JAEA-Review 2021-022 DOI:10.11484/jaea-review-2021-022



# 令和 2 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 FY2020 (April 1, 2020 – March 31, 2021)

> 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

**- Keview** 

January 2022

Japan Atomic Energy Agency

日本原子力研究開発機構

本レポートは国立研究開発法人日本原子力研究開発機構が不定期に発行する成果報告書です。 本レポートはクリエイティブ・コモンズ表示 4.0 国際 ライセンスの下に提供されています。 本レポートの成果(データを含む)に著作権が発生しない場合でも、同ライセンスと同様の 条件で利用してください。(<u>https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ja</u>) なお、本レポートの全文は日本原子力研究開発機構ウェブサイト(<u>https://www.jaea.go.jp</u>) より発信されています。本レポートに関しては下記までお問合せください。

国立研究開発法人日本原子力研究開発機構 JAEA イノベーションハブ 研究成果利活用課 〒 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. This work is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License (<u>https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.en</u>). Even if the results of this report (including data) are not copyrighted, they must be used under

the same terms and conditions as CC-BY.

For inquiries regarding this report, please contact Institutional Repository and Utilization Section, JAEA Innovation Hub, 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, 2022

#### 令和2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

#### (2021年9月6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論文発表は、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2年度における大型計算機システムを利用した研究開発の成果を中心に、それを支える利用支援、利用実績、システムの概要等をまとめたものである。

原子力科学研究所:〒319-1195 茨城県那珂郡東海村大字白方 2-4

# Summaries of Research and Development Activities by using Supercomputer System of JAEA in FY2020 (April 1, 2020 – March 31, 2021)

HPC Technology Promotion Office

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

(Received September 6, 2021)

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 FY2020, 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 FY2020, 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	目
-----	---

1.	はじめに		1
2.	原子力機構	毒の大型計算機システム環境	4
	2.1 大型	<b>』計算機システムの更新</b>	4
	2.1.1	計算需要と調達方針	4
	2.2 令利	□ 2 年度のシステム構成	5
	2.2.1	旧システムの構成	5
	2.2.2	新システムの構成	6
3.	令和2年度	まにおける計算機利用実績	8
	3.1 シア	ペテム稼働率・コア利用率	8
	3.2 大型	U計算機システムの組織別利用実績	9
4.	大型計算機	とシステムの利用支援	12
	4.1 計算	<b>『</b> 機利用における支援	13
	4.1.1	利用相談	13
	4.1.2	プログラム開発整備	13
	4.1.3	プログラム最適化チューニング	16
	4.1.4	GPGPU 計算機の整備に向けたユーザ支援	
	4.2 計算	『機利用技術の向上に向けた教育(講習会・セミナー)	19
5.	大型計算機	とシステム利用による研究成果	20
	5.1 安全	≧研究センター	20
	5.1.1	RuO <sub>4</sub> とNO <sub>x</sub> (X=1,2)の分子間ポテンシャルに関する理論的研究	20
	5.1.2	シミュレーションを活用した原子力発電所の動的確率論的リスク評価	23
	5.1.3	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	
	5.1.4	単管形状におけるスワール型スペーサによって誘起される乱流生成特性と	: 熱
		伝達向上に関する数値流体解析	
	5.1.5	S-CLSVOF 法による二相流 CFD 解析ソルバへの AMR 法の適用	
	5.1.6	FEMAXI-8 コードの移植・高速化作業	32
	5.2 J-P.	ARC センター	

5.2.2	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	35
<b>F</b> 9 百	マカ甘淋工学研究センカ	97
5.3 原		37 1
5.3.1	緊急時一件環境成別能評価システム SI EAMER にわける領域タリンスケーリ	) 0 <b>7</b>
• • • •		
5.3.2	同所政局分解能大気拡散モアルを用いた原于刀施設周辺の大気拡散・緑重解析	丌
<b>*</b> 0.0		39
5.3.3	DCHAIN 及び PHITS の改良	42
5.3.4	PHITS ユーザ人力支援ソフトワェアの作成	44
5.3.5	PHITS における分析機能の開発	47
5.3.6	PHITSのOpenMP共有メモリ型並列計算性能の向上を目指した改良	50
5.3.7	大気および土壌に分布した放射性核種に対する外部被ばく線量評価コードの	
	開発	53
5.3.8	β崩壊半減期の系統的な理論予測計算	56
5.3.9	様々な中性子エネルギーを利用した PGA における水素測定感度のシミュレー	_
	ションと実験結果の比較	58
5.3.10	中性子共鳴透過分析装置の高度化に向けた解析	60
5.3.11	中性子回転照射法実験のシミュレーション	62
5.3.12	下部ヘッドにおける溶融物挙動解析手法の開発	64
5.3.13	界面追跡法に基づく混相流解析手法開発	66
5.3.14	スプラッシュ現象に対する詳細混相流解析コードの適用性評価と課題抽出	69
5.3.15	過酷時及び定常時における炉心内非定常熱流動事象評価解析手法の開発	71
5.3.16	ADS 設計のための詳細熱流動解析	74
5.3.17	機構論的限界熱流束手法確立のための二相流挙動解析	77
5.3.18	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	80
5.3.19	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	83
5.3.20	ナトリウムの評価済み核データに対するベンチマーク計算	86
5.3.21	CuZr バルク金属ガラスと鉄表面のアセテート吸着に対する第一原理計算に基	恚
	づく原子レベルのエネルギーと応力評価	89
5.3.22	ADS 材料の第一原理計算	91
5.3.23	合金化と組織制御のための原子・電子シミュレーション	94
5.3.24	アルミニウム合金中のナノクラスタと転位との相互作用の解明	97
5.3.25	J-PARC MLF 水銀標的に対する 3GeV 陽子入射 180 度中性子エネルギース~	°
	クトルの解析	99

5.3	.26	ADS ビーム窓設計のための粒子輸送解析102
5.4	先靖	#基礎研究センター104
5.4	.1	高密度天体における物質の非一様構造と状態方程式104
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
5.5	物質	f科学研究センター110
5.5	.1	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110
5.6	高远	を炉サイクル研究開発センター113
5.6	.1	高速炉蒸気発生器内ナトリウムー水反応現象数値解析コードの高度化113
5.6	.2	SPIRAL による外側除熱条件下における大型燃料集合体試験解析116
5.6	.3	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の核
		特性の解析119
5.6	.4	高速炉の炉心変形評価のための FEM 解析モデルの開発121
5.7	敦了	<b>買総合研究開発センター</b> 124
5.7	.1	実験データを用いたハルバッハ配列 EMAT の磁束の再現シミュレーション124
5.7	.2	レーザー溶融・凝固解析コードの検証127
58	㈱彩	4.サイクル設計部 130
5.8	1	CNWG・朱准燃料物性計算科学研究 130
0.0	• 1	
5.9	福島	易研究開発部門133
5.9	.1	空間線量率を用いた実効線量推定手法の高精度化133
5.10	廃炕	□環境国際共同研究センター136
5.1	0.1	福島廃炉推進のためのレーザー溶融シミュレーションの安定化に向けた手法
		の開発(1)136
5.1	0.2	福島廃炉推進のためのレーザー溶融シミュレーションの安定化に向けた手法
		の開発 (2)
5.1	0.3	水域動態モデル 3D-Sea-SPEC のダム湖・河口域への適用142
5.1	0.4	東京電力福島第一原子力発電所の全炉心3次元核種インベントリ計算144
5.1	0.5	含水廃棄物等の水分蒸発挙動コードの開発145

5.11 シブ	ステム計算科学センター	.147
5.11.1	材料における軽元素が示す核量子効果等の計算科学研究	.147
5.11.2	原子力分野での物性計算科学技術の高度化	.150
5.11.3	機械学習を用いた放射性物質の原子スケールシミュレーション	.152
5.11.4	粘土鉱物へのラジウムの吸着構造の解明	.156
5.11.5	第一原理計算による原子力材料劣化機構の研究	.159
5.11.6	福島第一原子力発電所港湾内の放射性物質動態解析シミュレーション	.161
5.11.7	水素材料の第一原理分子動力学計算	.164
5.11.8	機械学習分子動力学法によるセメント水和物の解析	.167
5.11.9	原子・分子シミュレーションによる核燃料の物性評価	.170
5.11.10	液体材料の第一原理計算	.173
5.11.11	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	.176
5.11.12	リアルタイム都市風況解析コード CityLBM によるアンサンブル計算	.179
6. おわり	に	.182
付録		.183
著者名別	論文索引	.185

# Contents

1.	Introduct	tion1
2.	Supercon	nputer System of JAEA4
	2.1 Ren	newal of Supercomputer System of JAEA4
	2.1.1	Demand for Computational Resource and Procurement Policy4
	2.2 Cor	figuration of Supercomputer System in FY20205
	2.2.1	Configuration of Old Supercomputer System
	2.2.2	Configuration of New Supercomputer System
3.	Compute	r Usage Records in FY20208
	3.1 Ava	ailability and Utilization Rate8
	3.2 Sec	tor Computer Time
4.	User Sup	port of Supercomputer System of JAEA 12
	4.1 Sup	oport for the Use of Supercomputer System of JAEA13
	4.1.1	Help Desk
	4.1.2	Program Development and Maintenance13
	4.1.3	Program Optimization Tuning
	4.1.4	User Support for Program Modification for GPGPU Computer18
	4.2 Tra	ining for Computer Usage Techniques (Tutorials, Seminars)19
5.	Research	and Development Activity by using Supercomputer System of JAEA20
	5.1 Nu	clear Safety Research Center20
	5.1.1	A Theoretical Investigation on the Intermolecular Potential Curve between
		Ruthenium Tetroxide and $\mathrm{NO}_X\left(X{=}1{,}2\right)$ 20
	5.1.2	Simulation-based Dynamic Probabilistic Risk Assessment of Nuclear
		Power Plants
	5.1.3	Evaluation of Terrain Effect in Airborne Radiation Monitoring26
	5.1.4	CFD Investigation on the Turbulence Production and Heat Transfer
		Augmentation induced by a Swirl Spacer
	5.1.5	Application of AMR Method to Two-phase Flow CFD Solver on S-CLSVOF Method
	5.1.6	Optimization/Refactoring of Fuel Performance Code FEMAXI-8

5.2	J-F	PARC Center
5.	2.1	Simulation of Accelerator Driven Critical System using PHITS
5.	2.2	Simulating the Neutron Phonon Cross Section using the Density
		Functional Theory35
5.3	Nu	clear Science and Engineering Center
5.	3.1	Implementing Regional Downscaling Capability in the STEAMER
		Radionuclide Dispersion Prediction System
5.	3.2	Detailed Analysis on Plume Dispersion and Air Dose Rate in the Vicinity of
		a Nuclear Facility using a Local-scale High-resolution Atmospheric
		Dispersion Model
5.	3.3	Improvement of DCHAIN and PHITS42
5.	3.4	Development of PHITS Graphical User Interface: PHACE
5.	3.5	Development of Estimation Function in PHITS47
5.	3.6	Improvement of OpenMP Shared Memory Parallelization in PHITS50
5.	3.7	Dose-Estimation Code for External Exposure to Radionuclides in Air and
		on Ground53
5.	3.8	Systematic Theoretical Prediction of 8-decay Half-lives
5.	3.9	Comparison between Simulation and Experimental Results for
		Measurement Sensitivity of Hydrogen in PGA using Various Neutron
		Energy
5.	3.10	Analytical Research on Improvement of Neutron Resonance Transmission
		Analysis System
5.	3.11	Simulations for Experiments of the Neutron Rotation Method
5.	3.12	Development of Numerical Simulation Method for Molten Core Behavior in
		Lower Head64
5.	3.13	Development of Multiphase Flow Analysis Method Based on Interface
		Tracking Method
5.	3.14	Applicability Evaluation and Issue Extraction of The Detailed Multiphase
		Flow Simulation Code for a Splash Phenomena69
5.	3.15	Development of Numerical Simulation Method for Thermal Fluid Flow
		Phenomena on Severe Accident Condition in Reactor Pressure Vessel71
5.	3.16	Detailed Numerical Studies on Thermal-hydraulics in a Design of ADS
		System

5.3.17	Numerical Simulation of Two-phase Flow to Develop the Evaluation
	Method Based on Mechanism for Critical Heat Flux77
5.3.18	Development of Numerical Simulation Method of Aerosol Particle
	Capturing Behavior
5.3.19	Development of Evaluation Method for Aerosol Particle Behavior in a
	Reactor Building
5.3.20	Benchmark Calculations for Evaluated Nuclear Data of Sodium
5.3.21	Atomic-level Energy and Stress Calculated from First Principle in CuZr
	Bulk Metallic Glass and Iron Slab with Acetate Adsorbate
5.3.22	First-principles Calculation of Structural Material for ADS91
5.3.23	Atomic and Electronic Structure Calculations for Alloying and Defect
	Structures
5.3.24	Atomistic Modeling of Interaction between Nanocluster and Dislocations97
5.3.25	Analysis of 3-GeV Proton-induced Neutron Energy Spectrum at 180° for a
	Mercury Target at J-PARC MLF
5.3.26	Particle Transport Analysis for ADS Beam Window Design102
5.4 Ad	vanced Science Research Center104
5.4.1	Inhomogeneous Structures and the Equation of State of Matter in Compact
	Stars
5.4.2	Research for Ground State and Excitation Dynamics in Low-dimensional
	Strongly Correlated Systems
5.5 Ma	terials Sciences Research Center
5.5.1	Simulation Program for Microscopic Magnetization Processes in Magnetic
	Materials with Dipole-dipole Interactions110
5.6 Fa	st Reactor Cycle System Research and Development Center
5.6.1	Advancement of a Computer Program for Sodium-water Reaction
	Phenomena in a Steam Generator of Fast Reactors
5.6.2	Analysis of Large-scale Fuel Assembly Experiment with External Heat
	Removal Condition by SPIRAL
5.6.3	Calculation of Core Characteristics for Sodium-Cooled Fast Reactor with
	the Continuous Energy Monte-Carlo Code, MVP119

5.6	3.4	Development of an FEM Based Analysis Model for Core Deformation of a
		Fast Reactor
5.7	Tsu	uruga Comprehensive Research and Development Center124
5.7	7.1	Reconstruction of the Three Components of the Magnetization of Halbach
		Magnet in EMAT from Experimental Measurements124
5.7	7.2	Verification of the Simulation Code for Laser Processing127
5.8	Fue	el Cycle Design Department
5.8	3.1	Numerical Study of Physical Properties of Advanced Fuel in CNWG130
5.9	Sec	ctor of Fukushima Research and Development133
5.9	9.1	Studies on the Effective Dose for Public Calculated by Air Dose Rate
<b>F</b> 10	0.1	
5.10		laborative Laboratories for Advanced Decommissioning Science
5.]	10.1	Development of Stabilizing Laser Melting Simulation for Decommissioning
		Promotion at Fukushima Daiichi Nuclear Power Station (1)
5.1	10.2	Development of Stabilizing Laser Melting Simulation for Decommissioning
		Promotion at Fukushima Daiichi Nuclear Power Station (2)139
5.1	10.3	Application of the Numerical Model of Radionuclide Migration in Water to
		a Dam Lake and Coastal Areas in Fukushima142
5.1	10.4	Whole Core Three-dimensional Nuclide Inventory Calculation of the
		Fukushima Daiichi Nuclear Power Station144
5.1	10.5	Development of Drying Simulation Code for Waste Storage
	a	
5.11	Cei	nter for Computational Science & e-Systems
5.1	1.1	Computational Studies for Nuclear Quantum and Related Effects of Light
		Elements inside Materials
5.1	11.2	Development of Numerical Techniques for Materials in the Research Field
		of Atomic Energies
5.1	11.3	Atomic Scale Simulations of Radioactive Materials using Machine
		Learning
5.1	11.4	Investigation of Adsorption Structure of Radium on Clay Minerals156
5.1	11.5	First-principles Study for the Degradation of Nuclear Materials159

	5.11.6 Simulation for Radioactive Nuclides Transport inside Harbor of		
		Fukushima Daiichi Nuclear Power Station16	61
	5.11.7	Ab Initio Molecular Dynamics Simulations of Hydrogen in Materials16	64
	5.11.8	Machine Learning Dynamics Simulation for Cement Hydrate16	<b>37</b>
	5.11.9	Atomic Simulations of Physical Properties for Nuclear Fuel17	70
	5.11.10	First-principles Calculation of Liquid Materials17	73
	5.11.11	Atomistic Simulations for Microstructural Evolution of Irradiated	
		Materials	76
	5.11.12	Ensemble Simulation with the Real-time Urban Wind Code CityLBM1	79
6.	Conclusio	on18	82
App	pendices		83
Aut	thor Name	9 Index	85

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2年度に原子力機構の発表した査読付論文の総数は890件であった。このうち計算科学技術 を利用した論文は192件(21.6%)である。この論文数は、全論文の20%以上を占めており、原 子力機構の研究成果に対する計算科学技術の貢献度の高さを示している。



図 1.1 計算科学技術による研究成果創出貢献度 [平成 23 年~令和 2 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 23 年~令和 2 年度] (1/2)



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 23 年~令和 2 年度] (2/2)

大型計算機システムの利用者数が多い4組織(原子力基礎工学研究センター、安全研究センター、システム計算科学センター、高速炉・新型炉研究開発部門)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2年度の大型計算機利用成果をまとめたものである。2章 に新旧の大型計算機システムとその構成概要を、3章に大型計算機システムの利用状況を、4章に 大型計算機システムの利用支援について示す。さらに、5章では、原子力機構の大型計算機システ ムが具体的にどのような研究開発に利用され、どのような成果を創出しているかを示す。

# 2. 原子力機構の大型計算機システム環境

### 2.1 大型計算機システムの更新

平成 27 年 11 月末に導入した旧システム(ICE X)は、中核となる大規模並列演算部、3 つの 処理部(ISV アプリ処理部、可視化処理部、ログイン処理部)で構成され、システム全体として 総理論演算性能 2,421TFLOPS の性能を有したシステムである。運用開始以来、コアの年間利用 状況は、3 年目以降 93%を超える極めて高い利用率で推移しており、処理能力の限界に達してい た(図 2.1: 黄色の面グラフ)。

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



#### 2.1.1 計算需要と調達方針

新システムの更新に際しては、導入する新システムの規模(性能)を適正に評価するため、平 成 29 年 4 月に原子力機構の全課室を対象に計算需要調査を実施し、新システムに対して 10 PFLOPS 以上の計算ニーズがあることが判明した。その結果、CPU 価格の高止まりやスパコン メーカの開発計画の遅れから、原子力機構単独では 3.8PFLOPS 程度しか調達できない見込みで あることが判明した。この課題に対し、①旧システムは量子科学技術研究開発機構(以下「量研 機構」)との連携協力に係る包括協定に基づく共同利用を実施していた経緯も踏まえて量研機構と の共同調達・共同運用、②CPU よりもコストパフォーマンスが良いとされる GPGPU 計算機の導 入、③スパコン性能向上の鈍化を踏まえたリース期間の延長(4 年→6 年)などの調達方針の見直 し策を講じ、より計算需要に近い新システムへ更新を図ることとした。

## 2.2 令和2年度のシステム構成

令和 2 年度は、新システムの更新工事期間中における計算資源のない期間を最小限にとどめる ため、7 月に旧システムを半分に縮小して 11 月まで運用を続け、縮小により空いたスペースを活 用して新システムの SGI8600 を設置し、12 月から運用することとした。7 月に縮小した旧シス テム (2,409TFLOPS  $\rightarrow$  1,032TFLOPS) の計算資源の不足分を補うため、東京大学のスーパー コンピュータシステム (Oakbridge-CX システム)の利用権 (1,377TFLOPS 相当分)を令和 2 年 12 月まで確保し、導入過渡期においても総理論演算性能 (2,409TFLOPS) を維持した。

### 2.2.1 旧システムの構成

縮小後の旧システムの構成を図 2.2 に示す。旧システムは、大規模並列演算部を中核とし、3 つの処理部(ISV アプリ処理部、可視化処理部、会話処理部)を加えたシステム全体として総理 論演算性能 1,032TFLOPS の性能を有している。各ノードには、インテル Xeon プロセッサ(12 コア)を2プロセッサ、主記憶 64GB(ISV アプリ処理部、可視化処理部は 256GB)を搭載して いる。また、ノード間通信機構は、InfiniBand FDR の片方向 13.6GB/s(2ポート接続)の帯域 を有している。ストレージは、4TB HDD×1,260本、I/O 性能 163GB/s の磁気ディスク装置(3.5PB) に構築した並列ファイルシステムに、不慮のデータ消失に備えるための磁気テープライブラリー 装置(1PB)で構成している。



図 2.2 旧システムの構成

#### 2.2.2 新システムの構成

新システムの構成を図 2.3 に示す。新システムは、GPGPU 演算部と CPU 演算部の GPU+CPU のハイブリットシステムを中核とし、ISV アプリ処理部、ログイン処理部を加えたシステム全体 として総理論演算性能 12.6PFLOPS (旧システムの約 5 倍)の性能を有している。GPGPU 演算 部のノードには、インテル Xeon プロセッサ (24 コア、3.0GHz)を 2 プロセッサ、主記憶 384GB、 NVIDIA Tesla V100 32GB×4 枚、CPU 演算部のノードには、インテル Xeon プロセッサ (20 コ ア、3.1GHz)を 2 プロセッサ、主記憶 192GB、ISV アプリ処理部のノードには、インテル Xeon プロセッサ (28 コア、2.7GHz)を4 プロセッサ、主記憶 1,536GB、ログイン処理部のノードに は、インテル Xeon プロセッサ (20 コア、3.1GHz)を2 プロセッサ、主記憶 384GBを搭載して いる。また、GPGPU 演算部と CPU 演算部のノード間通信機構は、InfiniBand EDR の片方向 50GB/s(4 ポート接続)、ISV アプリ処理部とログイン処理部は InfiniBand EDR の片方向 25GB/s (2 ポート接続)の帯域を有している。ストレージは、12TB HDD×2,040本、I/O 性能 400GB/s の磁気ディスク装置 (17.6PB)で構築した大容量の並列ファイルシステムに、不慮のデータ消失 に備えるための磁気テープライブラリー装置 (4PB)で構成している。新旧システムの性能比較 を表 2.1 に示す。

GPGPU 演算部(9.739PFLOPS)においては、Linpack 性能試験を実施し、8.439PFLOPS (実行効率 86%)の性能を得た。この性能は「TOP500 Supercomputer Sites」(令和 2 年 11 月 発表)において、国内 8 位、世界 45 位を記録した。



図 2.3 新システムの構成

表 2.1 性能比較(主な仕様)

	旧システム <sup>※1</sup> ICE X	新システム SGI8600	性能等の 向上率 (倍)
タイプ	スカラ	スカラ	-
総演算性能 (TFLOPS)	2,409	12,540	5.2
コア数	60,240	41,296	0.67
ノード数	2,510	978	0.39
CPU	Xeon E5-2680 v3 12 コア/CPU	Xeon Gold 6242R 20 $\neg \mathcal{T}/\text{CPU}^{st_2}$ Xeon Gold 6248R 24 $\neg \mathcal{T}/\text{CPU}^{st_3}$	1.67 $2.0$
演算性能/コア (GFLOPS)	40.0	$99.2^{st_2}$ $96.0^{st_3}$	2.48 $2.4$
メモリ (GB/ノード)	64	$192^{st_2}\ 384^{st_3}$	3.0 6.0
総主記憶容量 (TB)	156.8	234.3	1.49
ノード間 通信性能	片方向 13.6GB/s (全二重)	片方向 50GB/s (全二重)	3.7
OS	SUSE Linux Enterprise Server 11 SP3	Red Hat Enterprise Linux 7.7	-
コンパイラ	Fortran C/C++	Fortran C/C++	-

※1 平成 27 年 11 月~令和 3 年 3 月までの性能
※2 CPU 演算部
※3 GPGPU 演算部

令和3年3月末 現在

# 3. 令和2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

旧システムは、安定して運用され、4 月~11 月の稼働率は 99%を達成した(図 3.1:青の棒グ ラフ)。運用の停止は、年度切替え作業(4 月)、システム更新に係るシステム縮退作業(7 月)、 構内全域停電(8 月)によるものである。また、コア利用率は 93%であった(図 3.1:黄の棒グラ フ、詳細な利用実績は付録 A に示す)。

新システムの導入過渡期用(6月~12月)として確保した東京大学スーパーコンピュータシス テム(約1PFlops分の利用権:以下、Oakbridge-CX)も有効に活用された。



図 3.1 旧システムと新システムの稼働率・コア利用率(年間)

新システムは、令和2年12月1日の運用開始から令和3年3月31日までは、利用者プログラ ムの移行や運用パラメータ調整を行うための試用期間としている。運用当初、バッチシステムの 初期トラブルの臨時保守作業等により、一時的に低い稼働率があったものの、その後100%(図 3.1:青の棒グラフ)を達成している。また、コア利用率は2月以降、約90%に到達した(図3.1: 緑の棒グラフ、詳細な利用実績は付録Aに示す)。

# 3.2 大型計算機システムの組織別利用実績

令和2年度の大型計算機システム(ICEX、Oakbridge-CX及びSGI8600含む)の利用者数は 367名である(システムの運用要員を除く)。組織別利用者数においては、原子力基礎工学研究セ ンター、安全研究センター、システム計算科学センター、及び高速炉サイクル研究開発センター の4つの組織で大きな割合を占めている(図3.2)。



図 3.2 大型計算機システムの組織別利用者数



図 3.3 大型計算機システムの分野別コア時間利用実績

大型計算機システムの利用コア時間は、4月からの累積で27,361万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。福島復興では原子力基礎工学研究センター、システム 計算科学センターがそれぞれ福島研究開発部門と連携して炉心内構造物の溶融挙動、コンク リート中のセシウム拡散や処理水放出の放射線物質の挙動などの解析計算に利用された。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。

項	計算内容	組織	プログラム名 最大並列数	利用時間 (コア時間 単位:万)	関連する 成果報告
1	過酷時及び定常時における 炉心内非定常熱流動事象評 価解析手法の開発	原子力基礎工学 研究センター 廃炉環境国際共同 研究センター	JUPITER 9,600	36,397.5	5.3.15 項

表 3.1 主な大型計算機システムを利用した福島復興に係る対応(1/2)

項	計算内容	組織	プログラム名 最大並列数	利用時間 (コア時間 単位:万)	関連する 成果報告
2	放射性物質の存在様態解析 等の数値シミュレーション	システム 計算科学センター	VASP 2,400	15,935.4	5.11.3 項
က	界面追跡法に基づく混相流 解析手法開発	原子力基礎工学 研究センター	TPFIT 5,120	8,409.8	5.3.13 項
4	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	原子力基礎工学 研究センター	JUPITER 10,368	2,636.8	5.3.18 項
15	福島第一原発事故のトリチ ウム水基礎物性に関する解 析	システム 計算科学センター	PIMD 7,680	2,586.5	5.11.7項
6	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	原子力基礎工学 研究センター	TPFIT 5,120	1,174.9	5.3.19 項
7	福島第一原子力発電所港湾 内の放射性物質動態解析シ ミュレーション	システム 計算科学センター	KOWAN 7,680	1,013.8	5.11.6 項
8	燃料デブリの物性評価	システム 計算科学センター	VASP 2,560	1,004.8	5.11.9 項
9	材料機能における核量子効 果(特に水素の同位体)の計 算科学研究	システム 計算科学センター	VASP 3,600	835.6	5.11.1 項
10	環境放射性核種に対する外 部被ばく線量評価	原子力基礎工学 研究センター	PHITS 2,160	394.4	5.3.7 項

表 3.1 主な大型計算機システムを利用した福島復興に係る対応(2/2)

# 4. 大型計算機システムの利用支援

大型計算機システムを利用した成果の着実な創出には、研究者における創意工夫によるところ が第一ではあるが、システムを運用管理する部門における利用者への充実した支援が欠かせない。 大型計算機システムは、大規模かつ複雑なシステム(ハードウェア、ソフトウェア)の組み合わ せにより成り立っている。利用者の多くはプログラミングの専門家ではないため、プログラム自 体の開発や改良が利用者任せになると、多大な時間を費やすことになり、本来の研究の効率的な 推進の妨げになる。また、システムの運用管理面からは、利用率と利用効率の低下を招くことに なる。

原子力機構では、専門スタッフによる階層的な利用支援体制を整備することにより、初歩的な 大型計算機システムの利用相談から、高度な技術を要するプログラムの開発や改良(最適化)に 至るまでをカバーするとともに、大型計算機システムの利用技術の習得・向上を目的とする講習 会・セミナー開催などの教育を実施することにより、利用者の研究活動を計算機利用技術の向上 と利用効率化の両面から体系的に支援している(図 4.1)。この利用支援への取り組みは、3章に 示したように、大型計算機システムの利用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2年度の利用相談は、年間725件(月平均:約60件)寄せられた(詳細は付録Bに示す)。 そのうち約60%が大型計算機システム(ICEX・SGI8600)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2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。

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・SGI8600 への整備が必要なプログラム	_

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

令和2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、令和元年度に引き続き、国内外のユーザ数が4,000名を超える汎用モンテカルロ計算コード(PHITS)について、PHITS利用のGUIの機能拡張、複数タリーの分析機能の開発、PHITSとDCHAIN-SPの連携解析の開発作業を3件実施した。これにより、PHITSを用いた研究成果の増加や利用者拡大が期待される。

表 4.2 4	令和2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)	汎用モンテカルロ計算コード(PHITS)の利用において、多 くの入力ファイルのパラメータ等を視覚的に理解して入力で きるグラフィカルユーザインタフェイス(PHACE)の開発を 支援。令和元年度に開発したWindows®版PHACEに対し、 編集機能の利便性向上のため右端の折り返し、行番号の表示 機能の追加と、表示文字の多言語化機構、Angel, Dchainの実 行機能を備えたメニューバーの再構成を実施。これにより、 PHITS利用の入力データ作成と実行が容易となり、特に初心 者にとっての利便性が向上した。	5.3.4 項
2	双極子相互作用す るサイトランダム 強磁性体における 微視的磁化過程シ ミュレーションプ ログラムの作成 (P1)	双極子相互作用及び RKKY 相互作用、交換相互作用するラン ダムネスを含む磁性体における磁化過程を解明するため、空 間2 次元と3 次元におけるランダウ=リフシッツ方程式を用 いたシミュレーションプログラムの開発を支援。これにより、 乱れを含む磁性体における磁化が動的に行われていく過程を より詳細に明らかにして、トポロジカルスピン秩序状態や、 長年にわたって未解決な問題が残るグラス状態に関する基礎 的な知見が得られるようになった。	5.5.1 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 の開発を支援。令和元年度に開発した[t-track]タ リーの分析機能を、[t-deposit]タリーでも利用できるように機 能の拡張を実施。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。	5.3.5 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3次元含水廃棄物等の水分蒸発挙動コードの開発を 支援。長期的な非定常計算を可能とするリスタート機能を開 発。これにより、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。	5.10.5 項

表 4.2 名	合和2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)	DCHAIN-PHITS で出力される誘導放射能の情報を PHITS の線源情報形式で出力する機能を開発。これにより、PHITS と DCHAIN-SP による放射能の逐次計算が可能となり、この 機能で、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 の利便性が向上した。	5.3.3 項
6	福島廃炉推進のた めのレーザー溶融 シミュレーション の安定化に向けた 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、多相多成分詳細熱流動解析コ ード JUPITER 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、溶融したステンレス鋼の溶融池に水噴流を 衝突させ、形成された溶融地から溶融スラグが飛散し凝固す るまでの現象が再現され、溶融で生じた溶融スラグの移行現 象の予測ができる見通しを得られた。	5.10.1 項 5.10.2 項
7	放射性雲からの外 部被ばく線量評価 コードにおける入 出力データの可視 化環境整備 (P1)	原子力施設から環境中に排出される放射性物質による外部被 ばくを評価するため、放射性雲からの外部被ばく線量評価コ ード SIBYL における入出力データの可視化環境を整備。こ れにより、汎用可視化アプリケーション ParaView による地 表面での外部被ばく線量の予測マップの迅速な作成が可能と なった。	5.3.7 項
8	TPFIT-LPT に対す る可視化ルーチン の作成 (P1)	粒子追跡機能を追加した二相流解析コード TPFIT-LPT に付随する可視化ルーチンに対し、解析結果を長時間のリアルタ イム可視化に対応できるよう機能改修を実施。これにより、 24 時間程度の連続稼働によって発生していたアプリケーシ ョンの異常終了問題を解決し、長時間の安定動作と解析結果 のリアルタイム可視化が可能となった。	5.3.13 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2年度は表 4.3に示す選定要件に基づ き、6件のプログラム最適化チューニング作業を採択・実施した。

選定要件	選定件数
(T1)大規模課題で使用するプログラム	1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	_
(T3)原子力機構内で共通に使用されるプログラム	3件
(T4)福島支援等、緊急対応が必要なプログラム	_
(T5)ICE X・SGI8600 への整備が必要なプログラム	2 件

表 4.3 プログラム最適化チューニングにおける選定要件と選定件数

令和2年度の主な作業について表4.4に示す。SGI8600への整備が必要なアプリケーションと して選定したLOHDIM-LES に対しては、GPGPU利用のためにOpenACC化を実施し、9.4倍 の速度向上を得た。また、TPFIT-LPT については、3次元 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、2.7 倍の速度向上を得た。これらのコードは、新システムでの有効利用 が期待される。

表 4.4	令和2	年度高速化	•	並列化作業
-------	-----	-------	---	-------

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	LOHDIM·LES コード の GPGPU 移植作業 (T3)	OpenACC 化	1ノードあたり CPU 比 9.4 倍 の高速化を達成	5.3.2 項
2	TPFIT-LPT の並列化 作業 (T1)	<ol> <li>3 次元 MPI 並列化</li> <li>スレッド並列化</li> </ol>	オリジナル比 2.7 倍の高速化 を達成	5.3.13 項
3	緊急時海洋環境放射能 評価システム STEAMER の移植作業 (T5)	<ol> <li>ROMSの動作確認</li> <li>SEA-GEARNの動作確認</li> <li>MATLABの動作確認</li> </ol>	SGI8600 への移植	5.3.1 項
4	FEMAXI-8 コードの 高速化作業 (T3)	<ol> <li>Intel コンパイラのバグ 調査</li> <li>gnu コンパイラの動作 確認</li> <li>Vtune でのホットスポ ット解析</li> </ol>	SGI8600 への移植	5.1.6 項
5	PHITS の OpenMP 共有メモリ型並列計算 の性能向上を目指した 改良 (T3)	スレッド並列化	オリジナル比 1.5 倍の高速化 を達成	5.3.6 項
6	汎用非線形構造解析 プログラム FINAS の 移植作業 (T5)	<ol> <li>FORTRAN IVと現在</li> <li>FORTRAN(77/90)の非</li> <li>互換対応</li> <li>COMMON 配列の宣言</li> <li>サイズの変更</li> </ol>	SGI8600 への移植	5.6.4 項

### 4.1.4 GPGPU計算機の整備に向けたユーザ支援

2.1.1 計算需要と調達方針で示したとおり、従来の CPU 計算機に比べてコストパフォーマンス に優れた GPGPU 計算機という新しいアーキテクチャーの計算機を整備することとなった。ただ し、既存のユーザプログラムは GPGPU 計算機には不向きなプログラムもあるため、全てを GPGPU 化の対象とするわけにはいかない。そこで、計算需要の高い既存ユーザプログラム(10 本)の計算処理特性を調査した。さらに、現状の CPU 計算機で動作しているプログラムを GPGPU 計算機で動作させるには、プログラムの書き換えが必要であるため、新システムの運用 開始に先駆けて、既存ユーザプログラムのうち、短期間で移植できる見込みのものをピックアッ プして GPGPU 化を実施し、研究現場に提供した。GPGPU 化により CPU 実行時に比べて 3~ 10 倍の高速化を実現した(表 4.5)。

プログラム名	プログラム概要	GPGPU/CPU 加速率
JUPITER	過酷事故時炉内溶融物の移動挙動等の熱流動現象を評 価するプログラム	3.6 倍
SERAPHIM	多次元熱流動及びナトリウムー水反応解析プログラム	3.1 倍
TPFIT	気液二層流挙動を解析するプログラム	10.0 倍
vMPS_QM	低次元量子系の基底状態及び動的物理量を高精度に計 算するプログラム	8.9 倍
LAMMPS	古典的な経験ポテンシャルを利用した分子動力学計算プロ グラム	4.1 倍

表 4.5 GPGPU 化による主要ユーザプログラム

# 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。なお、これらの教育は、新 型コロナウイルス(COVID-19) 感染拡大の状況を踏まえ、オンラインで実施した。

令和2年度の講習会は、新システムの利用講習会、ISV (Independent Software Vender) ソフト、可視化関連のセミナー、及び講習会を8回開催(初級レベル:6回、中級レベル:2回)、延べ303名が参加した(表4.6)。実習による講習会や実機を使って確実な技術習得を指向した。

項	技術レベル	開催日時	開催場所	内容	形式	参加者
1	可視化 初級	令和2年 9月4日	オンライン	AVS/Express 講習会	講義 実習	15 名
2	利用方法 初級	令和2年 9月25日	オンライン	プログラミング講習会	講義	22 名
3	ISV ソフト 初級	令和2年 10月8日	オンライン	Ansys® Mechanical Enterprise 機能紹介セミナー	講義	17名
4	ISV ソフト 初級	令和2年 10月23日	オンライン	Ansys® Fluent® 2020 R1 基本 セミナー	講義	14名
5	ISV ソフト 中級	令和2年 11月10日 ~13日	オンライン	Abaqus の収束に関するセミナー	講義 実習	61 名
6	利用方法 初級	令和2年 11月24日	オンライン	新スーパーコンピュータシステ ム利用講習会	講義	149名
7	ISV ソフト 初級	令和2年 12月18日	オンライン	STAR-CCM+ 基礎+新機能紹介 セミナー	講義	9名
8	可視化 中級	令和3年 1月27日	オンライン	ParaView 講習会	講義 実習	16名

表 4.6 令和 2 年度講習会

# 5. 大型計算機システム利用による研究成果

# 5.1 安全研究センター Nuclear Safety Research Center

# 5.1.1 RuO<sub>4</sub> と NO<sub>x</sub> (X=1,2)の分子間ポテンシャルに関する理論的研究 A Theoretical Investigation on the Intermolecular Potential Curve between Ruthenium Tetroxide and NO<sub>x</sub> (X=1,2)

城戸 健太朗 シビアアクシデント研究グループ

#### (1) 利用目的:

<sup>106</sup>Ru などの放射性ルテニウムは原子力施設のシビアアクシデント時に揮発性の高い四酸化 ルテニウム (RuO<sub>4</sub>) などの形態で移行しやすいため、環境放出量を正確に定量化すべき核分裂 生成物の一つである。核燃料再処理施設において想定される高レベル廃液の沸騰乾固事故では、 RuO<sub>4</sub>生成時に NOx ガスが共存し、個別効果実験によればそれらとの相互作用によって移行挙 動が大きく影響されることが示唆されている。一方で、その相互作用の複雑さから実験相関式 を超える、或いは説明できる機構論的なモデルを構築することは難しく、これまでほとんど検 討されていなかった。

本研究では、RuO<sub>4</sub>とNOxガスが気相において引き起こす化学反応のうち、最初のステップ と考えられるNOx付加体(X=1,2)生成までのポテンシャルエネルギー曲線(PEC)を量子化 学計算(CASSCF法、CASPT2法、LR-CCSD(T)法、DFT法など)を用いて評価し、それらを 比較することで妥当性を検証した。この過程にはNOxの最高被占軌道からRuO<sub>4</sub>の最低非占有 軌道への電子移動とN-O間結合生成が含まれ、特にそれらが同時に起こる結合が生成される分 子間距離の相互作用は複雑になる。このうち、LR-CCSD(T)法の計算をHPE SGI8600を用い て行った。同法は高い信頼性と引き換えに非常に多くのメモリ或いはディスク領域を要求する ため、PCや小規模なPCクラスタ計算機ではそもそも実行自体が困難である。本研究が対象と するような比較的小さな系に対しても、大型計算機による実行が不可欠である。

#### (2) 利用内容·結果:

紙面の都合上、本稿では NO との相互作用について記述する。図1に NO 分離錯体(1)、NO 付加体(2)、その間にある遷移状態(TS<sub>1-2</sub>)の分子構造を示した。これらの分子構造は DFT(UM06)法によって最適化されたものである。基底関数は Ru に LANL2TZ、O と N には aug-cc-pVTZ をそれぞれ採用している。この遷移状態は IRC 計算によって1及び2と接続する

ことを確認している。さらに、N1-O1 距離を 3.5Å とった構造から IRC 計算を開始すると自動 的に 1 の構造を与えた。この IRC 経路を 1 から 2 までの経路と接続して反応座標とし、いくつ かの方法を用いて PEC を評価した。

LR-CCSD(T)の計算には量子化学計算パッケージ NWCHEM 7.0 の TCE モジュールを用いた。NWCHEM は数千コア程度まで並列化効率がスケールすることが知られており、大型計算機での実行に適したソフトウエアである。2 に対する 480 コアの MPI 並列計算では 1.6 時間 (実時間)を要した。また、基底関数のレベルを上げた場合 (Ru: cc-pVQZ-pp、O と N: cc-pVQZ)

は 960 コアの MPI 並列ジョブによっておよそ 6 時間を要した。本稿では示さないが、NO2 との相互作用では酸素原子が 1 つ多いため、並列数が同じ場合、計算時間はおよそ 2 倍程度である。

図 2 に様々な計算手法によって得られた PEC を示している。この図の中で最も信頼性が高 いのは 15 電子 13 軌道からなる活性空間を考慮した CASPT2(15,13)法(白抜き丸の青線)であ る。N1-O1 距離が 1.495Å の点において LR-CCSD(T)(緑の四角)と比較することで、 CASPT2(15,13)法の妥当性を検証することができた。より詳細な議論については、下記の成果 リストに記載された論文を参照されたい。NO<sub>2</sub>-RuO<sub>4</sub> 系の結果も含めて計算結果の信頼性が高 まり、本成果を査読付き学術雑誌に掲載することができた。



図1 UM06 法によって最適化された分子構造



図2 様々な計算方法によって評価された NO-RuO4 間の PEC

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) Kentaro Kido, "A theoretical investigation on the intermolecular potential curve between ruthenium tetroxide and  $NO_X(X=1,2)$ ", Int. J. Quant. Chem., 121, e26781.

