化における潜伏期から破壊までの機構解明」研究PJ・「水素脆化の基本要因と実用課題」フォーラム共催シンポジウム「水素脆化の破壊機構と実用課題」、2019年9月、岡山。
- 3) 山口正剛、海老原健一、板倉充洋、“ニッケルの液体金属脆化における選択性と水素脆化：第一原理計算”、日本鉄鋼協会・講演概要集「材料とプロセス」33号、2020年3月、東京、ROMBUNNO.212、CD-ROM.

### (4) 今後の利用予定:

引き続き材料劣化機構の解明を進める。

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

#### Simulation for Radioactive Nuclides Transport inside Harbor of Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant

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・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 9 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、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。そのため、大型計算機の利用が必須であるが、その性能を有効に利用するため、シミュレーションコードの大規模並列化を進めとともに、その技術開発（並列性能が高く高速に動作するコードの開発）を同時に実施する。

##### (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 港湾口付近の流動場を評価したところ、図 1 に示すように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おり、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。また、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。

しかし、本コードは静水圧近似を用いたものであり、鉛直方向の流れが大きい場合には精度の問題があり、今年度実施したシミュレーションからシルトフェンス付近では鉛直方向の流速が大きいことが確認できていることや、静水圧近似を用いたアルゴリズムでは流れ場に合わせてシルトフェンスを変形させるシミュレーションが困難であることから、計算量が大きい鉛直方向の流速も高精度で計算でき、シルトフェンスの影響も考慮できる非静水圧を用いたコードを開発している。

また、この静水圧近似を用いたコードは鉛直方向の分割に $\sigma$ 座標系を用いているため、そのまま地形変化の大きいダム湖に適用すると、水平方向の圧力や水温に誤差が生じる。そのため、水深を考慮して適切に補正を行う機能を追加した。これにより、夏期に大きいダム湖で観測される上層の水温が高く下層の水温が低い水温の成層化を図2のように再現することができ、季節によるダム湖内の放射性物質の付着した浮遊砂の振る舞いの違いをシミュレーションすることを可能にした。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 査読付き国際会議論文

- 1) S. Yamada, T. Imamura, M. Machida, “High performance eigenvalue solver for Hubbard model: Tuning strategies for LOBPCG method on CUDA GPU”, Parallel Computing; Technology Trends, Advances in Parallel Computing, Vol.36, 2020, pp.105-113.

#### 学会発表

- 2) S. Yamada, M. Machida, “Studies for environmental impact of released radioactive materials under their mitigation measures in both inside and outside FDNPP harbor area using a nested CFD simulation code”, European Geosciences Union General Assembly 2019, Vienna, Austria, April 2019.
- 3) 山田進、町田昌彦、“シルトフェンスが浮遊砂の移動に与える影響：流れ場とシルトフェンスの連成シミュレーションによる評価”、日本原子力学会 2020年春の年会、2020年3月。

#### 書籍

- 4) 長谷川秀彦、今村俊幸、山田進、櫻井鉄也、荻田武史、相島健介、木村欣司、中村佳正、“3章 疎行列の固有値計算”、固有値計算と特異値計算、一般社団法人 日本計算工学会 編、丸善出版、2019年、pp.77-104.

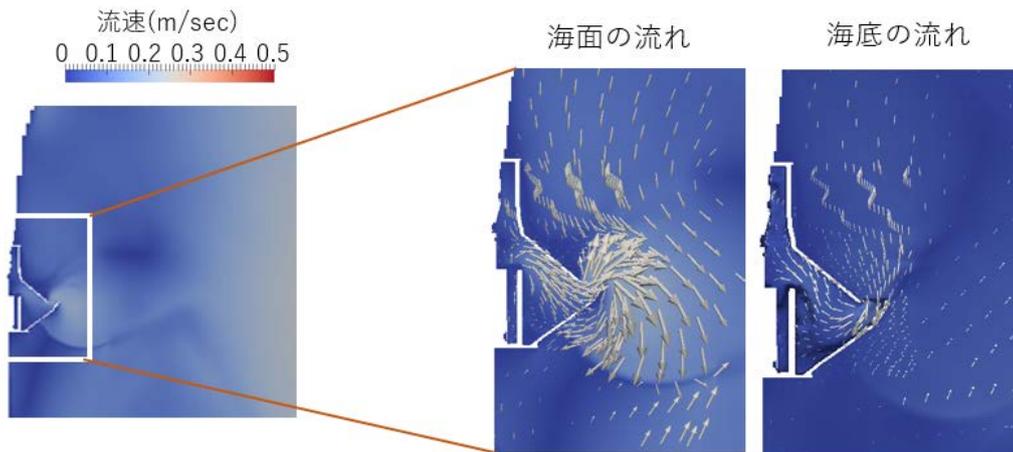


図1 シミュレーションによる港湾口付近の流れ場。海面では港湾から外洋への流れになっているが、海底ではその逆の流れになっていることが確認できる。



図2 水温が低いダム湖に水温が高い河川水が流れ込んだ際のシミュレーションによる温度分布の結果。これまでの方法だと左図のように上層と下層の水が混ざり、水温の成層化は見られないが、水深を考慮した圧力等の補正を行うことで、右図のように水温の成層化を再現することができる。

**(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。

### 5.13.9 水素材料の第一原理分子動力学計算

#### Ab Initio Molecular Dynamics Simulations of Hydrogen in Materials

志賀 基之、Thomsen Bo、近藤 友美  
シミュレーション技術開発室

##### (1) 利用目的:

原子力に関わる水素科学研究には非常に幅広い裾野がある。原発事故に伴うトリチウム水やセシウム水溶液の環境影響、廃炉に伴うマイナーアクチナイドの分離技術、核融合炉開発に不可欠な放射性水素拡散の防止、金属材料の水素脆化や応力腐食割れ、地層処分における地下水腐食リスクの問題など、枚挙に暇がない。水素物性はこうした様々な場面で鍵となる役割を演じるので、その起源となる水素の微視的振る舞いの解明はそれぞれ大きなインパクトを持つ。一方で、環境・エネルギー問題への意識の高まりから、水素を次世代のエネルギー発生媒体として利用するための取り組みが注目されている。世の中では将来のあるべき姿を「水素社会」と表現し、その意識が定着しつつある。これに伴って、水素利用技術に関わる材料設計に向け、液体・固体などの材料物質中の水素振る舞いに関する理解を深めるための基礎・基盤研究が重要性を増している。

本課題では、開発した高精度第一原理計算技術を活用して、液体・固体内部における水素存在状態に関する研究を行う考えである。具体的には、原子力分野で特に注目されている水素材料系として(a)トリチウム水系、(b)金属中の水素拡散系、(c)水溶液中の有機反応系の三つを研究対象とする。

##### (2) 利用内容・結果:

本年度は、水溶液中の有機反応系の第一原理分子動力学計算について、利用内容と結果を報告する。この研究は、科研費基盤研究(C) (16K05675)「水を反応場とするグリーンケミストリーの計算化学」の一環として、東京大学と共同で行われたものである。

有機溶媒に頼らない有機合成ルートの探査は、クリーンで持続可能な環境をコンセプトとしたグリーンケミストリー分野で注目されている。近年、豊富で毒性のない水の利用が注目され、水溶液の内部や界面における反応制御の技術が著しく進歩してきた。1980年代に Diels-Alder 反応が水溶液中で加速されるという実験的事実が知られてから、有機溶媒でしか起こらないと考えられてきた有機反応が次々に発見され、水溶性の基質や試薬で反応の簡素化・高効率化する研究も進んでいる。よりよい反応設計のためには、水溶液中で反応がどのように進行し、水の果たす役割について詳しい知見が必要である。そこで、第一原理分子動力学計算を利用して、これを調べることにした。

以下、グリーンケミストリー分野で話題となっているバイオマス由来三価アルコールの R-pentanetriol (R-PTO) の反応について得られた結果を詳しく紹介する[4]。先行実験で、R-PTO 分子は高温高圧条件の水溶液下でアルコール脱水反応を起こすことが知られていた。図 1 のように、脱水に関わる攻撃パターンによって四通りの反応経路が考えられ、それぞれ

五員環エーテルの R-tetrahydrofurfuryl alcohol (THFA) と六員環エーテルの R-および S-3-hydroxytetrahydropyran (3HTHP) へ至ることが考えられる。主生成物が THFA であることや、酸によって反応速度が加速されることが報告されていたが、その原因を実験で探ることは困難だった。また、3-HTHP の立体異性体である R/S 依存性についても調べられていなかった。そこで、本研究ではこの問題にあたることにした。

