JAEA-Review 2024-044 DOI:10.11484/jaea-review-2024-044



令和 5 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 FY2023 (April 1, 2023 – March 31, 2024)

高性能計算技術利用推進室

HPC Technology Promotion Office

システム計算科学センター

Center for Computational Science & e-Systems

A-Review

January 2025

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 研究開発推進部 科学技術情報課 〒 319-1112 茨城県那珂郡東海村大字村松 4 番地 49 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 (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.en).

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 Library, Institutional Repository and INIS Section, Research and Development Promotion Department, Japan Atomic Energy Agency.

4-49 Muramatsu, Tokai-mura, Naka-gun, Ibaraki-ken 319-1112, Japan

E-mail: ird-support@jaea.go.jp

© Japan Atomic Energy Agency, 2025

令和5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

(2024年9月13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。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、 過去十数年にわたり、毎年度、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、第4期中長期計画にて重点化して取り組むとされた「安全性向上 等の革新的技術開発によるカーボンニュートラルへの貢献」、「原子力科学技術に係る多様な 研究開発の推進によるイノベーションの創出」、「東京電力福島第一原子力発電所事故の対処 に係わる研究開発の推進」、「高レベル放射性廃棄物の処理処分に関する技術開発の着実な実 施」、「原子力安全規制行政及び原子力防災に対する支援とそのための安全研究の推進」等と いった研究開発活動に利用された。本報告は、令和5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 FY2023 (April 1, 2023 – March 31, 2024)

HPC Technology Promotion Office

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

(Received September 13, 2024)

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.

Over the past 10 years or so, the publication of papers utilizing computational science and technology at JAEA has accounted for about 20 percent of the total publications each fiscal year. The supercomputer system of JAEA has become an important infrastructure to support computational science and technology.

In FY2023, the system was utilized in R&D activities that were prioritized in the Fourth Medium- to Long-Term Plan, including contributing to carbon neutrality through the development of innovative technologies such as improving safety, creating innovation by promoting diverse R&D related to nuclear science and technology, promoting R&D in response to the accident at TEPCO's Fukushima Daiichi Nuclear Power Station, steadily implementing technological developments for the treatment and disposal of high-level radioactive waste, and supporting nuclear safety regulatory administration and nuclear disaster prevention by promoting safety research for these purposes.

This report presents a great number of R&D results accomplished by using the system in FY2023, as well as user support, operational records and overviews of the system, and so on.

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

目 次

1.	はじめ	に	1
2.	原子力	機構の大型計算機システム環境	4
3.	令和 5	年度における計算機利用実績	6
	3.1	システム稼働率・ノード利用率	6
	3.2	大型計算機システムの組織別利用実績	7
4.	大型計	算機システムの利用支援	10
	4.1	計算機利用における支援	11
	4.1.	利用相談・可視化相談	11
	4.1.	プログラム開発整備	11
	4.1.	プログラム最適化チューニング	13
	4.2	計算機利用技術の向上に向けた教育(講習会・セミナー)	15
5.	大型計	算機システム利用による研究成果	16
	5.1	原子力基礎工学研究センター	16
	5.1.	合金化と組織制御のための原子・電子シミュレーション	16
	5.1.	高濃度合金の機械学習ポテンシャル開発	20
	5.1.	放射線照射によって駆動される新規物性の探索	23
	5.1.4	PHITS ユーザ入力支援ソフト PHITS-Pad の開発	
	5.1.	過酷事故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29
	5.1.	機構論的限界熱流束予測評価手法確立のための二相流挙動解析	32
	5.1.	福島第一原子力発電所2号機を対象とした空冷時における原子炉格納容器	内
		の熱挙動解析	35
	5.1.	核熱連成シミュレーションの実現に向けた熱流動パラメータの推定	
	5.1.9	界面追跡法に基づく混相流解析手法開発	41
	5.2	先端基礎研究センター	44
	5.2.	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	44
	5.3	高速炉サイクル研究開発センター	47
	5.3.	高速炉蒸気発生器内ナトリウム-水反応現象数値解析コードの高度化	47
	5.3.2	炉心支持板のたわみによる添加反応度解析	50

5.3.3	CNWG·先進燃料物性計算科学研究	54
5.3.4	SPIRAL コードによる混合対流条件下大型燃料集合体試験解析	57
5.4 敦貧	賀総合研究開発センター	61
5.4.1	渦電流·超音波連成式を用いた 2D-EMAT コード	61
5.5 廃炊	炉環境国際共同研究センター	65
5.5.1	燃料デブリ取出し技術への適用に向けたレーザー加工技術シミュレーション	/
手法の関	開発(1)、(2)	65
5.6 核 ⁷	不拡散・核セキュリティ総合支援センター	68
5.6.1	粒子拡散モデル FLEXPART の SGI8600 への移植と並列化	68
5.6.2	保障措置検認のための遅発ガンマ線分光法の開発	71
5.7 安全	全研究センター	74
5.7.1	燃料挙動解析コード FEMAXI-8 の高速化	74
5.8 シン	ステム計算科学センター	75
5.8.1	軽元素が示す特異な反応経路の探索と生体分子等の分子機能の計算科学研究	175
5.8.2	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	78
5.8.3	粘土鉱物へのラジウムの吸着構造の解明	81
5.8.4	第一原理計算による原子力材料劣化機構の研究	84
5.8.5	水素材料の第一原理分子動力学計算	87
5.8.6	機械学習分子動力学による原子力分野における非晶質物質の高精度物性解析	² 91
5.8.7	原子・分子シミュレーションによる核燃料の物性評価	94
5.8.8	構造材料の第一原理計算	97
5.8.9	原子力分野での物性計算科学技術の高度化	100
5.8.10	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	103
5.8.11	都市風況解析に対するアンサンブルカルマンフィルタを用いたハイパーパラ	i.
	メータ最適化	105
5.8.12	機械学習を用いた都市汚染物質拡散の即時予測手法の開発	108
5.8.13	適合細分化格子版 JUPITER の界面追跡モデルの高度化	110
5.8.14	乱流アンサンブルデータ同化の GPU 実装	113

) に	6. おわり
		付録
		1124
100	34 (-+	
	論又究引	者者名別

Contents

1.	Introduct	ion1
2.	Supercon	nputer System of JAEA4
3.	Compute	r Usage Records in FY20236
	3.1 Ava	ilability and Utilization Rate
	3.2 Sec	tor Computer Time
4.	User Sup	port of Supercomputer System of JAEA 10
	4.1 Sup	oport for the Use of Supercomputer System of JAEA11
	4.1.1	Help Desk11
	4.1.2	Program Development and Maintenance11
	4.1.3	Program Optimization Tuning
	4.2 Tra	ining for Computer Usage Techniques (Tutorials, Seminars)15
5.	Research	and Development Activity by using Supercomputer System of JAEA16
	5.1 Nuc	clear Science and Engineering Center16
	5.1.1	Atomic and Electronic Structure Calculations for Alloying and Defect
		Structures
	5.1.2	Development of Machine Learning Potentials for High-Entropy Alloys20
	5.1.3	Exploration of Novel Physical Properties Driven by Irradiation23
	5.1.4	Development of User Input Support Software PHITS-Pad
	5.1.5	Development of Numerical Simulation Method for Thermal Fluid Flow
		Phenomena on Severe Accident Condition in Reactor Pressure Vessel
	5.1.6	Two-Phase Flow Analysis for Establishment of Critical Heat Flux
		Prediction Method Based on Mechanism
	5.1.7	Thermal Behavior for Air-cooling in PCV of Fukushima Daiichi Nuclear
		Power Station Unit 2
	5.1.8	Estimation of Thermal-Hydraulics Parameters for Neutronics/Thermal-
		Hydraulics Coupling Simulation
	5.1.9	Development of Multiphase Flow Analysis Method Based on Interface
		Tracking Method

JAEA-Review 2024-044

5.2	Ad	vanced Science Research Center
5.2	2.1	Research for Ground State and Excitation Dynamics in Low-Dimensional
		Strongly Correlated Systems
5.3	Fas	st Reactor Cycle System Research and Development Center47
5.3	3.1	Improvement of Analysis Code for Sodium-water Chemical Reacting Jet in
		a Steam Generator in a Sodium-cooled Fast Reactor47
5.3	3.2	Analysis of Reactivity Induced by Deflection of Core Support Plate50
5.3	3.3	Numerical Study of Physical Properties of Advanced Fuel in CNWG54
5.3	3.4	Analysis of Large-Scale Fuel Assembly Experiment at Mixed Convection
		Condition by SPIRAL
5.4	Tsu	aruga Comprehensive Research and Development Center61
5.4	4.1	2D-EMAT Code using a Coupled Eddy Current-Ultrasound Formulation61
5.5	Col	llaborative Laboratories for Advanced Decommissioning Science65
5.5	5.1	Development of Laser Processing Technology Simulation Method for Fuel
		Debris Retrieval Technology(1),(2)65
5.6	Int	egrated Support Center for Nuclear Nonproliferation and Nuclear Security68
5.6	3.1	Installation and Parallelization of the Particle Dispersion Model
		FLEXPART
5.6	3.2	Development of Delayed Gamma-ray Spectrometry for Nuclear Safeguards
		Verification
5.7	Nu	clear Safety Research Center74
5.7	7.1	Optimization/Refactoring of Fuel Performance Code FEAMXI-874
5.8	Ce	nter for Computational Science & e-Systems75
5.8	8.1	Computational Studies on Anomalous Reaction Related with Light Elements
		and Resultant Biomolecular Function75
5.8	8.2	Atomic-Scale Simulations of Radioactive Substances Using Machine Learning78
5.8	8.3	Investigation of Adsorption Structure of Radium on Clay Minerals81
5.8	8.4	First-principles Study of the Degradation of Nuclear Materials
5.8	8.5	First-principles Molecular Dynamics Simulations of Hydrogen Materials

JAEA-Review 2024-044

5.8.6	Analysis of Physical Properties of Amorphous Materials in the Nuclear Field by
	Machine Learning Molecular Dynamics91
5.8.7	Atomic Simulations of Physical Properties for Nuclear Fuel94
5.8.8	DFT Calculation of Structural Materials97
5.8.9	Development of Numerical Techniques for Materials in the Research Field of
	Atomic Energies
5.8.10	Atomistic Simulation of Microstructural Development of Irradiated Materials $\dots 103$
5.8.11	Hyperparameter Optimization Using Ensemble Kalman Filter for Urban Wind
	Simulation
5.8.12	Development of an Immediate Prediction of Urban Pollutant Dispersion Using
	a Machine Learning Approach108
5.8.13	Advanced Interface Capturing Model in the JUPITER-AMR110
5.8.14	GPU Implementation of Ensemble Data Assimilation of Turbulence113

6.	Conclusion	
	1.	115
Ap	opendices	
Au	uthor Name Index	

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、「安全性向上等の革新的技術開発による カーボンニュートラルへの貢献」、「原子力科学技術に係る多様な研究開発の推進によるイノ ベーションの創出」、「東京電力福島第一原子力発電所事故の対処に係わる研究開発の推進」、 「高レベル放射性廃棄物の処理処分に関する技術開発の着実な実施」、「原子力安全規制行政 及び原子力防災に対する支援とそのための安全研究の推進」などに重点化して取り組むとして 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5年度に原子力機構の発表した査読付論文の総数は901件であった。このうち計算科学技術 を利用した論文は226件である。この論文数は、全論文の25%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 26 年度~令和 5 年度] (原子力機構が発表した査読付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 26 年度~令和 5 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26年度~令和5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、高速炉サイクル研究開発センター)の研究成果創出貢献度を図 1.2に示す。

本報告は、原子力機構における令和5年度の大型計算機利用成果をまとめたものである。2章 に原子力機構の大型計算機システムの構成概要を、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

令和2年12月より運用を開始した大型計算機システム(原子力機構スーパーコンピュータシ ステム)は、GPGPU演算部とCPU演算部から構成される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。大型計算機システムの構成を図2.1に示す。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と、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。主な仕様を表2.1に示す。



図 2.1 大型計算機システムの構成

表 2.1 大型計算機システムの性能(主な仕権	な仕様)
-------------------------	------

	GPGPU 演算部 HPE SGI8600		CPU 演算部 HPE SGI8600	ISV アプリ処 理部 HPE ProLiant DL540 Gen10	ログイン処理 部 HPE ProLiant DL380 Gen10
タイプ	スプ	カラ	スカラ	スカラ	スカラ
総演算性能 (TFLOPS)	1,253	8,486	2,801 116.12 7.936		7.936
総主記憶容量 (TB)	102	-	132.375	18	0.768
コア数/ノード	4	8	40	112	40
ノード数	2'	72	706	12	2
ODI	Intel Xeon Gold 6248R	NVIDIA Tesla V100 SXM2	Intel Xeon Gold 6242R	Intel Xeon Platinum 8280	Intel Xeon Gold 6242R
Cru	24 core 3.0 GHz imes 2 CPU	32GB Memory x 4	20 core 3.1 GHz imes 2 CPU	$\begin{array}{c} 28 \mathrm{core} \\ 2.7 \mathrm{GHz} \\ \times 4 \mathrm{CPU} \end{array}$	20 core 3.1 GHz imes 2 CPU
演算性能/コア (GFLOPS)	96.0	162.5	99.2	86.4	99.2
メモリ/ノード (GB)	384	128	192	1536	384
ノード間 通信性能	片方向 (全二	50GB/s 二重)	片方向 50GB/s (全二重)	片方向 25GB/s (全二重)	片方向 25GB/s (全二重)
OS	Red Enter Linu	Hat prise x 7.7	Red Hat Enterprise Linux 7.8	Red Hat Enterprise Linux 7.8	Red Hat Enterprise Linux 7.8
コンパイラ	For C/C	tran)++	Fortran C/C++	Fortran C/C++	Fortran C/C++
バッチシステム	PBS Pro	fessional	PBS Professional	PBS Professional	PBS Professional
ファイルシステム	DDN EXASc	aler (Lustre)	DDN EXAScaler (Lustre)	DDN EXAScaler (Lustre)	DDN EXAScaler (Lustre)

令和6年3月末 現在

3. 令和5年度における計算機利用実績

3.1 システム稼働率・ノード利用率

大型計算機システム (SGI8600) は、安定して運用され年間稼働率は 98.8%を達成した (図 3.1: 紺の棒グラフ)。運用に際しては、電気料金の高騰により原子力科学研究所における節電目標 (令 和4年度電力消費量の 2%減)が要請された。演算装置の処理速度を規定するクロック数変更時の 消費電力を評価し、令和5年度 10月より GPGPU 演算部と CPU 演算部は CPU クロック数を 2.8GHz から 2.6GHz に下げて運用を継続した。この対策により、令和4年度電力消費量と比べ て 1.28%減の節電を図った。運用の停止は、年度切替え作業 (4月、3月)、構内全域停電 (7月)、 臨時保守作業 (7月、12月、2月) によるものである。また、ノード利用率は 91%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)。



3.2 大型計算機システムの組織別利用実績

令和 5 年度の大型計算機システムの利用者数は 416 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 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部門分野別ノード時間利用実績

大型計算機システムの利用ノード時間は、4月からの累積で525万ノード時間が利用された。 部門分野別の利用ノード時間を図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、原子炉格納容器内の熱挙動解析、 炉心内非定常熱流動事象評価解析、放射性物質の原子スケールシミュレーションなどの解析計算 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 (ノード 時間)	関連する 成果報告
1	福島第一原子力発電所 2 号 機を対象とした空冷時にお ける原子炉格納容器内の熱 挙動解析	原子力基礎工学 研究センター	JUPITER 6,400	357,885	5.1.7 項
2	過酷事故時及び定常時にお ける炉心内非定常熱流動事 象評価解析手法の開発	原子力基礎工学 研究センター	JUPITER 7,680	242,140	5.1.5 項
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	システム計算科学 センター	VASP 1,600	63,837	5.8.2 項
4	粘土鉱物へのラジウムの吸 着構造の解明	システム計算科学 センター	VASP 2,400	30,799	5.8.3 項
5	軽元素が示す特異な反応経 路の探索と生体分子等の分 子機能の計算科学研究	システム計算科学 センター	VASP 6,400	17,048	5.8.1 項
6	機械学習分子動力学による 原子力分野における非晶質 物質の高精度物性解析	システム計算科学 センター	VASP, LAMMPS, n2p2 640	12,826	5.8.6 項
7	原子・分子シミュレーション による核燃料の物性評価	システム計算科学 センター	VASP 768	1,249	5.8.7 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

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·可視化相談

利用相談・可視化相談では、大型計算機を含む計算機全般及び可視化技術について、利用に関 する相談対応、効果的利用についてのコンサルティング、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5年度の利用相談は年間436件、可視化相談は年間58件寄せられた(詳細は付録Bに示す)。

4.1.2 プログラム開発整備

プログラム開発整備は、利用者に代わって専門スタッフにより効率的にプログラム開発を行う もので、原子力機構内各部門で共通に使用される原子力プログラムなどの新規プログラムの作成 及び既存プログラムの整備・改良を行っている。また、計算機性能の飛躍的向上に伴い、シミュ レーション計算結果のデータも莫大なものになっており、これら計算結果の理解には可視化が欠 かせない。このため、データの可視化に対するプログラム開発整備も利用支援の重要な構成要素 の一つである。令和5年度は、表 4.1に示す選定要件に基づき大型計算機利用委員会により承認 された4件のプログラムを対象に、プログラム開発整備作業を実施した。

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	2 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	_
(P4) 大規模データの可視化処理を行うプログラム	—
(P5) 福島支援等、緊急対応が必要なプログラム	2 件
(P6) 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 5 年度の主な作業について表 4.2 に示す。特に、原子力機構内で共通に使用されるとして 選定されたアプリケーションのプログラム開発整備作業のうち1件では、令和4年度に引き続き、 国内外のユーザ数が 9,000 名を超える汎用モンテカルロ計算コード(PHITS) について、PHITS 入力ファイル作成専用エディタ(PHITS-Pad)β版の開発を支援した。これらの開発した機能は、 PHITS 公式版(ver.3.34)で一般公開され、更なる研究成果の増加や利用者拡大が期待される。

表 4.2 主な令和 5 年度プログラム開発

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	熱過渡応力の確率 論的評価に係るプ ログラムの開発 (P1)	ARKADIA の一部を構成する、熱過渡応力時刻歴の評価とその結果に含まれる不確実性の分析を行うプログラム(Excel VBA により作成)を、Linux 上で動作可能な Python スクリプトで開発したことで、本機能が ARKADIA(Linux 環境)に統合され、Linux 環境でシームレスに利用可能となった。	5.3.2 項
2	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 PHITS 用テキストエディタ(PHITS-Pad)の開発を支 援。令和4年度に開発した Windows 版及び Mac 版の PHITS- Pad に対し、①GUI に関連する諸動作、 ②データの検索と 置換、 ③字句解析とヒント表示の機能を追加した。これに より、特に初心者にとって敷居の高い PHITS の利用が容易 となった。	5.1.4 項
3	福島第一原子力発 電所の燃料デブリ 取出し技術へのレ ーザー加工技術適 用に向けたシミュ レーション手法の 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、レーザー照射を模擬した金属溶融 と水噴流条件(噴流速度:20.0m/sと126.9m/s、ノズル先端 距離:0.02m/sと0.05m/s)での実験値による解析計算を支 援。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た。また、間欠噴流による条件で の解析を実施し、安定した計算継続と溶融スラグの移行挙動 を確認した。これにより、溶融スラグの移行挙動を再現でき るようになり開発完了となった。	5.5.1 項

4.1.3 プログラム最適化チューニング

プログラム最適化チューニングでは、大型計算機システムで実行されるプログラムについて、 高速化・並列化チューニングを行い、実行効率の改善、処理時間の短縮を実現することで、利用 者の研究活動を加速させるとともに計算資源の有効活用を図っている。例えば、チューニングに より、計算時間が 20%短縮されれば、計算機資源が 20%増加した効果をもたらすため、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、並列化の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が高く、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並列化効率・実行 効率の改善や GPGPU 化の必要があるプログラムを募集している。令和5年度は、表 4.3 に示す 選定要件に基づき大型計算機利用委員会にて承認された5件のプログラムを対象に、プログラム 最適化チューニング作業を実施した。

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	2 件
(T4)福島支援等、緊急対応が必要なプログラム	—
(T5) SGI8600 への整備が必要なプログラム	1件

表 4.3 プログラム最適化チューニングにおける選定要件と選定件数

令和 5 年度の主な作業について表 4.4 に示す。SGI8600 への整備が必要なプログラムとして 選定された、2D-EMAT-coupled に対して、GPU 対応ライブラリ (cuSolverSP、cuSolverRF) の組み込みを実施し、従来に比べ 2.41 倍の速度向上を得た。大規模課題で使用するプログラムと して選定された GPGPU 利用者支援においては、GPU 版 JUPITER に対して、ループ中の IF 分岐のループ外への移動、関数のインライン展開や計算式の演算量の削減による最適化を行 い、従来に比べ 1.6 倍の速度向上を得た。本コードでは、令和 6 年度における使用ノード時間(4 月現在の予定)を用いて算出すると約 617,000 ノード時間を要する計算が GPGPU 化の最適化に より約 386,000 ノード時間で計算できるよう高速化されたことになる。

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	GPU 版 JUPITER の	TVD rugge_kutta3 関数に	最適化前に比べ 1.60 倍の高	5.1.8 項
	最適化作業	対し以下の最適化を実施。	速化を達成	
	(T1)	① GPU 処理部分の不要な		
		同期処理の無効化		
		② CPU 処理部分のループ		
		中の IF 分岐をループ		
		外へ移動、関数のインラ		
		イン展開や計算式の演		
		算量を削減		
2	2D-EMAT-coupled \exists	① GPU 対応ライブラリ	直接法 cuSolver ライブラリ	5.4.1 項
	ードの GPU 移植作業	(cuSolverRF) の組み	を採用することにより	
	(T5)	込み	GPGPU 演算部へ移植し、変	
			更前に比べ 2.41 倍の高速化	
			を達成	
3	FEMAXI-8 コードの高	①複数スレッド動作時に	ローカル変数(データ共有属	5.7.1 項
	速化作業	エラーを引き起こしかね	性)をスレッドプライベート	
	(T3)	ない変数の共有(モジュ	に指定して競合回避	
		ール変数)を中心に 9 種		
		類のコードを修正		
4	FLEXPART コードの	 並列化手法を粒子分割 	計算対象となる粒子が、計算	5.6.1 項
	高速化作業	から領域分割への変更	領域内で大きく偏在するた	
	(T3)	を試行	め、領域分割では性能向上が	
		② 逐次処理部分の calcpar	見込めないことが判明	
		関数の並列化		

表 4.4 主な令和5年度高速化・並列化作業

4.2 計算機利用技術の向上に向けた教育(講習会・セミナー)

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

令和 5 年度の講習会は、SGI8600 の利用講習会と可視化講習会を併せて 5 回開催(初級レベル:2回、中級レベル:3回)した。また、可視化講演会も開催した。講習会と講演会には、延べ184名が参加した(表 4.5)。実習による講習会も含まれており、確実な技術習得を指向した。

項	テーマ 技術レベル	開催日時	内容	形式	参加者
1	利用方法 中級	令和5年 6月28日	ディープラーニング講習会 (ディープラーニング実践編)	講義	92名
2	利用方法 初級	令和5年 8月25日	GPGPU プログラミング講習会 (OpenACC の入門的な講習)	講義	35 名
3	利用方法 中級	令和5年 10月20日	並列化・高速化講習会 (OpenACC の実践的な講習)	講義	27名
4	利用方法 中級	令和5年 11月14日	ParaView 中級者向け講習会	講義 実習	23 名
5	利用方法初級	令和6年 1月24日	初級者向け MicroAVS 講習会	講義 実習	7名

表 4.5 令和 5 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 原子力基礎工学研究センター Nuclear Science and Engineering Center

5.1.1 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、ロブゼンコ イバン 照射材料工学研究グループ

(1) 利用目的:

構造材料には、様々な結晶構造を持つ合金系が用いられる。それらの力学特性は、一般に各 構造の転位運動に対する応答として決定され、古典的な強化則を用いて理解されてきた。例え ば、面心立方構造合金の力学特性は、(111)面の積層欠陥を考慮した転位構造でよく理解され、 六方晶合金では、転位運動に関しては、c/a 比によって決まる構造に由来した異方性を考慮す ることである程度整理できる。一方、体心立方構造(BCC)構造を持つ金属では、純金属や2 元系希薄合金などの単純な材料でも、他の結晶構造では見られない特異な変形挙動を示すこと が知られている。特に近年では、高濃度の合金元素によって生み出される新たな特性が発見さ れ、GPa オーダーを越える強度と延性・靭性を両立した高濃度多元系合金(ハイエントロピー 合金: HEA) などの優れた力学機能をもつ金属材料が開発されている。しかしその多くは偶然 発見されたものであり、優れた機能を有する合金を戦略的に創製する手法の開発が期待されて いる。そこで本研究は、電子構造に基づいて構造材料の力学機能を設計することが可能な、将 来の社会基盤となる革新的な材料開発スキームを確立することを目的とする。優れた力学機能 設計および事故耐性燃料被覆管材料へ応用を目指すものであり、新規原子炉構造材料への重要 な研究として位置づけられる。HEA は配置の多様性から力学特性の基礎となる欠陥特性も多 様なバリエーションを持っているため、大型計算機を用いて大規模モデルの転位芯構造の第一 原理計算を行い、膨大な場合に対する欠陥の特性の評価を行う。

(2) 利用内容·結果:

1) 令和5年度課題の達成目標

当該課題では、BCC 合金系の未知の変形機構の起源を解明し、優れた力学機能を戦略的に 設計することを目的としている。電子構造に基づく欠陥構造の解析をマクロな力学機能の設計 に繋げることを達成目標として、とりわけ BCC 合金に対する問題について検討を行った。

2) 令和5年度の研究成果とその重要性

① BCC-Nb 希薄合金の酸素固溶に対する異常な強化機構の解明

体心立方耐熱金属におい て、ある種の溶質原子は硬化 と脆化を誘発する。特に格子 間酸素は Nb に劇的な硬化を もたらし、酸素を添加した Nb 合金の降伏応力は純 Nb の2倍以上になる。この酸素 による劇的な硬化は、転位と 酸素の相互作用が比較的弱 いため、従来のメカニズムで は説明できない。本研究で は、らせん転位と酸素、空孔 との3体相互作用に着目し、 2体問題では説明できない異 常な強化機構の検討を行っ た。第一原理計算の結果、酸 素と転位の相互作用は斥力 であるが、空孔と酸素のペア が形成されると、らせん転位 との引力相互作用が強まる



図1 Nb 中の空孔一酸素ペアによる異常な強化機構. (a-b) 解析 モデルの模式図、(c-d) 転位運動の移動障壁、(e) 転位運動の際 の酸素原子のシャッフリング.

ことが明らかになった。さらに、この特徴は、Nb 中でも、炭素や窒素では生じない酸素の特 有の性質であることがわかった。空孔と酸素はそれぞれ単体では、転位運動の障壁への寄与は それほど大きくないが、空孔と酸素のペアは、孤立した空孔と酸素の格子間よりも転位運動の エネルギー障壁をより大きく増加させることがわかった。この過程において、酸素のユニーク な八面体-四面体シャッフリングプロセスが劇的な硬化に支配的に寄与しているという、新し いメカニズムを発見した(図1)。このように、酸素添加 BCC 合金では、広く分布する空孔・酸 素対が転位運動の強力な障害物として振る舞い、損傷蓄積と連続的な硬化を引き起こすことを 明らかにした(論文(1))。

② BCC 構造を持つ耐火ハイエントロピー合金の力学特性の起源に関する研究

耐火ハイエントロピー合金 (RHEA) は、超高温用途への応用の可能性から注目されている。 しかし、体心立方結晶をもつため面心立方 HEA よりも脆く、さらに、主要な Ni 基超合金や FCC 合金系の材料よりも著しく低いクリープ強度を示す。これらの欠点を克服し、RHEA を 実用的な構造材料に発展させるためには、強度と延性を制御する要因の基礎的な理解を深める 必要がある。本研究では、TiZrHfNbTa と VNbMoTaW という 2 つのモデル RHEA を調査し、 実験により前者は 77K まで塑性 圧縮可能であるのに対し、後者は 298K 以下では圧縮不可能である ことを示した。

TiZrHfNbTa の六方最密充填 (HCP) 元素は、すべての構成元 素が BCC である VNbMoTaW と 比較して、転位芯エネルギーを下 げ、格子歪みを大きくし、せん断 弾性率を下げることで、高い延性 と相対的に高い降伏強度につなが ることがわかった (図 2)。転位芯 構造は VNbMoTaW ではコンパク トで、TiZrHfNbTa では拡張する ことがわかった(図2)。また、主 すべり面が両者で異なることが確 認された。これらは、いずれも HCP 元素の濃度に起因している ことが第一原理計算により明らか になった。この結果は、HCP 元素 と BCC 元素の比率に関連した電 子構造の変化を利用して、強度、



図 2 二つの RHEA の力学特性の違い.第一原理計 算による格子ひずみと転位構造解析.