### (4) 今後の利用予定:

本稿の成果は NOx 付加体生成には活性障壁が存在することを示唆している。この過程は高 レベル廃液の沸騰時の気相の温度(100℃から120℃程度)では、RuO4の RuO2への自己分解 反応と競合している可能性があり、より精度の高い RuO4の移行挙動の定量化を目指したポテ ンシャルエネルギー面の評価を予定している。この検討には CCSD(T)法のような大型計算機 における高並列ジョブの実行が必須の計算方法も含まれる。
# 5.1.2 シミュレーションを活用した原子力発電所の動的確率論的リスク評価

Simulation-based Dynamic Probabilistic Risk Assessment of Nuclear Power Plants

> 久保 光太郎 リスク評価・防災研究グループ

# (1)利用目的:

原子力発電所のリスクを抽出する手法として、確率論的リスク評価(Probabilistic Risk Assessment: PRA)が様々な機関で用いられている。当該手法の課題の一つとして、時間依存 性を有する機器やシステムの信頼性モデルの取り扱いが困難であることが挙げられる。

上記の課題を解決するために、原子力機構ではシミュレーションを活用した動的リスク評価 手法及びそのためのツール RAPID を開発中である [1]。当該手法では、モンテカルロ法に基づ いた評価を行うため、膨大な熱水力解析が必要となる。そのため、ICE X 及び HPE SGI8600 の利用が必要不可欠であった。

令和2年度は、当該手法に複数のサンプリング手法を適用することにより、計算コストの削減を試みた。また、リスク評価において解析条件の設定によって計算結果を過小評価する現象 (リスク希釈)が、当該手法でどの程度生じえるのか定量的に評価した。

# (2) 利用内容·結果:

本報告では、開発中の RAPID に複数のサンプリング手法を組込み、計算コストの削減を試 みた例を記載する。熱水力解析には THALES2 [2]を使用し、プラントモデルとしては沸騰水型 原子炉(BWR) タイプ4を選定した。図1に THALES2 でのモデルを示す。



#### 図1 BWRのモデル

起因事象として、全交流電源喪失を引き起こす外部電源喪失を選定した。当該事象において 期待できる緩和設備は、原子炉隔離時冷却系(Reactor Core Isolation Cooling system: RCIC) 及び高圧炉心注水系(High Pressure Core Injection system: HPCI)の二つのタービン駆動の システムである。両システムは直流電源に依存しており、バッテリーの枯渇によって外部電源 喪失の発生から平均値 8 時間、標準偏差 1 時間の正規分布に従って停止すると仮定した。仮定 したイベントツリーを図 2 に示す。



図2 イベントツリー

上記の条件において、モンテカルロサンプリング、ラテン超方格サンプリング、格子点サン プリング及び準モンテカルロサンプリングを適用した場合の炉心損傷時刻の平均値と計算回数 の関係を図3に示す。大数の法則に従い、計算回数を増やせば、いずれのサンプリング手法も 約11.62 時間付近に収束した。その中でも、準モンテカルロサンプリングを用いた場合、最も 少ない計算回数で計算値が収束した。具体的には、モンテカルロ法(赤線)と準モンテカルロ 法(青線)を比較すると、準モンテカルロ法では10分の1程度の試行回数で収束した。この理 由として、入力値として与えた不確実さが、準モンテカルロ法を用いることにより、少ないサ ンプル数で収束したことが挙げられる。例として、RCICの停止時刻の平均値とサンプル数の 関係を図4に示す。この結果は、開発中の評価手法に適切なサンプリング手法を適用すれば計 算コストを削減できる可能性を具体的に示したものである。



図3 炉心損傷時刻と計算回数の関係



図4 サンプル数と RCIC の停止時刻の関係

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) K. Kubo, et al., "Quasi-Monte Carlo sampling method for simulation-based dynamic probabilistic risk assessment of nuclear power plants", Journal of Nuclear Science and Technology, Epub ahead of print 2021. DOI: 10.1080/00223131.2021.1971119.
- 2) K. Kubo, et al., "A Comparative study of sampling techniques for dynamic probabilistic risk assessment of nuclear power plants", Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA+MC2020), Chiba, Japan, 2020.
- 3) K. Kubo and Y. Tanaka, "Evaluation of risk dilution effects in dynamic probabilistic risk assessment of nuclear power plants", 31st European Safety and Reliability Conference (ESREL2021), Angers, France, 2021.

# (4) 今後の利用予定:

令和 2 年度はローカル PC を用いて簡易的な条件下における内部溢水事象への適用[3]並び に機械学習及び簡易物理モデルを用いた計算コストの削減[4]を試みた。今後も HPE SGI8600 を継続利用し、地震や内部火災といった内部溢水以外の外部事象や、より詳細かつ現実的な事 故シナリオに対して開発中の手法を適用する。

- X. Zheng, et al., "Severe accident scenario uncertainty analysis using the dynamic event tree method", 14<sup>th</sup> International Conference on Probabilistic Safety Assessment and Management (PSAM14), Los Angeles, CA, 2018.
- [2] M. Kajimoto, et al., "Development of THALES-2: A computer code for coupled thermalhydraulics and fission product transport analyses for severe accident at LWRs and its application to analysis of fission product revaporization phenomena", International Topical Meeting on Safety of Thermal Reactors, Portland, 1991.
- [3] K. Kubo, et al., "Dynamic PRA of flooding-initiated accident scenarios using THALES2-RAPID", 30<sup>th</sup> European Safety and Reliability Conference and 15<sup>th</sup> Probabilistic Safety Assessment and Management Conference (ESREL2020-PSAM5), Online, 2020.
- [4] K. Kubo, et al., "Case study on sampling techniques using machine learning and simplified physical model for simulation-based dynamic probabilistic risk assessment", Asian Symposium on Risk Assessment and Management 2020 (ASRAM2020), Online, 2020.

# 5.1.3 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

# Evaluation of Terrain Effect in Airborne Radiation Monitoring

石崎 梓

リスク評価・防災研究グループ

# (1) 利用目的:

航空機モニタリングで得られるガンマ線スペクトルは様々な解析過程を経て、地上における 空間線量率や放射能濃度に換算される。その際、測定対象となる地形を平坦とみなしたモデル が用いられている。しかし、日本は山地が多く、データ換算精度への地形の効果については十 分検討されてこなかった。そこで様々な起伏地形の地表面に線源がある体系で、航空機モニタ リングで測定されるガンマ線のシミュレーションを行い、地形の起伏による影響を明らかにす るとともに、地形等の様々な条件でシミュレーションした結果を基に地形影響の補正方法の開 発を行う。

地形が上空における放射線測定に及ぼす影響を評価するため、ランダムに選定された実地形 に対するモンテカルロシミュレーションを行い、平坦な地形の場合と実地形の場合の上空にお けるガンマ線フラックスを比較した。さらに、ガンマ線フラックス比と地形に関するパラメー タとの相関関係を調査し、実測データの補正への使用を検討する。実地形に対するシミュレー ションでは、図1のように、複雑な傾斜を持った線源となる地表面を三角ポリゴンで表現する ため、計算の際に多くのメモリ容量が必要となる。また、線源から測定器までは数百 m 程度で あるため、十分な統計精度を確保するため、大型計算機の大口利用が必要であった。最終的に は、検証データの追加によって、地形補正で使用するパラメータを更新する。



図1 実地形から PHITS シミュレーション用線源への変換

#### (2)利用内容·結果:

地形影響によるガンマ線フラックス比を十分な統計精度で計算することができた。フラック ス比との相関関係を調査するパラメータとして、重みづけ平均標高と可視領域を選定した。そ れぞれの相関係数は重みづけ平均標高の場合は 0.923、可視領域の場合は 0.889 となった(図 2)。



図2 地形に関するパラメータとフラックス比との相関関係

今回得られた新たな検証データを用いることによって得られた補正パラメータを使用して、 過去数年間に航空機モニタリングで実際に得られた測定データの予備的な補正を試みた。その 結果を地上測定値と平均平方二乗誤差で比較を行った結果、以前よりも地上測定値に近い値を 得ることができた。今後、地形影響補正手法を確立するとともに、他要因による誤差の補正と 合わせてさらなる精度向上を行う。

# (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:

今年度の計算結果を基に、地形影響補正手法の確立を進める。

5.1.4 単管形状におけるスワール型スペーサによって誘起される乱流生成特性と熱伝 達向上に関する数値流体解析 CFD Investigation on the Turbulence Production and Heat Transfer Augmentation induced by a Swirl Spacer

安部 諭

熱水力安全研究グループ

# (1) 利用目的:

スタティックミキサー等の二次流れを発生させる機構は、熱や物質の混合促進のために使わ れる。原子炉燃料棒バンドルにおいても、(冷却材の流れによって引き起こされる振動を低減す るための)グリッドスペーサに二次流れと熱伝達向上を目的として、様々な形状の混合羽根が 設置されている。本研究では、乱流現象の詳細理解のための強力なツールである数値流体力学 (以下、CFD)を用いて、蒸気単相条件下における4枚羽根型のスワールスペーサで誘起され る乱流生成と熱伝達向上を調査した。なお、本解析の入力データは原子力規制庁から受託研究 (平成31年度原子力施設等防災対策等委託費(軽水炉の事故時熱流動調査)事業)で整備した ものである。

#### (2) 利用内容·結果:

解析対象は図1に示すような単管形状の流路途中に4枚羽根のスワールスペーサを模擬した 構造物を挿入した試験部とした<sup>1)</sup>。単管の直径は12.2 mm で入り口での流速および温度は、そ れぞれ 11.15 m/s、597.11 K とした。スワールスペーサ下流の円管壁は 104 kW/m<sup>2</sup> で加熱し た。本解析において重要となる乱流モデルは、等方性を仮定した標準 k-ε、realizable k-ε、SST k-ωモデルを採用した。例として SST k-ωモデルを用いた解析で得られた、図2に各断面での 二次流れの絶対値をカラーコンターで示す 1)。4 枚の羽根により、4 つの渦をもつ二次流れが生 成され、下流方向に進むにつれてそれらは結合し、一つの旋回流になることがシミュレートさ れた。この大きな旋回流の流れの保存性は高く、解析領域出口部までその構造は維持された。 また、二次流れの影響で、スペーサ下流のおよそ 10D(ここで D は円管径)以下において、熱 伝達の向上がみられた。



ルスペーサ



図1 解析対象 (a): 単管試験体、(b): スワー 図2 各断面での二次流れの大きさ (SST kω モデルを用いたケース) (a): スペーサ近 傍、(b): スペーサ遠方 z/D=40

(詳細は割愛するが)熱伝達に関して、この3つの乱流モデルのなかで、SST-k-ωモデルを 用いたケースで熱伝達係数を最もよい精度で予測し、標準 k-ε モデルでは最も過大評価する結 果となった。図3に、各乱流モデルで予測された乱流エネルギーの生成項 *P*<sub>k</sub>の可視化図を示す<sup>D</sup>。 すべてのケースにおいて、スペーサ直下流で乱流エネルギーが顕著に生成されていることがわ かる。(熱伝達係数を過大に予測した)標準 k-ε モデルを用いたケースでは、特に円管壁近傍で 乱流エネルギーが生成されている。一方、realizable k-ε および SST k-ω ではそれが抑えられ ている。この違いが、スペーサ近傍での熱伝達の予測性能の違いに影響していると結論付けら れる。さらに、乱流エネルギーの断面平均に着目すると(図4)、旋回流は維持されているにも かかわらず、スペーサから 10D 以上下流ではスペーサを設置しなかったケースとの違いは大き くなかった <sup>1)</sup>。以上より、スペーサによる熱伝達向上を理解するうえで、スペーサにより誘起 される二次流れの構造と乱流エネルギー生成機構を探ることは重要といえる。



図3 スペーサ近傍での乱流生成

図4 乱流エネルギー生成量の断面平均

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) Satoshi Abe, Yuria Okagaki, Akira Satou, Yasuteru Sibamoto, A numerical investigation on the heat transfer and turbulence production characteristics induced by a swirl spacer in a single-tube geometry under single-phase flow condition, Annals of Nuclear Energy, Volume 159, 2021, 108321, ISSN 0306-4549, https://doi.org/10.1016/j.anucene.2021.108321.

# (4) 今後の利用予定:

今後は、より詳細に流れ場を調査し、熱伝達向上メカニズムの理解向上に努める。特に、実際の燃料棒集合体のようなバンドル形状では、乱流の非等方成分が重要になる。そのため、(今回は等方性 RANS モデルを用いたが)非等方性を考慮し RANS や Large-Eddy Simulation (LES)解析を実施する予定である。

# 5.1.5 S-CLSVOF 法による二相流 CFD 解析ソルバへの AMR 法の適用

Application of AMR Method to Two-phase Flow CFD Solver on S-CLSVOF Method

> 岡垣 百合亜 熱水力安全研究グループ

# (1)利用目的:

シビアアクシデント時のプールスクラビング研究において、気泡挙動は粒子除去に大きく影響を及ぼすとしており、そのメカニズムを明らかにすることは重要である。このため、数値流体力学(CFD)コードによる界面追跡法(Volume of Fluid (VOF)法、Simple Coupled Volume of Fluid with Level Set (S-CLSVOF)法)を用いた気泡流解析を行っている[1]。界面追跡法は、界面を解像するための十分な計算解像度が必要となり、計算コストが膨大となるため、大規模並列処理が可能な ICE X 及び HPE SGI8600 を利用した。以下では、その解析研究の一部について示す。

#### (2) 利用内容·結果:

解析には、オープンソース CFD コード OpenFOAM の改良 VOF 法ソルバ S-CLSVOF 法に よるオリジナルソルバを用いた。S-CLSVOF 法は、一般的な界面追跡法である VOF 法に比べ、 VOF 法と Level Set 法をカップリングすることで界面をより正確に予測することができる。し かし、カップリングにより、VOF 法よりもさらに計算負荷は大きくなる。特に、今後実施を計 画している界面が広範囲を移動するような解析では、計算体系全体を細分化した計算格子を必 要とするが、界面そのものは局所に限られる。そのため、体積率や速度勾配などの物理量の移 動に応じて、計算格子の高解像度領域を動的に変化させる適合格子細分化(Adaptive Mesh Refinement: AMR)法を解析ソルバに適用し、界面付近と気相域のみ、計算格子を細分化した。

その検証解析結果を示す。解析は、Cano-Lozano ら[2]の単気泡上昇解析の既往研究を元に実施した。図1に計算体系と初期条件を示す。水中を浮力上昇する気泡(気泡径 $D = 4 \times 10^3$  m)の静止位置から液面に達するまでの気泡上昇速度を求め、AMR 法を適用したケース(AMR mesh)と適用しなかったケース(Fine mesh)において比較を行った。計算体系は、AMR meshでは、 $8D \times 8D \times 48D$ としたが、壁面による影響はほぼないと判断し、Fine mesh では、 $4D \times 4D \times 48D$ とした。計算格子数は、AMR mesh では約 38 万セル( $40 \times 40 \times 240$  セル)、fine mesh では約 4900 万セル( $160 \times 160 \times 1920$  セル)の一定セルサイズの六面体格子を用いた。AMR mesh の最大細分化レベルは 3 とし、最小格子幅は Fine mesh と一致するようにした。図 2 に AMR mesh の界面付近の計算格子を示す。気相域から界面付近の計算格子は細分化されている ことが確認でき、AMR 法が適用されたことがわかる。AMR mesh を用いた際の計算時間は、 Fine mesh と比べ 23%まで短縮された。図 3 に気泡上昇速度を示す。両結果共に、気泡は一定 高さまで垂直に上昇後、らせん状・ジグザグ状の不安定な運動により、気泡上昇速度に変動が見られた。終端速度(気泡上昇速度がオーバーシュートした後の平均気泡上昇速度)は、AMR mesh では約 0.25 m/s (時刻 t = 0.21-0.72 s)、Fine mesh では約 0.24 m/s (t = 0.36-0.72 s)

であった。実験相関式による値は、Clift らの式[3]では 0.24 m/s、Peebles and Garber の式[4] では 0.25 m/s であり、AMR mesh は後者、Fine mesh は前者と一致し、予測性能に問題がないことを確認した。

- 1) Y. Okagaki, Y. Sibamoto, S. Abe, Numerical study on bubble hydrodynamics with flow transition for pool scrubbing, CFD4NRS-8, 2020, 12p.
- 2) J.C. Cano-Lozano, R. Bolaños-Jiménez, C. Gutiérrez-Montes, C. Martínez-Bazán, The use of Volume of Fluid technique to analyze multiphase flows: Specific case of bubble rising in still liquids, Applied Mathematical Modelling 39, 2015, pp.3290-3305.
- 3) R. Clift, J.R. Grace, M.E. Weber, Bubbles, Drops, and Particles, Academic Press, 1978, pp.172.
- 4) F.A. Holland, R. Bragg, Fluid Flow for Chemical Engineers, Butterworth-Heinemann, https://doi.org/10.1016/B978-0-340-61058-9.X5000-2, 1995.



(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、S-CLSVOF 法のソルバと Multiphase Particle-in-Cell (MP-PIC) 法のソルバをカ ップリングさせ、Euler-Lagrange 解析への拡張を行う予定である。

# 5.1.6 FEMAXI-8 コードの移植・高速化作業

# Optimization/Refactoring of Fuel Performance Code FEMAXI-8

宇田川 豊

燃料安全研究グループ

# (1) 利用目的:

FEMAXIは、1.5 次元の有限要素力学計算モデル、径方向と軸方向各 1 次元の熱計算、各熱 計算メッシュに割り当てられた種々の常微分方程式系の組み合わせ/連成によって構成される、 燃料棒の照射挙動解析コードである。最新バージョン FEMAXI-8 は 2019 年に外部公開し、原 子力規制庁、大学、研究所、燃料メーカー、電力会社等で幅広い利用がある。原子力機構内で も、燃料安全研究への適用の他、事故耐性燃料、加速器駆動未臨界型原子炉向け窒化物燃料、 高富化度 MOX 燃料等新しいタイプの燃料の設計開発研究に活用されている。本作業では、大 規模な統計解析への応用等、同コードの今後の更なる活用範囲の拡大に備え、特にプログラム の高速化、乃至、高速化に必要となるコードのリファクタリングを実施する。

# (2) 利用内容·結果:

本年度は、開発環境とコンパイラ等構成の異なる大型計算機環境上で検出された数値計算上 の不具合に対応したデバッグ、Intel コンパイラによるビルドにおける課題整理、典型的な解析 ケースにおけるモジュール毎負荷分析、幾つかのスカラチューニング、一部モジュールにおけ る SIMD 実行の試行、メモリアクセス性能の評価、スレッド並列化に必要な課題の抽出とその 対応としてリファクタリング作業を実施した。スカラ最適化の検討によれば、数値計算上の負 荷の分散度合い、キャッシュヒット率は共に極めて高い水準にあり、有意な性能向上は見込め ないことが確認された。一方、スレッド並列化により大規模計算時の実効的なスループット向 上は見込めることから、並列化すべきモジュールの検討と静的データ要素の排除等必要なリフ ァクタリングに一部着手した。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

# (4) 今後の利用予定:

本年度検討で得られた成果を踏まえ、更に必要なリファクタリングを実施の上、スループット向上への寄与が見込めるスレッド並列化対応を進める。

# 5.2 J-PARCセンター J-PARC Center

# 5.2.1 PHITS を用いた加速器駆動核変換システムに関するシミュレーション

Simulation of Accelerator Driven Critical System using PHITS

中野 敬太

施設利用開発セクション

# (1)利用目的:

加速器駆動核変換システム(ADS)は大強度陽子加速器と未臨界炉心を組み合わせた、マイ ナーアクチノイド(MA)の有害度低減・減容化を目指したシステムである。原子力機構が提案 している ADS では、中性子源標的兼冷却材として鉛ビスマス共晶合金(LBE)の使用を想定し ている。LBE に 1.5 GeV – 30 MWの陽子ビームを照射し核破砕反応を起こすことで、発生す る核破砕中性子により MAの核変換を行う。LBE は数百日以上の長期にわたって大強度陽子ビ ームにさらされるため、水素からアスタチンまでのあらゆる元素が生成される。ADS の実現に はこれらの生成核種とその誘導放射能の評価が不可欠である。また、真空領域である大強度陽 子加速器と高温の LBE に満たされた未臨界炉心は、ビーム窓と呼ばれる数 mm 程度の非常に 薄い構造物で隔てられている。このビーム窓は加速器からの陽子ビームと炉心からの中性子及 び高温 LBE にさらされ、過酷環境で用いられることとなる。このビーム窓の成立性実証には、 まずシミュレーションによる材料損傷評価が必要となる。

これらを踏まえ、モンテカルロ粒子輸送計算コード PHITS を用いて ADS 体系を模擬したシ ミュレーションを実施し、ビーム窓の損傷評価に必要となるガス生成量等の諸量の見積もり及 び LBE 中の核種生成量と誘導放射能の評価を行うことが大型計算機の利用目的である。実行 増倍率 0.98 程度の ADS のモンテカルロシミュレーションを行うには膨大な時間を要する。そ こで ICE X 及び HPE SGI8600 を利用することで、十分な統計にて諸量の評価を行うことが可 能となる。

#### (2) 利用内容·結果:

原子力機構が提案している ADS 実機の体系にて粒子輸送シミュレーションを行い、ビーム 窓内部のガス核種(水素・ヘリウム同位体)生成量、DPA、発熱密度を、また LBE 中の核種生 成量と誘導放射能を計算した。大型計算機を使用したとしても、未臨界炉心の計算に加え数 mm の薄いビーム窓中のガス核種生成量を十分な統計で求めるのは非常に非効率的である。そこで、

1. 未臨界炉心計算を行い、ビーム窓中の陽子や中性子 Flux を計算する。

2. 十分に薄いビーム窓材に陽子及び中性子照射を行い、入射粒子エネルギー毎のガス核種生成断面積を求める。

3. Flux と断面積をかけ合わせることで、ビーム窓中のガス核種生成量を求める。 のようにシミュレーションを区切ることで効率的に生成量を計算した。図1に1の計算で得ら れた ADS 運転開始後 400 と 600 日目のビーム窓内部の陽子、中性子、光子 Flux を示す。陽子 は加速器からの 1.5 GeV に鋭いピークが存在し、核反応によりエネルギーを失った成分が以下 に続いている。中性子は数百 keV に幅広いピークを持っており、一方で 10 MeV 以上の高エネ ルギー成分は LBE の核破砕反応により生成されたものと考えられる。



図1 運転後400及び600日目におけるビーム窓内の粒子Flux

LBE 中の誘導放射能と核種生成量は PHITS からの出力を DCHAIN に接続して行った。図 2 に LBE の誘導放射能とその上位を占める核種の放射能推移を示す。初期は Bi-209 の中性子 吸収により大量の Bi-210, 211 が生成され大きな割合を占めることがわかる。同時に Bi-211 の 娘核である Tl-207 も Bi-211 と同じ放射能を示す。照射量の増加につれて半減期約 140 日の Po-210 も増加していくことが判明した。



図2 運転開始後のLBEの誘導放射能と主要な核種の放射能

# (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 ADS シミュレーションを継続し、諸量を評価する予定である。また MEGAPIE 等の ADS に関連する実験のシミュレーションも行い、実験値と計算値の比較も行う予定である。

# 5.2.2 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 the Neutron Phonon Cross Section using the 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。本研究課題では密度汎関数理論(Density Functional Theory, 以下 DFT と略)に基づく第一原理フォノン計算を用いたデータの解析を行うことで、 強相関電子系物質における電子格子相互作用の理解を目指す。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:

申請者は J-PARC における非弾性中性子分光実験の解析技術の高度化の一環として、第一原 理計算手法を利用したデータ解析に注力している。特に DFT を利用したフォノン計算に基づ き、中性子やX線によるフォノンの散乱断面積(動的構造因子)の第一原理評価を行っている。 2020 年度は計算手法のベンチマーク試験の一環として、実測のフォノン分散スペクトルと理論 計算との定量比較を行った。その一例を図1に示す。J-PARC の非弾性分光装置を用いて得ら れた実測のスペクトル構造(フォノン分散曲線や散乱強度など)が理論シミュレーションによ って非常に精度良く再現されている事が分かる。フォノン分散の評価には、Quantum ESPRESSO に実装されている密度汎関数摂動理論(DFPT)を用いた。

非弾性散乱分光手法は近年、著しい発展を遂げ、実験・理論間の直接比較が可能になりつつ ある。特に図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。フォノンの散 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 中性子散乱による実測のフォノン分散スペクトルと DFPT による散 乱断面積シミュレーションとの比較

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

[論文]

 <u>Naoki Murai</u>, Tatsuo Fukuda, Masamichi Nakajima, Mitsuaki Kawamura, Daisuke Ishikawa, Setsuko Tajima, and Alfred Q. R. Baron, Phys. Rev. B 101, 035126 (2020)
"Lattice dynamics in FeSe via inelastic x-ray scattering and first-principles calculations" 出版済み

[学会発表]

- <u>Naoki Murai</u>, Tatsuo Fukuda, Masamichi Nakajima, Mitsuaki Kawamura, Daisuke Ishikawa, Setsuko Tajima, Alfred Baron, APS March Meeting 2020
  "Phonon spectroscopy in FeSe using high-resolution inelastic x-ray scattering"
- 3) <u>村井直樹</u>,福田竜生,中島正道,河村光晶,石川大介,田島節子,Alfred Q. R. Baron, 第 34 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム "高分解能非弾性 X 線分光による鉄系超伝導体 FeSe のフォノン分散の研究"

# (4) 今後の利用予定:

これまで実験・理論間でフォノンのエネルギーや散乱強度の比較を行なってきたが、今後はそれに加えて、

- 1. 電子格子相互作用に起因するフォノンの線幅の評価
- 2. モンテカルロシミュレーションを利用した実験分解能の評価

を組み合わせることで、より現実に即した高精度なスペクトル構造のシミュレーションを目指 す。

# 5.3 原子力基礎工学研究センター

Nuclear Science and Engineering Center

5.3.1 緊急時海洋環境放射能評価システム STEAMER における領域ダウンスケーリング機能の実装
Implementing Regional Downscaling Capability in the STEAMER
Radionuclide Dispersion Prediction System

上平 雄基 環境動態研究グループ

# (1) 利用目的:

STEAMER は放射性物質の海洋放出量の情報と海洋拡散モデルを用いて海水中及び海底堆 積物中の放射性物質の濃度を予測するシステムである。より詳細な海況場及び原子力施設から 放出された放射性物質の濃度分布の予報値を得るため、システムに Regional Ocean Modeling System (ROMS) によるダウンスケーリング機能を導入した。従来の STEAMER では濃度予 測のために必要な海況場を他機関から取得したデータ(水平解像度約 10km)を入力していた。 新たに導入したダウンスケーリングシステムでは詳細な海況場(水平解像度約 3km)を得るこ とができる一方で、結果の取得に時間を要していた。現業運用に於いて、これらの予測情報は できるだけ迅速に取得できることが望ましい。したがって大規模並列計算が可能である ICE X を利用した。

なお、本作業は令和2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:

STEAMER は外部研究機関からの海況予報データの受信、入力データの作成、海洋拡散シミ ュレーションの実行及び計算結果の可視化というアルゴリズムで構成されている。このうち、 最も実行処理に時間を要していたのが海洋拡散モデルへの入力データの作成工程の一つである ROMS による海況場の計算であった。ROMS の MPI 並列計算の実行時間の検証を行った結果、 並列数の増加に伴い、優位な計算時間の短縮が確認された(表1)。また、ダウンスケーリング 機能による従来結果との差異を検討するため 2016 年 1 月の福島第一原子力発電所から仮想放 出された<sup>137</sup>Cs を対象としたテスト計算を行った。放出条件は 1Bq h<sup>-1</sup> とした。ダウンスケーリ ング機能を導入した高解像の計算結果と従来の低解像度の計算結果では濃度分布に優位な差異 が確認された(図1)。

#### JAEA-Review 2021-022

MPI (並列数)	実行時間(秒)
32	3224.31
64	1595.00
96	1062.79
128	826.77

表1 ROMSの実行時間(計算期間3日)



図1 海洋表層から水深 100m まで積分した <sup>137</sup>Cs 濃度の時間平均値(期間 2016/1/21-31) 左図:水平解像度約 3km、右図:水平解像度約 10km

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

## (4) 今後の利用予定:

現在、STEAMER は課室計算機で運用し、毎日予測結果を原子力機構の内部サーバーにア ップロードしている。今後は、ダウンスケールング機能を実装した STEAMER を ICE X 上 で運用する予定である。

# 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・線量解 析

Detailed Analysis on Plume Dispersion and Air Dose Rate in the Vicinity of a Nuclear Facility 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:

これまでの放射性物質の大気拡散予測システム(原子力機構の SPEEDI、WSPEEDI)は、 原子力施設からの放射性物質の放出に対する周辺環境への影響や住民の被ばく線量評価を目的 としている。そのため、100km~数千km程度の評価対象範囲を数百m~数km程度の計算格 子で分割して地表面形状を考慮した風の流れを再現して拡散計算を行っている。しかしながら、 原子力施設内や都市域の建物の影響を受けた複雑な風の流れを再現できず、それによる大気拡 散計算と建物の遮蔽を考慮した詳細な線量評価が行えなかった。

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、建物・地形影響を受けた非一様 性の強い乱流場において、施設近傍での核種濃度および空間線量を詳細に解析できる。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ていた。そのた め、計算対象時間は数十分程度、計算領域は数km程度とすることが多く、比較的短い時間で拡 散計算を行っていた。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ー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・線量評価を、ICE X 大型計算 機ノードを 50 台以上使用して大規模詳細計算を行った。気象状況が時間変化する条件下での 空間線量率のモニタリングデータと比較することで、モデルの検証を詳細に行うことを目的と する。

# (2) 利用内容·結果:

2017 年度後期の最適化作業にて高速化された 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・線量計算を行った。図1に計算領域を示す。地表面形 状は、数値標高・数値表面細密データを用いて精緻に解像した。水平方向に 5km、鉛直方向に 1km とした。計算格子は、水平方向に 5m、鉛直方向に 2.5m-20m としてストレッチをかけて いる。建物・地形起伏は外力項、樹木群は陽的に解像して抗力係数・葉面積密度・瞬間風速を 用いて乱流効果を表現した。乱流生成手法を用いて効率的に境界層乱流の生成を行うために 500m の乱流駆動領域を設け、ラフネスブロックを千鳥状に配置した。



図1 計算領域



図 2 六ヶ所再処理工場の排気筒より放出された放射性核種の大気拡散と空間線量率の時系 列変化(放射性核種の大気中3次元濃度分布は、検出できない濃度レベルまで示しており、放 射線影響が想定される範囲ではない。濃度が高い再処理工場敷地内においても、空間線量率の 上昇は、自然放射線による空間線量率の変動の範囲内となっている。)

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17日9:00-19:00とした。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。線量評価計算は、放射線挙動解析コード PHITS (Particle and Heavy Ion Transport code System)を用いて詳細な3次元放射線輸送計算を実施して作成した応答関 数データベース SIBYL (Satoh et al., 2021)を用いた。図2は、六ヶ所再処理工場の排気筒よ り放出された放射性核種の大気拡散と空間線量率の時系列変化を表している。図に示すように、 敷地内のモニタリングポストでの空間線量率の測定値を、計算により良好に再現することに成 功した。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 ができるものと考えている。

#### (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:

 <u>H. Nakayama</u>, D. Satoh, H. Nagai, H. Terada: Development of local-scale highresolution atmospheric dispersion model using large-eddy simulation part 6: introduction of detailed dose calculation method, Journal of Nuclear Science and Technology, 58, 2021, pp.949-969.

#### (4) 今後の利用予定:

現在、平成 30 年度英知を結集した原子力科学技術・人材育成推進事業 課題解決型廃炉研 究プログラム 選定課題「ガンマ線画像スペクトル分光法による高放射線場環境の画像化によ る定量的放射能分布解析法」における原子力機構の分担課題として実施する、大気拡散計算と 放射線計測を融合して大気放出された放射性核種の濃度分布と放出量を推定する手法開発に 取り組んでいる。

福島第一原子力発電所の廃炉工程で発生しうる放射性物質の大気放出を想定した大気拡散 予測の精度向上のために、原子力機構内にある建物を原子炉建屋と見なして、その周辺の気流 の集中観測と簡易的な拡散実験を実施する。気流の集中観測としては、対象建物よりやや離れ た所にドップラーライダーを設置して、上空の風速を3次元的に測定・取得する。また、建物 屋根面に超音波風速計を設置して、建屋の影響で生じる非定常性の強い複雑な乱流の情報とし て、高周波変動風速を測定・取得する。簡易的な拡散実験としては、放射性物質の放出をミス ト散布により模擬し、ミストの拡散の様子を複数のビデオカメラで異なる角度から撮影し、得 られた画像の解析により3次元拡散分布パターンを再構成する。

ICEX大型計算機を用いて、LOHDIM-LESにより各方位で事前計算した平均・乱流風速に 関する大規模データベースと3次元気象観測データをカップリングさせ、簡易拡散モデルを用 いて迅速かつ正確に大気拡散予測が行える計算手法の開発を行う予定である。

# 5.3.3 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-PHITS 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-PHITS では、放射性核種の崩壊から放出されるガンマ線のエネルギースペクトル情報を PHITS で利用できる形式で出力オプションが実装されているが、その際に任意のエネルギーメッシュ 幅を設定することはできない。また、アルファ線およびベータ線については、エネルギースペ クトル情報を出力する機能自体が備わっていない。

PHITS には、線源情報として放射性核種とその放射能を設定することで、その放射性核種の 崩壊に伴って放出される放射線を線源とした計算を実行できる機能がある。そこで、本開発で は DCHAIN-PHITS の計算で得られる誘導放射能の情報を PHITS の線源情報形式で出力でき るように、DCHAIN-PHITS の改良を行う。

#### (2)利用内容·結果:

DCHAIN-PHITS では、xyz スコアリングメッシュで誘導放射能の空間分布を出力する機能 が備わっており、PHITS では、線源を発生させる領域の形状を定義する方法として、xyz メッ シュ空間分布(s-type = 22)が備わっている。そこで、DCHAIN-PHITS の xyz スコアリング メッシュの計算で得られる各地点の誘導放射能を、PHITS の線源情報形式で出力する機能を開 発した。

新規に開発した機能の例題として、1辺10cmの立方体のコンクリートに100MeVの陽子を ビーム電流 0.1µA、ビーム半径 0.5cm で 10分間照射した後、50分間冷却したときの誘導放射 能の時間変化を DCHAIN-PHITS で計算し、50分間冷却した後の誘導放射能から放出される ベータ線およびガンマ線の輸送計算を PHITS で実施した。

図1に陽子ビーム照射時のコンクリート内の陽子フラックスおよび中性子フラックスの空間 分布を示す。入射陽子ビームは深さ4cm程度で停止し、入射陽子と標的との核反応により生成 された二次中性子がコンクリート内を通過する様子が確認できる。続いて、図2にビーム照射 中および冷却中のコンクリート内の放射能の空間分布の時間変化を示す。陽子が照射された箇 所の放射能は高く、陽子の届かない領域も二次中性子によってある程度放射化することが確認 できる。また50分間の冷却で放射能は2桁程度低下することもわかった。さらに、図3に50 分間冷却した後のコンクリート内における電子、陽電子及び光子フラックスの空間分布を示す。 何れの粒子も、放射能の高い領域においてフラックスが高いことが確認できる。特に陽電子は 陽子ビームによって放射化された領域においてフラックスが高くなることがわかった。なお、 フラックスが一様な正方形が散見されるが、これは DCHAIN-PHITSのxyz空間メッシュサイ ズに起因する。

以上のように、DCHAIN-PHITSのxyzスコアリングメッシュで得られる計算結果をPHITS の線源情報として利用できるようになった。これにより、PHITSとDCHAIN-PHITSによる 放射能の逐次計算が可能となり、加速器施設や原子炉などの誘導放射能の計算におけるPHITS の利用拡大が期待される。



図1 陽子ビーム照射中のコンクリート内の陽子および中性子フラックスの空間分布



図2 冷却中のコンクリート内の放射能の空間分布の時間変化



図3 冷却後のコンクリート内の電子、陽電子および光子フラックスの空間分布

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

# (4) 今後の利用予定:

今後も PHITS 及び DCHAIN-PHITS の改良を進める予定である。具体的には、PHITS で 線源粒子の種類を"all"と定義した時に、 放射性核種が放出可能な放射線種について自動でマ ルチソースに展開する機能を開発する。加えて、DCHAIN-PHITS では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についても、線源粒子の種類を"all"とした形式で出 力できるように改良する。

# 5.3.4 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。令和3年3月現在、PHITS の国内外のユー ザー登録者数は5,000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容易に理解して入 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:

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。

①動作環境(OS) Microsoft® Windows® 10 (PHITS の動作条件に準拠)
②ハードウェア Windows PC (PHITS の動作条件に準拠)

③開発言語 Python

④開発環境 Python3.7/3.8, wxPython

令和元年度「PHITS ユーザ入力支援ソフトウェアの作成」作業において作成した PHITS 入 力支援のためのテキストエディタ PHACE の機能拡充を図った。以下に主なプログラムの変更、 及び追加点を示す。

- ①メニューバーの再構成
- ②編集機能のパラメータの保存、設定機能の追加
- ③表示文字の多言語化機構の追加

④計算体系描画ソフト Angel、及び放射化計算コード Dchain の実行機能の追加

図1に、テキストエディタPHACEのメニューバーを示す。PHACEで作成した入力ファイルを読み込んで、「PHITS」、計算体系描画ソフト「ANGEL」、及び放射化計算コード「DCHAIN」を実行できるようにプログラムを作成し、メニューバーのアイコンの選択からこれらを実行できるように改良を行った。

🀳 * РНА	CE				追	加項目		
ファイル(F)	編集(E)	検索(S)	表示(V)	ウインドウ(W)	PHITS	ANGEL	DCHAIN	ヘルプ(H)
🗋 💕 🛛	a 🖨	🙆 🕥	🛃 🐰	🗅 🛍				

図1 PHITS 専用テキストエディタ PHACE のメニューバー

図2に、「表示」のサブメニューバーを示す。サブメニューバーを充実させて、一般のテキス トエディタに標準で搭載されている「行番号の表示」、「文字の折り返し」等の機能をサブメニ ューバーから選択できるように改良を行った。また、これら PHACE の設定パラメータを保存 する機能を追加することで、PHACE 立ち上げ時に前回起動したときのこれらの設定の読み込 みが可能となった。



図2 「表示」のサブメニューバー

図3に、日本語表示と英語表示のメニュー及びサブメニューバーを示す。PHACE が表示す る文字列を英語でも行えるように多言語化機構を作成し追加した。本作業では、多数の表示言 語の切り替えなどを行うグラフィカル・ユーザー・インターフェースは作成せず、初期データ として日本語と英語による言語パックを作成し、パソコン上の PHACE の実行環境のロケール が日本である場合は日本語で、それ以外の場合は英語となるよう自動的に表示が切り替わる機 能を開発した。

🐳 " PHA	CE								÷	PHA	CE					
77116F)	編集	(E) 検索(S)	表示(V)	ウインドウ(W)	PHITS	ANGEL	DCHAIN	ヘルプ(H)	File	Edit	Search Vie	w Window	PHITS	ANGEL	DCHAIN	Help
	•	元に戻す(U)	Ctrl+	Z						•	Undo	Ctrl+Z	0 03			
SAMPLE		再実行(R)	Ctrl+	Y					SA	1	Redo	Ctrl+Y				
	x	切り取り(T)	Ctrl+	×						x	Cut	Ctrl+X				
	6	3ピ-(C)	Ctrl+	+C						6	Сору	Ctrl+C				
	8	貼り付け(P)	Ctrl+	+V						125	Paste	Ctrl+V				
		削除(D)	D	Pel							Delete	Del				
	X	クリア(L)							- 11-2	x	Clear					
		すべて選択(A)	Ctrl+	A							Select All	Ctrl+A				
	-									-						
<									<							
	-Y-L	てクリップボードに	保存します。						Copy	the se	ection and say	e it to the cli	pboard.			