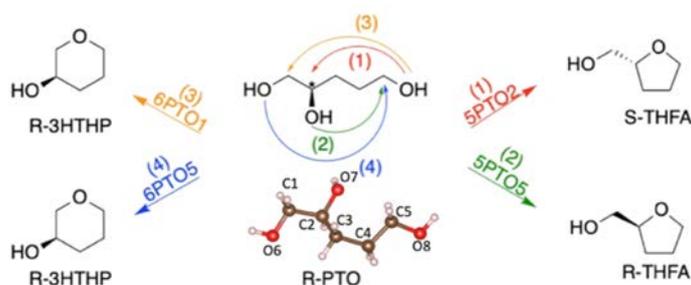


図1 水溶液中 R-PTO 分子の脱水反応における攻撃パターンの様式

第一原理分子動力学計算は PTO 水溶液に対して先行実験と同じ熱力学的条件 (523 K、20 MPa) のもとで行った。バルク水溶液を周期境界条件下の 30-70 分子系で表現した以外には、特にモデル化することなく計算することができた。ポテンシャルには、PBE-D2 汎関数に基づく密度汎関数 (DFT) 法、3ob Slater-Koster パラメータに基づく密度汎関数強束縛 (DFTB) 法の二つを用いた。

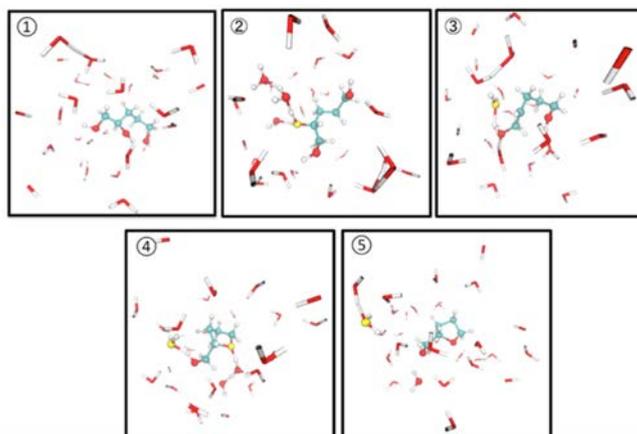


図2 R-PTO から S-TFTA への反応過程。各原子は赤 (O)、白 (H)、青 (C) で表している。  
図1 赤矢印で示した反応に対応する。

計算から得られた R-PTO から S-TFTA への反応における時系列変化を図2示す。①は PTO 分子として水溶液中に溶解している状態を表す。②では PTO 分子の一つの OH 基がプロトン化されて OH<sub>2</sub><sup>+</sup>になる。この際、水溶液から水素結合網を介したプロトンリレーが見られた。③では、OH 基が五員環エーテルを形成するように反対側の C を攻撃し、OH<sub>2</sub><sup>+</sup>基が水分子として放出される。④では、既存の OC 結合の切断と新たな CO 結合の生成が同時に進行する。このとき O-C-O はほぼ一直線状になっており、SN<sub>2</sub> 反応における遷移状態の特徴を示している。⑤では、

遷移状態を越えると、エーテル環が閉じたのち余剰プロトンを放出して反応が完結する。これは酸触媒型 SN2 反応であることを示唆して、実験結果を見事に説明している。

R-PTO から R,S-TFTA、R-3HTHP へ至る四通りの反応過程について同様の計算を行い、その結果、いずれの過程も酸触媒型 SN2 反応であることがわかった。DFT および DFTB に基づく分子動力学計算の結果はおおかた一致していて、いずれの場合も五員環エーテルの R,S-TFTA への自由エネルギー障壁は六員環エーテルの R-3HTHP への自由エネルギー障壁に比べて低くなる。これは、五員環エーテルが主生成物となることを示しており、実験結果とも一致している。反応経路の違いをより詳細に調べたところ、六員環エーテルよりも五員環エーテルの方が OH 基のプロトン化が反応の初期でより容易に起こることが見出された。すなわち、五員環エーテルが主生成物となる一因は、五員環エーテル生成過程において、水素結合網を介した水と PTO の間のプロトン授受をしやすいことにあると推察される。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Y. Noguchi, M. Hiyama, M. Shiga, H. Akiyama, O. Sugino, “Photoabsorption Spectra of Aqueous Oxyluciferin Anions Elucidated by Explicit Quantum Solvent”, *J. Chem. Theory Comput.*, Vol.15, 2019, pp.5474-5482.
- 2) H. Kimizuka, S. Ogata, M. Shiga, “Unraveling anomalous isotope effect on hydrogen diffusivities in fcc metals from first principles including nuclear quantum effects”, *Phys. Rev. B*, Vol.100, 2019, p.024104\_1-024104\_9.
- 3) Y. Kawashima, K. Ishimura, M. Shiga, “Ab initio Quantum Mechanics/Molecular Mechanics Method with Periodic Boundaries Employing Ewald Summation Technique to Electron-Charge Interaction: Treatment of the Surface-Dipole Term”, *J. Chem. Phys.*, Vol.150, 2019, 124103, 14 p.
- 4) Y. L. Chang, T. Sasaki, J. Ribas-Ariño, M. Machida, M. Shiga, “Understanding competition of polyalcohol dehydration reactions in hot water”, *J. Phys. Chem. B*, Vol.123, 2019, pp.1662-1671.
- 5) 志賀基之、“電子状態理論の初歩 XI”、分子シミュレーション研究会会誌アンサンブル、Vol.21, No.4, 2019, pp.277-282 (査読あり)。
- 6) 志賀基之、“水素系の新しい第一原理計算法の開発と応用”、第2回ハイドロジェノミクス研究会、東京、2019年11月(招待講演)。
- 7) M. Shiga, “Ab initio Molecular Simulations of Hydrogen Bonded Systems”, Department of Chemistry, New York University, New York, 2019年8月(依頼講演)。
- 8) M. Shiga, “Basics of biased sampling, umbrella sampling, WHAM, Bluemoon ensemble, quantum effects”, *Free Energy Calculations of Chemical and Biological Systems*, Indian Institute of Technology Kanpur, 2019年3月(招待講演)。

### (4) 今後の利用予定:

溶液反応系の他、トリチウム水系、金属中の水素拡散系の第一原理分子動力学計算にも取り組んでおり、今後も続ける予定である。

## 5.13.10 菌類・地衣類代謝物の放射性セシウム錯体形成機構の分子シミュレーション研究

## Molecular Simulation Study of Radiocesium Complexation Mechanism with Fungi and Lichen Metabolites

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。本研究では菌類や地衣類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、および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、アルカリ金属カチオン交換あるいはアルカリ金属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、アルカリ金属カチオン選択性を定量的に見積もる。一般的な菌類や地衣類の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を扱わ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 (parametric model 6) と多コンポーネント人工力誘起反応 (MC-AFIR; multicomponent artificial force induced reaction) 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 (Global route reaction mapping) と半経験的量子化学ソフト MOPAC (Molecular orbital package) 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 (Density functional theory; 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、スクレロシトリン、アウラントリコロン、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 にアルカリ性条件下で存在する二重脱プロトンノルバジオン A ( $\text{NBA}^{2-}$ ) のアルカリ金属カチオン交換反応を示す。これは、 $\text{NBA}^{2-}$  がカリウムカチオン錯体か

らセシウムカチオン錯体に変化する過程  $\text{NBA}^{2-}\text{K}^{+}+\text{Cs}^{+}\rightarrow\text{NBA}^{2-}\text{Cs}^{+}+\text{K}^{+}$ である。この過程の反応自由エネルギー（終状態自由エネルギーから始状態自由エネルギーを引いた値）は $-6.3\text{ kcal/mol}$ と負の比較的大きな値となっており、セシウムカチオン錯体がカリウムカチオン錯体よりもかなり安定であり、セシウムカチオンに対する選択性を示している。さらに試行計算を行った結果、このセシウムカチオン選択性はノルバジオン A のハサミ型の分子形状にあることを突き止めた。キノコ子実体、とりわけ傘部分にはノルバジオン A や上述のハサミ型の色素分子が幾らか存在することがわかっており、これらの色素の存在がキノコ中での放射性セシウム濃縮に重要な役割を果たしている可能性が確認できた。

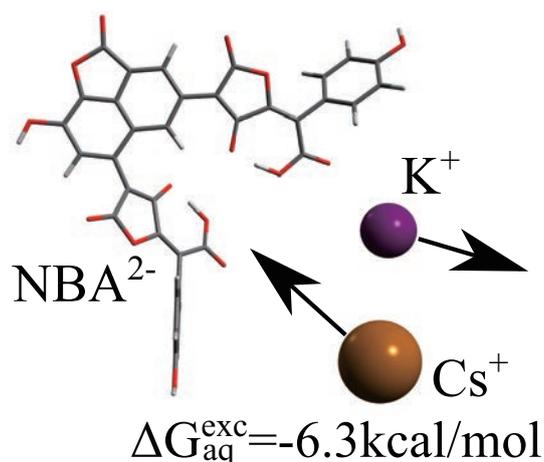


図1 アルカリ金属交換反応  $\text{NBA}^{2-}\text{K}^{+}+\text{Cs}^{+}\rightarrow\text{NBA}^{2-}\text{Cs}^{+}+\text{K}^{+}$ 。水溶液中の反応自由エネルギーは負で $-6.3\text{ kcal/mol}$ である。これは  $\text{Cs}^{+}$ 結合が優位にあることを示している。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 数納広哉、奥村雅彦、町田昌彦、“粘土鉱物や菌類のセシウム吸着機構：原子・分子論研究の現状と課題”、地盤工学会誌、Vol.67、No.10、2019、pp.34-35.
- 2) HS, M. Machida, T. Dohi, Y. Ohmura, Y. Sasaki, “Computational Molecular Study of Predominant Organic Molecules in Forest Ecosystems Concerning Cesium Accumulation and Transport”, 17th International Conference on the Chemistry and Migration Behavior of Actinides and Fission Products in the Geosphere (Migration 2019), Uji, Japan, September 2019 (ポスター発表) .