延性、すべり挙動を制御し、より効率的な発電所や輸送のための次世代高温材料を開発できる ことを実証している。本成果は、Nature Communication に掲載され、プレスリリースを行っ た(論文(2))。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

●投稿論文(査読あり)(出版済8報、掲載可1報)(他課題のものを除く)

- <u>T. Tsuru</u>, I. Lobzenko, S. Ogata, W.-Z. Han, "First-principles analysis of the effects of oxygen, vacancy and their complex on screw dislocation motion in BCC Nb", J. Mater. R es. Tech. 28(2024) pp.1013–1021.
- 2) <u>T. Tsuru</u>, S. Han, S. Matsuura, Z. Chen, K. Kishida, I. Lobzenko, S. I. Rao, C. Woodward, E. P. George, H. Inui, "Intrinsic factors responsible for brittle versus ductile nature of refractory high-entropy alloys", Nature Comm. 15 (2024), 1706.
- 3) <u>T. Tsuru</u>, K. Nishimura, K. Matsuda, N. Nunomura, T. Namiki, S. Lee, W. Hegemoto, T. Matsuzaki, M. Yamaguchi, K. Ebihara, K. Shimizu, H. Toda, "Identification of hydrogen trapping in aluminum alloys via muon spin relaxation method and firstprinciples calculations", Metall. Mater. Trans. A 54 (2023) pp.2374-2383.

- 4) H. Somekawa, <u>T. Tsuru</u>, A. Singh, "Grain boundary plasticity in Mg binary alloys by segregation of p-block element", Mater. Sci. Eng. A. 893(2024).146066.
- 5) 矢野伶・田中將己・山﨑重人・森川龍哉・<u>都留智仁</u>, β型チタン合金 Ti-22V-4Al における 変形・破壊挙動の温度依存性, 軽金属, 73,10 (2023) pp. 497-503.
- K. Kurihara, I. Lobzenko, <u>T. Tsuru</u>, A. Serizawa, "Effects of Local Bonding between Solute Atoms and Vacancy on Formation of Nanoclusters in Al-Mg-Si Alloys", Mater. Trans. 64 (2023) pp.1930–1936.
- Y. Chong, R. Cholizadeh, B. Guo, <u>T. Tsuru</u>, G. Zhao, S. Yoshida, M. Mitsuhara, A. Godfrey, N. Tsuji, "Oxygen interstitials make metastable β titanium alloys strong and ductile", Acta Mater. 257 (2023) 119165.
- 8) H. Mori, <u>T. Tsuru</u>, M. Okumura, D. Matsunaka, Y. Shiihara, M. Itakura, "Dynamic interaction between dislocations and obstacles in bcc iron based on atomic potentials derived using neural networks", Phys. Rev. Mater. 7 (2023) 063605.
- 9) T. Tsuchiya, K. Uttarasak, S. Lee, A. Ahmed, Š. Mikmeková, K. Nishimura, N. Nunomura, K. Shmizu, K. Hirayama, H. Toda, M. Yamaguchi, <u>T. Tsuru</u>, J. Nakamura, S. Ikeno, K. Matsuda, "Existence of hexagonal tabular β-phase in Al-Mg-Si alloys containing noble metal elements", Mater. Today Commun. 35 (2023) 106198.

●基調・招待講演(筆頭3、連名1)

- (Invited)<u>T. Tsuru</u>, I .Lobzenko, DFT-based description of dislocation core and dynamics in BCC HEAs, THERMEC 2023 :12th International Conference on Advanced Materials, July 2-7,2023, WIEN, Austria.
- 11) (Invited) <u>T. Tsuru</u>, First-principles study on mechanical properties and dislocation core in BCC refractory high-entropy alloys, The 11th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing, Nov.19-23, 2023, Jeju, Korea.
- 12) (依頼講演)<u>都留智仁</u>,電子構造に由来した転位構造と運動の記述,日本機械学会計算力学 部門 A-TS 01-15 研究会, 2023 年 12 月 18 日,大阪大学.

●その他

13) (成果普及情報誌)<u>都留智仁</u>,「計算科学を用いて合金の強度を評価する-元素戦略による 電子状態計算に基づく合金設計-」,原子力機構の研究開発成果 2023-24, p.40.

5.1.2 高濃度合金の機械学習ポテンシャル開発

Development of Machine Learning Potentials for High-Entropy Alloys

ロブゼンコ イバン、都留 智仁 照射材料工学研究グループ

(1) 利用目的:

High/Medium-entropy alloys (HEA/MEA), which contain three or more principal elements, are part of the novel materials group called multi-component alloys. These alloys have attracted extensive attention from materials science communities because they exhibit outstanding mechanical properties such as high strength and ductility. However, the vast number of compositional variants of multi-component systems hinders efficient experimental studies. Such problems of HEA as mechanisms of deformation and the influence of chemical short-range order are among topics that require better understanding.

Theoretical studies of mechanical properties are mainly associated with two levels of approximation: (i) quantum-mechanical (density functional theory, DFT) and (ii) classical molecular dynamics (MD). The recently emerged method of building inter-atomic potentials using artificial neural networks trained on a data set calculated in DFT is a unique approach that combines the advantages of both classical and quantum-mechanical approximations. Due to the usage of machine learning techniques, such interatomic potentials are called machine learning potentials, or MLPs.

In this project, as shown in the schematic Fig. 1, the combination of quantum-mechanical and classical modeling is used to improve the understanding of the mechanical properties of multi-component alloys.



Fig. 1. The use of artificial neural networks in predictions of mechanical properties of materials.

The use of the HPE SGI8600 large-scale supercomputer is necessary at the dataset preparation stage. That step requires calculations of a wide variety of atomic structures to obtain a representation of the system's energy landscape. The variations of the energy depending on the geometrical characteristics of atomic environments in different structures are then captured by the MLP. To reach high accuracy of further classical MD calculations with the MLP in this project the highly reliable DFT calculations of the energy of corresponding structures for the dataset are employed, which requires large computational resources and is only possible on a supercomputer. In this project, the HPE SGI8600 is also used at the stage of MLP training, for the capabilities of the nodes with graphical processor units (GPUs) significantly improve the speed of such calculations.

(2) 利用内容·結果:

1) Research targets of FY2023 project

The work performed in FY2023 was focused on improving the quality of the previously built machine-learning potentials (MLPs) for BCC multi-component alloys. The MLPs were improved and allowed for the modeling of dislocation motion in classical molecular dynamics (MD) simulations.

2) FY2022 research results and their importance

With the improved MLPs, the mechanical properties were studied in two BCC mediumentropy alloys (MEA), MoNbTa and ZrNbTa. The two materials were chosen due to their close composition and the most stable BCC phase. Therefore, these alloys open up the possibility of unveiling the role of group IV element Zr in the mechanical properties of MEAs.

1. Screw dislocation shape in BCC ternary alloys.

To study the shape of screw dislocation, it was introduced at the center of the (111) plane of the structure with 400,000 atoms. It is known from the elasticity theory that a dislocation introduces a long-range stress field, and the size of the model system should be big enough to reduce the influence of the model's boundaries. The accessibility of such big atomic models is the main advantage of classical MD used in the present project. Another advantage of a big atomic system is in the possibility to fulfill the condition of randomness required for MEAs.

After the introduction of the dislocation, the system was relaxed, and the shape of the dislocation core was analyzed. In previous works on MoNbTaW refractory HEA two types of screw dislocation cores were found. Due to the inhomogeneity of chemical environments, the core may suffer the extension on the (110) plane, which makes it non-compact if such an extension is large. Our analysis of the differential displacement maps shows that the dislocation core in MoNbTa is compact, while it is of ZrNbTa is non-compact.

2. Mechanisms of strength associated with dislocations mobility in BCC ternary alloys.

Applying the shear strain to the system makes it possible to study the movement of the dislocation. In the present study, the dislocation dynamics under shear were analyzed, and two main strengthening mechanisms were found. The first one is so-called pinning (see Fig. 2a), which is seen when, due to the unique chemical composition in a particular region of the alloy, the energy barrier of the movement of the dislocation part around that region increases, which prevents the whole dislocation from moving further. The second mechanism is the so-called cross-slip (see Fig. 2b), which is characterized by the movement of some parts of the dislocation in a direction not consistent with the slip plane.



Fig. 2 Atomistic configurations representing pinning and cross-slip, the two main mechanisms of strengthening in BCC MEAs.

(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2報)

- 1) <u>I.Lobzenko</u>, T.Tsuru, H.Mori, D.Matsunaka, Y.Shiihara, Implementation of atomic stress calculations with artificial neural-network potentials, Mater. Trans., 64, 10, (2023), pp. 2481-2488, doi:10.2320/matertrans.MT-M2023093
- 2) <u>I.Lobzenko</u>, T.Tsuru, Y.Shiihara, T.Iwashita, First-principles atomic level stresses: application to a metallic glass under shear, Mater Res. Expr. 10, 8, (2023), pp. 085201-085213, doi:10.1088/2053-1591/acf2da

●国際・国内会議(2件)

- 3) <u>I.Lobzenko</u>, Y.Shiihara, H.Mori, D.Matsunaka, T.Tsuru "Atomic stress distribution near Al surfaces, calculated using artificial neural network interatomic potential" THERMEC' 2023, Vienna University of Technology, Austria, 2023.
- 4) <u>I.Lobzenko</u>, Y.Shiihara, H.Mori, D.Matsunaka, T.Tsuru, "Developing interatomic potentials for mechanical properties of multi-component alloys using machine learning technique", The Japan Institute of Metals and Materials 2023 Autumn Meeting, University of Toyama, Japan, 2023.

5.1.3 放射線照射によって駆動される新規物性の探索

Exploration of Novel Physical Properties Driven by Irradiation

関川 卓也

放射線挙動解析研究グループ

(1) 利用目的:

本研究の目的は DNA を始め、様々な物質に対して放射線による物性変化を追う計算システムを確立することである。そのシステムを用いることで、従来の新物質探索で用いられてきたパラメータに放射線照射を新たなパラメータとして追加することができるため、放射線駆動物性学という新たな学問を開拓することが可能になり、新しい物質設計の指針を提案することを目指す。

特に次世代のナノ材料として、化学的強度やサイズ等に優れる DNA について様々な研究が 行われてきたが、DNA の電子状態は一次元的であり不純物散乱の影響を大きく受けやすく、 金属化の実現は困難であった。そこで本研究では不純物を伴わずに電子物性を変えられる放射 線照射に注目するとともに、これまで例のない放射線生物影響の初期過程の大規模シミュレー ションに挑戦する。

スーパーコンピュータを利用する必然性を述べる。DNA の二重らせん構造を再現するため には最低でも 650 原子から構成される単位構造が必要であり、その電子状態を第一原理計算 によって解明することは、通常のワークステーションレベルのメモリでは不可能である。しか し、原子力機構のスーパーコンピュータ SGI8600 ではジョブクラス mc64 において 64 ノー ドをフルに用いて 11520 GB のメモリを用いることで 650 原子の計算が可能となる。また、 DNA の安定構造を求めるために約 3000 ノード時間を必要とするが、通常利用の 12000 ノー ド時間では大幅に不足するため、大口利用の必要性及び緊急性がある。

(2) 利用内容•結果:

1) 令和5年度課題の達成目標

申請者が所属する放射線挙動解析研究グループでは、放射線輸送計算コード PHITS を開発 している。本研究では最初に PHITS により放射線と物質の相互作用を計算する。次に、第一 原理計算ソフトウェア OpenMX により放射線と物質の相互作用の結果、物質に生じる分子構 造・電子状態変化を原子レベルで計算する。最後に、第一原理計算から得た電子状態の結果を 基に理論モデルを組み、電子相関を取り込んで具体的な新規物性を解明する。

現時点で、DNA に関しては密度汎関数理論の枠組みの問題により、系全体から平均1個の 電子を取り除くような計算しかできないが、OpenMX の擬ポテンシャルを改良することによ って局所的なホールを実現する。本研究の成果を国内学会(日本物理学会、日本原子力学会) や国際会議(REI 21)で発表し、proceedings 等に論文投稿する。

2) 令和5年度の研究成果とその重要性

PHITS により炭素線が DNA に引き起こす電離数を計算し、第一原理計算ソフトウェア OpenMX を用いて電離数と Guanine, Cytosine のペアが一様に連なった poly(CG)の分子構 造・電子状態変化の関係を原子レベルで計算した。その結果、1~20の電離数において中性状態では遺伝情報を担う Guanine が化学反応に主に寄与し、電離数が多くなると全体の構造を 支える主鎖が化学反応に主に寄与することが明らかになった(図1)。一番簡単な配列ではあ るが、電離数による電子状態変化を統一的に理解できた。

また、新規物性が期待される二価、三価の poly(CG)について第一原理計算から得た電子状態の結果を基に理論モデルを組むことができた。これによって、電子相関を取り込んで具体的な新規物性を解明するステップに繋げる準備が整った。この過程で、DNA の電離が進むごとに塩基と主鎖の波動関数の混成が大きくなり、希土類元素で見られる"重い電子状態"と非常に似た電子状態の兆候が現れた。これは希土類元素を含まない DNA に放射線照射を行うことで"重い電子状態"が実現することが期待される結果であり、放射線照射によって駆動される新規物性の端緒を掴んだと考えている。

具体的な成果としては、電離数が多い場合の計算結果を REI21 の proceedings として Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, B に論文を出版済みであり、国際会議での ポスター発表二件、国内学会では第78回日本物理学会の口頭発表一件、第三回量子医科学会 における招待講演の口頭発表を行った。



© 2024 Elsevier B.V., its licensors, and contributors.

図 1. (a)1 価、(b) 20 価 DNA の化学反応サイト。DNA 近傍に生成された放射線分解化学種 はこれらのサイトと反応し、DNA 損傷が形成されていく[成果リスト論文 1]。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文

【出版済】【査読有】【IF = 1.279】【謝辞: Numerical calculations were performed using
 … and the supercomputer HPE SGI8600 in the Japan Atomic Energy Agency.】 Takuya
 Sekikawa, Yusuke Matsuya, Beomju Hwang, Masato Ishizaka, Hiroyuki Kawai,
 Yoshiaki Ōno, Tatsuhiko Sato, Takeshi Kai, "Changes in molecular conformation and

electronic structure of DNA under ¹²C ions based on first-principles calculations",投稿時期: 2023年10月27日,投稿先: Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, B, 548, 165231 (2024) 6p.

国際会議

- 2) T.Sekikawa, Y.Matsuya, H.Beomju, M.Ishizaka, H.Kawai, Y.Ōno, T.Sato, T.Kai, "Detailed molecular conformational changes and electronic structure of DNA irradiated with low-energy radiation based on first-principles calculations", The 21st international conference dedicated to research relating to radiation effects in insulators and non-metallic materials, 2023, Fukuoka.
- 3) T.Sekikawa,Y. Matsuya, H.Beomju, M.Ishizaka, H.Kawai, Y.Ōno, T.Sato, T.Kai, "Firstprinciples calculations of DNA irradiated with a proton and a carbon ion beam", The International Symposium on Quantum Science, Technology and Innovation, 2023.

国内会議

- 4) 関川卓也,ファン・ボンジュ,石坂優人,松谷悠佑,川井弘之,大野義章,佐藤達彦,甲斐健師,"放 射線誘起正孔がもたらす DNA の分子構造と電子状態変化の第一原理計算",日本物理学 会第78回年次大会(2023年).
- 5) 関川卓也,ファン・ボンジュ,石坂優人,松谷悠佑,川井弘之,大野義章,佐藤達彦,甲斐健師,"放 射線生物影響の最初期過程に関する計算機シミュレーション-DNAの放射線損傷による 電子状態への影響-",日本量子医科学会第3回学術大会(2023年,招待講演).

5.1.4 PHITS ユーザ入力支援ソフト PHITS-Pad の開発

Development of User Input Support Software PHITS-Pad

橋本 慎太郎 放射線挙動解析研究グループ

(1) 利用目的:

放射線挙動解析コード PHITS は、任意の 3 次元体系における様々な放射線の挙動を解析す ることができる汎用のモンテカルロ計算コードである。令和 6 年 3 月時点で PHITS の登録者 数は 9,000 名を超えており、放射線検出器開発、加速器遮蔽設計、医療応用、線量評価といっ た幅広い分野で利用されている。一方、PHITS を実行するためには、多くのパラメータの意 味と入力形式を理解する必要がある。初心者にとっては特に、これらをマニュアルなどで確認 する手間が PHITS を継続的に利用する際の敷居を高くしていた。そこで我々は、ユーザがス トレスなく入力ファイルを作成できるように、ユーザ支援を行うための様々な機能をもつソフ トウェアの開発を進めてきた。この PHITS 用テキストエディタ PHITS-Pad にはパラメータ の情報を容易に参照可能なヒント表示機能が実装されており、入力ファイルの作成が従来より 簡便となるため、PHITS を用いた研究開発の更なる進展が期待される。

(2)利用内容·結果:

PHITS-Pad には、通常のテキストエディタの機能に加えて、PHITS 固有のパラメータの強 調表示やその意味をヒントとして表示する機能の他、PHITS を実行するショートカットキー が整備されている。これらの機能を活用することにより、ユーザは適切に各パラメータを設定 することが容易となる。本稿では、これらの特長について紹介する。

● 固有パラメータの強調表示

図1にPHITS-Padによるファイル作成時の画面を示す。"Title"や"Parameters"といっ たセクション名の他、"icntl"や"maxcas"といった文字列に色が付き、これらが PHITS 固 有のパラメータであることが視覚的に確認できるようになっている。一方、図1の7行目に示 すように、正しくは"maxbch"であるパラメータを"mxbch"と入力した場合は、文字列が 灰色となるため容易にタイプミスを発見できる。

🗗 C:¥	phits¥lecture¥b	asic¥lec01¥lec01.i	inp - PhitsPad								—		×
ファイル(F) 編集(E) t	食索(S) 表示(V)	プログラム(P)	オプション(0)	ヘルプ(H)								
	7 🗋 🖨 🖨	0 🙆 👌	X 🖻 🛍		~ [1 🕹 🔹							
1	1 [Title]												
21	2 minimized input file for lecture												
3		-											
4	[Parame	eters]											
5	icntl	=	0) #	(D=0)	3:ECH	5:NO	R 6:9	SRC 7,	8:GSI	H 11	:DSH	12
6	maxcas	=	50) #	(D=10)	numb	er of	part	icles	s per	one	bat	ch
7	mxbch	=	2	#	(D=10)	numbe	r of	batch	nes				

図 1. PHITS-Pad によるファイルの作成画面。
また、パラメータにはその入力値によって PHITS 実行時の動作を大きく変化させるものが ある。図1の5行目にある"icntl"もその一つであり、例えば"0"の場合は放射線の振る舞 いを模擬する粒子輸送計算が実行され、"1"の場合は輸送計算で参照される核反応断面積等の 数値データが出力される。この種類のパラメータについては、その入力値にも色が付き、次に 紹介するヒント表示機能が有効となるため、各入力値の意味を容易に確認することができる。

● ヒント表示機能

PHITS 固有のパラメータやその入力値について、その意味や入力形式を小さなウィンドウ で説明するのがヒント表示機能である。図2に、"icntl"パラメータのヒントを表示させた画 面を示す。初期設定では、入力したパラメータの右側にカーソルがある状態で2秒経つと自動 的に表示され、カーソルを別の行に移動させると消える。PHITS パッケージ内には様々なサ ンプルファイルが用意されており、そのファイル中のパラメータの意味を確認する際に非常に 便利な機能である。

P C¥phits¥lecture¥basic¥lec01¥lec01.inp - PhitsPad —		×
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) プログラム(P) オプション(O) ヘルプ(H)		
1[Title]		^
2minimized input file for lecture		
3		
4 [Parameters]		
5 icntl = 0 # (D=0) 3:ECH 5:NOR 6:SRC 7,8:GSH 11:	DSH	12
6 icntl 💽 50 # (D=10) number of particles per one	batc	h
7 <mark>(D=0)基本動作オプション。</mark> 2 # (D=10) number of batches		
8		~
<		>
Codec: utf-8 Length: 2,285 Lines: 58 Line: 5 Column: 6		

図 2. ヒントウィンドウの表示。

ヒントウィンドウを表示させる方法は変更可能であり、自動的に表示する設定から、必要に 応じて手動で表示させる設定に変えることができる。手動の場合、ヒントを表示させたい文字 列を範囲選択し、右クリックで出るポップアップからヒントの確認を選択することで表示でき る。図3に示したのは、icntl=0の時のヒントを表示させるために、その入力値"0"を範囲選 択して、ポップアップを出現させた状態である。"ヒントの確認"をクリックすることで、 icntl=0の時のヒントが表示される。

4	[Parameters	1				
5	icntl =	0	¢.	元に戻す(U)	Ctrl+Z	:NOR 6:SRC 7,8:GSH 11:DSH 12
6	maxcas =	50	1	再実行(R)	Ctrl+Y	of particles per one batch
7	maxbch =	2	X	切り取り(T)	Ctrl+X	of batches
8				⊐ピ-(C)	Ctrl+C	:
9	[Source]		B.	 貼り付け(P)	Ctrl+V	
10	s-type =	1		削除(D)		c axial source
11	proj =	proton	×	クリア(L)		lent particle
12	dir =	1.0				of beam [cosine]
13	r0 =	0.		すべて選択(A)	Ctrl+A	
14	z 0 =	0.		<mark>と</mark> ントの確認(H)		ion of z-axis [cm]

図 3. 手動でヒント表示機能を動作させる際の表示画面。

また、ヒントウィンドウは上にあるタイトルバーをドラッグ&ドロップすることで移動させ ることができる。この場合は、カーソルが別の行に移動してもヒントウィンドウは消えないの で、そのヒントを見ながらパラメータの値を入力できる。図4に示したのは、"x-type"パラ メータが"2"の時のヒントウィンドウを右側に移動させた際の画面である。x-typeは3次元 空間のx座標に関するメッシュの切り方を決めるパラメータであり、x-type=2の時は、最小 値と最大値及びそれらの間の分割数をそれぞれ xmin、xmax、nxで指定する。ヒントウィン ドウにはこれらの入力形式が具体的に示されているため、各パラメータを適切に入力すること ができる。

🕞 * Ci¥phits¥lecture¥basic¥lec01¥lec01.inp - PhitsPad — 🗌								
ファイル(F) 編集(E) 検索(S) 表示(V) プログラム(P) オプショ	ン(O) ヘルプ(H)							
	✓ Q. 3 1							
28 [T-Track]	x-type = 2							
29 mesh = xyz	群数と最小値、最大値を与え、線形で等分点が与えられる。							
30 x-type = 2	この次に群数、最小値、最大値を次の様な書式で与えます。 X and							
31	x-type = 2							
32	nx = number of group							
33	xmin = minimum value							
34 y-type = 1	xmax = maximum value							
35 ny = 1	<pre># number of y-mesh points</pre>							
36 -5.0 5.0								
37 z-type = 2	# z-mesh is linear given by zmin, zmax and							
38 nz = 200	# number of z-mesh points							
39 $zmin = -20$.	<pre># minimum value of z-mesh points</pre>							
40 $zmax = 20.$	<pre># maximum value of z-mesh points</pre>							

図 4. x-type=2 の時のヒント表示画面。

プログラム実行のショートカットキー

PHITS プログラムのショートカットキーも整備されている。Ctrl+Shift+P とキー入力する と、PHITS-Pad で表示中のファイルを使って PHITS が実行される。PHITS パッケージ付属 の ANGEL、DCHAIN、PHIG-3D といったプログラムも同様であり、これらの入力ファイル を編集して直ぐに各プログラムを実行することができる。

令和5年度の開発により、テキストエディタとしての基本的な機能に加えて、ユーザにとっ て強力な入力支援となる各種機能を実装した PHITS-Pad が完成した。本ソフトは令和6年3 月公開の PHITS バージョン 3.34 に組み込んで配布している。今後は、パラメータが新規に追 加された場合に対応できるように、ヒント用のデータベースシステムを構築する。また、環境 設定のダイアログを開発するなどして、テキストエディタとしての機能を充実させる予定であ る。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 T. Sato, Y. Iwamoto, S. Hashimoto, T. Ogawa, T. Furuta, S. Abe, T. Kai, Y. Matsuya, N. Matsuda, Y. Hirata, T. Sekikawa, L. Yao, P.E. Tsai, R.N. Hunter, H. Iwase, Y. Sakaki, K. Sugihara, N. Shigyo, L. Sihver and K. Niita, Recent improvements of the Particle and Heavy Ion Transport code System - PHITS version 3.33, J. Nucl. Sci. Technol. 61 (2024) pp.127-135.

