

# 令和6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 FY2024  
(April 1, 2024 – March 31, 2025)

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

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。（<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.ja>）  
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（<https://www.jaea.go.jp>）  
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

令和 6 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

(2025 年 8 月 28 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」等の研究開発活動に利用された。本報告は、令和 6 年度における大型計算機システムを利用した研究開発の成果を中心に、それを支える利用支援、利用実績、システムの概要等をまとめたものである。

Summaries of Research and Development Activities  
by using Supercomputer System of JAEA  
in FY2024 (April 1, 2024 – March 31, 2025)

HPC Technology Promotion Office

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

(Received August 28, 2025)

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 FY2024, 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 for 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 FY2024, 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 6 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
3.3	新サービスの提供 .....	10
4.	大型計算機システムの利用支援 .....	12
4.1	計算機利用における支援 .....	13
4.1.1	利用相談・可視化相談 .....	13
4.1.2	プログラム開発整備 .....	13
4.1.3	プログラム最適化チューニング .....	15
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） .....	17
5.	大型計算機システム利用による研究成果 .....	18
5.1	原子力基礎工学研究センター .....	18
5.1.1	軽水の熱中性子散乱則評価のための分子動力学シミュレーション .....	18
5.1.2	LOHDIM-LES の効率的流入境界処理コードの整備 .....	21
5.1.3	合金化と組織制御のための原子・電子シミュレーション .....	24
5.1.4	高濃度合金の人工ニューラルネットワークポテンシャル開発 .....	28
5.1.5	放射線照射によって駆動される新規物性の探索 .....	32
5.1.6	PHITS ユーザ入力支援ソフト PHITS-PAD のヘルプ機能の開発 .....	35
5.1.7	誘導放射能解析コード DCHAIN-SP の並列化作業 .....	38
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 .....	40
5.1.9	界面追跡法に基づく混相流解析手法開発 .....	43
5.1.10	過酷事故時及び定常時における原子炉内非定常熱流動事象解析手法の開発と応用 .....	46
5.1.11	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 .....	49
5.1.12	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 .....	52
5.1.13	MicroAVS による ACE-3D 用可視化用ソフトウェアの開発 .....	55
5.1.14	三次元二流体解析コード ACE-3D の 3 方向並列化と性能評価 .....	58

5.2 パイオニアラボ .....	60
5.2.1 新型 BWR 熱水力評価技術開発 .....	60
5.3 先端基礎研究センター .....	62
5.3.1 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 .....	62
5.4 安全研究センター .....	66
5.4.1 振発性ルテニウムと硝酸の気相における反応機構の量子化学計算による検討 ...	66
5.4.2 格納容器内自然対流に関する CFD 解析.....	69
5.4.3 燃料挙動解析コード FEMAXI-8 の高速化.....	72
5.5 燃料材料開発部 .....	73
5.5.1 CNWG・先進燃料物性計算科学研究.....	73
5.6 高速炉研究開発部 .....	76
5.6.1 高速炉蒸気発生器内ナトリウムー水反応現象数値解析コードの高度化 .....	76
5.6.2 SPIRAL コードによる加熱円管内乱流混合対流の層流化現象解析 .....	80
5.7 高速炉解析評価技術開発部.....	84
5.7.1 「常陽」炉外試験データを用いたナトリウム冷却高速炉の炉心湾曲コードの妥当性確認；単体ダクト湾曲のベンチマーク .....	84
5.8 核変換ディビジョン .....	88
5.8.1 加速器駆動システムの低エネルギービーム輸送のためのビーム過渡現象の研究.....	88
5.9 核不拡散・核セキュリティ総合支援センター.....	92
5.9.1 遅発ガンマ線の応用研究と分析 .....	92
5.10 システム計算科学センター.....	95
5.10.1 第一原理計算による原子力材料劣化機構の研究.....	95
5.10.2 水素材材料の第一原理分子動力学計算 .....	98
5.10.3 原子・分子シミュレーションによる核燃料の物性評価 .....	102
5.10.4 粘土鉱物へのラジウムの吸着構造の解明.....	105
5.10.5 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 .	109

5.10.6 構造材料の第一原理計算 .....	113
5.10.7 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 .....	116
5.10.8 二相格子ボルツマン法による高速炉における気体巻き込みシミュレーション の効率向上 .....	120
5.10.9 界面捕獲法を用いた気液二相流体計算における気泡合体モデルの開発 .....	124
5.10.10 GPU 向け乱流アンサンブルデータ同化コード CityLBM-LETKF の開発 .....	128
5.10.11 複雑な気象条件に対応した局所風況解析手法の開発 .....	132
6. おわりに .....	135
付録 .....	136
著者名別 論文索引 .....	139

## Contents

1.	Introduction .....	1
2.	Supercomputer System of JAEA.....	4
3.	Computer Usage Records in FY2024 .....	6
3.1	Availability and Utilization Rate .....	6
3.2	Sector Computer Time .....	7
3.3	Launch of New Services .....	10
4.	User Support of Supercomputer System of JAEA.....	12
4.1	Support for the Use of Supercomputer System of JAEA.....	13
4.1.1	Help Desk.....	13
4.1.2	Program Development and Maintenance.....	13
4.1.3	Program Optimization Tuning .....	15
4.2	Training for Computer Usage Techniques (Tutorials, Seminars) .....	17
5.	Research and Development Activity by using Supercomputer System of JAEA .....	18
5.1	Nuclear Science and Engineering Center.....	18
5.1.1	Molecular Dynamics Simulation for Evaluating Thermal Neutron Scattering Law of Light Water.....	18
5.1.2	Code Implementation of Efficient Inflow Boundary Conditions for LOHDIM-LES.....	21
5.1.3	Atomic and Electronic Structure Calculations for Alloying and Defect Structures .....	24
5.1.4	Development of Artificial Neural Network Potentials for Multi-Component Alloys.....	28
5.1.5	Exploration of Novel Physical Properties Driven by Irradiation .....	32
5.1.6	Development of the Help Function for PHITS-PAD .....	35
5.1.7	Parallelization of the Induced Radioactivity Analysis Code DCHAIN-SP .....	38
5.1.8	Estimation of Thermal-Hydraulics Parameters for Neutronics/Thermal-Hydraulics Coupling Simulation.....	40
5.1.9	Development of Multiphase Flow Analysis Method Based on Interface Tracking Method .....	43
5.1.10	Development of Numerical Simulation Method for Thermal Fluid Flow .....	48

Phenomena on Severe Accident Condition in Reactor Pressure Vessel .....	46
5.1.11 Thermal Behavior for Air-cooling in PCV of Fukushima Daiichi Nuclear Power Station Unit 2 .....	49
5.1.12 Two-Phase Flow Analysis to Establish the CHF Prediction Method Based on the Mechanism .....	52
5.1.13 Development of Visualization Software for ACE-3D using MicroAVS .....	55
5.1.14 Three-Directional Parallelization and Performance Evaluation of the Two-Fluid Thermal-Hydraulic Code ACE-3D .....	58
5.2 Pioneer Laboratory.....	60
5.2.1 Key Technology Development for Novel BWR Thermal-hydraulic Design.....	60
5.3 Advanced Science Research Center .....	62
5.3.1 Research for Ground State and Excitation Dynamics in Low-Dimensional Strongly Correlated Systems.....	62
5.4 Nuclear Safety Research Center .....	66
5.4.1 A Reaction Pathway from RuO <sub>3</sub> (OH) or RuO <sub>2</sub> (OH) <sub>2</sub> to Ruthenium Tetroxide by Nitric Acid in Gas Phase with Quantum Chemistry Computations .....	66
5.4.2 CFD Analysis of Natural Convection in a Nuclear Containment Vessel .....	69
5.4.3 Optimization and Refactoring of Fuel Performance Code FEMAXI-8 .....	72
5.5 Fuels and Materials Department.....	73
5.5.1 Numerical Study of Physical Properties of Advanced Fuel in CNWG .....	73
5.6 Fast Reactor Research and Development Department .....	76
5.6.1 Improvement of Analysis Code for Sodium-water Chemical Reacting Jet in a Steam Generator in a Sodium-cooled Fast Reactor.....	76
5.6.2 Analysis of Laminarization in Heated Vertical Tube at Turbulent Mixed Convection Condition by SPIRAL .....	80
5.7 Fast Reactor Life-Cycle Safety and Integrity Evaluation Technology Development Department.....	84
5.7.1 Validation Study on SFR Core Bowing Codes using Joyo Ex-core	

Experiment Data: Single Duct Bowing Benchmark .....	84
5.8 Nuclear Transmutation Division.....	88
5.8.1 Beam Transients Studies for the Low-Energy Beam Transport of the Accelerator Driving System.....	88
5.9 Integrated Support Center for Nuclear Nonproliferation and Nuclear Security ...	92
5.9.1 Delayed Gamma-ray Final Application Studies and Analysis.....	92
5.10 Center for Computational Science & e-Systems .....	95
5.10.1 First-Principles Study of the Degradation of Nuclear Materials .....	95
5.10.2 First-Principles Molecular Dynamics of Hydrogen-Related Materials .....	98
5.10.3 Atomic Simulations of Physical Properties for Nuclear Fuel .....	102
5.10.4 Investigation of Adsorption Structure of Radium on Clay Minerals.....	105
5.10.5 Analysis of Physical Properties of Amorphous Materials in the Nuclear Field by Machine Learning Molecular Dynamics.....	109
5.10.6 DFT Calculation of Structural Materials .....	113
5.10.7 Atomic-Scale Simulations of Radioactive Substances using Machine Learning.....	116
5.10.8 Enhancing Efficiency of Gas Entrainment Simulation for Fast Reactors using Two-phase Lattice Boltzmann Method.....	120
5.10.9 Development of a Bubble Coalescence Model for Gas-Liquid Two-Phase Fluid Calculations Using the Interface Capture Method.....	124
5.10.10 CityLBM-LETKF: Ensemble Data Assimilation for Turbulence Simulations on GPU .....	128
5.10.11 Local Wind Analysis Method Using Complicated Meteorological Data .....	132
6. Conclusion.....	135
Appendices.....	136
Author Name Index .....	139

## 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な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 6 年度に原子力機構の発表した査読付論文の総数は 1,022 件であった。このうち計算科学技術を利用した論文は 202 件である。この論文数は、全論文の約 20%以上を占めており、原子力機構の研究成果に対する計算科学技術の貢献度の高さを示している。

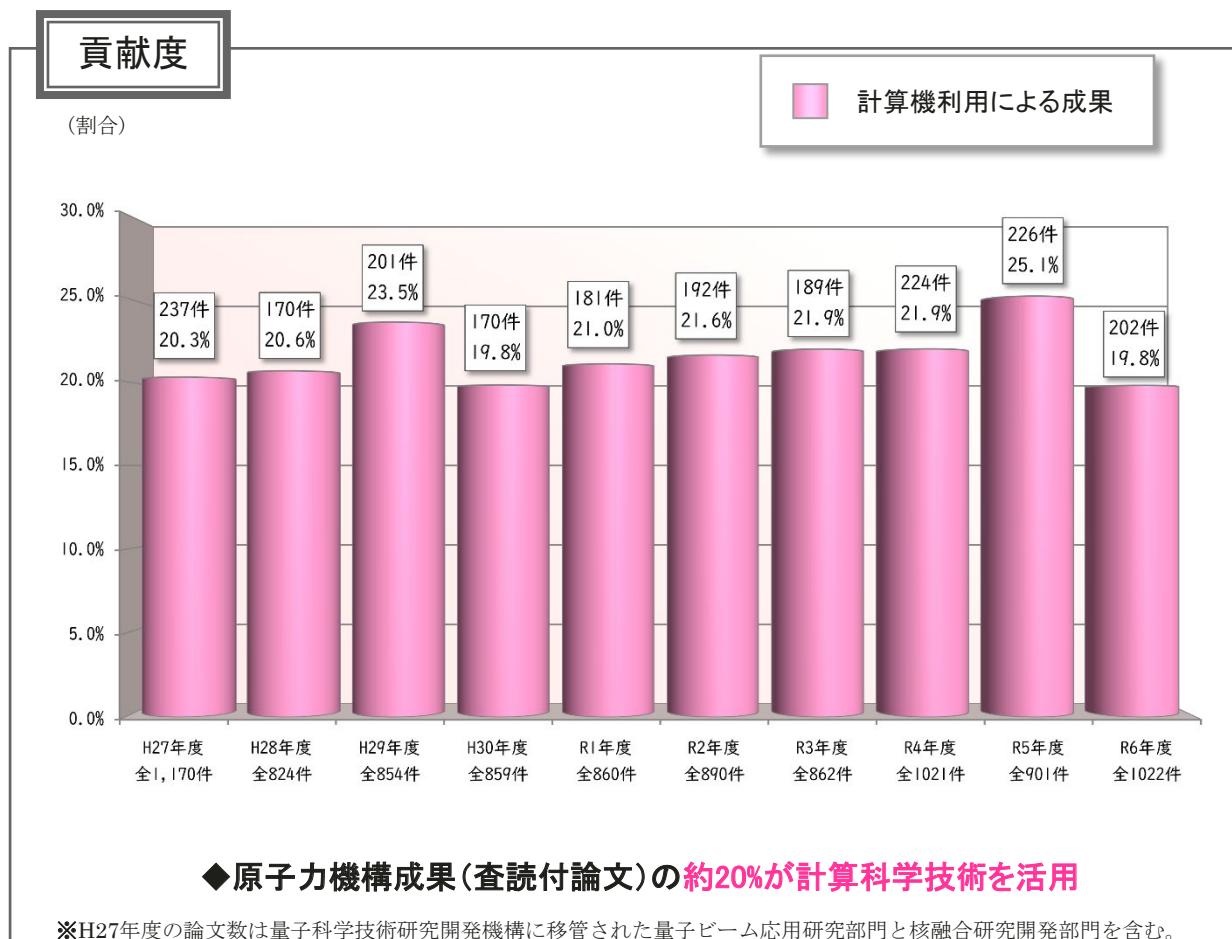


図 1.1 計算科学技術による研究成果創出貢献度 [平成 27 年度～令和 6 年度]