### (4) 今後の利用予定:

今後は、イオンチャンネル（細胞の生体膜にある膜貫通タンパク質の一種で、受動的にイオンを透過させるタンパク質）とアルカリ金属カチオンに関する計算を ADF ソフトウェアを用いて行う計画である。また、新型コロナウイルスと菌類・地衣類代謝物に関する研究において分子シミュレーション数値計算ソフトウェアや人工知能技術ソフトウェアなどの開発、利用を計画している。

### 5.13.11 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:

本テーマの目的は、核燃料の構成物質である酸化アクチノイドを始めとするアクチノイド化合物の物性を、第一原理計算を始めとするシミュレーションにより推算し、核燃料物性の計算による評価を可能として、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する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。この目標を達成するために、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てきた。加えて、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ない、より現実的な物性評価を目指していく。特に、第一原理計算を学習することで、第一原理計算と同程度の信頼性で高速なシミュレーションが可能な機械学習分子動力学法を利用した物性予測にも挑戦する。

##### (2) 利用内容・結果:

今年度の研究成果としては以下の項目が上げられる。

##### 1. 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

昨年度に引き続き、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。昨年度は、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を確認したが、今年度はポーラロンによる電荷分布の変化の詳細を調べた。図1に電子ポーラロンの電荷分布を示したが、その大きさはおよそ  $3\text{\AA}$  程度と分かった。 $\text{UO}_2$  の格子定数は  $5\text{\AA}$  程度なので、その大きさが十分小さいことが分かった。また、ポーラロンの形状はスピンの向きに強く依存することが発見した。

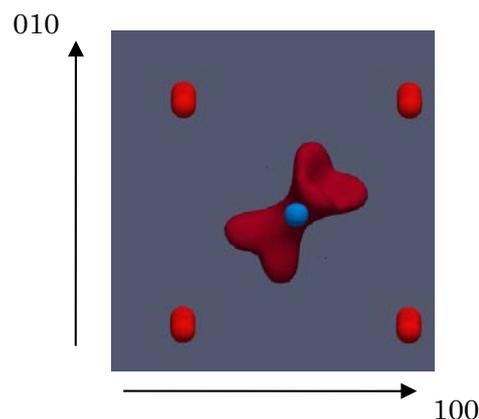


図1  $\text{UO}_2$  中の電子ポーラロンの電荷分布の増加量を示す等高面(赤い面)。赤い球は酸素、水色の球はウラン原子を表す。ポーラロンのスピンの向きは 111 方向に設定してある。

## 2. 燃料溶融物の凝固のメソスコピック解析

燃料デブリの物性解析として、燃料溶融物の凝固による微細構造の生成や物性への影響を評価するため、ウラン-ジルコニウム酸化物に対してフェーズフィールド法によるシミュレーションを実施した。コードとしては MOOSE コードを用いて、二酸化ウラン中のジルコニウム濃度による凝固点の変化と潜熱による温度変化、ジルコニウムの拡散などを考慮に入れてシミュレーションを行なった。中心に固相の核を置いた液相を初期状態として、凝固点よりわずかに温度の低い状態でシミュレーションを行なったところ、急速に固相が成長し、潜熱による温度上昇が見られた後、ゆっくりとジルコニウムの拡散がおこり平衡状態へと収束した (図 2)。今回、信頼性の高いとされる Kim-Kim-Suzuki 法と熱伝導方程式を組み合わせたフェーズフィールド法を利用しており、より複雑な状況への応用が期待できる。

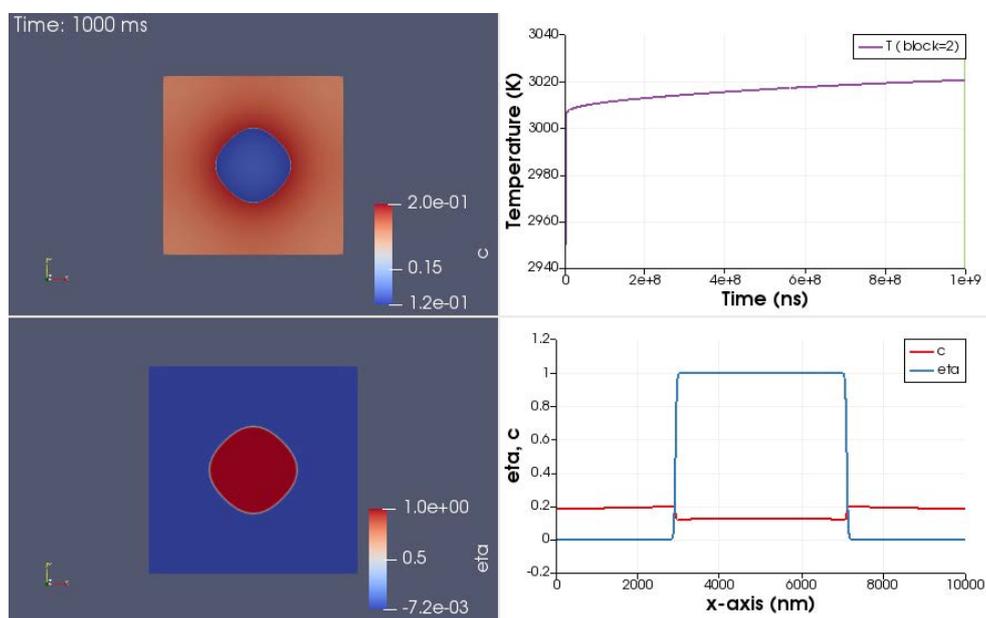


図 2 ウラン・ジルコニウム酸化物のフェーズフィールド法のシミュレーション。中心に固相の核がある液相が初期状態で、一辺  $10 \mu\text{m}$  の系を用いた。(左上) 1 秒後のジルコニウム濃度。(左下) 固相 (赤) と液相 (青) の様子。(右上) 中心温度。(右下) x 軸方向のジルコニウム濃度  $c$  (赤) と固相の割合  $\eta$  (青)。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) H. Nakamura, M. Machida, "First-principles calculation study on phonon thermal conductivity of thorium and plutonium dioxides; Intrinsic anharmonic phonon-phonon and extrinsic grain-boundary-phonon scattering effects," J. Nucl. Mater., Vol.519, 2019, pp.45-51.

### (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基にして、機械学習を用いた分子動力学による熱物性の評価を行う予定である。

### 5.13.12 転位と溶質元素の第一原理計算

#### DFT Calculation of Dislocations and Solute Atoms

板倉 充洋

シミュレーション技術開発室

##### (1) 利用目的:

原子炉構造材料の経年脆化においては ppm オーダーの格子欠陥が機械的特性に大きな影響を与え、また産業用の新規合金開発においても微量の添加元素で機械的特性が大きく変わるが、これらは格子欠陥や合金元素が塑性変形をになう転位と相互作用することで起こる現象である。そうした相互作用を第一原理計算で明らかにすることで材料脆化対策や合金開発に資する様々な知見を得ることが出来る。

また、ADSやFBRなどの次世代炉では水の代わりに液体金属を冷媒として用いる場合が多く、特に ADS では鉛ビスマス冷媒による構造材の液体金属脆化が設計を決める要因となる。また福島第一原発の廃炉作業を前に、炉内で燃料、被覆管、制御棒、構造材など様々な材料が熔融し化学変化、反応して生成したデブリの組成や分布を予測することが現在求められている。こうしたテーマにおいて特に熔融した金属や酸化物とそれ以外の材料の相互作用が重要なファクターとなるが、それを調べるには大規模な第一原理計算が必要となる。本年度からはこうした液体材料の物性計算も行っていく。