5.1.5 過酷事故時及び定常時における炉心内非定常熱流動事象評価解析手法の開 発

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

> 山下 晋、永武 拓、鈴木 貴行、福田 貴斉 炉物理・熱流動研究グループ

(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へ影響を与えた局所の溶融事象などが起こっ 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な予測が重要である。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三次元熱流動解析コード JUPITER の開発を行っ ている。本課題は福島支援に関する利用①:「過酷事故時及び定常時における炉心内非定常熱 流動事象評価解析手法の開発」により実施されたものである。

(2) 利用内容·結果:

1) 令和5年度課題の達成目標

令和5年度は、JUPITERのSA時炉内構造物溶融挙動解析としてXR-2試験解析による妥当性確認、ADSビーム窓周りの熱流動解析と構造連成解析機能構築、気泡上昇流解析を通じたJUPITERの妥当性確認の実施を目標とした。

2) 令和5年度の成果報告とその重要性

令和 5 年度の達成目標として設定した研究(炉内構造物挙動解析、ADS ビーム窓周りの熱 流動解析と連成解析機能の構築、気泡上昇流解析)を実施し、以下の成果を得た。

· 炉内構造物挙動解析

JUPITER の過酷事故時の燃料集合体内部溶融移行挙動解析の妥当性確認を目的として、 200mm×200mm×1400mmの解析規模を有する XR-2 試験解析を実施した。図1は燃料集合 体内部へ溶融物を流入させ、その後の移行挙動とその温度分布である。計算領域上面からステ ンレスとボロンカーバイドの共晶溶融物を実験と同じ流量になるように流入させている。図よ り、集合体内部で複雑な移行挙動を示していることが分かる。下部では、炉心支持板内部や燃 料支持金具内部に溶融物が移行している様子が確認できる。また、制御棒上の温度の時間変化 を実験値と比較した結果、定量的に一致することを確認した。

XR-2 試験は実験時間が合計 2000 秒におよぶ。JUPITER のような機構論的流体解析手法 では、非常に長時間の解析となるため、安定かつ高速な計算が必須である。本課題で、相変化 モデルにおいてマッシーゾーン生成の解析を考慮していたが、それが計算不安定性に影響を与

えていたことが分かっ た。よって、本解析は 凝固速度が本来マッシ ーゾーンを考慮すべき 時間スケールよりも短 いことに着目し、マッ シーゾーンを考慮しな いこととした。その結 果安定に計算ができる ようになり、2000秒の 計算が現実的に可能で ある見通しを得た。 CFD による詳細解析 が困難であると言われ ていた長時間の溶融解 析実施の見通しを得ら れたことは、SA解析コ ードの溶融・移行解析 部分の不確かさへの参 照解の提供を可能にす るなど重要な成果であ ると言える。今後、他 の比較項目(集合体内 部での凝固量、集合体 外部への排出量など) を定量的に比較する予 定である。



図3 圧力分布(左)、変形形状とミーゼス応力分布(右)

<u>ADS ビーム窓(BW)</u>周りの熱流動解析

図2(左)に示す模擬BW実験体系を用いた実験から得られた斜線領域のy方向速度分布に 対しJUPITERの結果との比較結果を図2(右)に示す。図より、実験結果とJUPITERの結 果は良い一致を示しており、JUPITERのBW詳細熱流動場解析に対する妥当性を確認した。 これらの結果を論文誌にまとめ公開した。次に、JUPITERと構造解析ソフトFrontISTRに よる流体構造連成解析プラットフォームを開発しその試解析を実施した。図3(左)は JUPITERにより計算された圧力場であり、噴流が衝突するBW先端で最も高い圧力分布とな っている。この結果を独自に開発したコンバータを用いて FrontISTR 用のデータに変換し変形解析を実施した。図3(右)より、噴流が衝 突する BW 先端で最も大きく変形していることが分かる。これによ り、流体構造連成プラットフォームの適用性を確認した。

本研究成果は、BW の設計への貢献のみならず、SA 時の炉内構造 物熱変形による事象進展解析にも応用できる重要な成果である。今後 は、two way 連成解析を実現するため、変形後の形状データを JUPITER 用のデータに変換するコンバータを作成し、変形を考慮し た形状での JUPITER 解析をできるようにすることで、two way 連成 解析プラットフォームを完成させる。

・原子力システム研究開発事業(気泡上昇流解析)

JUPITER の気液二相流解析手法の妥当性確認を目的として、単管 流路内の気泡上昇流解析を行った。計算体系は、直径 30 mm 長さ 1500 mm の円管流路である。図4は気相の見かけ流入速度 jg=0.178 m/s、液相の見かけ流入速度 jl = 0.215 m/s の場合におけるスラグ流 条件下での気泡形状(左:解析結果、右:実験結果)である。図より、 気泡後流の微細な気泡群は実験の方がより密集して分布しているこ とが分かる。原因として、格子解像度の不足、界面捕獲手法における



図 4 単管流路内 気泡上昇流の解析 結果 (左)、実験結 果 (右)。流動条件 は slug 条件

数値拡散の影響及び VOF 法の気液界面の接合が考えられる。一方、気泡形状の傾向はよく似た形状となっており、JUPITER による解析は実験結果を定性的に再現できることを確認した。 以上より、気泡上昇流解析において流動様式を概ね再現できたことは、本事業の完遂だけでなく、原子力基礎工学研究センターの本中長期計画項目 2(1)基礎基盤「革新的原子力システム研究開発」に資する重要な成果である。今後は、本研究により明らかになった界面捕獲手法における課題について、数値スキームの変更や改良を通じた改善を進めていく予定である。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) <u>S.Yamashita</u>, S.Uesawa, A.Ono and H.Yoshida,"Development of a numerical simulation method for air cooling of fuel debris by JUPITER", Mechanical Engineering Journal, Vol.10, No.4, DOI:10.1299/mej.22-00485
- 2) <u>S.Yamashita</u>, N.Kondo, T.Sugawara, H.Monji and H.Yoshida,"Benchmark simulation code for the thermal-hydraulics design tool of the accelerator-driven system: validation and benchmark simulation of flow behavior around the beam window", Journal of Nuclear Science and Technology, DOI:10.1080/00223131.2023.2268676

・講演発表及び口頭発表

3) 山下,周,三輪,"人工知能技術と熱流動の融合によるデータ駆動型プラント安全評価手法の開発(4) JUPITER コードを用いた噴流着水解析と機械学習による侵入長さ予測", 日本原子力学会秋の大会,2023.

5.1.6 機構論的限界熱流束予測評価手法確立のための二相流挙動解析

Two-Phase Flow Analysis for Establishment of Critical Heat Flux Prediction Method Based on Mechanism

小野 綾子、吉田 啓之、鈴木 貴行、山下 晋 炉物理・熱流動研究グループ

(1) 利用目的:

炉物理・熱流動研究グループでは、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、機構論的限界熱流束(Critical Heat Flux: 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。このような原子炉規模の体系におけて大規模詳細数値シ ミュレーションを行うためには、HPE SGI8600の利用が必須である。

(2) 利用内容·結果:

1) 令和5年度課題の達成目標

本課題の最終目標は、CHF 評価手法の確立を目指して、軽水炉実機燃料集合体体系におけるマクロな沸騰二相流挙動の再現を、数値シミュレーションを用いて行うことである。令和5年度は、これを実現するために、JUPITER を用いた機構論的 CHF 予測を小規模体系において実現させること、沸騰二相流解析の実機適用へ向けて、単チャンネルおよび複数バンドルに適用すること、簡易沸騰モデルの JUPITER 実装に向けた検討を行うこと、二相流計測データを用いて気泡流に対する JUPITER の妥当性確認を行うこと、この4項目を実施した。

2) 令和5年度の研究成果とその重要性

(1) JUPITER を用いた機構論的 CHF 予測評価手法の確立と小規模体系における妥当性検証

申請者が提唱している機構論的 CHF モデルは、限界熱流束近傍の超高熱流束領域において、 伝熱面を覆う様な十数 mm 程度の蒸気塊が形成され、その下に形成される数百 µ m 程度の液 膜が乾くことで、CHF が発生するマクロ液膜蒸発モデルをベースとしている。マクロ液膜蒸 発モデルは、 $q_{CHF} \tau = \rho_i H_{ig} \delta$ の熱バランス式で表さ れる。 δ は液膜厚さで申請者が開発している液膜形 成モデルから求めることとするが、蒸気塊の滞留時 間 τ (伝熱面の特定箇所を覆う時間の長さ)につい ては、JUPIITER を用いた数値シミュレーション によって数値実験によって求めることとしている。 今回は、開発中の簡易沸騰モデルと JUPITER を合 わせることで、高熱流束域の沸騰二相流をシミュレ ーションし、 τ の熱流束を関数とした相関式を求め た。図1に示すように強制対流沸騰条件において求 めた相関式をマクロ液膜蒸発モデルに用いて CHF を予測した。予測結果は CHF の実験値の 19%のず れの範囲で予測した。



図1マクロ液膜蒸発モデルに基づいた CHF 予測

(2) 簡易沸騰モデルを用いた単チャンネル沸騰解析およびバンドル沸騰解析

簡易沸騰モデルは、伝熱面表面に相変化による蒸気の出現をオリフィスからの蒸気吹き出し によって模擬しているが、JUPITER で円筒体系に適用した際に、設定熱流束に対応した蒸気 量が噴出していないことが判明した。図2において、円筒面上に設置されたオリフィス面を緑 線で示す。オリフィスに対して、法線方向のuiとviに分けられた速度で上記を流入させるが、 緑の円弧の長さとオリフィス境界に設定されたセルの面(青と赤)の長さが一致しないことに

起因することを明らかにした。この問題に対して、計 算体系を直交座標で構築した際に、モデルから設定し た曲面のオリフィス面積と吹き出し速度の積に対し て、直交座標での正味の蒸気吹き出し面積を量が全て 同じになるようにする入力を作成する補正プログラ ムを開発した。これにより、ランダムに配置され、等 熱流束が与えられた全てのオリフィスからは、等量の 蒸気が吹き出すことが可能となった。これを用いて、 燃料バンドル体系における沸騰解析を行った(図3)。 入力で与えられた熱流束に対応する蒸気量が正確に 噴出していることを確認した。



図 2 円筒面におけるオリフィスと 蒸気吹き出し速度

(3) 簡易沸騰モデルの JUPITER コード実装に向けた調査と改良

簡易沸騰モデルで JUPITER に対する入力を作成するプログラム群を整理し、チャート図に まとめた。その中で、JUPITER からの物理量をモデルにフィードバックして反映させる部分 と外部からの入力とする部分を整理して実装について検討した。外部モジュールとして作成す る方法で検討することとした。



図3 簡易沸騰モデルの燃料集合体体系への適用

(4) 二相流計測データを用いた JUPITER による燃料集合体内二相流解析の妥当性検証

LDV を用いて非接触で小気泡挙動を計測する計測技術を開発している。今年度は、解析検 証用に、4×4バンドル体系を対象とした二相流試験を行った。実験に先んじて、実験体系を再 現した二相流解析を実施した。二相流解析では、入口条件となる気泡生成のノズル部の幾何形 状の特徴を再現するようにし、生成される気泡径を実験に近づけることを試みた。解析では、 周囲流速の増大とともに、ノズル分散する気泡径が現象する傾向が得られており、実験結果の 傾向と定性的に一致することを確認した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 A. Ono, S. Yamashita, T.Suzuki, H.Yoshida, "Development of the simplified boiling model applied for the large-scale simulation by the detailed two-phase flow analysis based on the VOF method", Mechanical Engineering Journal, 11,4,2024,p.24-00188.

5.1.7 福島第一原子力発電所2号機を対象とした空冷時における原子炉格納容器内 の熱挙動解析

Thermal Behavior for Air-cooling in PCV of Fukushima Daiichi Nuclear Power Station Unit 2

上澤 伸一郎、山下 晋、小野 綾子、堀口 直樹、吉田 啓之、鈴木 貴行 炉物理・熱流動研究グループ

(1) 利用目的:

今後の燃料デブリの取り出し作業の進捗状況により炉内の発熱量も低下することから、福島 第一原子力発電所の廃炉における汚染水対策として注水量低減並びに間欠注水による冷却も しくは空冷が考えられている。しかしながら、原子炉圧力容器の内部調査が十分とは言えず、 不確かさが残ることから、燃料デブリの分布状態や燃料デブリ取り出し作業の進捗状況に応じ た最適な冷却方法を事前に検討する必要がある。

本課題では、福島第一原子力発電所の原子炉格納容器内の燃料デブリ熱挙動推定技術の開発 として、圧力容器内外に分布していると想定される燃料デブリの位置、発熱量、デブリの空隙 率などの影響を含めた、空冷時における熱挙動推定技術の開発を行う。大規模熱流動解析が必 要と考えられることから、課題担当者が所属する炉物理・熱流動研究グループが独自に開発し た、多相多成分詳細熱流動解析コード JUPITER を使用する。また、デブリが多孔質体である と推定されるとともに、多孔質体内部を再現して大規模な熱流動解析を実施することは空間解 像度的に不可能と考えられることから、JUPITER にポーラスモデルを追加した。

本手法を開発することにより、燃料デブリの分布状態や燃料デブリ取り出し作業の進捗状況、汚染水の蓄積・処理状況、原子炉格納容器内の閉じ込め機能等に応じた冷却方法の評価が可能になり、状況に応じた最適な冷却方法の提案が期待できる。また、本課題で開発する手法は、これまで計算ができなかった多孔質体の熱流動解析を可能にするとともに、実験と解析を 並行して実施することによる妥当性確認など、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:

<u>1) 令和5年度課題の達成目標</u>

福島第一原子力発電所事故における燃料デブリの空隙率や透過係数、有効熱伝導率などの内部 構造は現状においても明らかにされていない。本課題では、福島第一原子力発電所2号機を対象 とした、空冷時における原子炉格納容器内の熱挙動解析について、燃料デブリの空隙率や透過係 数、有効熱伝導率をパラメータとした解析を実施し、デブリの空隙率や透過係数、有効熱伝導率 など多孔質体の内部構造が空冷に与える影響について明らかにする。また、乱流自然対流熱伝達 について、実験との比較を通して妥当性確認を行った。

2) 令和5年度の研究成果とその重要性

燃料デブリの空隙率や透過係数、有効熱伝導率をパラメータとした実機の熱流動解析

本課題では、公開資料に基づいて、燃料デブリや炉内構造物をモデリングした体系で解析した

(図 1)。発熱は燃料デブリのみとし、崩壊熱と FP の放出 を仮定して、全体の発熱総量を 35 kW とした。燃料デブ リは、炉心外周部 (空隙率 ϵ = 0.30)、RPV 下部 (ϵ =0.30)、 ペデスタル内 (ϵ =0.60) の 3 箇所に堆積しているとした。 RPV 下部では金属層と UO₂層が密度比により 2 層に分離 しているとし、ペデスタル内の燃料デブリは最大高さ 0.7 m で傾斜して堆積していると仮定した。

多孔質体の空隙率や内部構造により、多孔質体自体の有 効熱伝導率は大きく異なることが知られていることから、 本課題では有効熱伝導率モデルとして代表的な並列モデ ル(流体層と固体層が熱移動の方向に対して並行に並んだ モデル)、直列モデル(流体層と固体層が熱移動の方向に 対して垂直に並んだモデル)、加重幾何平均モデル(流体 と固体がランダムに並んだモデル)について解析を実施



図1 解析体系

し、比較した(図2)。モデルによらず、RPV下部とペデスタル内の燃料デブリの温度が周囲構 造物よりも高いことがわかる(図中A)。特に、直列モデル(c)ではその温度上昇が顕著であった。 また、同モデルでは、他モデルで見られる上昇流(図中B)が生じなかった。これらは、RPV下 部燃料デブリ(発熱)の上部にある金属多孔質体(非発熱)により除熱が妨げられ、金属多孔質 体上部の温度が低かったためと考えられる。このように、モデルにより除熱量は大きく異なるこ とから、原子炉格納容器(PCV)内の熱挙動を推定するためには、燃料デブリ等の多孔質体とし ての内部構造の把握と、それに対応したモデルの適切な選択が必要である。

多孔質体内の流体の通り易さの指標である透過係数については、RPV 下部の燃料デブリの透 過係数を、3.67×10⁻¹⁰m²(充填層の粒径 1 mm に相当)、3.31×10⁻⁹m²(3 mm)、3.67×10⁻⁸m² (10 mm)に設定し、温度分布の比較を行った。その結果、本条件範囲においては、透過係数に

よる燃料デブリ内の流速や温度に差はなく、除熱性能への影響は小さいことがわかった。





乱流自然対流熱伝達の妥当性確認

炉内のような大規模体系における自然対流は乱流域に遷移すると考えられることから、本課題 では、本グループで実施している乱流自然対流熱伝達実験の模擬解析を実施し、温度分布や流速 分布の比較を行い、その妥当性を確認した。図 3 左は、乱流自然対流熱伝達実験の模式図であ る。本実験では下部に加熱面が設置してあり、その上面に球径 10mm の SUS 球を充填した多孔 質体を設置した。多孔質体の高さは 100mm、直径は 185mm の円柱である。温度計測として、 熱電対を用いて 3 カ所の水平方向に対して鉛直方向温度分布を取得した。図 3 右に解析と実験 の比較結果を示す。各水平位置について、最大で 10℃程度過大評価しているものの、概ね一致す る結果が得られた。実機の炉内状況の不確かさや温度変化を考慮すれば、その温度差は小さく、 実機への適用は問題ないと考えられる。



図3 自然対流熱伝達実験模式図(左)と鉛直方向温度分布の解析と実験の比較結果(右)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

・国際会議における論文発表(査読有)

 <u>Shinichiro Uesawa</u>, <u>Susumu Yamashita</u>, Mitsuhiko Shibata and <u>Hiroyuki Yoshida</u>, Development of numerical simulation method of natural convection around heated porous medium by using JUPITER, Proceedings of the 30th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE30), ICONE30-1711, 2023. (出版済)

・講演発表及び口頭発表(査読無)

- <u>上澤伸一郎</u>,<u>小野綾子</u>,<u>山下晋</u>,<u>吉田啓之</u>,空冷時における燃料デブリ熱挙動推定技術の 開発(5)原子炉格納容器内熱挙動の予備解析,日本原子力学会 2023 年秋の大会,2023. (発表済)
- 3) <u>上澤伸一郎,小野綾子,山下晋,吉田啓之</u>,空冷時における燃料デブリ熱挙動推定技術の 開発(6) 原子炉格納容器内熱挙動解析における有効熱伝導率モデルの影響,日本原子力 学会 2024 年春の年会,2024.(発表済)

5.1.8 核熱連成シミュレーションの実現に向けた熱流動パラメータの推定

Estimation of Thermal-Hydraulics Parameters for Neutronics/Thermal-Hydraulics Coupling Simulation

神谷 朋宏、山下 晋

炉物理・熱流動研究グループ

(1) 利用目的:

近年、産業界で広く用いられている炉心設計コードの妥当性を検証することで、コードのよ り広い条件に対する適用や過大な設計上の余裕の削減による設計の高度化が期待されている。 一般的に、コードの妥当性は実験結果と解析結果を比較することで確認されるが、軽水炉内は 高温・高圧であること、強い放射線が存在することから実験によって妥当性確認用データを取 得することは困難である。そのため、炉内の核反応と熱流動を詳細かつ忠実に取り扱ったシミ ュレーションによって妥当性確認データを取得することの意義は大きい。軽水炉内では、核分 裂と水の流動が互いに影響を及ぼしあっているため、詳細かつ忠実なデータの取得に向けて核 反応と熱流動を連成させることが必要となる。そこで、熱流動を詳細かつ忠実に解析するコー ドである JUPITER と核反応を解析するモンテカルロ計算コードである MVP の結合による MVP/JUPITER 核熱連成シミュレーションを実現し、妥当性検証に資するデータを取得する ことが目的である。

MVP/JUPITER 核熱連成シミュレーションの実施にあたり、解析可能なスケールに限界が あるため、本課題では、単一燃料集合体に対して核熱連成シミュレーションを実施する。その 体系における計算は数億から十数億の計算セルを必要とする規模であり、計算コストが非常に 大きい。したがって、大きなメモリ、多数の並列数、高い計算速度が求められ、HPE SGI8600 の利用が必須である。

(2) 利用内容·結果:

1) 令和5年度課題の達成目標

令和5年度の目標は、核熱連成シミュレーションの実施にあたり設定しなければならないパ ラメータである熱流動解析時間の適切な値を選定すること、集合体規模の核熱連成シミュレー ションを実施することであった。

2) 令和5年度の研究成果とその重要性

・BWR 用 8×8 単一集合体体系における沸騰シミュレーション

核熱連成シミュレーションを実施する体系である BWR 用 8×8 単一集合体体系において、 沸騰を考慮した熱流動解析を実施した。図1に計算体系を示す。定格運転状態の BWR を想定 し、圧力を 7.07MPa、温度を 549.15K(サブクール度は 10.5K)とした。初期では計算領域は 水で満たされており、発熱する燃料棒が配置される。

可視化結果およびボイド率分布から定性的に妥当な結果が得られた。図2は計算開始から8 秒後の可視化結果である。灰色の部分は燃料棒を示し、青色の部分は気液界面を示す。水の温 度は発熱する燃料棒によって徐々に上昇し、やがて水から蒸気への相変化が生じていることが わかる。図3は各時刻におけるサブチャンネル(図1の斜線部)の軸方向ボイド率分布に50 mmの範囲で移動平均を施した結果を示す。水および蒸気は発熱する燃料棒から熱を受け取る ため、集合体上部に向かうに従いボイド率が増大していることがわかる。また、4秒あたりか らボイド率が統計的には概ね一定の分布となっていることが確認される。これは統計的には定 常な流れ場となる定格運転を非定常解析コードであるJUPITERを用いて解析可能であるこ とを表しており、定格運転時を対象とする核熱連成シミュレーションの実施にあたり重要な結 果であるといえる。さらに、出口付近のボイド率が0.8程度であることが読み取れるが、これ は実際のBWRのボイド率とほとんど同じである。この結果は今後の核熱連成シミュレーショ ンに向けて重要である。





図1 計算体系

図2 気液界面の可視化結果(t=8s)



図3 軸方向ボイド率分布(50 mmの範囲で移動平均)

・MVP/JUPITER 核熱連成シミュレーション

 2×2 バンドル体系において MVP/JUPITER 核熱連成シミュレーションを実施した。定格 運転状態の BWR を想定し、圧力を 7.07 MPa、温度を 549.15 K (サブクール度は 10.5 K) とした。初期では計算領域は水で満たされており、燃料棒が配置される。時間 t=[0,0.25 s]の区間では燃料棒は発熱せず、その後は、JUPITER の結果を反映させた MVP の計算によ って発熱分布を取得する。MVP を用いた核計算は 0.25 秒毎に実施される。

図4は各時刻における軸方向ボイド率分布と燃料棒の線出力分布をそれぞれ示す。図4から、*t*=1sにおいてボ

イド率分布大きく変化 していることから、水 蒸気が発生しているこ とがわかる。これは核 解析結果を熱流動解析 に反料棒を熱流動解析 に反料棒が発きしたため である。さらに、ボイ ド本が変化していること がわかる。以上から、 核と熱流動が相互に影 響を及ぼし合うシミュ レーションができたこ とが確認された。



図4 軸方向ボイド率分布および燃料棒の線出力分布

・GPU 版 JUPITER コードのチューニング

GPU 処理部分のプロファイルリング結果から不要な同期処理を無効化し、CPU 処理部 分のプロファイリング結果から関数のインライン展開促進や計算式の手動展開による高速 化を実施した。その結果、3 次精度の TVD Runge-Kutta 法部分に関してはデータ規模に 対して適切な並列数を使用できれば 1.6 倍程度高速化さ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):

・ポスター発表

- 1) 神谷朋宏,小野綾子,永武拓,多田健一,近藤諒一,長家康展,吉田啓之,BWR 用 8×8 単一集 合体体系における沸騰シミュレーション,事故耐性燃料開発に関するワークショッ プ,2023.
- ・口頭発表
- 2) 神谷朋宏,永武拓,小野綾子,多田健一,近藤諒一,長家康展,吉田啓之,先進的核熱連成シミ ュレーションシステムの開発(11)燃料バンドル体系に対する JAMPAN を用いた MVP/JUPITER 連成シミュレーション,日本原子力学会春の年会,2024.

5.1.9 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

堀口 直樹、鈴木 貴行、上澤 伸一郎、森口 大輔、吉田 啓之 炉物理・熱流動研究グループ

(1) 利用目的:

炉物理・熱流動研究グループでは、第4期中長期計画における原子力基礎基盤研究として、 軽水炉等の安全性向上と基盤技術の高度化に関する詳細二相流シミュレーション技術の開発・ 検証を実施している。本課題では、以下で示す高い計算負荷を要するシミュレーションに対し て大型計算機を利用した。

軽水炉の熱設計では、サブチャンネル解析コードを用いて、炉内に配置される燃料集合体内 二相流の解析が行われている。サブチャンネル解析コードに含まれる相関式の開発・改良には、 運転条件に対応する、高温・高圧の二相流試験によって取得されたデータが用いられてきた。 しかしこのような試験では、設計変更毎に試験を行うためには、多額の費用や長い実施期間が 必要であること、可視化観察による内部流動の把握が困難であることなど、多くの課題がある。 これらの課題に対して、機構論的かつ詳細な時空間解像度を有する詳細二相流シミュレーショ ンによって、試験データを代替する数値シミュレーションデータを提供できれば、比較的低コ ストかつ短期間に相関式の改良や内部流動の詳細把握を達成し得る。これを実現するためには サブチャンネル内で見られる二相流やその素過程を再現する必要があることから、本研究では 界面追跡法に基づく詳細二相流解析コード TPFIT[1]を用いた数値シミュレーションを実施し てその再現性を検証する。

(2) 利用内容·結果:

1) 令和5年度課題の達成目標

令和5年度では、サブチャンネル内二相流の素過程である、速度差を有する界面における液 滴形成およびじょう乱波形成を対象とし、次の目標を掲げて実施した。

● 対象とする素過程:速度差を有する界面における液滴形成

達成目標

- 浅水プール中壁面衝突噴流の数値シミュレーションの実施と液滴形成の定性的な 確認
- ▶ 液滴形成の機構の理論評価手法の開発と評価
- ▶ 環状噴霧流の数値シミュレーションの実施と液滴形成の定性的な確認
- 対象とする素過程:速度差を有する界面におけるじょう乱波形成

達成目標

- ▶ じょう乱波が確認された流動試験を模擬した解析体系の構築
- ▶ 環状流の数値シミュレーションの実施とじょう乱波形成の定性的な確認

2) 令和5年度の成果報告とその重要性

速度差を有する界面における液滴形成に着目した数値シミ ュレーションおよびその機構の理論評価手法を開発した[2]。 まず長年の実績があり同様の液滴形成が起きると考えられる 浅水プール中の壁面衝突噴流を対象とした数値シミュレーシ ョンを実施し、壁面衝突噴流中の液滴形成を定性的に確認し た(図1)。次に液滴形成の機構の理論評価手法を開発した。 この液滴形成では、界面で流体の運動量が界面エネルギーを 超えることが現象発生の境界条件の一つであると考えられ、 このバランスを無次元的に表したレイノルズ数 (Rea 数)とオ ーネゾルゲ数 (Ohd 数) のグラフに、この境界条件を示す一つ の理論線(Ohd=2Re⁻¹)を引くことができる。すなわち、液滴 形成の機構を表した Re 数と Oh 数の理論線を導くことがで き、この理論線と数値シミュレーションによる液滴データを 比較することで、液滴形成の機構を理論的に評価できると考 えた。液滴データと、速度差を有する界面における液滴形成 の機構を複数の理論線で表して得た領域を図2に示す。ここ で、γは二流体の密度比である。両者が重なったことから、 数値シミュレーションにおける液滴形成は速度差を有する 界面における液滴形成であると理論的に評価できた。以上か ら、対象とした素過程およびその機構を数値シミュレーショ ンで再現できた。さらに、原子炉サブチャンネル内二相流を 模擬した鉛直上昇管内環状噴霧流の数値シミュレーション を実施し、液滴形成を定性的に確認した[3] (図 3)。今後、原 子炉サブチャンネル内二相流模擬体系でも同様に機構を評 価する予定である。

また、じょう乱波形成について以下を実施した。じょう乱 波は流路壁に付着した液膜界面に見られる波の一つであり 振幅に比べて波長が長い特徴を持つが、これまで炉内模擬擬 体系の数値シミュレーションで再現した報告は無く、本解析 コードの適用性も未検討であった。そこで、試験データが豊 富で再現性を検討しやすい、代替流体を用いた鉛直上昇管内 環状流試験[4]を模擬対象とした数値シミュレーションを実 施した。解析体系は流路径5mm、空間解像度0.1mm(xy 方向)と0.5mm(z方向)とした。流路長を変更して複数ケ ース実施して液膜厚さを評価した結果、流路長1100mm、 解析時間500ms程度あれば小さな波が発達して長波長の波



図1浅水プール中壁面衝突噴 流における液滴形成の再現[2]







を形成することを確認した(図4)。試験において同様の波がじょう乱波と見なされることから、本数値 シミュレーションにおいてもじょう乱波を再現できたと言える。今後、試験データとの比較を継続し、じょう乱波の再現を定量的に確認していく。

以上の結果から、本利用課題で開発する解析コー ドを用いて原子炉サブチャンネル内二相流の一部の 素過程を機構から再現できた。今後、これらの再現性 の確認を定量的に行っていくとともに、対象とする 素過程を充足させていく。この成果は、詳細二相流シ ミュレーションを原子炉内二相流のデータ取得や現 象把握に活用していく上で重要な成果である。



図4 じょう乱波とその発達の再現[5]

参考文献

[1] 吉田啓之ら、"大規模シミュレーションによる稠密炉心内気液二相特性の解明、(I)",日本 原子力学会和文論文誌, 3, 3, 2004, pp. 233-241.

[2] N. Horiguchi, *et al.*, "Atomization mechanisms of a wall–impinging jet in a shallow pool, Physics of Fluids", Phys. Fluids, 35, 7, 073309, 2023, pp.1-17.

[3] 堀口直樹ら, "環状噴霧流における液滴発生・付着現象の数値シミュレーション",日本原 子力学会 2023 年秋の大会,名古屋,日本,2023.

[4] H. Zhang, *et al.*, "On the velocity and frequency of disturbance waves in vertical annular flow with different surface tension and gas-liquid density ratio", Int. J. Heat Mass Trans., 211, 1, 124253, 2023, pp.1-13.

[5] 堀口直樹ら,"じょう乱波を含む環状流の数値シミュレーション"日本原子力学会 2024 年 春の年会,東大阪,日本,2024.