図3 日本語表示と英語表示のメニュー及びサブメニューバー

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、ANGEL 及び DCHAIN 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。また、DCHAIN に関する例題の入力フォルダ (phits/recommendation/DCHAIN) において、PHITS 計算から出力される DCHAIN の入力 ファイルの読み込みと、この入力を用いた DCHAIN 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):

 岩元 洋介,放射線遮蔽ハンドブックに基づく遮蔽設計の基礎と応用(3) モンテカルロコ ード PHITS の現状と応用,日本原子力学会 2021 年春の年会 放射線工学部会 企画 セッション,オンライン 2021 年 3 月 18 日.

# (4) 今後の利用予定:

今後は、PHITS 専用テキストエディタ PHACE について、PHITS 用 3 次元描画ソフトウェ ア(PHIG-3D) との連動、パラメータ等の説明表示機能及び入力データ先読み機能の追加を行 うとともに、動作環境(OS)に依存しない PHACE を作成する予定である。

# 5.3.5 PHITS における分析機能の開発

# Development of Estimation Function in PHITS

橋本 慎太郎

放射線挙動解析研究グループ

#### (1)利用目的:

汎用のモンテカルロ粒子輸送計算コードPHITSは、放射線施設の遮蔽計算や医学物理分野に おける線量評価などの様々な用途に利用されており、ユーザーの数も年々増加している。近年、 例えば入射ビームのエネルギーが誤差を持つ場合に、その誤差が輸送計算の結果に与える影響 を分析するニーズが多くなってきている。この例では、計算条件となるビームのエネルギーを 変化させて複数回の輸送計算を行い、それらの結果をスクリプト等の外部プログラムを活用し て分析できる。しかし、外部プログラムの開発はプログラミング技術が必要となり、多くのユ ーザーが自作することは困難である。

そこで我々は、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し、分析結果を出 力する専用スクリプト autorun の開発を進めている。2019 年度は、粒子の飛程を出力する[ttrack]タリー(ここで、タリーは計算結果を出力する機能を表す)で利用できるよう開発した。 2020 年度はこれを発展させ、放射線が物質に付与する線量を出力する[t-deposit]タリーでも利 用できるように機能の拡張を行った。開発は原子力機構の大型計算機 ICE X を利用して進め、 機能は 2021 年 3 月公開の PHITS バージョン 3.24 に実装した。

#### (2) 利用内容·結果:

2020 年度は[t-deposit]タリーについて専用スクリプトが利用できるよう開発を行った。これ により、例えば放射線が物質に付与する線量を求める際に、入射エネルギーに含まれる誤差が 与える影響を系統的不確かさとして評価できる。PHITS では分散分析 (ANOVA; analysis of variance)を導入することで、統計誤差  $\sigma_{stat}$  と系統的不確かさ  $U_{syst}$  及び全不確かさ  $U_{tot}$  を評価 しており、これらは次の関係を満たす。

 $(\mathbf{U}_{\text{tot}})^2 = (\mathbf{U}_{\text{syst}})^2 + (\sigma_{\text{stat}})^2$ 

ここで、統計誤差  $\sigma_{stat}$ は、統計的不確かさ  $U_{stat}$  とモンテカルロ計算の試行回数 N を用いて、 ( $\sigma_{stat}$ )<sup>2</sup> = ( $U_{stat}$ )<sup>2</sup>/N により求められる。

PHITS の専用スクリプト autorun.bat (Windows 用) や autorun.sh (Mac、Linux 用) は、 次の 3 つのステップで容易に利用できる。

- 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(以下、 ParticleTherapy.inpとする)を用意
- 2. 専用スクリプトのためのインプットファイル(以下、autorun.inp とする)を用意
- 3. autorun.inp を入力ファイルとして、専用スクリプトを実行

上の例で示した2種類のインプットファイル(ParticleTherapy.inpとautorun.inp)が不備な く用意されている場合、専用スクリプトを実行することで、PHITSの輸送計算が自動的に実行 され、統計誤差と系統的不確かさ及び全不確かさの評価結果が出力される。 以下では、炭素線照射による線量計算を例題として、2 種類のインプットファイルの作成方 法と専用スクリプトの利用結果について紹介する。

### 1. 輸送計算のインプットファイル(ParticleTherapy.inp)

炭素線の輸送計算を PHITS で実行するためのインプットファイル ParticleTherapy.inp(フ ァイル名は変更可能)では、線源の条件を決める[source]セクションは次のような設定となる。

[ source ]

set:c1[200]

s-type = 1

proj = 12C

e0 = c1

•••••

ここで、s-type は線源の形状に関するパラメータであり、proj と e0 はそれぞれ線源の種類と エネルギーを指定するパラメータである。上の例では、e0 にユーザー定義定数 c1 の値[200]が 代入されるため、200 MeV/nucleon のエネルギーをもつ炭素 12 が線源として指定される。分 析機能の専用スクリプトを実行した際は、c1 の値が autorun.inp で指定する値に変化し、それ ぞれのエネルギーで輸送計算を実行した結果が得られる。

また、分析機能を利用したい[t-deposit]セクションの最後に、次のような anatally サブセクションを追加する。

anatally start manatally = 1 sfile = dose\_ana.out

anatally end

ここで、anatally start と anatally end で挟んだ領域が anatally サブセクションとなる。 manatally は分析方法を指定するオプションであり、分散分析による系統的不確かさを求める 場合は manatally=1 とする。分析結果の出力ファイル名は sfile により指定する。

他に、専用スクリプトで使用することを指定するために、[parameters]セクションにおいて icntl=16 とする。以上により、ParticleTherapy.inp の用意は完了する。

# 2. 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=ParticleTherapy.inp

set:c1 c-type=1 nc=3 199 200 201 file=の後に、前節で示した輸送計算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 cl の情報を記載する。set:cl 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、cl のデータを指定する。今回の例では、炭素 12 の 入射エネルギーを 199, 200, 201 MeV/nucleon と 1 MeV/nucleon きざみで変化させており、各 cl の値を使って合計 3 回の輸送計算を自動的に実行する。

#### 3. 専用スクリプトの利用結果

専用スクリプトを実行すると、PHITSの計算結果をコピーするための 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作成し、各 c1 の値を使って計算した タリー結果をそれぞれのフォルダに移動させる。上記の autorun.inp ファイルの nc で指定した 回数(今回の例では3回)の輸送計算が終了すると、outfiles フォルダにある複数(今回の例で は3つ)の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。 (x10<sup>-8</sup>)

図1に、今回の例題の計算結果として、200±1 MeV/nucleonの炭素線を水に照射して得られた 深さ方向の線量分布を示す。炭素線はz軸で示す 深さ方向に沿って照射しており、z=8.7cmの位置 でブラッグピークを示した。この位置における線 量の計算結果の統計誤差は無視できる程小さい が、系統的不確かさは誤差棒で示す程度に確認さ れ、その値は約30%となった。以上のように開発 した機能を活用することで、計算で系統的な不確 かさの要因の一つとなり得るビームエネルギー が誤差(±1MeV/nucleon)を持つ場合の影響を 評価することに成功した。



本開発により、計算条件の誤差が計算結果に与える影響を[t-deposit]タリーでも評価することが可能となった。2021年3月現在でPHITSの国内外のユーザー数は5,000名を超えているが、本機能の利用を通じて、研究開発の更なる進展が期待される。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

#### (4) 今後の利用予定:

今後は、原子核反応の粒子数を出力する[t-product]タリーや放射線による物質の損傷数を出 力する[t-dpa]タリー等、PHITS に組み込まれた他のタリーについても専用スクリプトが利用 できるよう機能の拡張を行う。

# 5.3.6 PHITS の OpenMP 共有メモリ型並列計算性能の向上を目指した改良 Improvement of OpenMP Shared Memory Parallelization in PHITS

古田 琢哉 放射線挙動解析研究グループ

#### (1)利用目的:

粒子・重イオン輸送計算コード PHITS は、任意の三次元体系中の様々な放射線挙動を模擬で きる汎用のモンテカルロシミュレーションコードであり、工学、医学、理学、地球惑星科学等 の様々な分野の応用研究で利用されている。PHITS には、計算実行時間短縮を目的として並列 計算機能が整備されており、OpenMP による共有メモリ型並列計算機能にも既に対応してい る。PHITS での仕様は、入射放射線のヒストリ毎の輸送を並列して計算することで全体の実行 時間を短縮する一方で、膨大なメモリ容量を占め得る体系データは並列コア間で共有し、大容 量のメモリを持たない計算機でも並列計算が可能な仕様となっている。しかし、X 線輸送計算 等、1 ヒストリの計算コストが小さい例において、並列化効率(並列コア数増加に対する計算速 度の上昇率)が良くないことがわかっている。そこで、大型計算機(ICE X)を利用し、いくつ かの計算例について OpenMP の並列化効率等の計算性能を確認し、性能向上を目指したコード の改良を実施した。

# (2) 利用内容·結果:

計算性能は、PHITSのパッケージ内に計算サンプルとして用意されている核反応断面積計算 やX線治療計算等の14種の計算例で実測した。同じ合計ヒストリ数の計算例に対し、OpenMP の並列数を変えてシミュレーションを実行し、実行時間を測定することで並列化効率を算出し た。測定結果の一部として、特に並列化効率が悪い(a)核反応断面積計算および(b)X線治療計算 の結果を表1に示す。この表において、並列数nの並列化倍率mnは、並列数の増加で、加速 された実行時間の倍率ti/tnを示し、並列化効率rnはこの倍率を理想値であるnで割った%値を 示す。表1の結果は、従来通り1ヒストリの計算コストが小さい(a)(b)の計算例において、並列 数の増加に対する並列化効率の劣化が確認できた。詳細解析のため、サブルーチン毎やループ 毎にプロファイル解析を実行した結果、並列コア間で同時に同一メモリ領域にアクセスするメ モリ競合を防ぐための排他処理の多用と大量のスレッドプライベート変数(並列コア毎の独立 変数)の定義によるオーバーヘッドが計算効率の低下の主な原因となっていることがわかった。 そこで、今回の改良では、以下のように①変数初期化プロセスのループ外への移動、②タリー 非共有化オプションの実装、③スレッドプライベート変数の削減により、OpenMPによる並列 計算の性能を向上させた。

 変数初期化プロセスのループ外への移動:ユーザーが指定する入力ファイルのパラメ ータ設定に従い、使用が予定される物理モデルに必要な変数の初期化をヒストリルー プ前に実施するように修正した。これにより、反応モデルの呼び出し毎の初期化有無の 確認が不要となり、これに伴う排他処理も除去できた。

計算例	n: 並列数	tn: 実行時間(秒)	mn: 並列化倍率	rn: 並列化効率
	1	1009.26	1.00	100.00%
(a) 核反応	2	553.63	1.82	91.15%
断面積計算	5	474.79	2.13	42.51%
	10	539.99	1.87	18.69%
	1	1124.17	1.00	100.00%
(b) X 線治療	2	655.55	1.71	85.74%
計算	5	269.94	4.16	83.29%
	10	147.31	7.63	76.31%

表1 改良前の実行時間、並列化倍率および並列化効率

- ② タリー非共有化オプションの実装:従来コードではタリー変数を OpenMP の並列コア 間で共有するため、輸送計算の演算コストが低い計算例では、タリーの排他処理が計算 時間のボトルネックとなっていた。そこで、大容量のメモリ領域を必要としない計算例 では、タリー変数を非共有化するオプションを用意することで高効率の OpenMP 並列 計算を実現した。
- ③ スレッドプライベート変数の削減:従来コードではスレッドプライベート変数として 扱われていた1ヒストリ中に生成される二次粒子情報等の変数に並列コアの ID の指 定に関する次元を一つ追加することで、スレッド間での独立を担保した共有変数とし、 スレッドプライベートの指定を解除した。

計算例	n: 並列数	tn: 実行時間(秒)	mn: 並列化倍率	rn: 並列化効率
	1	1011.87	1.00	100.00%
(a) 核反応	2	515.11	1.96	98.22%
断面積計算	5	208.80	4.85	96.92%
	10	106.56	9.50	94.96%
	1	771.04	1.00	100.00%
(b) X 線治療	2	453.57	1.70	85.00%
計算	5	188.96	4.08	81.61%
	10	127.24	6.06	60.60%

表2 改良後の実行時間、並列化倍率および並列化効率

改良実施後に実測した測定結果を表2に示す。(a)核反応断面積計算に関しては、改良による 顕著な並列化効率の向上が確認できた。改良前は10並列で効率が20%程度まで低下していた のに対し、改良後は10並列の計算でも95%程度の非常に良好な並列化効率が得られた。(b)X 線治療計算に関しては、改良による並列化効率の大幅な向上は確認されず、むしろ10並列の際 の効率が低下した。一方で、実行時間の絶対値に着目すると、改良後の実行時間は、改良前の 15%から30%の短縮が確認できた。今回の改良により、オーバーヘッドが減ったことで、実行 時間の短縮が実現したと考えられる。並列化効率の向上が見られなかった要因は、排除しきれ ていない排他処理が計算時間のボトルネックとなっているためと考えられる。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

# (4) 今後の利用予定:

PHITS は汎用のモンテカルロシミュレーション計算コードであり、多くのユーザーが異な る目的でシミュレーション計算を実施している。長時間計算を要する計算例も多く存在し、高 効率の並列計算機能は必須の技術である。今後も引き続き大型計算機を利用し、並列計算機能 の改良およびベンチマークテストを実施する予定である。

# 5.3.7 大気および土壌に分布した放射性核種に対する外部被ばく線量評価コードの開発

Dose-Estimation Code for External Exposure to Radionuclides in Air and on Ground

佐藤 大樹

放射線挙動解析研究グループ

# (1)利用目的:

環境中への放射性核種の流出事象が発生した場合、放射性核種から放出されるガンマ線によ る外部被ばく線量を迅速に把握することが極めて重要となる。これまでに、局所域大気拡散モ デル LOHDIM-LES で予測した放射性核種の放射能濃度分布から、地表面での空間線量率分布 を精度よく計算する SIBYL コードを開発した。令和2年度は、開発した SIBYL を放射性核種 流出時の初期対応に適用するため並列化技術を用いた計算速度の高速化を実施する。また、利 用者の利便性向上のためグラフィカル・ユーザ・インターフェース(GUI)を整備する。

# (2) 利用内容·結果:

ICE X での高速化のため、SIBYLのメモリ非共有 MPI プロセス並列化とメモリ共有 OpenMP スレッド並列化を行い、両並列技術を用いたハイブリッド並列計算ができるよう改良した。図 1 に SIBYL によるハイブリッド計算のフローを示す。まず、LOHDIM-LES の大気拡散計算の 結果と SIBYL の入力データを読み込み、設定した分解能で計算領域を直方体グリッドに分割 し、そのグリッドサイズに線量計算に用いる応答関数のサイズを合わせる。その後、グリッド で区切られた領域を小規模なグループにまとめ、各 MPI プロセスに分配する。さらに、MPI プ ロセスでは、応答関数を用いた線量計算のループを OpenMP のスレッド並列により処理し、ハ イブリッド並列を実現する。各 MPI プロセスでは計算の完了次第、MPI マネージャプロセス に結果を送信し、マネージャプロセスは結果を集計するとともに未計算の領域がなくなるまで 小グループの線量計算を MPI プロセスに分配する。このようにして並列化した SIBYL の性能 を、ICE X 上(1 ノードに 12 個の演算コアを有する CPU を 2 個保持)で 4 ノード利用して評 価した。1 ノードの計算要素数は 24(12×2)であり、4 ノードで最大 96(24×4)となる。

図2にICEX上で行ったSIBYLの並列計算性能の評価結果を示す。評価に用いた例題では、 1mの分解能で区切った水平方向240m×240m高さ方向150mの領域に24m×24m×24mのコ ンクリート製ビル群を5行5列で配置し、LOHDIM-LESで予測した放射性セシウムの土壌沈 着に対して、地表面から高さ1mでの空間線量率の分布を計算した。この際、高速化の指標とし て次式で示す高速化ファクターSを定義した。

$$S = \frac{T_{\text{Serial}}}{T_{\text{Parallel}}}$$

ここで、*T*<sub>Serial</sub>と*T*<sub>Parallel</sub>は、計算要素を1つだけ使用した逐次計算とMPIプロセスやOpenMP スレッドの計算要素を複数使用した並列計算の計算時間をそれぞれ表す。図中の点線は理想的 な並列性能を表すが、計算要素数24以下ではいずれの並列技術も理想直線に近い性能を示し た。計算要素数 24 を超えるとノードを跨いだ並列計算となるが、計算要素数 96 におけるハイ ブリッド並列計算の高速化ファクターは 85.4 であり、良好な並列性能を示した。一方、MPI 並 列計算の高速化ファクターはハイブリッド計算のものに劣った。この原因は、ハイブリッド計 算では OpenMP 技術を利用して、データの配分および集計で通信遅延の生じやすい MPI プロ セス数を抑制して並列数を伸ばせたためである。

図3に利用者の利便性向上のため開発したGUIを示す。SIBYLの全操作はGUIを通して実行可能である。また、計算結果は可視化ソフトウェア ParaView 形式で出力される。

令和2年度の研究開発により、SIBYLは簡便なGUIを通して原子力災害で一般的に想定される各種モデルケースの線量評価を1時間以内に精度よく実行できることを示し、緊急時の初 期対応に適用できる展望を得た。



図1 SIBYLの計算フロー。「T」および「P」の文字が付いた数字は、それぞれ OpenMP のス レッド番号と MPI のプロセス番号を示す。図は 12 個の OpenMP スレッドと 3 個の MPI プロ セスを用いたハイブリッド並列計算を表す。



図2 ICEX上でのSIBYLの並列性能評価の結果。「T」および「P」の文字が付いた数字は、 それぞれ OpenMP のスレッド数と MPI のプロセス数を示し、括弧内はハイブリッド並列時の 計算要素数を表す。

		1	
Path:	D:¥Work¥Environment¥SPEEDI¥PLUME¥RE		
nput parameters:	input.data		
I data:	Z.data		
Gerial number:	0 Apply	(	
Activity data:			
Plume:	PLUME.data		Display
Ground:	GROUND.data		Run
levation data:	ELEVATION.data		
Obstacle data:	SHIELD, data		

図 3 SIBYL の計算を制御する GUI。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) D. Satoh, H. Nakayama, T. Furuta, T. Yoshihiro, K. Sakamoto, "Simulation code for estimating external gamma-ray doses from a radioactive plume and contaminated ground using a local-scale atmospheric dispersion model", PLoS ONE, 16(1), e0245932, 2021.

# (4) 今後の利用予定:

可視化による SIBYL の計算結果の直感的な理解のため、開発した GUI と ParaView との より一層の連携を強化する計画である。

# 5.3.8 β 崩壊半減期の系統的な理論予測計算

# Systematic Theoretical Prediction of β-decay Half-lives

湊 太志 核データ研究グループ

### (1)利用目的:

原子核は陽子と中性子で構成されている有限多体系であり、その物理的な振る舞いを忠実に 再現するため、様々な微視的モデルが提案されている。精密な理論モデルほど多大な計算コス トがかかるが、原子核崩壊データ作成のような研究開発では、精密性を犠牲にすることはでき ない。

実験的に測定されていない原子核の  $\beta$  崩壊の半減期の理論予測には、核子間相互作用を起点 とした Hartree-Fock-Bogoliubov 法+Quasiparticle Random Phase Approximation 法による 微視的理論モデルが有効である。この理論モデルに基づいた計算コードを用いて、1 つの原子 核の数値解を得るためには、多次元の固有値問題を何度も解く必要があり、計算コストが非常 に高くなる。また  $\beta$  崩壊をする原子核の数は 5,000 以上あると予測されており、本研究開発の 目的である原子核崩壊データの開発を達成するためには、通常の計算機を用いることは非現実 的である。そのため、原子力機構の大型計算機 ICE X 及び HPE SGI8600 を利用し、原子核崩 壊データ開発に必要な  $\beta$  崩壊の情報を予測した。

#### (2)利用内容·結果:

図1は、ストロンチウム(Sr)同位体の半減期 の理論計算結果を示したものである。β 崩壊 計算に最も適切な核子間相互作用を模索する ため、9 種類の相互作用(SV-min、SkO'、 SkM\*、SGII、SLy5、SLy4、SAMi、Skx、SkP) を用いて計算を行った。使用する二体相互作用 によって、半減期に最大で約2桁の違いがあ ることが分かった。このように、数多くの原子 核を、複数の異なる相互作用で系統的に調べら れることも、大型計算機を利用することのメリ ットである。本研究では、半減期実験データの ある全ての原子核と理論計算の結果を比較し、 SkO'相互作用が最も適切であると判断し、原 子核崩壊データの開発に用いた。

108 exp 10 SV-min 106 SkO' 105 SkM\* 104 SGII SL<sub>V</sub>5 10<sup>3</sup> (s) SLy4 10<sup>2</sup> T 1/2 SAM 101 Skx 100 10-1 10-2 10-3 10<sup>-4</sup> 95 100 105 110 115 120 125 130 135 90

図 1:異なる二体の相互作用を用いたストロ ンチウム同位体の半減期の計算結果(横軸 は質量数 A、縦軸は半減期 T<sub>1/2</sub>(s))。

図 2 は、例として、今回の研究で得られた理 論予測の結果を元に、セシウム 143 (Cs-143)の  $\beta$ 線スペクトルを構築したものである。Cs-143 は、 $\beta$ 崩壊をしてバリウム 143 (Ba-143)の基底状態または励起状態に壊変するが、実験 的に全ての励起状態が分かっていないため、 $\beta$ 線スペクトルのエネルギー分布を過大評価して しまうことが知られている。図 2 の"Estimation"(破線)は、実験的に分かっている励起状態 から推測される  $\beta$ 線スペクトルの結果である。この過大評価の問題解決のため、実験的に分か っていない励起状態への壊変に伴う  $\beta$ 線スペクトルの予測を、理論計算を用いて行った。図 2 の"Continuum"(点線)は、理論計算によって得られた  $\beta$ 線スペクトルである。"Estimation" と比較して、エネルギー分布は低い領域に集中している。"Estimation"と"Continuum"の線形 結合が求めるべき  $\beta$ 線スペクトルとなる。別の実験から分かっている  $\beta$ 線エネルギーを基に 両者を規格化し、得られた結果が図 2 の"Total"(実線)である。 $\beta$ 線スペクトルがやや低エネ ルギー側へシフトしていることが分かる。これにより、実験データのみでは過大評価していた  $\beta$ 線スペクトルのエネルギー分布を、より精密に求めることができるようになった。

 $\beta$ 崩壊をした原子核は、しばしば高い励起エネルギーを持っており、中性子を放出すること がある。それを遅発中性子と呼び、1回の $\beta$ 崩壊当たりに遅発中性子を放出する割合を遅発中 性子分岐比( $P_n$ )と呼ぶ。図3は、例として、ヨウ素(I)同位体の遅発中性子分岐比を示したも のである。質量数が大きくなるほど、 $P_n$ が大きくなっていることが分かる。特に質量数が170 近くになると、ほぼ確実に遅発中性子を出すことが分かる。



図 2:セシウム 143(Cs-143)の  $\beta$  線スペクト ル。横軸は  $\beta$  線のエネルギー。"Estimation" (破線)は、実験的に分かっている励起状態デ ータから推測される  $\beta$  線スペクトル、 "Continuum"(点線)は、測定データ以外の寄 与を理論モデルで予測したものである。"Total" (実線)は、"Estimation"と"Continuum"を  $\beta$ 線エネルギーを基に規格化し得られた結果で ある。



図 3: ヨウ素(I)同位体の遅発中性子分岐比 (P<sub>n</sub>)。横軸は質量数(A)。実線は図を見 やすくするためのものである。質量数が大 きくなるほど、P<sub>n</sub>が大きくなっていくこ とが分かる。

今回得られた成果は、学術論文誌に投稿される予定であり、また原子力機構で開発中の核デ ータライブラリ JENDL5 の崩壊データに採用される予定である。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

#### (4) 今後の利用予定:

これまでに球対称である1次元モデルによる原子核のβ崩壊計算を行い、成果をまとめてい る段階である。今後はこれを軸対称変形した2次元モデルへと拡張する予定である。2次元モ デルへの拡張により、固有値問題の次元数が大幅に増えることが予想され、さらに計算機資源 が必要となることが予想されるため、引き続き原子力機構の大型計算機を利用する予定であ る。

# 5.3.9 様々な中性子エネルギーを利用した PGA における水素測定感度のシミュレーションと実験結果の比較

Comparison between Simulation and Experimental Results for Measurement Sensitivity of Hydrogen in PGA using Various Neutron Energy

前田 亮

原子力センシング研究グループ

# (1)利用目的:

即発γ線分析法(PGA)では試料に対して中性子ビームを照射し、測定対象核種を励起させ 脱励起の際に放出されるγ線を測定することで試料中の核種を定量する。PGAは軽元素にも適 用可能、測定確度が高い、比較的高い精度を持つ、バルク試料を非破壊で測定可能など多くの 特長を有している。

他の手法では測定が困難な軽元素にも適用可能な PGA だが、水素などの中性子散乱断面積 の大きい核種を多く含む試料において測定確度が低下してしまうという課題がある。散乱断面 積の大きい水素などを多く含む試料では、中性子が散乱された時に試料中の走行距離が変化す るために、見かけの中性子束が増加し測定感度(y線計数/核種量)が変化し確度が低下する。 この現象について Mackey 等は熱中性子を利用した PGA において球形の試料を使用すること で、見かけの中性子束の変化を抑制し確度の低下を低減した。また、Paul 等は冷中性子を利用 した PGA では見かけの中性子束の効果に加えて、試料中の原子核との散乱による中性子のエ ネルギー変化も測定感度に影響を及ぼすため、試料の中性子散乱性能に応じた補正が必要にな ると報告した。この補正法開発のためには、シミュレーションにより水素を多く含む様々な試 料、複数の中性子エネルギーにおける中性子散乱の影響を評価する必要があるが、この時、シ ミュレーションによる実験の再現性が重要になる。

このため、本研究では冷中性子から熱外中性子までの幅広いエネルギーの中性子を利用した PGA が可能な J-PARC BL04 ANNRI での実験結果とモンテカルロシミュレーションコード PHITS を用いた計算結果を比較することで、その再現性を評価した。本研究では多くの計算条 件でシミュレーションを行う必要があるため大型計算機による支援を必要とした。

#### (2) 利用内容·結果:

ANNRIでは、大強度パルス中性子源と高効率のクラスターGe 検出器を利用することで、飛行時間法(TOF)により入射中性子エネルギーを測定しながら PGA を行う TOF-PGA が可能である。実験では直径 22 mm の中性子ビームを試料に照射し、クラスターGe 半導体検出器を2 台、合計 12 個の結晶と 4 台の同軸型 Ge 半導体検出器を使用し y 線を計測した。試料としてアクリル製の水素密度 95.0 mg/cm<sup>3</sup>、直径 3.18, 4.76, 5.56, 7.94, 9.53 mm の球形試料とポリスチレン製の水素密度 13.2 mg/cm<sup>3</sup>(ポリスチレン単体の約 1/5)、直径 10, 13, 15, 20 mm と水素密度 7.63 mg/cm<sup>3</sup>(ポリスチレン単体の約 1/10)、直径 10, 13, 15, 20 mm の球形試料を使用した。解析では熱中性子領域を 24.2~26.8 meV、冷中性子領域を 4.77~5.22 meV、熱外中性子領域を 0.8~1.3 eV とし、各入射中性子エネルギー領域でゲートをかけて得られた y 線スペ
クトル中の 2223 keV の <sup>1</sup>H の捕獲 γ 線ピークを解析した。

シミュレーションでは PHITS3.16 と核データ JENDL4.0 を利用して、実験で使用した試料 に対して直径 22 mm、エネルギー25 meV (熱中性子)、5 meV (冷中性子)、1 eV (熱外中性 子)の単色中性子ビームを照射した時に、水素原子核から発生する 2223 keV の γ 線量を計算 した。

実験結果とシミュレーション結果から水素の測定感度を計算し、それを各エネルギー、各水 素密度における最小試料の値で規格化し比較した。図1に各エネルギーにおける各試料の測定 感度の C/E(実験結果とシミュレーション結果の比)を示した。C/E は、0.972 から 1.09 とな り PHITS を用いたシミュレーションは ANNRI での実験結果を良く再現することが確認され た。



図1実験とシミュレーションで得られた(a)熱中性子、(b)冷中性子、(c)熱外中性子照射時の 水素測定感度の比較結果

## (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,遠藤駿典,中村詔司,木村敦,"TOF-PGA を用い た水素測定における試料密度の影響",日本原子力学会 2020 年秋の大会,オンライン, 2020.

## (4) 今後の利用予定:

今後は様々な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、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

# Analytical Research on Improvement of 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:

原子力機構では従来の非破壊測定(NDA)では対応できない高線量核燃料物質に適用できる NDAを開発している。その一環として、当グループではアクティブ中性子法であるダイアウェ イ時間差分析法(DDA)、中性子共鳴透過分析法(NRTA)、即発ガンマ線分析法(PGA)を高 度化し、それらを組み合わせることにより、高線量核燃料物質のための NDA の確立を目指し ている。この研究開発のなかで本課題では、NRTA 部の性能評価や高度化に資する研究につい てシミュレーションコード PHITS を利用して実施した。

## (2)利用内容·結果:

昨年度までに NRTA 部の基本設計を終了した。今年度は NRTA 測定システムの迅速化に資 するシミュレーションを実施した。従来の設計では、NRTA による核物質の定量分析に数時間 かかることが予測されていた。測定時間をさらに短縮し、迅速な測定を達成可能となれば、装 置の適用範囲が広がると期待できる。そこで図 1 のような中性子の飛行距離を従来の 1/2 ほど の距離に縮めて配置した場合に遮蔽などを追加することで迅速測定が可能かどうかを検討し た。距離を縮めて検出器を中性子発生源に近づけると、発生源から飛来する中性子の量は増え る一方、天井や壁など周囲からの背景雑音も増加する。そのため、増加した背景雑音を効率的 に低減し信号雑音比を向上させる必要がある。そこで、短距離システムにおいて背景雑音を効率的 に低減し信号雑音比を向上させる必要がある。そこで、短距離システムにおいて背景雑音を低 減化するため、中性子飛行管内部のコリメータの強化及び検出器遮蔽の強化に関するシミュレ ーションを実施した。その結果、中性子吸収材として B4Cを用いたコリメータや遮蔽を追加す ることで、雑音を低減化できるめどがついた。NRTA では試料に中性子を照射し、試料を透過 してくる中性子を捉え飛行時間スペクトルを導出して、試料に含まれる元素の共鳴に対応する へこみを測定する。構築した短距離システムにより、図2に示すように銀(Ag) やインジウム (In)の試料を測定可能であることが分かった。

上記のように距離を縮めることに加えて、中性子の発生量を増加させ迅速測定に資するため、 モデレータの厚みの最適化を検討した。その結果、厚みを16 cm にすることにより従来の2 倍 の中性子量が見込めることがわかった。

上記のように迅速測定が可能になれば、より効率的に大量の試料を測定することが可能とな り、例えば、将来的には使用済み核燃料やデブリなどの計量管理に適用しやすくなることが期 待できる。



図1 短距離型の NRTA システムの概要図



図 2 短距離 NRTA システムで得られる飛行時間スペクトル (黒は試料がない場合、赤は試料がある場合)

- (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
  - <u>土屋晴文</u>,北谷文人,藤暢輔,"核不拡散・核セキュリティ用アクティブ中性子 NDA 装置の 開発(5) NRTA システムの役割と特徴",日本原子力学会 2021 年春の年会(2021/3/17-3/19).

## (4) 今後の利用予定:

令和2年度に原子力機構内の実験施設にNRTAシステムの設置を完了した。令和3年度に 模擬試料や模擬高線量場における試験測定を開始する。そうした測定に対するシミュレーショ ンによる予測を今後、導出していく予定である。

## 5.3.11 中性子回転照射法実験のシミュレーション

## Simulations for Experiments of the Neutron Rotation Method

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 中性子法である DDA (Differential Die-Away)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、装置 は高価で大型・重厚になってしまう短所がある。そこで、低コストで小型(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。

現在、回転照射法の実験に取り組んでおり、その検討において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。中性子線源が一点の固定条件である DDA 法のシミ ュレーションに比べ、回転照射法では中性子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体系及び 中性子東分布の結果を図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15cm で ある。円盤と中性子検出器バンクの間に測 定対象物としてポリエチレンで囲んだ核物 質(天然ウラン)を配置した。検出器バンク はHe-3検出器を6本含み、その周りをポリ エチレンとカドミウムで囲んだものであ る。それにより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している。中 性子束分のシミュレーションには、モンテ カルロコードである PHITS を、核データに は JENDL-4.0 を使用した。中性子束分布の 計算結果から、中性子線源、測定対象物及び 中性子検出器バンク間の中性子束分布が視



図1 体系及び中性子束分布の計算結果例

覚的に確認することができ、これらの結果は実験設定の検討に有用となる。

中性子線源の回転速度が 3000rpm の時のシミュレーション結果を図 2 に示す。このシミュ レーションには、モンテカルロ計算コードである MVP を、核データには JENDL-4.0 を使用し た。黒線は中性子検出器バンクで観測される中性子カウントを示す。横軸は線源位置の角度で あり、90°位置が最も対象物に近付く位置となる。90°以降の値がそれ以前より少し高くなって いることが分かる。これは回転照射の効果が現れているためであり、回転速度が 3000rpm にお いてもこの効果を得られることが分かった。

この回転照射の効果を調べるために、中性子カウント(黒線)のうち、核分裂で発生した中 性子(核分裂中性子)のカウントを求めた。その結果を赤線で示す。なお、この赤線は実際の 実験では直接求めることができないものである。この赤線の結果から、核分裂中性子の分布が 90°以降に明確に遅れが生じていることが分かった。この核分裂中性子の遅れによって、観測さ れる中性子カウントにも遅れが生じる。なお、核分裂中性子に遅れが生じる原因は、中性子線 源から発生した高速中性子が低エネルギーまで減速するまでに時間を要するためである。



図2 回転速度 3000rpm の計算結果例

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) M. Komeda, Y. Toh, K. Tanabe, Y. Kitamura, T. Misawa, "First demonstration experiment of the neutron rotation method for detecting nuclear material", Annals of Nuclear Energy, 159, 108300 (2021).