(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)

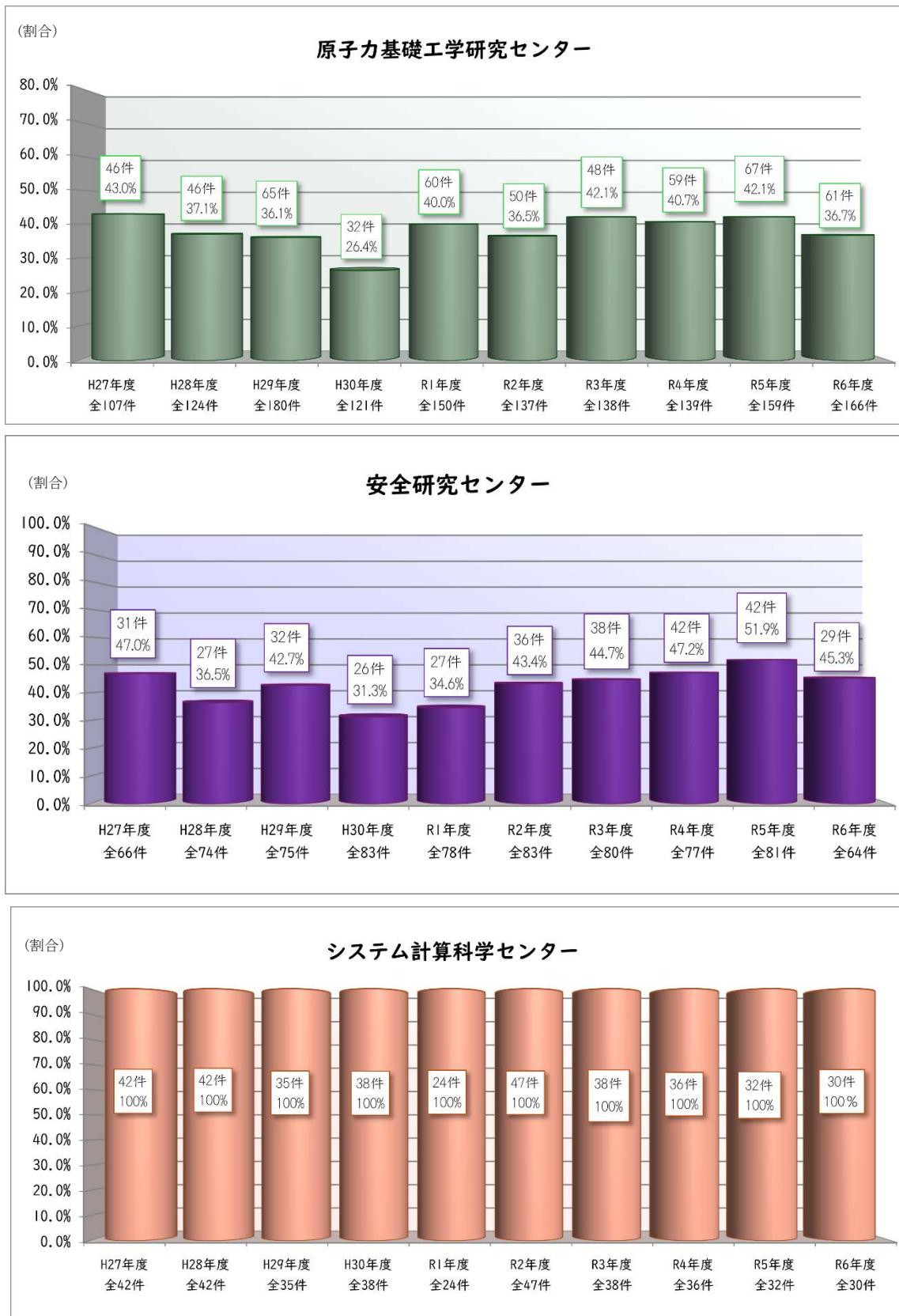
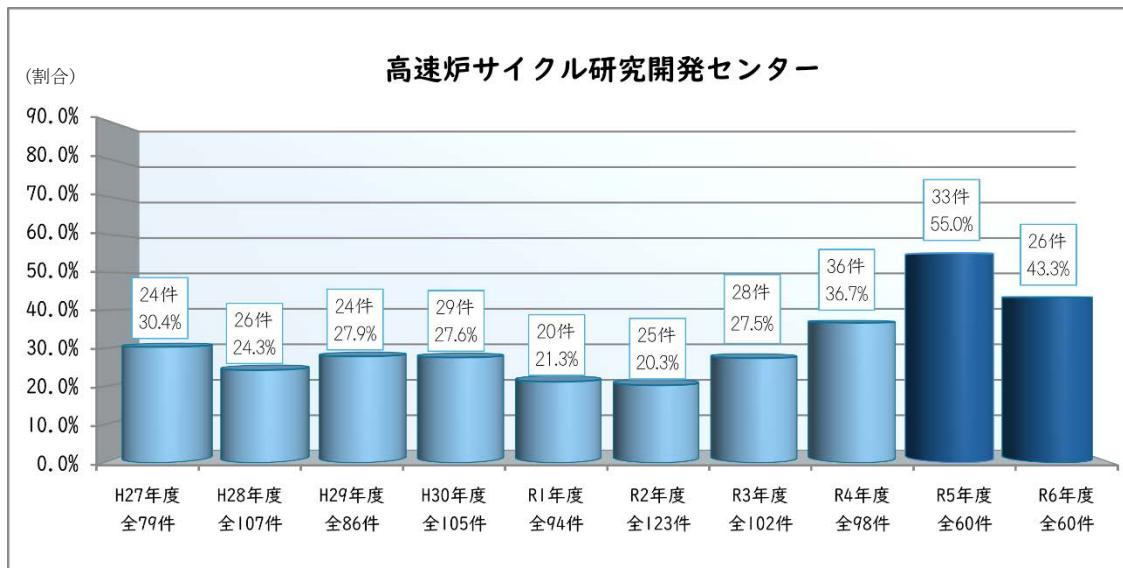


図 1.2 組織別計算科学技術による研究成果創出貢献度 [平成 27 年度～令和 6 年度] (1/2)



※ R4 年度までの論文数は、高速炉・新型炉研究開発部門としての集計

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 27 年度～令和 6 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 6 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 演算部の GPU+CPU のハイブリットシステムを中心とし、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に、不慮のデータ消失に備えるための磁気テープライブラリー装置（4PB）で構成している。主な仕様を表 2.1 に示す。

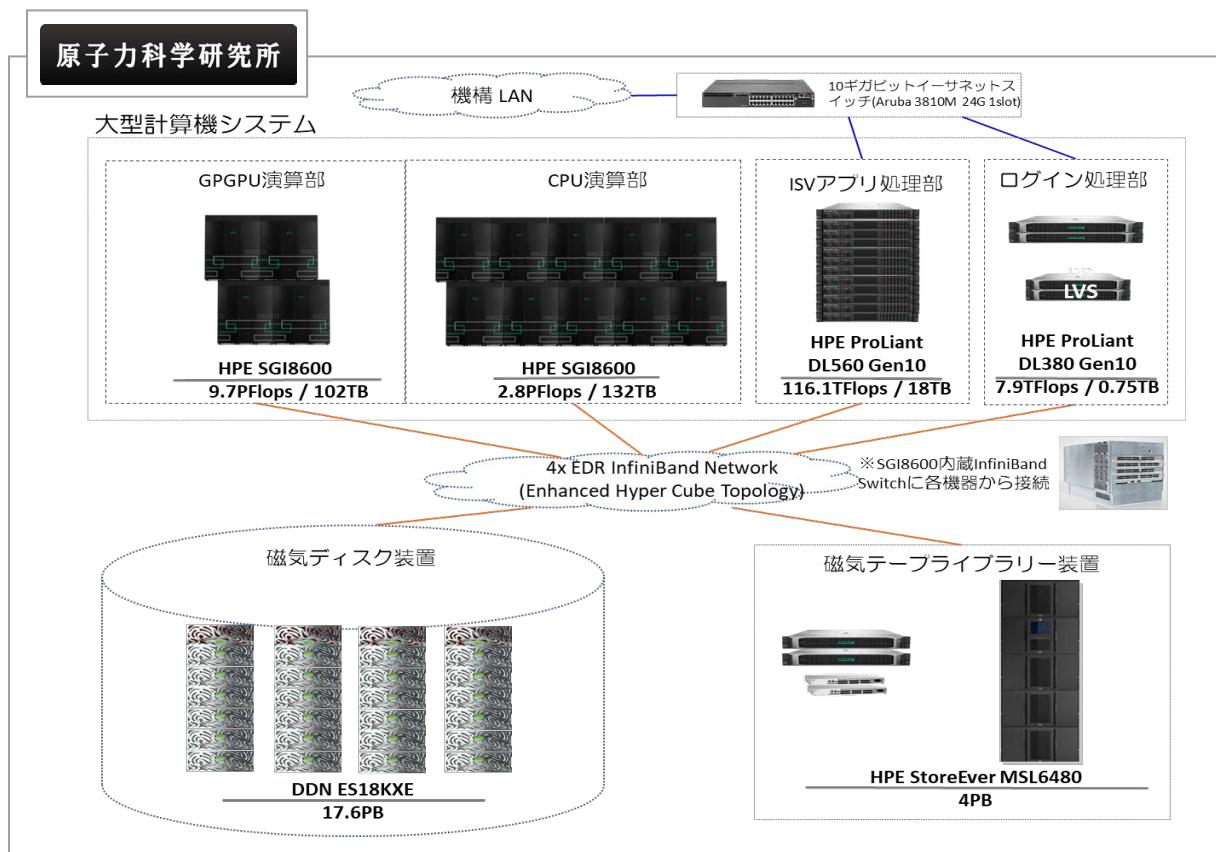


図 2.1 大型計算機システムの構成

表 2.1 大型計算機システムの性能(主な仕様)

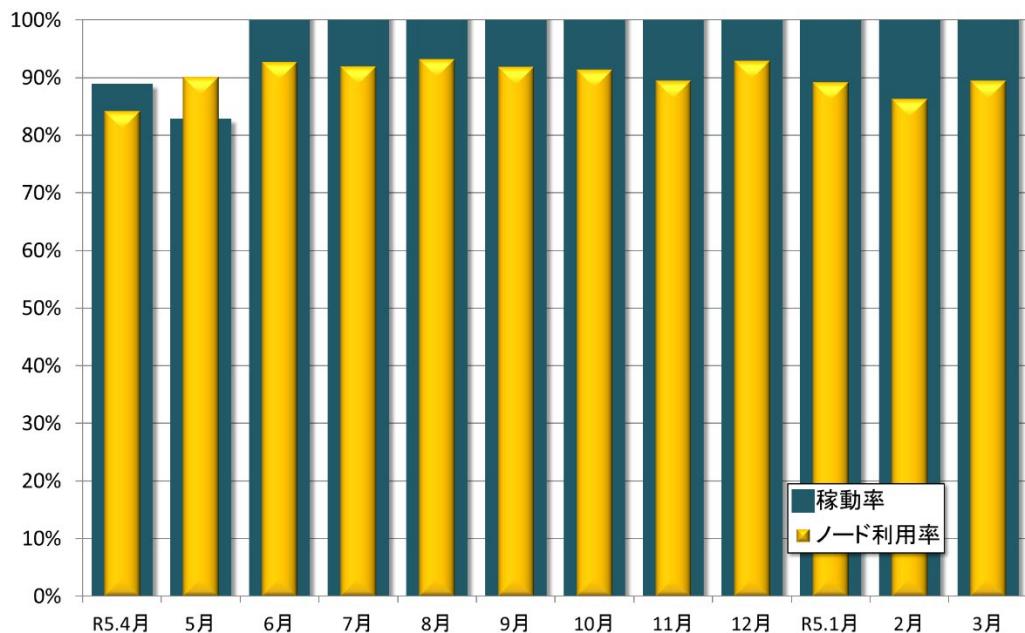
	GPGPU 演算部 HPE SGI8600		CPU 演算部 HPE SGI8600	ISV アプリ 処理部 HPE ProLiant DL540 Gen10	ログイン 処理部 HPE ProLiant DL380 Gen10
タイプ	スカラ		スカラ	スカラ	スカラ
総演算性能 (TFLOPS)	1,253	8,486	2,801	116.12	7.936
総主記憶容量 (TB)	102	-	132.375	18	0.768
コア数／ノード	48		40	112	40
ノード数	272		706	12	2
CPU	Intel Xeon Gold 6248R 24core 3.0GHz × 2CPU	NVIDIA Tesla V100 SXM2 32GB Memory × 4	Intel Xeon Gold 6242R 20core 3.1GHz × 2CPU	Intel Xeon Platinum 8280 28core 2.7GHz × 4CPU	Intel Xeon Gold 6242R 20core 3.1GHz × 2CPU
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 50GB/s (全二重)		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 Hat Enterprise Linux 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	Fortran C/C++		Fortran C/C++	Fortran C/C++	Fortran C/C++
バッチシステム	PBS Professional		PBS Professional	PBS Professional	PBS Professional
ファイルシステム	DDN EXAScaler(Lustre)		DDN EXAScaler (Lustre)	DDN EXAScaler (Lustre)	DDN EXAScaler (Lustre)