- (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
 - 1) <u>N. Horiguchi</u>, <u>H. Yoshida</u>, A. Kaneko, Y. Abe, Atomization mechanisms of a wallimpinging jet in a shallow pool, Physics of Fluids, 35, 7, 073309, 2023, pp.1-17.
 - 2) <u>H. Yoshida, N. Horiguchi</u>, H. Furuichi, K. Katono, Effects of spacer on entrainment and deposition behavior of droplets in simplified subchannel of light water cooled fast reactor RBWR, the 2023 30th International Conference on Nuclear Engineering(ICONE 30), Kyoto, Japan, 2023, ICONE30-1824, Internet.
 - 3) <u>堀口直樹</u>, <u>吉田啓之</u>, 成島勇気, 上遠野健一, 環状噴霧流における液滴発生・付着現象の数 値シミュレーション, 日本原子力学会 2023 年秋の大会, 名古屋, 日本, 2023.
 - 4) <u>堀口直樹</u>,環状流におけるじょう乱波挙動の数値シミュレーション,日本原子力学会熱流 動部会第5回若手研究者勉強会,オンライン,2023.
 - 5) <u>堀口直樹</u>, <u>吉田啓之</u>, Zhang, H., 森昌司, じょう乱波を含む環状流の数値シミュレーション, 日本原子力学会 2024 年春の年会, 東大阪, 日本, 2024.

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

5.2.1 低次元強相関系の基底状態および励起ダイナミクスの研究 Research for Ground State and Excitation Dynamics in Low-Dimensional Strongly Correlated Systems

大西 弘明、杉本 貴則、森 道康 スピン-エネルギー科学研究グループ

(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 や運転再開した 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、大型計算機を活用し た大規模並列計算により、こうした数値計算上の困難を克服する。

(2) 利用内容·結果:

一次元反強磁性体は、厳密解が得られる数少ない量子多体系として注目され、1930年代か ら長年にわたって研究されてきた。とりわけ、相互作用が異方的なイジング型の基底状態は、 ゼロ磁場では反強磁性秩序を持ち、磁化容易軸に磁場を印加するとある転移磁場で量子スピン 液体状態への相転移が起こる。量子スピン液体状態はギャップレス励起を持つ一方、高エネル ギーの励起状態として、ベーテ仮説の複素束縛解であるストリング状態を持つ。今回我々は、 一次元イジング型反強磁性体 CsCoCl₃の強磁場電子スピン共鳴(Electron Spin Resonance, ESR)実験により、磁場誘起量子スピン液体相と強磁性相の境界付近において、ストリング状 態とマグノン束縛状態とのクロスオーバーを観測することに成功した。図1に ESR 実験と数 値計算の結果を示す。ESR 実験では、転移磁場においてエネルギーギャップが消失するソフ ト化が起こり、さらに、高周波数領域にストリング励起モードが現れることが分かった。さら に、このストリング状態が、飽和磁場以上でマグノン束縛状態へと移り変わっていく振る舞い が観測された。これらの励起状態への遷移は本来禁制であるが、数値計算による ESR スペク トルのスピン相関成分、カイラリティ相関成分、電気分極相関成分の解析から、禁制遷移観測 の微視的機構を解明した。これらの研究成果を論文発表して、注目論文として採択された[9]。



図 1: 一次元イジング型反強磁性体 CsCoCl₃の ESR 実験の共鳴周波数(白丸) と ESR ス ペクトルの DMRG 計算結果 (カラーマップ)。(a)スピン相関 q=0 成分、(b)スピン相関 q=π 成分、(c)カイラリティ相関成分、(d)電気分極相関成分。横軸 h 磁場、縦軸ω周波数(=エネ ルギー)の強度分布をカラーマップで示している。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学術論文

- T. Ichikawa, H. Hakoshima, K. Inui, K. Ito, R. Matsuda, K. Mitarai, K. Miyamoto, W. Mizukami, K. Mizuta, T. Mori, Y. Nakano, A. Nakayama, K. N. Okada, <u>T. Sugimoto</u>, S. Takahira, N. Takemori, S. Tsukano, H. Ueda, R. Watanabe, Y. Yoshida, and K. Fujii, "A comprehensive survey on quantum computer usage: How many qubits are employed for what purposes?", Nat. Rev. Phys. 6, 345, 2024.
- <u>T. Sugimoto</u>, S. Suzuki, R. Tamura, and T. Tohyama, "Revisiting the Magnetic Orders in Heisenberg Model for Tsai-Type Quasicrystal Approximant", J. Phys. Soc. Jpn. 93, 045001, 2024.
- 3) <u>T. Sugimoto</u> and T. Tohyama, "Quasi-fractionalization of edge spin in chiralityassisted cluster-based Haldane state on triangular spin tube", Comms. Phys. 6, 291, 2023.
- R. Ghadimi, M. Hori, <u>T. Sugimoto</u>, and T. Tohyama, "Confined states and topological phases in two-dimensional quasicrystalline pi-flux model", Phys. Rev. B 108, 125104, 2023.
- 5) S.Kimura, <u>H. Onishi</u>, K. Okunishi, M. Akaki, Y. Narumi, M. Hagiwara, K. Kindo, and H. Kikuchi, "Magnetic Excitation in the S=1/2 Ising-like Antiferromagnetic Chain CsCoCl₃ in Longitudinal Magnetic Fields Studied by High-field ESR Measurements", J. Phys. Soc. Jpn. 92, 094701, 2023. [Editors' Choice]
- 6) <u>M. Mori</u> and T. Ziman, "Magnetic Structures and Spin-Wave Excitations in Rare-

Earth Iron Garnets Near the Compensation Temperature", IEEE Trans. Magn. 59, 1300505, 2023.

- 7) <u>H. Onishi</u> and S. Miyashita, "Low Temperature Behavior of Itinerant Ferromagnet Realized in Extended Nagaoka Mechanism", JPS Conf. Proc. 38, 011157, 2023.
- 8) M. Hori, R. Ghadimi, <u>T. Sugimoto</u>, T. Tohyama, and K. Tanaka, "Self-consistent Study of Non-Abelian Topological Superconductivity in Quasicrystals", JPS Conf. Proc. 38, 011065, 2023.
- 9) M. Hori, R. Ghadimi, <u>T. Sugimoto</u>, T. Tohyama, and K. Tanaka, "Momentum-Space Analysis of Topological Superconductivity in Two-Dimensional Quasicrystals", JPS Conf. Proc. 38, 011062, 2023.

国際会議

- 10) R. Ghadimi, M. Hori, <u>T. Sugimoto</u>, and T. Tohyama, "Confined states in twodimensional quasicrystals with applied pi-flux", International conference on complex orders in condensed matter: aperiodic order, local order, electronic order, hidden order, Evian, France (Sep., 2023).
- 11) <u>H. Onishi</u>, "Wavepacket Approach for Spin Transport in Zigzag Spin Chain", The 34th IUPAP Conference on Computational Physics, Kobe, Japan (Aug., 2023).
- 12) <u>T. Sugimoto</u>, "Quantum-circuit algorithms: many-body topological invariant and Majorana zero mode", The 34th IUPAP Conference on Computational Physics, Kobe, Japan (Aug., 2023).
- 13) <u>H. Onishi</u>, "Spin quadrupole excitations in frustrated ferromagnetic chain", RIXS/REXS workshop 2023, Sendai, Japan (Aug., 2023).
- 14) <u>T. Sugimoto</u>, S. Suzuki, R. Tamura, and T. Tohyama, "Multifarious magnetic orders in icosahedral-quasicrystal approximants", International Conference on Strongly Correlated Electron Systems 2023, Incheon, Korea (July, 2023).
- 15) <u>T. Sugimoto</u>, S. Suzuki, R. Tamura, T. Yamada, and T. Tohyama, "Various magnetic phases in Tsai-type 2/1 quasicristal approximants", 15th International Conference on Quasicryatals, Tel Aviv, Israel (Jun., 2023).
- 16) .<u>M. Mori</u> and T. Ziman, "Magnetic Structures and Spin-wave Excitation in Rare-Earth Iron Garnets near the Compensation Temperature", Intermag 2023, Sendai, Japan (May, 2023).

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

5.3.1 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 Improvement of Analysis Code for Sodium-water Chemical Reacting Jet in a Steam Generator in a Sodium-cooled Fast Reactor

小坂 亘、内堀 昭寛、渡部 晃、柳沢 秀樹 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、破損伝播の発生有無及び発生した場合の影響を評価する数値 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。

民間で実施される多様な炉システム概念の検討及び絞り込みを支援するため、AI 支援型革 新炉ライフサイクル最適化手法 ARKADIA (図 2) を開発している。ARKADIA は、安全性、 経済性、保守性など様々な観点からプラント設計の自動最適化を行う。本研究で開発する数値 解析システムは、将来、ARKADIA の一部機能として SG の設計最適化に大きく寄与するもの である。



ナトリウム冷却高速炉

蒸気発生器内部

図1 反応ジェット、隣接管の損傷及び破損伝播



図2 AI 支援型革新炉ライフサイクル最適化手法 ARKADIA

(2) 利用内容・結果:

1) 令和5年度課題の達成目標

LEAP-III コードの温度分布評価では、1本の反応ジェットによる温度等値線を与える相関 式を基に、複数のジェットが干渉する場合に対してそれぞれの規模(水リーク率)により影響 範囲を評価するモデルを用いる。令和5年度は、相関式整備に向けた予備解析及びジェット干 渉モデルの妥当性確認・高度化検討のための数値解析を実施する。前者は、実規模の試験結果 (SWAT-3 試験)の再現解析を行い、SERAPHIMによる3次元解析の計算安定性及び妥当性 を確認する。後者は、2本のジェットが直交する場合を対象に、同じく SERAPHIMによる3 次元解析を行い、それぞれの水リーク率の比を変更して挙動に及ぼす影響を確認する。

2) 令和5年度の研究成果とその重要性

温度等値線整備のための予備解析として、SWAT-3 試験に相当する解析体系を設定した(図 3)。すなわち、伝熱管を 92 本設置し、そのうちの1本から水蒸気を噴出させた状況である。 図 4(a)は同試験の結果において高温(1000℃以上)を記録した領域を示す[1]。図 4(b)は本解 析より得られた温度分布である。両者の高温領域の分布は概ね一致し、SERAPHIM による実 機規模の3次元解析について計算安定性・妥当性を確認できた。今年度得られた知見をベース に、次年度は、新たな SG 設計案に対する相関式整備に取り組む予定である。

SERAPHIM を用いて Na 中を 2 本の水蒸気ジェットが直交する状況について 3 次元解析を 行った。図 5 に噴出孔を含む断面上の気相温度分布を示す。白抜きの円が伝熱管を表し、図 5(a)~(c)それぞれで左側伝熱管からの水リーク率は等しく設定しており、下側伝熱管からの水 リーク率が(a)では左側のジェットと等しく、(b)では左側のジェットの 1/2、(c)では 1/4 になる ように設定した。現在の LEAP-III のジェット干渉モデルでは、(b)や(c)のような水リーク率の 比が 1/2 より差がある場合、水リーク率の小さいジェットは大きい方のジェットにより遮断さ れるが、本解析結果では水リーク率比 1/2 の場合でもジェットの合流とみられる挙動が示され た。今後、局所的な流速・温度からウェステージ率を見積もる相関式と組み合わせることで定 量的な評価も可能と考えられ、今年度の研究成果は、干渉モデルの妥当性確認及び高度化検討 に資する重要な知見である。

JAEA-Review 2024-044





図4 温度分布の比較



図5 ジェット干渉挙

【参考文献】

 [1] 田辺裕美,渡辺智夫,"蒸気発生器安全性総合試験装置(SWAT-3)による破損伝搬試験 (V)", PNC TN9410 86-104, 1986, p.132.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) W.Kosaka, A.Uchibori, H.Yanagisawa and Y.Okano, "Development of Lagrangian Particle Method for Temperature Distribution Formed by Sodium-water Reaction in a Tube Bundle System", NURETH20, Washington D.C., 2023.
- 2) 東ヶ崎駿, 張承賢, 河口宗道, 澤和弘, 小坂亘, 内堀昭寛, 岡野靖, "粒子法を用いたナ トリウム冷却高速炉蒸気発生器内のナトリウム・水反応に起因する反応ジェットの温度 評価", 日本原子力学会 2023 年秋の大会, 名古屋大学, 2023.
- 3) 小坂亘, 内堀昭寛, 柳沢秀樹, 岡野靖, "ナトリウム冷却型高速炉の蒸気発生器におけ る伝熱管破損伝播評価の高度化に資する粒子法コードの開発", 令和5年度日本原子力 学会北関東支部リモート若手研究者・技術者発表会, Web, 2024.

5.3.2 炉心支持板のたわみによる添加反応度解析

Analysis of Reactivity Induced by Deflection of Core Support Plate

吉村 一夫¹、堂田 哲広¹、井川 健一¹、上羽 智之¹、 菊地 紀宏¹、森 健郎¹、岡島 智史²、田中 正暁¹、宮崎 真之²、三浦 孝充³ ¹ 炉心・プラント解析評価グループ

2構造信頼性・材料技術開発グループ

3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の実現に向けて、炉物理、熱流動、構造力学 分野の各解析コードをプラント動特性解析コードと連成して解析する手法の開発を進めてい る。特に炉心での燃料集合体等(集合体)の変形を扱う場合、反応度計算のための境界条件と して、炉心内に装荷された数百体規模の集合体群の変形(炉心変形)を計算する必要があり、 計算負荷が非常に大きくなる。この計算負荷への対応のため、集合体変形計算に使用している 汎用非線形構造解析システム "FINAS"の HPE SGI8600 (Linux 環境) への移植を進めてい る。

令和5年度は大規模体系への適用を実施するとともに、熱過渡応力の時刻歴算出にあたり、 有限要素解析に代えてランプ応答の重ね合わせを利用した簡便な評価に係るソフトウェア開 発を行った。本稿では、炉心支持板のたわみにより添加される反応度解析結果及び熱過渡応力 簡易評価ソフトウェア開発の概要について述べる。

(2) 利用内容·結果:

1)米国高速実験炉 EBR-II を対象とした炉心支持板たわみによる添加反応度解析

米国高速実験炉 EBR-II の集合体を含む炉心支持板体系を FINAS により模擬し、自重等に よる炉心支持板のたわみによって添加される反応度を評価した。

解析体系

図1に、炉心支持板のたわみ評価のための EBR-II の解析体系を示す。炉心支持板は上部と 下部の2枚からなり、上下の炉心支持板は、中央部を除いて、連結管と呼ばれる構造材により 連結されている。なお、すべての集合体は上部炉心支持板に支えられている。

解析においては、炉心支持板の外周は上部及び下部ともに水平を保つように固定し、上部炉 心支持板と集合体は常に垂直を保つように設定した。また、上下2枚の炉心支持板で囲われた 空間(高圧プレナム)は、流量条件によって高圧プレナム内部の流体圧力が変化することから、 定格流量時(高流量で高圧となるケース)と1次主循環ポンプ停止時(低流量で低圧となるケ ース)の2ケースに分けて、支持板の変形(たわみ)解析を行った。

② 解析結果

図2に、高流量時及び低流量時における上部炉心支持板のたわみ解析結果を示す。高流量時 には、高圧プレナム部が高圧になることにより、連結管が存在しない中央部が上向きに変形し てW字型にたわむのに対し、低流量時には、高圧プレナム部の流体圧力が低下することから、 U 字型にたわむ結果となった。

図3に、高流量時及び低流量時における集合体の傾きを示す。高流量時には、上部炉心支持板のW字型のたわみが小さいため、集合体はほぼ直立しているのに対し、低流量時には、上部炉心支持板がU字型にたわむことによって集合体は全体的に内側に傾く結果となった。

図4に、支持板のたわみによって生じる集合体中の核燃料物質の移動により添加される反応 度(炉心変形反応度)の解析モデルを示す。炉心変形反応度は、集合体が移動することにより 添加される反応度と、集合体間ナトリウム(インターラッパ部のナトリウム)の体積が変化す ることによる反応度の合計で算出される。前者は、集合体の変位ベクトルと燃料核物質の分布 から求まる反応度価値マップの集合体中心位置における勾配ベクトルとの内積で求められ、後 者は、インターラッパ部のナトリウムの体積変化に比例定数を掛けて求められる。高流量時か ら低流量時での、支持板たわみによる集合体の傾きの変化(図3)による反応度を、上記の炉 心変形反応度モデルを用いて計算した結果、約3.5 centの正の反応度が添加される結果となっ た。これにより、1次主循環ポンプ停止等による流量喪失時において、上部炉心支持板が下側 にたわむことで、集合体間距離が縮まり、正の炉心反応度が添加される可能性があることが示 唆された。

以上の結果について、FINAS により炉心支持板のたわみが炉心反応度に与える影響が評価 可能であることを確認した。今後、Linux 版 FINAS の高速化等により計算時間の短縮を図っ ていく。

2) 熱過渡応力簡易評価ソフトウェア開発

令和5年度は、熱過渡応力時刻歴の評価とその結果に含まれる不確実性の分析を行うプログ ラム(Excel VBAにより作成)を、Linux上で動作可能なPythonスクリプトに移植すること で、さらなる高速化を図ることを目的とし、Excel VBAにより作成されたプログラム(移植元 プログラム)と同様の計算を行うPythonスクリプトを構築した。熱過渡応力時刻歴の評価と その結果に含まれる不確実性の分析を行うプログラムが、Linux上で動作可能なPythonスク リプトに移植されたことで、Linux環境で動作する他の解析コードや解析評価システム等とシ ームレスに利用可能となった。また、処理時間の高速化に向けた検討を行った。時間のかかっ ている関数を調査し、その関数の行毎に時間を確認し、深いループとならないような解法ロジ ックへの変更やチューニングを行った並列化などの手法が有効になることが分かった。また、 時間のかかる計算の部分をC/C++等のコンパイル型言語に置き換えることで処理時間の短縮 が期待できることが分かった。これらの検討結果をもとに今後、ソフトウェアの改良を図って いく。



図2 高流量時と低流量時の上部炉心支持板のたわみの比較



図3 高流量時と低流量時の上部支持板のたわみによる燃料集合体の傾きの比較



図4 炉心変形反応度解析モデル

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

 K. Yoshimura, N. Doda, K. Igawa, T. Uwaba, M. Tanaka and T. Nemoto, "Analysis of Fuel Assemblies Inclination due to Upper Core Support Plate Deflection for Reactivity Evaluation," Proc. of SMiRT27, Yokohama, Japan, 2023.

5.3.3 CNWG·先進燃料物性計算科学研究

Numerical Study of Physical Properties of Advanced Fuel in CNWG

渡部 雅¹、加藤 正人¹、町田 昌彦²、中村 博樹² ¹燃料サイクル設計部

2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、本研究の 対象は、前者「酸化物燃料の基礎物性」である。

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、かつ物性の様々な変化を表現可能とする計算式を導出することにある。 得られた計算式は、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 古典分子動力学と著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 る詳細なデータとともに、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、上記フッ化カルシウム及びフッ化ストロンチウムの 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。今年度は中性子非弾性散乱で得られたフッ化カルシウムの実 験結果の解析を中心に行った。

(2) 利用内容·結果:

今年度の目標は燃料物質の 模擬物質であるフッ化カルシ ウム (CaF2) に対して、高温で の熱物性を評価するために行 われた中性子非弾性散乱の結 果を、機械学習分子動力学を用 いて解析することである。

これまでに、機械学習ポテン シャルが、CaF2の様々な熱物 性値を良い精度で再現するこ とを確認してきた。本研究で は、このポテンシャルを用い て、中性子非弾性散乱で測定さ れる動的構造因子S(Q,ω)を評 価するコードを開発し、J-PARC で行われた実験結果と の比較を行った。図1に温度 1300K と室温での実験結果と 計算結果を示す。計算結果は、 分子動力学計算コード LAMMPS を用いて、 16×16×16 のスーパーセル (原 子数約 5 万)の CaF₂ に対し て、NPT, NVT で平衡状態にし た後、100 万ステップ(1ns) の NVE シミュレーションで 得られた原子の軌道をもとに して評価した。図1にあるよ うに計算結果は実験結果を非 常によく再現している。温度 が Bredig 転移温度(1400K)



図 1: CaF2 の動的構造因子。(a-d)は温度 300K,(e-h)は 1300K の結果。(a), (c), (e), (g)は J-PARC の実験結果。(b), (d), (f), (h)は機械学習分子動力学の計算結果。(a), (b), (e), (f)の横軸の波数 Q は (400)-(411)-(422), (c), (d), (g), (h) は(311)-(411)-(511). 縦軸はすべてエネルギー。

に近づくにつれて光学フォノンのソフト化と散漫散乱の増大が観測されているのが特徴的で ある。ソフト化に関しては図1の300Kで(411)でのフォノンのエネルギーが20meV程度ある のに対して、1300Kで10meV付近まで減少していることから分かる。このフォノンのモード

はF原子のみによる振動であり、F原子の超イオ ン伝導転移の前兆と思われる。また、散漫散乱は 図 1 の(400)-(411)-(422)のゼロエネルギー付近で 顕著に起きているのが分かる。図2の1300Kでの S(Q,ω=0)から分かるように、散漫散乱は特定の波 数 Q のところで観測されている。この散漫散乱も F 原子の超イオン伝導化によるものと考えられる が、超イオン伝導化した F 原子に対しても、なん らかの秩序が存在していることを示唆している。 このように、機械学習分子動力学を用いた中性子 非弾性散乱の解析は、実験をよく再現し、信頼性 が高く、定量的な評価が十分可能である。同程度 に信頼性が高い第一原理計算では、計算コストの 面で、このような評価は不可能であり、本手法の 優位性が確認できた。今後、燃料物質への信頼性 の高い応用が期待できる。



図 2: CaF₂のエネルギー0 での動的構 造因子の計算結果。縦軸、横軸は波数 Q。温度は 1300K。(200)-(222),(400)-(422),(022)-(222)で散漫散乱が観測 されている。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

国内会議

- 渡部 雅,加藤 正人,蒲沢 和也,梶本 亮一,中村 博樹,町田 昌彦,加倉井 和久, 「CaF2のブレディック転移と物性変化,1;高温中性子非弾性散乱測定」,日本原子力学会 2023 年秋の大会,2023 年 9 月,名古屋.
- 中村 博樹,町田 昌彦,渡部 雅,加藤 正人,「機械学習分子動力学による(Ca,Sr)F2の高 温物性の評価」,日本原子力学会 2023 年秋の大会,2023 年 9 月,名古屋.

査読付論文

 M. Kato, T. Oki, M. Watanabe, S. Hirooka, R. Vauchy, T. Ozawa, T. Uwaba, Y. Ikusawa, H. Nakamura, M. Machida, "A science-based mixed oxide property model for developing advanced oxide nuclear fuels", J. Am. Ceram. Soc., vol. 107, issue 5, 2024, pp. 2998-3011.

5.3.4 SPIRAL コードによる混合対流条件下大型燃料集合体試験解析

Analysis of Large-Scale Fuel Assembly Experiment at Mixed Convection Condition by SPIRAL

> 吉川 龍志、菊地 紀宏、田中 正暁 炉心・プラント解析評価グループ

(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。混合対流(自然・強制共存対流)となる自然循環時の燃料集合体内部では、 浮力により流速及び温度分布が影響を受け、流量再配分が生じる。この場合、燃料集合体中央 部の高温領域では浮力によって流速が増大することで摩擦損失が増加し、温度分布及び圧力損 失が相互に関係し合う複雑な現象となることから、燃料集合体内の温度分布を評価することが 難しく、崩壊熱除去性能評価において重要な評価項目となる。本研究では、燃料集合体内の詳 細な熱流動情報を数値解析によって取得し、燃料集合体内の温度分布を確認するためのリファ レンスコードとして整備を進めている燃料集合体熱流動詳細解析コード SPIRAL の自然循環 相当条件での予測特性の確認及び圧力損失を含む熱流動特性評価を実施した。

令和 5 年度は、91 本の模擬燃料ピン集合体水試験(Toshiba91 試験)^[1]の試験データを用 い、SPIRAL による圧力損失評価の精度確認と同条件下での集合体内の熱流動特性の把握を目 的に、集合体内の浮力による流量再配分が生じる層流領域の試験条件を対象に集合体内熱流動 解析を実施した。実機規模の燃料集合体を対象とするため解析要素数が多く、低流量の混合対 流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、大型計算機(HPE SGI8600) での高速 CPU による大規模・長時間(多ステップ)の並列計算が必須となった。

(2) 利用内容·結果:

1) 令和5年度課題の達成目標

低流量の混合対流条件下での 91 本模擬燃料ピン集合体水試験(Toshiba91 試験)^[1]を対象 とした熱流動解析を実施した。

図1に解析体系及び要素分割を示す。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9巻き分の範囲とした。入口 境界には下流側の断面との間で周期境界条件を適用した流速分布を、出口境界は上流側断面と の間で周期境界条件を適用した圧力分布をそれぞれ与えた。流入境界の温度を一定として、燃 料ピンの発熱は、被覆管内側表面に熱流束として設定し、ラッパー管の外側を断熱条件とした。 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-ε/k_θ-ε_θ*モデル^[2]を採 用した。SPIRAL による解析で使用した解析モデルの要素総数は約 1,884 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 2×10⁻⁵秒で 250 秒までの準定常解析を実施 した。

図2にSPIRALにより得られた鉛直断面における温度分布及び発熱部下端と上端の水平

断面における鉛直方向流速分布を示す。発熱部下端では集合体中心側で流速が低く、ラッパー 管側で流速が高い十分発達した流速分布であるが、発熱部下端から上端に掛けては模擬燃料ピ ンの発熱によって温度が比較的高い集合体中心側で正の浮力によって流速が上昇し、逆に、温 度が比較的低いラッパー管側では負の浮力によって流速が低下することで、集合体内で流量再 配分が生じる結果を得た。

下部非発熱部に対して、等温条件摩擦損失係数の解析結果は試験相関式と 5.5%の相対誤差 で一致している。また、浮力による摩擦損失の増加について、発熱部に対して摩擦損失係数の 解析結果は試験測定値と 11%の相対誤差で一致している。



2) 令和5年度の研究成果とその重要性

本課題では、大規模並列計算を有効に利用して、従来は困難であった低流量の混合対流条件 下における模擬燃料集合体内の詳細熱流動解析を実施し、本解析で得られた流速分布、温度分 布及び摩擦損失を分析することにより、燃料集合体内の浮力による流量再配分及び摩擦損失の 増大を詳細に解明することが可能となった。また、本解析は SPIRAL の妥当性確認の一環と位 置付けており、これらの妥当性確認を重ねて SPIRAL の信頼性を高め、燃料集合体設計で検討 される種々の燃料集合体に対し、様々な運転条件下での熱流動特性を数値的に予測することが 可能なリファレンスコードとする。さらに、SPIRAL による燃料集合体内熱流動詳細データの 適用により、設計評価コードであるサブチャンネル解析コードにおける解析モデルの高精度化 及び予測精度向上の実現、高速炉設計最適化や安全性評価に資することも目的としている。

参考文献

- K. Mawatari, F. Namekawa, N. Handa, F. Kasahara, Y. Ishida, "Natural Circulation Decay Heat Removal Experiments and Analysis in An LMFBR Assembly", Proceedings of the L.M.F.B.R. Safety Topical Meeting, Lyon, France, July 19-23, 1982, pp.281-290.
- [2] 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):

- R. Yoshikawa, Y. Imai, N. Kikuchi, M. Tanaka, H. Ohshima, "Validation of the Hybrid Turbulence Model in Detailed Thermal-Hydraulics Analysis Code SPIRAL for Fuel Assembly Using Sodium Experiments Data of 37-Pin Bundles", Nuclear Technology, vol.210, no.5, 2024, pp.814-835.
- 2) R. Yoshikawa, Y. Imai, N. Kikuchi, M. Tanaka, A. Gerschenfeld, "Validation Study of Thermal-Hydraulics Analysis Code SPIRAL to A Large-Scale Wire-wrapped Fuel Assembly Sodium Test at a Low Reynolds Number Flow Regime", Proceedings of the 30th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE30), Kyoto, Japan, May 21-26, 2023, ICONE30-1403.

3) N. Kikuchi, Y. Imai, R. Yoshikawa, N. Doda, M. Tanaka, "Investigation on Applicability of Subchannel Analysis Code ASFRE to Thermal Hydraulics Analysis in Fuel Assembly with Inner Duct Structure of Sodium Cooled Fast Reactor", Journal of Nuclear Engineering and Radiation Science, vol. 9, no.3, 2023, pp.031401-1-031401-11.