## (4) 今後の利用予定:

大型計算機を用いて、回転照射法の実用化研究等に取り組んでいく。

# 5.3.12 下部ヘッドにおける溶融物挙動解析手法の開発

Development of Numerical Simulation Method for Molten Core Behavior in Lower Head

永武 拓

熱流動技術開発グループ

# (1) 利用目的:

過酷事故時の溶融燃料挙動の把握は、原子力発電所の安全対策に重要である。本課題では、 下部ヘッドにおける炉心溶融物の挙動を解析することを目的とし、粒子法を基にした数値解析 手法の開発を実施する。

# (2)利用内容·結果:

解析手法の妥当性確認の一環として、スウェーデン王立工科大学で実施されて SIMECO 試験の一部を模擬した解析を実施した(図1)。本試験は下部ヘッドにおける溶融燃料の自然対流についての試験であり、上部層は下部層と比較し密度が低い物質(水一食塩水)を配置し、下部層のみを加熱することで自然対流を起こし、その際2層の挙動を観察するものである。解析は二層の密度比1.0、1.3、1.5の3ケースを実施した。図2に解析結果を示す。試験では密度比が1.3を下回ると2層が混じり合う挙動が発生しており、本解析においても同様の結果を示している。従って、自然対流時の密度が異なる層の挙動を再現できることを確認した。



図1 計算体型



図 2(a) 密度比 1.0

図 2(b) 密度比 1.3



図 2(c) 密度比 1.5

# (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:

SIMECO 試験では本試験以外にも温度分布計測を行っている。この試験解析を実施し、妥当性確認を進めていく。また計算コードの並列化を行い、より詳細な解析を実施する予定である。

## 5.3.13 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解析結果の検証を行っている。令和2年度の達成目標は、 昨年度までに改良・機能追加を行った解析手法を用いて以下の解析を実施、結果の評価を行う ことである。

i. PWR 及び RBWR を想定する条件で、スペーサによる影響を評価するための解析を実施する。 ii. プール中の微粒子を含む二相流挙動解析により、気相から液相への微粒子挙動の詳細を明ら かにする。

iii. 浅水プール内液体ジェットの侵入挙動解析を高解像度で実施し、ジェット着底後に発生す る微粒化物径の推定を実施する。

また、令和2年度はTPFIT-LPTコードの改良として、計算科学センターと連携し、「TPFIT-LPT に対する可視化ルーチンの作成」および「TPFIT-LPT の並列化」を実施した。

#### (2) 利用内容·結果:

#### 燃料集合体内二相流挙動の評価

燃料集合体内の二相流 挙動に与えるスペーサの 影響を数値シミュレーシ ョンにより評価するため、 ニュークリア・デベロップ メントで実施した、PWR を想定した円管流路内の 気泡流試験を対象とした 解析を実施した。流路内に スペーサを模擬した障害 物を含む系に対する解析 により、障害物後方での気 泡の集まりなど、試験結果



Fig. 1 Numerical Domain Fig. 2 Simulated Annular Dispersed Flow

と定性的に一致する解析結果が得られた。RBWR 炉心を簡易に模擬した体系について、スペー サが環状噴霧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 を適用して詳細解析(格子サイズ約 100µm 空間解像度)を実施した。 解析では、スペ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.1 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.2 にそれぞれ 示すスペ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。得られた結果は、サブチャンネル解析コード内のモデル評価に活用される。

プール中の微粒子を含む二相流挙動解析

水を配置した容器(プール)に対して、底面に設置したノズルから微粒子を含む気相を注入 し二相流を形成させる解析を実施した。形成された二相流(気泡)の下部に気相から水中に移 動した微粒子が多く存在する様子を確認した。微粒子の移行挙動について詳細に確認したとこ ろ、ノズルより噴出した微粒子が上昇し、気泡上部から液相に移動すること(Fig. 3)、移動し た粒子が気泡周囲の流れ場に従って下部に移動することを確認した。Fig. 3 中、破線は t=0.030s における気泡の最大到達位置であり、おおよそ、この時点からノズルからの気相が気泡へと分

離する。t=0.035 [s]との 画像の比較から、5ms の間、気泡の最大到達 位置はほとんど移動せ ず、気液界面と微粒子 の相対的な速度差が大 きくなっていること、 微粒子が気相から液相 に移行したことが分か



t=0.030 [s] t=0.035 [s] Fig.3 Small particles behavior around top of injected bubble

る。これより、この状況における微粒子の移動は、局所・瞬時の気液界面と微粒子の相対的な 速度差により生じ、微粒子の慣性力が大きな影響をもつことが分かる。また、本解析技術を拡 張し、電場中を移動するイオンの挙動の評価に適用し、MCCCE法における同位体分離に対し て理論的な検討を可能とする結果を得ることができた。

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

今年度も昨年度に引き続き、浅水プール内液体ジェット侵入挙動解析を実施した。解析結果 の一例として、時刻 250ms 経過時の界面形状の可視化図を Fig.4(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.4(b)には分別された液滴の体積から求 めた微粒化物径分布を示す。筑波大学で実施された実験結果と同様に、約 1mm 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り、福島第一原子力発電所廃炉作業へ貢献できる見通し を得た。

## TPFIT-LPT コードの改良および並列化

今年度は、計算科学センターと連携し、TPFIT-LPTの可視化ルーチンの作成を行った。これ により、プログラムの長時間の安定動作と解析結果のリアルタイム可視化が行えるようになっ た。また、TPFIT-LPTの並列化を行い、HPE SGI8600への対応を実施した。



## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

## 国際会議

- 1) <u>H. Yoshida</u> and <u>S. Uesawa</u>, "Numerical simulation of microparticles motion in twophase bubbly flow" Proceedings of 2020 International Conference on Nuclear Engineering (ICONE 2020) (Internet), ICONE28-POWER2020-16393, (2020). 査読有 り、発表済.
- 2) <u>T. Suzuki</u>, <u>H. Yoshida</u>, <u>N. Horiguchi</u>, S. Yamamura, Y. Abe, "Numerical Simulation of Liquid Jet Behavior in Shallow Pool by Interface Tracking Method", Proceedings of 2020 International Conference on Nuclear Engineering (ICONE 2020) (Internet), ICONE28-POWER2020-16213, (2020). 査読有り、発表済.
- 3) Y. Iwane, K. Takase, T. Suzuki, T. Nagatake, <u>H. Yoshida</u> "Evaluation of Dependence of Coolant Flow Rates on Void Fraction Distributions in Fuel Assemblies During Light Water Reactor Accidents" (5<sup>th</sup> STI-Gigaku 2020) 発表済.

国内会議

- 4) <u>吉田啓之</u>, 永武拓, 小野綾子, 成島勇気, 上遠野健一, 「軽水冷却高速炉の開発,4, 模擬サ ブチャンネル内詳細二相流シミュレーション」, 日本原子力学会 2020 年秋の大会, 2G15, 福岡(online) 発表済.
- 5) 岩根悠太、高瀬和之、<u>鈴木貴行</u>、永武拓、<u>吉田啓之</u>、軽水炉過渡時の燃料集合体内ボイド 率分布の冷却材流量依存性に関する評価、 第34 回数値流体シンポジウム 発表済.
- (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。今後も、詳細な気液二相流現象の把握を目的とした大規模解析の実施や 解析コード開発のために HPE SGI8600 を利用する予定である。

# 5.3.14 スプラッシュ現象に対する詳細混相流解析コードの適用性評価と課題抽出

Applicability Evaluation and Issue Extraction of The Detailed Multiphase Flow Simulation Code for a Splash Phenomena

> 吉田 啓之、山下 晋、大川 富雄<sup>1</sup> 熱流動技術開発グループ

## (1)利用目的:

液滴・液膜衝突現象は、流体力学分野においてよく見られる物理現象である。液滴が液膜に 衝突する際の衝突液滴を一次液滴、衝突により飛散することのある液滴を二次液滴と呼ぶ。こ の液滴・液膜衝突により発生することのある二次液滴は、様々な工業分野で悪影響を及ぼす。 そのため、二次液滴について調査することは、非常に重要となっている。本課題では、実験解 析により JUPITER の液滴・液膜衝突現象への適用性を確認することを目的とした。

## (2) 利用内容·結果:

JUPITER による数値解析結果が実験結果をどの程 度再現できるかを確認した。支配方程式は非圧縮性流体 の支配方程式である連続の式及び Navier-Stokes 方程 式である。移流項に対する離散化として 5 次精度 WENO法、拡散項に対して2次精度中心差分法、自由 界面捕獲手法として THINC/WLIC 法を用いている。ま た、時間積分は3次精度 TVD-Runge Kutta 法により離 散化している。図1に解析領域の概形を示す。液滴径を



d=2.65mm、格子解像度  $\Delta \varepsilon$  d/150 (総格子点数約 5 億点)と設定した。速度境界条件は全ての 境界で no-slip 条件とした。衝突速度を約 2m/s、液膜厚さを 0.9mm としたときの液滴落下開 始から衝突、crown 形成、崩壊までのスナップショット (t = 0~12.5 ms) を図 2、3 に示す。 図より各時刻における液滴の位置、crown の成長並びに崩壊過程をよく再現できていることが 確認できる。



本研究は原子力機構と国立大学法人電気通信大学の共同研究に基づいて実施したものである。 1 電気通信大学 情報理工学研究科 機械知能システム学専攻



図3 解析結果

液滴衝突現象は、自由界面捕獲手法、表面張力モデル、移流・拡散手法において高い精度が 要求される現象であり、これらの結果より、手法が適切に機能していることが確認できた。以 上より、JUPITER は液滴衝突現象をよく再現できることが分かった。ただし、VOF 関数の特 性上格子点数を増やせば増やすほど微細な構造が出現する傾向にあるので、適切な格子点数を どのように決めるかが課題である。

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

#### (4) 今後の利用予定:

スプラッシュ現象は数億点規模の格子点数を必要とする大規模計算であり、多くの計算リソースを必要とするシミュレーションである。今後は上記の計算条件に加え様々なパラメータによる定量的比較を実施するとともに、crownの崩壊過程メカニズムの解明などについて多くの計算資源を利用していく予定である。

# 5.3.15 過酷時及び定常時における炉心内非定常熱流動事象評価解析手法の開発 Development of Numerical Simulation Method for Thermal Fluid Flow Phenomena on Severe Accident Condition in Reactor Pressure Vessel

山下 晋、上澤 伸一郎、菅原 隆徳、堀口 直樹 熱流動技術開発グループ

## (1)利用目的:

福島第一原子力発電所事故後、これまで SA 解析コードで用いられてきた事故進展シナリオ (典型的シナリオ)とは異なる非典型的シナリオに基づき炉心溶融が起こったことが分かりつ つあり、SA 解析コードで用いられている物理モデルをより精緻なものとした解析が重要視さ れている。定常時熱流動挙動においても、軽水炉安全性向上の観点から、例えば沸騰挙動や気 泡流挙動など機構論的に予測が重要である。このような過酷事故 (SA: Severe Accident)時の SA 解析コードの事故進展及び定常時の原子炉内熱流動挙動に対する不確かさを機構論的に解 析し、原子炉の安全性向上やアクシデントマネージメントに資することを目的として、数値流 体力学 (CFD) に基づく多相多成分 3 次元熱流動解析コード JUPITER の開発を行っている。 本課題では、従来まで固相については均一の固体でしか表現できないという課題を解決するた めに、JUPITER にダルシー則に基づく多孔質体モデルの導入を行った。また、多孔質体モデル の Verification 及び機能確認解析として自然対流解析を行った。

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:

2020年度の達成目標として、多孔質体として考えられている燃料デブリを表現することを目 的として、従来均一として表現されていた固相に対し、多孔質体モデルを導入した。ダルシー 則を適用した支配方程式を次式に示す。

$$\frac{\partial u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (1)$$

 $\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{u_i}{\varepsilon} \right) = -\frac{\varepsilon}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_i} + v \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} - \frac{v\varepsilon}{\kappa} u_i - b \sqrt{u_j u_j} u_i + \varepsilon g_i, \quad (2)$ 

$x_i$	位置ベクトル [m]	ν	動粘性係数 [m²/s]
$u_i$	速度ベクトル [m/s]	ε	空隙率 [-]
ρ	密度 [kg/m <sup>3</sup> ]	$\kappa = k\nu/g$	固有透過係数 [m²]
β	体積膨張率 [1/K]	$g_i$	重力加速度 [m/s²]
Т	温度 [K]	k	透水係数 [m/s]

Navier-Stokes 式(2)の右辺台3項により流体抵抗として多孔質体を表現する。多孔質体への

流体のしみ込みやすさや流れやすさを 空隙率と透過係数をパラメータとして 与えることにより表現される。多孔質 体モデルの妥当性検証として既往研究 との比較を行った。図1に示す2次元 領域中央部にダルシー相 1,2 を配置 し、左側境界から速度 0.0016m/s で水 を流入させた。この体系では解析解が あることが知られており、JUPITER との比較を行った。空隙率及び固有透 過係数は、ダルシー相1で0.4, 1e-11m<sup>2</sup>、 ダルシー相2で0.5, 4e-11m<sup>2</sup>である。 図2に、横方向の圧力分布と速度分布 を比較した結果を示す。図より赤線で 示した JUPITER の結果は、解析解と 非常に良い一致を示しており、導入し た多孔質体モデルは適切に機能してい ることが分かった。

図 3 に示す結果は、JUPITER を用



 -8.0e+02
 -750
 -750

 -700
 -650
 -650

 -600
 -550
 -550

 -550
 -500
 -500

 -550
 -500
 -450

 -300+02
 -30e+02
 -30e+02

いて、多孔質体を直接球体で表現した場合(左)とダルシー則を用いた場合(右)の比較図で

図3 多孔体直接計算(左)と多孔体モデルの温度分布図(右)

ある。流れの微細な構造に違いはあるものの、多孔質体内部の温度分は、同様の傾向を示していることが分かった。今後は、導入した多孔質体モデルを用いて実験との比較解析を実施し、

定性的・定量的観点から妥当性検証を行う予定である。

本年度は、多孔質体モデルの導入だけでなく、共同研究を通じてスプラッシュ現象など原子 カ以外の課題にも JUPITER を適用し、妥当性の検証や現象の理解に貢献することができた。 当初設定した目標を概ね達成することができたと言える。特に空冷解析では、解析を主体とし て実験パラメータなどを設定することができた。これにより、効率的な装置設計に繋げること ができると考えられ、費用対効果は高かったと言える。

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

査読付論文

- 1) <u>S. Yamashita</u>, C. Kino and H. Yoshida, "A numerical simulation method for core internals behavior in severe accident conditions, Chemical reaction analyses in core structures by JUPITER", Proc. 2020 International Conference on Nuclear Engineering (ICONE2020) (Internet), 7p, (2020).
- 2) P. Chai, <u>S. Yamashita</u> and H. Yoshida, "Development and validation of the eutectic reaction model in JUPITER code", Annals of Nuclear Energy, 145, pp.1-13 (2020).

## (4) 今後の利用予定:

今年度は、多孔質体モデルの導入並びに熱対流問題への適用を行った。今後は、大規模二相流解析や SA 時の溶融挙動解析などを通じた妥当性確認を実施していく。

## 5.3.16 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、菅原 隆徳

熱流動技術開発グループ、核変換システム開発グループ

## (1)利用目的:

原子力発電に伴い排出される使用済み燃料中の高レベル放射性廃棄物(HLW: High Level Waste)の地層処分における負担軽減を目的として、日本原子力研究開発機構(原子力機構)では分離変換技術の研究を行っている。このうち、核変換の研究開発については、主にマイナーアクチノイド(MA: Minor Actinide)の核変換を目的として加速器駆動核変換システム(ADS: Accelerator Driven System)の研究開発を行っている。

原子力機構が検討している ADS は、800MW 熱出力鉛ビスマス(LBE: Lead Bismuth Eutectic) 冷却型の概念であり、核破砕ターゲットとしても LBE を用い、陽子加速器は 1.5GeV-30MW(最大)の出力を必要とする。運転開始時(BOC: Beginning of Cycle)の実効増倍率は 0.97 であり、1 サイクル 600 日運転を行うことを想定している。この間、燃焼が進むにつれて 実効増倍率が 0.95 程度まで低下し、出力を一定に保つため、陽子ビームの出力を運転開始時の 15MW から 30MW 程度まで2倍程度増やす必要がある。そのため、加速器と未臨界炉の境界 を成すビーム窓に大きな負荷がかかり、成立性の高いビーム窓概念検討が大きな課題の一つと なっている。ビーム窓設計では、核計算によりビーム窓発熱量を計算し、得られた発熱量分布 を用いて熱流動解析を行って、空間的な温度分布を求めた後、それを用いた熱構造解析が行わ れる。ビーム窓周りの熱流動解析はこれまでに、定常流れを仮定した計算しか行われていない。 一方、代表的な流速、長さ、LBE の物性値からレイノルズ数を求めると数百万程度に達し、流 れ場は非定常な乱流状態であることから、ビーム窓周りの温度分布には依然として不確かさが 存在する。従って、信頼性の高い ADS 設計を行うために、流れの非定常性を考慮した詳細な流 動場解析が重要である。本課題は、原子力機構が開発する、過酷事故時炉内溶融物移行挙動解 析手法である JUPITER を用いて、ADS ビーム窓周りの詳細な熱流動場計算をビーム窓やノズ 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。

ー連の解析及びそれに係る計算手法を開発することで、原子力発電所から排出される HLW に含まれる大量の MA を効率的に核変換できる ADS の実現へ向けて大きく貢献できる。なお、 本課題は大口課題:「ADS 設計のための詳細熱流動解析」により実施されたものである。

#### (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 2mm 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。

表1 計算条件

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

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。

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

表2 ノズル形状

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0.16m/s で流入する。ビーム窓



図1 各ケースのノズル形状(左からケース0、1、2、3、4)

及びノズルの T91 鋼である。初期温度は 573K、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は各ケースにおける Y-Z 断面の Z 方向温度分布である。図2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。ビーム窓近 傍の温度分布の乱れ度合いとして、ケース4の絞り形状が最も攪拌されている傾向にあること が分かる。これは絞り効果により流速が増大しているためであると考えられる。図3にビーム 窓先端からビーム窓曲面に沿った径方向距離を横軸とするビーム窓内側壁面温度分布である。



図2 Y-Z 断面のZ方向温度分布(左から、ケース0、ケース1、ケース2、ケース3、ケース4)

健全性に影響を与える因子として、温度と先端から側面の温度勾配がある。 図より温度に着目すると、ビーム窓内側の温度分布に最も寄与した形状は Case 4 であることが分かった。この結果は、絞りによりノズル内部のLBEが加速され、衝突流速の増加に伴い除熱性能が向上したためと考えられる。一方、温度勾配において、Case 4 は絞り効果により他ケースと比較してより局所的に噴流が衝突するため温度勾配は比較的大きくなることが分かる。即ち除熱効果を上げつつ温度勾配を小さく



図 3 ビーム窓内側の径方向温度分

する形状の検討が重要である。以上より、ノズル形状の違いを考慮した熱流動解析から、ビー ム窓健全性に影響する因子としてノズル形状の考慮が重要であることを確認した。

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

#### (4) 今後の利用予定:

JUPITER の妥当性検証を目的として、他の解析手法と詳細な比較を行うと共に、筑波大学 と熱流動技術開発グループ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引き続き行う。

## 5.3.17 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 of Two-phase Flow to Develop the Evaluation Method Based on Mechanism for Critical Heat Flux

小野 綾子、山下 晋、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り、原子炉バーチャルシミュレータ構築への発展が期待される。

本研究課題においては、原子炉燃料集合体のような大規模計算体系での解析であり、かつ詳 細メッシュを必要とするため、通常のデスクトップパソコンなどでの計算は不可能であり、大 型計算機の利用が不可避である。

#### (2) 利用内容·結果:

従来の VOF 法における伝熱面からの沸騰 シミュレーションにおいては、あらかじめ設 定した数百 $\mu$ m 程度の気泡核を設置し、相変 化分を計算して気泡を生長させる。よって、 この手法とモデル化では数十 $\mu$ m 程度のメ ッシュサイズが最低限要求されるため、実機 燃料集合体規模での二相流解析において核か ら発泡を含む沸騰二相流を実施するのは現実



図1 簡易沸騰モデ ルによる解析結果 <u>蒸</u>気泡 蒸気泡

図2 高速度カメラで撮影された 高熱流束での沸騰様相(飽和条件)

(直径8mm)

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、 沸騰を再現した。発泡時刻および発泡箇所は乱数によって決定している。今年度は、蒸気吹出 し速度や配置数等、モデルを改良し、物理を機構論的に再現できるようにした。図1に10mm 四方の伝熱面を仮定した沸騰様相について示す。図2は直径8mmの伝熱面で沸騰する様子を 高速度カメラでとらえたものであるが、蒸気泡(合体泡と合体泡が接合し形成される伝熱面上 を覆う大気泡)が形成され、計算結果と同様の様相が見られる。また、この蒸気泡の離脱頻度 を比較し、おおむね一致することを確認し、沸騰二相流解析への簡易沸騰モデルの適用性を確 認した。これは VOF 法を用いた詳細解析手法において大規模な沸騰計算を可能とする重要な モデルとなりうる。

JUPITER コードを実機のような複雑構造をもつ燃料集合体内の熱流動シミュレーションに 適用するために、OECD-NEA で行われた実機燃料集合体形状におけるベンチマークと同様の 体系で単相流解析を実施し、ベンチマークデータとの比較を行った。図3にスプリットベーン やスワールベーンを付したスペーサ下流の流速分布を示す。スプリットベーンではサブチャン ネル間を移行する流れが、スワールベーンではチャンネル内で旋回する流れが再現された。本

課題の主目的である実機燃料集合体内の 二相流挙動計算においては、合体や分裂な ど気泡挙動に影響を及ぼす燃料ピン表面 から離れたバルクの流動現象が重要であ るため、概ねその適用性が確認できた。 JUPITER で用いる計算格子形状は等間 隔の正方形メッシュであることから、複







(b) スワールベーン

雑形状のベーン壁ごく近傍の速度の解像 図3 単相流解析結果(スペーサ下流1D 位置,D:水力等価直径) が困難であると予想されていたが、分裂や合体などの気泡挙動に重要なサブチャンネル内の流 動がよく再現できることから、実機燃料集合体形状への適用可能性が確認された。

しかしながら、チャンネルボックス壁近傍での速度値が OECD-NEA ベンチマークで得られ た実験データと不一致することから、他のベンチマークで実施された解析結果も参考に、原因 の究明と改善を来年度以降に行う予定である。図4にスプリットベーンおよびスワールベーン

形状で実施した二相流解析結果についてサ ブチャンネル内のボイド率分布を示す。ス プリットベーンではピン間の狭隘部におい てもボイドが広がり、スワールベーンでは サブチャンネル中央にてボイド率が高くな るというそれぞれ特徴的な結果が得られ た。従来、スプリットベーンやスワールベ ーン付きのスペーサを持つ PWR 用燃料集





合体では定格運転条件では単相流であるため、二相流条件での解析が行われた例がない。一方 で、福島事故以降、安全性向上の観点から PWR でも燃料集合体内の沸騰を考慮する必要があ り、本解析結果は今後の効率的な燃料設計に大きく寄与する他、PWR での機構論的な限界熱流 東予測手法の確立に大きく寄与するものである。

## (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 and H. Yoshida, "Numerical simulation of two-phase flow in 4x4 simulated bundle", Mech. Eng. J., Vol.7, No.3, 2020.
- A. Ono, H. Sakashita, and H. Yoshida, "Macrolayer Formation Model for Prediction of Critical Heat Flux in Saturated and Subcooled Pool Boiling", Heat Transf. Eng., DOI: 10.1080/01457632.2020.1826738, 2020.

・講演発表および口頭発表

3) 小野綾子,山下晋,鈴木貴行,吉田啓之,"詳細二相流解析による軽水炉燃料集合体内二 相流動に対するベーン効果",日本原子力学会2021年春の年会,オンライン開催,2021.

## (4) 今後の利用予定:

今後は、燃料集合体体系において高圧下での二相流解析を実施し、原子力機構で取得してい る実験データベースと比較することで、JUPITERコードの検証を実施する。また、簡易沸騰 モデルを垂直面での沸騰体系に適用できるようモデルを改修するほか、燃料集合体体系の沸騰 シミュレーショにおいてモデルを適用できるようコードの改修を実施する。

## 5.3.18 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、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を受けた。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 プレイ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。また近年では、廃炉作業における放射性飛散微粒子の閉じ込め管理技 術として、燃料デブリ切削時に発生する気相中の微粒子の捕集技術の開発も進められているこ とから、粒子挙動の予測手法の重要性は高まっている。

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 に追加することにより、エア ロゾル粒子捕集挙動予測手法を開発する。本解析においては、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ため、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と考えられる。

本手法を開発することにより、多様な事故状況に応じた捕集装置の数値実験が可能になり、 捕集性能の高性能化のための最適設計の提案が期待できる。また、実験では計測が困難な高速 な流動挙動や微細な粒子挙動の可視化も可能になり、捕集挙動の現象把握も期待できる。加え て、本研究で開発する手法は、詳細な二相流解析手法をこれまで適用されていなかった微細な 条件に拡張するものであるとともに、実験と解析を並行して実施することによる解析コードの 検証など、解析コードの発展としての意義も大きい。

#### (2) 利用内容·結果:

#### 粒子の濡れ性(接触角)の入力機能の追加

気液界面への沈着挙動の予測精度をさらに向上させるため、粒子の濡れ性(接触角)を入力・ 設定できるようにコードの改良を実施した。予備解析として、静止した単一液滴に粒径 3µm の 粒子を初速度 3m/s で衝突させる解析を実施したところ、同等な慣性力で気液界面に侵入する 場合、濡れやすい粒子(接触角が小さい粒子)ほど沈着して液内部に取り込まれやすいことを 確認した。また、エアロゾルを含んだ気泡挙動の解析(図1)において、接触角をパラメータに した解析を実施したところ、濡れやすい粒子ほど気相から液相への移行が多く見られ、粒子の 濡れ性がエアロゾルの捕集性能に影響を及ぼす可能性があることがわかった(図2)。このよう な粒子の性状に着目した捕集挙動解析はこれまでに例がなく、濡れ性によって有意な差がある ことは捕集性能の予測において重要な意味を持つと考えられる。



図1 エアロゾルを含んだ気泡挙動の解析結果 液相流速 2.4 m/s の矩形配管内に左側 面からエアロゾルを流速 3.8 m/s で供給したときの配管中心断面の気泡挙動(青領域)と 粒子挙動(白点)の時系列結果。粒子の質量密度は 3000 kg/m<sup>3</sup>、粒径は 10 µm。左側の 結果は粒子の接触角が 30°(濡れやすい粒子)での結果、右側は 150°(濡れにくい粒子) の結果。150°での結果と比較して、30°での結果のほうが下流での気泡中の粒子が少なく、 液中に移行していることがわかる。

図3の解析結果について、除去率で整理した結果。除去率

は、気相とともに流入させた粒子数(1万個)に対して気

相中から除去された粒子の割合を示す。接触角が小さい (濡れやすい)ほど、除去率が大きい。一方で、接触角90° より大きい、濡れにくい粒子は除去されにくいことがわか



図2 接触角に対する粒子の除去率

#### ブラウン力の追加

サブマイクロスケール以下の微粒子において支配的と考えられるブラウン運動を再現するた め、粒子の運動方程式にブラウン力を追加した。図3で示すように、粒径が小さい粒子ほどラ ンダムな挙動が顕著となり、ブラウン運動のランダムな挙動を再現できるようになった。また、 追加した解析機能の妥当性を検証するため、既存の理論(アインシュタインの関係式)との比 較解析を実施したところ、時間ステップを適切に設定することにより、ブラウン運動の移動量 について妥当な結果が得られることを確認した(図4)。

る。







**図 4 既存理論との比較** 縦軸は、本解析によって得られた 10 秒後の移動量を、アインシュ タインの関係式より得られる移動量で除した 値。1 のとき、理論値との一致を表す。横軸は、 本解析の時間ステップである。時間ステップ *dt*= 10<sup>-6</sup> s であれば、粒径 0.05 μm 以上の粒 子のブラウン運動が再現できる。

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- ·投稿論文発表(查読有)
- 1) <u>Shinichiro Uesawa</u> and <u>Hiroyuki Yoshida</u>, Observation of aerosol particle behavior near gas-liquid interface, Mechanical Engineering Journal, Vol.7, No.3, 2020, 19-00539-1 - 19-00539-9. (出版済)
- ・国際会議における論文発表(査読有)
- 2) <u>Hiroyuki Yoshida</u> and <u>Shinichiro Uesawa</u>, Numerical simulation of microparticles motion in two-phase bubbly flow, Proceedings of 2020 International Conference on Nuclear Engineering (ICONE 2020) (Internet), ICONE28-POWER2020-16393, 2020. (出版済)

## (4) 今後の利用予定:

本予測手法の妥当性検証を実施するとともに、粒子捕集メカニズムの解明と装置設計の最適 化ならびに実験の効率化に向けた実験模擬解析を実施する予定であり、今後も大型計算機の利 用を予定している。

# 5.3.19 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 for Aerosol Particle Behavior in a Reactor Building

堀口 直樹、上澤 伸一郎、山下 晋、吉田 啓之 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 微小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 非定常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 い実時間の非定常解析が困難、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:

粒子挙動解析機能の検証

JUPITER への粒子挙動解析機能の組み込みおよびその機能の検証を目的とした。粒子挙動 に関する条件として、粒子径が十分に小さくかつ球形、粒子数密度は十分に小さい、壁面衝突 の際に粒子は壁面上で静止または完全弾性衝突となることを仮定し、ラグランジュ粒子追跡法 を用いて解くこととした。機能を組み込み、この機能検証した結果として、粒子が壁面で衝突 する前後の画像を図1に示す。気相の流れに追従していた粒子は、壁面で完全弾性衝突して方 向転換する様子を確認した。



② 原子炉建屋内粒子挙動のベンチマーク解析

原子炉建屋内エアロゾル粒子挙動の評価は、実際の原子炉建屋を用いた実験は困難であるこ とから数値解析によって実施する必要がある。しかし、このような場合に数値解析結果の確か らしさを得るためには、共通の解析対象となるベンチマーク問題を設定し、これを複数の数値 解析コードを用いて解析して結果を相互比較するベンチマーク解析の実施が必要である。そこ で本項は、原子炉建屋内粒子挙動のベンチマーク解析の実施を目標とした。具体的には、ベン チマーク問題の設定、TPFIT および JUPITER を用いた長い実時間の非定常数値解析の実施、 比較対象とするための商用数値解析コード ANSYS Fluent を用いた数値解析の実施とこれらの 結果の比較である。

まず TPFIT および JUPITER を用いた長い実時間の非定常数値解析のため解析体系を構築 したが、新大型計算機システムへの移行に伴う計画的な計算資源の利用や代替案の考案・実行 に至れなかったため、十分な時間の数値解析を実施できなかった。さらに、Fluent を用いて CFD による流れ場を用いて粒子の運動を求め、通過割合(粒子の流入個数に占める流出個数)を粒 径毎に評価した結果、大粒径かつ小流量ほど低い通過割合となった、これは重力の影響が大き いほど床面へ重力沈降して、大空間を通過しにくくなるためと考えられる。よって、Fluentの 結果は物理的に妥当なものであると考えられる。 これらの研究成果から、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おいて 必要な JUPITER の機能と比較対象となる結果を準備できた。

#### (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(査読無)

- 中村康一,関口昂臣,<u>堀口直樹</u>,氷見正司,<u>上澤伸一郎</u>,吉田啓之,西村聡,原子炉建屋内 エアロゾル粒子挙動評価手法に関する研究(1)福島第一発電所2号機を対象とした建屋 なエアロゾル挙動のベンチマーク解析の概要と進捗,日本原子力学会2021年春の年会, 2021.
- 2) 関ロ昂臣,中村康一,<u>堀口直樹</u>,関口昂臣,<u>上澤伸一郎</u>,氷見正司,<u>吉田啓之</u>,西村聡,原 子炉建屋内エアロゾル粒子挙動評価手法に関する研究 (2)MAAAP コードにおけるノー ディング分割による建屋エアロゾル挙動評価への影響,日本原子力学会 2021 年春の年 会,2021.
- 3) <u>堀口直樹</u>,中村康一,関口昂臣,<u>上澤伸一郎</u>,氷見正司,<u>吉田啓之</u>,西村聡,原子炉建屋内 エアロゾル粒子挙動評価手法に関する研究 (3)CFD 解析による粒子挙動評価および流 量・粒径の影響,日本原子力学会 2021 年春の年会, 2021.

#### (4) 今後の利用予定:

これまで、比較的小さい空間での粒子挙動解析機能の検証を実施した。今後は原子炉建屋の スケールに近づけた比較的大きい空間での検証を実施し、大型計算機を利用した解析の準備が 整い次第、改めて申請し大型計算機を利用することを検討する予定である。

## 5.3.20 ナトリウムの評価済み核データに対するベンチマーク計算

## Benchmark Calculations for Evaluated Nuclear Data of Sodium

松田 規宏 炉物理標準コード研究グループ

#### (1) 利用目的:

令和3年度の公開を目指している評価済み核データJENDL-5 は、開発の各段階でベンチマ ーク計算を通じた精度検証を実施しつつ開発が進められている。JENDL-3.3以来の改定となる ナトリウムの評価済み核データのアルファ版(初期テスト版)の検証を行うため、米国オーク リッジ国立研究所(ORNL)の実験炉(TSR-II)を用いて実施されたJASPER 実験[1,2]の解 析をベンチマーク問題に採用し、粒子・重イオン輸送計算コード PHITS[3] によるモンテカル ロ計算を実施した。JASPER 実験に対するベンチマーク計算は JENDL-3.3 の検証[4] でも行 われており、ナトリウムの厚い遮へい体を透過してくる中性子スペクトルの計算結果(いわゆ る「深層透過問題」。)を十分な統計精度で得るためには、高い能力の計算機資源を必要とする。 [1] F.J. Muckenthaler, R.R. Spencer, H.T. Hunter, J.L. Hull, A. Shono, "Measurements for the JASPER program in-vessel fuel storage experiment," ORNL/TM-11989, Oak Ridge

National Laboratory (1992).

- [2] F.J. Muckenthaler, R.R. Spencer, H.T. Hunter, J.L. Hull, A. Shono, "Measurements for the JASPER program intermediate heat exchanger experiment," ORNL/TM-12064, Oak Ridge National Laboratory (1992).
- [3] Tatsuhiko Sato, Yosuke Iwamoto, Shintaro Hashimoto, Tatsuhiko Ogawa, Takuya Furuta, Shin-ichiro Abe, Takeshi Kai, Pi-En Tsai, Norihiro Matsuda, Hiroshi Iwase, Nobuhiro Shigyo, Lembit Sihver and Koji Niita, "Features of Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 3.02, "J. Nucl. Sci. Technol. 55, pp.684-690 (2018).
  [4] Japanese Nuclear Data Committee, Shielding Integral Test Working Group (FY2006-2010), "Integral test of JENDL-3.3 based on shielding benchmarks," JAEA-Research 2018-017, (2019) 72p.

## (2)利用内容·結果:

ベンチマーク計算に用いた JASPER 実験の計算体系を図 1 に示す。モンテカルロ計算の線 源は、実験で得られた TSR-II からの中性子スペクトルを再現するよう、データベースに基づ いて乱数で決定する。データベース、ならびに乱数を用いた中性子の発生位置、放出方向、お よびエネルギーの決定プログラムは、PHITS のユーザー定義ソース usrsors.f に設定した。ユ ーザー定義ソースを利用するためには、usrsors.f を含む PHITS のソースプログラムをコンパ イルして実行ファイルを新たに作成する必要がある。



図1 ベンチマーク計算に用いた JASPER 実験の計算体系

図 1 の計算体系に対するベンチマーク計算の結果を図 2 に示す。ベンチマーク計算には、 JENDL-5 評価済み核データのアルファ版(JENDL-5 α)のほか、既存の評価済み核データ JENDL-4.0、JEFF-3.3、および ENDF/B-VIII.0 を用いた。



JENDL-5 評価済み核データのアルファ版を用いた中性子エネルギースペクトルの計算結果 は JASPER 実験の結果をよく再現し、既存の評価済み核データと同等の性能を有すことを示 している。

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

## (4) 今後の利用予定:

モンテカルロ法計算コードによる深層透過問題の計算結果を十分な統計精度で得るために は、大型計算機の支援が必須であり、引き続き利用を予定している。 5.3.21 CuZr バルク金属ガラスと鉄表面のアセテート吸着に対する第一原理計算に基づ く原子レベルのエネルギーと応力評価

> Atomic-level Energy and Stress Calculated from First Principle in CuZr Bulk Metallic Glass and Iron Slab with Acetate Adsorbate

> > Ivan Lobzenko、Tomohito Tsuru 照射材料工学研究グループ

## (1)利用目的:

At the macroscopic level mechanical properties of materials are defined by the behavior of structural parts at microscopic level. In case of metals such structural units are single atoms and it is vital to know their stress response to the macroscopic strain. While performing computer simulations in classical approximation it is relatively easy to calculate atomic stress. However, in many cases classical approximation does not reach required accuracy. *Ab initio* calculations are much more accurate, but there is no conventional way of calculating atomic stress in that case. The purpose

of this study was to extract atomic-level data (atomic stress, as shown in Fig.1 and atomic energy) for two different systems: (I) bulk metallic glass CuZr and (II) iron slab with acetate molecule adsorbate. In both cases high accuracy was ensured by using first principle calculations based on density functional (DFT) method, as implemented in OpenMX software. The recently developed by Prof. Y. Shiihara scheme of atomic stress calculations was applied.



Fig. 1 Stress drop in Cu<sub>48</sub>Zr<sub>48</sub> system

#### (2)利用内容·結果:

(I) Four optimized structures of Cu48Zr48 compound have been obtained starting from four different random structures. Final structures went through sophisticated optimization process very similar to the real process of metallic glass formation. Shear stress (of various directions) have been applied to all four structures and averaged stress-strain curves have been obtained. Using the atomic stress analysis, it was shown that particular groups of atoms in initial structure can



Fig. 2 Stress-Strain curve of CuZr

be responsible for the softening. It can be seen in Fig. 1 that in Cu48Zr48 structure under 8% xy shear strain Zr atoms give the stress drop to the system. The macroscopic behavior is represented by the stress-strain curve in Fig. 2.

#### JAEA-Review 2021-022

(II) In the case of the acetate molecule adsorbate on the iron slab, the comparison was made between two different types of the slab. One system has the grain boundary (GB) and the other system was "clean" surface. Results show that adsorption on the system with GB is more favorable in comparison to the "clean" system. The atomic energies contributions to the adsorption energy (see Fig. 3) demonstrate that the presence of a grain boundary allows molecule to reduce its' energy.



Fig. 3 Atomic contribution to the adsorption energy for (a) the case with grain boundary and (b) the case of "clean" surface

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 投稿論文(査読あり)(出版済 10 報)
- 1) I. Lobzenko, Y. Shiihara, T. Iwashita, T. Egami, "Shear Softening in a Metallic Glass: First-Principles Local-Stress Analysis", Phys. Rev. Lett. 124 (2020) 085503.
- 2) I. Lobzenko, Y. Shiihara, Y. Umeno, Y. Todaka "Adsorption enhancement of a fatty acid on iron surface with Σ3(111) grain boundary" App. Surf. Sci. 543 (2021) 148604.

## (4) 今後の利用予定:

We will construct new function for atomic stress based on artificial neural network potential.

## 5.3.22 ADS 材料の第一原理計算

#### First-principles Calculation of Structural Material for ADS

阿部 陽介、板倉 充洋、山口 正剛、鈴圡 知明、都留 智仁 照射材料工学研究グループ

#### (1)利用目的:

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

計算対象として、オーステナイト鋼のベースとなる、fcc 構造を有する γ 鉄を選んだ。この系 ではランダムな磁性状態を用いた計算をしないと結晶の対称性等を再現できないことが知られ ている。昨年度得られた知見を元に、スピンの向きとして一次元方向のみを用いるコリニア磁 性の計算を採用した。三次元的なスピンを考える方法では計算時間が 4 倍となるが、その計算 結果への影響は小さいためである。ランダムな向きの磁性はすでに計算され公開されている 32 原子の Special Quasiradom Structure を用いて半分の原子を上向きスピン、半分を下向きスピ ンとした初期状態で計算を行った結果、同じスピン状態で最終的に電子状態と原子配置ともに 収束した。図 1 にこの系の基底状態のスピン配置と、SQS を用いて作成したランダムスピン配 置を示す。基底状態では特定の<100>方向にスピンが配列し対称性が破れるため、fcc 構造でな く fct 構造が安定となるため使用できず、ランダム配置を用いた計算が必須となる。

次にこの配置を基に 16 個の異なる原子位置の原子を取り除き、再び緩和計算を行って空孔 生成エネルギーを計算した結果を図 2 に示す。空孔を導入する位置によっては周囲の原子のス ピンが反転し、空孔生成エネルギーに影響を与える。そのため空孔生成エネルギーにはばらつ きが出る。スピン反転は導入した空孔の周辺で起こっていて、その頻度は半分以上である。ま た空孔導入によりスピン偏極の値は全般的に絶対値が大きくなっている。これは鉄においては 原子が密集しているところではスピン偏極が小さくなり、逆に表面原子や孤立原子ではバルク より大きくなる傾向から理解できる。図 2 では特に 4 番の位置で示した原子で空孔導入により 次近接原子を含む 9 原子でスピンの反転が起こっており、これによりエネルギーが大幅に低下 したことで空孔生成エネルギーが大きく下がっている。

そこでこの反転したスピン配置を用いて完全結晶のエネルギーを再計算したところ、SQS 状態より 0.7eV 低いエネルギーが得られた。この状態を基準として空孔生成エネルギーを計算したのが図 2 で黒丸で示したものである。他の場合と比べて同等のエネルギーになっている。基準とした完全結晶状態の磁性状態のエネルギーは基底状態とくらべて+0.3eV であり、SQS 状態の+1.0eV より大幅に下がっている。熱力学的な平衡を考えると、空孔の周辺で特徴的なスピン配置があり、それが完全ランダム状態とくらべて 0.7eV 程度の利得があるとするなら、常温ではそうした特徴的な状態が支配的となっていることが考えられる。したがって、空孔生成エネルギーの計算においては空孔導入によって反転したスピン配置を用いて完全結晶のエネルギーを再計算し、両者の差をとることで物理的に妥当な空孔生成エネルギーが得られると考えられる。これはさらに合金元素を導入してランダムスピン状態で計算する場合にも同様と考えられる。

これらの知見は、原子力分野のみならず産業一般で広く使われているステンレス鋼の第一原 理計算が行えないという現在の材料科学の課題について貢献する重要なものである。



図1 (a) fcc 鉄における基底状態のスピン配置。異なる色が上向き、下向きスピンを表す。 (b) SQS を用いて作成されたランダムなスピン配置。



図 2 ランダムスピン状態の fcc 鉄における空孔生成エネルギー。横軸は取り除いた原子の番号。白丸が単純計算、黒丸はスピンの向きをそろえた計算の結果。

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

投稿論文(査読あり)

- <u>Y. Abe</u>, Y. Satoh, N. Hashimoto, "Migration energy of a self-interstitial atom in α-iron estimated by in situ observation of interstitial clusters at low temperatures using highvoltage electron microscopy", Philosophical Magazine, Vol.101, No.14, pp.1619-1631, (2021).
- 2) <u>M.Itakura, M.Yamaguchi</u>, D.Egusa, E.Abe, "Density functional theory study of solute cluster growth processes in Mg-Y-Zn LPSO alloys", Acta Materialia, Vol.203, 116491.
- 3) <u>T.Suzudo</u>, K.Ebihara, <u>T.Tsuru</u>, "Brittle-fracture simulations of curved cleavage cracks in  $\alpha$ -iron: A molecular dynamics study", AIPAdvances 10 (2020), 115209.
- <u>T.Tsuru</u>, K.Shimizu, <u>M.Yamaguchi</u>, <u>M.Itakura</u>, K.Ebihara, A.Bendo, K.Matsuda, H.Toda, "Hydrogen-accelerated spontaneous microcracking in high strength aluminium alloys", Sci. Rep. 10 (2020) 1998.
- 5) <u>都留智仁</u>,「原子シミュレーションに基づく力学特性評価と材料設計」,まてりあ,Vol.60, No.1, pp.25-29, 2021.