##### (2) 利用内容・結果:

転位の計算に関しては、東京大学で行われている Mg-Y-Zn 合金の微細組織の高解像度透過型電顕観察の結果の解析を行った。高解像度電顕では転位周辺の原子位置を 0.3 オングストロームの精度で観察することが可能であり、転位と溶質原子の相互作用に関し重要な知見が得られる。Mg においては通常底面転位は二本の部分転位に分裂し、その間に積層欠陥を生成する。Mg-Y-Zn 系においてはこの積層欠陥に Y、Zn が析出することで安定化し部分転位の間隔が広がっていく。観察ではそのような過程で広がり、Y、Zn を多く含む積層欠陥が観察された。そうした場合、部分転位の間隔は大きくなり互いの弾性場の影響をうけない配置となる。第一原理計算において部分転位の間隔を広くとり、通常は緩和で間隔が狭くなる場所を特定の原子位置を固定することで広く広がった部分転位の配置を作り出すことに成功した。この配置で得られた原子位置と、電顕観察で得られた原子位置を比較したところ、Y、Zn がない領域では両者がよい一致を見せた。

液体材料の計算に関しては、まず固化した材料であり、国際廃炉機構で実験が行われている、UO<sub>2</sub> と ZrO<sub>2</sub> の混合酸化物の模擬デブリの機械的特性を測定した実験の結果を第一原理計算で再現することを試みた。X線解析により模擬デブリは cubic な蛍石型構造でカチオン位置にランダムに Zr 原子と U 原子が配置していることが分かっており、この構造を用いて実験が行われた組成範囲をカバーする、ZrO<sub>2</sub> 分率 12.5%、25%、50%の場合について第一原理計算を行い、弾性定数および破壊靱性の評価を行った。図 1 に破壊靱性の評価のためにへき開表面エネルギーの計算を行った際に用いた原子配置を示す。また、図 2 に弾性定数（ヤング率）の ZrO<sub>2</sub> 分率依存性の計算結果と実験結果を示す。弾性定数については実験で分率 25%付近で値が下がることが観測されていて、当初はサンプル内のき裂による音速低下が原因と考えられていたが、第一原理計算でも 25%付近でヤング率が低下することが分かり、その原因は Zr 原子と U 原子のサイズ

の違いによる O 原子の乱れが 25%付近で最も強くなるためであることが計算結果の解析によって判明した。また実験では分率が 50%付近で破壊靱性の急激な上昇がみられたが、第一原理計算を用いて弾性率とへき開エネルギーを評価し、その二つから Griffith の式を用いて破壊靱性を評価したところ、Zr 分率の違いによる大きな変化は見られなかった。実験では分率 50%以上では X 線解析の結果、微量の tetragonal 相が内部に含まれていることが判明しており、破壊力学的考察からそれら微小な第二相がき裂先端付近で相変態して応力を緩和することで破壊靱性が劇的に上昇するのが原因であるとの結論を得た。

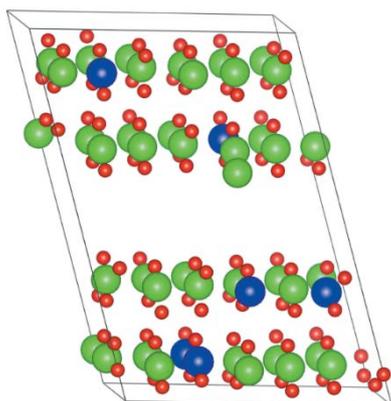


図 1 へき開エネルギー計算に用いた原子配置  $Zr_6U_{42}O_{96}$ 。青、緑、赤の球がそれぞれ Zr,U,O 原子

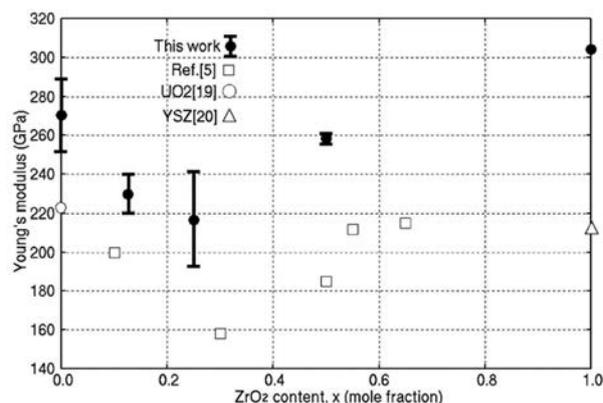


図 2 計算によって得られた多結晶のヤング率の  $ZrO_2$  分率依存性と実験結果の比較

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文

- 1) M. Itakura, H. Nakamura, T. Kitagaki, T. Hoshino, M. Machida, “First-principles calculation of mechanical properties of simulated debris  $Zr_xU_{1-x}O_2$ ”, Journal of Nuclear Science and Technology, Vol.56, Issue 9-10, 2019, pp.915-921.
- 2) S. Hayakawa, K. Doihara, T. Okita, M. Itakura, M. Aichi, K. Suzuki, “Screw dislocation-spherical void interactions in fcc metals and their dependence on stacking fault energy”, Journal of Materials Science, Vol.54, Issue 17, 2019, pp.11509-11525.
- 3) S. Hayakawa, T. Okita, M. Itakura, T. Kawabata, K. Suzuki, “Atomistic simulations for the effects of stacking fault energy on defect formations by displacement cascades in FCC metals under Poisson’s deformation”, Journal of Materials Science, Vol.54, Issue 16, 2019, pp.11096-11110.

学会発表

- 4) 浦川裕翔、江草大佑、板倉充洋、阿部英司、“ミルフィーユ構造 Mg 合金中のヘテロ界面における転位芯緩和挙動”、日本金属学会 2020 年春季大会、東京、2020 年 3 月。

### (4) 今後の利用予定:

令和 2 年度からはテーマを液体材料の計算へと変更し、シビアアクシデント時の高温状態における各種材料 (B4C 制御棒、熔融鉄など) の界面特性を評価していく予定である。

### 5.13.13 照射材料の微細構造発達シミュレーションのための原子論的シミュレーション

#### Atomistic Simulations for Microstructural Evolution of Irradiated Materials

鈴木 知明

シミュレーション技術開発室

##### (1) 利用目的:

金属材料の機械的特性、特に降伏強度と破壊靱性は構造物の安全性に関わる重要な指標であるが、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。また、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の吸蔵量が増える。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次世代炉の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、時間・空間スケールでの制限がある実験による解析では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最適である。

システム計算科学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長年にわたり開発してきた。2019 年度には、基礎工学研究センターと協力して ADS 材料も研究対象に加えた。

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等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、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、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。上記原子力材料研究の礎として材料挙動の基礎的な理解を深めるため、金属の塑性変形や破壊など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。本材料中の空孔など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と空孔が再結合しやすくなることを発見した。また、レニウム等の合金元素によってタングステン材が軟化する場合があり、そのメカニズムを第一原理計算より特定した。

B) 原子炉圧力容器の内張には铸造ステンレス鋼が使われているが、その中の 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して硬化が原因で脆化する。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温度にか

かわらずユニバーサル線形関係にあることが明らかになった。なお、この関係は共同研究者によって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、将来材料の健全性評価に応用できると考えられる。

C) 鉄などの体心立方構造 (BCC) 金属は低温で脆化することが知られているが、そのメカニズムはらせん転位の挙動と深く関わっていることが実験から指摘されている。低温でのらせん転位のすべり面は $\{110\}$ であるが、温度上昇とともに $\{112\}$ 面が現れてくることが実験でわかっている。課題申請者らは分子動力学シミュレーションを用いて、室温で $\{112\}$ にすべり面が変化する現象を再現することに成功した (図 1)。また、転位運動の詳細な解析からこのすべり面が温度揺らぎによって引き起こされている可能性が高いことを示した。