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

5.4.1 渦電流-超音波連成式を用いた 2D-EMAT コード 2D-EMAT Code using a Coupled Eddy Current-Ultrasound Formulation ミハラケ オビデウ マリウス プラント技術開発グループ

(1)利用目的:

Simulations of electromagnetic acoustic sensor transient response (EMAT) with high accuracy in both amplitude and signal shape using different integration techniques (as Crank-Nicolson, Backward Euler and Newmark-beta method) and high-order FEM elements to avoid large discrepancies in the EMAT signal shapes when using various FEM models.

(2)利用内容·結果:

The Electromagnetic Acoustic Transducer (EMAT) uses the combination of eddy current (ECT) and permanent magnet to generate ultrasonic (UT) waves in metallic materials. When a transient current passes through the wire in the ECT coil, the Lorentz force generated (due to the interaction between the magnetic field of the permanent magnet and the eddy currents induced in the metallic specimen) is the source of the ultrasound wave that propagates through the material toward a flaw and reflects back to the EMAT-ECT detection coil. Because EMAT can withstand high temperatures (up to 200^o Celsius degrees) and high radiations, it suitable the In-Service Inspection (ISI) of nuclear reactor vessels or under-sodium view telemetry in fast breeder reactors.

The EMAT sensor operation is based on a periodic time-transient pulse excitation at high frequency $(0.5\sim5MHz)$ in short bursts (<20µs). The numerical simulations of the EMAT signals use a finite element method (FEM) and a coupled ECT-UT system formulation, in a two-dimensional (2D) geometry, which integrates the time-transient solution in the EMAT detection area. Therefore, the EMAT signal, integrated as a voltage signal in the ECT coil, has a complex time-transient shape, which is usually evaluated only by the burst amplitude due to the presence of a defect in the metal plate.

The 2D-EMAT code, which was fully developed in the JAEA laboratory, is based on finite element method (FEM) and has CPU parallelization using OpenMP and GPU parallelization using OpenACC, in order to be used on JAEA supercomputer. The EMAT coupled model equations used in the JAEA code are shown in next equations:

$$\nabla \times (\nu \nabla \times A) = J_s - \sigma \left[\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial u}{\partial t} \times (\nabla \times A) \right] + \nu_0 (\nabla \times M)$$
(1)

$$G\Delta \boldsymbol{u} + (\lambda + G)\nabla(\nabla \cdot \boldsymbol{u}) - \sigma \frac{\partial A}{\partial t} \times (\nabla \times \boldsymbol{A}) = \rho \frac{\partial^2 \boldsymbol{u}}{\partial t^2}$$
(2)

where l, G are Lame parameters, \mathbf{A} is the magnetic vector potential, \mathbf{u} is the material displacement, \mathbf{J}_{s} is the transient current density in the coil, \mathbf{M} is the magnetization of the permanent magnet, s, n and r are the electric conductivity, magnetic reluctance and material density.

Until now, the numerical FEM simulations of the EMAT signal had large variations not only in the shape of the computed EMAT transient signal, but also in the amplitude of the defect, depending on the values of various parameters in the numerical FEM simulation model. The convergence of the EMAT signal simulation to the correct signal shape can only be achieved by using very large mesh discretization models and the correct time-transient procedure, resulting in very long time-transient steps. Although many EMAT simulations have been reported in the literature, there is no systematic approach to ensure the accuracy of EMAT signal simulations. Therefore, until now, it was very difficult to simulate reliable EMAT sensor operation with high accuracy in a reasonable time to use the simulations for future EMAT sensor design and signal analysis. Therefore, the purpose of the presents simulations was to find out the methodology to have reliable EMAT simulations, that could be also confirmed later by experimental measurements.

The 2D-EMAT code was updated from the previous Crank-Nicolson (CN) and Backward Euler (BE) integrations techniques to the Newmark-beta (NM) method. Additionally, new FEM interpolations elements were added in the code from 1st and 2nd triangles to 3^{rd, 4th} and 5th order for triangular elements and mixed triangular-rectangular elements with interpolation of 1st, 2nd and 3rd order.

Numerical simulations of long EMAT transient signal were conducted on JAEA supercomputer, and validated the convergence of all above three integration methods, but only when very large steps time/signal period were used. A schematic of the EMAT sensor detection system, when above a metallic plate, and the FEM mesh for a long metallic plate, with a defect located far from the sensor (EMAT coils and EMAT magnet) is shown in Figure 1. Figure 2 shows the simulations of EMAT signal amplitude and shape variation using Newmark (β , γ) method when the number of time steps/signal period increases from 512 to 10240. In order to simulate the propagation of EMAT signal, a large number of time periods of the signal has to be simulated (250~500), resulting in 5 million of FEM simulations, at
JAEA-Review 2024-044

each time step point. Therefore, it is required to find the methodology to compute the EMAT signal with high accuracy, but also in the shortest time possible, in order to be able to simulate the EMAT signal for faraway defects (from 0.3 mm to 1~2 meters in the future).



Figure 1. a) EMAT schematics; b) Geometry of the EMAT sensor and long metal plate



Figure 2. Simulations of EMAT signal with a varying amplitude A(t) around the peak zone using NM(β , γ).

The convergence of the EMAT signal amplitude and shape was demonstrated when using various integration techniques as CN, BE and NM and using high FEM elements, and is showing in Figure 3. By applying the new procedure to simulate the EMAT signal by FEM, based on Newmark-beta (0.5,0.5) and rectangular 3rd order (12 nodes) FEM mesh, it is possible to compute very quickly (0.5 hours vs. 18 days) the correct EMAT signal (as shown in Figure 4), which matches in both amplitude and shape the correct EMAT signal obtained by either method (CN or EB or NM(β , γ)), but only at a very high number of time steps/ μ s.



Figure 3. Convergence of EMAT signal with a higher time steps/ μs using BE, CN and NM methods



Figure 4. a) Accurate simulation of EMAT using BE, CN or NM and 65000 points/µs, in 18 days; b) Fast/accurate simulations using NM(0.5,0.5) and 64 points/µs, in 0.5 hours

The obtained results validate the path for future EMAT sensor optimization and simulation and other non-destructive applications in FBR, including also simulations of remote defect detection (1~3 meters) in metallic structures in a short and practical time, as it was further investigated and simulated when compared with experimental measurements of EMAT (shown in Figure 5).



Figure 5. EMAT for 20% deep defect (1060 mm far): a) Measurements; b) Simulation

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) O. Mihalache, I. Yamamoto, Accurate Simulations of EMAT Signal Amplitude and Shape based on FEM using a coupled ECT-UT formulation, 21st International Symposium on Applied Electromagnetics and Mechanics, November 12-15, Tokyo, Hachioji, (2023) (accepted for publication in International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics).
- 2) T. Yamaguchi, O. Mihalache, EMAT Based on Halbach Magnet Configuration for Detecting Faraway Defects in Long Metal Plates, 21st International Symposium on Applied Electromagnetics and Mechanics, November 12-15, Tokyo, Hachioji, (2023) (accepted for publication in International Journal of Applied Electromagnetics and Mechanics).

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

5.5.1 燃料デブリ取出し技術への適用に向けたレーザー加工技術シミュレーション手法の開発(1)、(2)
Development of Laser Processing Technology Simulation Method for Fuel
Debris Retrieval Technology(1),(2)

柴田 卓弥¹、山下 晋²、北村 竜明³、坂本 健作³、赤岡 克昭¹1 先進放射線計測研究グループ

2 炉物理・熱流動研究グループ

3システム計算科学センター

(1) 利用目的:

福島第一原子力発電所廃炉推進のための技術開発整備の一環として、レーザー加工を利用し た燃料デブリ取出し技術の利用が有望視されている。レーザー加工は遠隔操作が可能であり、 ロボットアーム等にレーザーヘッドを取り付けることで、人が近づけない放射線量の高い場所 や人が入れない狭隘部でも利用が可能である。さらに、ウォータージェットと組み合わせるこ とでより効率的にレーザー加工できることを実験で確認している。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た。これまでに開発を進めてきた解析手法は計算コスト が高かったため、より短時間で計算結果を得るために簡易的な解析手法の検討を行った。

(2) 利用内容·結果:

レーザー照射による金属の溶融とウォータージェットによる溶融スラグの移行挙動をシミ ュレーションにより評価、検討するために作製したモデル形状を図1、解析領域のメッシュ例 を図2に示す。多相多成分詳細熱流動解析コード(JUPITER、バージョン:2023/04/19)を 使用し、レーザー照射部を加熱することでレーザー照射を模擬し、レーザー照射と間欠ウォー タージェットを同時に走査(0.1 m/s)が可能な計算モデル系を作成した。また、作成したモデ ル系により、レーザー照射による対象物(ステンレス)の溶融と溶融物とウォータージェット (20.0 m/s)の衝突によって生じる溶融スラグの移行挙動について計算を行った。これまでの 実験で行った条件と同様にウォータージェットは、0.0~2.3 ms間は運転、2.3~18.5 ms間は 停止の条件とした。また、レーザー加工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。

図 2 解析領域メッシュ例

レーザー照射とウォータージェットを同時に走査して計算を行った結果、100.0 msec まで 安定した計算の継続と溶融スラグの移行を確認することができた。図3に示した100.0 msec 後の ParaView で可視化した画像から、実験結果と同様にレーザー照射を走査した位置が掘削 されており、本解析手法が有効である見通しを得た。また、図3に示したようにレーザー照射 によって溶融したステンレスがウォータージェットにより、掘削部から除去され図の上部に点 在していることが確認でき、実験の現象を再現できる見通しを得た。さらに、図4に示したよ うに、走査時間が経過するとともに掘削量が増加していることも確認できた。

一方で、計算時間が100.0 msec と短いため、実験結果と比較することが困難である。今後 は長時間の計算結果と実験結果と比較し、本解析手法の妥当性を評価する必要がある。

JAEA-Review 2024-044



図 3 溶融スラグの分布(100ms後)



図 4 掘削体積

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

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

5.6.1 粒子拡散モデル FLEXPART の SGI8600 への移植と並列化 Installation and Parallelization of the Particle Dispersion Model FLEXPART 古野 朗子 CTBT 技術協力室

(1) 利用目的:

包括的核実験禁止条約準備委員会(CTBTO)では、核実験の検知を目的に、放射性核種のほか、地震波、水中音波、微気圧振動波の観測を世界中に設置しているそれぞれ専用の CTBT 監視観測所で実施している。日本国内においては、締約国としての義務を果たすため、外務省が2002年に「CTBT 国内運用体制」を構築した。CTBT 国内運用体制においては、事務局を(公財)日本国際問題研究所が担当し、地震波および微気圧振動波の監視を(一財)日本気象協会が、放射性核種の監視を原子力機構が担当している。万一、核実験が疑われるデータが出現した場合は、日本気象協会および原子力機構(当室)がデータ解析を実施して事務局に提出し、事務局から外務省に報告されるシステムとなっている。

このような国内運用体制の検証能力および実効性の確認のため、関係者で年に3回、「国内運 用体制 統合運用試験」を実施している。各回8日間を試験期間として、3つの課題(北朝鮮 の核爆発実験を仮定した対応訓練、地震波・放射性核種それぞれのテーマに基づいた訓練)を 設定する。北朝鮮の核実験を想定した課題においては、試験期間の初日の午前9時に北朝鮮の 核実験場で人工地震波が観測されたというシナリオのもとで、日本気象協会は地震波の解析 を、当室は放射性核種の解析を実施し、結果を事務局に期間中毎日報告する。地震波のテーマ に基づいた訓練においては、日本気象協会が独自に設定した監視領域を期間中継続して監視す る。放射性核種のテーマにおいては、北朝鮮以外のエリアで核実験が起きたとの仮定の下で当 室が放射性核種の監視を実施する。なお、当室が解析に使用する監視データは試験期間に放射 性核種監視観測所で観測されたものである。

当室では、放射性核種の解析対象とする放射性核種監視観測所を大気拡散解析によって決定 している。震源地(核実験実施地)からの放射性物質の放出を仮定した大気拡散解析を試験期 間全体について実施し、放射性核種が一度でも到達した観測所を解析対象とするのである。対 象領域は放出点を中心とした数千キロ領域としている。

当室では従来、米国大気科学庁(NOAA)が開発した大気拡散モデル HYSPLIT¹¹をこの大 気拡散解析に用いてきた。HYSPLIT は動作が軽く操作性に優れたモデルであるが、NOAAの サイトで用意されている入力気象データには目的に応じた予報データがなく、解析値を利用し た拡散解析を毎日実施する必要があった。作業の効率化のため、CTBTO で広く使われている 大気拡散モデルのうち、ノルウェー大気科学研究所の A. Stohl 博士が開発した FLEXPART²⁾ を導入した。FLEXPART にはいくつかバージョンがあるが、当室では米国大気研究センター NCAR が開発した大気力学モデル WRF の出力を入力気象場として利用するバージョン

(FLEXPART-WRF)を利用している。WRFの入力として必要な全球予報データはインター ネット経由で無償ダウンロードできる。試験期間の初日に FLEXPART-WRF で予報データに 基づく拡散解析を実施すれば、これまで毎日実施してきた拡散計算を一度で済ませることが可 能である。

FLEXPART-WRF は HYSPLIT と比較して高精度の計算が可能である分、計算コストが高い。実際の核実験の際に迅速な計算が可能となるよう、令和5年度のプログラム高速化・並列化作業の支援を受け、FLEXPART について粒子分割による並列化を実施して高速化を図った。

※引用文献

- Stein A. F. et al., NOAA's HYSPLIT Atmospheric Transport and Dispersion Modeling System, Bulletin of the American Meteorological Society, Vol. 96, No. 12, 2015, 2059-2077, https://doi.org/10.1175/BAMS-D-14-00110.1
- 2) Stohl A., The Lagrangian particle dispersion model FLEXPART version 6.2, Atmos. Chem. Phys., 2005, Vo1.5, 2461-2474, https://doi.org/10.5194/acp-5-2461-2005.

(2) 利用内容·結果:

5月31日から6月7日までの8日間、令和6年度第1回統合運用試験が実施された。その 際当室では、北朝鮮の核実験を想定した課題のほか、放射性核種のテーマとしてロシア・ノバ ヤゼムリャ核実験場における核実験を想定した課題を選定して実施した。

このうち、ノバヤゼムリャ核実験場を想定した課題については、6月3日0時に人工地震波 が観測されたと仮定し、6月3日0時~6月8日0時(世界時間)について大気拡散解析を実 施した。入力気象データには米国 NCEP(National Centers for Environmental Prediction) の全球予報データを用いた。入力データの時間分解能は3時間、水平分解能は0.25°である。 WRFの水平分解能は40km、格子数は130×130とした。対象核種はXe-133であり、 FLEXPART-WRF内で放射性物質を模擬して拡散させる仮想粒子数は100万個とした。この 程度の水平分解能であれば、WRFの計算開始からFLEXPART-WRFの計算終了までの所要 時間は2時間以内であることが望ましい。逐次版を利用していた段階では、FLEXPART-WRF の計算だけで2時間43分を要していたが、今回の並列化作業により半分程度に短縮できる見 通しであり、今後の統合運用試験では並列版を利用する予定である。

図1は、計算開始から84時間後のXe-133の第1層濃度分布図である。星印が放出点(ノ バヤゼムリャ)であり、青い点は放射性核種監視観測所を示す。この解析においては、北大西 洋上に位置するスピッツベルゲン観測所(ノルウェー)およびレイキャビク観測所(アイスラ ンド)にXe-133が到達したため、これらの2観測所を解析対象として選定した。試験期間中、 これらの観測所では核実験が疑われる人工放射性核種の検出がなかったため、事務局にその旨報告した。



20240606_120000

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

1) CTBT 技術協力室,令和 5 年度日本国際問題研究所軍縮・科学技術センター受託契約 「CTBT 国内検証体制の確立・運用(放射性核種データの評価)」年次報告書,令和6年3 月,206p.

5.6.2 保障措置検認のための遅発ガンマ線分光法の開発

Development of Delayed Gamma-ray Spectrometry for Nuclear Safeguards Verification

> ロドリゲズ ダグラス チェイス 技術開発推進室

(1) 利用目的:

Nuclear safeguards verification of high-radioactivity nuclear material (HRNM) is challenged by the intense neutron and gamma-ray emissions from minor actinides and long-lived fission products. The International Atomic Energy Agency is interested in utilizing new techniques to improve safeguarding capabilities for HRNM, especially irradiated nuclear fuel from power reactors. The ISCN is developing Delayed Gamma-ray Spectrometry (DGS) as an active-interrogation technique to supplement current safeguarding capabilities by being able to directly measure the fissile nuclide content in HRNM. DGS utilizes an external neutron source to induce fission in the U-Pu mixed nuclear material, dominantly the fissile U-235, Pu-239, and Pu-241, and measuring the gamma-ray emissions from short-lived fission. Notably, the fission products with half-lives of ≤10 minutes emit many gamma rays with energies between 2700 and 6000 keV that can penetrate the thick Pb shielding required to suppress the extreme 662-keV gamma-ray emission from Cs-137 to reasonable count rates.

Our primary focus is to determine the DGS interrogation conditions to achieve accurate and precise fissile nuclide content evaluations using optimized, compact instruments. Specifically, we are developing an inverse Monte Carlo analysis method to determine fissile nuclide content in any mixed material form. However, the signal and signature will depend on the interrogation instrument capabilities, which must be optimized for both the form factor restrictions and the analysis requirements.

(2)利用内容·結果:

Two types of work were performed on the CCSE HPE SGI8600 cluster. First, we are developing a DGS Monte Carlo (DGSMC) to simulate an interrogation for both predictive Monte Carlo (MC) expectations and to perform inverse MC analysis on measured spectra. In JFY2023, we compared EC/JRC PUNITA experimental spectra [1] to DGSMC simulations to evaluate the validity of the code, as well as to FIER [2] and FISPACT-II [3] simulations to confirm nuclear data. Figure 1 shows ²³⁵U simulated spectra compared to the measured spectrum for the 10-s irradiation and measurement times at the end of 158 cycles. This study showed that we were able to show that DGSMC performs as well as FIER and FISPACT as a simulation code, results in closer comparisons to ²³⁹Pu spectra, and is viable for inverse MC analysis after better short-lived fission product yields can be



Figure 1. A measured 235 U spectrum compared to simulated spectra as indicated in the legend.

flux in the sample space and understanding shielding effects for operating in the JAEA/ISCN DGS Laboratory. Supplemental studies were performed for multiple types of deuterium-deuterium (D-D) neutron generators, finally settling on the Adelphi DD108+. In March 2023, the FSAI equipment and the DD108+ were both delivered (see Figure 2). This final design was reevaluated [4].

The other primary study performed with the Center for Computational Science & e-Systems (CCSE) HPE SGI8600 cluster was to re-evaluate the new JAEA/ISCN **Fission Signature Assay Instrument** MCNP [5](FSAI) model [6]. Originally studied in JFY2021-JFY2022, the model included generic materials, focusing on optimizing the



Figure 2. Fission Signature Assay Instrument with the D-D neutron generator.

evaluated in JFY2023 for differences from the idealized, design models [7,8], to ensure that it still qualified with the relicense, and that it provided signals for characterization. Specifically, we incorporated the real material compositions and adjusted the system geometries to understand the relative differences. Final characterization is underway and will be published upon conclusion.

- 1) Rodriguez DC, Bogucarska T, Koizumi M, et al., "Evaluation of high-energy delayed gamma-ray spectra dependence on interrogation timing patterns", Nucl. Inst. and Methods A 997, 2020, 165146.
- Matthews E, Goldblum BL, Bernstein LA, et al., "FIER: Software for analytical modeling of delayed gamma-ray spectra", Nucl. Inst. and Methods A 891, 2018, 111-117.
- 3) Sublet JCh, Eastwood JW, Morgan JG, et al., "FISPACT-II: An Advanced Simulation System for Activation, Transmutation and Material Modelling", Nucl. Data Sheets 139, 2017, 77-137.
- 4) Rodriguez DC, Rossi F, Takahashi T, "Comparing DGSMC, FIER, and FISPACT

simulations to experimental delayed gamma-ray spectra for nuclear safeguards development", IEEE Transactions on Nucl. Science 71 (3), 2024, 255-268.

- 5) Goorley JT, James MR, Booth TE, et al., "Initial MCNP6 Release Overview", Nuclear Technology 180, 2012, 298-315.
- 6) Rossi F, Koizumi M, Rodriguez DC, et al., "Design and characterization of the Fission Signature Assay Instrument", INMM-ESARDA Joint Annual Meeting, 2023.
- Rodriguez DC, Rossi F, Takahashi T, et al., "Model design of a compact delayed gammaray moderator system using ²⁵²Cf for safeguards verification measurements", Appl. Rad. And Isotopes 148, 2019, 114-125.
- 8) Rossi F, Koizumi M, Rodriguez DC, "Model design of a deuterium-deuterium neutron generator moderator and evaluation for delayed gamma-ray nondestructive assay for safeguards verification", Journal of Nucl. Science and Tech. 58 (3), 2021, 302-314.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Rodriguez D.C., Rossi F., Takahashi T., "Comparing DGSMC, FIER, and FISPACT Simulations to Experimental Delayed Gamma-ray Spectra for Nuclear Safeguards Development", IEEE Transaction on Nuclear Science, 71 (3), 2024, 255-268.
- 2) Rodriguez D.C., Akamatsu S., Rossi F., et al., "Delayed Gamma-ray Spectroscopy for Mixed Nuclear Material Safeguards Verification", 44th Annual Meeting of the Institute of Nuclear Material Management, Japan Chapter, Nov.21-22, 2023.
- 3) Rodriguez D.C., Abbas K., Bertolotti D., et al., "JAEA-JRC Collaborative Development of Delayed Gamma-ray Spectroscopy for Nuclear Safeguards Nuclear Material Accountancy", INMM-ESARDA Joint Annual Meeting, May 22-26, 2023, #331.
- 4) Rodriguez D.C., Rossi F., "JAEA/ISCN Delayed Gamma-ray Spectroscopy Inverse Monte Carlo Analysis Development Status", INMM-ESARDA Joint Annual Meeting, May 22-26, 2023, #332.
- 5) Rossi F., Koizumi M., Rodriguez D.C., Takahashi T., "Design and Characterization of the Fission Signature Assay Instrument for Nuclear Safeguards", INMM-ESARDA Joint Annual Meeting, May 22-26, 2023, #280.

5.7 安全研究センター Nuclear Safety Research Center

5.7.1 燃料挙動解析コード FEMAXI-8 の高速化

Optimization/Refactoring of Fuel Performance Code FEAMXI-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、大学、原子力規制庁、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:

本年度は昨年度に引き続き、スレッド並列化に必要なリファクタリング項目の整理課題の抽 出とその対応、OpenMP によるスレッド並列化指定下のビルド、テストラン等の作業を実施 した。FEMAXI において多くの運用で解析全体に占める計算コストの割合が最も大きく、且 つメッシュ間の依存性が極めて小さい、FP ガス移行モデルを並列化対象として検討を進め、 スレッド並列化時に特有の条件で生じるメモリ不正アクセス等数件のバグを発見・これらを修 正した。これらの修正を経て、スレッド並列化オプション有効時のビルドにより、解析が問題 無く実行できるケース・条件が広がったことを確認できた。一方、並列数を増やしたケースで は、依然として常微分方程式ソルバーモジュール内でのメモリ不正アクセスが原因と思われる プログラム実行停止が生じることも確認された。今後本年度検討で得られた成果を踏まえ、並 列実行時に問題を生じることが判明した一部のクラスの設計変更等、スレッド並列化対応を進 める。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

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

5.8.1 軽元素が示す特異な反応経路の探索と生体分子等の分子機能の計算科学研究 Computational Studies on Anomalous Reaction Related with Light Elements and Resultant Biomolecular Function

町田 昌彦、志賀 基之、中村 博樹、小林 恵太 システム計算科学センター

(1)利用目的:

本課題では、原子力研究開発分野において研究対象となる機能分子及び材料の設計に資する 計算科学技術の開発と機能分子及び材料に関する新知見の取得を目的とする。特に、本課題で は、分子に含まれる元素の質量数が軽いため、原子核の量子効果等が重要な役割を果たす元素 を多く含む分子群を主たる研究対象とする。主要な対象分子としては、生体分子(有機分子) とする。

本課題にて上記のような軽元素を含む分子に着目する理由は、質量数が軽い元素が分子内に 含まれることで、原子核の量子効果やその特異な反応特性等が分子物性に重要な影響を及ぼす ためである。従って、その量子効果や反応特性を考慮する最新の計算科学技術が必要となる。 本課題では、上記の軽元素を含む分子群に焦点を当て、その特性を高精度にシミュレーション 可能とする技術を研究開発する他、開発するシミュレーション技術を用いて、特異な物性や機 能(生体分子の場合は生体活性等)の解明を目標とする。また、新たな高精度な分子計算科学 技術を進展させることで、広く計算科学技術の発展やイノベーション創出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。

生体分子(有機分子)のセシウム吸着特性:

これまで、生体内の代謝物分子(有機分子)がセシウムを吸着する特性を有するかどうかを 調べるシミュレーション研究を実施し成果を創出してきた。尚、生体分子においては、水素が 極めて重要な役割を果たし、水素が移動することで、セシウム吸着に好都合な状態となる分子 が存在しており、本課題では、分子内水素移動等が、生体分子の機能発現に対し、どのような 役割を果たすかをシミュレーションにより定量評価し、生体分子のセシウム吸着に関する新知 見の取得を目指す。

(2) 利用内容·結果:

1)令和5年度課題の達成目標

令和5年度は、生体分子の放射性セシウム吸着機構解明に向け、主に下記の2つの研究課題 を実施した。

①地衣類代謝物のセシウム錯体形成力を計算により求め、地衣類のセシウム保持機構の一端 を解明する。

②キノコの色素分子とセシウム錯体形成力を計算により求め、キノコのセシウム蓄積機構の 一端を解明する。

2) 令和5年度の研究成果とその重要性

令和5年度は生体分子(特に上記②キノコの色素分子)の放射性セシウム吸着機構解明に向 けて、下記の研究成果(論文を執筆)を創出した。

"Computational Studies on Cs Complexation Selectivity of Chalcitrin and Comparative Analysis with Other pigments", Hiroya Suno, Masahiko Machida, (to be submitted).