令和 6 年 3 月末 現在

### 3. 令和 6 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、年間稼働率 97.2%を達成した（図 3.1：紺の棒グラフ）。運用の停止は、年度切替え作業（4月）、OS バージョンアップ作業（4月、5月）、構内全域停電（7月）、臨時保守作業（7月）によるものである。また、ノード利用率は 90.4%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）。



$$\text{※稼働率} = (\text{実運用時間} / \text{運用可能時間}) \times 100$$

運用可能時間：運用可能日数×24 時間

実運用時間：運転可能時間－(システムダウン時間+保守時間)

$$\text{※ノード利用率} = (\text{総ノード利用時間} / \text{総ノード運用時間}) \times 100$$

総ノード利用時間：ジョブで利用したノード時間の総合計

総ノード運用時間：実運用時間×全ノード数

図 3.1 大型計算機システムの稼働率・ノード利用率（年間）

### 3.2 大型計算機システムの組織別利用実績

令和 6 年度の大型計算機システムの利用者数は 444 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）。

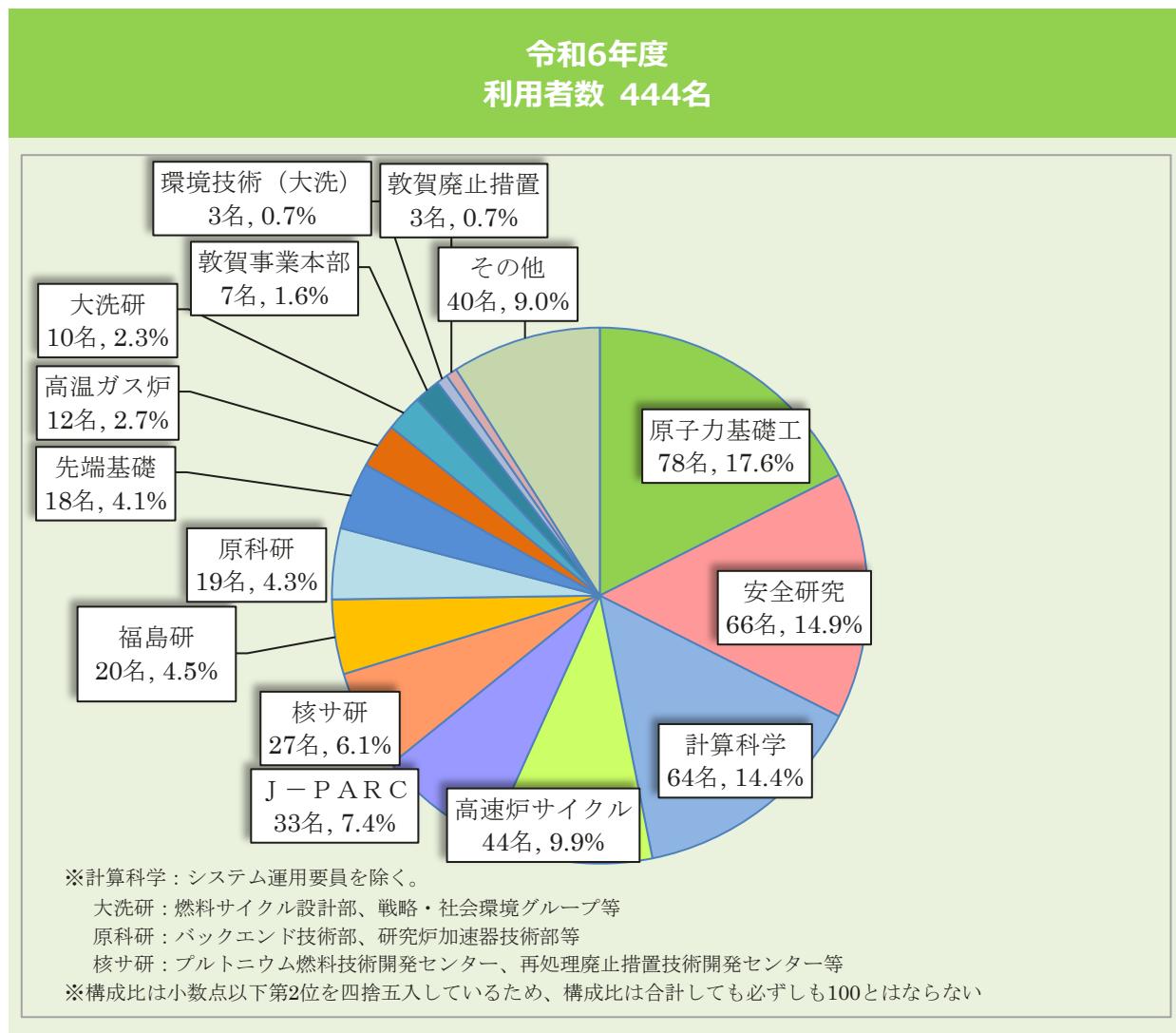


図 3.2 大型計算機システムの組織別利用者数

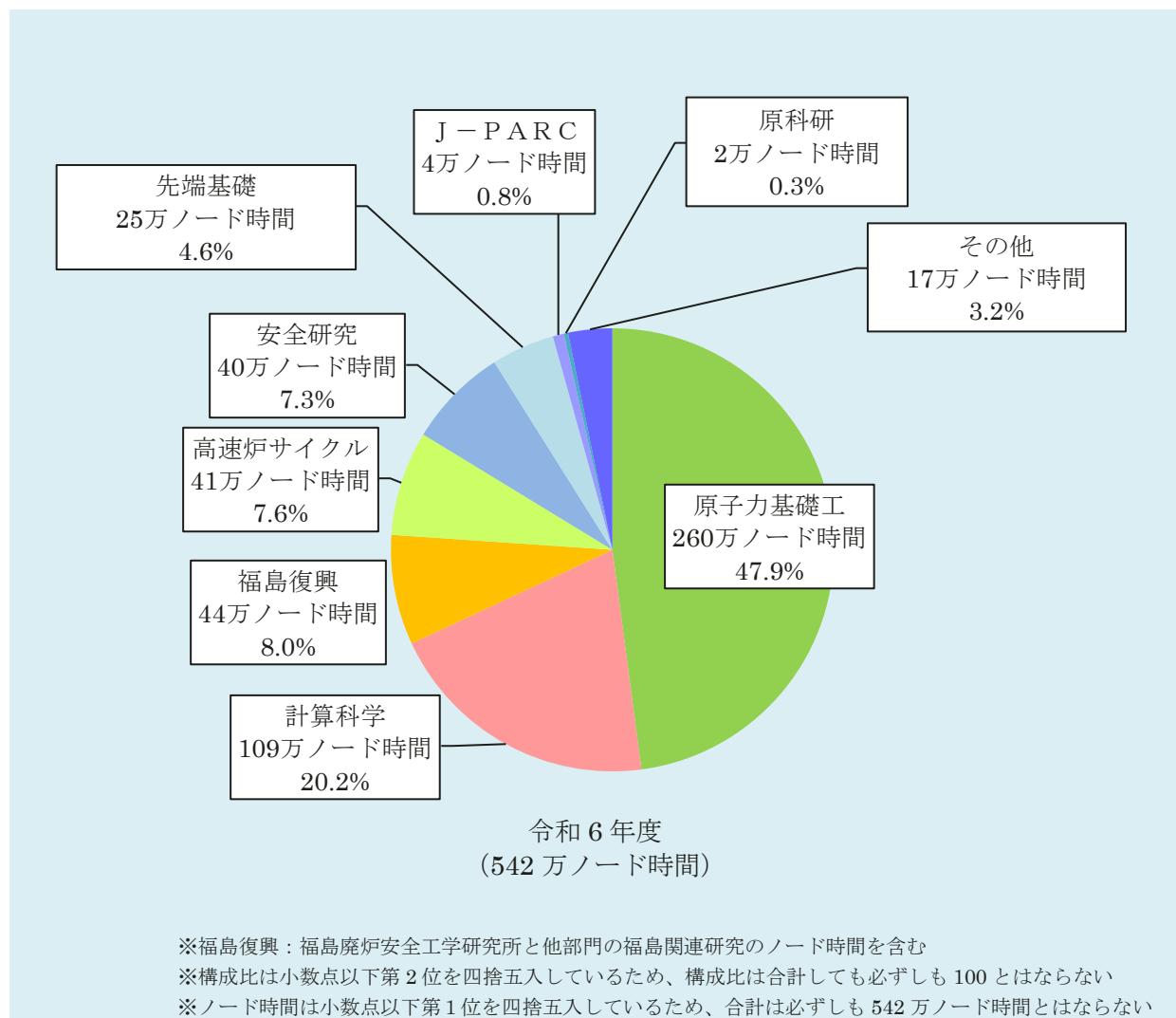


図 3.3 大型計算機システムの部門分野別ノード時間利用実績

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542万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廃炉安全工学研究所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。

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

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 5,760	179,867	5.1.11 項
2	過酷事故時及び定常時における原子炉内非定常熱流動事象解析手法の開発と応用	原子力基礎工学 研究センター	JUPITER 7,000	133,763	5.1.10 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 1,200	34,310	5.10.7 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 1,440	60,144	5.10.4 項
5	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	3,067	5.10.5 項
6	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 7,680	1,532	5.10.3 項

### 3.3 新サービスの提供

大型計算機システム (SGI8600) では、研究環境および業務環境のデジタル化を推進するため、クラウドサービス（仮想環境）及び内部生成 AI サービスの提供を開始した。まず、原子力機構における多様な研究開発プロジェクトに対し、専用の計算環境を提供可能なクラウドサービスを ISV アプリ処理部上に順次整備し、令和 6 年度には 4 課題について環境整備を完了、テスト運用を開始した。整備済みの 4 課題については表 3.2 に示す。なお、本クラウドサービスは令和 7 年度より本格運用を開始する予定である。

また、GPGPU 演算部の 1 ノードを活用して内部生成 AI を構築し、令和 7 年 3 月より原子力機構内において運用を開始した。運用開始後、令和 7 年 3 月 21 日から 27 日までの 1 週間における利用状況は、累計利用者数 1,034 名、メッセージ数 8,155 件、トークン数 10,818k に達した。

表 3.2 クラウドサービス利用課題 (1/2)

項	課題名	部署	内容
1	課室サーバの代替・バックアップ・テスト環境の構築	安全研究センター 燃料安全研究 グループ	令和 6 年度から 5 ヶ年の予定で開始した安全研究センターにおける NRA からの補助事業ではデータベース整備を行うこととしており、新規データベース環境 (MySQL 等) の導入や試運用によるメインサーバ挙動への影響、これに伴う業務遂行への影響・遅延を生じるリスクを回避すると同時に、当該データベースを連携部署とフラットな関係で共用することが容易な環境を構築する。
2	大気拡散データベースシステム WSPEEDI-DB による大気拡散予測結果の迅速提供に必要な計算出力データベースの構築	原子力基礎工学研究センター 環境動態研究 グループ	ウクライナからの依頼に基づき、ザポリージヤ原発からの放出を仮定した WSPEEDI-DB による大気拡散予測結果を毎日継続的に提供する。
3	広域線量分布測定用装置 (KURAMA-II) データ解析システムの高速化	システム計算科学 センター HPC・DX 基盤技術開発室	福島県からの受託事業において、KURAMA-II 解析システムを外部クラウド上で運用している。このシステムを仮想サーバ環境に移植し、プログラムの整理・統合・高速化及びデータベースの最適化作業を実施する。

表 3.2 クラウドサービス利用課題 (2/2)