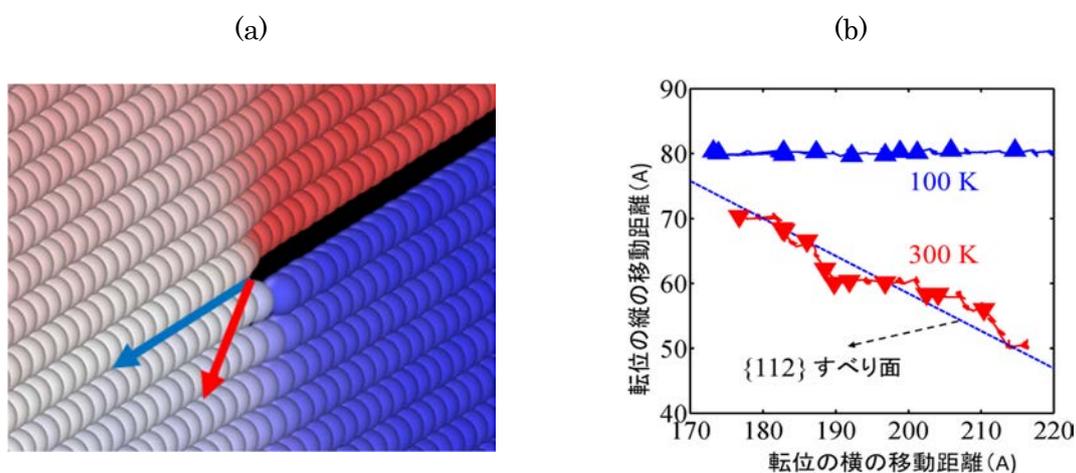


図 1 鉄結晶のすべりによるらせん転位の移動

- (a) 鉄結晶の中の一つの面だけを取り出して可視化した。図中央に原子面が裂けた部分がらせん転位の位置である。実際には、このような原子面が重なって金属を構成しているので、原子面に垂直に転位線が存在する。低温では転位はまっすぐ移動する (青い矢印) が、温度が高くなるにしたがって赤の矢印のように移動方向がずれる。結晶がすべる面は図示された原子面に垂直で矢印に平行な面で、すべり面が温度上昇で転移することになる。
- (b) 原子シミュレーションを用いて、温度が高くなるにつれてらせん転位の移動によるすべり面が $\{112\}$ 面に変化する現象を再現することに成功した。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) T. Suzudo, T. Onitsuka, K. Fukumoto, “Analyzing the cross-slip motion of screw dislocations at finite temperatures in body-centered-cubic metals: molecular statics and dynamics studies”, Modeling and Simulation Materials Science Engineering, Vol.27, 2019, pp.064001\_1-064001\_15.
- 2) T. Tsuru, M. Waketa, T. Suzudo, M. Itakura, S. Ogata, “Anomalous solution softening by unique energy balance mediated by kink mechanism in tungsten-rhenium alloys”, Journal of Applied Physics, Vol.127, 2020, pp.025101\_1-025101\_9.
- 3) T. Suzudo, H. Takamizawa, Y. Nishiyama, A. Caro, T. Toyama, Y. Nagai, “Atomistic modeling of hardening in spinodally-decomposed Fe-Cr binary alloys”, Journal of Nuclear Materials, Vol.540, 2020, pp. 152306\_1-152306\_10.

- 4) Y. Du, K. Yoshida, Y. Shimada, T. Toyama, K. Inoue, K. Arakawa, T. Suzudo, K. J. Milan, R. Gerard, S. Ohnuki, Y. Nagai, “In-situ WB-STEM observation of dislocation loop behavior in reactor pressure vessel steel during post-irradiation annealing”, *Materialia*, Vol.12, 2020, pp.100778\_1-100778\_10.
- 5) E. Wakai, N. Okubo, S. Takaya, Y. Nagae, T. Suzudo, H. Abe, M. Yamaguchi, K. Aoto, “Effects of Helium Production and Displacement Damage on Microstructural Evolution in Helium-Implanted Austenitic Stainless Steel and Martensitic Steel Examined By HIT Experiment and kMC Simulation”, *JPS Conf. Proc.*, Vol.28, 2020, p.061008.
- 6) K. Ebihara, T. Suzudo, “Molecular Dynamics Simulations of Phosphorus Migration in a Grain Boundary of  $\alpha$ -iron”, *TMS 2020; 149th Annual Meeting & Exhibition Supplemental Proceedings*, San Diego, U. S. A., February 2020, pp.995-1002.
- 7) T. Suzudo, T. Tsuru, “First Principles Modeling on Radiation Defects in W and W-based Alloys”, *4th International Workshop on Models and Data for Plasma-Material Interaction in Fusion Devices (MoD-PMI 2019)*, Toki, Japan, June 2019 (招待講演) .
- 8) T. Tsuru, T. Suzudo, “First-principles modeling of radiation resistant W-based alloys”, *6th Fusion Materials Theory & Modeling Workshop (6th FMTCP)*, Walla Walla, U.S.A., June 2019 (招待講演) .
- 9) E. Wakai, S. Takaya, Y. Matsui, Y. Nagae, S. Kato, T. Suzudo, M. Yamaguchi, K. Aoto, S. Nogami, A. Hasegawa, H. Abe, K. Sato, T. Ishida, S. Makimura, P.G. Hurh, K. Ammigan, D.J. Senor, A.M. Casellal, D.J. Edwards, “Irradiation damages of structural materials under different irradiation environments”, *J. Nucl. Mater.*, Vol.543, 2021, p.152503.
- 10) T. Suzudo, K. Ebihara, T. Tsuru, “Brittle-fracture simulations of curved cleavage cracks in alpha-iron: a molecular dynamics study”, *AIP-Advances*, DOI: 10.1063/5.0026659.
- 11) T. Suzudo, K. Ebihara, T. Tsuru, “Cleavage and dislocation emissions in BCC iron: A molecular dynamics study”, *GIMRT Joint International Symposium on Radiation Effects in Materials and Actinide Science (GIMRT-REMAS 2020)*, October 2020, Sendai (online) (招待講演).

#### (4) 今後の利用予定:

材料が割れる現象の研究は構造材料研究のなかで最も重要性の高いものであるが、そのメカニズムは未だによくわかっていない。しかしながら、今後機構のスパコンが更新されることもあり、大規模なき裂進展の分子動力学の応用によって、その現象を徐々に明らかにしていくことができると考える。まずは、き裂先端での転位射出等の塑性変形を正しく再現することが必要となる。また、水素やヘリウムなどのガス原子は脆化を促進させるが、それらがき裂進展にどうかかわっているのかを原子レベルで明らかにしていく。

共同研究を行っている東北大学金属材料研究所において非常に高精度の電子顕微鏡が開発され、照射誘起の転位ループの詳細なデータ得られるようになってきている。また、転位ループが圧力容器脆化に寄与しているということが実験から分かってきている。本課題では、実験データを再現するような分子動力学計算を行うことにより、照射誘起転位ループの詳細な物理的状態を解明し、転位ループが原子炉圧力容器の脆化にどのような関連しているのかを原子レベルで解明していく。

### 5.13.14 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、小野寺 直幸、真弓 明恵、ユスフ アリ<sup>+</sup>、日水 有人<sup>+</sup>  
 高度計算機技術開発室  
 + 情報システム利用推進室

##### (1) 利用目的:

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、エクサスケール計算機を駆使した大規模計算が必須となっている。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、富岳や次期機構スパコンのようなアクセラレータ型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 つの課題について今年度の成果を説明する。

###### ① CPU 版 PARCEL の多次元領域分割 (DDM) 形式のインターフェース (API) 整備

オープンソースとして公開した CPU 版 PARCEL は圧縮行格納 (CRS) 形式、圧縮対角格納 (DIA) 形式に対応しているが、これらのデータ形式の並列処理は 1 次元領域分割となるため、多くのシミュレーションで用いられる 3 次元問題の領域分割に最適化されていない。この問題を解決するために、既に多相多成分熱流動解析コード JUPITER、プラズマ流体解析コード GT5D で整備されている DDM 形式の API を整備し、PARCEL のデータ形式を拡張した。図 1 に示す現在サポートしているデータ形式の表にあるように、これまで CRS、DIA 形式で開発を進めて

きたほぼ全てのアルゴリズムをサポートしている。DDM 形式では問題の物理的なトポロジに応じて多次元領域分割を行うため、ステンシル計算のような、情報が2次元ないし3次元方向に規則的に伝搬する問題では、行列を行方向で単純に1次元分割するCRS、DIA形式に比べて通信量が大きく削減され、さらに反復行列解法の前処理も効率化され収束特性が改善する。しかしながら、図2に示すように、現在の実装では処理速度がCRS、DIA形式に比べてかなり遅いため、オープンソースとして公開するには更に最適化を進める必要があることがわかった。今後、多次元領域分割した各演算カーネルの最適化や通信と演算のオーバーラップ等の並列最適化を継続していくことを予定している。

		倍精度		4倍精度		省通信	
並列化		1次元	多次元	1次元	多次元	1次元	多次元
データ形式		CRS/DIA	DDM	CRS/DIA	DDM	CRS/DIA	DDM
前処理	点ヤコビ	○	△	○	△	○	△
	ブロックヤコビ	○	△,□	○	△	○	△,□
	加法シュワルツ	○	△	○	△	○	△
	アンダーラップ						△
ソルバ	CG	○	△,□	○	△	○	△,□
	BiCGstab	○	△	○	△		
	GMRES	○	△	○	△	○	△,□