当該論文では、キノコが持つ色素分子の一つである Chalcitrin に着目し、セシウムとの錯 体形成力を計算により評価した。Chalcitrin とは、ある種のキノコ、特に高い放射性セシウム 濃度が観測されるキノコにおいて産生されるが、その量は少なく希少化合物ではあるが、図1 に示すように、ハサミ状の分子形状をもつことから、ハサミ状の分子に挟まれる形でセシウム との錯形成が有利に進むと考えられる。実際、これまでの研究によると、同様の形状を持つ分 子である Norbadione A, Badione A らは、セシウムを挟み込み、セシウムに対して選択的に錯 形成をする分子であることが分かっていた。この背景の下、本論文では、初めて Chalcitrin と いう物質に着目し、セシウム選択性について計算科学的研究を行った。



図1 キノコ色素分子 (Chalcitrin) の分子構造: セシウム錯体 (紫: セシウム)

JAEA-Review 2024-044



図2 キノコ色素分子 (Chalcitrin) セシウム錯体の電子密度分布

図2は、そのキノコ色素分子(Chalcitrin)がセシウム錯体を形成した際に得られる電子密度分布を示している。この結果から分かることは、ハサミ状分子内のハサミの根本の電子密度が高く、根本とハサミ分子との結合力が大きいことが示唆される。これは、ハサミにより挟み込みによる安定化が期待できないと考えられ、セシウム選択性を有しないことが計算結果より判明した。

この結果は、選択性を有する Norbadione A 及び Badione A とは異なり、同じハサミ状分子 にもかかわらず、根本部分の可塑性がセシウム選択性を得るために必須であることが、本研究 の結果と上記分子の比較を通して理解できた。実際、キノコ自身が成長期に Norbadione A と Badione A をより多く産出することから、セシウム選択性とキノコの成熟度に相関があること も分かっており、キノコが成長期の際は、よりセシウムとの錯形成が進行する一方、成熟期に は、セシウムの濃集が緩和されることが説明できる。これについては、未だ、十分な生理学的 解釈は得られていないが、セシウム選択性と成熟度の関係と産生される代表色素分子種の間 に、相関があることは明らかであり、今後の興味深い課題の一つと考えられる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし

5.8.2 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 Substances Using Machine Learning

奥村 雅彦、中村 博樹、町田 昌彦、板倉 充洋、山口 瑛子、小林 恵太、山田 進 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。また、土壌に強く吸着した環境中 放射性セシウムについては、大規模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。一方、原子力発電は、地球温暖化の主要因の一つ とされる二酸化炭素の放出を抑える発電技術として、国が掲げる目標「2050年カーボンニュ ートラル」の実現のために不可欠である。そのために、安全な新型炉や強靭な構造材料の開発 が必要とされている。また、安全な使用済み核燃料の地層処分のためには、環境中の放射性核 種動体の解明が必要とされている。

このように、廃炉、新型炉燃料、構造材料、地層処分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ことで、 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ことで、物質の電子状態を知 ることが可能になり、分子動力学計算を行うことによって、原子・分子のダイナミクスを知る ことが可能になる。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安全に評価することが可能である。

上記の背景の下、本課題では、福島第一原子力発電所事故、新型炉核燃料、構造材料、地層 処分に関わる物理・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し、高精度かつ低計算コストであ る機械学習分子動力学法の開発、応用計算も実施する。

(2)利用内容·結果:

- 1) 令和5年度課題の達成目標
- 1. 機械学習分子動力学法コードの開発
 - 1.1 教師データのデータベースとそれを利用する統合システムの開発

機械学習分子動力学法は、大量の密度汎関数法の計算結果を教師データとして必要とする

が、申請者の知る限り、機械学習分子動力学法のための教師データのデータベースは存在しない。そこで、教師データのデータベースを作成し、昨年度から開発を続けている既存の機械学 習分子動力学法パッケージで上記のデータベースを簡単に利用可能にするインターフェース を作成する。また、自前の機械学習分子動力学法コードの作成も継続する。

令和5年度は令和4年度に作成した機械学習分子動力学法の教師データ作成、学習、分子動力学法の実行を制御する Python スクリプトを発展させ、全行程を自動化する Python スクリ プトの完成を目標とする。

2. 機械学習分子動力学法シミュレーション研究

2.1 廃炉関係:令和3年度に開始した U-ZrO 固溶体-過酸化水素溶液の固液界面の機械学習 分子動力学シミュレーションを目的として、過酸化水素溶液の機械学習ポテンシャルの作成を 継続する。令和5年度は、機械学習ポテンシャルの完成を目標とする。

2.2 新型炉燃料関係:当室で開発した ThO₂の機械学習ポテンシャルを高速化する。令和5年度は複数の記述子による性能の違いを評価し、ThO₂の機械学習分子動力学法に最適な手法及びパラメータを決定することを目標とする。

2.3 地層処分関係:粘土鉱物による放射性核種吸着現象のメカニズム解明に向けて、粘土鉱物の機械学習ポテンシャルを作成する。令和5年度はパイロフィライトの機械学習分子動力学法シミュレーションを実施し、物性を評価することを目標とする。

2) 令和5年度の研究成果とその重要性

- 1. 機械学習分子動力学法コードの開発
 - 1.1 教師データのデータベースとそれを利用する統合システムの開発 教師データ作成、学習、分子動力学法の実行を制御する Python スクリプトを作成した が、70%ほどの完成度に留まった。一方、パッケージリリースに向けて「nbdev」とい う Python パッケージ作成のための統合環境に開発環境を移行し、ユニットテストやド キュメントの作成を含めたパッケージ開発を統合的に進めた。
- 2. 機械学習分子動力学法シミュレーション研究
 - 2.1 廃炉関係:上記パッケージ開発に注力したため、本課題を進めることができなかった。
 - 2.2 新型炉燃料関係:適切なパラメータの決定に成功し、約2.1 倍の高速化を実現した。
 - 2.3 地層処分関係:パイロフィライトの機械学習分子動力学法シミュレーションを目標としていたが、その前に実施していた高圧下カオリナイトと超水和カオリナイトのシミュレーション研究の論文化に向けて、追加の物性評価を行った。

上記の結果のうち、高圧下のカオリナイト及び超水和カオリナイトの構造の圧力依存性について述べる。カオリナイトは、大気圧では図 1(a)に示されるような構造を取るが、水環境中2.5GPaを超える圧力下では、層間に水分子を含む "超水和カオリナイト"と名付けられた構造(図 1(b))が安定であるという予想が提案された(H. Hwang et al., Nature Geoscience 10,947 (2017))。提案されたモデルは層間距離の測定結果などから推測されたものであるが、微視的な構造については推測であり、数値シミュレーションで確認する必要があった。しかし、古典分

子動力学法において原子間力を規定する"力場"は大気圧下の物理量を再現するように調整されているために、高圧下で正しい結果を与えるかどうか不明であった。一方、第一原理計算は 圧力によらず適用可能であるが、計算コストの高さから層間に水分子を含む構造について粒子 数・体積・圧力一定(NVT)のシミュレーションを実施して統計を取ることが難しかった。そ こで、我々は、カオリナイトと超水和カオリナイトの機械学習ポテンシャルを作成し、NVT 機 械学習分子動力学シミュレーションを実施した。その結果、図1(c)のような関係が得られた。 まず、カオリナイト(点線)について、機械学習分子動力学法(赤点線)は実験で観測されて

いる高圧での構造相転移を 記述できているが、古典分子 動力学法(青点線)は記述で きないこと、超水和カオリナ イトについては、はっきりし とした構造相転移はないこ とがわかった。これは、高圧 下という極限的な環境にお ける粘土鉱物の記述には、既 存の古典分子動力学法では 不十分であり、機械学習分子 動力学法が必要であること を示している。



(c) カオリナイト及び超水和カオリナイトの構造の圧力依存性



図1. カオリナイト、超水和カオリナイトの構造圧力依存性

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

国際会議

- 1) <u>M. Okumura</u>, "Machine learning molecular dynamics simulations of materials with complex structures," the 7th International Symposium on Frontiers in Materials Science, 21-24 January 2024, Hsinchu, Taiwan. 【招待講演】
- 2) <u>M. Okumura</u>, "Machine Learning Molecular Dynamics: A Fast and Highly Accurate Simulation Method for Materials," the 4th International Conference on Data Driven Plasma Science, 16-21 April 2023, Okinawa, Japan. 【招待講演】
- 3) <u>M. Okumura</u>, <u>K. Kobayashi</u>, <u>A. Yamaguchi</u>, "Super-hydrated kaolinite under high pressure: A machine learning molecular dynamics study", 33rd Goldschmidt Conference, 9-14 July 2023, Lyon, France.

国内学会

 4) <u>奥村雅彦</u>, "統合機械学習分子動力学システムの開発とその応用",日本原子力学会 2024 年春の年会,東大阪市,大阪府,2024 年 3 月 28 日.

5.8.3 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放射性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。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、実験室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、吸着機構は不明である。

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、原子力発電所の事故で放出される元素にセシウム (Cs)とストロンチウム(Sr)があるが、Csは土壌表層に固定されるのに対し、Srは固定されず、 両者の環境動態は正反対である。この原因は、Csは粘土鉱物に対して脱水和して吸着する(内 圏錯体の形成)ため吸着力が強い一方で、ストロンチウム(Sr)は水和したまま吸着する(外圏錯 体の形成)ため吸着力が弱いことが考えられている。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、 Ra の水和構造および粘土鉱物への吸着構造について、世界初となる広域 X 線吸収微細構造 (EXAFS)法を用いた解明を目指すとともに、シミュレーションを用いた解明も実施し、Ra の 吸着挙動、ひいては環境中での動態を解明することを目的とする。

これまでに報告されている実験結果に基づくと、Ra は内圏錯体を形成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。 尚、粘土鉱物は原子数が多い構造のため、HPE SGI8600を用いて計算を行う。

(2) 利用内容·結果:

令和5年度の研究成果とその重要性

粘土鉱物への吸着反応は様々な元素の環境挙動を支配するため重要であるが、吸着イオンに よってその影響は大きく異なる。例えば原子力発電所の事故から放出された放射性セシウム

(Cs)は土壌表層に強く固定されたが、同様に 放出された放射性ストロンチウム(Sr)は固定 されなかった。両者の環境挙動の違いは、粘 土鉱物への吸着構造が異なるためと考えら れる。Cs+が粘土鉱物に吸着する際には、脱水 して吸着し内圏錯体を形成することが知ら れている。一方で Sr²⁺が吸着する際には、水 和したまま吸着し外圏錯体を形成すること が知られている(図 1)。一般に内圏錯体の方 が外圏錯体よりも脱着しにくいため、放射性 Csは土壌表層に固定される一方で Sr は固定 されないという環境動態の違いが生まれた と考えられる[1]。このように、マクロな環境 動態を理解したり推定したりするためには、 分子レベルの吸着構造の理解が必須である。 しかし、粘土鉱物への吸着反応は複雑なた め、吸着構造を決める要因は不明である。ま た、本研究で着目しているラジウム(Ra)につ いては、その取扱いの難しさから、吸着構造 の解明はこれまで行われていなかった。そこ で、本年度では、(i)Raの粘土鉱物への吸着構



図1. 内圏錯体と外圏錯体の違い.



図 2. Ra の EXAFS スペクトル. 水和とモンモリロナイトでは第一殻のみ、 バーミキュライトでは第二殻も見られる。 実線は測定結果を、破線は解析結果を示す。

の解明および(ii)同族元素との比較や異なる粘土鉱物種の比較を通してより一般化された知見 を取得することを目指した。

(i)について、Ra の粘土鉱物吸着構造の解明を実験と計算の両面から行った。実験について は、広域 X 線吸収微細構造(EXAFS)法を利用し、放射光施設 SPring-8 にて粘土鉱物 Ra 吸着 試料の測定を行った。粘土鉱物としてバーミキュライトとモンモリロナイトを用いた。その結 果、Ra はバーミキュライトに対して内圏錯体を形成する一方、モンモリロナイトについては 外圏錯体を形成することがわかった(図 2)。得られたスペクトル解析し、Ra とその周辺原子の 距離を算出した。特にバーミキュライトに吸着した Ra については、酸素(O)やケイ素(Si)との 距離 Ra-O1、Ra-O2、Ra-Si、がそれぞれ 2.87 Å、4.17 Å、3.76 Å であることがわかった。

計算については、水分子が層間に存在しない内圏錯体の形成に着目した。バーミキュライト

の層間に Ra が吸着した構造につ いて、VASP を用いて構造最適化 を行った。得られた構造について、 Ra とその周辺の原子の距離を計 算し、ヒストグラムを作成したと ころ(図 3)、上記の実験結果と整合 し、モデルの妥当性が確認された。

(ii)について、様々な元素を吸着 した粘土鉱物の安定性をポテン シャルエネルギーによって評価 した。その結果、エネルギーの最 小 値 は 2 価 イ オ ン Mg>Ca>Sr>Ba>Ra, 1 価イオン で Na>K>Rb>Cs となり(図 4)、 イオン半径の順と一致した。ま た、イオン半径が大きいイオンで は b 軸の値が 0 (粘土鉱物の空洞



図 4. 様々な元素を吸着した粘土鉱物の ポテンシャルエネルギー

の中心)の時にポテンシャルエネルギーが最小になることから、粘土鉱物の空洞とイオンのサ イズ適合性が重要であることがわかった。

粘土鉱物では、層構造中のSiがAlを置換することで電荷を生成するが、SiとAlの正確な 配置を実験から明らかにするのは難しい。そこで本研究では、SiとAlの配置や置換量が異な る4種類のモデルを作成し、同様の計算を行った。その結果、上記の「イオン半径が大きい方 が安定であり、その際、粘土鉱物の空洞の中心が最も低エネルギーになる」という傾向が見ら れ、この傾向はSiとAlの配置や置換量によらないことがわかった。こういった系統的な調査 および知見により、様々な元素の吸着構造を推定することができ、その結果に基づいて様々な 元素の環境挙動を推定したり理解したりすることに役立つ。例えば、福島第一原子力発電所の 事故によって放出された放射セシウムの挙動にも粘土鉱物が重要であることが知られており、 今回の知見は放射性セシウムの環境動態解明にも資する。以上の内容をまとめて国際査読付き 論文に投稿し、令和6年に出版された。

参考文献:

- A.Yamaguchi et al. J. "Local structure of strontium adsorbed on 2:1 clay minerals and its comparison with cesium by XAFS in terms of migration of their radioisotopes in the environment", Radioanal. Nucl. Chem. 317,545-551(2018).
- (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):
 - <u>A. Yamaguchi</u>, Y. Kurihara, K. Nagata, K. Tanaka, S. Higaki, T. Kobayashi, H. Tanida, Y. Ohara, K. Yokoyama, T. Yaita, T. Yoshimura, <u>M. Okumura</u>, Y. Takahashi, Molecular geochemistry of radium: a key to understanding cation adsorption reaction on clay minerals, Journal of Colloid and Interface Science, 661, 2024, pp. 317-332.

5.8.4 第一原理計算による原子力材料劣化機構の研究

First-Principles Study of the Degradation of Nuclear Materials

山口 正剛 シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

原子力用構造材料には様々な劣化の問題が存在する。たとえば軽水炉においては圧力容器の 照射脆化、シュラウドの応力腐食割れなどがあり、後者においては腐食反応に伴う水素脆化の 可能性が指摘されている。加速器駆動未臨界炉のターゲット窓材においては鉄鋼材料の熔融鉛 ビスマスによる腐食による劣化とともに機械試験において見られる液体金属脆化が懸念され ている。このように原子力材料(主に鉄鋼)には劣化や脆化の問題が様々あり、それらは材料 の寿命を決定するため、そのメカニズムを解明し科学的根拠に基づいた対策を施すことが、軽 水炉等原子炉の安全性向上にとって必要である。本研究では、物質の性質を支配する原子・電 子の振る舞いを記述する第一原理計算を用い、劣化や脆化メカニズムの原子・電子論からの根 本的な理解を目指している。

(2) 利用内容·結果:

原子力用構造材料の一つにオーステナイトステンレス鋼があり、この鋼は母体の鉄元素が FCC構造をもち、NiやCrなどの合金元素が数十パーセントという高い割合で含まれ、かつ、 各元素の磁性スピンがランダムに配置して常磁性状態となっている。このような合金元素と磁 性スピンがランダムに配置した合金に関しては、一般的に第一原理計算は1通りの計算では済 まず、多数の可能な配置に対して計算し、その結果を平均化する等の過程が必要となるほか、 磁性スピンの反転等が原因で計算が困難となっている。オーステナイト系ステンレス鋼の興味 深い性質の一つとして、Ni量が多い場合に水素脆性に対する耐性が高いことが知られている。 このため、水素ステーションなどで使われる鉄鋼材料は主にNi量の多いオーステナイト系ス テンレス鋼である。近年、コスト削減を目指してこのようなオーステナイト系ステンレス鋼の 耐水素脆性が研究されているが、水素の多量添加により強度や延性が上昇するという、非常に 興味深い性質が見出されている。

このように、オーステナイト系ステンレス鋼の合金成分制御による耐水素脆性材料の研究開 発がなされ、Cr や Ni のような合金成分と水素吸蔵量との関係が調べられている。本研究で は、オーステナイト系ステンレス鋼の水素溶解エネルギーの第一原理計算を試み、水素吸蔵量 の測定結果と比較し、計算技術の開発と計算結果の定量性の検証を、実験との比較を行いつつ 試みた。具体的には、図1のような合金成分(Cr, Ni, etc.)をランダムに配置したセルを用いた 第一原理計算によって水素溶解エネルギーの第一原理計算を試み、実験と比較を行い計算精度 の検証を行った。必要なセルサイズの検証、磁性の影響等などの解析などを詳細に行う。令和 4 年度中は、ランダムな原子配置やスピン配置に関する計算を行う前に、最も安定な時期構造 である Antiferromagnetic doublelayer (AFMD)構造の FCC 鉄に 1 個あるいは 2 個の Ni 及び Cr 原子を導入した計算を行い、FCC 鉄中の水素溶解エネルギーに対する Ni や Cr 原子の添加 の影響を詳細に調べた。

令和4年度中に二重反強磁性配置を仮定した磁気構造を持つ32原子のFeを含むセル中に、 1-2原子のCrやNiを置換して配置し、水素吸収エネルギーを計算し、このエネルギーに対す るFcc鉄中のNi原子Cr原子の影響を詳細に調べた。そして水素吸収エネルギーのNi,Cr濃 度依存性をモデル化して実験における水素吸収量とそこから算出される水素吸収エネルギー を比較すると、かなりよく一致することが分かった。その次の段階として令和5年度は、以上 のような二重反強磁性配置を仮定せず、ランダムな常磁性をSQS法により小さいセル内でモ デル化したセルを用いて、水素吸収エネルギーの計算を試みた。

図 2(a)は、Fe-36Ni の SQS 配置の原子配置において AFMD 磁気構造を仮定した場合の水 素吸収エネルギー(Esol)と水素占有率(Occupation)の分布である。令和4年に計算した、SQS 配置を用いない二重反強磁性(AFMD)磁気構造のセルモデルにおける水素吸収エネルギーの 計算結果を(AFMD-model)として示した。図 2(b)は、常磁性構造の計算結果である。常磁性磁 気構造はコリニアーとし、スピンのアップとダウンを別の元素として扱うことで常磁性構造を 作っているが、32 原子という原子数の少ないセルのため、ランダムな構造の再現に不十分な 点があるなど、計算結果に懸念は残る。

AFMD-model と今回の SQS 計算結果を比較すると、SQS 計算結果では水素吸収エネルギーにばらつきが生じており、現実の水素吸収エネルギーのサイト毎の違いをある程度反映して 再現しているのではないかと考えられる。二重反強磁性磁気構造と常磁性構造の間にも、水素 吸収エネルギーのばらつきに違いが見られる。点線は水素占有率の平均であり、これらを実験 値(約 0.01)と比較すると大きめに算出されている。

- Fe50% Cr25% Ni25%
- Special Quasirandom Structure (SQS)



32 atom/cell 図1 32 原子を用いた SQS モデル



図2 溶解エネルギー(Esol)と占有率(Occupation) (a) AFMD (b) 常磁性

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) <u>M.Yamaguchi</u>, T.Tsuru, K.Ebihara, M.Itakura, "First-principles calculations of hydrogen trapping energy on incoherent interfaces of aluminum alloys", Materials Transactions 64, 2553-2559 (2023).
- 2) (解説記事) <u>山口正剛</u>,「液体金属脆化の元素選択性と脆化メカニズム:第一原理計算」ま てりあ, 62巻, 10号, 646-651 (2023).
- 3) (招待講演)<u>山口正剛</u>,格子欠陥と第一原理計算 -金属の粒界脆化とすべり変形について-第 32 回格子欠陥フォーラム, 2023 年 9 月 16 日,東北大金研(仙台).
- 4) (国際会議) <u>M. Yamaguchi</u>, T. Tsuru, K. Ebihara, M. Itakura, First-principles calculations of hydrogen trapping energy on incoherent interfaces in aluminum alloys, MRM2023/IUMRS-ICA2023, December 11-16, 2023, Kyoto, Japan.

5.8.5 水素材料の第一原理分子動力学計算

First-principles Molecular Dynamics Simulations of Hydrogen 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:

本課題では、原子力分野の先端科学において重要な役割を果たす水素材料物性の微視的解明のため、水素材料の第一原理分子動力学計算を行う。

原子力関連の水素科学研究の裾野は幅広い。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。水素物性は様々な場面で重要な役割を演じ、その起源となる水素の 微視的振る舞いの解明が欠かせない。一方、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。日本政府 は、令和4年に温室効果ガスの排出を全体としてゼロにする「脱炭素社会」を目指すことを宣 言し、令和4年にはGX実現に向けた基本方針案を打ち出した。これに伴い、次世代燃料電池 やバイオマス変換など、水素利用技術に関わる材料設計に向け、固体や液体材料中の水素振る 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。

水素は、水などの液体、金属中などの固体内部、有機物質などの生体分子中など、様々な環 境の中であまねく存在している元素である。水素の特徴は、原子価を+1から-1まで変幻自在 に変化させることや、量子性を帯びていて物質中を動き回りやすいことなどであり、水素材料 の物性を豊かにしている。しかし、水素は、X線に反応しないなど、観測の難しい元素でもあ る。このため、計算科学への期待が高まっている。そこで、申請者は水素系の計算科学的研究、 計算科学技術開発に取り組んでいる。その研究成果の一部は、分子科学会奨励賞(志賀基之、 「水素の量子統計的ゆらぎを考慮した第一原理分子動力学計算」、2010年)、分子シミュレー ション研究会学術賞(志賀基之、「水素・重水素の量子統計力学を反映した量子論的分子シミ ュレーション」、2010年)の受賞対象となってきた。

申請者は、複数の水素関連プロジェクトに参加している。文部科学省の新学術領域研究「ハ イドロジェノミクス」計画研究「水素の先端計算による水素機能の高精度予測」(平成 30 年度 ~令和4年度)、基盤研究B「電子と原子核の量子論に基づく水素エネルギー材料の第一原理 設計」(令和3年度~令和5年度)、基盤研究B「鉱物の水素同位体効果の解明:第一原理経路 積分分子動力学計算法と高圧実験による展開」(令和5年度~令和7年度)、基盤研究C「第一 原理半古典分子動力学による物質中水素の量子振動スペクトル計算」(令和5年度~令和7年 度)を進めてきた。また、スパコン富岳電池課題「次世代二次電池・燃料電池開発によるET革 命に向けた計算・データ材料科学研究」(令和2年度~令和4年度)にも関わってきた。これ らのプロジェクト推進において、原子力機構の大型計算機環境は基盤インフラとして欠かせな い存在である。これまで、原子力機構の計算機利用による成果は、国際誌論文などを通じて多 数発表し、実績を積んできた。

(2) 利用内容·結果:

a)水・氷の構造と動力学

常温常圧下の液体状態における重水

(H₂O, D₂O, T₂O) について、第一原理経 路積分分子動力学計算を行い、構造解析 を行った。その結果、重水の種類によって 水素結合の強さに差があり、分子内およ び分子間の原子間距離に違いが現れるこ とを見出した。これは、水素・重水素原子 の質量差がもたらす量子効果のためであ る。

水の酸素·水素原子間、水素·水素原子間 動径分布関数動径分布関数を図 1 に示 す。この関数の凹凸が大きくなるほど、水 分子間の水素結合が強いことを表す。ピ ークの高さは、水分子が互いに接する確 率を表しており、水素結合構造の強度を 表す特徴量の一つである。計算結果は、 H₂O, D₂O に関して中性子回折実験とよ く一致している。一方、T₂O は放射性で

あることから実験結果は存在しない。本



図 1:水の第一原理経路積分分子動力学計算から 得られた水の重水素置換体(H₂O、D₂O、T₂O) における酸素-水素原子間(左)、水素-水素原子 間の動径分布関数(右)。計算(カラー色線)と 中性子回折実験(黒色線 H₂O、灰色 D₂O)の比 較。なお、実験(灰色 D₂O)の曲線が近距離にお いて 0 になっているのはデータ不足によるアー ティファクト。

研究では、T₂O, D₂O, H₂O の順でピークが高い結果になり、D₂O のみならず T₂O も H₂O よ り水素結合が強いことが計算で示された。

さらに、実験結果のない半重水(HDO, HTO)の計算を行った。H, D, T が混合する水にお いて、同位体を区別した半重水の構造は実験で測定困難であり、計算による予測となる。その 結果によれば、HDO と HTO の分子構造は非対称であり、その周りに作られる水素結合構造 の対称性が崩れている。なお、第一原理計算による HTO (トリチウム水)の構造に関する研 究事例はこれまでなかったため、本報告が世界初となった。この計算技術を応用して、高圧氷 の弾性定数に関する量子効果の存在を明らかにした (Tsuchiya, Shiga, Tsuneyuki, Thomsen, Physical Review Research 6 (2), 023302)。

b) 固体材料中の水素拡散

水素は他の元素よりも金属中を高速で拡散できることが知られている。水素のこの特徴は、 水素吸蔵、燃料電池など様々な金属材料の脆化要因になっていると考えられている。ところが、 水素拡散の機構をより詳しく知るために必要な拡散係数の精密決定は、現在もなお容易ではな い。実験では測定可能な温度領域が制約され、作成試料によって測定データのばらつきが見ら れる。一方、第一原理計算では拡散経路に関 する事前知識なしに行うと膨大な計算時間 を要する。そこで本研究では、第一原理計算 を模倣した機械学習ポテンシャルを用いて、 水素拡散係数を評価した。機械学習ポテンシ ャルは計算を大幅に加速するため、拡散経路 に関する事前知識なしに運動論的効果を含 めた経路積分分子動力学計算を実行可能に する。

本研究では、体心立方構造金属 Nb, Fe, W 内部における水素の同位体 (H, D, T)の拡散 係数に対して計算を行った (Kwon, Shiga, Kimizuka, Oda, Acta Mater., 247, 118739 (2023))。図2は、Nb 中水素拡散係数の温度 依存性に関する計算結果を実験と比較した ものである。通常の古典分子動力学法

(CLMD)では、低温になるに従い拡散係数 を過小評価する様子がわかる。これは水素原 子の量子効果(トンネリング、零点振動)が 反映されていないためである。一方、量子論



図 2: Nb 中における水素同位体 H (黒)、D (赤),T(青) 拡散係数の温度依存性。白抜 きのシンボルは実験値、色つきのシンボルは 計算値。実線は古典分子動力学法(CLMD)、 四角は経路積分に基づく量子遷移状態理論 (PI-QTST)、三角は半古典論である経路積分 セントロイド分子動力学(CMD)による計算

に基づく量子遷移状態理論(PI-QTST)や、半古典論である経路積分セントロイド分子動力学 を用いると水素原子の量子効果が正しく反映されて、広い温度領域で実験値を再現する。質量 の小さい水素同位体の順(H, D, T)で量子効果が大きい。こうして、第一原理計算を模倣した 機械学習ポテンシャルと量子効果を考慮した経路積分法を組み合わせた精緻な計算によって、 体心立方構造金属中における水素拡散係数を定量的に評価した。低温領域で実験的評価が難し い重水素拡散についても、信頼性ある予測データが得られた。

c) 第一原理分子動力学法開発

物質中における水素の状態は、量子振動スペクトルに反映される。そこで、実験で観測され る量子振動スペクトルを理論的に解釈するのに、計算との比較が重要になる。しかし、量子振 動スペクトル計算を直接行おうとすると、量子位相の振動的振る舞いに起因した「符号問題」 によって計算が膨大となってしまう。そこで、現実的な計算量で量子効果を近似的に扱う半古 典論が求められている。従来の半古典従来法として CMD, RPMD が提案されてきたが、これ らは非物理的な振動回転カップリングが顕著になり計算が破綻してしまう問題がある。そこ で、量子的粒子の重心運動に対する Newton-like な方程式と、非重心運動に対する過減衰 Langevin 方程式を連立して解くことで、上記の非物理的運動を抑制することを提案した。こ れを用いて水の赤外吸収スペクトルの計算を行い、量子振動スペクトルが正確に評価されるこ とを示した(前年度成果発表)。さらに、金属中水素における非弾性散乱スペクトルを計算したところ、実験をよく再現することを実証した(Shiga, Thomsen, Kimizuka, Physical Review B 109 (5), 054303)。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 【論文(査読付)】<u>M. Shiga</u>, <u>B. Thomsen</u>, H. Kimizuka, "Inelastic Neutron Scattering of Hydrogen in Palladium Studied by Semiclassical Dynamics" Physical Review B 109 (5), 054303 (2024).
- 2) 【論文(査読付)】J. Tsuchiya, <u>M. Shiga</u>, S. Tsuneyuki, E. C. Thompson, "Nuclear quantum effect on the elasticity of ice VII under pressure: A path-integral molecular dynamics study" Physical Review Research 6 (2), 023302 (2024).
- 3) 【論文(査読付)】<u>志賀基之,トムセンボー</u>,永井佑紀,"ソフトウェア紹介「PIMD」", 分子シミュレーション学会会誌アンサンブル,25,303-310 (2023).
- 4) 【論文(査読付)】H. Kwon, <u>M. Shiga</u>, H. Kimizuka, T. Oda, "Accurate description of hydrogen diffusivity in bcc metals using machine-learning moment tensor potentials and path-integral method" Acta. Mater., 247, 118739 (2023). IF = 9.4
- 5) 【著書 (共著)】<u>M. Shiga</u>, "Hydrogenomics: The Science of Fully Utilizing Hydrogen", S. Orimo, K. Fukutani, K. Fujita (Eds.), (Kyoritsu, 2023).
- (国内会議) <u>志賀基之</u>, "並列分子シミュレーションソフトウェア PIMD について", Quloud-PIMD セミナー (2023/12/13), 東京 (招待講演).
- 7) 【国内会議】<u>志賀基之</u>, "経路積分理論に基づく半古典動力学", 分子シミュレーション学 会 (2023/12/4), 福井 (口頭発表).
- 8) 【国際会議】<u>M. Shiga</u>, "Brownian Chain Molecular Dynamics: A Semiclassical Path Integral Approach", The 6th International Conference on Molecular Simulations (ICMS 2023), (2023/10/8), Taipei (招待講演).
- 9) 【国内会議】 <u>志賀基之</u>, "経路積分に基づく半古典動力学による振動スペクトル計算", (2023/9/13), 第17回分子科学討論会, 大阪大学 (ポスター発表).
- 【国際会議】<u>M. Shiga</u>, "Brownian Chain Molecular Dynamics: A path integral approach for vibrational spectra", The 5th conference of Theory and Applications of Computational Chemistry (2023/9/8), Sapporo (招待講演).
- 11) 【国際会議】<u>M. Shiga</u>, "Path Integral Brownian Chain Molecular Dynamics: A Semiclassical Approach for Vibrational Spectra", 34th IUPAP Conference on Computational Physics, (2023/8/8), Kobe (口頭発表).
- 12) 【国際会議】<u>M. Shiga</u>, "Probing Quantum Effects in Materials by Ab Initio Path Integral Simulations", CECAM Flagship School on Path Integral Quantum Mechanics (2023/6/8), Tel Aviv (招待講演).