国内会議

- 6) 佐藤裕樹, <u>阿部陽介</u>, 他, "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 年秋期大会, オンライン, 2020 年 9 月.
- 7) 佐藤裕樹, <u>阿部陽介</u>, 他, "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(2)", 日本金属学会 2021 年春期大会, オンライン, 2021 年3月.
- 8) 阿部陽介, 佐藤裕樹, 橋本直幸, "超高圧電子顕微鏡その場観察による純鉄中の点 欠陥の 移動エネルギー評価", 日本金属学会 2021 年秋期大会, 2021 年 9 月.

#### (4) 今後の利用予定:

本課題については今後スパコンの利用予定はない。

## 5.3.23 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、Ivan Lobzenko 照射材料工学研究グループ

## (1)利用目的:

強さ(強度)と延び(延性)・破壊に対する粘り強さ(靱性)は構造材料において最も重要な 性質である一方、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、一般には両立 することは困難である。すなわち、強度を高めようとすると、延びが小さくなる。構造材料に は、強度が高いだけでなく一定の変形を許容することが求められ、このような要請から金属材 料が広く用いられてきた。材料の力学特性に対する機能向上は、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。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)合金設計に分けることができ、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。新たな機能を持つ材料を戦略的かつ効率的に創成するために、欠陥組織や合金化の影 響を非経験的に評価・予測する方法の開発が期待されている。本研究では、大型計算機を用い て変形時の欠陥の動的挙動に関する大規模並列分子動力学シミュレーションを行うとともに、 第一原理計算に基づく合金設計手法を構築することを目的とする。

#### (2) 利用内容·結果:

#### ① 第一原理計算と転位運動の熱活性化過程に基づく力学モデル

BCC タングステンに対して、第一原理計算による転位運動を検討した。第一原理計算の枠組 みで転位の計算を行うために、転位構造のモデルは前述のような線形弾性論を用いた変位場を 与えた周期境界中の四重極子配置を持つらせん転位を導入する。このモデルに対して、第一原 理計算を用いて任意の位置のエネルギーを計算した。Peierls ポテンシャルは理想的に直線の転 位が運動する際のエネルギーであるが、実際の BCC 金属の転位は示すキンク機構によって運 動する。キンク機構を直接第一原理計算から解析することは困難であるため、次式の線張力モ デルを用いて転位運動を記述する。

$$W_{LT}(\mathbf{x}_i, \sigma_{yz}) = b \sum_i \left[ V_p^i(\mathbf{x}_i) - \sigma_{yz} b \mathbf{x}_i + \frac{\Gamma^i}{2b^2} (\mathbf{x}_{i+1} - \mathbf{x}_i)^2 \right]$$
(1).

第一原理計算から得られた Peierls ポテンシャル と線張力の係数を用いて、キンク機構による転位 運動を再現した。NEB 法を線張力モデルの自由 度に対応させた最適化手法を用いて,直線転位が 一周期分移動する間の最小エネルギー経路を転 位のエネルギー汎関数を用いて最適化したもの を図1に示す。負荷応力に依存して線形的に変化 することを示しており、応力の依存性を表現でき る。また、このようなキンク機構は温度に依存し



図1 線張力モデルによるキンク形成
た熱活性化過程であり、合金元素の影響を考慮し、温度に依存して転位の2次元運動を許容した解析手法を検討している。

#### ② アルミニウム合金の水素による自発的破壊現象の解明

高強度アルミニウムでは、材料中の水素が微量であっても水素脆化による破壊を誘発することが知られている。しかし、水素挙動を実験的に直接的に捉えることは困難であることから、 水素が変形や破壊に及ぼす影響はわかっていない。

本研究では、大型シンクロトロン放射光施設を用いたアルミニウムの最先端の実験による欠 陥構造の観察、および電子状態計算によって欠陥構造と水素の関係を理解するとともに、破壊 に至るプロセスを明らかにすることを目的として研究を行った。まず、実際に材料中に存在す る欠陥構造に対して、水素が集まる可能性の全てを原子モデルに基づく電子状態計算によって 検討した。図2に合金中に存在する多様な欠陥構造の模式図と計算によって評価された合金中 の水素分配を示している。この結果から、これまで水素が集まると考えられていた転位への分 配は小さい一方、微細粒子との界面によく集まることを明らかにした。また、多数の水素が集 積した際の界面における結合エネルギーと界面凝集エネルギーの変化を図3に示す。その結果、 界面には多数の水素が集まりやすいことに加え、水素分子が形成されながら集積し続けること がわかる。さらに、多数の水素の集積によって界面の凝集エネルギーは低下していき一定の量 に達した時点でゼロになる。すなわち、水素は界面で飽和することなく安定的に集積し、界面 の接着力が喪失することによって自発的剥離を生じている。このようにして、微細粒子は高強 度化には不可欠である一方、水素を集めやすく、割れを促進することが明らかになった。本成 果は、Scientific Reports に掲載されるとともに、2020年にプレス発表された。



- 95 -

- (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
  - 投稿論文(査読あり)
  - 1) S. Yamamoto, Y. Miyajima, C. Watanabe, R. Monzen, T. Tsuru, H. Miura, "Dependences of Grain Size and Strain-Rate on Deformation Behavior of Commercial Purity Titanium Processed by Multi-Directional Forging", Mater. Trans., Vol.61, No.12 (2020), pp.2320-2328.
  - 2) H. Somekawa, D. A. Basha, A. Singh, T. Tsuru, H. Watanabe, "Change in damping capacity arising from twin-boundary segregation in solid-solution magnesium alloys", Philos. Mag. Lett.Vol.100, No.10,(2020), pp.494-505.
  - 3) T. Tsuru, K. Shimizu, M. Yamaguchi, M. Itakura, K. Ebihara, A. Bendo, K. Matsuda, H.Toda, "Hydrogen-accelerated spontaneous microcracking in high strength aluminium alloys", Sci. Rep., Vol. 10 (2020) 1998.
  - 4) 都留智仁,「原子シミュレーションに基づく力学特性評価と材料設計」,まてりあ Vol.60, No.1, pp.25-29, 2021.
  - プレス発表
  - 5) 都留智仁,「アルミニウムの自発的破壊現象の解明 ~水素でアルミがもろくなる原因の解 明と、計算科学による高強度合金への期待~」,日刊工業新聞,電気新聞,他(全7社に掲載).
  - 書籍, 解説記事
  - 6) (書籍) 乾晴行 編著,「ハイエントロピー合金: カクテル効果が生み出す多彩な新物性」(分 担執筆),内田老鶴圃,2020年5月.
  - 7) (解説記事) 戸田裕之,都留智仁,山口正剛,松田健二,清水一行,平山恭介,「アルミニウムの自 発的な剥離現象の謎に迫る」,月刊化学, Vol.75, No.10, (2020) pp.48-53.
  - 国際・国内会議
  - 8) (基調講演)都留智仁,山口正剛,板倉充洋,海老原健一,清水一行, Artenis Bendo,松田健二,戸田裕之,「高強度アルミニウム合金の水素誘起自発的破壊現象の解明:実験と計算科学からのアプローチ」,軽金属学会第139回秋期大会,2020年11月7-8日,オンライン,他.

#### (4) 今後の利用予定:

合金設計に関する研究として、現在高濃度合金の転位挙動を第一原理計算に基づき記述する ための方法を検討している。また、希薄合金と高濃度合金に対する機械学習ポテンシャルの開 発を行う。

#### 5.3.24 アルミニウム合金中のナノクラスタと転位との相互作用の解明

#### Atomistic Modeling of Interaction between Nanocluster and Dislocations

都留 智仁、芹澤 愛 照射材料工学研究グループ、芝浦工業大学

#### (1)利用目的:

アルミニウム (Al) に Mg、Si を添加した Al-Mg-Si 系合金は強度および耐食性に優れてお り、焼付塗装時に強度が向上するベークハード性を持つことから、自動車用ボディーパネル材 に用いられている。この合金では、焼入れ後室温で保持してから人工時効する二段時効を行う と、焼付塗装時に十分な時効硬化が得られない二段時効の負の効果が起こることが知られてい る。一方、焼入れ後 100℃程度で保持してから人工時効を行うと、二段時効の負の効果は表れ なくなる。こうした予備時効の温度条件による時効硬化量の違いは、時効初期に形成するナノ クラスタの違いに起因している。しかし、その違いについては不明な点も多く、Al-Mg-Si 系合 金の複雑な時効挙動を理解するためには各条件で形成するナノクラスタの相違点を明らかにす ることが不可欠である。

本研究では、原子力機構の大型計算機を用いて、Al-Mg-Si 系合金において室温で形成する Cluster (1)と 100℃程度で形成する Cluster (2)の 2 種類のナノクラスタのエネルギーを第一原 理計算によって評価し、内部構造の違いを解明することを目的とした。

#### (2)利用内容·結果:

#### 1.解析方法

Alの4×4×4結晶格子のうち2つのAl原子をMg原子、Si原子、空孔で置換し、各場合について置換した原子または空孔を最近接位置と第二近接位置および遠距離に配置したスーパーセルを作成した。第一原理計算を用いて純Alおよび、2溶質原子あるいは空孔が最近接位置と第二近接位置にある場合の全エネルギーを計算した。計算には第一原理計算コードにはVASPを用いた。なお、全ての計算においてカットオフエネルギーは400 eVとし、k点サンプリングにはMonkhorst-Pack法を用い3×3×3メッシュ分割した。合金元素間および空孔の結合エネルギーの評価とともに、メトロポリスの方法を用いた平衡モンテカルロ計算によって、温度の違いによるナノクラスタの構造を評価した。

#### 2.解析結果

① Al-Mg-Si 系合金中における溶質原子の結合エネルギーの算出

溶質原子および空孔の結合エネルギー を評価するにあたり、本研究では結合エ ネルギーを、溶質原子または空孔が結合 している状態とそれぞれが独立して存在 している状態のエネルギー差と定義し た。Al-Mg-Si 系合金中で形成される溶質 原子および空孔の結合エネルギーを図 1 に示す。溶質原子同士および溶質原子と





空孔の2体間において、最も安定な結合は Mg-Si 結合であることが明らかとなった。また、Si

と空孔は最近接位置で安定に存在し、Al-Mg-Si 合金中において Si 原子が空孔をトラップする 効果があることが示された。

②平衡モンテカルロ計算を用いたナノクラスタの安定構造の探索

ナノクラスタの安定構造を決定するために、Al 母相中に Cluster (1)あるいは Cluster (2)を 1 つ含む原子モデルを 10 個ずつ作成した。Cluster (1)のモデルでは 298K、Cluster (2)のモデル では 373K の温度条件とし、モンテカルロ法を用いて平衡状態における原子配置を探索した。 シミュレーション前および 2000 ステップ後の構造を図 2 に、各モデル中における Mg-Si 結合 および Mg、Si、空孔が最近接位置に集まった結合の数を表 1 に示す。いずれのナノクラスタモ デルにおいても、シミュレーション後の Mg-Si 最近接結合および Mg-Si-Vac 最近接結合の数 は、シミュレーション前に比べて増加しており、これらの結合を多く含むナノクラスタが高い 熱的安定性を持つ傾向があることが明らかとなった。また、一部の Cluster (1)が持つ高い熱的 安定性には、Cluster (1)の高い Si 濃度および空孔量に起因する Mg-Si 結合および Mg-Si-Vac 最近接結合が寄与している可能性が示された。



図2 シミュレーション前および 2000 ステップ後の構造

	Cluster (1)		Cluster (2)	
	Before	After	Before	After
Mg-Si	17	35	13	31
Mg-Si-Vac	2	18	1	3

表1 各結合の数

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

#### (4) 今後の利用予定:

Al-Mg-Si 系合金において、合金元素の固溶状態と多様な化合物のエネルギーを第一原理計 算によって評価するとともに、それらを用いた機械学習ポテンシャルを構築することを計画し ている。

#### 5.3.25 J-PARC MLF 水銀標的に対する 3GeV 陽子入射 180 度中性子エネルギースペ クトルの解析 Analysis of 3-GeV Proton-induced Neutron Energy Spectrum at 180° for a Mercury Target at J-PARC MLF

岩元 大樹

核変換システム開発グループ

#### (1)利用目的:

高エネルギー加速器施設や核破砕中性子源施設の遮蔽設計及び加速器駆動核変換システムの 研究開発では、高エネルギーの陽子ビームと標的原子核との核反応(核破砕反応)を記述する 核反応モデルが重要な役割を演じる。核破砕反応によってビーム進行方向から180度方向に放 出される中性子(180度中性子)は、施設の遮蔽設計に大きなインパクトを与えるが、数 GeV の高エネルギー陽子入射による180度中性子に関する実験データは存在していなかった。その ため、180度中性子に対する核反応モデルの予測精度に関する実験的な検証が強く望まれてい た。

このような背景から、J-PARC 物質生命科学実験施設 MLF に設置された水銀標的に 3GeV 陽子ビームを照射し、水銀標的に対する 180 度中性子のエネルギースペクトルを測定した。実 験結果と核反応モデルによる解析結果を比較するには、実験体系を忠実にモデル化して粒子輸 送シミュレーションを行う必要があるが、実験体系が極めて複雑で長大なため、大規模な計算 資源を必要とした。本解析に原子力機構の ICE X を利用することで、短期間のうちに目的とす る 180 度中性子のエネルギースペクトルを得ることができた。以下ではその結果について記載 する。

#### (2) 利用内容·結果:

解析には、モンテカルロ粒子輸送シミュレー ションコード PHITS を用いた。シミュレーシ ョンでは、粒子の物質中の挙動を忠実に再現 する必要があるため、図 1 に示すような水銀 標的及びその周辺を詳細に模擬したモデルを 使用した。

図 2 に本実験の測定体系を示す。極めて複 雑な水銀標的モデルに加えて、水銀標的と中 性子検出器との距離が 126.4m と極めて長い ため、測定位置における 180 度中性子のエネ ルギースペクトルを十分な統計精度で得るに は膨大な計算コストを要する。そのため解析 では、次の2つのステップに分けて、目的とす



図1 PHITS の解析に使用した MLF 水銀 標的の幾何形状モデル



図 2 180 度中性子測定体系図(平面図)

る180度中性子のエネルギースペクトルを求めた。

- 1. 3 GeV 陽子ビームを線源とした水銀標的付近の粒子輸送解析
- ステップ1の解析で得られた水銀標的付近の180度中性子を線源としたビームダクト 内の中性子輸送解析

複雑かつ長大な幾何形状モデルに加えて、水銀のような重核種と GeV 領域の高エネルギー陽 子との核反応の解析には膨大な計算機資源を要する。解析に原子力機構の ICE X による並列計 算を利用することで、短期間のうちに、測定位置における 180 度中性子エネルギースペクトル を得ることができた。

図 3 に、解析及び測定で得られた 180 度中性子エネルギースペクトルの比較を示す。ここ で、解析では、PHITS の現標準仕様の最新の核反応モデル INCL4.6/GEM と旧標準仕様の Bertini/GEM を用いた。図に示されているように、本解析によって INCL4.6/GEM の方が実験 値をよく再現していることを示すことができ、核反応モデルによる 180 度中性子に対する予測 結果の妥当性を示すことに成功した。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。



中性子エネルギースペクトルの比較

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 H. Matsuda, H. Iwamoto, et al., "Estimation of thick target neutron yield at 180° for a mercury target induced by 3-GeV protons," Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interaction with Materials and Atoms, vol. 483, 2020, pp.33-40.

#### (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 の後継機 HPE SGI8600 の 利用を予定している。

#### 5.3.26 ADSビーム窓設計のための粒子輸送解析

#### Particle Transport Analysis for ADS Beam Window Design

菅原 隆徳、渡辺 奈央 核変換システム開発グループ

#### (1)利用目的:

加速器駆動核変換システム(ADS)の設計検討において、ビーム窓の検討は大きな課題の一 つである。ビーム窓は加速器と未臨界炉心の境界を成す構造物であり、陽子による発熱、液体 鉛ビスマス(LBE)による外圧、陽子・中性子による照射損傷など過酷な環境で用いられる。 核変換システム開発グループでは、ビーム窓の効率的な設計検討を行うため、粒子輸送・熱流 動・構造の連成解析システムを開発している。このシステムでは、各解析で用いるメッシュを 共通のジオメトリデータから生成することで信頼性を高めるとともに、入出力のインターフェ ースを一元化することで効率的な設計検討を可能とする(図1)。

このシステムでは、熱流動解析で用いるメッシュに対して、粒子輸送解析で得られた発熱分 布を与える必要がある。熱流動解析の精度を保つためには、できるだけメッシュサイズを小さ くする必要があるが、一方でメッシュサイズが小さいと粒子輸送解析における統計精度を上げ るために、より多くの粒子数、計算時間が必要となる。精度を保ちつつ、現実的な時間で粒子 輸送解析を行うため、HPE SGI8600上で PHITS による粒子輸送解析を実施した。





#### (2) 利用内容·結果:

図2に解析モデルを示す。解析モデルはビーム窓、ノズルそしてLBE領域から構成される。 ビーム窓とノズルはT91鋼を使用し、ビーム窓内部は真空である。これらの領域を対象として、 粒子輸送および熱流動解析を行った。

ANSYS Workbench で構築した連成解析システムにおいて、解析モデルから NASTRAN 形 式でのメッシュ(テトラ)を出力し、PHITS にわたす。このとき、メッシュ数は約 1400 万と なった。このジオメトリを用いて、陽子、中性子の輸送計算を行った。入射陽子エネルギー1.5 GeV、ビームプロファイルはガウシアン(1 $\sigma$ =11.16 cm)とし、HPE SGI8600 上で解析を行った。

粒子輸送解析の結果得られた発熱密度分布を図 3(b)に示す。これは、PHITS の出力を FLUENT 用メッシュ(図 3(a)、メッシュ数約 400 万)に自動的に変換したコンター図であり、 陽子ビーム電流値 15 mA に換算した値となっている。この発熱密度分布を用いて熱流動解析を 行った結果、ビーム窓外表面の温度は 450-470℃程度となり、既往研究と同程度の温度になる ことを確認した。



#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

#### (4) 今後の利用予定:

今回は参照ケースを対象とした粒子輸送解析を実施した。今後は、ビーム窓の形状(半径、 厚さ)、入射エネルギー等を変えた様々なケースを対象として、HPE SGI8600 において同様 の解析を行うとともに、ビーム窓連成解析システムを用いて、より実現性の高いビーム窓概念 の創出を目指す。

#### 5.4 先端基礎研究センター

Advanced Science Research Center

### 5.4.1 高密度天体における物質の非一様構造と状態方程式 Inhomogeneous Structures and the Equation of State of Matter in Compact Stars

丸山 敏毅<sup>1</sup>、Cheng-Jun Xia<sup>2</sup> 先端理論物理研究グループ<sup>1</sup>

Zhejiang University Ningbo Institute of Technology<sup>2</sup>

#### (1) 利用目的:

中性子星や超新星コアのような高密度天体を構成する物質は、1cm<sup>3</sup>あたりの重さが10<sup>14</sup>g 以上といった通常の原子核密度と同程度か原子核内部の数倍にも達する高密度となっている。 このような高密度の領域では物質の構成粒子の種類や物理的振舞いが密度によって異なる、い わゆる相転移が起こると考えられる。また、相転移によっては異なる相同士が規則的な構造を 示す"構造を持った混合相"となり、物質の状態方程式(密度と圧力の関係)ばかりでなく強 度や粘性のような力学的性質にも影響する。これらの情報は近年進んでいる中性子星連星から の重力波の観測や、大質量の中性子星の発見などの事実と照合されることにより、原子核や原 子核物質、高密度天体の正しい理解へとつながって行く。

我々は標準原子核密度近辺の、比較的低い密度領域での原子核物質の液相-気相相転移におけ る非一様な"原子核パスタ"と呼ばれる構造の詳細について調べるために、相対論的平均場模 型(核力を媒介する中間子場の記述)とThomas-Fermi近似(局所運動エネルギー密度が局所 粒子密度のみに依存する近似)とによって記述される核子と電子の密度分布を3次元空間にお ける数値計算によって解く。周期的境界条件を持ったセルの中で計算するが、セルの形状やサ イズが結果に影響を及ぼさないようにするため、十分に大きなセルと十分に細かなグリッドを 用いて計算する必要があり、大型計算機の使用が必要となる。

#### (2)利用内容·結果:

まず低密度原子核物質の構造として受け入れられている原子核パスタ(球形原子核/Droplet、 棒状原子核/Rod、板状/Slab、棒状の穴/Tube、球形の穴/Bubble)が我々の3次元計算によって 現れることを確かめた。これまでの類似した研究と異なり、Wigner-Seitz セルに球形近似や円 筒近似を用いず、Droplet/Bubble では bcc と fcc 及び simple 格子を、Rod/Tube では honeycomb と simple 格子を厳密に区別した。図1のように、固定した陽子含有率での構造は、これまでの ようにパスタ構造を示すが、Droplet ではほぼ bcc、Bubble では fcc と bcc が現れることを示し た。



図 1 陽子含有率*Y<sub>p</sub>* = 0.5,0.3,0.1の原子核物質の最小エネルギー、構造によるエネルギー 差、及び構造のサイズ。

原子核物質の状態方程式の探求では先ず対称核物質の比圧縮率 K を決定しようと原子核構 造や重イオン衝突の実験と理論、高密度天体の質量と大きさの観測などから、非常に多くの議



図2 用意した2つのパラメータセットに よる原子核物質の結合エネルギーBのバリ オン密度 $n_b$ 依存性。電子の寄与は含んでい ない。SNM は対称核物質、PNM は中性子 物質を差し、SNM の最小値を与える密度 が標準原子核密度 $n_0 \approx 0.16 \text{fm}^{-3}$ である。 この密度での PNM の傾きがLとなる。

論がされてきた。そして近年では対称エネルギー に関する硬さ(非対称核物質の比圧縮率 L)が 注目され、これも原子核の実験・理論と天体核物 理の分野で議論が盛んになっている。我々はKを 240 MeV に固定した上でLが 89 MeV と 41 MeV の異なる 2 つのパラメータセットを用意した(図 2 参照)。このために相対論的平均場模型に対し て*p*-ωカップリング項を導入した。陽子含有率は 固定せずベータ平衡を課した中性子星物質につ いて 3 次元計算を行った。図 3 に密度に対する エネルギー、陽子含有率、構造のサイズを示す。 左がL = 89 MeVの場合、右がL = 41 MeVの場合 である。大きなLを用いると Droplet 以外のパス タ構造が現れにくいと言われていたが、それを肯

定する結果になっている。また、小さめのLではいわゆるパスタ構造の種類だけでなく、Bubble の bcc、fcc の 2 種類の構造も区別されて現れている。点電荷による考察では、bcc 格子がクー ロンエネルギーを最小にすることが分かっているので、fcc が現れるのは Droplet//Bubble の形 状が球形からずれていたり、クーロン力以外に核力が効くためであると思われる。



図3 ベータ平衡な中性子星物質のエネルギー、陽子含有率、構造のサイズ。
左がL = 89MeV、右がL = 41MeVの場合。

この2つのパラメータセットの比較により、低密度物質の状態方程式も異なっていることが 分かる。図4左は、得られた状態方程式を元に計算された中性子星の質量と半径の関係である。 大きなLでは中性子物質の状態方程式が小さなLより硬くなるため、天体の半径が膨らむ傾向に ある。また、図4右の潮汐変形性でも有意な違いが現れている。標準原子核密度から離れた高 密度領域での状態方程式をこの模型で記述できるわけではないが、中性子星の表面付近(殻) の状態方程式の違いはその殻層の厚さや力学的強度に効いてくると思われる。



図4 2つのパラメータセットによる中性子星の質量 (単位は太陽質量)と半径(左)。右は潮汐変形性。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) C.-J. Xia, T. Maruyama, N. Yasutake, T. Tatsumi, Y.-X. Zhang, "Nuclear Pasta Structures and Symmetry Energy", Physical Review C ,Vol.103, 55812 (2021) 13p.

#### (4) 今後の利用予定:

今後原子核パスタに対する磁場の影響を計算する計画があり大型計算機を使う予定である。

#### 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。本研究で使用する 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 や運転再開する JRR-3 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 や JRR-3 などでの実験研究との連携を強力に推進する。

#### (2) 利用内容·結果:

交換相互作用の面直 z 成分と面内 xy 成分が異方的な一次元反強磁性 XXZ 模型は、量子相転 移が起こる典型模型として古くから研究されている。z 成分が xy 成分より大きいイジング型で は反強磁性基底状態が実現する。そこへ xy 面内方向の磁場を加えると、z 方向の反強磁性相関 に加えて磁場方向に磁気モーメントが誘起された傾斜反強磁性状態へと連続的に変化し、飽和 磁場で強磁性状態へと至る。擬一次元イジング型反強磁性体のモデル物質 BaCo<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub>は、ゼロ 磁場では 5.4K で反強磁性秩序する。xy 面内方向に磁場を加えると、本来磁場方向依存性は生 じないはずだが、H//[110]では飽和磁場の 40T 付近まで磁気秩序が保たれるのに対して、 H//[100]では 10T 付近で磁気転移を示すことが報告された。この奇妙な異方性の起源として、 CoO<sub>6</sub> 八面体の主軸が傾いた結晶構造に起因して有効交替磁場が現れるという模型が提案され たが、微視的な実験・理論に基づく証拠が得られていなかった。

本研究では、有効交替磁場を取り入れた有効スピン模型の磁気構造と磁気励起スペクトルに ついて数値的解析を行い、電子スピン共鳴実験との詳細な比較を行った。[100]方向では共鳴モ ードが磁場とともに速やかに低エネルギーに降りてきてソフト化する(図1)のに対して[110] 方向では飽和磁場の 40T 付近までソフト化が起こらない(図 2) などの実験結果の特徴を数値 計算で良く再現した。有効交替磁場を考慮しただけでは転移磁場が 5T あたりにきて実験結果 の 10T と定量的に合わない問題があったが、鎖間相互作用を平均場で取り入れた計算により、 実験結果を定量的に説明した(図 3)。Jordan-Wigner 変換による解析も行い、[100]方向と[110] 方向の磁気励起をスピノン描像に基づいて統一的に理解できることを示した。

理論・実験両面からの微視的観点での研究で、有効交替磁場の存在を実証できた。数値計算 結果と電子スピン共鳴実験を比較して良い一致が見られており、理論と実験の緊密な連携によ り成し得た成果という意味で重要である。磁場方向に応じた磁性の制御について知見が得られ ており、新規磁性材料への応用可能性という観点でも意義が大きい。論文出版済 1)。



図 1: BaCo<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub>の横磁場 H//[100]中のスピン励起スペクトルの(a)x 成分、(b)y 成分、(c)z 成 分。磁場方向を x 方向としている。128 サイトの計算結果。



図 2: BaCo<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub>の横磁場 H//[110]中のスピン励起スペクトルの(a)x 成分、(b)y 成分、(c)z 成 分。磁場方向を x 方向としている。128 サイトの計算結果。



図 3: BaCo<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub>の横磁場 H//[100]中のスピン励起スペクトルの(a)x 成分、(b)y 成分、(c)z 成 分。磁場方向を x 方向としている。図 1 でさらに鎖間相互作用を取り入れた 128 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

- A. Okutani, H. Onishi, S. Kimura, T. Takeuchi, T. Kida, M. Mori, A. Miyake, M. Tokunaga, K. Kindo, and M. Hagiwara, "Spin Excitations of the S=1/2 One-dimensional Ising-like Antiferromagnet BaCo<sub>2</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub> in Transverse Magnetic Fields", J. Phys. Soc. Jpn. Vol.90, Issue 4, p.044704 (2021).
- 2) S. Ideta, S. Johnston, T. Yoshida, K. Tanaka, M. Mori, H. Anzai, A. Ino, M. Arita, H. Namatame, M. Taniguchi, S. Ishida, K. Takashima, K. M. Kojima, T. P. Devereaux, S. Uchida, and A. Fujimori, "Hybridization of Bogoliubov-quasiparticles between adjacent CuO<sub>2</sub> layers in the triple-layer cuprate Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>Ca<sub>2</sub>CuO<sub>10+6</sub> studied by ARPES", Phys. Rev. Lett. Vol.127, Issue 21, p.217004 (2021).
- 3) R. Ghadimi, T. Sugimoto, K. Tanaka, and T. Tohyama, "Topological superconductivity in quasicrystals", Phys. Rev. B Vol.104, Issue 14, p.144511 (2021).
- 4) S. Suzuki, R. Tamura, and T. Sugimoto, "Classical and Quantum Magnetic Ground States on an Icosahedral Cluster", Mater. Trans. Vol.62, Issue 3, p.367 (2021).
- 5) Y. Hashizume and T. Sugimoto, "A toy model approach to fractal nature: thermodynamics on a Cantor-lattice Ising model", Mater. Trans. Vol.62, Issue 3, p.374 (2021).
- 6) S. Suzuki, A. Ishikawa, T. Yamada, T. Sugimoto, A. Sakurai, and R. Tamura, "Magnetism of Tsai-type quasicrystal approximants", Mater. Trans. Vol.62, Issue 3, p.298 (2021).
- 7) R. Ghadimi, T. Sugimoto, and T. Tohyama, "Mean-field study of the Bose-Hubbard model in Penrose lattice", Phys. Rev. B Vol.102, Issue 22, p.224201 (2020).
- 8) M. Mori, "Nuclear Magnetic Relaxation Time near Compensation Temperature in Ferrimagnetic Insulator", J. Phys. Soc. Jpn. Vol.89, Issue 11, p.114705 (2020).
- 9) T. Sugimoto, K. Morita, and T. Tohyama, "Cluster-based Haldane states in spin-1/2 cluster chains", Phys. Rev. Research Vol.2, Issue 2, p.023420 (2020).
- 10) K. Sasaki, T. Sugimoto, T. Tohyama, and S. Sota, "Magnetic excitations in magnetization plateaus of a frustrated spin ladder", Phys. Rev. B Vol.101, Issue 14, p.144407 (2020).

#### (4) 今後の利用予定:

フラストレート強磁性鎖のスピンネマティック状態の磁気特性に関して、スピン四極子の独 立な5成分について系統的な解析を行う。また、輸送特性に関して、スピン流・エネルギー流 相関関数や波束ダイナミクスの解析を行う。多数のマグノンが束縛された「マグノンクラスタ ー」が流れることで、マグノン単体より効率的にスピン流を生成できる可能性を検証する。一 連の解析により、磁気特性と輸送特性の関連性を明らかにする。

#### 5.5 物質科学研究センター

Materials Sciences Research Center

5.5.1 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
Simulation Program for Microscopic Magnetization Processes in Magnetic
Materials with Dipole-dipole Interactions

横田 光史 研究推進室

#### (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対して有用性が高 い。

ここでは、局所磁化を表すスピン変数のベクトル性を取り入れたハイゼンベルグ模型に対す るランダウ=リフシッツ方程式を用いたシミュレーションを長距離相互作用である双極子相互 作用や RKKY 相互作用を取り入れて行うためのプログラム(rkky lle)を近距離相互作用であ る交換相互作用を含む系に拡張した。このプログラムは、非磁性体原子によるランダム希釈系 についても調べることができるという特徴がある。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 ンに対する幾何学的フラストレーションの影響や非磁性体原子によるランダムネスの影響など 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は、長距離相互作用の取り扱いに困難があるが、フーリエ変換した ランダウ=リフシッツ方程式を用いることで、長距離相互作用を取り入れることができる。そ れによって、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を行うことができる ようになってきている。厚みを持った3次元系におけるトポロジカルな磁気バブルであるスキ ルミオンストリングなどの磁区構造や幾何学的フラストレーションを持つ面心立方格子上の双 極子相互作用を含む反強磁性体における磁気構造などを調べている。また、ランダムネスは実 際の磁性体の磁気的性質に対しても重要な影響を及ぼす。長距離相互作用を含む系でのランダ ム希釈系についての数値計算は、膨大な計算時間がかかるが、そうした系についても調べ始めている。

図1は、面心立方格子上の双極子相互作用を含む反強磁性体のひとつの面における type-II と呼ばれる単位格子の2倍の周期を持つ磁気構造の例を示している。

図2は、2次元系における双極子相互作用を含む強磁性体における非磁性不純物の影響の例 を示している。非磁性不純物を含まない左図では、トポロジカルスピン構造である磁気スキル ミオンが見られる。非磁性不純物を1%含む中央の図では、type II と呼ばれる磁気バブルが見 られる。また、非磁性不純物を10%含む右図においては、明確なスピン構造ではないが、渦巻 き状の多数のスピン構造が見られる。このように、磁性不純物はスピン構造に多大な影響を及 ぼす可能性がある。



図 1 面心立方格子上の双極子相互作用を含む反強磁性体のひとつの面における type-II と 呼ばれる単位格子の2倍の周期を持つ磁気構造の例。色凡例は水平方向の磁化の成分の値を表 す。



図 2 2 次元系における双極子相互作用を含む強磁性体における磁気構造の例。色凡例は面 直方向の磁化の成分の値を表す。左図で非磁性不純物を含まない場合で、トポロジカルスピン 構造である磁気スキルミオンが見られる。非磁性不純物を 1%含む中央の図では、type II と呼 ばれる磁気バブルが見られる。非磁性不純物を 10%含む右図においては、渦巻き状の多数のス ピン構造が見られる。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) T. Yokota, "Ground states for a layered ferromagnet with dipole-dipole interactions", Phys. Rev. E 103, 012128\_1-012128\_6, 2021.

#### (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双極子相互作用やRKKY 相互作用するランダム希釈系、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 高速炉サイクル研究開発センターFast Reactor Cycle System Research and Development Center

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

内堀 昭寛、渡部 晃、柳沢 秀樹 システム安全解析評価グループ

#### (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、温度上昇による強度低下を引き起こし、二次的な破損 (破損伝播) に至る可能性が生じる。本研究では、この伝熱管破損時事象を評価する機構論的解析システム を構築し、SG の設計及び安全評価へ適用することを目的としている。

本解析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評価する多次元解 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。令和2年度は、非構造格子用 SERAPHIM の適用性確認の一環として、伝熱管群の 存在する体系での Na-水反応試験を解析し、構造格子用コードの結果との比較から非構造格 子化の効果を評価した。また、簡易解析コード LEAP-III の整備として、SERAPHIM による多 次元詳細解析を援用し、計算負荷の低い温度分布評価手法の構築を行った。



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:

伝熱管破損時の液体 Na 中水蒸気噴出を模擬した体系で解析を実施した。液体 Na プール中 に 43 本の模擬伝熱管を配置し、最下段伝熱管の中央に設けた模擬破損孔より、高圧の飽和水蒸 気を鉛直上方へ噴出させた。図 2 に構造格子及び非構造格子での解析結果を示す。構造格子で は伝熱管表面を階段形状で模擬するため、伝熱管に衝突した反応ジェットが大きく2方向に分 裂する挙動が生じた。構造格子では体積率の高/低領域が複雑に混在していることに対して、 非構造格子では体積率の高い領域が菅群の存在する領域に集中して形成されている。質量平均 温度については、構造格子では高温領域が2方向に分散していることに対し、非構造格子では 高温領域は上方へ分布している。以上の通り非構造格子化による形状模擬性向上の効果を確認 した。



図2 液体 Na 中水蒸気噴出現象に対する構造/非構造格子解析結果

簡易解析コード LEAP-III では、伝熱管破損評価のため Na 側温度を相関式で与えるが、高 温領域を過度に広く評価する場合がある。本件では、計算負荷を可能な限り抑制し、なおかつ 従来の相関式よりも現実的な温度分布を評価するため、Lagrange 粒子により液体 Na 中に噴出 した気相の挙動を解析する新たな手法を構築した。本手法では、工学的アプローチにより気相 粒子と伝熱管の相互作用や、気相粒子の化学反応による発熱を表すモデルを構築したが、モデ ルパラメータの決定(最適化)に SERAPHIM による多次元詳細解析を援用した。図3に、伝 熱管群体系での Na 中水蒸気噴出現象を新手法で解析した結果を示す。液体 Na 中に噴出した 気相粒子は伝熱管の間隙を通過しながら上昇している。また、噴出口の近傍では高温領域が発 生しており、従来の知見に整合する結果となっている。



図3 新手法による Na 中水蒸気噴出現象の試解析結果

令和 2 年度はさらに、SERAPHIM のさらなる高速化を目的に、大型計算機システムの GPGPU 演算部への適用化作業を行った。基本的なコーディングは終了し、試解析用の入力デ ータを用いて、従来の CPU 解析結果と同等の結果が得られることを確認した。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- A. Uchibori, H. Yanagisawa, T. Takata, J. Li and S. Jang, "Advancement of Elemental Analysis Model in LEAP-III Code for Tube Failure Propagation under Sodium-water Reaction Accident", Mechanical Engineering Journal, Vol. 7, No. 3, Paper No. 19-00548, 2020.
- 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",日本機械学会論文集,86巻,883号,No. 19-00353,2020.
- A. Uchibori, M. Aoyagi, T. Takata and H. Ohshima, "Development of Ex-vessel Phenomena Analysis Model for Multi-scenario Simulation System, SPECTRA", ICONE2020, Online, August 4-5, 2020.
- 4) 内堀昭寛,青柳光裕,曽根原正晃,高田孝,大島宏之,"ナトリウム冷却高速炉におけるマルチレベル・シナリオシミュレーション技術開発(16)炉内/炉外事象一貫評価システムの開発",日本原子力学会2020年秋の大会,2020年9月16日~18日,オンライン.
- 5) 内堀昭寛, 椎名祥己, 渡部晃, 高田孝, "非構造格子版ナトリウム-水反応現象解析コード SERAPHIM の管群体系に対する適用", 日本機械学会 2020 年度年次大会, 2020 年 9 月 13 日~16 日, オンライン.