図1 PARCEL におけるデータ形式の整備状況

○CPU 版オープンソース公開済、△：CPU 版未公開、□GPU 版未公開

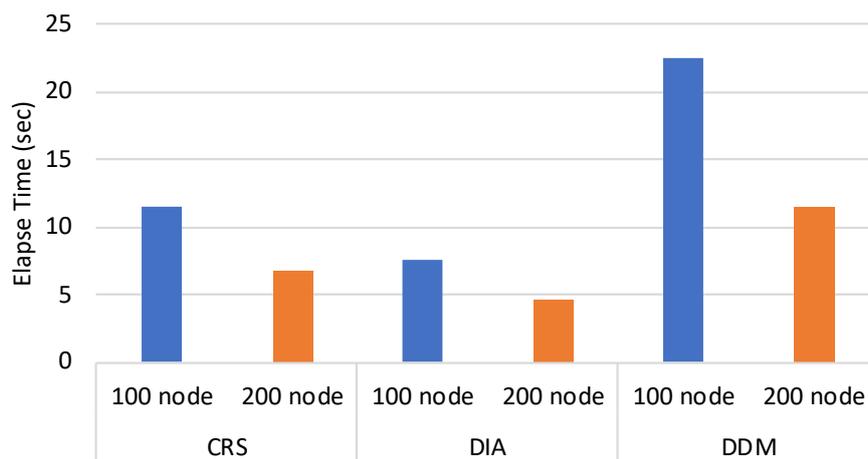


図2 ICEX における各データ形式のCG法ソルバの処理時間の比較 (3次元ポアソン方程式、600×600×600、1000反復)

## ② GPU 版省通信行列ソルバを適用して GPU 版 JUPITER を構築する

H30 年度に開発した GPU 版省通信行列ソルバを適用して GPU 版 JUPITER を構築した。この研究開発にあたっては数千 GPU の大規模処理をターゲットとして、既存の GPU 版省通信行列ソルバの並列最適化を更に進めた。GPU 版省通信行列ソルバではブロックヤコビ前処理における不完全 LU 分解のデータ依存性が GPU 並列処理のボトルネックとなっていたが、H30 年度に GPU 向けのブロックヤコビ前処理アルゴリズムを開発し、CPU 比 5 倍程度の演算加速を実現した。この演算加速によって、数千 GPU の大規模並列処理では差分計算の袖通信が新たなボトルネックとなることがわかってきた。この課題を解決するために、GPU 上の演算と通信のオーバーラップ手法を開発した。この手法では GPUDirect と呼ばれる GPU 間直接通信機構を活用してホストメモリへのデータアクセスコストを削減するとともに、MPI 通信処理と GPU 演算処理を複数のストリームとして実装することで同時処理を可能とした。この手法によって通信処理を隠蔽し、最大で 30% 程度の性能向上を達成した。これらの手法を用いて実装した GPU 版行列ソルバの性能をオークリッジ国立研究所 (ORNL) で運用されている世界最大の GPU スパコン SUMMIT においてテストし、従来の GPU 並列処理に比べて一桁以上大規模な 7,680GPU まで演算性能を加速させることに成功した。(図 3)

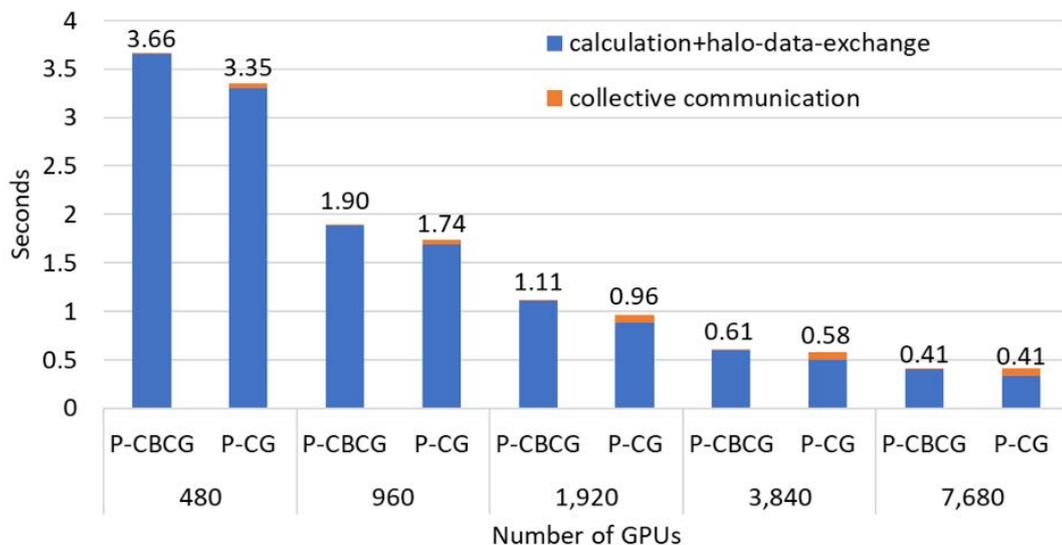


図 3 SUMMIT (ORNL) における前処理付 CG 法ソルバ (P-CG) と前処理付チェビシェフ基底省通信 CG 法ソルバ (P-CBCG) の 7,680GPU までの強スケーリングテスト (JUPITER、1280×1280×4608、480 反復)

## ③ GPU 版 PARCEL の整備

JUPITER、GT5D において開発された GPU 版省通信行列ソルバが DDM 形式の任意の 2 次元、もしくは、3 次元問題で利用可能となるように CPU 版 PARCEL と同様の汎用インターフェ

ースを整備した。これまでに CG 法、省通信 CG 法、省通信 GMRES 法の整備が完了し、同じ CPU/GPU 数を用いた場合、CPU 版 PARCEL の 6~8 倍の高速化が達成されている。今後、CRS 形式に関する実装を進める。

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

査読付き原著論文

- 1) N. Onodera, Y. Idomura, S. Uesawa, S. Yamashita, H. Yoshida, “Locally mesh-refined lattice Boltzmann method for fuel debris air cooling analysis on GPU supercomputer”, Mechanical Engineering Journal, Vol.7, Issue 3, 2020, pp.19-00531\_1-19-00531\_10.
- 2) Y. Idomura, “Isotope and Plasma Size Scaling in Ion Temperature Gradient Driven Turbulence”, Phys. Plasmas, Vol.26, Issue 12, 2019, pp.120703\_1-120703\_5 (2019, featured article).
- 3) K. Matsumoto, Y. Idomura, T. Ina, A. Mayumi, S. Yamada, “Implementation and performance evaluation of a communication-avoiding GMRES method for stencil-based code on GPU cluster”, The Journal of Supercomputing, Vol.75, 2019, pp.8115-8146.
- 4) Y. Ali, N. Onodera, Y. Idomura, T. Ina, T. Imamura, “GPU Acceleration of Communication Avoiding Chebyshev Basis Conjugate Gradient Solver for Multiphase CFD Simulations”, Proceedings of 10th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems (Scala 2019), Denver, U.S.A., November 2019, pp.1-8.
- 5) N. Onodera, Y. Idomura, T. Kawamura, S. Uesawa, S. Yamashita, and H. Yoshida, “Fuel debris’ air cooling analysis using a lattice Boltzmann method”, Proceedings of 27th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-27), Tsukuba, Japan, 2019, 6p.

**(4) 今後の利用予定:**

CPU 版 PARCEL に関しては、今年度に整備した DDM 形式の各ルーチンの最適化を更に進める。GPU 版 PARCEL に関しては、次期機構スパコン向けの整備を推進するとともに、CRS 形式等の疎行列への対応に向けた拡張を進める。

### 5.13.15 モニタリングポストの測定結果を使った空間線量率の時間変化の推定

#### Estimation of Temporal Changes in Air Dose Rate using Measurement Results of Monitoring Posts

関 暁之  
高度計算機技術開発室

##### (1) 利用目的:

福島第一原子力発電所事故から 9 年が経過し、福島県の空間線量率は着実に低下してきている。しかし、避難指示区域には依然として空間線量率の高い地域があり、避難した住民ができるだけ早く帰宅できるように、今後も除染等の対策を進めていく必要がある。その対策を適切に行うために、避難指示区域内の空間線量率の状況が時間の経過とともにどのように変化しているか推定することはたいへん重要である。

そこで我々は、近くのモニタリングポスト (MP) の測定データと統合することにより、測定回数が少ない場所での空間線量率の時間変化を推定する方法を開発した。MP は、設置地点における空間線量率を 10 分毎に測定しており、時間的に測定頻度の多い貴重なデータである。この推定方法では、異常な測定値による推定エラーを回避するために、事前に機器の故障が原因と考えられる測定値や、除染による線量の極端な減衰を示す測定値をスクリーニングプログラムを用いて除外した。次に、観測モデルを、対象地点における時間的に疎なデータと、近くにある MP の密なデータの相関から設定した。最後に、設定した観測モデルをもとに、対象地点の空間線量率の時間変化をベイズ統計に従って推定した。

対象とした MP のデータは、設置地点ごとに年単位で分けると 10,000 を超えるデータセットになる。さらにスクリーニングやベイズ統計の計算は、計算結果を検証しつつ、適切なパラメータを決定していく試行錯誤が必要になる。そのため大規模な計算資源が必要となり、原子力機構の ICE X を利用することで、短時間に効率よく推定を行う必要があった。