項	課題名	部署	内容
4	オンプレミス生成 AI を用いたアプリケーション利用基盤構築	システム計算科学センター 業務 DX 推進室	原子力機構内では予てより生成 AI 利用のニーズが高まっていた次第であるが、セキュリティ要件や利用料金の問題により、活用が進まない状況であった。原子力機構内のオンプレミス環境で動作する生成 AI を構築し、加えてローコードのアプリケーション基盤も同時に構築することで、ユーザが気軽に利用可能な生成 AI 活用環境を提供する。

## 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 자체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。

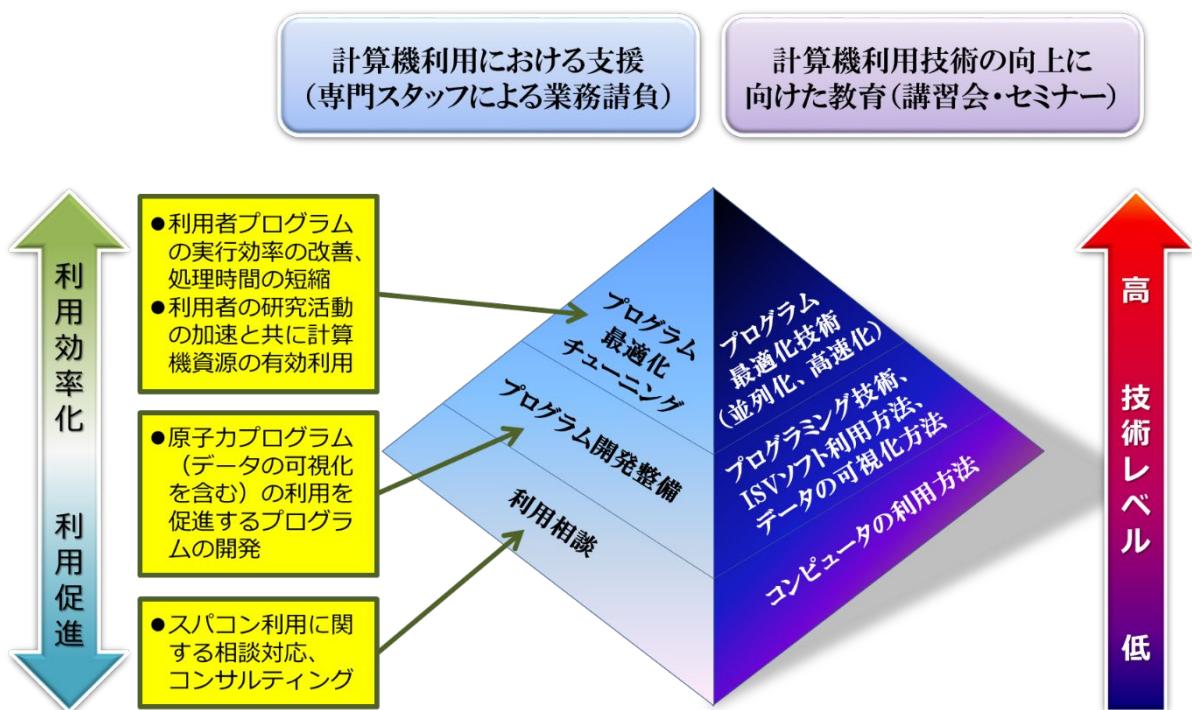


図 4.1 利用支援体制

## 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 6 年度の利用相談は年間 579 件、可視化相談は年間 51 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 6 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。

表 4.1 プログラム開発整備における選定要件と選定件数

選定要件	選定件数
(P1) 原子力機構内で共通に使用されるプログラム	4 件
(P2) 大規模課題で使用するプログラム	—
(P3) 解析の大規模化等、大規模利用（大規模並列化）が必要なプログラム	—
(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	—
(P6) SGI8600 への整備が必要なプログラム	—

令和 6 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 5 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）に対して、PHITS の Web 版ユーザーズマニュアルのソーステキストから PHITS-PAD 字句解析用辞書を自動生成するプログラムの作成及びウインドウ表示モニタの自動選択等の機能を追加した。これらの開発した機能より、利便性が向上し、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 令和 6 年度プログラム開発整備作業

項	作業件名 (選定要件)	作業概要及び結果	関連する 成果報告
1	PHITS ユーザ入力支援ソフト PHITS-PAD のヘルプ機能の開発 (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 5 年度に開発した Windows 版及び Mac 版の PHITS-PAD に対し、PHITS の Web 版ユーザーズマニュアルのソーステキストから PHITS-PAD 字句解析用辞書を自動生成する機能、 ウィンドウ表示モニタの自動選択等の機能を追加した。これらにより、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。	5.1.6 項
2	MicroAVS による ACE-3D 用可視化用ソフトウェアの開発 (P1)	核熱連成シミュレーションの実現に向けて、三次元二流体モデル解析コード (ACE-3D) において、ACE-3D で得られた解析結果を Micro AVS で可視化処理をする際に、解析データを非構造格子型である UCD フォーマットに変換するプログラムの開発を行った。これにより、計算結果の可視化をより正確、かつ簡便に行えるようになった。	5.1.13 項
3	「常陽」炉外試験データを用いたナトリウム冷却高速炉の炉心湾曲コードの妥当性確認；単体ダクト湾曲のベンチマーク (P1)	汎用機/VP2600 向けに実装された汎用非線形構造解析プログラム (FINAS) において、Linux 環境への移植、拡張書式 (ワイドデータ) を使用するフラグ (インプットで指定) が ON の場合、データ部の整数値及び実数値入力がそれぞれ 10 カラム、20 カラムを使用した場合のリスタート機能の開発を行った。これにより、SGI8600 (Linux 環境) 上で大型炉心の構造計算が利用可能となった。	5.7.1 項
4	LOHDIM-LES の効率的流入境界処理コードの整備 (P1)	局所域高分解能大気拡散計算コード (LOHDIM-LES) において、効率的に乱流変動風の生成を行えるようにターゲットとする風速変動標準偏差分布の入力条件の機能追加、計算領域内での保存性をより向上させるため、主流方向に直交する側面境界条件を周期境界条件に変更した。これらにより、代表風向に応じて、流入境界条件及び側面境界条件の処理を自動的に切り替える事が可能となった。	5.1.2 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 6 年度は、表 4.3 に示す 3 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。

表 4.3 プログラム最適化チューニングにおける選定要件と選定件数

選定要件	選定件数
(T1) 大規模課題で使用するプログラム	—
(T2) 解析の大規模化等、大規模利用（大規模並列化）が必要なプログラム	1 件
(T3) 原子力機構内で共通に使用されるプログラム	2 件
(T4) 福島支援等、緊急対応が必要なプログラム	—
(T5) SGI8600 への整備が必要なプログラム	—

令和 6 年度の主な作業について表 4.4 に示す。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として選定された、ACE-3D に対して、X 軸、Y 軸方向にも領域分割を行えるよう 3 次元化を実施し、従来の Z 軸方向と同程度の並列化効率で計算可能となった。FEMAXI-8 では、スレッド対象となったカーネルから呼び出されるサブルーチン群のローカル変数（データ共有属性）をスレッドプライベートに指定して競合回避するよう修正し、1 スレッドと比較して 4 スレッドで 2.11 倍の高速化を達成した。

表 4.4 令和 6 年度高速化・並列化作業

項	プログラム名 (選定要件)	高速化・並列化 チューニングの概要	高速化・並列化 チューニングによる 速度向上及び作業結果	関連する 成果報告
1	MicroAVS による ACE-3D 用可視化用 ソフトウェアの開発 (T2)	MPI プロセス並列化 (X/Y 軸方向)	オリジナルの Z 軸方向と同 程度の並列化効率で実行可 能	5.1.13 項
2	誘導放射能解析コー ド DCHAIN-SP の並 列化作業 (T3)	① OpenMP スレッド並 列化 ② MPI プロセス並列化	オリジナルの逐次版と比較 して、MPI80 並列時に 70.5 倍、OpenMP40 並列時に 35.6 倍の高速化を達成	5.1.7 項
3	FEMAXI-8 コードの 高速化作業 (T3)	① スレッド並列化	1 スレッドと比較して 4 ス レッドで 2.11 倍の高速化を 達成	5.4.3 項

## 4.2 計算機利用技術の向上に向けた教育(講習会・セミナー)

利用者の計算機利用技術の向上に向けた教育として、大型計算機システム上で利用されるソフトウェアや高速化等のプログラミング方法等について講習会を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 6 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 4 回開催（初級レベル：2 回、中級レベル：2 回）した。講習会には、延べ 143 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。

表 4.5 令和 6 年度講習会

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 初級	令和 6 年 7 月 3 日	ディープラーニング講習会 (ディープラーニング入門IV)	講義	69 名
2	利用方法 初級	令和 6 年 8 月 23 日	GPGPU プログラミング講習会 (OpenACC の入門的な講習)	講義	29 名
3	利用方法 中級	令和 6 年 10 月 23 日	並列化・高速化講習会 (プログラム性能評価手法の講習)	講義	26 名
4	利用方法 中級	令和 6 年 11 月 12 日	ParaView 初級者向け講習会	講義 実習	19 名

## 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 軽水の熱中性子散乱則評価のための分子動力学シミュレーション

Molecular Dynamics Simulation for Evaluating Thermal Neutron Scattering Law of Light Water

中山 梓介

核データ研究グループ

##### (1) 利用目的:

熱中性子炉の代表例である軽水炉の炉心計算では、炉心内に多量に含まれる軽水の熱中性子散乱則（物質の原子・分子運動による低エネルギー中性子の散乱を記述するデータ。以下、TSLと表記する）が、炉内中性子の空間・エネルギー分布の変化を通じて、臨界性や出力分布といった炉心特性の計算結果に大きな影響を及ぼす。この影響は、（ウランやプルトニウムを含む）全核種の核反応データに関して、あるデータベースから別のものに総入替えした時の 50%にも達することがあることが知られている。

TSL は物質の原子・分子運動による中性子散乱を記述するデータであるため、物質の相や温度・圧力によって多様に変化する。例えば、氷、水、超臨界水は同じ H<sub>2</sub>O だが TSL は別物であり、同じ水でも常温と数百°Cを超える高温（かつ高圧状態）では TSL は大きく異なる。軽水炉の炉心計算の観点からは、原子炉運転時のような高温・高圧状態における TSL が特に重要となる。

しかし、日本の JENDL や米国の ENDF/B、欧州の JEFF 等、現行の核反応データベースでは、軽水の TSL は常温で最適化された経験的力場を用いた古典分子動力学シミュレーションに基づいて評価されている。そのため、応用上最も重要な高温・高圧状態においては、実験値と乖離した値が格納されていることが近年指摘され始めている。

この問題を克服するため、経験的力場を用いず温度や圧力変化への外挿性が高いと考えられる第一原理計算に基づいた分子動力学シミュレーションによって、原子炉運転時のような高温・高圧状態における軽水の TSL を新規評価することが本研究の目的である。これによって、軽水炉の炉心計算の高度化に貢献することを目指す。

##### (2) 利用内容・結果:

###### 1) 令和 6 年度の達成目標

本研究は令和 6 年度から 3 カ年計画で進めている。初年度である令和 6 年度は初めに、中性子散乱実験の実験値が比較的多く存在する常圧状態における沸点以下（常温～80°C程度）の条件

において分子動力学シミュレーションを行い、その結果を基に常圧・常温付近の条件における軽水のTSLを導出して実験値と比較することで、本研究で採用予定のTSL評価手法の予測精度を検証することを達成目標とした。

## 2) 令和6年度の成果とその重要性

軽水中の主な中性子散乱源である水素は質量が小さく、量子振動効果が顕著である。この効果を考慮するため、分子動力学シミュレーションには通常の分子動力学法ではなく、経路積分分子動力学法を用いた。この経路積分分子動力学法の計算にはPIMDコードを使用した。なお、経路積分分子動力学法には通常の分子動力学法よりも長大な計算時間が必要になる。このために、大型計算機HPE SGI8600を利用する必要がある。

また、計算の効率化のため、分子動力学シミュレーション中で使用するポテンシャルはシミュレーションの各ステップで第一原理計算によって求めるのではなく、第一原理計算の結果を再現するように事前に作成された機械学習ポテンシャルを用いた。第一原理計算中で用いる交換相関汎関数に依存して最終的に得られる機械学習ポテンシャルも変わり得るが、本研究ではRPBE-D3およびrevPBE0-D3という汎関数に基づく機械学習ポテンシャルをそれぞれ使用し、2通りの計算を行った。

結果の一例として、中性子散乱実験値や既存の核反応データベース値との比較結果を図1に示す。図には常温・常圧の軽水に入射エネルギー151meVの中性子を衝突させた際の中性子散乱二重微分断面積（散乱中性子のエネルギー・角度相関）を示している。なお、実験値との比較のため、データベース値および計算値に関しては7meVの幅を持つガウス分布で平滑化したものを見ている。