5.8.6 機械学習分子動力学による原子力分野における非晶質物質の高精度物性解析 Analysis of Physical Properties of Amorphous Materials in the Nuclear Field by Machine Learning Molecular Dynamics

小林 恵太、奥村 雅彦、町田 昌彦 シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

原子力分野では、既存の分子シミュレーション技術では扱いが困難な、様々な複雑な物性に 対し高精度なシミュレーションを実施する必要性がある。例えば、コンクリート物質・粘土鉱 物における放射性物質の移行・吸着過程の把握には水溶液・物質中の放射性核種の拡散、化学 反応を考慮した分子シミュレーションが必要となる。また、福島第一原子力発電所での過酷事 故の様な状況下では溶けた燃料の詳細物性の把握等が必要となる。以上のような複雑物性を原 子レベルから解析するには古典分子動力学等の手法が有用であると考えられるが、古典分子動 力学は経験的なパラメータに強く依存するため、得られた結果の信頼性には十分な検討が必要 となる。一方、経験的なパラメータに依存しない高精度計算として、量子力学計算に基づいた 第一原理計算が存在するが、その計算コストの高さから、扱えるシステムサイズとシミュレー ション時間が強く制限される。本課題では、第一原理計算と同等の精度で分子動力学の実行が 可能となる機械学習分子動力学法を用い、原子力分野において必要となる各種複雑物性に対す る高精度分子シミュレーション技術の開発を行う。以下に具体的な研究対象を記す。

・セメント材料及び粘土鉱物中の放射性セシウムの吸着・拡散挙動の解析

福島第一原子力発電所の事故により、大量の放射性セシウムが吸着したコンクリートや 土壌が存在する。コンクリート、粘土における放射性セシウムの吸着形態の詳細を解明 していくことは重要である。機械学習分子動力学を用いることにより、コンクリート物 質・粘土に対する高精度分子シミュレーションを実施し、コンクリート物質・粘土鉱物 における放射性セシウムの吸着・拡散挙動を明らかにする。

・機械学習分子動力学による非晶質物性の解析

多くのセメント・粘土物質は非晶質的な構造を取ることが知られている。また、核燃料 の融解・凝固現象を明らかにするためには、液体・非晶質物性を高精度に記述可能な機 械学習力場の開発が必要である。本課題では最も代表的な非晶質物質であるアモルファ スシリカの物性や核燃料の融解・凝固現象を高精度に記述可能な機械学習力場の構築を 行う。

(2) 利用内容·結果:

1) 令和5年度の研究成果とその重要性

令和5年度はアモルファスシリカの中距離構造の解析を実施した。一般に非晶質物質には結 晶のような秩序は存在せず、短距離秩序のみが存在すると考えられているが、アモルファスシ リカを代表とする、幾つかの非晶質物質では中距離秩序構造が存在することが示唆されてい る。この中距離秩序は X 線・中性子回析において低波長領域に鋭い第一ピーク(FSDP)として 観測され、その構造起源に関しては長い間議論されてきた。アモルファス物質における中距離 秩序はガラスの透明度・高屈折率と関連しており、光ファイバーを用いた大規模光通信等の産 業応用においては重要である。また、中距離秩序構造は、融解物質のガラス形成能力と関連し ていることが示唆されているため[Kohara, S et al. Scientific Reports (2021)]、物質の融解・ 凝固の基礎的理解にとっても重要である。FSDP は圧縮により大きく変化することが報告され ており、低温で圧縮したシリカガラスと高温で圧縮したシリカガラスの FSDP はそれぞれ減 少[Kono, Y. et al. Nat. Commun (2022)]、増大[Onodera, Y. et al. NPG Asia Mater (2020)]す ることが報告されている。図1(a)は室温圧力下(低温圧縮)と高温塑性変形(高温圧縮)にお けるアモルファスシリカの FSDP を機械学習分子動力学により計算したものである。機械学 習分子動力学は低温・高温圧縮における実験データの振る舞いを再現することができた。 FSDP を生み出す中距離の秩秩序構造の起源に関しては、数多くの理論やモデルが提唱されて きたが、アモルファスシリカにおいては、ケイ素・酸素共有結合によって形成されるリング構造 間の中距離の周期性(図1(b))に起因するという説が有力である。我々は、コンピューター上 に精確に再現されたアモルファスシリカの構造データに対し、リング中心の相関関数やパーシ ステントホモロジーを用いた解析を行うことにより、実際にリング構造間の中距離の周期構造

が FSDP を生み出してい ることを確かめた。また、 高密度アモルファスシリ カにおける中距離秩序構 造の変化を明らかにする ために、圧縮時のリング 構造の変形挙動、特にリ ングのアスペクト比(リ ングの短辺と長辺の比率 l2/l3、図 1(c)の差し込み 図)に注目した。その結 果、低温圧縮では、全て のリングのアスペクト比 が変化するのに対し、高 温圧縮では、大きなリン グのアスペクト比がより 大きく変化し(図1(c))、 細長くなることが分かっ た(図1(d))。この結果 は、高温圧縮ではリング の短辺の長さスケール



高温圧縮では大きなサイズのリングが顕著に変形、異なった大きさのリングの短辺の長さが揃う

図1.(a): アモルファスシリカの構造因子における FSDP。(b): ケイ素・酸素 のリング構造に現れる中距離の周期性。(c): 圧縮に対するリングアスペク ト比の変化。(d): 圧縮に対するリングの変形挙動。 が、小さなリングから大きなリングまで揃うことになり(図1(d))、リングの長さスケールが 均一化することで、リング間の周期性が発達し、FSDPの発達に寄与していることが分かった。 本課題によりアモルファスシリカにおける中距離秩序構造の変化はリング構造の変形挙動に より特徴づけられることが明らかになった。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

・論文

- <u>Keita Kobayashi</u>, <u>Masahiko Okumura</u>, Hiroki Nakamura, Mitsuhiro Itakura, <u>Masahiko Machida</u>, Shingo Urata, and Kentaro Suzuya, "Machine learning molecular dynamics reveals the structural origin of the first sharp diffraction peak in highdensity silica glasses", Scientific Reports 13 (2023) 18721.
- ・国内会議
- 2) 小林恵太,山口瑛子,奥村雅彦,「機械学習分子動力学法による高圧水和カオリナイトの 解析」,日本原子力学会 2023 年秋の大会,名古屋大学東山キャンパス,2023 年 9 月.
- 3) 小林恵太, 「機械学習分子動力学法による高密度シリカガラスにおける中距離秩序の解析」2023 年度 液体・非晶質研究会, 2024.

5.8.7 原子・分子シミュレーションによる核燃料の物性評価

Atomic Simulations of Physical Properties for Nuclear Fuel

中村 博樹 シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

本研究の目的は、核燃料の構成物質である酸化アクチニドを始めとするアクチニド化合物や 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ニ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く。特に、 第一原理計算を学習することで、第一原理計算と同程度の信頼性で高速なシミュレーションが 可能な機械学習分子動力学法を利用した物性予測にも挑戦する。

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、福島第一原発での燃料デブリの物性評 価にも適用が期待される。

本年度は二酸化ウランと二酸化プルトニウムに対して、高次の相関効果を含む第一原理計算 手法を適用して、基底状態における磁性の評価を行い、磁気秩序の再現が可能かどうかを調査 した。

(2) 利用内容·結果:

本年度は第一原理計算を基にした手法を用いて、二酸化アクチニドの基底状態における磁気 秩序の再現可能性について検証した。二酸化ウランを始めとする二酸化アクチニドの多くは低 温で磁気秩序を持っている。しかし、このような低温での性質は、高温での物性が重要になる 核燃料では、あまり関係ないように見える。しかし、二酸化ウランの室温以上での熱伝導率が 分子動力学などで予測されるよりも小さく測定されるのは、フォノン・磁気散乱によるもので あると考えられており、そのため、磁気秩序を正しく再現できるかどうかは、高温での熱物性 予測の精度に大きく影響を与えるものである。したがって、本研究は二酸化アクチニドの信頼 性の高い物性予測のためには重要であり、ひいては燃料デブリの物性評価にも深く関わってくる。

前述の通り、二酸化アクチニドは低温で複雑な磁気秩序を持つことが多い。第一原理計算で この磁気秩序を再現することは多くの場合困難である。これは、アクチニド原子のf軌道の電 子が局在し、強相関電子系をなすことが主な原因である。このような強相関効果を、第一原理 計算の1つである密度汎関数法 (DFT) で用いられる局所密度近似や一般化勾配近似で取り扱 うのは難しい。そこで、強相関効果を考慮するために DFT+U 法や hybrid DFT 法などが用 いられるが、それでも磁気秩序を再現するのは、やはり困難である。

昨年度の報告では、二酸化ウランに対して、DFT+U法で様々な交換・相関エネルギーの近 似を用いて、磁気秩序の再現を試みたが、どれもうまくいかなかった。一方、令和4年度の報 告で、二酸化プルトニウムに対して adiabatic-connection-fluctuation-dissipation theorem

(ACFDT)を用いて、実験で観測されている非磁性の基底状態を再現することに成功した。 そこで、今年度は、二酸化アクチニドに対して、ACFDTを用いて、様々な磁気秩序に対して エネルギーを計算し、実験で観測された磁気秩序が基底状態になっているかどうかを調査す る。

まず、始めに二酸化ウランを取り 上げる。ACFDT ではまず始めに DFT で波動関数を求めて、それを 基に相関エネルギーの高次補正を 行う。始めに計算する DFT の波動 関数としては PBEsol+U 法を用い て計算した。また、ACFDT で感受 率を計算する際には RPA 近似を用 いた。計算した磁性としては、実験 で観測されている transverse 3k 反強磁性秩序(以下 3k-t)の他に longitudinal 1k 反強磁性(1k-t)と longitudinal 3k 反強磁性(3k-l)を 採用した。結果を図1に示す。DFT +U(PBEsol+U)では、どの磁気秩 序でもエネルギーは同程度で、差が



図 1:ACFDT で計算した二酸化ウランのエネルギ ー。1k_l, 3k_l, 3k_t はそれぞれ、longitudinal 1k 反強磁性、longitudinal 3k 反強磁性、 transverse 3k 反強磁性を示す。横軸は格子定数。

非常に小さいが、一番安定なのは 3k-l となっている。一方、ACFDT では 1k-l が他の 2 つよりも不安定となり、わずかではあるが実験で観測されている 3k-t が基底状態となり、実験と無矛盾な結果を得た。

次に二酸化プルトニウムの結果に移る。二酸化プルトニウムは非磁性であり、令和4年度に PBE+Uを用いた ACFDT で非磁性基底状態を再現したことを報告した。今回、PBEsol+U で も同様の計算を行った。図2に示すよ うに、ACFDT では非磁性と3k・tが ほぼ同じくらいのエネルギーとなっ たため、非磁性基底状態を再現できた とは言い切れないが、PBEsol+Uでの 非磁性状態では1eV程度エネルギー が高かったことを考えると、ACFDT はかなり良く実験結果に肉薄してい ると言える。また、交換相関エネルギ ーの選択も結果に重要な影響を与え ること分かった。

このようにDFT+U法では、正しい 磁気秩序を再現できなかったのに対 して、ACFDT法を用いれば、より良 い磁気秩序を再現できることが期待 できる。このため、高次の相関エネル ギーの効果が重要であると考えられ、



図 2:ACFDT で計算した二酸化プルトニウムのエ ネルギー。1k_l, 3k_t, f100, nm はそれぞれ、 longitudinal 1k 反強磁性、transverse 3k 反強磁 性, 100 方向の強磁性、非磁性を示す。横軸は格子 定数。

今後の高温物性評価への応用に際しては、このような高次のエネルギーの寄与を考慮する必要 があると考えられる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

招待講演

1) 中村博樹「核燃料物性評価のためのミクロシミュレーション」日本原子力学会核燃料部会 第33回「核燃料・夏期セミナー」(水戸) 2023 年 8 月.

5.8.8 構造材料の第一原理計算

DFT Calculation of Structural Materials

板倉 充洋 シミュレーション技術開発室

(1) 利用目的:

ステンレス鋼は原子炉内の構造材料として重要であるのに加え、キッチンから船舶まで幅広 い用途で用いられている。また新型炉 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、軽水炉の過酷事故では制御棒成分との反応で最初に溶融 する。一方でステンレス鋼の原子シミュレーションによる照射脆化評価はフェライト鋼に比べ て進んでいない。その原因はステンレスがランダムな磁性状態を示し、第一原理計算が容易に は行えない点にある。本課題では大規模な第一原理計算と機械学習を用いてその課題を解決 し、ステンレス鋼の物性を再現し、照射の影響等を機構論的に予測するモデルを開発すること である。

(2) 利用内容·結果:

1) 達成目標

ADS 材料(オーステナイト鋼)の物性評価手法の基盤技術確立

原子力基礎工学研究センターと連携し行っている ADS 材料の研究ではフェライト鋼とオー ステナイト鋼が候補材料として検討されている。オーステナイト鋼は第一原理計算において磁 性の扱いが複雑となり、その計算法が確立しておらず、システム計算科学センターの第四期中 長期計画ではこの計算法開発を目標の一つとしている。令和5年度はこの計算法開発のため、 オーステナイト鋼の磁性を含んだ計算について、令和4年度に行った絶対零度での計算を拡張 し、有限温度の格子振動を再現することを行った。

オーステナイト鋼は、鉄にクロム 20%ニッケル 10%程度を加えた合金であり、耐食性、耐 照射性に優れ軽水炉の炉内構造物や新型炉 ADS のビーム窓材料、また産業界でも家庭用のス テンレス材料や自動車などで広く使われている。しかし、第一原理計算による物性評価および 新合金の開発は途上段階である。同じく鉄骨など構造材料に使われるフェライト鋼については 磁性スピンがそろった状態を用いた第一原理計算手法が確立し物性評価が可能になっている が、オーステナイトは常温で鉄原子のスピンがランダムな方向を向いた常磁性となり、その状 態を再現しなければ物性を再現できないという課題がある。本年度はステンレス鋼に対し欠陥 を含まない原子構造について、熱振動も含めた原子配置を考え、その磁性状態や振動特性を再 現する機械学習ポテンシャルを開発することを行った。

ステンレス鋼ではランダムな磁性状態に加え、Fe、Cr、Niの三元素がランダムに配置した 合金配置も考慮する必要があり計算が複雑になる。この課題を解決するため、磁性状態を上向 きと下向きの2種類に限定したコリニアな磁性を対象とし、それぞれの鉄原子を2種類の異な る元素として扱い、全体として4元素系合金とすることで既存の機械学習分子動力学の枠組み を用いてポテンシャルを開発することに成功した。教師データは初めにランダムに数百通り生成し、これを学習に用いたポテンシャルで分子動力学計算を実行、教師データが足りない部分を特定し第一原理計算によりデータを補完し、最終的に 3000 の教師データを元にポテンシャルを開発した。

2) 研究成果とその重要性

開発したポテンシャルを用いて、3000原子を用いた温度 300K における分子動力学計算を 行い、フォノン分散を評価した。合金系においては合金配置のランダムネスに結果が左右され るが、原子の数が多い場合は全体的に平均されランダムネスによる誤差が小さくなるため、多 数の原子を用いることが重要である。図1に得られたフォノン分散の図を示す。現状ではスピ ンの違いを元素の違いとして離散的に扱っているため、MD 計算の中でスピンの向きを変える ことは行えないので、磁性状態としてスピンがそろった強磁性状態と、スピンがランダムな常 磁性状態の二種類の配置について計算を行い、実験データとして、Fe-CrisNii2Mo2の合金(常 磁性)および Fe-Ni30(強磁性)の場合(Appl. Phys. A 74 [Suppl.], S1013-S1015 (2002))と の比較を行った。実験では強磁性と比較して常磁性の場合に縦波の周波数が低く、横波が高く なる傾向がみられているが、この傾向を周波数の絶対値まで含めて高い精度で再現しているこ とがわかる。ステンレスの物性を機構論的なアプローチに基づいてここまで再現した例はな く、顕著な成果であるといえる。最終的な目標である照射による物性変化の計算には図2に示 した通り、対象を段階的に複雑にし確実に物性を再現するポテンシャルを開発していくことが 必要であるが、その3~4合目程度までは到達したといえる。さらに表面、積層欠陥、転位な どを再現するポテンシャルまで開発できれば材料科学の分野に大きなインパクトを与えるこ とができる。また酸素を含むポテンシャルを開発し酸化被膜の特性を評価可能となれば産業界 にもインパクトを与えることになる。



図1 機械学習 MD 計算で得られたステンレスのフォノン分散。左が常磁性、右が強磁性。 赤と緑の線はそれぞれの実験データにおける X 点(100)での縦波と横波の周波数を示す。


図2 ステンレス鋼の機械学習ポテンシャル開発ロードマップ

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- Y. Yamamoto, S. Hayakawa, T. Okita, <u>M. Itakura</u>, "Meso-timescale atomistic simulations on coalescence process of He bubbles in Fe by SEAKMC method", Computational Materials Science 229, p.112389 (2023).
- H. Mori, T. Tsuru, M. Okumura, D. Matsunaka, Y. Shiihara, <u>M. Itakura</u>, "Dynamic interaction between dislocations and obstacles in bcc iron based on atomic potentials derived using neural networks", Physical Review Materials 7, p.063605 (2023).
- H. Miyazaki, T. Akatsuka, K. Kimura, D. Egusa, Y.K. Sato, <u>M. Itakura</u>, Y. Takagi, "Investigation of the Electronic Structure of the Mg99. 2Zn0. 2Y0. 6 Alloy Using Xray Photoelectron Spectroscopy", Materials Transactions 64, pp.1194-1198 (2023).
- Y.K. Sato, D. Egusa, H. Miyazaki, K. Kimura, <u>M. Itakura</u>, M. Terauchi, E. Abe, "STEM-EELS/EDS Chemical Analysis of Solute Clusters in a Dilute Mille-Feuille-Type Mg–Zn–Y Alloy" Materials Transactions 64, pp.950-954 (2023).
- Y. Urakawa, D. Egusa, <u>M. Itakura</u>, E. Abe, "Anomalous Local Lattice Softening around Kink Boundaries in a Mille-Feuille Structured Dilute Mg–Zn–Y Alloy" Materials Transactions 64, pp.1065-1071 (2023).

■口頭発表

6) 板倉充洋,小林恵太,「グラファイト格子間原子クラスタの特異な挙動」,日本原子力学会 2024 年春の大会, 2024.

5.8.9 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、町田 昌彦、山田 進 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。本申請に おいて開発を行う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デ カルロ法)は、後述するシミュレーション技術開発室の中長期計画の中核を担う計算技術であ 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原子力機構内外の研究力 強化に貢献することも目的とする。

(2)利用内容·結果:

1.自己学習ハイブリッドモンテカルロ法の開発と拡張

令和5年度の目標は「原子分子シミュレーションに対する機械学習シミュレーション手法の 一つである自己学習ハイブリッドモンテカルロ法をさらに発展させる」であった。

まず、Al-Pd-Ru 合金系での長時間の機械学習分子シミュレーションに成功し、固体中で特 異な Al 拡散することを明らかにした。この結果は論文「Atomic diffusion due to hyperatomic fluctuation for quasicrystals」として Physical Review Letters に発表し、プレス発表を行っ た (https://www.u-tokyo.ac.jp/focus/ja/press/z0310_00052.html)。そして、この手法を合金系 へ拡張させるための新しいタイプの自己学習ハイブリッドモンテカルロ法の開発と、シミュレ ーション技術開発室の志賀氏が開発しているオープンソース分子動力学ソフトウェア PIMD の改良を行った。しかし残念ながら、現時点においては、合金系への拡張手法は既存の手法と 比べた時の優位性を見出すことができず、異なる方法を考える必要があることがわかった。ま た、開発者以外が PIMD へ新機能を実装する際にコードを理解するのが難しいという問題が 発生したため、現在、堅牢性および保守性を高めるために、最新のプログラミング技術の知見 を適用し、コードを改修中である。

また、機械学習分野の新しい技術をシミュレーションに反映させられるかを調べるため、 ChatGPT に代表される生成 AI のアーキテクチャである Transformer を利用した自己学習モ ンテカルロ法を開発し、論文「Self-learning Monte Carlo with equivariant Transformer」が Journal of Physical Society of Japan に受理された(10月)。 2. 超高速超伝導シミュレーション手法による超伝導物質の評価

令和 5 年度の目標は「我々が開発した局在クリロフ空間を用いた LK-BdG 法は非常に巨大 な系のシミュレーションが可能になる手法であり、超伝導材料の特性を研究する実験グループ との連携が可能である。実際、これまで、ドイツハンブルグ大学のグループと共同研究を行っ ている。この手法をさらに使いやすく改良することで、機構内外の研究グループと連携を行っ ていく。」であった。そして、沖縄科学技術大学院大学(OIST)の量子物質科学ユニットの岡 田准教授と藤澤研究員とともに、表面超伝導における微小デバイス特性について研究を行い、 プレプリント「Imaging Josephson Vortices on Curved Junctions, arXiv:2307.11970」およ び「Visualizing magnetic field-induced rotational electronic symmetry breaking in a spinel oxide superconductor, arXiv:2306.06711」を投稿し、現在論文は査読中である。

3.量子多体問題シミュレーション手法の高性能化

大規模な問題を GPU 演算部で計算するとき、すべての演算を GPU で行うのではなく、一 部の演算を CPU で計算することで、CPU・GPU 間の通信量が削減でき、高速化が期待でき る。そこで、令和 5 年度は演算をどのように CPU と GPU で分担させるのが適切であるかを 調査研究する。また、シミュレーションの高速計算のためには用いるアルゴリズム自体の高速 化が重要であるため、収束性を向上させる計算方法について研究についての継続する予定であ る。また、実際に開発したコードを実際の量子問題に適用し、提案した手法の有効性を確認す るとともに、物性を調査する。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

論文発表

- 1) <u>Yuki Nagai</u> and Akio Tomiya, "Self-learning Monte Carlo with equivariant Transformer", arXiv:2306.11527" Journal of Physical Society of Japan (受理).
- 2) Yuita Fujisawa, Anjana Krishnadas, Barnaby R.M. Smith, Markel Pardo-Almanza, Hoshu Hiyane, <u>Yuki Nagai</u>, Tadashi Machida, Yoshinori Okada, "Imaging Josephson Vortices on Curved Junctions", submitted to Nature Comunications (投稿中).
- 3) Yuita Fujisawa, Anjana Krishnadas, Chia-Hsiu Hsu, Barnaby R. M. Smith, Markel Pardo-Almanza, Yukiko Obata, Dyon van Dinter, Guoqing Chang, <u>Yuki Nagai</u>, Tadashi Machida, Yoshinori Okada, "Visualizing magnetic field-induced rotational electronic symmetry breaking in a spinel oxide superconductor", submitted to Science Advances(投稿中).
- <u>Yuki Nagai</u>, Yutaka Iwasaki, Koichi Kitahara, Yoshiki Takagiwa, Kaoru Kimura, Motoyuki Shiga, "Atomic diffusion due to hyperatomic fluctuation for quasicrystals", Physical Review Letters 132, p.196301 (2024).

国際会議口頭発表

- 5) Akio Tomiya and <u>Yuki Nagai</u>, "Equivariant transformer is all you need", 40th International Symposium on Lattice Field Theory (Lattice 2023).
- 6) <u>Yuki Nagai</u>, Masahiko Okumura, Keita Kobayashi, Motoyuki Shiga, "Self-learning hybrid Monte Carlo method; A First-principles approach", 34th IUPAP Conference on Computational Physics (CCP2023).
- 7) <u>Yuki Nagai</u>, "Atomic diffusion due to hyperatomic fluctuation for quasicrystals and their approximants", International Conference on Complex Orders in Condensed Matter; Aperiodic Order, Local Order, Electronic Order, Hidden Order.

国際会議招待講演

- 8) <u>Yuki Nagai</u>, "Self-learning Monte Carlo method for electrons, atoms, and quarks and gluons", East Asia Joint Seminars On Statistical Physics 2023.
- 9) <u>Yuki Nagai</u>, "The Self-learning Monte Carlo method; Accelerating simulations with machine learning", 7th Model Calculation Seminars.

国内会議招待講演

10) <u>永井佑紀</u>、「自己学習ハイブリッドモンテカルロ法; 機械学習ポテンシャル学習の自動化 と厳密計算」Quloud-PIMD セミナー.

5.8.10 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 Simulation of Microstructural Development of Irradiated Materials

 鈴
 知明

 シミュレーション技術開発室

(1)利用目的:

原子力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、それらの理論的バックグラウンドである破壊力学論は必ずしも実験結果を説明で きるものとはなっていない。このため、精度の高い原子レベルの計算科学を用いて実験を再現 し理論を補完していく必要がある。また、プラズマ対向材では照射欠陥によって核セキュリテ ィ上問題となるトリチウムの吸蔵量が増える。こうした影響をモデル化し予測することが既存 材料の安全性評価や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、実験による解析のみで は上記の微小な時間・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高精度に定 量評価するには第一原理計算などの原子モデリングが必要となる。

システム計算科学センターと原子力基礎工学研究センター燃料・材料工学ディビジョンは原 子力構造材料の安全性評価と新材料の設計に資するため、金属材料における格子欠陥や不純物 元素の計算手法を開発している。

本課題では、現行の軽水炉や次世代炉(高速炉・ADS・核融合炉)で使用される構造材料の 基本的な力学特性および照射によって誘起される材料劣化に影響を与える現象を、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を主目的とする。これにより、様々な実験で得 られる結果に対して理論的な支柱を与えるとともに、メソ・マクロスケールの劣化モデルの基 礎データの取得が期待される。

(2) 利用内容•結果:

1) 令和5年度課題の達成目標

非常に正確な鉄の原子間ポテンシャルが機械学習により開発されたため、鉄の破壊のメカニ ズムを明らかにしていく。今年度は特に有限温度での解析を行う。

2) 令和5年度の研究成果とその重要性

これまで低温でのき裂進展の特性を解析してきたが、実際に材料が使用される主な環境は室 温以上である。そして引張試験などで観測される破面は必ずしも第一原理計算が予測する1つ の平面でおきる単純な割れではなく、塑性変形を伴っている破壊面が観測される。この現象は き裂先端塑性と言われている。我々は複雑で理解困難なき裂先端塑性を再現するために機械学 習によって作成された鉄の原子間ポテンシャルによる破壊シミュレーションを有限温度で行 い、低温では単純な割れが起きる場合でも温度上昇によって塑性が現れることを証明した。こ の結果は従来の不完全な破壊力学理論と実際の現象とつなぐ意味で重要であり、日本材料学会 誌「材料」にその結果を発表した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) (出版決定) <u>鈴士知明</u>,海老原健一,都留智仁,森英喜, "機械学習ポテンシャルを用いた BCC 鉄へき開の大規模原子シミュレーション",材料, 72, 2 (2024).
- 2) T. Suzudo, K. Ebihara, T. Tsuru, H. Mori, "Emergence of crack tip plasticity in semibrittle α-Fe", Journal of Applied Physics, p.075102 (2024).