##### (2) 利用内容・結果:

開発した推定方法は、規制庁が設置しているリアルタイム線量測定システムと呼ばれる MP の 2012 年～2017 年のデータを日次平均した値を使う。このデータを年単位で分け、12 月から 4 月までの降雪時のデータを除外した。さらに、これらの MP のデータは、原子力事故による放射性セシウムによるものではない自然ガンマ線 (バックグラウンド) も含むため、この影響を外すように、 $0.1 \mu\text{Sv/h}$  以下の測定値を含むデータは推定に使用しなかった。

積雪やバックグラウンドの影響を除外しても、一部の MP のデータは、除染効果であると考えられる突然の線量減少、周辺環境の影響による線量増加、年間を通した線量の大きな変動、および外れ値などが残っていた。これらの異常値は推定値に大きな影響を与える可能性があるため、除外する必要があった。しかしながら、MP のデータセットは大量にあり、また、同じ基準で異常値が排除されることが望ましいため、ICE X を使ってデータスクリーニングを行った。異常な減衰のスクリーニングには、線量減衰の二成分モデルから得られる減衰率との比較を行った。また、外れ値のスクリーニングには、k 近傍法や中央絶対偏差を用いた。これらスクリーニングの

結果、推定に使用できる MP のデータは、約 9,000 のデータセットとなった。

スクリーニング後の MP のデータセットを用いて、対象地点における空間線量率の時間変化を推定した[1]。今回は、開発した推定方法の妥当性を検証するため、MP の設置地点における空間線量率を近隣の MP の測定結果を用いて推定した。一つのケースを用いた推定の流れを図 1 に示す。まず、ある対象地点と近隣 MP のデータセットを選択する (図 1(a))。次に、対象地点の最初と最後の測定値と近隣 MP における同日の測定値から回帰直線を得て、これを観測モデルとする (図 1(b))。ここでは、回帰直線が得られる最小の測定点数である 2 点を採用している。そして、得られたモデル式に従い、ICE X を使ったサンプリングを実施することによって順に各変数の条件付分布関数を算出する。このサンプリングの結果、赤線で表示された空間線量率の推定値が求まります (図 1(c))。

推定方法が妥当かどうかを検証するために、対象地点における MP の実際の測定値との平均絶対誤差率 (MAPE) を計算した。全 9,222 ケースの MP の推定結果から得られた MAPE のうち 9,177 のケースにおいて MAPE が 10%未満で予測することができた。その割合は、全組み合わせの 99.5%となったため、この推定方法は有効な推定方法になると考えられる。

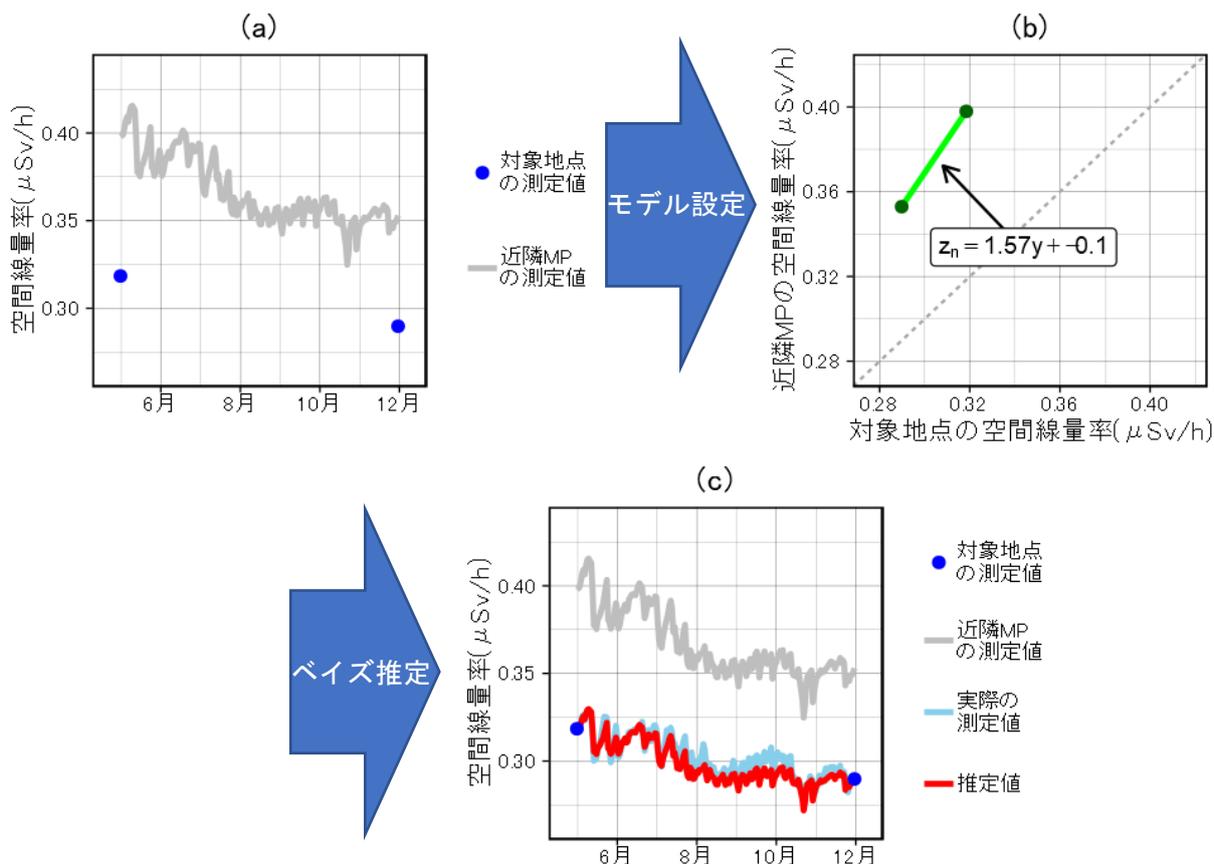


図 1 推定の一連の流れ。(a) 推定する対象地点と近隣 MP のデータセットを選択。(b) 対象地点の測定値と近隣 MP における同日の測定値から観測モデルを設定。(c) ICE X を使ったサンプリングによって、赤線で表示される推定値を計算。

さらに、開発した推定方法による MAPE の要約統計量を表 1 に示す。MAPE の中央値、平均値ともに 2%以下の誤差で推定できている。四分位範囲は 1%以下であり、誤差の変化幅も少ない。ただ、MAPE の最大値は 76%になっている。また、MAPE が 10%を超えるケースも 45 ケースある。これらの原因は、スクリーニングで設定した閾値では、除ききれていない異常値に原因があると考えられる。

最小値	第 1 四分位	中央値	平均値	第 3 四分位	最大値
0.26	0.95	1.30	1.69	1.85	76.28

表 1 開発した推定方法による MAPE の要約統計量

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) A. Seki, A. Mayumi, H. M. Wainwright, K. Saito, H. Takemiya, Y. Idomura, “Estimation of air dose rate using measurement results of monitoring posts in Fukushima Prefecture”, Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA+MC2020), Japan, 2020, pp.158-164.

**(4) 今後の利用予定:**

開発した空間線量率の推定方法の精度を高めるため、MAPE が 10%以上となるケースを中心に原因を調査する。そして、今回対象としなかった MP 以外の測定について適用し、測定が実施されなかった期間の空間線量率の推定を実施する。これにより、より正確な積算線量率が推定可能となり、除染の実施計画や避難指示区域の再策定などの取り組みに貢献することができると考えられる。

## 6. おわりに

本報告集は、原子力機構における多分野にわたる大型計算機システムを利用した優れた研究成果を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 月末に運用開始した大型計算機システムは、4 年のリース期間中、大きなトラブルもなく順調に利用が進み、令和元年度の年間コア利用率は最高の 93.9%を達成した。また、本システムは次期システムの運用開始まで再リースして運転を継続する。

次期システムの更新については、大型計算機利用委員会（令和元年 10 月 8 日）において、最終仕様書が承認された後、入札公告官報公示（令和元年 12 月 2 日）、入札締切（令和 2 年 2 月 14 日）、技術審査委員会（令和 2 年 3 月 6 日）を経て、開札（令和 2 年 3 月 30 日）を実施し、応札した日本ヒューレッド・パッカー社（HP）のスーパーコンピュータシステム（総演算性能：12.66PFLOPS）に決定した。次期システムは、令和 2 年 12 月 1 日の運用開始予定である。