図の通り、ENDF/B-VIII.1とJENDL-5はほぼ同じ値を与えており（JEFFの最新版はENDF/B-VIII.1と同じ値が格納されているため割愛）。これは、前述の通り両者の評価が、常温で最適化された同一の経験的力場(TIP4P-2005/f)を用いた古典分子動力学シミュレーションに基づいて行われているためと理解できる。また、今回の計算についても用いる汎関数に依らずほぼ同等の値を与えてることが分かる。

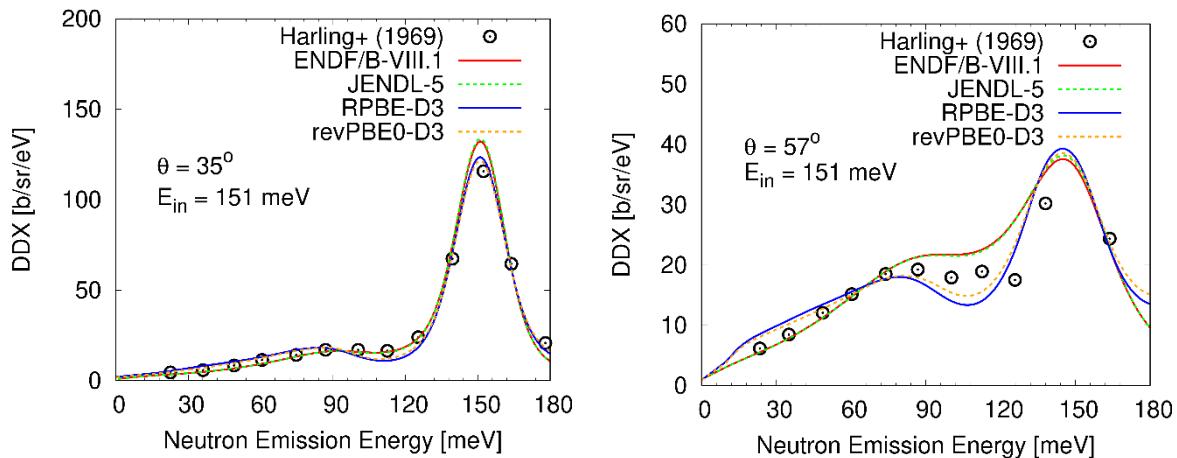


図1 常温・常圧の軽水に対する中性子散乱二重微分断面積に関する  
実験値・既存データベース値・今回の評価値の比較図。

入射エネルギーは151meV、散乱角度は35°（左図）および57°（右図）

図 1 に示した以外の結果も踏まえ、常圧での沸点以下の条件では、今回評価した軽水の TSL は、ENDF/B-VIII.1 や JENDL-5 といった最新の核反応データベースに格納され、現在種々の軽水炉炉心計算に実用されている TSL と同程度の高い予測精度を持つことが分かった。常温・常圧付近では今回評価した TSL の予測精度が既存のものと遜色ないことが分かった訳だが、この結果には重要な意義がある。既存の核反応データベースに格納されている TSL は常温・常圧付近で最適化された経験的力場を用いた古典分子動力学シミュレーションに基づいて評価されている。そのため、常温・常圧付近では実験値の再現性が高いことはある意味で当然ともいえる。他方、応用上最も重要な軽水炉運転条件（高温・高圧状態）は、経験的力場を最適化した条件から外れているため、前述の通り、この条件下では実験値と乖離した値が格納されていることが指摘され始めている。

その一方で、今回評価した TSL は第一原理計算に基づく機械学習ポテンシャルを用いた分子動力学シミュレーションに基づくものであり、温度や圧力条件に依らず一定の予測精度を持っていることが期待される。そのため、今回得られた結果は、経験的力場を用いたシミュレーションでは予測精度が落ちる高温・高圧状態に対しても、今回の手法では高精度の予測が可能であることを期待させるものであると言える。

今年度の結果を踏まえ、次年度の計画として常温付近の軽水 TSL について、炉心計算を用いた更なる検証を行うことを予定している。令和 6 年度の検証では中性子散乱の実験値のみを用いていたが、評価した TSL を用いた炉心計算を行い、その結果を実験炉などの臨界実験の結果と比較することで、別の角度からの TSL の更なる検証を行う。具体的には軽水 TSL を既存のものから今回評価したものに変更した場合で、臨界実験値の予測精度がどのように変わるかを検証する。なお、炉心計算には近似が少なく計算精度の高いモンテカルロ法に基づいた計算コードを用いる。

加えて、今後、軽水炉運転条件における中性子散乱実験を実施予定である。本実験は、世界初の軽水炉運転条件における高精度の中性子散乱実験になると期待される。これに先がけ、令和 7 年度中に高温・高圧状態の軽水 TSL を評価することを計画している。TSL 評価の際には今回と同様いくつかの交換相関汎関数に基づく機械学習ポテンシャルを使用した計算を行っておき、どの汎関数に基づく評価値が最も妥当であるかを実験値との比較から判断可能にしておく。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等) :

- ・ 学会口頭発表
- 1) 中山 梢介, 木村 敦, Thomsen Bo, 原子炉運転条件下における熱中性子散乱則の測定・評価 : (1)プロジェクト概要, 日本原子力学会 2024 秋の大会, 仙台市.
  - 2) S. Nakayama, Current status and issues of evaluation of thermal neutron scattering law for nuclear reactor moderators, 2024 年度核データ研究会, 熊取町 ※招待講演.

### 5.1.2 LOHDIM-LES の効率的流入境界処理コードの整備

#### Code Implementation of Efficient Inflow Boundary Conditions for LOHDIM-LES

中山 浩成

環境動態研究グループ

##### (1) 利用目的:

原子力機構は、これまで緊急時環境線量情報予測システム SPEEDI を開発してきた。SPEEDI は、数十~百 km の領域を数百 m 程度の計算格子で地表面形状を解像するしているため、数 m オーダーの建物周りや急峻地形上における複雑乱流場での詳細拡散予測はできない。こういった局所域スケールでの大気拡散現象を正確に数値予測するためには、地表面形状を精緻に解像し、乱流・物質拡散の非定常挙動を的確に捉えられる数値シミュレーションモデルの構築が必要である。

申請者は、非定常乱流現象の再現に優れた Large-Eddy Simulation (LES) 乱流モデルに基づく局所域高分解能大気拡散モデル (LOcal-scale High-resolution atmospheric DIspersion Model using LES : LOHDIM-LES) の開発を行っている。LES 乱流モデルは、瞬間的に変化する非定常現象を数値的に解析するため、流入境界条件に対して瞬間的に変化し大気乱流に相当する流入変動風を規定する必要がある。そのため、LOHDIM-LES コードは、拡散風洞実験 (写真 1[1]) を参考にして設計された。

大型計算機を用いることで、計算モデル上流側に長い助走空間の地表面上に障害物を適宜配置して任意の大気乱流を生成させ、下流側に置かれた対象模型上の高分解能大気拡散解析が可能となる (図 1)。



写真 1 ハンブルグ大学拡散風洞実験施設[1]

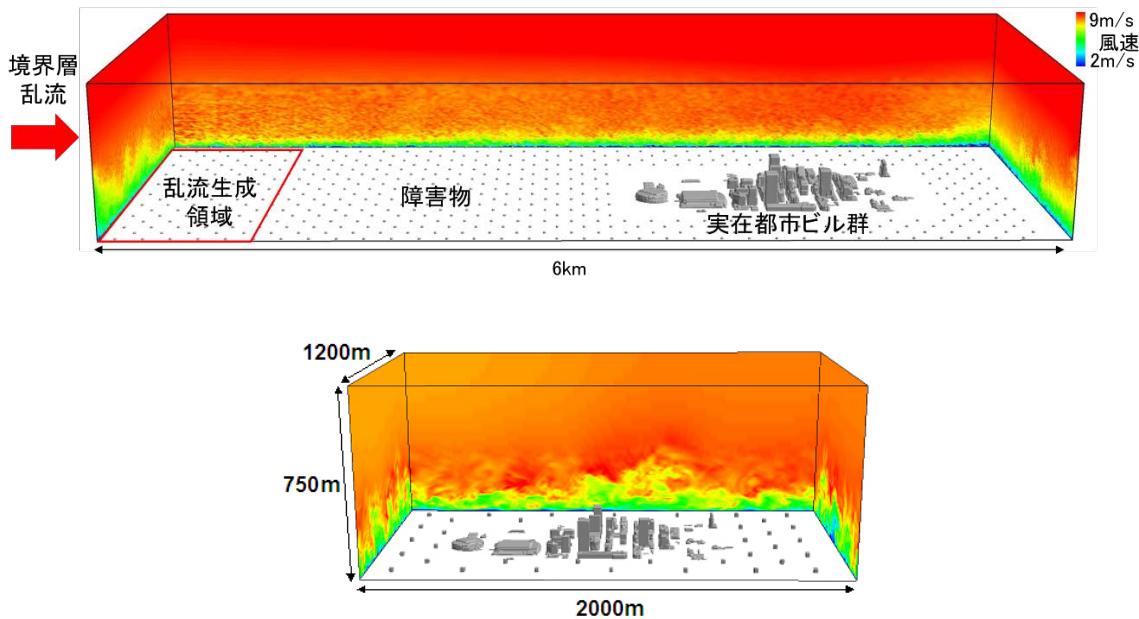


図1 LOHDIM-LESの計算モデル（上段：大気乱流生成領域、下段：大気拡散解析領域）

これまで、流れの衝突・剥離・循環が生じる複雑気流条件を対象にした高分解能大気拡散計算を行い、文献値と比較検証を行うことで、実験技術と同等の基本性能を有することを実証した。しかし、ターゲットとする風洞気流場を再現するために長い助走空間を設定する必要があり、ある程度の試行錯誤を繰り返す必要があった。

そこで、LOHDIM-LESにターゲットとする大気乱流を効率的に生成できる流入境界処理コードを導入し、整備をした。本計算コードは、原子力施設の安全審査における拡散風洞実験の代替手段となり、実用的な大気拡散解析の利用が可能となる。

## 参考文献

- [1] Leitl B, Schatzmann M (2003). Generation of wind tunnel data sets in support of the Joint Urban 2003 atmospheric dispersion study, Oklahoma City, July 2003, Interim Report 07-2003, Meteorological Institute, Hamburg University, Bundesstrasse 55, 20146 Hamburg, Germany

## (2) 利用内容・結果:

ターゲットとする気流場を効率的に作り出すために、風速変動を動的に制御可能な乱流生成手法を開発した。この手法は、風洞気流の乱流統計量と計算値との比を乱流駆動係数として、ターゲットとする風速変動を作り出すものである。試験計算として、実大気に相当する乱流統計量の標準データを用いた。

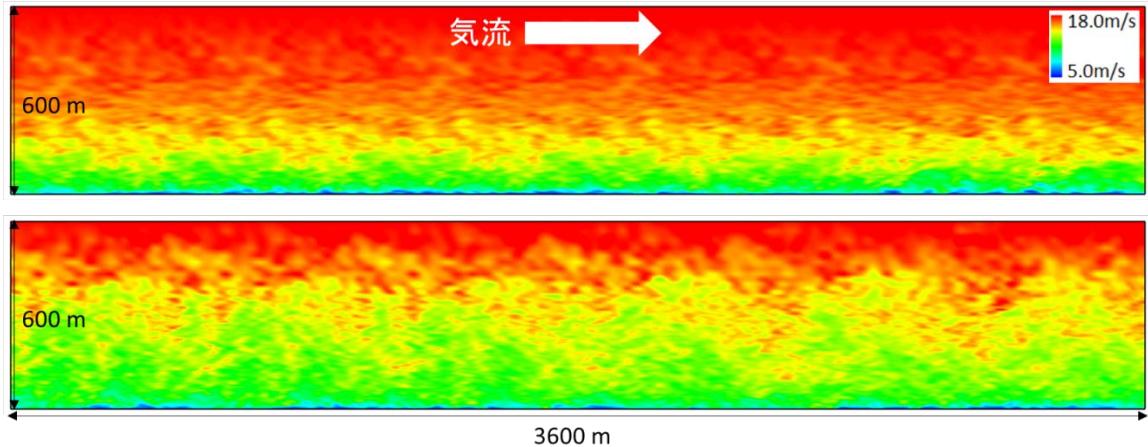


図 2 LOHDIM-LES により生成された風洞気流場の再現（上段：従来法、下段：新手法）

図 2 は、効率的流入境界処理コード（新手法）を導入して生成された乱流境界層を、導入無しの従来法と比較したものである。ここでは、新手法の有効性を調べるために、風洞実験においてよく使用される乱流を促進させるための障害物は設置していない。計算領域は  $3600\text{m} \times 800\text{m} \times 600\text{m}$  (主流方向×風向直交方向×鉛直方向) とし、水平方向の計算格子サイズは 10m、鉛直方向には 10m–20m の不当間隔格子とした。