#### (4) 今後の利用予定:

非構造格子用 SERAPHIM により、温度、圧力や伝熱管配置等条件の異なる解析を実施し、 妥当性確認実績の拡充を図る。粒子法による Na 側温度分布評価モデルについては、妥当性確 認、改良、実機条件への拡張を進める。SERAPHIM の GPGPU 演算部への適用について、令 和2年度構築プログラムの最適化チューニングを実施する。

#### 5.6.2 SPIRAL による外側除熱条件下における大型燃料集合体試験解析 Analysis of Large-scale Fuel Assembly Experiment with External Heat Removal Condition by SPIRAL

吉川 龍志、菊地 紀宏、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:

ナトリウム冷却高速炉の安全性強化の方策として、自然循環を活用した炉心崩壊熱の除去が 期待されている。自然循環時の炉心部では、浮力が駆動力となるとともに、隣接する集合体間 の温度差に従って径方向熱移行が生じ、燃料集合体内のみならず、炉心全体での水平断面温度 分布は平坦化する。また、強制循環時に比べて炉心通過流量が大幅に低下するため、燃料集合 体内の最高温度が上昇する可能性があり、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。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 を用いて、ナトリウム冷却高速炉の燃料集合体の外側から 除熱がある条件での予測特性の確認及び燃料集合体内部の熱流動挙動の把握を目的としてい る。

令和2年度は、「低流量条件下における実機規模の模擬燃料集合体ナトリウム試験(GR91 試験)」を対象に、集合体外側に設けられた六角アニュラス流路を流れる低温ナトリウムによって 集合体外側から除熱される条件の熱流動解析を実施し、SPIRALの妥当性を確認するとともに、 同条件下での集合体内の熱流動特性を明らかにすることとした。実機規模燃料集合体を対象と するため要素数が多く、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、本解析には、 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 及び HPE SGI8600)の利用が必須である。

#### (2) 利用内容·結果:

大規模解析として、ナトリウムを作動流体とした低流量条件下の模擬燃料集合体試験である GR91 試験を対象とした熱流動解析を実施した。

図1に解析モデルを示す。解析体系は、模擬燃料集合体領域およびその外側のインターラッパー領域(集合体間のナトリウム槽を模擬した六角アニュラス流路)とし、鉛直方向は、ヒーターによって模擬された燃料ピンの発熱部長を包含できる長さとしてワイヤースペーサー巻き ピッチ 13.5 巻き分の範囲とした。集合体の発熱条件を燃料ピン内側表面に熱流束として設定 し、六角アニュラス流路の外側を断熱条件とした。入口断面(図1の下方の境界断面、流れ方 向は下から上)での水力等価直径と断面平均流速に基づくレイノルズ数は、集合体部で 270、 六角アニュラス流路で 3,600 となる。入口境界には下流側の断面との間で周期境界条件を適用 した流速分布を、出口境界は上流側断面との間で周期境界条件を適用した圧力分布をそれぞれ 与えた。壁境界は Non-Slip 条件を課した上で低 Re 数効果を加味した壁関数を適用した。ま た、乱流モデルとして、流体の層流-乱流遷移特性を良好に再現できる Hybrid 型 k-e/ko-eo モデ ルを採用した<sup>III</sup>。SPIRAL による解析で使用した解析モデルの要素総数は約 3,200 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<sup>-4</sup> 秒で 1,200 秒までの準定常解 析を実施した。



図2 解析結果(鉛直断面)

図2にSPIRALにより得られた鉛直断面における鉛直方向冷却材流速と冷却材及び構造材温度の分布を示す。発熱部上部では、模擬燃料ピンの発熱により高温となる集合体中心側で、浮力による強い上昇流が形成される一方で、ラッパー管側では、ラッパー管を介して六角アニュラス流路から除熱されて局所的に低温となるため下降流が形成されている。集合体内の発熱条件と、ラッパー管外側からの除熱条件とのバランスにより、燃料集合体中に局所的な循環流が 生じ得ることが分かった。ラッパー管外面を断熱とした場合の、集合体発熱量と集合体部の冷却材質量流量から算出される集合体内の推定冷却材平均上昇温度は $\Delta T = 731$  ℃であるが、本解析体系における SPIRAL の解析結果は 260 ℃程度となり、集合体外側に設けられた六角アニュラス流路のナトリウムによる除熱が強く影響していることが分かった。

試験で計測された温度と解析結果について、集合体平均冷却材上昇温度を比較し、SPIRAL による解析結果は、試験結果を良好に再現していることを確認した。

 H. Ohshima, Y. Imai, "Numerical Simulation Method of Thermal-hydraulics in Wirewrapped 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.

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) N. Kikuchi, Y. Imai, R. Yoshikawa, N. Doda, M. Tanaka, "Investigation of Applicability of Subchannel Analysis Code ASFRE on Thermal Hydraulics Analysis in Fuel Assembly with Inner Duct Structure in Sodium Cooled Fast Reactor", Proceedings of the 28th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE28), Virtual, Online, August 4-6, 2021, ICONE28-65662.
- 2) R. Yoshikawa, Y. Imai, N. Kikuchi, M. Tanaka, A. Gerschenfeld, "Validation Study of Finite Element Thermal-hydraulics Analysis Code SPIRAL to a Large-scale Wirewrapped 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.

#### (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、燃料集合体内に局所的な循環 流が生じる場合の熱流動現象の把握を目的として、集合体内への流れが喪失し、かつ、集合体 外側のアニュラス流路に流れがある条件における GR91 試験を対象に、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。

#### 5.6.3 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の核特 性の解析

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

谷中 裕、丸山 修平、滝野 一夫、桑垣 一紀、菰田 宏、曽我 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、反射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、決定論的手法による解析と比較して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パー管、制御棒集合体内の吸収体ピン、反射体内のステン レス鋼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、集合体置換反応度、反応率分布)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。



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)

#### (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。

#### 5.6.4 高速炉の炉心変形評価のための FEM 解析モデルの開発 Development of an FEM Based Analysis Model for Core Deformation of a Fast Reactor

上羽 智之<sup>1)</sup>、堂田 哲広<sup>1)</sup>、根本 俊行<sup>2)</sup>、浜瀬 枝里菜<sup>1)</sup>、横山 賢治<sup>1)</sup>、田中 正暁<sup>1)</sup> 1)炉心・プラント解析評価グループ、2)高性能計算技術利用推進室

#### (1) 利用目的:

高い安全性及び経済性を有する高速炉プラントを実現に向けては、プラント全体で最適な設計ができることが不可欠となるため、炉物理、熱流動、構造力学分野の解析コードをプラント動特性解析コードと連成させる統合評価手法の開発整備を進めている。この内、構造力学分野の炉心変形解析では、有限要素法(FEM)を用いた変形モデルを開発している。このモデルはFEMによる炉心汎用非線形構造解析システムの"FINAS"をベースとしている。炉心解析では、炉心内に装荷された数百体の燃料集合体の変形や接触を解く必要があり、その計算負荷を低減することを目的に、FINASを原子力機構の大型計算機で利用するための整備(HPE SGI8600への移植作業)を進めている。この整備は継続中であるが、炉心変形解析モデルの開発は進捗しており、得られた成果について述べる。

#### (2) 利用内容·結果:

炉心変形解析では、炉心に装荷された集合体群の湾曲が重要であり、集合体の湾曲に及ぼす 影響として以下の変形モデルを構築した。

(1) 炉心支持板変形

炉心内での集合体は、図1に示すように、下部が炉 心支持板によって支えられている。炉心支持板が集 合体の自重によって変形すると、集合体の湾曲変位 に影響するようになる。また集合体の湾曲自体も支 持板の変形に影響する。このため、炉心変形解析モデ ルでは、支持板をシェル要素で構築し、集合体と支持 板の変形の相互作用を考慮できるようにした。



図1 集合体下部構造モデル

(2) 集合体断面

炉心内の集合体をビーム要素でモデル化した。集合体モデルを図2に示す。熱膨張などによって集合体群の湾曲が生じると、隣接する集合体同士がスペーサーパッドを介して接触する状態になる。この接触荷重によって、集合体は図3に示すようにパッド部の断面が変形するが、この変形により集合体間の間隔が変化するので、湾曲変位に影響すると考えられる。このようなパッド部での接触と集合体の断面変形を解析するため、図4に示すように接触要素とパッド要素を導入し、ビーム要素に接続した。



図2 集合体モデル

炉心変形解析モデルの解析機能確 認のため、図5に示す127本の集合 体群の炉心体系を構築し、熱膨張に よる変形解析を実施した。炉心最外 層の集合体には支持枠による変位拘 束を与えた。また、温度は炉心内で 分布を与え、中心側の温度が高く、 外側が低くなるようにした。

変形前と変形後の解析結果を図 6、7にそれぞれ示す。図6より、炉 心支持板と集合体、パッド要素など が適切にモデル化されていることを 確認した。







図4 パッド要素と接触要素



図5 炉心変形解析条件(127本集合体体系)

図 7 からは、集合体群の湾曲が発生している状況が解析されていることが分かる。炉心最外 層の集合体は支持枠によって外側への変形が拘束されていること、また集合体同士もスペーサ ーパッドで接触することにより、互いに重なり合うことはなく、設定した温度分布に対応して 全体的に外側に開く方向に湾曲することを確認した。この FINAS による炉心変形モデルを用 いて解析した成果は、計算工学講演会論文集で発表した。



図7 炉心変形解析結果(変形後)

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Norihiro Doda, Erina Hamase, Kenji Yokoyama and Masaaki Tanaka, "Development of Neutronics and Thermal-hydraulics Coupled Analysis Method on Platform for Design Optimization in Fast Reactor", 計算工学講演会論文集,Vol.25.(2020年6月).
- 2) Norihiro Doda, Tomoyuki Uwaba, Toshiyuki Nemoto, Kenji Yokoyama, and Masaaki Tanaka, "Development of Neutronics, Thermal-hydraulics, and Structure Mechanics Coupled Analysis Method on Integrated Numerical Analysis for Design Optimization Support in Fast Reactor",計算工学講演会論文集,Vol.26.(2021年5月).

#### (4) 今後の利用予定:

今後も FINAS を大型計算機で利用するための整備を継続する。この整備により FINAS の 高速化・並列化を図り、実機炉心体系での炉心変形、プラント動特性、炉物理、熱流動の連成 解析を実施する予定である。

#### 5.7 敦賀総合研究開発センター

Tsuruga Comprehensive Research and Development Center

# 5.7.1 実験データを用いたハルバッハ配列 EMAT の磁東の再現シミュレーション Reconstruction of the Three Components of the Magnetization of Halbach Magnet in EMAT from Experimental Measurements

ミハラケ オビデウ マリウス ナトリウム技術開発グループ

#### (1)利用目的:

Numerical simulations were conducted to optimize and enhance the In-Service Inspection (ISI) of actual or future nuclear reactor metallic components when using a combination of eddy current technique (ECT) with ultrasounds (UT) as in electromagnetic acoustic sensors (EMAT). In EMAT, a permanent magnet is used to generate an ultrasound wave in the metallic material when an eddy current coil is located under the magnet due to the Lorentz force generated in the test material. The amplitude and propagation properties of the UT wave is influenced by the higher amplitude of the magnetic flux distribution when the magnet is a Halbach magnet array, as shown in Figure 1. The Halbach magnet is composed of a periodic arrangement of horizontal (H) and vertical (V) block magnets (see Figure 1c) with magnetization oriented in either horizontal and vertical direction in each unit block. While the manufacture data describe only a medium value of the principal magnetization for all magnetic blocks, the values of magnetization slightly differ in each block, changing the uniformity and symmetry of the magnetic field when they are arranged in the configuration, as presented in measurements in Figure 1b.

The research, in 2020 was focused on the reconstruction of the magnetization of Halbach magnet in EMAT in order to be able to simulate accurately the magnetic field influence in EMAT sensors. While in 2019, the aim was to identify an algorithm to reconstruct only a single magnetization component, in each magnetic block, in 2020 the focus was to expand the reconstruction of the magnetization to all three magnetization components and identify the algorithm that converge to the same magnetization distribution values.



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

#### (2) 利用内容·結果:

In the numerical algorithm of magnetization reconstruction, it is used an iterative procedure that starts from an initial magnetization (manufacturer data or zero magnetization in each magnetic block or arbitrary non-zero magnetization) and computes the magnetic field (using a theoretical formula based on a constant magnetization inside a division block) that compares with external field measurements. To account for the constant magnetization model formula used in the algorithm, each H or V-block magnet is further decomposed in  $(n_x \cdot n_y \cdot n_z)$  division blocks (up to 100-100-100), resulting in a maximum 1 million cells. An example of the performance of the reconstructed magnetization (Mx,My,Mz) (using JAEA-ICEX supercomputer) is presented in Fig. 2, for block-division (8-8-10) only for one H-block magnet.



Fig. 2 a) Measurement of distribution of magnetic field outside of block unit magnet; b) Reconstruction of (Mx,My,Mz) magnetization distribution c) Simulation of magnetic field using reconstructed magnetization for a block

The reconstruction of distribution of one component of magnetization in Halbach magnet of EMAT sensor was implemented by developing a new code in 2019 that reconstructed the magnetization in the magnet by dividing in many division blocks and comparing the results with experimental measurements outside of block (Fig. 3). The code was optimized for parallel execution on JAEA-ICEX supercomputer using OpenMP-MPI technique. In 2020 the code was updated to take into account and reconstruct all three components of magnetization inside magnet. Therefore, the external magnetic field of Halbach magnet can be computed with high precision in future 2D/3D simulation of EMAT sensor.



Fig. 3 Results in 2019: reconstruction of only one component magnetization (My) distribution inside one magnet block using various block divisions

Several distributions of the 3-component magnetization (Mx,My,Mz) is shown next (Figure 4) in one block magnet with different division of block in x,y,z direction. By increasing the number of divisions, the magnetization profile converges to a more accurate description of Halbach magnet magnetization distribution enabling optimization of EMAT sensor in future.



Fig. 4 Reconstruction of (Mx,My,Mz) magnetization distribution inside one magnet block using various block divisions ( $n_x$ - $n_y$ - $n_z$ ): a) (10-10-4) ; b) (10-10-8); c) (20-20-4) d) (30-30-4)

#### (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) O. Mihalache, T. Yamaguchi, "Fast and Efficient Numerical Algorithm to Reconstruct the 3D Magnetization Distribution of EMAT block or Halbach Magnet", The 12th International Symposium on Electric and Magnetic Fields, July 6-8 2021, submitted to International Journal of Numerical Modelling. (under review).

#### (4) 今後の利用予定:

In 2021, the research will focus on optimization/enhancement of the algorithm for reconstruction of the magnetization, MPI parallel optimization and implementation in the EMAT simulation code to add Halbach magnetic field influence to the ultrasound propagation module.

#### 5.7.2 レーザー溶融・凝固解析コードの検証

#### Verification of the Simulation Code for Laser Processing

田口 俊弘 レーザー応用研究グループ

#### (1)利用目的:

レーザーを利用した加工技術や分析技術はその非接触性や光ファイバを用いた狭隘部へ輸送 の容易性、エネルギー密度の高さによって材料への影響を局所に限定可能といった種々の特徴 から、放射線により接近が困難な箇所が多く、加工時の放射性物質の飛散量を抑制したいとい うニーズのある原子力施設での利用に適している。現在、原子炉の廃止措置へのレーザー技術 の利用促進に資するため、レーザー溶断技術の高度化に向けた技術開発を行っている。その一 環として、レーザーの照射条件の最適化へ活用するためのツールとして、レーザー溶融・凝固 解析コード<sup>[1]</sup>の開発を行っている。

構造物のレーザー溶断は、一般的にミリメートル以下のスケールの領域に高密度のエネルギ ーが付与されることによる材料の溶融・蒸発等の相変化、レーザー照射により生じる狭隘なカ ーフにおける溶融物の熱流動、高流速のアシストガスと溶融物や構造物との相互作用等の複雑 かつ広範囲なスケールにわたる現象を扱う必要がある。そのため、解析を行う際には時間的、 空間的に刻み幅を小さくする必要がある一方、比較的大きな構造物を対象に数多くの物理過程 を計算するため計算コストが大きくなることから、大型計算機を利用してコードの検証を行っ ている。

#### (2) 利用内容·結果:

原子炉の解体においては溶断対象として厚肉の材料が想定される。厚肉材料の溶断時には深

さ方向の材料の溶融と溶融物の挙動が重 要であり、本報告ではそれらの挙動に影響 の大きいパラメータとしてレーザー出力 とアシストガスの流量に着目して計算を 行った。

計算は図 1 に示すような体系で実施した。レーザー及びアシストガスは同軸上で 上方から下方に(z軸の正から負の方向) に照射もしくは吹付けながら、20cm/min の速度で移動させ、照射対象がどの程度溶 融しているかを評価の指標とした。その他 の計算条件を表1に示す。

計算結果の例として、照射中の yz 断面 の材料形状及び温度分布を図2に示す。レ ーザーの照射によって材料が加熱溶融し、



液滴が流れている様子が得られており、界面の移動を伴う溶融物の挙動を模擬できていること が分かる。

評価の指標として、レーザースポットが走 査された面積と材料の高さの積、即ちレーザ ー光が直接照射されうる最大領域において固 体が除去された割合である溶断率(Rate of Cut Volume)を定義した。底面まで溶融し、 レーザー光軸上に固体が残らない場合には溶 断率は 1.0 に近接することになる。

レーザー出力及びアシストガス流量を変化 させたときの溶断率を図3に示す。材料の端 面からレーザー照射を開始しているため、レ ーザーの移動開始に伴って溶断率が上昇し始 め、一定程度移動すると各条件によって異な る値に飽和することが示されている。低出力 かつ低流量の条件では、溶断率が低くなって おり底面まで溶融しなかったことが表れてい る。一方、レーザー出力又はアシストガス流 量を増加させると溶断率が上昇している。こ れらはそれぞれ、出力の上昇により材料への 入熱が増加し溶融範囲が増加すること、アシ



図 2 レーザー溶断の計算例(12kW、 120L/min、2 秒経過時)



図3 出力及びアシストガス流量を変えたときの溶断率

ストガスによって溶融物が排出され固体材料へのレーザーの到達が容易になり深さ方向の溶融 が促進されたことが理由と考えられる。

アシストガスの流量の効果は、溶融物がレーザー照射箇所近辺に停滞するとレーザーエネル ギーが溶融物に吸収され、そのエネルギーが水平方向に(x、y軸方向)に拡散し、深さ方向の 溶融が阻害されるという報告<sup>[1]</sup>とも矛盾しない結果となっており定性的な挙動は再現できてい るものと考えられる。

[1] K. Sugihara et al., Numerical simulation of thermohydraulic characteristics of dross ejection process in laser steel cutting, Proc. of 20th Int. Conf. on Nucl. Eng. and the ASME 2012 Power Conference (ICONE-20 & POWER 2012).

計管結構	領域サイズ	24mm×12mm×39mm	
司	メッシュ数	$160 \times 80 \times 260$	
照射材料	材質、初期温度	$SS400$ , $20^{\circ}C$	
	サイズ	11mm×12mm×25mm	
	相転移	融解と固化のみ計算	
レーザー	出力	8, 12, 16 kW	
	スポット径、強度分布	直径 0.9mm、フラットトップ	
	移動速度	20cm/min	
アシスト ガス	流量	10, 30, 60, 120L/min	
	ノズル径	5mm	
	初期温度	30°C	
並列計算	並列化	MPI 並列	
	使用並列数	160 または 320	

表1 主要な計算緒元

#### (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:

計算に用いているシミュレーションコードは、流体モデルを使用しているためにアシストガ スの流速でタイムステップの上限が決まる。このため、流量が120L/minのときには、320並 列で計算しても10日(240時間)程度の計算時間が必要であった。今後は、定量的な評価の 精度を向上させるため実験結果と比較・検討してコードの改良を行うとともに、必要な精度を 確保しつつ計算時間を短縮するための検討を継続していく。

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

#### 5.8.1 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<sup>1</sup>、町田 昌彦<sup>2</sup>、中村 博樹<sup>2</sup> <sup>1</sup>燃料サイクル設計部、<sup>2</sup>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、この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 物燃料の基礎物性」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「酸化物燃料の基礎物性」を主たる研究対象とする。

タスク「酸化物燃料の基礎物性」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、酸化物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の導出を目指す。得ら れる妥当な計算式は、酸化物燃料の設計、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 古典分子動力学と申請者等が専門とする第一原理計算を組み合わせて、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 温における酸化物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、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、酸化物燃料と同じく、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、酸化物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物燃料で普遍的に発生し、高温での熱物性における劇 的な現象であることから、燃料の安全性評価に大きなインパクトを与え、その現象の詳細な機
構解明が待たれている。

本研究では、フッ化カルシウムの Bredig 転移に焦点を絞り、その現象発生機構をミクロな 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。 ミクロな機構の解析には機械学習分子動力学を用いる。この手法では第一原理計算で大規模な 学習データを生成し、それを基に機械学習で原子間ポテンシャルを作成し、これを用いて分子 動力学計算で物性評価する。学習データの生成及び、分子動力学シミュレーションでは大規模 な計算リソースを必要とするため、大型計算機を用いた。

#### (2)利用内容·結果:

まず始めに、機械学習分子動力学のためのポテンシャル作成に必要な学習データを蓄積する ために第一原理分子動力学を行った。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、学習データを収 集した。この際、システムサイズとしてはユニットセルに対して 3×3×3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、およそ 1~4ps のシミュレーションを行なっ た。さらに、同じ大きさのスーパーセルにゆがみを加えて、等温での第一原理分子動力学も行 い、学習データを補った。この計算においては、第一原理計算に用いる交換・相関相互作用の 近似として、広く使われている PBEsol と最近開発された SCAN の 2 種類を用いて比較した。

これらの学習データを基にして Behler-Parrinello のニューラルネットワーク・ポテンシャル を構築した。この手法では、各原子のエネルギーを、その周辺の原子配置の関数として記述す る。原子配置から対称関数とよばれるものを構築し、これらを入力データとし、エネルギーを 出力とするニューラルネットワークを作成し、学習させた。その際の原子当たりのエネルギー に対する平均平方根誤差は学習データ、テストデータともに 5×10<sup>-4</sup> eV 以下になり、十分な精 度のポテンシャル作成に成功した。

この機械学習ポテンシャルを用いて、等温等圧の分子動力学計算を様々な温度で行い、エン タルピーを求め、さらにそれを数値微分することで比熱を得た。CaF2は1430Kで Bredig 転移 と呼ばれる急激な変化がみられる。これに対して、学習データに PBEsol を用いた場合、転移 温度を1250K と過少評価してしまった。一方、SCAN を用いた場合、転移温度は1400K とな り、測定値を精度よく再現する結果となった(図1)。SCAN の機械学習ポテンシャルで融点を 評価したところ、1660K となり、測定値である1690K とよく一致した。結果として、交換・相 関相互作用としては PBEsol より SCAN の方が高温物性を評価するのに適しているのが分かっ た。

また、Bredig 転移のメカニズムを理解するために、フッ素の空孔濃度とその温度微分を評価 した(図2)。その結果、転移温度と空孔濃度の微分のピーク位置がよく一致しており、比熱の 急激な上昇は空孔の増大に伴うエントロピーの上昇に起因していることが確認できた。



図 1:機械学習分子動力学(MLMD)に CaF<sub>2</sub>の比熱。EXP1,2 は実験値。縦線は Bredig 転移温度の文献値 1430K である。

図 2:フッ素の空孔濃度(n)とその温 度微分 (dn/dT)。縦線は Bredig 転移 温度の文献値 1430K である。

これまでは、信頼性の高い第一原理計算を用いた大規模分子動力学は困難であったが、機械 学習分子動力学を用いることで、第一原理分子動力学と同等の信頼性のあるシミュレーション を低計算コストで実行可能となった。この手法の有効性が CaF<sub>2</sub> に対して示されたことで、今 後、燃料物質への応用が期待できる。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

国際会議 査読付き会議録

1) H. Nakamura, M. Machida, Machine-Learning Molecular Dynamics Study of Thermal Properties of CaF<sub>2</sub>, Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA & MC 2020), 2020, pp.104-108.

国内会議

2) 中村博樹,町田昌彦,加藤正人,「模擬燃料物質 CaF2の機械学習分子動力学」,日本原子力 学会 2020 年秋の大会, 2020 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、MOX 燃料を模擬した CaF2と SrF2の固溶体に対する解析を行い、MOX 特有の物性評価を試みる予定である。

# 5.9 福島研究開発部門 Sector of Fukushima Research and Development

# 5.9.1 空間線量率を用いた実効線量推定手法の高精度化

Studies on the Effective Dose for Public Calculated by Air Dose Rate

遠藤 佑哉 安全管理第1課

# (1)利用目的:

2011年3月の東京電力福島第一原子力発電所(以下、「1F」)事故により放射性物質が環境中 へ放出され、福島県中通り、浜通りを中心に空間線量率が上昇した。特に今回の事故では、放 射性セシウムは中長期間に亘り空間線量率を上昇させる要因の1つであり、当該地域における 公衆の外部被ばくによる実効線量を評価することは、放射線防護上極めて重要である。

2021 年現在、1F 事故後に追加となる外部被ばく線量は、周辺線量当量率が実効線量と同等 と考え計算されており、実際よりも高めに評価されている。したがって、今後の原子力緊急時 の放射線防護においては、これらの諸量の関係について明らかにし、より正確に実効線量を評 価することが重要である。

また、<sup>134</sup>Cs と <sup>137</sup>Cs の放射能比は、2011 年 3 月の放出時点でおよそ 1:1 であったが、それ らの物理的半減期は大きく異なることから、放射能比が時間とともに変化する。さらに、地表 面に沈着した放射性セシウムは土壌下層へと徐々に移行していくことから、時間経過に伴い実 効線量換算係数が変化することが予想される。

本研究では、未かく乱土壌に分布する<sup>134</sup>Cs 及び<sup>137</sup>Csの空気カーマ率、周辺線量当量率及び 実効線量それぞれの関係と、時間経過が空気カーマ率及び周辺線量当量率から実効線量への換 算係数に与える影響を放射線輸送計算コード PHITS によるシミュレーション及び実環境にお ける測定の2つの手法により評価した。シミュレーションに当たっては、膨大な計算時間を要 することから、大型計算機 ICE X を利用した。

#### (2)利用内容·結果:

1Fから南西に約5kmの距離にある空間線量率が高い未除染の農地を評価地点とし、空気カ ーマ率、周辺線量当量率及び実効線量(個人線量当量)の関係をシミュレーション及び実測に より評価した。シミュレーションの概要を図1に、両手法による計算(測定)方法を表1に示 す。本シミュレーションでは、土壌コアサンプリングによって得られた評価地点の土壌データ を用いて福島県浜通りの土壌を再現した。線源は、<sup>134</sup>Cs及び<sup>137</sup>Csとし、それぞれ土壌中の各 層に一様分布させ、高さ1mにおけるγ線のフルエンスデータを測定した。得られたデータに ICRP Publ.74 及び 116 の線量換算係数を乗じることで、土壤層毎に実効線量換算係数を算出 し、評価地点の深度分布に対応する線量を計算した。

両手法による評価結果を図2に示す。線源の分布範囲は、評価地点の規模を考慮し、土壌の 中央から半径5mに設定した。評価の結果、どちらも「周辺線量当量率>空気カーマ率>実効 線量(個人線量当量)」の関係が得られ、周辺線量当量率及び空気カーマ率による実効線量の評 価は、実際より高く見積もられることが分かった。なお、実測値の方がシミュレーション値よ りも1割ほど大きいが、これは測定地点から半径5mの範囲より遠方からのy線による影響で ある。



図1 シミュレーションの概要

表1 シミ	ュレーショ	ン及び実測に	よる計算	(測定)	方法
-------	-------	--------	------	------	----

	シミュレーション	実測	
空気も二マ変	ICRP Publ.74 の線量換算係数を	NaI(Tl)サーベイメータ(TCS-1172)	
至刘刀一文率	用いてフルエンスデータから算出	により5分間隔で1時間測定	
周辺線量当量率	ICRP Publ.74 の線量換算係数を	NaI(Tl)サーベイメータ(TCS-172B)	
	用いてフルエンスデータから算出	により5分間隔で1時間測定	
宝动绰号	ICPD Dubl 116 の始星協賞 低粉な	電子式個人線量計(PDM-122-SZ)計4	
(個人線量当量)	HUNTフルエンスデータかく 管山	台をアクリルブロックに設置し、4日	
		間測定	

時間経過が実効線量換算係数へ与える影響に ついて、<sup>134</sup>Cs と <sup>137</sup>Cs の放射能比及び土壌中放射 能濃度深度分布を変化させることにより評価し た結果、周辺線量当量率から実効線量への換算係 数は、事故直後と事故後 9 年以降を比較すると、 回転照射条件(ROT)及び等方照射条件(ISO) 0.5 における実効線量換算係数ともに約 0.02 0.00 Sv/Sv(H\*(10))小さくなり、時間が経過するにつれ 実効線量が実際より高く見積もられる傾向を示した。 換算係数に影響を与える主な要因は、土壌による y 線 の遮蔽であり、放射性セシウムが土壌の深い層に多く 分布するほど地上で計測される y 線のエネルギーが低 下するためである。



率及び美効緑重の関係 実効線量の実測値は、個人線量当量 の値である

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) Y. Endo, Y. Uezu, T. Takase, K. Yamaguchi, H. Tsukada "Studies on the effective dose for public calculated by air dose rate", ICRP International Conference on Recovery after Nuclear Accidents: Radiological Protection Lessons from Fukushima and Beyond, online, December 2020.

(4) 今後の利用予定:

なし

# 5.10 廃炉環境国際共同研究センター Collaborative Laboratories for Advanced Decommissioning Science

# 5.10.1 福島廃炉推進のためのレーザー溶融シミュレーションの安定化に向けた手法の 開発(1)

Development of Stabilizing Laser Melting Simulation for Decommissioning Promotion at Fukushima Daiichi Nuclear Power Station (1)

赤岡 克昭<sup>1</sup>、柴田 卓弥<sup>1</sup>、山下 晋<sup>2</sup>、北村 竜明<sup>3</sup>、坂本 健作<sup>3</sup>、高瀬 和之<sup>4</sup>
1 遠隔分析技術開発グループ

2 熱流動技術開発グループ

3 システム計算科学センター 高性能計算技術利用推進室

4 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(1F)の廃炉推進のための技術開発整備の一環として、レーザー加 工技術を利用した燃料デブリ取出技術の利用が有望視されている。この技術を確立するた 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の蒸発や物体の溶 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 を対象物に合わせて最適に制御することが必要である。そこで、レーザーによる水の蒸発 や物体の溶融などの現象をシミュレーションによって明らかにするための解析手法の開発 を行っている。これまでに、レーザー入熱を想定した加熱領域に対し、ノズル先端から水 を噴射した場合の解析を行い、レーザー入熱量、水噴流速度、計算格子サイズなどがシミ ュレーション結果に及ぼす影響を評価し、シミュレーションに用いた相変化モデルの妥当 性を確認した。本研究開発は、相変化モデルを用いた解析が安定して実施できるように、 複数の圧力-流速連成手法(SIMPLE、SIMPLEC、SIMPLER、PISO など)から最適な手 法を選出するための評価解析を実施した。

# (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。

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や加熱面上液相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および検討した。モデルの作成には、ANSYS DesignModeler(形状作成/修正)とANSYS Meshing(メッシュ生成)を使用した。これらは、統合型アプリケーションANSYS Workbenchの環境での使用が可能である。また、解析にはANSYS Fluent(汎用熱流体解析ソフト)を使用した。

図1に溶融モデル形状(噴流設定)、図2に沸騰モデル形状の解析領域メッシュを示す。ノズ ル径は0.8mm、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 空気の界面はインテリア境界となっている。



凝固・融解モデルで圧力・流速連成手法に SIMPLE と Coupled の二つを使用し、加熱される ことにより鋼材が溶融し約 2 mmの深さの縦穴が形成されるまでの溶融現象や溶融部分から固相 部分への温度勾配の変化等が確認でき、金属の溶融現象の予測が可能なことが明らかになった (図 3、4)。



金属材料溶融挙動シミュレーションで溶融した鋼材の領域にノズルから噴出した水を衝突さ せ、固体表面の液膜や溶融した鋼材の飛散現象を検討したが、噴流が液膜への衝突前後におい て、乱流モデルでは ε (乱流散逸率)が、層流モデルでは圧力が発散してしまい現象を確認する ことができなかった。これは、噴流による急激な変化が原因と考えられ、安定した解析を実施 するにはメッシュサイズの調整が有効と考えられるが、大きな計算コストが掛かってしまい望 ましくない。今後、更なる詳細な解析モデルの形状や条件の調整が必要である。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

#### (4) 今後の利用予定:

汎用熱流体解析ソフト Fluent を用いた溶融モデル金属材料溶融挙動シミュレーションでは 計算が発散してしまったため、多相多成分詳細熱流動解析コード JUPITER を用いて、引き続 き検討を行っていく。 5.10.2 福島廃炉推進のためのレーザー溶融シミュレーションの安定化に向けた手法の 開発(2)

> Development of Stabilizing Laser Melting Simulation for Decommissioning Promotion at Fukushima Daiichi Nuclear Power Station (2)

柴田 卓弥<sup>1</sup>、赤岡 克昭<sup>1</sup>、山下 晋<sup>2</sup>、北村 竜明<sup>3</sup>、坂本 健作<sup>3</sup>、高瀬 和之<sup>4</sup> 1 遠隔分析技術開発グループ

2 熱流動技術開発グループ

3 システム計算科学センター 高性能計算技術利用推進室

4 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(1F)の廃炉推進のための技術開発整備の一環として、レーザー加 工技術を利用した燃料デブリ取出技術の利用が有望視されている。この技術を確立するた 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の蒸発や物体の溶 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 を対象物に合わせて最適に制御することが必要である。そこで、レーザーによる水の蒸発 や物体の溶融などの現象をシミュレーションによって明らかにするための解析手法の開発 を行う。これまでに、レーザー入熱を想定した加熱領域に対し、ノズル先端から水を噴射 した場合の解析を行い、レーザー入熱量、噴流水速度、計算格子サイズなどのパラメータ がシミュレーション結果に及ぼす影響を評価した。具体的には、レーザーによって材料が 溶融する過程及び溶融池に水噴流が衝突する過程に対して各パラメータによる予測結果の 違いを明らかにした。また、本計算体系では乱流の影響が強く、解析条件によっては計算 が発散することを確認した。本研究開発は、これら得られた知見を基に新たに解析条件を 設定し、多相多成分詳細熱流動解析コード JUPITER を用いて評価改正を実施した。

# (2)利用内容·結果:

レーザーによる水の蒸発や物体の溶融等の現象をシミュレーションによって明らかにす る。解析手法の開発を行うため、多相多成分詳細熱流動解析コード JUPITER を使用し、 レーザー照射を模擬した金属溶融と水噴流条件を同時に計算するモデル系を作成し解析を 実施した。また、レーザー加熱シミュレーションで得られた解析結果から可視化画像の作 成を ParaView(オープンソース可視化フリーソフトウェア)で行った。

レーザー照射を模擬した加熱による金属の溶融と水噴流による溶融スラブの移行現象をシミ ュレーションにより評価、検討したモデル形状を図1に示す。このモデルは、ステンレス鋼表 面のレーザー加熱領域に対して15°の角度で、水噴出口より水噴流が衝突する。奥行は14mm、 レーザーによる加熱領域は奥行き中央部7mmの箇所にφ4mmとなっている。図2にレーザー 照射を模擬したシミュレーションの評価、検討をするための解析領域メッシュを示す。



図1 溶融モデル形状



図2 解析領域メッシュ

図 3 に水噴流が無い状態でのシミュレーション結果(温度コンター)を示す。レーザー照射 によりステンレス鋼が溶融し縦穴が形成されるまでの溶融現象や溶融領域から固相領域への温 度勾配の変化が確認でき、金属の溶融現象の予測が可能なことが明らかになった。



図4に水噴流が有る状態でのシミュレーション結果を示す。溶融したステンレス鋼の溶融池 に水噴流を衝突させ、形成された溶融地から溶融スラグが飛散し凝固するまでの現状が確認で き、溶融によって生じた溶融スラグの移行現象の予測が可能な事が明らかになった。しかしな がら、本作業で作成したモデル系では、水の噴出速度が速くなると噴流が散乱してしまい溶融 池に噴流を衝突させることができなかった。





図 4 80 msec 時の溶融スラグ移行現象結果(左図: X-Z 方向、右図: Y-Z 方向)

溶融によって生じた溶融スラグの移行現象に対する評価データを取得した。これにより、レ ーザーを利用した燃料デブリ加工・切断時の複雑な物理現象の解明が期待できることや原子炉 熱設計コードの予測精度向上が期待できる見通しを得た。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

# (4) 今後の利用予定:

今後も多相多成分詳細熱流動解析コード JUPITER を用いて、引き続き検討を行っていく。

# 5.10.3 水域動態モデル 3D-Sea-SPEC のダム湖·河口域への適用

# Application of the Numerical Model of Radionuclide Migration in Water to a Dam Lake and Coastal Areas in Fukushima

操上 広志、吉田 航、山口 崇博 環境動態研究グループ

# (1) 利用目的:

原子力機構では、福島第一原子力発電所の事故により環境中に放出された放射性物質の環境 中における動態を調査、解析することにより、被ばく線量への影響が大きい移動経路を明らか にし、移動抑制等の対策を提案することを目指した研究開発を行っている。

これまでの調査・解析により、増水時の懸濁態放射性セシウムのダム湖内での挙動について は理解が進んできた。しかし、これまで経験してきた以上の大規模な降雨が発生した場合のダ ム下流への流出率や、ダム湖の放水管理が流出率に与える影響について、実在するダムを対象 に予測することは、下流への汚染の拡散など将来リスクへの備えの観点でなお重要である。ま た、溶存態放射性セシウムについては、堆積物からの脱離が懸念され、下流での溶存態放射性 セシウムの予測のために脱離の影響を推定しておく必要がある。河川から海へ流出した放射性 セシウムの挙動についても、これまで簡易的な条件での解析を実施してきたが現実的な条件で の解析が求められる。

そのため、令和2年度においては、ダム湖・河口域における放射性セシウム動態の定量的評価を目的とし、これまで原子力機構が開発してきた水域動態モデル3D-Sea-SPECを、大柿ダム湖及び請戸川河口域へ適用した。

#### (2)利用内容•結果:

上記の目的に資するため、降雨、ダム湖水位の条件 が、土壌及び放射性セシウムの下流への流出率に与え る影響や、降雨時の河口域での放射性セシウムの挙動 について、3D-Sea-SPECを用いた解析を実施し、結果 を分析した。

図1は大柿ダム湖のシミュレーション結果の一例で ある。降雨が発生した際に、ダム湖の上流から流入した 懸濁態放射性セシウムがダム湖内を移行しているよう すを示している。図2には、短期・長期の2パターン の大規模な降雨を想定した場合の、放射性セシウムの 下流への流出率を算出した結果を、過去の増水時の事 例と比較したものである。降雨の規模や継続性によって放 射性セシウムの下流への流出率が変化することを示してい る。さらに、ダム湖の初期水位の違いによるシミュレーショ ンにより、初期水位が高いほど流出率が低くなることがわ





かった。これは、ダム湖による放射性セシウムの緩 衝効果によるものである。

上記は降雨時における懸濁態放射性セシウムの 挙動についてであるが、一方で、灌漑水や河川生態 系への影響の観点では、平常時の溶存態放射性セシ ウムの挙動を理解することも重要である。そのた め、湖底堆積物からの放射性セシウムの脱離の影響 を評価するためのシミュレーションを実施した。そ の結果、堆積物と湖水間の分配係数の変化によって



実測の傾向である脱離による溶存態放射性セシウム濃度上昇を再現することが可能であること がわかった。

河川から海へ流出した放射性セシウムの挙動評価のためのシミュレーションについては、実 測している請戸川河口域へ適用した。本シミュレーションでは、実測の沈降フラックスや懸濁 態放射性セシウム濃度の再現性が低かった。海底堆積物やその放射性セシウム濃度の初期分布 や河川から海へ流出した懸濁態放射性セシウムの脱離などの設定を見直した解析を行う必要が ある。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

#### (4) 今後の利用予定:

令和3年度においても、河口域における放射性セシウムなどの挙動についての解析を継続し て実施する予定である。

# 5.10.4 東京電力福島第一原子力発電所の全炉心3次元核種インベントリ計算

Whole Core Three-dimensional Nuclide Inventory Calculation of the 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:

原子力基礎工学研究センターが公開した東京電力福島第一原子力発電所(1F)のインベント リデータベース(JAEA-Data/Code 2012-018)は1F廃炉に向けた研究開発で広く利用されて いる。しかし、1F事故後の余裕がない時期に作成されたデータであることから、1)可燃性 Gd やU燃料を部分的に含む MOX 燃料集合体の組成などが考慮されていない、2)燃料集合体の軸 方向の燃焼度分布やボイド率分布が考慮されていない、3)構造物中に含まれる C-14 や Co-60 の生成源となる微量不純物の放射化が考慮されていない、4)最新版 JENDL-4.0 でなく JENDL-3.3 の核データが利用されている、など見直すべき点が多々ある。本研究ではそれらを克服した 1~3 号機の 3 次元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ている。デ ータベース作成に必要な大量の計算およびその結果を編集するプログラムの開発に大型計算機 を利用する。

#### (2)利用内容·結果:

データベース作成にあたり、3 つのインベントリ計算(I ~ Ⅲ)を実施する必要がある。(I) 1~3 号機の炉心部(燃料/被覆管など)を対象とした全炉心燃焼+放射化計算、(Ⅱ) 1~3 号機の 上部下部構造材(タイプレートなど)を対象とした全炉心上部下部放射化計算、(Ⅲ) 1~3 号機 の全制御棒を対象とした全炉心制御棒放射化計算。

令和2年度は、(I)全炉心燃焼+放射化計算および(Ⅱ)全炉心上部下部放射化計算を実施 し、(I)の2号機の結果について日本原子力学会2021年春の年会で口頭発表をおこなった。 令和3年度は、これら(I)および(Ⅱ)のデータに、(Ⅲ)全炉心制御棒放射化計算の結果を 追加し、最確な1F核種インベントリデータベースとして結果をまとめる。データベースを多 くの1F廃炉研究(デブリ性状把握、事故進展解析の高度化、水素発生量評価、処理処分技術評 価、被ばく環境影響評価など)に活用できるよう公開に向けて準備・整備を進めていく。

## (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 奥村啓介,坂本雅洋,多田健一,西原健司,溝上伸也,溝上暢人,三木陽介,金子誠司, "東京電力福島第一原子力発電所の全炉心3次元核種インベントリ計算(1)背景と目的", 日本原子力学会2021年春の年会3B01,東京(オンライン),2021.
- 2) 坂本雅洋,奥村啓介,多田健一,西原健司,溝上伸也,溝上暢人,三木陽介,金子誠司, "東京電力福島第一原子力発電所の全炉心3次元核種インベントリ計算(2)計算手法2号 機に対する結果",日本原子力学会2021年春の年会3B02,東京(オンライン),2021.