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

令和 2 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

表 A.1 令和元年度大型計算機システムの利用実績

	ICE X		
	バッチ処理 件数	会話処理 件数	コア時間 (h)
4 月	43,731	5,378	40,421,817
5 月	64,139	5,211	42,395,475
6 月	51,003	4,534	37,762,744
7 月	38,367	5,547	37,721,215
8 月	51,981	5,261	41,949,159
9 月	98,425	5,336	38,368,891
10 月	46,362	6,188	41,727,084
11 月	44,714	6,032	39,997,888
12 月	46,389	5,664	42,118,280
1 月	50,938	6,089	42,481,744
2 月	65,870	5,631	35,641,546
3 月	38,837	5,073	40,359,227
合計	640,756	65,944	480,945,070

付録 B

表 B.1 令和元年度利用相談件数(可視化を除く)

	ICE X	Linux	パソコン	ネットワーク	その他 (利用一般)	合計
4月	49	1	2	5	8	65
5月	29	0	1	10	9	49
6月	27	0	0	8	13	48
7月	43	0	3	8	18	72
8月	38	0	1	9	13	61
9月	39	0	2	6	24	71
10月	26	0	0	4	16	46
11月	34	0	1	7	16	58
12月	28	0	0	2	13	43
1月	26	0	2	2	8	38
2月	35	0	2	0	10	47
3月	43	1	1	0	9	54
合計	417	2	15	61	157	652

表 B.2 令和元年度可視化相談件数

<b>1. 可視化相談(技術支援)</b>	
①	可視化ノード及び遠隔可視化用表示装置の可視化相談・技術支援 (56件)
②	PC版 MicroAVS インストール支援 (26件)
③	PC版 AVS/Express インストール支援 (2件)
④	Ensign DR インストール支援 (1件)
⑤	ParaView クラサバモードインストール支援 (2件)
<b>2. 可視化ツール提供等</b>	
①	ParaView データ変換ツールの機能追加
②	MicroAVS ユーザ向け AVSExpress による可視化処理マニュアルの作成
③	ParaView オプションツールの環境整備

著者名別 論文索引

A-Z	う
Alex Malins.....171	上澤 伸一郎 ..... 76, 85, 88
Ari Hamdani.....23	内堀 昭寛 ..... 125
Douglas Chase Rodriguez.....160	宇都野 穰 ..... 109
Fabiana Rossi.....160	
Hai Quan Ho.....123	え
Mihalache Ovidiu.....139	江連 俊樹 ..... 136
Simonnet Marie.....118	海老原 健一 ..... 180
The Dang Vu.....171	
Thomsen Bo.....191	お
Trianti Nuri .....21	大西 弘明 ..... 112
	岡垣 百合亜 ..... 28
あ	奥村 雅彦 ..... 115, 176, 182
相澤 一也.....171	小野 綾子 ..... 82
安部 諭 .....26	小野寺 直幸 ..... 76, 203
安部 晋一郎 .....57	
阿部 陽介.....99, 101	か
	加藤 正人 ..... 142
い	門脇 正尚 ..... 55
李 在洪 .....165	上平 雄基 ..... 50
五十嵐 誉廣 .....107	
石垣 将宏.....31	き
石崎 梓 .....19	菊地 紀宏 ..... 131
石田 武和.....171	木田 美津子 ..... 154
石塚 悦男.....123	北村 竜明 ..... 148, 151
板倉 充洋.....99, 198	
伊藤 史哲.....165	こ
井戸村 泰宏 .....203	小泉 光生 ..... 165
岩元 大樹.....41	米田 政夫 ..... 74
岩元 洋介.....59	菰田 宏 ..... 134
	近藤 友美 ..... 191

<b>さ</b>		<b>ち</b>	
坂本 健作.....	148, 151	崔 炳賢.....	33
坂本 雅洋.....	153	チャイ プンフィ.....	156
佐藤 達彦.....	67		
<b>し</b>		<b>つ</b>	
志賀 基之.....	168, 191	土屋 晴文.....	72
柴田 卓弥.....	148, 151	都留 智仁.....	99, 101
<b>す</b>		<b>て</b>	
菅原 隆徳.....	79	寺田 敦彦.....	158
杉田 剛.....	115		
杉本 貴則.....	112	<b>な</b>	
杉山 智之.....	21	永井 佑紀.....	174
鈴木 敏.....	165	永江 勇二.....	154
鈴木 貴行.....	82, 85, 88	永武 拓.....	76, 79
鈴木 知史.....	104	中村 博樹.....	142, 168, 176, 196
鈴木 知明.....	99, 200	中山 浩成.....	52
鈴谷 賢太郎.....	49		
数納 広哉.....	194	<b>に</b>	
		仁井田 浩二.....	44
		西田 明美.....	33
<b>せ</b>		<b>は</b>	
関 暁之.....	207	橋本 慎太郎.....	62
		原田 正英.....	44
<b>そ</b>		<b>ひ</b>	
曾我 彰.....	134	日水 有人.....	203
<b>た</b>		<b>ふ</b>	
高瀬 和之.....	148, 151	深谷 裕司.....	145
高橋 時音.....	165	古田 琢哉.....	65
高屋 茂.....	128	古野 朗子.....	163
滝野 一夫.....	134		
武田 和雄.....	44		
田中 正暁.....	131, 136		
谷口 良徳.....	16		
谷中 裕.....	134		

ほ

堀口 直樹.....85, 88, 91, 94

ま

前田 亮.....69

町田 昌彦..... 142, 168, 171, 174, 176, 188

松田 規宏.....97

松田 洋樹.....38

真野 晃宏.....35

真弓 明恵.....203

み

三輪 周平.....94

む

村井 直樹.....46

も

毛利 哲也.....134

茂木 孝介.....21

森 道康.....112

や

柳沢 秀樹.....125

山口 瑛子.....182

山口 正剛.....99, 185

山下 晋..... 76, 79, 148, 151

山田 進.....174, 188

山田 知典.....148, 151

ゆ

ユスフ アリ.....203

よ

横田 光史..... 121

吉川 龍志..... 131

吉田 亨..... 44

吉田 啓之..... 82, 85, 88

吉廣 保..... 131

わ

渡部 晃..... 125

This is a blank page.

# 国際単位系 (SI)

表1. SI 基本単位

基本量	SI 基本単位	
	名称	記号
長さ	メートル	m
質量	キログラム	kg
時間	秒	s
電流	アンペア	A
熱力学温度	ケルビン	K
物質량	モル	mol
光度	カンデラ	cd

表2. 基本単位を用いて表されるSI組立単位の例

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

(a) 量濃度 (amount concentration) は臨床化学の分野では物質濃度 (substance concentration) ともよばれる。  
 (b) これらは無次元量あるいは次元1をもつ量であるが、そのことを表す単位記号である数字の1は通常は表記しない。

表3. 固有の名称と記号で表されるSI組立単位

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

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

表4. 単位の中に固有の名称と記号を含むSI組立単位の例

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

表5. SI 接頭語

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

表6. SIに属さないが、SIと併用される単位

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

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

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

表8. SIに属さないが、SIと併用されるその他の単位

名称	記号	SI単位で表される数値
バール	bar	1 bar=0.1MPa=100 kPa=10 <sup>5</sup> Pa
水銀柱ミリメートル	mmHg	1 mmHg=133.322Pa
オングストローム	Å	1 Å=0.1nm=100pm=10 <sup>-10</sup> m
海里	M	1 M=1852m
バイン	b	1 b=100fm <sup>2</sup> =(10 <sup>12</sup> cm <sup>2</sup> ) <sup>2</sup> =10 <sup>-28</sup> m <sup>2</sup>
ノット	kn	1 kn=(1852/3600)m/s
ネーパ	Np	SI単位との数値的関係は、 対数量の定義に依存。
ベレル	B	
デシベル	dB	

表9. 固有の名称をもつCGS組立単位

名称	記号	SI単位で表される数値
エルグ	erg	1 erg=10 <sup>-7</sup> J
ダイン	dyn	1 dyn=10 <sup>-5</sup> N
ポアズ	P	1 P=1 dyn s cm <sup>-2</sup> =0.1Pa s
ストークス	St	1 St=1cm <sup>2</sup> s <sup>-1</sup> =10 <sup>-4</sup> m <sup>2</sup> s <sup>-1</sup>
スチルブ	sb	1 sb=1cd cm <sup>-2</sup> =10 <sup>4</sup> cd m <sup>-2</sup>
フオト	ph	1 ph=1cd sr cm <sup>-2</sup> =10 <sup>4</sup> lx
ガリ	Gal	1 Gal=1cm s <sup>-2</sup> =10 <sup>-2</sup> ms <sup>-2</sup>
マクスウェル	Mx	1 Mx=1 G cm <sup>2</sup> =10 <sup>-8</sup> Wb
ガウス	G	1 G=1Mx cm <sup>-2</sup> =10 <sup>-4</sup> T
エルステッド <sup>(a)</sup>	Oe	1 Oe <sub>e</sub> =(10 <sup>3</sup> /4π)A m <sup>-1</sup>

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

表10. SIに属さないその他の単位の例

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