従来法では、流入境界より空間的に変化している境界層乱流が生成されているのが確認できるが、活発な変化を生じている高さは 300m 程度までである。

一方、新手法は、活発に変化する境界層乱流は 500m 程度の高さまで及んでいるのが確認できる。この解析結果により、風洞実験のように亂れを促進させるための障害物の設置をすることもなく、かつ多数の試行錯誤の計算をすることもなく、ターゲットとする境界層厚さを伴う気流場の生成を効率的に行うことが可能であることを示した。

原子力施設の安全審査における拡散風洞実験は、労力・費用・時間に多大なコストがかかることから、現在、計算シミュレーションによる合理化が求められている。数値シミュレーションモデルの利用は、原子炉施設の立地や構造物の形状・配置などに変更が生じた場合に柔軟に対応することが可能であり、施設設計の合理化や多様化が図れる。本計算コードは、様々な条件の拡散風洞実験における気流場を効率的に再現でき、高い精度を持って実験技術の代替手段となりうる。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) なし。

### 5.1.3 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、ロブゼンコ イバン、久保 淳、阿部 陽介  
照射材料工学研究グループ

##### (1) 利用目的:

材料の力学応答、とりわけ塑性変形挙動は、元素種・結晶構造・格子欠陥などの「材料因子」と、温度・変形などの「外場因子」が複数に絡み合った非線形の相互作用によって決定される。この多様な因子の相互作用の複雑さが、力学機能向上に対する戦略的な材料開発を阻んできた。学理に基づいた力学機能設計の実現には、それぞれの因子と力学応答との関係および複数の因子間の相互作用を考慮して力学特性を記述する枠組みの構築が必須である。近年で、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 オーダーを超える強度と延性・韌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。HEA は総じて拡散が遅く、これを利用した耐照射性が高く原子力材料への応用も期待されている。しかしその多くは偶然発見されたものであり、特に HEA では組み合わせと濃度の自由度が膨大となるため優れた機能を有する合金を戦略的に創製する手段が必要とされている。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材料開発スキームを確立することを目的とする。

##### (2) 利用内容・結果:

###### 1) 令和 6 年度課題の達成目標

令和 6 年度の研究計画では、体心立方構造 (BCC) と面心立方構造 (FCC) の二つの異なる結晶構造を持つ HEA の変形機構の起源について検討し、優れた力学機能を設計する指針を得ることを目的とした。

###### 2) 令和 6 年度の研究成果とその重要性

###### ハイエントロピー合金の力学特性評価

###### ・高耐熱性 BCC ハイエントロピー合金の特異なすべり変形挙動の解析

一般に BCC 合金の変形において、低温ではすべりは {110} 面に固執し、高温では <111> 転位が {110} 面と {112} 面の間で頻繁に交差すべりするため、巨視的に観察されるすべり面は荷重軸に強く依存する。（このすべり面の選択は  $\Psi$ - $\chi$  関係を用いて効果的に理解することができる。 $\Psi$ - $\chi$  関係は、ステレオ投影において主すべり面 {110} と最大せん断応力を生じる面の角度  $\chi$  と主すべり面 {110} と実際に観察されるすべり面の角度  $\phi$  の関係を表したものである）。一部の HEA ではこの  $\Psi$ - $\chi$  関係が通常の BCC 合金で観察される {110} 面の固執でなく、{112} 面で観察されることが実験的に知られている。このすべりの固執が構成元素によって変化すると想定し、混合比を変化させた仮想的な Nb-Zr 合金を用いて転位運動の最小エネルギー経路を探索する枠組みを作成した。解析の結果、第 IV 族元素濃度が高いハイエントロピー合金において、

転位運動の最小エネルギー経路は d 軌道の電子構造に起因していることがわかった。 $\Psi$ - $\chi$  関係は BCC 金属の変形の基礎として扱われる事項であるが、本結果は HEA 合金研究を通じて  $\Psi$ - $\chi$  関係を決める因子を明らかにしたものである。さらに BCC 合金系への第 IV 属元素の添加は価電子濃度を低下させ、弾性不安定性、高い格子ひずみ、低い転位のエネルギーなどの力学特性に直結する特性を決定する主要因となることが明らかになった。

#### ・ FCC ハイエントロピー合金の変形

BCC-HEA と合わせて FCC 構造を持つ HEA についても成果が得られた。FCC 構造を有する高エントロピー合金の中には、優れた強度-延性バランスを有するものがある。転位すべり以外の微細な双晶パターンなどの特異な変形モードが機械的特性に寄与している一方で、そのような特異な変形を引き起こす HEA の基本的な性質や特徴は解明されていない。CoCrFeNiMn およびその派生系の優れた機械的特性の原因となる基本特性を第一原理計算により包括的に探索した。その結果、まず局所的な格子歪みはバーガースベクトルのほぼ 2% に達し、HEA の強度向上に寄与していることがわかった（図 1）。さらに、積層欠陥エネルギー（SFE）は、ランダム固溶体では著しく低い一方、Monte-Carlo 計算によって得られた短距離秩序（SRO）が形成されるドメイン周辺では上昇した（図 1）。SFE の増加は、SF 形成による化学的 SRO とスピン秩序の乱れに起因するが、本解析の結果 HEA 特有の固溶体領域に分布する低 SFE ドメインと高 SFE ドメインが、様々な変形モードを連続的に活性化させ、優れた強度と延性のバランスを実現していることが示唆された。詳細なスピン秩序の効果については検討の余地があるが、この結果は、HEA 合金の代表格である CoCrFeNiMn の高強度の要因として、格子ひずみでは説明できない現象を解明したものである。

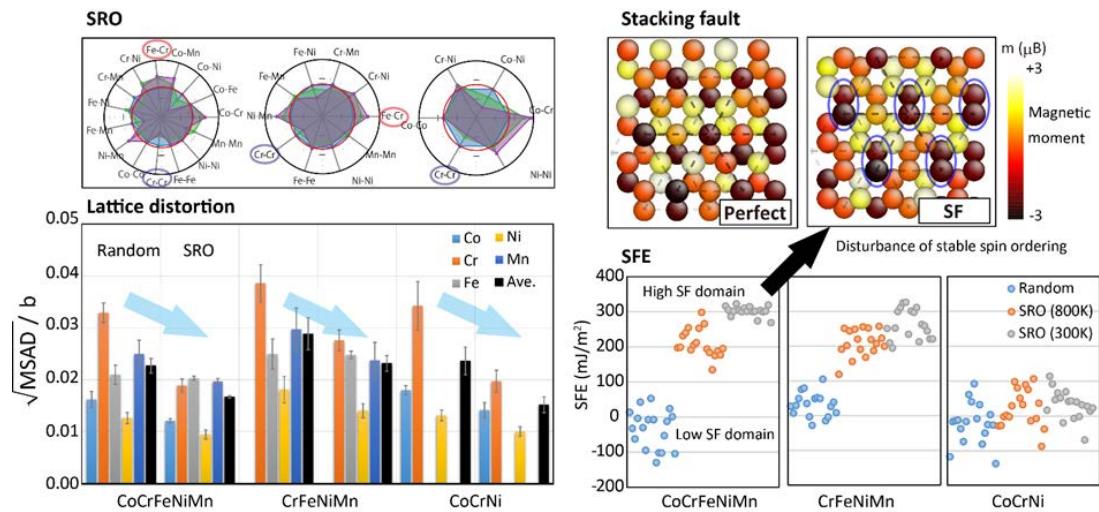


図 1 CoCrFeNiMn、CrFeNiMn、CoCrNi の機械的特性を決定する特性: Monte-Carlo 計算によって得られた短距離秩序（SRO）、局所格子ひずみ、積層欠陥エネルギー

### 合金系の機械学習ポテンシャル開発と事故耐性燃料被覆管材への応用

事故耐性燃料被覆管材料として、照射材料 Gr の研究の柱として研究を行っている Fe-Cr 系合金のポテンシャル開発を検討し、結晶構造・格子ひずみ・クラスタ・積層欠陥など機械特性に必要データセットに対する第一原理計算を完了し、ポテンシャルのプロトタイプを完成させた。脆化因子となる  $\alpha'$  析出物を模擬することが期待される。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### ● 投稿論文 (査読あり)

- 1) T. Tsuru, Origin of Excellent Strength-Ductility Balance Unique to FCC High-Entropy Alloys: A Plaston-Based Mechanism Derived from Electronic Structure Calculations, Mater. Trans., 65, (2024), pp.988-994.
- 2) H. Somekawa, T. Tsuru, K. Naito, A. Singh, Control of twin boundary mobility by solute segregation in Mg binary alloys, Scripta Mater., 249, (2024), 116173.
- 3) Y. Abe, T. Tsuru, Y. Fujita, M. Ohtomo, T. T. Sasaki, S. Yamashita, N. Okubo, S. Ukai, Effects of Al addition on Vickers hardness increase by thermal aging of Fe-Cr-Al alloys — Evaluation by systematic experiments, machine learning modeling, and first-principles calculations, J. Nucl. Mater., 606, (2025), 155606.
- 4) 都留智仁, 韓恕, 陳正昊, ロブゼンコ イバン, 乾晴行, 高耐熱性ハイエントロピー合金の特異な力学特性の起源, までりあ, 63, (2024), pp.695-702.
- 5) 都留智仁, 眞山剛, マグネシウム合金の計算材料科学, 軽金属 (連載講座) , 74, (2024), pp.442-450.
- 6) 都留智仁, 力学問題のシミュレーション研究と大型プロジェクトとの関わり, アンサンブル, 26, (2024), pp. 296-301.
- 7) 東海林瑞希, 栗原健輔, ロブゼンコ イバン, 都留智仁, 芹澤愛, 時効硬化型 Al 合金における GP ゾーンおよびナノクラスタの形成過程および形状決定因子の解明, 軽金属, 74, (2024), pp.535-545.
- 8) K. Shimizu, K. Nishimura, K. Matsuda, S. Akamaru, N. Nunomura, T. Namiki, T. Tsuchida, S. Lee, W. Higemoto, T. Tsuru, H. Toda, Combining muon spin relaxation and DFT simulations of hydrogen trapping in Al<sub>6</sub>Mn, Scripta Mater., 245, (2024), p. 116051.
- 9) S. Kiyohara, T. Tsuru, Y. Kumagai, First-principles Calculations on Dislocations in MgO, Sci. Tech. Adv. Mater., 25, (2024), 2393567.
- 10) R. Yano, M. Tanaka, S. Yamasaki, T. Morikawa, T. Tsuru, Temperature Dependence of Deformation and Fracture in a Beta Titanium Alloy of Ti-22V-4Al, Mater. Trans., 65, (2024), 1260. 他 1 報.
- 基調・招待講演
- 11) (基調講演) 都留智仁, 山口正剛, 海老原健一, 板倉充洋, アルミニウム合金における水素

脆化抑制のための元素戦略, 軽金属学会第 147 回秋期大会, 2024 年 11 月 8 日, 群馬大学.

- 12) (依頼講演) 都留智仁, 電子状態計算を用いた転位芯構造と運動の解析手法と力学機能設計, 2024 年度日本金属学会関東支部講習会, 2024 年 11 月 8 日, online.

● その他

成果普及情報原稿

- 13) (成果普及情報誌) 都留智仁, 高耐熱ハイエントロピー合金の特異な力学特性の起源 – 電子状態計算に基づく力学機能設計 –, JAEA R&D Navigator 2024-25 .

### 5.1.4 高濃度合金の人工ニューラルネットワークポテンシャル開発

#### Development of Artificial Neural Network Potentials for Multi-Component 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:

The unceasing growth of studies on multi-component alloys (MCA), metallic materials consisting of several principal elements, is dictated by a number of their unique properties. However, because of essentially complicated interactions between atoms in MCA, the origin of their excellent properties remains largely unknown.

Due to the enormously large compositional space of MCA, atomistic simulations is the method of choice for their studies, with a focus on the behavior of dislocations. The present study answers the demand for high-accuracy modeling of novel alloys. The project uses first-principles calculations based on density functional theory (DFT) to facilitate the development of new interatomic potentials for futher use in classical molecular dynamics (MD). As shown in Fig. 1, the resulting machine-learning potentials (MLPs) have an advantage of calculation speed compare to the DFT approach and high accuracy compare to the conventional potentials currently used in MD.

This study uses HPE SGI8600 high-performance super computer at each stage: from the acquisition of the database from DFT calculations through training of potentials using GPU nodes to finally modeling large-scale atomistic systems in classical approximation using the newly built interatomic potentials.