# (4) 今後の利用予定:

まだ実施していない(Ⅲ)を中心に、今後も大型計算機を利用し、1F 核種インベントリデータ ベースの開発を進める。

# 5.10.5 含水廃棄物等の水分蒸発挙動コードの開発

# Development of Drying Simulation Code for Waste Storage

寺田 敦彦 保管機器健全性評価グループ

#### (1)利用目的:

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

本研究では、崩壊熱等の発熱による粒子間の自由水の蒸発や容器壁面からの抜熱等による過 飽和水分の凝縮等の相変化、及び毛管圧力による水分移動モデルを改良した2次元モデルにて 水分挙動の再現性向上を行い、あわせて、長期的な計算に向けた3次元モデルへの対応を図っ 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を前提に開発を進め 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用いた内部加熱試験を通して塩分を含む自由水が吸着塔内 の高温領域に移動し塩分濃度分布が形成されることが示唆されている。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て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ている。

上述した内部加熱試験の体系を基にした解析例を紹介する。図1に解析モデルの概要を示す。 解析モデルは2次元である。Leverett 関数は、同種のゼオライトを用いた試験管規模の水分吸 い上げ速度計測試験結果から作成した。ゼオライトを充填した円筒容器(容積約 1.6m<sup>3</sup>)の底 部に高さ46cm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1kW)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

スとした。また、2次元モデルの制限上、水分や水蒸気ガスは周囲ヒータ中を透過できるものと 仮定した。ゼオライト層上部空間は2カ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51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。ヒータ加熱によって、容 器中心部の温度が上昇し、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3に示す非対称な発熱分布を有する3次元モデルに作成した水分移動モデルを 反映して、試計算を進めている。





図 3 3 次元モデルでの水分 の様相

# 図1 解析モデルの概要

(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:

本年度のプログラム開発により、セシウム吸着塔やデブリ保管容器内での崩壊熱による水分 乾燥過程へのモデル特性の影響の検証や長期的な水分蒸発挙動評価に向けた見通しが得られ た。今後、コード並列化・高速化による計算コストの低減を進め、実機の様々な塔内環境を想 定したシミュレーションを行える環境を整備していきたいと考えている。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。

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

# 5.11.1 材料における軽元素が示す核量子効果等の計算科学研究 Computational Studies for Nuclear Quantum and Related Effects of Light Elements inside Materials

町田 昌彦、数納 広哉、小林 恵太、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、原子力研究開発分野と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。

原子力研究開発分野と関連する産業界では、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。尚、物質群には、生体分子(有機分子)も含まれる。本課題にて、その ような軽元素を含む物質に着目する理由は、質量数が軽い元素が物質内に含まれる際、原子核 の量子効果やその豊かな反応特性等が物性に重要な影響を及ぼすため、量子効果及び反応をも 考慮する最新の計算科学技術を必要とするからである。本課題では、上記の軽元素を含む物質 群に焦点を当て、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、特異な物性や機能(生体分子の場合、生体活性)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、広く計算科学の発展にも寄与することを目指す。以下に具体的な研究対象を記 す。

i) Li を含む固体材料(イオン伝導体)

主に、Li<sub>2</sub>O等を中心とし、イオン伝導性に着目する。これまで、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ており、シミュレーションを実施して定量的成果の創出を目指す。 ii) 超伝導材料(水素やその同位体を含む固体)

2015年に最も高い超伝導転移温度(約205K)を示したH<sub>2</sub>Sに着目し研究を進める。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ている。また、高圧下において、構造上の転移を示すが、その転移が量子相転移となることが判明しており、それと超伝導との関係性について、シミュレーションを実施して定量的成果の創出を目指す。

iii)生体分子(有機分子)

これまで、生体分子とセシウム吸着についてシミュレーション研究を実施し成果を創出して きたが、生体分子においても、水素は極めて重要な役割を果たす。本課題では、分子内水素移 動等が、生体分子の機能発揮に置いてどんな役割を果たすかをシミュレーションにより定量評 価し、生体分の新機能に関する知見の取得を目指す。

# (2) 利用内容·結果:

 Hiroya Suno, Masahiko Machida, Terumi Dohi, Ohmura, "Quantum chemical calculation studies toward microscopic understanding of Lichen's retention mechanism of Cs radioisotopes and other alkali metals", Scientific Reports (Nature Research), 11, No.8228(2021).

菌類と藻類の共生体である地衣類は、重金属を含む様々な金属の保持・蓄積機能を有してお り、原発事故等で放出された放射性セシウムのバイオモニターとして用いられているが、その 金属保持・蓄積機構は未だ十分に解明されていない。本研究では、地衣類の放射性セシウムや 他のアルカリ金属の保持・蓄積機能を解明するため、地衣類成分の錯形成能力を計算化学に基 づくシミュレーションにより評価した。計算対象は、福島県で生息するウメノキゴケの主要代 謝物であるシュウ酸、アトラノリン、ウスニン酸、レカノール酸、プロトセトラル酸とした(図 1 参照)。計算を行った結果、アルカリ金属間比較では Li+>Na+>K+>Rb+>Cs+の順で錯形成能力 が高いことがわかった。また、代謝物間比較では、髄層に分布するプロトセトラル酸の錯形成

能力が高いことがわかっ た。また、同じく髄層に分 布するレカノール酸も中 性溶液下では錯形成能力 がやや高くなる一方、上 皮層に分布するウスニン 酸やアトラノリンは、ア ルカリ性水溶液中で錯体 形成能力が高くなること がわかった。本結果から、 地衣類は金属ストレスが



図1:地衣類の内部構造と代謝物成分の分布

増加した際、上皮層がアルカリ金属元素を効率よく取り込んだ後、髄層に至り中性となった pH 域でも、アルカリ金属元素を効率的に取り込める機構を備えていることが分かった。

② Hiroya Suno, Masahiko Machida, "An Atomistic Origin of Selective Cs Accumulation in Mushrooms: DFT analysis for alkali-metal cation complexation selectivity of scissors-like pigments" ACS Food Sci. Technol. 2021, 1, 8, 1381, DOI:10.1021/acsfoodscitech.0c00158. キノコ(菌類)は原発事故等で放出された放射性セシウムを蓄積・保持することが知られて いる。この放射性セシウムに対する特性は、傘部分に分布するキノコの色素成分分子のセシウ ムとの選択的錯形成によるものであることが分かってきている。本研究では、キノコ色素のア ルカリ金属錯形成選択性を計算化学に基づくシミュレーションにより評価した。代表的なキノ コ色素であるノルバジオン A とこれに類似した成分に着目した(図2参照)。その結果、セシ ウム選択性は、ノルバジオン A やそれと類似した、プルビン酸基が2つ対称的に配置している 分子構造を持つ分子でのみ起こり得ることがわかった。



図2:キノコの傘部分に分布する色素分子:ノルバジオンA

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

査読付き論文

- 1) <u>Hiroya Suno, Masahiko Machida</u>, Terumi Dohi, Yoshito Ohmura, "Quantum chemical calculation studies toward microscopic understanding of Lichen's retention mechanism of Cs radioisotopes and other alkali metals in lichens", Reports (Nature Research),11, No.8228(2021).
- 2) <u>Hiroya Suno</u>, <u>Masahiko Machida</u>, "An Atomistic Origin of Selective Cs Accumulation in Mushrooms: DFT analysis for alkali-metal cation complexation selectivity of scissors-like pigments" ACS Food Sci. Technol., 1, 8, 1381-1391(2021).

解説記事

- 3) <u>数納広哉</u>, <u>町田昌彦</u>, 「菌類(キノコ)の放射性セシウム濃縮機構解明に向けた分子シミュレ ーション 技術の研究開発―量子化学計算によるキノコ色素分子の錯体形成におけるセシ ウム選択性の定量的評価―」, RIST ニュース, No.66, 3 (2020). 出版済
- 4) <u>数納広哉</u>,奥村雅彦,<u>町田昌彦</u>,「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, pp.34-35, 741, 34 (2019). 出版済

# (4) 今後の利用予定:

令和3年度も、同様の目的と内容にて大型計算機利用を継続する。令和3年度は、新型コロ ナウイルスによる感染拡大もあり、生体内の有機分子の研究に焦点を当て研究を展開すること を計画している。これまでにセシウムとの錯形成をテーマとしてきた生体内有機分子の計算科 学的アプローチは、薬剤分子の研究開発にも応用可能であり、新たな発展を模索したい。

# 5.11.2 原子カ分野での物性計算科学技術の高度化

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

永井 佑紀、山田 進、町田 昌彦 シミュレーション技術開発室

# (1)利用目的:

本申請では、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の中長期計画に従い、 原子力分野での物性計算科学技術の高度化を目的とした計算科学研究課題を申請する。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)の開発である。また、申請する大規模シミュレーション課題枠を 利用し、平成23年度までCREST (JST)受託研究にて開発してきた密度行列繰り込み群法を 広く公開するレベルまで、並列化性能を高め、機能材料研究開発に資する大規模シミュレーシ ョンコードとして機構内外の研究力強化に貢献することも目的とする。

### (2) 利用内容·結果:

#### ① 自己無撞着場による超高精度超並列物性評価コードの作成

超伝導体の物性を計算する際、量子効果をきちんと考慮したままデバイスサイズのシミュレ ーションを行うことは困難であった。そこで、局在クリロフ空間を用いた新アルゴリズムを考 案した。このアルゴリズムは超伝導状態の物理的性質を利用した新しいアルゴリズムであり、 シミュレーションの計算コストを大幅に削減することに成功した。この手法開発は高く評価さ れ、論文誌 Journal of the Physical Society of Japan の Editors' choice という賞を受賞した [成果リスト 1]。このアルゴリズムをスーパーコンピュータ上で高速動作するように実装し、材 料物性を調べた。本年度は、準結晶と呼ばれる並進対称性を持たない物質群をこのアリゴリズ ムで取り扱った。準結晶は結晶やアモルファスと異なる種類の乱雑かつ秩序のある構造を持ち、 通常より高い熱伝導性を持つ。また、2018 年にある種の準結晶が超伝導になることが発見され、 材料として極めて興味深い物質である。この準結晶超伝導磁場下の性質を調べるために、我々 が開発した手法を用いて 2 次元超伝導準結晶のシミュレーションを行った。その結果、興味深 い磁束ピン留めが起きることがわかった。この成果は 20 年秋の物理学会で発表した。現在論文 にまとめているところである。また、超伝導自己無撞着場に関する論文と自己エネルギー自己 無撞着場に関する論文がそれぞれ Physical Review Letters に掲載された[成果リスト 3、4]。

# ② 機械学習技術を用いた自己学習モンテカルロ法によるコードの作成

「自己学習ハイブリッドモンテカルロ法」は第一原理分子動力学シミュレーションを機械学 習によって高速化する手法である。この手法の開発により、非常に広範囲の物質の性質のシミ ュレーションが可能になった。この手法は量子力学的効果を取り込んだ高精度な分子動力学法 である第一原理分子動力学法を大幅に高速化することが可能であり、かつ、計算精度が第一原 理分子動力学法と厳密に等しいという利点を持っている。本年度は東京大学大学院新領域創成 科学研究科の熱電材料の実験グループとの共同研究を開始し、熱電材料として有望な合金系準 結晶の機械学習ポテンシャルの生成を試みた。準結晶は周期がなく第一原理計算を行うことが できないため、準結晶と局所構造が似ているが周期を持つ近似結晶と呼ばれる物質群に対して 自己学習ハイブリッドモンテカルロ法を適用し、有効な機械学習ポテンシャルの作成を行った。 作られた機械学習ポテンシャルは異なる組成の近似結晶に使えることを確認することができ た。これにより、複雑な構造を持つ合金系に対しても自己学習ハイブリッドモンテカルロ法が 有効であることがわかった。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 論文発表

- <u>Yuki Nagai</u>, "N-independent Localized Krylov Bogoliubov-de Gennes Method: Ultrafast Numerical Approach to Large-scale Inhomogeneous Superconductors", J. Phys. Soc. Jpn. 89, 074703 (2020).
- 2) Majid Kheirkhah, <u>Yuki Nagai</u>, Chun Chen, Frank Marsiglio, "Majorana corner flat bands in two-dimensional second-order topological superconductors", Phys. Rev. B 101, 104502 (2020).
- 3) Majid Kheirkhah, Zhongbo Yan, <u>Yuki Nagai</u>, Frank Marsiglio, "First- and Second-Order Topological Superconductivity and Temperature-Driven Topological Phase Transitions in the Extended Hubbard Model with Spin-Orbit Coupling", Phys. Rev. Lett. 125, 017001 (2020).
- 4) <u>Yuki Nagai</u>, Yang Qi, Hiroki Isobe, Vladyslav Kozii and Liang Fu, "DMFT Reveals the Non-Hermitian Topology and Fermi Arcs in Heavy-Fermion Systems", Phys. Rev. Lett. 125, 227204 (2020).
- 5) <u>Yuki Nagai</u>, Masahiko Okumura, Keita Kobayashi, and Motoyuki Shiga, "Self-learning Hybrid Monte Carlo: A First-principles Approach", Phys. Rev. B 102, 041124(R) (2020).
- 6) Etsuko Itou and <u>Yuki Nagai</u>, "Sparse modeling approach to obtaining the shear viscosity from smeared correlation functions", Journal of High Energy Physics volume 7 (2020).
- 7) Hiroshi Shinaoka and <u>Yuki Nagai</u>, "Sparse modeling of large-scale quantum impurity models with low symmetries", Phys. Rev. B 103, 045120 (2020).

# (4) 今後の利用予定:

自己学習ハイブリッドモンテカル法を様々な物質材料に適用することで、機構内外の分子シ ミュレーション需要に応えるとともに、さらなる手法の精緻化を行う。

# 5.11.3 機械学習を用いた放射性物質の原子スケールシミュレーション

Atomic Scale Simulations of Radioactive Materials using Machine Learning 奥村 雅彦、小林 恵太、山口 瑛子、中村 博樹、板倉 充洋、町田 昌彦、北垣 徹 シミュレーション技術開発室

# (1)利用目的:

2011年の東日本大震災に起因する東京電力福島第一原子力発電所事故により燃料棒が溶融 し、環境中に放射性核種が放出された。現在、原子炉内に残っている、溶け落ち生成された燃 料デブリの取り出しが計画されているが、建屋及び炉内は高い放射線量を示し、廃炉作業は容 易ではない。廃炉作業を安全に進めるためには、建屋内の放射性核種による汚染状況を正確に 把握し、作業員の被ばく量を可能な限り低減する必要がある。その一方、環境中に放出された 放射性セシウムは、土壌に強く吸着し、生活圏に近い表土を剥ぎ取る大規模な除染が行われた。 除染がほぼ完了した現在、膨大な量の除染除去土壌の処理処分が新たな問題となっている。今 後、除染除去土壌の一部は再利用される予定であり、残った除去土壌は福島県内の中間貯蔵施 設に保管された後、福島県外の最終処分場に移されるが、最終処分場の候補地は未だ決まって いない。

以上、現在計画されている廃炉作業や除染除去土壌の課題は、国民全体に果たされた社会的 課題だが、より安全に廃炉を進展させ、除染除去土壌の長期管理の負担を減らすには、極めて 多くの科学的知見が必要である。例えば、事故の進展に応じた燃料や建材の物理的変化や化学 的変化などの理解は、廃炉作業を安全に進めるため、必須な科学的知見となる他、事故進展の 解明に貢献することが可能となれば、将来の原子炉の安全性向上に資する事も期待される。ま た、放射性セシウムが土壌に強く吸着するメカニズムの解明は、除染除去土壌から放射性セシ ウムを取り除く手法開発の知見となり、最終処分場に関わる負担の軽減へ繋がると期待される。

上記の廃炉等に係る科学的知見獲得の研究方法として、実験観察手法と理論的手法がある。 実験観察手法は、現実の物質を直接調べる事で、物質の様態を把握する。しかし、放射性物質 を研究対象とする場合、測定自体が制限される。その一方、理論的手法は、研究対象をモデル 化する必要があるため、現実の複雑な様態の把握が課題となる場合がある。しかし、第一原理 計算手法等を用いる事で、物質の電子状態を知る事が可能になり、分子動力学計算を行う事に よって、原子・分子のダイナミクスを知る事が可能になる。これらの特徴により、理論的手法 は、物理・化学現象の根本的なメカニズム解明が可能である他、放射性物質の物性を評価する 上で安全性の課題等は一切ない。

上記の背景の下、本課題では、福島第一原子力発電所事故に関わる物理・化学現象の科学的 知見の獲得を主な目的とする。特に、電子状態が物性に及ぼす影響を調べるために、第一原理 計算を主な計算手法とする。第一原理計算は高精度であるが計算コストが高いため、複雑な構 造を持つ現実の物質を再現する事が難しい場合がある。そこで、高精度かつ低計算コストであ る計算手法である機械学習分子動力学法を用いる計算も並行して実施する。この手法は、第一 原理計算の計算結果を人工ニューラルネットワーク等に学習させて、それを用いて高精度かつ 低計算コストの分子動力学法シミュレーションを実現する手法である。本課題では、機械学習 分子動力学法コード開発も併せて実施する。

#### (2)利用内容·結果:

大型計算機利用課題(大口利用)として、令和2年度は、コンクリート中のセメントを記述 する機械学習ポテンシャルを作成した。その結果、図1の(a)、(b)に示すように、第一原理計算 に近い精度を持つ機械学習ポテンシャルを作成する事に成功した。そして、それを用いて物性 評価を行ったところ、実験値とよく一致する結果を得た。また、このポテンシャルを用いて、 第一原理計算では実施が難しい大規模セメント系のシミュレーションを実施し、水分子の拡散 係数を評価した。その結果、実験値とよく一致する結果を得た。これらの研究成果は、査読付 き論文として発表された。機械学習分子動力学法はこれまで、少ない原子種(2種類もしくは3 種類)に適用されてきたが、本研課題によって4原子種の放射性物質系にも適用可能な事が示 された。この事より、本課題の研究成果は、機械学習分子動力学法の可能性を広げた結果であ ると言える。



図 1 セメント系における第一原理計算と機械学習ポテンシャルの (a) エネルギー 及び (b) カに対する相関図。(c) 機械学習分子動力学法シミュレーションを実施したセメント系。固体層 と液体層が交互に現れる層状物質である。青、灰色、赤、薄桃色、緑はそれぞれケイ素、アル ミニウム、酸素、水素、カルシウムを表す。

また、最も単純な粘土鉱物の一つであるカオリナイトの機械学習ポテンシャルを作成し、物性 評価を行った。その結果、粘土鉱物系で最もよく使われている古典力場 Clay-FF では再現でき なかった、ミクロな構造及びフォノンスペクトルについて、実験値の再現に成功した(図 2)。 これらの結果は、現在、論文にまとめているところである。本研究によって初めてミクロな構 造やフォノンスペクトルがうまく再現できる高精度な力場が作られ、今後の粘土鉱物のシミュ レーションに大きな影響を与える事が期待される。



図 2 カオリナイトのフォノンスペクトル。OH 基の振動に対応。

上記の結果はそれぞれ福島廃炉研究及び福島環境回復研究に関係しており、福島支援に資す る結果である。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

査読付き論文

- <u>K.Kobayashi</u>, <u>H.Nakamura</u>, <u>A.Yamaguchi</u>, <u>M.Itakura</u>, <u>M.Machida</u>, and <u>M.Okumura</u>, "Machine learning potentials for tobermorite minerals", Comp. Mater. Sci. 188, 110173 (2021). (出版済)
- 2) Y.Nagai, <u>M.Okumura</u>. <u>K.Kobayashi</u>, and M.Shiga, "Self-learning hybrid Monte-Carlo: A ffirst-principles approach", Phys. Rev. B 102, 041124(R) (2020). (出版済)
- 3) <u>M.Okumura</u>, <u>A.Yamaguchi</u>, and <u>K.Kobayashi</u>, "Machine Learning Molecular Dynamics Simulations of Clay Minerals and Calcium Silicate Hydrates", Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020, 126 (2020). (出版済)
- 4) <u>A.Yamaguchi</u>, I.Asano, Y.Kitagawa, C.Meng, A.Nakao, <u>M.Okumura</u>, "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, 127 (2020). (出版済)

国際会議

- 5) <u>M.Okumura</u>, S.Kerisit, I.C.Bourg, L.N.Lammers, T.Ikeda, M.Sassi, K.M.Rosso, and <u>M.Machida</u>, "Mechanism of inhomogeneous concentration of Cs in 2:1 Clay minerals: Systematic numerical studies", Clay Minerals Society 57th Annual Meeting, October 18–23, 2020, online. (招待講演)
- 6) D.Kaplan, K.Morris, P.Sellin, <u>M.Okumura</u>, and V.Freedman; Moderators: F.Smith and A.Gorton, "A Hanford Perspective on Environmental Remediation: Workshop Discussion Panel", Clay Minerals Society 57th Annual Meeting, October 18–23, 2020, online. (パネルディスカッション・招待)
- <u>A.Yamaguchi</u>, <u>M.Okumura</u>, Y.Takahashi, "Effects of ionic radius on adsorption structures of hard cations on clay minerals", Clay Minerals Society 57th Annual Meeting, October 18–23, 2020, online.

- 8) <u>M Okumura</u>, <u>K.Kobayashi</u>, <u>A.Yamaguchi</u>, <u>H.Nakamura</u>, <u>M.Itakura</u>, and <u>M.Machida</u>, "Machine learning molecular dynamics studies of clay minerals", Goldschmidt Virtual 2020, June 21–26, 2020, online.
- 9) <u>A.Yamaguchi</u>, <u>M.Okumura</u>, Y.Takahashi, "Effects of ionic radius on adsorption structures of various cations on 2:1 clay minerals", Goldschmidt Conference Virtual 2020, June 21–26, 2020, online.

国内学会

- 10) <u>奥村雅彦</u>,「福島環境回復及び廃炉に向けた放射性セシウムの原子スケール動態計算」,日本原子力学会 2021 年春の年会 計算科学技術部会 企画セッション 「計算科学技術に基づいた福島第一原子力発電所事故に関する最新知見」, 2021 年 3 月 18 日. (招待講演)
- 11) <u>A.Yamaguchi</u>, Y.Takahashi, <u>M.Okumura</u>, "Investigation of adsorption structure of cation on clay minerals based on XAFS method and ab initio calculation with solvent effects of water", 日本地球化学会 第 67 回オンライン年会, 2020 年 11 月 12 26 日.
- 12) 小林恵太, <u>中村博樹</u>, <u>山口瑛子</u>, <u>板倉充洋</u>, <u>町田昌彦</u>, <u>奥村雅彦</u>, 「セメント水和物に対す る機械学習分子動力学方による解析」, 日本原子力学会 2020 年秋の大会, オンライン, 2020 年 9 月.

# (4) 今後の利用予定:

今年度は比較的単純なセメント鉱物、粘土鉱物に対して機械学習分子動力学法が有効である ことが確認できた。今後は、より複雑な鉱物に対して機械学習分子動力学法を適用し、セシウ ム吸着現象の研究につなげる予定である。また、研究対象を広げ、福島第一原発事故の溶融燃 料等へ機械学習分子動力学法の適用を試みる予定である。

# 5.11.4 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、小林 恵太 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α崩壊で生成する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分光法の適用が難しく、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うことは重要な新知見であるが、その吸着様態は不明である。

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する ため、その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、上記の実験の難しさから分光 学的手法が適用されておらず、シミュレーションの先行研究も少ない。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。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。大型計算機 を用いることで、放射性元素を取り扱う危険を冒さずに詳細な解明を行うことができる。

#### (2)利用内容·結果:

#### 1) 2020 年度課題の達成目標

1. Ba の水和構造の解明

水和状態をより良く表現する新しい汎関数である SCAN を用いてシミュレーションを行う。 また、X線吸収微細構造(XAFS)法による観測も行い、シミュレーション結果と比較するとと もに先行研究の結果とも比較する。

2. Ra の水和構造の解明

Ba と同様の計算手法を用いてシミュレーションを行う。観測も行い、その妥当性を評価する。

3. 両者の比較

Raの水和状態に関する研究例はほとんどないためRaのシミュレーションだけでも重要であるが、これまでアナログ元素としてよく用いられてきたBaとの違いを定量的に評価することで、より重要かつ広く用いられる知見を得る。

#### 2) 2020 年度の研究成果とその重要性

ユニットセル中に 100 個の水分子と 1 個の Ba または Ra イオンを配置した系に ついて VASP を用いた分子動力学法によ り 60ps 計算し、平衡後の 50ps の構造を 分析した RDF の結果を図 1 に示す。

RDF の結果に基づくと、Ba の第一水和 設における Ba-O の距離は 2.78Å、配位 数は 7.8 であることがわかった。これは別 途 XAFS 法の実験により測定した結果と 整合的であり、SCAN を用いた計算手法の 妥当性が確かめられた。先行研究の結果と の比較からも本手法の有用性が確かめら れた。



Ra にも同様の計算を行った結果、第一水和殻における Ra-O の距離は 2.88Å、配位数は 8.4 であり、Ba よりも 0.1Åほど距離が遠く、配位する水分子は 0.6 多いことがわかった。さらに Ba-O と Ra-O の動径分布関数を比較すると、3.0Å付近にあるピークについて Ra の方がブロ ードになっており、3.0Åから 4.0Åの間にある RDF の最小値については Ra の方が高くなっ た。これは Ra の第一水和殻が Ba よりも緩く配位していることを示唆している。

一般に、水和構造は固液界面の様々な反応に影響を与える。例えば、地球表層に広く存在する二酸化ケイ素(SiO<sub>2</sub>)は、第一水和殻の配位が緩いイオンを吸着すると溶解速度が高くなる

という報告もある。従って本研究の結果を踏まえると、Ba を吸着するよりも Ra を吸着した場 合に鉱物の溶解が早く進むことを示唆している。また、粘土鉱物の層間においても、Ra の方が 水分子の配位が弱いことから、脱水した吸着構造をとりやすい可能性を示しており、これまで の室内実験や環境試料の分析の示唆する結果と整合的である。ただし、粘土鉱物への吸着反応 を解明するためには、粘土鉱物と水と吸着イオンのすべてが存在する系のシミュレーションが 必須である。今後、粘土鉱物の存在下での水分子と Ba イオンや Ra イオンの構造をシミュレー ションで解明していく。Ba については査読付き論文を執筆中である。Ra については実験結果 が得られ次第、Ba の比較も含め、査読付き論文にまとめる予定である。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

[国際会議査読付きプローシーディング]

1) <u>A.Yamaguchi</u>, I.Asano, Y.Kitagawa, C.Meng, A.Nakao, M.Okumura, "Quantitative evaluation of effects of isomorphic substitutions on delamination energies of clay minerals", Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020, pp. 127-130 (2020). (出版済)

#### [国際会議]

- 2) <u>A.Yamaguchi</u>, M.Okumura, Y.Takahashi, "Effects of ionic radius on adsorption structures of various cations on 2:1 clay minerals", Virtual Goldschmidt Conference 2020, June 21-26, 2020. (オンライン開催)
- 3) <u>A.Yamaguchi</u>, M.Okumura, Y.Takahashi, "Effects of ionic radius on adsorption structures of hard cations on clay minerals", The 57th Annual Meeting of the Clay Minerals Society, Richland, USA, October 18-23, 2020. (オンライン開催)

# [国内会議]

4) <u>A.Yamaguchi</u>, Y.Takahashi, M.Okumura, "Investigation of adsorption structure of cation on clay minerals based on XAFS method and ab initio calculation with solvent effects of water", 日本地球化学会 第 67 回オンライン年会, 2020 年 11 月 12 - 26 日. (オ ンライン開催)

[学術論文出版]

5) A.Yamaguchi, K.Kobayashi, Y.Takahashi, M.Machida, M.Okumuraa, "Hydration structures of barium ions: Ab initio molecular dynamics simulations using the SCAN meta-GGA density functional and EXAFS spectroscopy studies", Chemical Physics Letters, 780, October 2021, 138945, https://doi.org/10.1016/j.cplett.2021.138945

# (4) 今後の利用予定:

今後は、粘土鉱物、吸着イオン、水分子、のすべてが入ったシミュレーションを実施してい くが、原子数が多くなるため計算コストが高くなるなどの問題がある。この問題の解消のため 様々な手法を検討していく。今回得られた水和構造と粘土鉱物中での構造を比較することで、 環境中での吸着機構や動態をより正確に推定することができるようになる。

# 5.11.5 第一原理計算による原子力材料劣化機構の研究

# First-principles Study for 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。そのため本研究は、 原子力以外の分野にも波及効果やインパクトのある研究である。

#### (2) 利用内容·結果:

液体金属脆化のメカニズム解明に向けて、脆化の元素選択性の物理的起源を明らかにすべく、

第一原理計算による研究を継続してい る。これまで、鉄やアルミについての 計算を終え、脆化をもたらす液体金属 元素には溶解エネルギーや粒界吸着エ ネルギーがその他の元素に比べてゼロ に近いという特徴があることが分かっ ている。その他の金属(Mg、Ti、Ni) における LME にも同様かどうかを調 べるために計算を進めた。Fig.1 に示す ような状態についてエネルギーを計算 し、溶解エネルギー、粒界吸着エネル ギーの評価を行った。



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 Fig. 1: 計算に用いた原子モデル

小さいため、脆化をもたらす液体金属に対しては固体単体の状態をエネルギーの基準とした。 そして、液体金属原子が結晶粒界に吸着している場合、固体中で置換して存在している(溶解 状態の)場合、表面に吸着している場合のエネルギーを計算した。

これまでに計算した液体金属元素はすべて表面吸着しやすいことが分かった。つまり、破面の安定化をもたらすため、脆性破壊を促進する効果を持つことが分かった。ADS 炉の冷却材である鉛(Pb)とビスマス(Bi)も、鉄の表面エネルギーを大きく低下させる効果をもつことが

わかった。しかしながら、液体金属脆化が実用上問題にならないナトリウム(Na)も、鉄の表面エネルギーを低下させる効果を持つことが分かった。

Ni、MgとTi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。MgとTiに関しては実験データ不足であるが、Niに関しては、脆化する 元素と脆化しない元素がはっきり分かれ、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。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

○査読有論文

 <u>Masatake Yamaguchi</u>, Tomohito Tsuru, Kenichi Ebihara, Mitsuhiro Itakura, Kenji Matsuda, Kazuyuki Shimizu, Hiroyuki Toda, "Hydrogen-Trapping in Mg<sub>2</sub>Si and Al<sub>7</sub>FeCu<sub>2</sub> Intermetallic Compounds in Aluminum Alloy: First-Principles Calculations", Materials Transactions, Vol. 61(2020) pp.1907-1911.

○解説(査読無)

2) (出版済)戸田裕之、山口正剛、都留智仁、清水一行、松田健二、平山恭介、「ナノ~マク ロを繋ぐトモグラフィー:界面の半自発的剥離」、まてりあ Vol.60(2020)pp.13-18.

○招待・依頼講演等

3) (依頼講演)山口正剛、「液体金属脆性から考えた水素脆化メカニズム」、第11回プラストンに基づく変形現象研究会~鉄鋼材料の水素脆性~(京都大学構造材料元素戦略研究拠点)、2021年1月26日 オンライン開催。

○口頭発表

- 4) 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 2020 年秋期講演大会、2020/09/16-18 オンライン開催。
- 5) 山口正剛、都留智仁、海老原健一、板倉充洋、「アルミニウム合金中非整合界面の水素ト ラップエネルギーの第一原理計算」軽金属学会第139回秋期大会、2020/11/07-08 オンラ イン開催。

○受賞

6) 松田健二他 計 15 名 (第 12 著者:山口正剛)、令和 2 年度軽金属論文賞「Effect of Copper Addition on Precipitation Behavior near Grain Boundary in Al-Zn-Mg Alloy」、 Materials Transactions, Vol.60(2019)pp.1688-1696 掲載。

○知財(特許出願)

7) 戸田裕之、清水一行、山口正剛、2020/06/03 特願 2020-96333「アルミニウム合金材およびアルミニウム合金材の水素脆化防止剤」。

# (4) 今後の利用予定:

引き続き、液体金属脆化のメカニズム解明等を進める予定である。

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

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

山田 進、町田 昌彦シミュレーション技術開発室

# (1)利用目的:

福島第一原子力発電所(1F)の事故直後、大規模な放射性物質の海洋への直接漏洩が起こった。この漏洩により、1F付近でモニタリングされていた放射性物質の濃度は港湾内だけでなく 港湾外でも極めて高い値を示した。海洋への汚染に際しては、海洋環境への影響が国際的レベ ルで取り沙汰されることもあり、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10年が経った今では、その量は事故当初と比べて大きく減少した。しかし、放 射性物質によっては、港湾内と港湾外の濃度に差があることから、未だに放射性物質が港湾へ 流入し、港湾外に拡散していると考えられ、港湾内からどのように港湾外に移動するか、また、 港湾外でどのように拡散するかを評価することが求められている。

申請者らは計算機シミュレーションにより、上記課題を解決することを目標としている。さらに、上記のシミュレーションを最新の並列計算機を用いて高速に実施するために必要となる 大規模並列化や GPU 化の技術開発も同時に実施することも目標としている。

#### (2) 利用内容·結果:

本研究では、1F港湾内および沿岸での放射性物質の移流・拡散の評価を目指している。その ため、計算領域を入れ子状に配置し、それらの境界で適切にデータの受け渡しのできるシミュ レーションコード「3D-Sea-SPEC」を開発している。このコードでは、領域ごとに格子サイズ を設定できるため、地形や流動場が複雑である 1F 港湾内などをメートル単位で考慮し、徐々 に外側の領域の格子サイズを大きくしていくことで、数百 km 範囲の福島沿岸域の流動場シミ ュレーションが可能になる。そこで、境界条件として JCOPE2 の海洋データや気象庁の気象デ ータを境界条件に利用し、1F 沿岸のシミュレーションを実施したところ、図 1 のように季節 によって海洋の流れが大きく異なることを確認した。以上の結果は、我々の開発した 3D-Sea-SPEC コードを用いることで、実際の海洋の状態を考慮した 1F 港湾由来の放射性物質の拡散 状況を評価するシミュレーションが可能であることを示している。さらに、実際の環境を対象 にした評価のためには適切な境界条件のデータを利用することが重要であることも示してい る。

また、3D-Sea-SPEC コードは並列化しており、並列計算が可能であるが、大きい領域のシミ ユレーションでは並列計算を行っても多くの時間が必要になる。そこで、大型計算機「HPE SGI8600」の GPU を有効に利用することを目指し、3D-Sea-SPEC を GPU 向きに高速化し た。その結果、流動場計算の部分だけではあるが、CPU のみを利用した場合よりも約2倍高速 に計算できることを確認した。

さらに、流れ場とシルトフェンスの変形を連成計算する方法を提案し、実際の水路実験と比較し、その有効性を確認した。これにより、1F港湾内等に汚染物質の拡散抑制のために設置されているシルトフェンスの影響を考慮したシミュレーションが可能になると考えられる。



(c) 2014 年 7 月(d) 2014 年 10 月図1 季節ごとの 1F 港湾周辺の流動場。季節により大きく異なっていることが確認できる

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

査読付き論文

- 1) 山田進,町田昌彦,田中みのり,関克己,有川太郎,水中シルトフェンスの変形・移動を可 能とする3次元モデリング:流体・シルトフェンス連成計算の実現,日本応用数理学会論 文誌, Vol.31, No.1, 2021, pp. 20-43.
- 2) S. Yamada, M. Machida, H. Kurikami, Applications of Radiocesium Migration Models to Fukushima Environmental Issues: Numerical analysis of radiocesium transport in temperature-stratified reservoirs by 3D-Sea-SPEC, Proc. of SNA+MC2020, 2020, pp.140-146.