5.8.11 都市風況解析に対するアンサンブルカルマンフィルタを用いたハイパーパラメー タ最適化

Hyperparameter Optimization Using Ensemble Kalman Filter for Urban Wind Simulation

小野寺 直幸、井戸村 泰宏、長谷川 雄太、伊奈 拓也 高度計算機技術開発室

(1) 利用目的:

デジタルツインに基づく風況予測は、原子力施設等を対象とした放射性物質のリアルタイム 拡散予測に活用できるだけでなく、都市街区内の歩行者に対する熱中症評価や微小粒子状物質 の拡散予測などスマートシティ設計・運用等の新たな社会基盤構築に貢献できる技術である。 風況デジタルツインの実現には、都市全域を含む広域な気象場から建物や樹木等を捉えたマル チスケール乱流解析が不可欠である。昨年度(令和4年度)は、東京工業大学(東工大)周辺 の詳細な都市モデルを用いた風況解析に取り組んできた。しかしながら、実気象データを用い た東工大周辺の風況解析では、地表面近傍と上空で風向が異なる複雑な境界条件の影響により 解析精度の低下が見られ、実施予定であった物理モデルのハイパーパラメータ最適化手法に対 して、研究計画に遅れが生じている。令和5年度は、風況デジタルツインの実現において、令 和4年度に問題となった複雑な気象条件への対応が最善と考え、メソスケール気象データから 局所風況解析へのデータ同化手法および乱流の再構成手法を開発する。

都市街区の詳細な風況解析の実現には、数 km 範囲の都市全域から数 m 幅の路地を捉えた 大規模なマルチスケール風況解析が必須となる。CityLBM は AMR 法の適用による計算格子 点数の約 1/10 への削減および GPU 向け最適化による CPU 比 10 倍以上の性能向上を達成し ているが、路地を捉えた最小の検証条件(6km 四方 4m 解像度)においても、1 ケースで 8 GPU(V100)程度の計算資源が必要となる。以上のように、本研究プロジェクトは、HPE-SGI8600 の高速な計算資源を利用することにより、初めて実現できる。

(2) 利用内容·結果:

1) 令和5年度の研究内容、達成目標

令和5年度は、「都市風況解析に対するアンサンブルカルマンフィルタを用いたハイパーパ ラメータ最適化」と題して、風況ラージエディシミュレーションの検証計算を行った。達成目 標としては、以下の目標を設定していた。

① 観測システムシミュレーション実験(OSSE)によるパラメータの感度解析実験(達成)

② 観測データを用いた東京都心部のハイパーパラメータ最適化実験(一部実施)

2) 令和5年度の研究成果とその重要性

① 観測システムシミュレーション実験(OSSE)によるパラメータの感度解析実験

東京都心部に対する OSSE として、地表面温位のバイアス値を+10K と設定した Nature run に対して、地表面近傍の温位(高さ 2m、11 箇所)の1分間累積移動平均を観測値としたアン

サンブル計算を実施した。計算条件として、実際の都市街区を模擬するために、建物、地形、 および衛星画像を基に地表面に植生分布(高さ8m)を設定した。風況および温位の境界条件 として、温位が一定の条件下にて、都市街区内の建物高さに基づいた対数則に基づく南西の流 入風(高さ500mで風速12m/s、カットオフ高さ500m)を計算領域の外周および上端の256m 以内の領域に設定した。EnKFのパラメータとして、地表面温位の時間発展式の標準偏差(σx =0.5)、温位の観測誤差(σy=1)と設定し、1分毎にデータ同化による状態ベクトル(地表面 温位)を更新した。

OSSEによるアンサンブル計算により求められた観測ベクトル(地表面近傍温位)および状 態ベクトル(地表面温位バイアス)の推定値を図1・2に示す。青の実線がアンサンブル平均 値および青の点線が各アンサンブル値、灰色の実践がNature runの値(真値)となる。灰色 のNature runでは計算開始から計算領域内の大気が加熱され、およそ 60 分程度で地表面近 傍の温位が定常となった。OSSEでは、それに追従して、アンサンブル数が(a)Nens=4 および (b)Nens=8 のどちらの条件においても、観測値に対して 0~0.1[K]の範囲内の値が示された。地 表面温位バイアスにおいても同様に、計算開始直後の観測値の急激な上昇を捉えることで、そ れと相関の高い地表面温位を上昇させ、最終的に地表面温位バイアスが 10~15[K]程度を推定 した。以上の結果より、EnKFを適用することで、観測データから境界条件のハイパーパラメ ータである地表面温位バイアス値を推定可能であることが示された。



(b) $N_{ens} = 8$

図1 地表面近傍の温位(観測ベクトル: Y、y₀)の時刻暦。



(b) $N_{ens} = 8$

図 2 地表面温位バイアス(状態ベクトル: X)の時刻暦。

② 観測データを用いた東京都心部のハイパーパラメータ最適化実験

ドップラーライダーの観測に基づいた気象条件を防災科研の雲解像数値モデル(CReSS)に て作成し、それを境界条件とする風況解析を実施した。図3に計算領域および東工大に設置し てある Lidar の視線方向速度を示す。定性的ではあるが、CityLBM は観測と同様の風向およ び速度の筋状構造を再現していることが確認できる。一方で、地表面近傍と上空で風向が異な る条件においては、観測精度の低下が見られたため、この問題の解決に時間を費やし、研究計 画に遅れが生じている。



(i) 計算格子(建物、地形、植生)
 (ii) CityLBM
 (iii) Observed
 図 3 東工大周辺の風況解析の予備計算結果(令和4年12月7日の気象条件)。(i) 計算領域の可視化(6,144m x 6,144m x 1,536m)、東工大に設置してある Lidar の視線方向速度の(ii) CityLBM の計算結果、(iii) Lidar による観測結果。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

国内会議

- 1) 小野寺直幸,井戸村泰宏,長谷川雄太,朝比祐一,稲垣厚至,下瀬健一,平野洪賓,"適合細 分化格子ボルツマン法による東京都市街区内の風況ラージエディシミュレーション",第 37 回数値流体力学シンポジウム,名古屋,2024 12/15-17.
- 2) 小野寺直幸,井戸村泰宏,長谷川雄太,朝比祐一,稲垣厚至,下瀬健一,平野洪賓,"アンサンブルカルマンフィルタを用いた都市風況解析のためのパラメータ最適化",第 28 回計算工学講演会,つくば市,2024 5/31-6/2.

5.8.12 機械学習を用いた都市汚染物質拡散の即時予測手法の開発

Development of an Immediate Prediction of Urban Pollutant Dispersion Using a Machine Learning Approach

> 小野寺 直幸、朝比 祐一、長谷川 雄太、井戸村 泰宏 高度計算機技術開発室

(1)利用目的:

都市区画における化学、生物、放射性 汚染物質の拡散予測は安全性の観点か ら関心が高い。その拡散予測には高精度 かつ即時性が要求される。都市区画にお ける気流および汚染物質拡散計算を行 う CityLBM コード[Onodera et al., Boundary-Layer Meteorology, 2021]で は、GPU を複数台利用することで高解 像度での都市風況解析のリアルタイム 計算を可能としている(図 1)。



図1 CityLBM による都市部汚染物質拡散計算

近年の機械学習の進展により、ある入力条件に対する流体シミュレーション結果を深層学習 によって予測する代理モデルの構築が可能になりつつある。例えば、二次元定常流については、 畳み込みニューラルネットワーク(CNN)を利用することで、符号付き距離関数(SDF)で表 された内部の物体形状から定常流れ場を高精度で予測できる。代理モデルによる予測はシミュ レーションに比べ計算コストが大幅に小さいため、大規模シミュレーションの代替には高いニ ーズがある。

都市風況計算では高い解像度と比べて極めて限定的な観測点における時系列データしか利 用できない。本研究では、時系列解析にて有力な Transformer と画像処理にて有力な CNN を 組み合わせたモデルを用いることで、少数の観測点の時系列データから、汚染物質拡散予測と 汚染物質放出点予測を高速かつ高精度に行う機械学習モデルの開発を試みる。

機械学習用の代理モデルの構築には、非常の多くの条件に対するデータの作成・学習が必須 となる。本課題では、HPE-SGI8600の GPU を用いることで、初めて実現できる。

(2)利用内容·結果:

1) 令和5年度の達成目標

令和5年度は、「機械学習を用いた都市汚染物質拡散の即時予測手法の開発」と題して、ノ イズからのデータ生成を可能とする Diffusion model において、計算資源を大量に必要とする アンサンブル計算を必要としないデータ同化を開発した。達成目標としては、以下の目標を設 定していた。

① Diffusion model を用いたアンサンブル予測モデルの性能の定量的評価と予測精度向上(達成)

② アンサンブルデータ同化への適用性評価(主担当者退職のため未実施)

③ 観測データに基づく深層学習モデルの汚染物質放出点探索への適用に向けた準備(主担当 者退職のため未実施)

2) 令和5年度の研究成果とその重要性

① Diffusion model を用いたアンサンブル予測モデルの性能の定量的評価と予測精度向上

都市街区内の風況デジタルツインの実現には、シミュレーションと観測データ同化を組み合わせた解析が必須である。最先端のデータ同化技術の研究としては、理化学研究所の三好らのグループによる局所アンサンブル変換カルマンフィルタ(LETKF)に基づくフェーズドアレイ気象レーダーのデータ同化等の気象分野の研究が挙げられる。一方で、従来のデータ同化では、アンサンブル数と同数のシミュレーションを実施する必要があり、大規模な計算資源の確保が問題となっていた。そこで、本研究では、ノイズからのデータ生成を可能とする Diffusion model をシミュレーションデータに適用することで、LETKF で必要となる複数のアンサンブルデータを生成する手法を開発した。検証計算として、データ同化分野での標準ベンチマーク問題 Lorenz96 を実施した結果、従来のアンサンブル計算に基づく LETKF と同精度、もしくは良い結果が得られることを確認した(図 2)。



図 2 Lorenz96 モデルのデータ同化実験: Reference (Nature run)、LETKF (従来手法)、Ours (提案手法)。上段:計算結果、下段: Nature run との差 (薄い色が良い)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

国際会議

 Y. Asahi,Y. Hasegawa, N. Onodera, T. Shimokawabe, H. Shiba, Y. Idomura, "Generating observation guided ensembles for data assimilation with denoising diffusion probabilistic model", SynS&ML Workshop @ICML 2023,Hawaii,US, 2023 7/28.

5.8.13 適合細分化格子版 JUPITER の界面追跡モデルの高度化

Advanced Interface Capturing Model in the JUPITER-AMR

杉原 健太、下村 健太、井戸村 泰宏、山下 晋、小野 綾子、 伊奈 拓也、小野寺 直幸、Sitompul Yos 高度計算機技術開発室

(1) 利用目的:

原子力工学分野では炉心設計や安全評価において気液二相流体解析が重要な役割を果たしている。構造物と気液界面の相互作用に起因する複雑な流動形式を捉えたマルチスケール現象解析の実現に向けて、スーパーコンピュータ(スパコン)を活用した数値流体力学(CFD)解析コードJUPITERの開発およびその計算速度のボトルネックとなる圧力 Poisson 解法の高速化を実施してきた。CPU スパコンを用いた 1mm 格子解像度のがンドル体系の多相流体解析、更に GPU スパコンを用いた高速化により 0.6mm 格子解像度の解析を実現した。しかしながら、上記の解析においても実験結果[1]のボイド率を定量的に再現できなかった。多数の気泡を有する流れを計算する際に気泡同士が接近すると、実験では反発するようなケースであっても、従来の界面捕獲法では数値的に合体してしまうことが判明した。気泡の連鎖的数値合体は流動様式に大きな影響を及ぼすため、接近した気泡同士が合体するか否かをコントロールする必要があると考え、気泡同士の合体を抑制可能なマルチ・フェーズフィールド(MPF)法の導入を進めている。本研究課題では界面捕獲法の解析精度向上のために、気泡上昇解析に最適化した Phase Field 法を開発する。また、令和4年度課題にて開発した MPF 法において数百を超えるような多数の気泡を取り扱えるように、GPU 計算に最適化された省メモリ化手法を導入し、基礎検証問題として気泡流解析を実施して Colin らの実験結果[2]との比較検証を行う。

【参考文献】

[1] Ren et al., Meas. Sci. Technol. (2018), 29, 104004

[2] Colin et al., J. Fluid Mech. (2012), 711, pp. 469-515.

(2) 利用内容·結果:

1) 令和5年度課題の達成目標

令和 5 年度は MPF 法の適用によるバンドル体系解析のボイド率解析精度の向上に向けて (a)気泡上昇計算における Phase Field 変数の最適化、(b)バンドル体系解析における流入出境 界条件の最適化、(c) MPF 法を適用した気泡流解析などを実施した。

2) 令和5年度の研究成果とその重要性

多相流体解析コード JUPITER-AMR 向けの高精度な気液界面捕獲手法を開発することで、 原子力分野の熱流動解析や産業応用分野の冷却システム等、多数の気泡を含む工学問題におけ る多相流体解析の高精度化が期待できる。このような多相流体解析は幅広い工学問題に適用可 能であることから、原子力分野の CFD ソフトウェアの発展だけでなく、実験手段の代替とし て工学分野に与える影響は大きい。以下に具体的な実施内容を示す。 (a)気泡上昇計算における Phase Field 変数の最適化

従来の Phase Field 法では、気液界面幅の修正強度に関するパラメータ γ を全計算領域に対して一様に設定されていた。また、 γ の大きさは小さすぎると界面幅が広がってしまい、大き

すぎると界面幅は一定になるが界面形状の精度が低下するため、適切な値は計算毎に経験的に $\gamma = 0.7 | umax |$ のように決められてきた。

本研究では、界面幅の拡散は移流計算の数値粘性と変形速度場の 2 点に起因すると考え、 γ (x)=M|u(x)|+B|S| δ のように速度分布 u(x)と変形速度テンソル S に比例するように空間分布を設定する 手法を考案した。本手法は 2 次元界面移流計算ではパラメータ最 適化した従来手法よりも 31-37%誤差を低減し、単一気泡上昇計算 では同等以上の計算結果となることが示された[成果リスト 1,4]。 本手法を適用した 5×5 バンドル体系解析結果 (図 1) は、第 28 回 計 算 工 学 講 演 会 グ ラ フ ィ ッ ク ス ア ワ ー ド 特 別 賞 (Visual Computing 賞)を受賞した[成果リスト 2]。本手法は通常の Phase Field 法だけでなく、その発展系である MPF 法にも適用可能であ る。



図15×5バンドル解析

(b)バンドル体系解析における流入出境界条件の最適化

バンドル体系解析では計算領域下部に流入境界としてオリフィスを設定しており、令和4年 度までの計算ではオリフィス領域の計算格子に気相、それ以外は

液相の VOF および流速を固定していた。この方法ではオリフィス から流入する気泡サイズをコントロールすることが難しく、流入 時点で実験よりも大きな気泡が生成されてしまう問題があった。 令和 5 年度はその問題を解決するために図 2(左)のように水と空 気を同じオリフィスから交互に流入させる手法を考案し、流入気 泡サイズのコントロールが可能となった。また、計算領域内の気 相体積の時間履歴を計測したところ指定流量の空気が正しく流

入していることが確認できた。本手法は研究成果(a)のバンドル



図2 改良型流入境界条件

体系解析で利用しており、流入気泡サイズのコントロールが必要な問題に対して適用可能である。

(c) Multi-Phase Field(MPF)法を適用した気泡流解析

従来の界面捕獲法を用いた気液二相流解析では、約3格子程度まで接近した気泡同士は数値 的に合体してしまうという特徴があるため、バンドル体系解析では気泡の連鎖的な合体によっ て気泡径が過大評価された流動様式になってしまう問題があった。令和4年度課題では上記課 題の解決のために MPF 法を JUPITER コードに導入し、水平に並んだ2個の気泡反発現象を 再現可能であることを確認した。しかし、1 相に1 配列を割り当てる通常の界面データの格納 方法では数百~数千を超えるような多数の気泡を計算することは困難であるため、MPF の界 面捕獲計算に必要なデータのみを効率的に格納する必要がある。令和5 年度は多数の気泡デー タを効率的に格納するために、OAPT 法(図3)を導入した。上記手法は6 個程度のメモリ階 層に数百を超えるような多数の相を格納することが可能である。図4 は 223 個の気泡のデー タ格納の様子である。1 相に1 配列を割り当てる方法では223 配列が必要になってしまうが、 上記手法を用いれば6 個のフェーズフィールド配列と相 ID 配列で格納可能である。OAPT 法 では各相の影響範囲を図4(中,右)のブロックのように、界面から離れた計算格子まで定義する 必要があり、原著論文の手法では流体率関数を用いて閾値を設定しているが、調整が難しいた め本研究では符号付距離関数を導入して界面からの距離でコントロールする手法を考案した。 本手法を円筒内気泡下降流問題に適用し、Colin(2012)らの実験におけるボイド率分布や平均 流速分布と比較したところ、概ね妥当な結果得られることを確認した[成果リスト3]。



図 3 MPF の省メモリ化手法(OAPT) 図 4 気泡流の界面データ格納の様子(2 階層分)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- <u>杉原健太、小野寺直幸、井戸村泰宏、山下晋</u>、"気泡上昇解析における Phase Field 変数の最適化"、第28回計算工学講演会(5/31-6/2、つくば市)、査読無し国内会議論文(出版済).
- 2) <u>杉原健太、小野寺直幸、井戸村泰宏、山下晋</u>、「Phase Field 法を用いた 5x5 バンドル体 系の気泡流解析」、日本計算工学会 第 28 回計算工学講演会グラフィックスアワード特別 賞 (Visual Computing 賞) (6/1).
- <u>杉原健太、小野寺直幸、井戸村泰宏、山下晋</u>、"Multi-phase field 法を用いた気泡流解析"、
 第 37 回数値流体力学シンポジウム(12/15-17、名古屋)、査読無し国内会議論文(出版 済).
- <u>K. Sugihara, N. Onodera, Y. Idomura, and S. Yamashita</u>, "Optimized phase-field modeling using a modified conservative Allen-Cahn equation for two-phase flows", JAEA-Research 2023-006. 査読無し研究報告書(出版済).
- 5) <u>杉原健太、小野寺直幸、井戸村泰宏、シトンプル ヨス、山下晋</u>、"Phase Field 法を用い た気液二相流解析"、日本原子力学会 2024 年春の年会(3/26-28、東大阪)(出版済).

5.8.14 乱流アンサンブルデータ同化の GPU 実装

GPU Implementation of Ensemble Data Assimilation of Turbulence

長谷川 雄太、杉原 健太、下村 和也、伊奈 拓也、井戸村 泰宏、小野寺 直幸 高度計算機技術開発室

(1)利用目的:

システム計算科学センター高度計算 機技術開発室では、GPU スパコン向け の数値流体解析(CFD)に関する研究 開発を推進している。申請者らは特に、 都市部および原子力施設周辺における 風況・大気拡散のデジタルツインの構 築を目的として、これまでに格子ボル ツマン法(LBM)および適合細分化格 子法(AMR)に基づく単相流体解析コ ード「CityLBM」*1、LBM および局所 アンサンブル変換カルマンフィルタ (LETKF)に基づく乱流アンサンブル データ同化の基礎検証用コード

「LBM2D-LETKF」(図 1)*2を開発し てきた。本研究課題では、LBM2D-



図 1 乱流アンサンブルデータ同化の概念図。Nature
 run:正解の乱流場、Observation:ノイズを含む観測値、
 Forecast:データ同化を行う前の計算結果、Analysis:デ
 ータ同化によって得られた乱流場。

LETKF で得られた知見をもとに、LETKF の CityLBM コードへの移植を進める。

*1 Onodera, et al., "Real-Time Tracer Dispersion Simulations in Oklahoma City Using the Locally Mesh-Refined Lattice Boltzmann Method", Boundary-Layer Meteorology 179, 187-208, 2021.

*2 Hasegawa, et al., "GPU optimization of lattice Boltzmann method with local ensemble transform Kalman filter", Proceedings of 13th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Heterogeneous Systems (ScalAH22) (Internet), 10-17, 2022.

(2)利用内容·結果:

2次元等方乱流計算の詳細精度検証 [成果 1]

令和4年度から継続して、2次元等方乱流を対象としたデータ同化の検証を行った。論文化 にあたり、計算格子点数、乱流モデル等のマイナーな計算条件を変更した再計算を行い、疎な 観測に対する LETKF のデータ同化精度を従来のデータ同化手法であるナッジング法と比較 した(図2)。図のように、ナッジング法では疎な観測において渦度場が平滑化されてしまい物 理的に不自然な結果が得られる一方で、LETKF では粗い観測においても流れの特徴的なスケ ールをよく捉えられていることがわかる。

本成果は、格子ボルツマン法および LETKF を用いた乱流のアンサンブルデータ同化実装の

世界初の事例であり、査読付き論文誌 Fluid Dynamics Research (IF=1.5)に掲載された。



図2 2 次元等方乱流の疎な観測によるデータ同化における渦度分布。p は観測の間引き幅。 格子点数は 256×256 であり、たとえば p=64 での観測点数は 4×4。© authors, redistribution under CC-BY 4.0 license.

② 3 次元実装の状態ベクトル選定による計算の高速化 [成果 4]

LETKF を 3 次元・細分化格子コードである CityLBM に移植し、コードの高速化を行った。 LETKF をはじめとするアンサンブルカルマンフィルタでは、アンサンブル統計量を計算する ための状態ベクトルの MPI 通信が必要となる。Naïve な実装では状態ベクトルは LBM のプ リミティブ変数である速度分布関数であり、要素数は格子点あたり 27 個と比較的大きいため、 通信が計算のボトルネックとなっていた。



図 3 3 次元角柱まわりの流れにおける状態ベクトルによる計算時間の比較。(左)状態ベクト ルを LBM の速度分布関数(27 要素)とする従来実装、(右)状態ベクトルを巨視的量(4 要素)と する実装。 これに対して、本研究では、流体の巨視的量である密度・速度を状態ベクトルに採用することで、要素数を格子点数あたり4個に削減した。これにより、LETKFの通信時間を7割削減、 LBM を含む計算全体で実行時間を4割程度削減した(図3)。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

【論文】

 <u>Y. Hasegawa</u>, <u>N. Onodera</u>, <u>Y. Asahi</u>, <u>T. Ina</u>, T. Imamura, and <u>Y. Idomura</u>, "Continuous data assimilation of large eddy simulation by lattice Boltzmann method and local ensemble transform Kalman filter (LBM-LETKF)," Fluid Dynamics Research, vol. 55, p. 065501, 2023. doi:10.1088/1873-7005/ad06bd

【国際会議】

2) <u>Y. Hasegawa</u>, "Exascale CFD plan in JAEA: Towards digital twin of urban wind environment", Panel: High Performance Computing, 20th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics (NURETH-20, 2023/8/20-25, Washington DC, US).

【国内会議(査読なし)】

- 3) <u>長谷川雄太</u>、小野寺直幸、朝比祐一、<u>井戸村泰宏</u>、"格子ボルツマン法と局所アンサンブ ル変換カルマンフィルタ(LBM-LETKF)による二次元等方乱流のデータ同化"、第 28 回 計算工学講演会(2022/5/31-6/2、つくば).
- 4) <u>長谷川雄太、井戸村泰宏、小野寺直幸</u>、朝比祐一、"格子ボルツマン法・局所アンサンブル 変換カルマンフィルタにおける状態変数ベクトルの選定について"、第 37 回数値流体力 学シンポジウム (2022/12/15-17、名古屋).
- 5) <u>長谷川雄太</u>、<u>井戸村泰宏</u>、<u>小野寺直幸</u>、"GPU 向け乱流アンサンブルデータ同化コード LBM-LETKF の開発"、原子力学会 2024 年春の年会(2023/3/26-28、大阪).

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、また分野を超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。

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5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 用ノード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6年9月

編集ワーキンググループ
 リーダー:鈴木 喜雄
 スタッフ:坂本 健作、河津 諒平
 事務局 :桧山 一夫、稲子 秀美

付録

付録A

	SGI8600		
	バッチ処理 件数	会話処理 件数	ノード時間 (h)
4 月	52,563	5,090	618,189
5月	37,335	4,358	687,171
6月	71,403	5,034	631,710
7月	59,716	4,725	621,669
8月	31,449	4,382	667,427
9月	19,520	4,399	639,392
10 月	27,229	4,472	673,582
11 月	20,258	4,170	646,927
12 月	17,505	4,309	652,841
1月	26,910	4,752	677,971
2 月	21,251	4,696	578,044
3月	36,085	4,280	655,859
合計	421,224	54,667	7,750,782

表 A.1 令和5年度大型計算機システムの利用実績





図 A.1 令和5年度大型計算機システムバッチ処理件数





図A.3 令和5年度大型計算機システムノード時間

付録 B

表 B.1 令和 5 年度利用相談件数·可視化相談件数

1. 禾	1. 利用相談件数(436件)	
1	SGI8600 (273 件)	
2	Linux (5件)	
3	パソコン(37 件)	
4	network(75 件)	
5	その他(利用一般)(46 件)	
2. ⋷	可視化相談件数(58件)	
6	SGI8600 及び遠隔可視化用表示装置の可視化相談・技術支援(50件)	
7	PC版 MicroAVS インストール支援 (3件)	
8	PC版 AVS/Express インストール支援(2 件)	
9	ParaView クラサバモードインストール支援(2 件)	
10	PDF3D ReportGen インストール支援(1 件)	

著者名別 論文索引

Sitompul Yos	3	
Thomsen Bo		

A-Z

あ

赤岡	克昭65
朝比	祐一108
阿部	陽介16

5

井川	健一	50
板倉	充洋	
井戸村	↓ 泰宏105	,108,110,113
伊奈	拓也	. 105,110,113

う

上澤	伸一郎	35,41
内堀	昭寛	47
上羽	智之	50
宇田川	豊	74

お

大西	弘明	44
奥村	雅彦	
岡島	智史	50
小野	綾子	
小野寺	,直幸	105,108,110,113

か

加藤	正人	
神谷	朋宏	

ح

小坂	亘4	7
小林	恵太)1

さ

坂本	健作	65
~ 1	<i>i</i> e ¹¹	~ ~

l

志賀	基之	
柴田	卓弥	65
下村	健太	110
下村	和也	113

す

	杉原
	杉本
²	鈴木
103	鈴圡

せ

関川	卓也	23

	た
田中	正暁50,57

っ

都留 智仁......16,20

	と
堂田	哲広50

な

永井	佑紀	100
永武	拓	29
中村	博樹	54,75,78,94

は

橋本	真太郎	
長谷川	雄太	105,108,113

ર્જ

福田	貴斉	.29	涯
古野	朗子	.68	渡

ほ

堀口 直樹35,	41
----------	----

ま

町田	昌彦	54,75,78,91,100

み

61	マリウス	オビデウ	ラケ	ミハラ
50		•••••	真之	宮崎
50			孝充	三浦

Ł

森	健郎50
森	道康44
森口	大輔41

Þ

	•
柳沢	秀樹47
山口	瑛子
山口	正剛

山下	晋29,32,35,38,65,110	,
山田	進)

よ

吉川	龍志	57
吉村	一夫	50
吉田	啓之	41

ろ

ロドリゲズ	ダグラス	チェイス71
ロブゼンコ	イバン	

わ

度部	雅	54
度部	晃	47

This is a blank page.