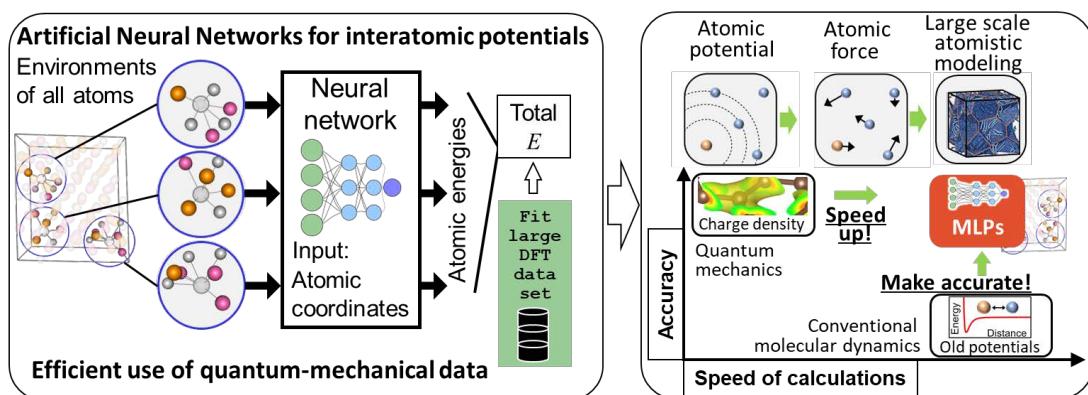


Fig. 1 MLPs usage scheme and advantage compared to other atomistic calculations methods

## (2) 利用内容・結果:

Research targets, their results and significance for the FY2024 project

- Building machine-learning potentials for high-entropy alloys based on the data set in DFT

In the course of the project, the large dataset for the five-element multi-component alloy (MCA) ZrNbTaTiHf was built using first-principles calculations based on the density functional method (DFT). The dataset comprised 80,000 different structures with varying number of atoms. The smallest structures representing basic phase (such as the body-centered cubic BCC or the face-centered cubic FCC) of single element were as small as eight atoms (with periodic boundary conditions responsible for the bulk state of the crystal). The biggest structures contained 250 atoms, which is necessary for the correct representation of crystals with surfaces. The size of the dataset grows bigger with more constituting elements of the alloy under study due to the necessity of covering different atomic environments for the correct fit of the energy surface of the material.

After the dataset is built, a number of new machine-learning potentials (MLPs) were trained on it. The difference in the potentials comes from the randomness of choosing a part (3%) of the data set for the test purposes. As shown in Fig. 2(a), the comparison of the elastic constants calculated with the newly built MLPs and in DFT reveals a good quality of the dataset because of the low dispersion of the MLPs results. Currently the potentials are undergoing other quality tests, such as the phase stability test shown in Fig. 2(b). During such calculations, the alloy is heated to a high temperature and then cooled back. The monotonic change of energy and volume of the system demonstrates the stability of the BCC phase of ZrNbTaTiHf.

The significance of these results is in the demonstration of the robustness of the newly built potentials. Also, it is worth mentioning that there are no interatomic potentials for the ZrNbTaTiHf alloy described in literature, and therefore the results which can be obtained in this project are unique.

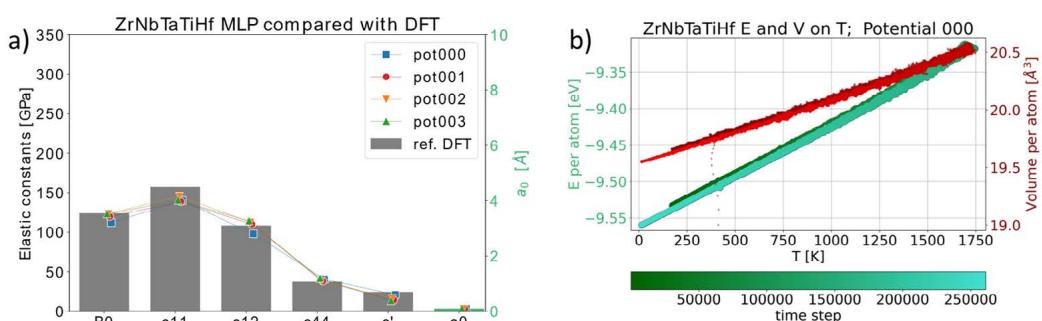


Fig. 2 (a) calculation of elastic constants of ZrNbTaTiHf with four different newly built MLPs (symbols connected by dashed lines) in comparison with the DFT results (columns). (b) Energy and volume per atom during the phase stability test for one of the new MLPs.

## 2. Machine-learning potentials development for accident-tolerant fuel cladding

The quality of the newly built MLPs for FeCrAl alloys are also under study in the current project. In the first stage, the elastic constants of the pure Fe calculated by MLPs were shown to be close to the existing results in the literature. As a next step, the energies of defective structures were investigated. One of the results related to the point defects in the pure Fe is presented in Fig. 3. The good agreement between the MLPs and the reference DFT is seen in all energies of the structures before relaxation.

The relaxation process with MLPs has revealed the metastable character of self-interstitials in orthorhombic (labeled O in Fig. 3), tetrahedral (labeled T in Fig. 3), and 100 configurations. This result was also confirmed in DFT by further analysis of the mentioned structures. Also, the relaxation path between the metastable and stable configurations uncovered new structures that should be added to the dataset for a better representation of the energy surface of the FeCrAl alloy. Among other investigated structures are point defects with Cr and Cr clusters of different sizes in the iron matrix.

The development of highly accurate and robust interatomic potential for FeCrAl alloy is a significant result, which will make possible studies of the origins of brittleness of Cr-reach  $\alpha'$  phase and influence of Al on mechanical properties of the alloy.

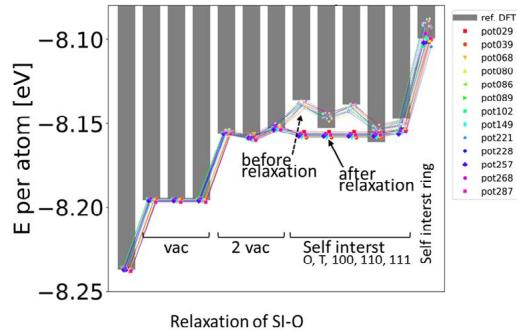


Fig. 3 Energy per atom in defective structures of pure Fe calculated with MLPs (symbols connected with lines) and DFT (columns)

### (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 1 報）

【出版承認】【査読有】

- 1) 東海林 瑞希・栗原 健輔・Ivan Lobzenko・都留 智仁・芹澤 愛, “Al-Cu および Al-Mg-Si 合金における GP ゾーン・ナノクラスタ形成過程および形状決定因子に対する数値解析”, 軽金属 第 74 卷 12 号 2024.

- 国際・国内会議（3 件）

- 2) I. Lobzenko, T. Tsuru, Y. Shiihara, T. Iwashita, “Local Von Mises Stress Change in CuZr Metallic Glass as an Indicator of the Stress Response” “The 30th International Conference on Computational & Experimental Engineering and Sciences”, Singapore 2024.
- 3) I. Lobzenko, T. Tsuru, “Atomistic modeling of mechanical properties of base-centered cubic multi-component alloys” ハイエントロピー合金と磁性に関する研究会 Japan,

JAEA 2024.

- 4) I. Lobzenko, T. Tsuru “Building interatomic potentials based on artificial neural networks for BCC multi-component alloys” reported at scientific seminars at CEA Paris-Saclay (France), SCK Mol (Belgium), KTH Stockholm (Sweden), RUB Ruhr (Germany), during the short internship 2024.

● 表彰

- 5) 論文賞物性部門: I. Lobzenko, T. Tsuru, H. Mori, D. Matsunaka, Y. Shiihara, Implementation of atomic stress calculations with artificial neural-network potentials, Mater. Trans. 64, 10 (2023), 2481.

### 5.1.5 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:

本研究の目的は放射線による物質の性質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。結果、放射線駆動物質科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。

本研究では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 に注目した。これまで、DNA の物性コントロールを目指した様々な研究が行われてきた。しかし、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共に、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。

また、本手法を DNA 以外の物質への適用する試みも開始した。

##### (2) 利用内容・結果:

###### 令和 6 年度の達成目標

令和 6 年度は、PHITS を利用して放射線と物質の相互作用を計算し、第一原理計算ソフトウェア OpenMX を利用してその相互作用の結果生じる分子構造・電子状態変化を原子レベルで計算する。また、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。

まず、PHITS と OpenMX を統合した DNA の状態変化解析を目指す。さらに、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形成を実現する。また、様々な塩基配列や分子修飾された DNA、他の有機分子にも計算を適用する。本研究の成果を国内学会（日本物理学会、原子力学会）や国際会議（Quantum Innovation 2024）で発表し、proceedings を始めとした論文を投稿する。

###### 令和 6 年度の成果とその重要性

【放射線照射 DNA に生じる新規物性の研究】DNA は生体分子であるが、超伝導、磁性など固体物理的な側面でも注目されている。しかし、DNA の擬一次元的な性質から不純物や格子欠陥などのランダムネスに弱く電子物性のコントロールが非常に困難であった。DNA の電子物性のコントロールに新たな指針を与えることは、DNA が物質科学のステージとなる可能性を広げる。これまで “Toy model” として扱われてきた一次元格子模型に関する数々の研究に新たな意味を与える。本研究で我々は密度汎関数理論を用いて、ホールを生成した DNA の電子状態を計算し、一次元近藤格子模型を構築した。その計算結果は、ホール生成によって重い電子状態が実現することを示す。その重い電子状態は遺伝情報を担う Guanine と全体の構造

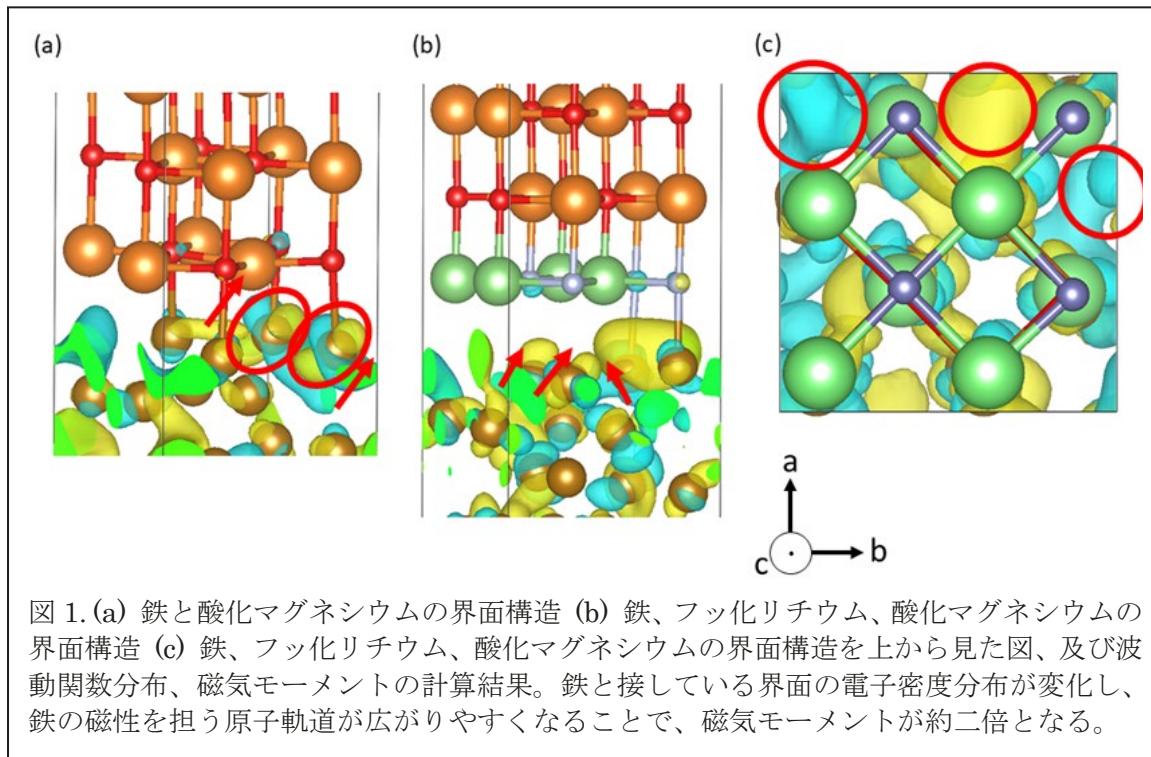
を支える主鎖の混成に起因する。本研究で得られた科学的知見は、DNA で様々なレアアースを置き換える技術に繋がり、ナノサイズの重い電子状態を利用した技術革新を可能にする。

**【生体分子ウラシルの金属的な性質のメカニズム研究】**DNA や RNA は生体高分子であるが、電子デバイスとしても高い潜在能力を持つ。その中で、ハロゲン化ウラシルの粉末試料における光電子分光実験において、金属のような微小バンドギャップが計測された。有機化合物の極少バンドギャップの物性解明は、固体物理における新奇発見となる。本研究で我々は密度汎関数理論を用いて、ハロゲン化ウラシルの固体表面における電子状態を計算した。その計算結果は、微小バンドギャップの実験値を再現した。また、その微小バンドギャップはウラシルとハロゲン原子の混成軌道が固体と真空の表面で作りだす *in-gap* バンドに起因することを示した。本研究で得られた科学的知見は、DNA や RNA を用いた電子デバイスを実現することに繋がり、更なる電子回路の集積を始めとした技術革新を可能にする。本研究成果を *Nature Physics* に投稿中である。