学会発表

3) M. Machida, S. Yamada, H. Kurikami, Characteristic radiocesium transport in temperature-stratified reservoirs and port-areas: Analysis by using a code, 3D-Sea-SPEC, developed for complex aquatic areas, EGU General Assembly 2020, Austria Center Vienna, Vienna (Austria). (May. 2020). (online)

# (4) 今後の利用予定:

海洋シミュレーションコード 3D-Sea-SPEC の機能の拡張を進めるとともに、様々な気象条 件でのシミュレーションを実施し、港湾内の核種が外洋にどのように拡散するかの知見を得る 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。

# 5.11.7 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 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 要さを増している。

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(H<sub>2</sub>O)とトリチウム水(T<sub>2</sub>O, HTO)の酸解離定数に関する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。この研究は新学術領域「ハイドロジェノミクス」 の計画研究「水素の先端計算による水素機能の高精度予測」の一環として行われたものである。

水溶液の酸解離定数 (pKa) は、酸塩基化学において基本的な役割を果たすため、これを定量 的に評価することは重要な課題である。特に、pKaの推定が実験的に難しい場合、それに代わ る方法として計算化学に期待されている。しかし、pKaを高い精度で評価することは、これま での方法では困難だった。pKaを正しく計算するには、水分子の解離現象を記述する理論に基 づかなくてはならない。水の解離では水素原子の熱揺らぎと量子揺らぎの両方が関わっており、 その効果を含めた第一原理計算が必要だ。これを成し遂げるために、効率の良い構造サンプリ ング法、高精度の密度汎関数理論 (DFT) など、高度な計算技術が不可欠という事情がある。 加えて、計算精度を担保しようとすると計算時間がその分増えるため、計算機の高速化とプロ グラムの並列化が十分に達成されていなければならない。

原子力機構システム計算科学センターでは、水素原子の熱揺らぎと量子揺らぎを取り入れた第 一原理計算である「第一原理経路積分法」を提案し、超並列計算機に対応したプログラム 「PIMD」を開発してきた。第一原理経路積 分法は、DFT に基づく非経験的電子状態計 算を行いながら、原子の揺らぎ効果を考慮す るのに、経路積分法に基づいた構造サンプリ ングを行う分子シミュレーションである。こ れは、原子核と電子からなる物質系を丸ごと 量子論で扱った予測精度の高い計算技術で ある。電子状態に関する断熱近似や DFT 汎 関数などの基本的近似は含まれるが、その下 で構造揺らぎは量子統計力学に基づき厳密 に計算される。水の第一原理経路積分シミュ レーションの様子を図 1 に示す。酸素(赤 球)、水素(白球)の重ね合わせは、それぞれ の原子の量子揺らぎの大きさを表している。

ところが、pKaの計算には、さらにもう一 工夫が必要である。H2O分子がH+とOHに 解離するのは、分子振動運動の時間スケール では滅多に起こらない希少現象なので、通常



図1:水の第一原理経路積分シミュレ ーションにおけるスナップショット。

の分子シミュレーションでは自然に現れないからである。そこで、図2に示すように、本研究 では第一原理経路積分法を熱力学的積分法と組み合わせることにした。熱力学的積分法は、分 子シミュレーションにおいて人工的に拘束をかける方法である。すなわち、水分子の解離を促 すよう、1つの酸素(橙球)の周りに存在する水素(白球)の配位数が一定となるように拘束を



図 2:水分子の電離に関する自由エネルギー曲線。横軸は拘束した水分子の配 位数を酸素-水素間距離に換算したもの。

かけ、拘束にかかる平均力を計算する。そして、配位数をパラメータとしてこの計算を繰り返 す。この平均力を積分すると、拘束に抗して解離が起きるために必要な可逆仕事として、自由 エネルギー曲線を求めて、これを pKa に換算することができる。この方法を使って、水の重水 素置換体における pKa の推定した。核の量子揺らぎを考慮した第一原理経路積分法による量子 計算(緑線は H<sub>2</sub>O、橙線は T<sub>2</sub>O)は、それを考慮しなかった従来の第一原理分子動力学法によ る古典計算(黒線は H<sub>2</sub>O と T<sub>2</sub>O)よりも解離自由エネルギーを低く評価する。その結果、H<sub>2</sub>O の pKa は核の量子揺らぎ効果によって 4.5±0.9 も低くなった。従来の古典計算では pKa を過 大評価することが知られていたが、本研究でその理由が解明された。

第一原理経路積分法で計算された水の重水素置換体の pKa 値を表 1 にまとめる。 $D_2O$  の pKa が軽水の 14 よりも大きく 15 程度となり、実験値 14.86 に近い値になった。この違いは水素原 子核の量子揺らぎ効果によるものである。また、実験では知られていない  $T_2O$  の pKa を計算 したところ 15 程度で、 $D_2O$  の pKa と同程度になることが予測された。HDO や HTO における pKa も計算することができ、その予測値は 16 程度になった。

表1:量-	子計算の結果: 水	の pKa
重水素置換体	計算値(相対値)	実験値
H <sub>2</sub> O	14.0	14.00
D <sub>2</sub> O	$15.0 \pm 0.3$	14.86
T <sub>2</sub> O	$15.0 \pm 0.2$	
HDO	$16.1 \pm 0.1$	
HTO	$16.3 \pm 0.1$	

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

<2020年度>

- 1) Y. Noguchi, M. Hiyama, M. Shiga, O. Sugino, H. Akiyama, "Quantum-Mechanical Hydration Plays Critical Role in the Stability of Firefly Oxyluciferin Isomers: State-of-the-art Calculations of the Excited States", J. Chem. Phys., Vol.153, 201103 (2020) 6p.
- 2) 君塚肇, 尾方成信, 志賀基之, 日本物理学会誌, Vol.75, pp.484-490 (2020).
- 3) Y. Nagai, M. Okumura, K. Kobayashi, M. Shiga, "Self-learning hybrid Monte Carlo: A first principles approach", Phys. Rev. B,Vol.102, 041124(R) (2020).
- 4) L. Yan, Y. Yamamoto, M. Shiga, O. Sugino, "Nuclear quantum effect for hydrogen adsorption on Pt(111)", Phys. Rev. B,Vol.101, 165414 (2020) 9 p.
- 5) <u>志賀基之</u>, "階層的並列化された第一原理経路積分計算", 物性研究所スパコン共同利用・ CCMS 合同研究会「計算物質科学の新展開 2020」, オンライン (2020/12/22), (招待講演).
- 6) <u>Motoyuki Shiga</u>, "Studies and Special Lecture: Path Integral Simulations", CMD Workshop 2020, online (2020/9/4), (招待講演).

# (4) 今後の利用予定:

トリチウム水系のほか、溶液反応系、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。
#### 5.11.8 機械学習分子動力学法によるセメント水和物の解析

#### Machine Learning Dynamics Simulation for Cement Hydrate

小林 恵太、中村 博樹、山口 瑛子、板倉 充洋、町田 昌彦、奥村 雅彦 シミュレーション技術開発室

#### (1) 利用目的:

東京電力福島第一原子力発電所(1F)では、原子炉容器の破損等の結果、大量の放射性セシ ウムが原子炉格納容器のコンクリートに吸着し、非常に高い線量となっている。廃炉において 生じる大量の汚染コンクリートの処理、減容化等において、コンクリート中のセシウムの吸着 挙動を明らかにしていくことが重要となる。セシウムはコンクリート中のセメント水和物に強 く吸着されることが知られている。セメント水和物は非常に多孔質な物質であり、セシウムイ オンは水とともにセメント細孔中を移動し、セメント水和物表面に吸着されると考えられてい る。このような系のシミュレーションでは、細孔中の水・イオンの輸送、水・イオンとセメン ト水和物表面での化学反応を考慮した、大規模シミュレーションが必要となる。従来の高精度 シミュレーション手法である第一原理計算では、計算コストの高さから、このような大規模計 算は困難である。

本課題では機械学習分子動力学法と呼ばれる手法を用い、この問題の解決に取り組んだ。こ の手法では、大量の第一原理計算データを機械学習することにより、第一原理計算の結果を再 現する予測モデル(機械学習力場)を作成する(図 1)。この機械学習力場を用いた分子動力学計 算が機械学習分子動力学法と呼ばれ、この手法では、第一原理計算並みの精度を持ちながら、 第一原理計算より遥かに低い計算コストでのシミュレーションが可能となる。本課題では、ス パコンを用い、大量の第一原理データを作成し、セメント水和物の機械学習力場の構築を行っ た。



図 1:小規模な第一原理計算を大量に実行することにより、第一原理データセットを作成し、 機械学習による予測モデルを作成します。この予測モデルに基づいた分子動力学を実行す ることにより大規模高精度計算が可能となります。

#### (2)利用内容·結果:

セメント水和物の代表的なモデル物質であるトバモライトに対し、第一原理計算を実行しデ ータセットの作成を行った。生成したデータセットには層間の距離が異なる3種類のトバモラ イト(9Å,11Å,14Å)、水、水・トバモライトの界面構造等が含まれており、それぞれ数十から 数百原子程度の構造からなり、データセットの総数は約70,000構造である。構築した機械学習 力場の精度を検証した所、図2のように両者は非常によい線形関係にあることを確認した。



図 2: 第一原理計算の結果(横軸)、機械学習力場の結果(縦軸)を示した散布図。(a)はエネ ルギーに関する散布図であり、(b)は力に対する散布図である。

構築した機械学習力場を用い、物性値の計算を行ったところ、格子定数、弾性定数、振動特性 等の実験値を高精度に再現することを確かめた。更に、セメント水和物-水界面での数千原子規 模の大規模分子動力学計算を実施し、水・カルシウムイオンの輸送・吸着特性を計算したとこ ろ、過去の実験値をよく再現することに成功した(図3)。



図 3: 右図-(a):機械学習分子動力学により得られたセメント水和物表面・水界面の構造。 左図-(b):計算により得られた界面付近での水・イオンの分布(赤、緑線)、水の拡散係数 (■)。表面付近で水の拡散係数が著しく低くなり、同時にイオンが表面付近に局在してい る。

# (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):■論文

1) Keita Kobayashi, Hiroki Nakamura, Akiko Yamaguchi, Mitsuhiro Itakura, Masahiko Machida, and Masahiko Okumura, "Machine learning potentials for tobermorite minerals", Computational Materials Science, vol. 188, 2021, pp.110173-1-110173-14.

#### (4) 今後の利用予定:

セメント水和物のような、複雑な系に対する高精度シミュレーションは、従来の計算手法で は困難なものあったが、機械学習分子動力学法により、セメント水和物の高精度シミュレーシ ョンが可能となった。今後はセシウムイオンを含んだセメント水和物の機械学習力場の構築を 行い、コンクリートへのセシウムイオン吸着挙動の解明に取り組んでいく予定である。そのた めの第一原理データセット作成のためにスパコンを利用が必要である。

#### 5.11.9 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 合物や核燃料に関連する材料の物性を、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、核燃料関連物質の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い、より現実的な物性評価を目指している。また、 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している。

この研究の最終的なゴールとしては、MA-MOX などの新規燃料の開発に有用な知見を与え ることを可能とすることである。特に実験で観測することが困難な物性値を、計算で取得する ことによって、核燃料開発を効率化させることができる。また、シビアアクシデント解析にお いては、原子炉の通常運転時にはありえない環境での物性値を評価する必要があり、そのよう な場合も本研究で開発された技術を応用できる。また、今後、福島第一原発での燃料デブリの 取り出しに伴い、その物性が問題となってくるが、その評価にも適用が期待される。

本年度は、燃料デブリの生成に重要な役割を果たす、溶融鉄や制御棒の材料である炭化ホウ素(B4C)に注目し、それらの物性評価を行った。

#### (2) 利用内容·結果:

シビアアクシデント時には制御棒で鉄と炭化ホウ素(B<sub>4</sub>C)との共晶により融解することが 予想される。この時の溶融進展の解析のためには、液体状の鉄や B<sub>4</sub>C との界面の物性が必要で あるため、本研究ではこれらの量の第一原理分子動力学による解析を行った。

具体的には、以下の物性量を評価した。

a) 鉄液体の表面エネルギー

表面エネルギーを第一原理計算で求める場合は、スラブ構造(図1)とバルク構造のエネルギーの差が必要である。本研究では、バルク構造、スラブ構造ともに鉄原子数128個でシミュレーションを行った。バルク構造に対しては等温等圧(NPT)の第一原理分子動力学シミュレーションを2000Kでおこなった。一方、スラブ構造に対しては図1のような構造を用いて等温等積(NVT)のシミュレーションを同じく2000Kで行った。その結果、得られたエネルギーは1.9 J/m<sup>2</sup>であり、実験値の2.5 J/m<sup>2</sup>よりは小さい結果を得たが、その原因については現在検討中である。

b) 鉄液体中のホウ素拡散係数

B4C と鉄が共晶した場合は、ホウ素が鉄液体中を拡 散していくことになる。そのため、溶融進展を解析す るにはホウ素の拡散係数が重要になる。この拡散係数 を求めるため、鉄 127 個、ホウ素 1 個での第一原理分 子動力学を行った。この計算から平均二乗変位を求め (図 2)、その時間依存性から拡散係数を求めた。その 結果、鉄の拡散係数は 5.4×10<sup>-9</sup>m<sup>2</sup>/s となり、ホウ素の 拡散係数は 12.6×10<sup>-9</sup>m<sup>2</sup>/s であった。この結果から、ホ ウ素の拡散は非常に早く、鉄とホウ素の共晶の進展が 比較的早く進むことが予想される。



図1:表面エネルギー評価の ための鉄液体のスラブ構造。



図 2:鉄(Fe)とホウ素(B)の平 均二乗変位の時間依存。傾きが拡 散係数に相当する。

c) 液体鉄-B<sub>4</sub>Cの界面エネルギー

液体の鉄と B<sub>4</sub>C の界面エネルギーを評価した。界面エネルギーの計算に先立ち、液体鉄と同様の方法で 2000K での B<sub>4</sub>C の表面エネルギーを求めた。さらに図 3 のようなスラブ構造を用いて、同じく 2000K での界面エネルギーを評価した。その結果を表 1 に示す。

この結果では Fe-B<sub>4</sub>C の界面エネルギーは鉄と B<sub>4</sub>C が乖離することなく、安定に存在するこ とがわかる。また、シミュレーションの途中でホウ素が液体鉄中へ拡散していく様子が観測さ れた。



X1.2000K(9)X面 介面———————————————————————————————————				
	表面・界面エネルギー(J/m²)			
液体鉄表面	1.9			
B <sub>4</sub> C 表面	3.3			
Fe-B4C 界面	2.7			

#### 表1:2000K での表面・界面エネルギー

図 3:鉄-B<sub>4</sub>C 界面計算のための スラブ構造

#### (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。

#### 5.11.10 液体材料の第一原理計算

#### First-principles Calculation of Liquid Materials

板倉 充洋、中村 博樹、奥村 雅彦、小林 恵太、海老原 健一、山口 正剛、鈴圡 知明 シミュレーション技術開発室

#### (1) 利用目的:

新型炉の設計や、既往軽水炉における事故解析等においては固体・液体界面の特性が重要な パラメータとなる場合がある。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溶融し化学変化、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溶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。

#### (2) 利用内容·結果:

#### a) ADS 材料と液体金属の相互作用評価

ADS 炉の冷媒として使用される液体鉛ビスマス、および実験データのある液体インジウムに ついて、構造材料である鉄の表面での界面特性を有限温度の第一原理計算分子動力学を用いて 評価した。鉄のみ、液体金属のみの場合と界面がある場合のエネルギーを比較することで接触 界面の表面エネルギーを評価できる。さらに材料として極端な液体金属脆化が報告されている アルミ+液体ガリウムについても同様の計算を行い、脆化傾向についての知見を得る研究を行 った。その結果、まず極端な脆化の例として知られるアルミ・ガリウム系では表面エネルギー がガリウムによって 25%に低下するという結果が得られた。

次に鉄の場合については、鉛ビスマス、インジウムそれぞれで界面エネルギーが70%程度に 低下した。またエネルギー低下についてはインジウムの方が強く、き裂先端にインジウムおよ び鉛ビスマスを浸透させた実験でも破壊靭性の低下はインジウムの方が大きいという結果が得 られており、この界面エネルギーの低下が一つの脆化指標となることが分かった。一方で吸着 エネルギーが大きすぎると逆に二つの破面同士を接着する効果が出てくるが、これまでの当グ ループの計算においてもそのような吸着エネルギーが極端に大きい液体金属元素では実験で脆 化が報告されていないという知見を得ている。今後はそうした元素についても破壊に関連した 計算を行い脆化メカニズムの解明を行っていく。

#### b)制御棒溶融解析のパラメータ取得

制御棒は直径数 mm の B<sub>4</sub>C ペレットを厚さ数 mm ステンレス管に詰めたもので、接してい る部分で融点が下がり最初に溶ける。ステンレスの融点まで温度が上昇すると全体が溶融、移 行するがその時点で B<sub>4</sub>C が全て溶融ステンレスに包まれていると高い粘性で流動し B<sub>4</sub>C の酸 化は抑制される一方、B<sub>4</sub>C が溶けずに残っている場合は水蒸気で酸化しつつ崩落し、両者の場

#### JAEA-Review 2021-022

合で炉内での生成物が異なる。マクロな SA 解析では扱えない制御棒の内部構造の変化をより 細かいスケールで燃料棒一本に限定した移行解析により明らかにすることで過酷事故の炉内で の様相解明に貢献する。溶融した鉄が B<sub>4</sub>C 粒子の表面に接触しつつ浸透していく過程をメゾス ケールのフェイズフィールドモデルで再現することを目標とし、2020年はその際に必要となる 溶融鉄と B<sub>4</sub>C 界面におけるぬれ性を第一原理計算により評価した。計算の概要を図1に示す。



気液・cos(接触角)=固気 -固液

図1 B<sub>4</sub>C 固体・鉄液体の界面ぬれ性計算の概要

固液界面にぬれ性がある場合、粉末固体の隙間に液体が毛細管現象によって浸透していく駆動力が働く。一方でぬれ性がない場合は浸透が起こらない。ぬれ性は固体・液体・気体(真空)が接する点での接触角によって評価され、この角度が 90 度より小さいほどぬれ性が大きくなる。この角度はミクロスケールの計算により固液、気液、固気の三種類の界面の界面エネルギーを計算することで評価可能である。三種類の界面エネルギーを 2000K における有限温度第一 原理分子動力学計算で評価した結果、接触角は 70±10 度と評価された。この結果はぬれ性が あることを示しており、粉末への毛細管現象による液体鉄の浸透をモデル化する必要があるこ とが分かった。

c) 軽金属材料への応用展開

材料の特性に関する第一原理計算技術の応用展開として、科研費新学術領域「MFS 構造の科 学」に参画し、特異な機械的特性が報告されているマグネシウム合金における特徴的な規則構 造が生成される過程を詳細な第一原理計算で解析し、実験では分からなかった規則構造の内部 の原子構造を明らかにした。合金元素のYとZnが集積していく過程で格子の間に大きな空隙 が発生し、そこに周辺のMg原子が入り込むと同時に原子があるべき場所にない空孔が発生し、 その空孔が最終的には拡散し他の場所での合金元素の集積を加速するという、金属材料ではこ れまで報告されていない特殊な現象が起こることを第一原理計算で明らかにし、さらに空隙に 原子が入り込む過程はエネルギー活性を必要としないため、すべての合金元素集積クラスタに おいて格子間原子が存在しており、その種類は大部分が Mg、一部が Y 原子であるという、原 子スケールモデルの構築には欠かせない情報を得ることができた。本成果は Acta Materialia 誌 (IF=7.2) に発表した。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

■論文

- 1) M.Itakura, M.Yamaguchi, D.Egusa, E.Abe, Density functional theory study of solute cluster growth processes in Mg-Y-Zn LPSO alloys, Acta Materialia, Vol. 203, 116491
- 2) T.Tsuru, K.Shimizu, M.Yamaguchi, M.Itakura, K.Ebihara, A.Bendo, et al., Hydrogenaccelerated spontaneous microcracking in high-strength aluminium alloys, Scientific reports, Vol.10, No.1, pp.1-8

■口頭発表

3) 板倉充洋、中村博樹、奥村雅彦、小林恵太、"デブリの特性に関する計算材料科学的研究"、 日本原子力学会 2021 年春の年会、2021 年 03 月(招待講演)。

#### (4) 今後の利用予定:

ADS 材料に関しては、吸着エネルギーが大きいにもかかわらず脆化が報告されていない液体金属元素について鉄のき裂に液体金属が侵入した場合のエネルギーを計算し、き裂が進展する場合のエネルギー変化への影響を調べることで脆化機構への寄与を明らかにする予定である。また制御棒溶融解析については本年度得られた知見を元に機構論的な溶融解析を行い、その有効性を検証する予定である。

#### 5.11.11 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 鈴士 知明

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と基礎工燃料・材料工学ディビジョンは原子力構造材料の安全性 評価と新材料の設計に資するため、金属材料における格子欠陥や不純物元素挙動の計算手法を 開発している。2019年度からはこれまでの軽水炉・核融合炉等の材料に加え加速駆動炉(ADS) 材料を対象に加え開発した手法の応用を行っているところである。

本課題では、現行の軽水炉や ADS・核融合炉で使用される構造材料内で照射によって起こる 原子論的変化の課程で材料劣化に影響を与えるものを切り出してきて、原子論的な精度の高い 計算機シミュレーションを行うことにより、メソ及びマクロスケールの材料劣化モデルの基礎 データを得ることを主目的とする。また、これらの研究の礎として必要な照射を伴わない材料 の機械的特性の基礎的な理解、特に材料の塑性変形や破壊などのメカニズムの原子論的な理解 が不十分であるため、それらの材料挙動メカニズムの計算科学研究も同時に進める。

#### (2)利用内容·結果:

#### a) き裂進展研究

これまで行ってきた純鉄でのき裂進展研究において、へき開に関する分子動力学シミュレー ションに関する論文(図 1)を AIP Advances から出版し、エディターより注目論文(Editor's Pick)に選出された。この論文では図1にあるように、実験結果で観察されるへき開面が大規 模分子動力学シミュレーションによっても再現されたことである。また、水素脆化研究に関し て、水素が存在することによる空孔生成に関してモデル計算を行い、Metall Mater Trans A か ら論文が出版された。

b) 照射誘起の欠陥の挙動に関する研究

東北大学金属材料研究所と協力し、圧力容器の健全性に影響を与える因子の一つである材料 中に形成される照射誘起転位ループの解析を行った。東北大学は電子顕微鏡観察、課題申請者 は分子動力学シミュレーションを担当した。転位ループが転位と相互作用し一体化すると転位 の移動性が低下するしくみが実験・理論の両方から観察され、圧力容器脆化メカニズム解明に 重要な結果を得た。この成果は Materialia 誌に掲載された。また、圧力容器のクラッドの脆化 で問題となる Fe-Cr 合金系の硬化のモデリング研究をおこない、実験と良好な一致を示す結果 が得られ、J. Nucl. Mater 誌に論文が掲載された。



(a)、(b)、および(c)はそれぞれ{100}、{110}、{111}面でのへき開シミュレーションの結果で、き裂が進展する面が実験観察と同じ{100}面であることが示された。

c) プラズマ対向材としてのタングステンの照射効果研究

本課題はタングステン中の合金元素が照射効果に及ぼす影響をモデル化している。新型コロ ナウイルス感染症等の影響で実験のスケジュールが遅れており、実験結果を再現するためのモ デリング計算は来年度に持ち越し、今年度はキネティックモンテカルロコードの整備等を行っ た。また、これまでの活動をまとめた論文を Scientific.net シリーズの Spallation Materials Technology において出版した。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- E. Wakai, et al. "Effects of Helium Production and Displacement Damage on Microstructural Evolution and Mechanical Properties in Helium-Implanted Austenitic Stainless Steel and Ferritic/Martensitic Steel", Materials Science Forum, vol. 1024, Trans Tech Publications, Ltd. (2021) pp. 53-69.
- 2) T. Suzudo, "Computational Study of Solute Effects in Tungsten under Irradiation" Materials Science Forum, vol. 1024, Trans Tech Publications, Ltd. (2021) pp. 87-94.
- K. Ebihara, Y. Sugiyama, R. Matsumoto, K. Takai, T. Suzudo, "Numerical Interpretation of Hydrogen Thermal Desorption Spectra for Iron with Hydrogen-Enhanced Strain-Induced Vacancies", Metall Mater Trans A, Vol.52 (2021) pp. 257-269.
- 4) 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. Casella, D. J. Edwards, "Irradiation damages of structural materials under different irradiation environments", Journal of Nuclear Materials, Vol.543 (2021) 152503.

- 5) (エディター推薦論文)T. Suzudo, K. Ebihara, T. Tsuru, "Brittle-fracture simulations of curved cleavage cracks in *a*-iron: A molecular dynamics study", AIP Advances 10, (2020) 115209.
- 6) 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) 152306.
- 7) 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) 100778.
- 8) E. Wakai, N. Okubo, S. Takaya, Y. Nagae, T. Suzudo, H. Abe, M. Yamaguchi, and 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) 061008.

#### (4) 今後の利用予定:

材料の破壊メカニズムは未だによくわかっていないためその研究は原子力材料だけでなく 構造材料研究全体でも非常に重要性の高いものである。破壊は巨視的な影響を及ぼす現象で あるが、その本質は原子間結合の解離であり微視的な現象である。よって実験的手法では微 視的な観察が困難であり、分子動力学シミュレーションによる微視的な解析が重要である。 しかしながら、シミュレーションで使われる原子間ポテンシャルの精度が必ずしも十分とは 限らないという問題がある。このような問題を解決するため、機械学習によって高精度の原 子間ポテンシャルを作成する研究が行われており、次年度からはそのような機械学習ポテン シャルの応用を考える。

圧力容器脆化研究に関しては、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。共同で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解 像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。転位ループの分子動力学シミュレーションでも上記の原子間ポテンシャルの精度の問 題があり、過去の解析結果が原子間ポテンシャルの精度に影響を受けていないかどうかを機械 学習ポテンシャルによって検証していく。

#### 5.11.12 リアルタイム都市風況解析コード CityLBM によるアンサンブル計算

#### Ensemble Simulation with the Real-time Urban Wind Code CityLBM

長谷川 雄太、小野寺 直幸、井戸村 泰宏 高度計算機技術開発室

(1)利用目的:

高度計算機技術開発室では、建物の密集する都市部を対象 とした風況および汚染物質拡散の即時予測を行うことを目 的として、格子ボルツマン法に基づくリアルタイム都市風況 解析コード(CityLBM、図1)の開発を進めている。これま での研究開発により、適合格子細分化法 (AMR法)の導入に よるメモリ使用量削減、GPU スパコンに対する実装の最適化 図 1 CityLBM コードによる により、数 km 四方に 1 m オーダーの高解像度格子を適用し 都市部風況・汚染物質拡散解析 たリアルタイム解析を達成している。



都市風況は乱流の影響を強く受け、不確実性の大きな流れとなっているため、アンサンブル 計算により統計量を算出し、計算の不確かさを評価することが重要であるが、アンサンブル計 算を行うには膨大な計算資源が必要である(例えば、1 ケース 4 GPU の計算で 100 アンサンブ ル計算を行う場合、4×100 = 400 GPUの計算が必要)。このため、本研究ではスパコンの利用 が必須となる。

#### (2) 利用内容·結果:

オクラホマシティでの野外拡散実験[1]を対象とし て、実証解析を行った。本実験は、オクラホマシティ中 心部で汚染物質を模擬した気体 (SF6)を放出し、汚染 物質の濃度を市内で観測したものである。汚染物質の放 出点および観測点は、それぞれ図 2 の Release point お よび A~H に示す通りである。実験当日の天気は快晴 で、風向は平均して南西から南南西の方向である。実験 では、30分間の連続放出が3回(9:00,11:00,13:00)、 パフ放出 (パルス放出)が4回 (15:00, 15:20, 15:40, 16:00)、それぞれ行われた。令和2年度の実証解析では、 このうち連続放出の条件を対象として計算を行った。ま た、CityLBM の計算条件としては、水平4km 四方の計 算領域を設定した。計算領域の中心約 1km 四方にオク ラホマシティの建物データを反映した物体を配置する



図 2 オクラホマシティの野外拡散 実験における汚染物質の放出点およ び観測点(A~H、St.II)、公園緑地 の範囲 (Botanical garden)

とともに、その周辺領域に地表面付近の乱流境界層の発達を促進するラフネスブロックをラン ダムに配置した。さらに、図2で Botanical garden と示される緑色の領域には植生モデル[2] に基づく外力項を導入した。実気象場を反映した風況を設定するため、境界条件として、事前 にメソスケール気象モデル(WRF; Weather Research and Forecast)で計算された風速および 温度を入力した。このとき、WRFの計算結果は水平 500 m 解像度および1分間隔の出力であ る。このような解像度・時間刻みの大きく異なるデータを CityLBM に連続的に入力するため、 ナッジングデータ同化 [3] を導入した。すなわち、CityLBM の計算領域の上空および東西南 北の四面に数百 m 程度の厚みを持った緩和領域を設定し、緩和領域内で、WRF データを空間・ 時間的に線形補間した値を目標値として平均的な流れ場を修正する緩和計算(ナッジング)を 行った。また、東西南北の四面は、ナッジングデータ同化に加えて周期境界を適用し、流れ場 の乱流成分を維持するモデルを採用した。これらの計算条件を設定することで、実気象場に風 況を近づけつつ、ナッジングデータ同化による乱流の過度な散逸を回避し、妥当な風況場を設 定することが可能となった。以上の計算条件を用いて、以下の2種類の計算を行った。

まず、2m 解像度・4km 四方・36 GPU の計算条件にて9アンサンブル計算を行い、汚染物 質濃度を実験値と比較した。図3に示すように、計算結果はアンサンブルごとに大きくばらつ くが、アンサンブル平均においては実験値とよく一致している。アンサンブル平均値は、factorof・2(計算と実験値の比が0.5倍~2倍以内)の指標において正答率76%を記録しており、既往 研究と比較しても極めて高い精度である。以上より、都市街区における風況および物質拡散は、 乱流等の影響を受けて本質的に排除不可能なばらつきを含んでいるが、アンサンブル計算を行 うことでばらつきの範囲内で実験を高精度に再現できることが示された。また、本成果は、こ のような高解像度・高精度の計算が、GPU スパコンを用いた高速計算によりリアルタイムに実 行できることを示した世界初の事例である[成果リスト1),2)]。

次に、アンサンブル計算の統計的な性質を詳細に評価するため、4 m 解像度・4 km 四方・4 GPUの計算条件にて100アンサンブル計算を行った。この時、物理時間1分間隔で30分間、 汚染物質濃度の測定を行ったため、サンプル数は100×31=3100サンプルである。本計算にて 汚染物質濃度のヒストグラムを確認したところ、図4に示す結果が得られた。一般に、ヒスト グラムは正規分布に従うことが望ましいが、汚染物質濃度のヒストグラムは正規分布に従わず、 ゼロ付近の値が頻出するような分布になることがわかった。この分布は正規分布よりも対数正 規分布やガンマ分布でよく近似でき、したがって汚染物質の拡散過程は乗算的な確率過程に基 づく不確実性を有していることが明らかになった[成果リスト 3)]。今後この知見をもとに、 都市風況・汚染物質拡散解析に対するデータ同化手法の実装を検討する予定である。

参考文献

- M. J. Leach, "Final Report for the Joint Urban 2003 Atmospheric Dispersion Study in Oklahoma City: Lawrence Livermore National Laboratory participation," 2005.
- [2] R. H. Shaw and A. R. Pereira, "Aerodynamic roughness of a plant canopy: A numerical experiment," Agric. Meteorol., vol. 26, no. 1, pp. 51-65, 1982.
- [3] C. Paniconi, M. Marrocu, M. Putti, and M. Verbunt, "Newtonian nudging for a Richards equation-based distributed hydrological model," Adv. Water Resour., vol. 26, no. 2, pp. 161-178, 2003.





図 3 オクラホマシティにおける野外拡散 実験に対するアンサンブル計算結果。中空 点は各アンサンブルの結果、塗り潰し点は 全アンサンブルの平均値。

図 4 100 アンサンブル計算における汚染 物質濃度のヒストグラム。PDF (青線) は 対数正規分布によるフィッティング曲線。

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- N. Onodera, Y. Idomura, Y. Hasegawa, H. Nakayama, T. Shimokawabe, T. Aoki, "Realtime tracer dispersion simulation in Oklahoma City using locally-mesh refined lattice Boltzmann method," Boundary-Layer Meteorology, 2021. doi: 10.1007/s10546-020-00594-x
- 小野寺直幸,井戸村泰宏,長谷川雄太,中山浩成,下川辺隆史,青木尊之,「プレス発表:リアルタイムで高精度な汚染物質拡散シミュレーションを世界で初めて実現—都市構造物の詳細を捉え予測精度を大幅に向上—」,https://www.jaea.go.jp/02/press2020/p21012801/, (参照:令和3年1月28日).
- 3) Y. Hasegawa, N. Onodera, Y. Idomura, "Ensemble wind simulations using a meshrefined lattice Boltzmann method on GPU-accelerated systems," Proceedings of Joint International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications + Monte Carlo 2020 (SNA + MC 2020), 2020.

#### (4) 今後の利用予定:

今後、これまでの検証計算で用いてきた汚染物質放出条件(30分間の連続放出)よりも再 現が困難とされているパフ放出(パルス放出)の実験の条件で検証計算を行うことを計画して いる。パフ放出では、アンサンブル数 300 が必要になると見積もられており、従来を上回る大 アンサンブル計算が必要である。また、並行して、都市風況のアンサンブル計算におけるデー タ同化手法の開発についても検討を行なっているが、アンサンブルデータ同化では 30 アンサ ンブル以上の計算が必要となる見込みである。このような大規模計算を行うため、引き続き HPE SGI8600 を利用する予定である。

### 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。

新システムの更新においては、量研機構との共同調達を経て、原子力科学研究所に従来比で 5.2 倍(12.6PFLOPS)の理論演算性能となる「HPE 製 SGI8600」を中核とする大規模な GPU+ CPU のハイブリットシステムの導入が決定した。

新システムの導入作業では、COVID-19の影響により、スパコンメーカ及び工事業者の来訪制 限を課せられたが、現場の下見をリモートで実施、一部作業を感染拡大地域外の業者に変更する などの対応により、当初の予定どおり令和2年12月1日から運用を開始した。

新システムは、原子力分野の取り扱う大規模かつ複雑化する様々な事象の解明や予測のための 数値シミュレーション、AI 技術を用いた解析・ビッグデータ、さらにデータサイエンスの研究 及びこれらを活用した研究に対応した研究基盤と、さらなるユーザ層・課題の拡大に向けた従来 にはない新しいインフラを提供するものである。この新しいインフラを利活用した研究成果の着 実な創出に貢献すべく、計算機運用及び利用支援に係るスタッフが全力でサポートしていく所存 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2年度における大型計算機システムの利用状況を調査し、利用コア時間の多かった利用者に報告書作成を依頼した。利用者から提出された報告書を編集・校正し、本報告集が完成した。多忙にもかかわらず報告書を作成して頂いた利用者の皆様並びに本報告集作成にご協力を頂いた関係者各位にこの場を借りて感謝申し上げる。

令和3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、河津 諒平
事務局 :桧山 一夫、篠塚 尚也

## 付録

### 付録A

	ICE X				SGI86	00	Oakbridge-CX *
	バッチ 処理 件数	<ul><li>会話</li><li>処理</li><li>件数</li></ul>	コア 時間 (h)	バッチ 処理 件数	<ul><li>会話</li><li>処理</li><li>件数</li></ul>	コア 時間 (h)	コア 時間 (h)
4月	43,983	5,030	40,454,757				
5月	27,385	4,752	43,008,612				
6月	34,397	5,995	40,472,534				203,566
7月	-	-	-				9,069,631
8月	18,704	4,663	16,587,577				3,857,073
9月	43,715	5,208	17,260,314				4,566,061
10 月	46,069	5,537	17,764,908				10,122,806
11 月	23,711	3,209	11,014,886				13,868,842
12 月				25,997	7,873	20,187,890	17,638,611
1月				26,040	6,921	27,245,809	
2 月				17,141	6,042	25,129,246	
3月				23,617	6,559	28,556,564	
合計	237,964	34,394	186,563,588	92,795	27,395	101,119,509	59,326,590

#### 表 A.1 令和 2 年度大型計算機システムの利用実績

\*東京大学スーパーコンピュータシステム

#### 付録 B

	ICE X	SGI8600	Linux	パソコン	network	その他 (利用一般)	合計
4月	35		0	0	11	7	53
5月	14		0	0	13	3	30
6月	41		0	1	8	10	60
7月	19		0	5	9	12	45
8月	17		0	4	4	7	32
9月	24		0	1	6	9	40
10 月	25		2	0	7	13	47
11 月	17		0	1	14	6	38
12 月		110	1	0	2	10	123
1月		43	0	1	7	7	58
2月		58	0	2	3	5	68
3月		35	1	2	11	3	52
合計	192	246	4	17	95	92	646

表 B.1 令和 2 年度利用相談件数(可視化を除く)

#### 表 B.2 令和 2 年度可視化相談件数

1.	1. 可視化相談(技術支援)			
1	ICE X・SGI8600 及び遠隔可視化用表示装置の可視化相談・技術支援(79 件)			
2	PC 版 MicroAVS インストール支援(14 件)			
3	PC 版 AVS/Express インストール支援(8 件)			
4	ParaView クラサバモードインストール支援(4 件)			
5	Ensight DR インストール支援(1 件)			

#### 2. 可視化ツール提供等

- ① MicroAVS ユーザ向け AVSExpress による可視化処理マニュアルの作成
- ② 並列版 ParaView 向け非構造格子データ分割ツールの開発
- ③ 気象データ可視化ツール GMT (Generic Mapping Tools)の環境整備

## 著者名別 論文索引

### A-Z

Cheng-Jun Xia	104
Ivan Lobzenko	89, 94
Thomsen Bo	

## あ

28
42
, 94

### い

石﨑	梓	26
板倉	充洋	52, 167, 173
井戸村	す 泰宏	179
岩元	大樹	99
岩元	洋介	44

## う

上澤	伸一郎	66, 71, 80, 83
宇田川	豊	32
内堀	昭寛	113
上羽	智之	121

## え

海老原	〔 健一	173
遠藤	佑哉	133

## お

大川	富雄69
大西	弘明107
岡垣	百合亜

奥村	啓介	 
奥村	雅彦…	 152, 156, 167, 173
小野	綾子	 
小野₹	产 直幸	 

## か

加藤	正人130
上平	雄基

## き

菊地	紀宏116
北垣	徹152
北村	竜明136, 139
城戸	健太朗

## く

久保	光太郎	23
操上	広志	142
桑垣	一紀	119

## ح

小林	恵太147, 152, 156, 167, 173
米田	政夫62
菰田	宏119

## さ

坂本	健作	136, 139
坂本	雅洋	
佐藤	大樹	53

## l

志賀	基之	147,	164
柴田	卓弥	136,	139

## す

菅原	隆徳71, 74, 102
杉本	貴則107
鈴木	貴行66, 77, 80
鈴圡	知明91, 173, 176
数納	広哉147

### せ

芹澤	愛	97
----	---	----

## そ

曽我	彰11	9
----	-----	---

## た

回祝 1日本100,	100
滝野 一夫	119
田口 俊弘	127
田中 正暁116,	121
谷中 裕	119

#### う

土屋	晴文60
都留	智仁

### て

寺田 敦彦.....145

### と

		_	
堂田	哲広		.121

## な

永井	佑紀150
永武	拓64
中野	敬太
中村	博樹130, 147, 152, 167, 170, 173
中山	浩成

### **ね** 根本 俊行......121

## は

橋本	慎太郎	 . 47
長谷川	雄太	 179
浜瀬	枝里菜	 121

### ર્સ

### ほ

+品 口	すお	66	71	20	Q 2
西日	旦 [[1]	00,	11,	60,	00

### ま

前田	亮58
町田	昌彦130, 147, 150, 152, 161, 167
松田	規宏86
丸山	修平119
丸山	敏毅104

### み

湊	太志	••••••		 56
ミノ	、ラケ	オビデウ	マリウス	 . 124

### む

村井	直樹:	35
ココント	巨小灯	50

### Ł

森 道康.....107

## や

柳沢	秀樹113
山口	瑛子152, 156, 167
山口	崇博142
山口	正剛91, 159, 173
山下	晋 69, 71, 74, 77, 83, 136, 139
山田	進150, 161

## よ

横田	光史110
横山	賢治121
吉川	龍志116
吉田	啓之66, 69, 77, 80, 83
吉田	航142

## わ

渡部	晃	113
渡辺	奈央	

This is a blank page.