**【溶媒抽出に用いられる抽出剤の放射線影響研究】**放射性核種を抽出する有機分子と放射線の相互作用に関する基礎研究は、核燃料サイクル研究に貢献する。燃料溶解液からウランを抽出する Plutonium Uranium Redox Extraction (PUREX) 法は、リン酸トリプチル (TBP) を利用するが、その放射線分解過程における物理、物理化学過程は十分に理解されていない。この理解は後続の化学過程に相当するリン酸トリプチルの劣化挙動の評価に繋がる。本研究では放射線輸送計算コード PHITS を用いて物理過程を解析し、アルファ線通過におけるリン酸トリプチルの電離数分布を評価した。次に密度汎関数理論を基礎とした第一原理計算により、物理化学過程を解析した。ここでは、物理過程から得られた電離数分のホールを生成した液体 TBP 8 分子系の放射線分解メカニズムを解析した。これら一連の計算により我々は、リン酸トリプチルにおける放射線分解の最前線を探究した。本研究で得られた科学的知見は、アルファ線がもたらす高密度照射場におけるリン酸トリプチルの放射線影響の解明に貢献する。本研究成果を *Phys. Chem. Chem. Phys.* に投稿するため論文執筆中である。

**【放射線影響に強い半導体、磁気トンネル接合素子の研究】**不揮発性磁気メモリは情報を保持するために電力が不要な次世代の磁気メモリとして注目されている。鉄と酸化マグネシウムの界面はその候補材料の一つである。近年の実験により、鉄と酸化マグネシウムの界面に単原子層フッ化リチウムを挿入すると垂直磁気異方性が二倍に増加することが報告された。本研究で我々は密度汎関数法を用いて、鉄-酸化マグネシウムの界面と鉄-フッ化リチウム-酸化マグネシウムの界面の磁気モーメントを計算した。その結果から我々は、フッ化リチウムをその界面に挿入すると、界面付近の鉄原子の電子軌道が、フッ化リチウムの極小電子密度領域に向けて傾くように分布することで、磁気モーメントが挿入前の二倍になることを示した（図 1）。本研究で得られた科学的知見は、高性能な不揮発性磁気メモリの候補材料を探索する新たな指針となる。今後、放射線影響に強いと言われている磁気トンネル接合素子の放射線影響研究を第一原

理電子状態計算に基づいて行っていくつもりである。本研究の成果は Journal of Applied Physics に掲載され、AIP publishing Showcase on Kudos にも選定された（掲載論文 1）。



### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 学術誌掲載論文

- 1) ①Takuya Sekikawa, Kazuki Takada, Takeshi Kai, Yoshiaki Ōno, ②Mechanism of magnetization enhancement at the Fe/LiF/MgO interface elucidated through the first-principles calculations of the interface structure, ③Journal of Applied Physics, ④137, ⑤20, ⑥2025, ⑦203901 備考 : AIP publishing Showcase on Kudos に選定。

#### 国内会議

- 2) 関川卓也, 猪熊祐輔, 大野義章, 徳永陽, 甲斐健師, “第一原理計算に基づくホールドープされた DNA における重い電子状態の可能性”, 日本物理学会第 79 回年次大会 (2024 年) .
- 3) 関川卓也, フアン・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, “電離した DNA 分子の電子状態計算シミュレーション—Quantum Radiobiology の可能性－”, 日本放射線影響学会第 67 回大会 (2024 年、招待講演) .

## 5.1.6 PHITS ユーザ入力支援ソフト PHITS-PAD のヘルプ機能の開発

### Development of the Help Function for 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:

放射線の挙動を模擬する汎用のモンテカルロ計算コード PHITS は、令和 7 年 3 月時点で登録者数が 1 万人を超えており、加速器遮蔽設計、放射線検出器の開発、線量評価、医療応用など、幅広い分野で利用されている。我々は、PHITS の入力ファイル作成を支援するソフトウェア「PHITS-PAD」を開発しており、PHITS ユーザの作業効率を向上させるための様々な機能を実装している。その機能の一つに、入力パラメータの説明をヒントとして表示するヘルプ機能があるが、この機能は、パラメータ名や説明をまとめた XML 形式の辞書ファイルを必要とする。しかし、XML ファイルは人が直接編集するには不便であるため、より扱いやすい形式でパラメータ情報を管理するデータベースファイルを構築し、そこから XML ファイルを生成するための補助プログラムを開発した。

#### (2) 利用内容・結果:

- PHITS-PAD とヒント表示機能

PHITS-PAD は、PHITS 特有のパラメータを強調表示するなどの特徴を備えたテキストエディタである。パラメータの説明がヒントウィンドウに表示されるため、ユーザはその意味や役割を確認しながら入力ファイルを作成することができる。図 1 に、PHITS-PAD によるファイル作成時の画面例と、ヒントウィンドウの表示例を示す。この図では、PHITS パラメータの一つである icntl が強調表示されており、このパラメータの右側にカーソルを置いたまま約 2 秒経過すると、図のようにヒントウィンドウが自動的に表示される。PHITS 特有のパラメータに不慣れな初心者ユーザにとって、マニュアルなどの資料を参照する手間が省けるため、非常に有用な機能である。なお、ヒント表示が不要な中・上級者ユーザは、設定によりこの機能を無効化することが可能である。

The screenshot shows the PHITS-PAD application interface. The main window displays an input file named 'lec01.inp' with the following content:

```

1 [ Title ]
2 minimized input file for lecture
3
4 [ Parameters ]
5 icntl      =      0      # (D=0) 3:ECH 5:NOR 6:SRC 7,8:GSH 11:DSH 12:DUMP
6 icntl      50      # (D=10) number of particles per one batch
7 (D=0) 基本動作オプション。 2      # (D=10) number of batches
8

```

A tooltip window is open over the 'icntl' parameter at line 5, providing detailed information about its meaning and usage.

図 1 PHITS-PAD によるファイルの作成画面とヒントウィンドウの表示

### ● ヒント表示機能に必要な辞書ファイル

PHITS-PAD でヒントを適切に表示するためには、パラメータ名とその説明を関連付けて整理した辞書ファイルが必要である。我々は、そのような関連付けを構造的に管理できる XML 形式で辞書ファイルを作成している。図 2 にその一部を示す。この図の 10 行目に示すように、icntl がパラメータ名であること及びこれが取り得る値が 16 個であることが items タグによって指定されている。また、ヒント表示機能で出力される説明文は、11 行目に示すように hint タグで囲むことで指定でき、これを 10 行目から始まる parameter name タグ以下に記述することで、hint タグに書いた説明と icntl の関連付けが行われる。PHITS-PAD では、このような XML 形式の辞書ファイルを用いることで、ヒント表示機能を実現している。

```

1 <?xml version="1.0" encoding="UTF-8" ?>
2 <phits>
3   <language>
4     <name>日本語</name>
5     <locale>ja_JP</locale>
6   </language>
7   <section name="Title" form="0"/>
8   <section name="Parameters" form="1">
9     <comment>$#!</comment>
10    <parameter name="icntl" items="16">
11      <hint>(D=0) 基本動作オプション。</hint>
12      <item>
13        <value>0</value>
14        <hint>通常の粒子輸送計算。</hint>
15      </item>

```

図 2 PHITS-PAD で使用している辞書ファイルの一部。

### ● PHITS データベースファイル

しかし、図 2 からも分かるように、XML 形式のファイルには <hint> など多数のタグが含まれており、人が直感的に内容を把握しながら編集するには適していない。そこで、より編集が容易な ReStructuredText (RST) 形式でパラメータ情報を管理するデータベースファイルを作成する方針とし、それを XML 形式に変換する補助プログラムを開発した。図 3 には、RST 形式で記述した icntl パラメータのファイルを示す。RST は、Python で処理可能なマークアップ言語であり、技術文書を簡潔かつ構造的に記述できるテキスト形式として知られている。図 3 では、RST における表作成用の命令 list-table を用いて、icntl の名称と説明を記載した。XML 形式で記述した図 2 と比較して、より直感的に編集できることが分かる。

1 .. list-table:: **icntl**
2   :header-rows: 0
3
4   * - 値
5   * - 説明
6   * - (D=0)
7   * - 基本動作オプション
8   * - 0
9   * - 通常の粒子輸送計算。

図 3 RST 形式で書いた icntl パラメータファイル。

### ● XML 形式に変換する補助プログラム

保守管理を容易にするため、変換用の補助プログラムは PHITS と同じ Fortran 言語で開発した。このプログラムはコンパイルすることで、Windows、macOS、Linux といった各種環境で実行可能である。実行時に、入力となる RST ファイルが格納されたフォルダ名や、出力する XML のファイル名などを指定した入力ファイルを使用する。図 4 に、Windows のコマンドプロンプトで補助プログラムを実行した際の表示画面を示す。

(実行ファイル) < (入力ファイル)

のコマンドで実行でき、図 2 で示したような XML ファイルを生成する。

```
C:\Windows\System32\cmd.exe
Microsoft Windows [Version 10.0.19045.5854]
(c) Microsoft Corporation. All rights reserved.

D:\$dico>dico.exe < input.txt
1) Overwrite: manual documents
2) Overwrite: input dictionary
    1 個のファイルを移動しました。

Project Home: D:\$dico

D:\$dico>
```

図 4 変換用の補助プログラム実行の様子

### ● まとめと今後の予定

PHITS-PAD のヒント表示機能を完成させるために、編集が容易なデータベースファイルの形式を決定し、そこから XML 形式の辞書ファイルへ変換する補助プログラムを開発した。今後は、約 1,000 ある PHITS のパラメータをデータベース化し、変換によりヒント表示機能を本格的に完成させる予定である。また、データベース形式として採用した RST は HTML への変換が容易であることから、この特長を活かして PHITS のウェブマニュアルも作成・公開したいと考えている。これらのユーザ支援機能の充実は、PHITS を本格的に利用する際のハードルを大きく下げるため、本コードを活用した研究開発のさらなる成果が期待される。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし。

### 5.1.7 誘導放射能解析コード DCHAIN-SP の並列化作業

#### Parallelization of the Induced Radioactivity Analysis Code DCHAIN-SP

古田 琢哉

放射線挙動解析研究グループ

##### (1) 利用目的:

本課題の目的は、誘導放射能解析コード DCHAIN-SP を並列化することで、PHITS コードとの連携計算で発生する詳細メッシュ領域に対する解析を高効率に実行可能にすることである。DCHAIN-SP は、20MeV 以下の中性子スペクトルと放射化断面積から核種生成率を算出し、照射中および照射後の任意の時刻における核種の蓄積、誘導放射能、崩壊熱、ガンマ線エネルギースペクトルなどを評価するコードである。放射線輸送計算コード PHITS と組み合わせることで、任意の三次元体系での評価が可能であり、高エネルギー粒子や重イオンの照射に伴う核種生成の評価も可能である。従来の DCHAIN-SP は、逐次実行型プログラムであり、10 個程度のブロック領域を想定した解析プログラムである。しかし、加速器体系の様な複雑な三次元体系での放射能分布を高分解能で解析するためには、三次元空間を XYZ メッシュや四面体メッシュで細かく分割して解析する必要があり、計算量が急増する。PHITS には既に並列計算による高速化が組み込まれているため、DCHAIN-SP の逐次実行がこの様な計算でのボトルネックとなっていた。そこで、本研究では DCHAIN-SP コードを並列化し、大規模かつ高精度な解析が可能な環境の構築を目指す。

##### (2) 利用内容・結果:

DCHAIN-SP では、各領域の計算が完全に独立しているため、並列化によって効率的な高速化が可能である。本研究では、OpenMP スレッド並列（メモリ共有型）と MPI プロセス並列（メモリ分散型）の 2 つの並列化手法を導入する。OpenMP スレッド並列では、追加のソフトウェアが不要なため、ユーザーが環境を特別に用意する必要が無く、簡単に並列計算を実行できる。一方で、MPI プロセス並列では、メモリ分散型であるため、OpenMP スレッド並列で必要とされるようなメモリ競合防止措置が不要で、高い並列化効率が期待できる。汎用計算コードである PHITS と DCHAIN-SP では、ユーザーの利用形態が多様であることを踏まえ、DCHAIN-SP には両方式を実装することにした。

本研究では、まず Fortran で記述された既存の DCHAIN-SP コードを整理し、並列化処理を導入し易くするための改修を行った。特に、領域ごとのループ処理に使用されていた古い GOTO 文を、OpenMP 対応が可能な DO ループ構造へと書き換えた。また、並列実行時のファイル出力における競合を防ぐために、各スレッド／プロセスが独立して出力をを行い、最終的にマスター プロセスが集約する仕組みを導入した。

表 1 1 コア実行の計算時間の比較。

	オリジナル版	シリアル版	OpenMP 版	MPI 版
実行時間 (秒)	11169.27	10633.16	11718.17	10741.44

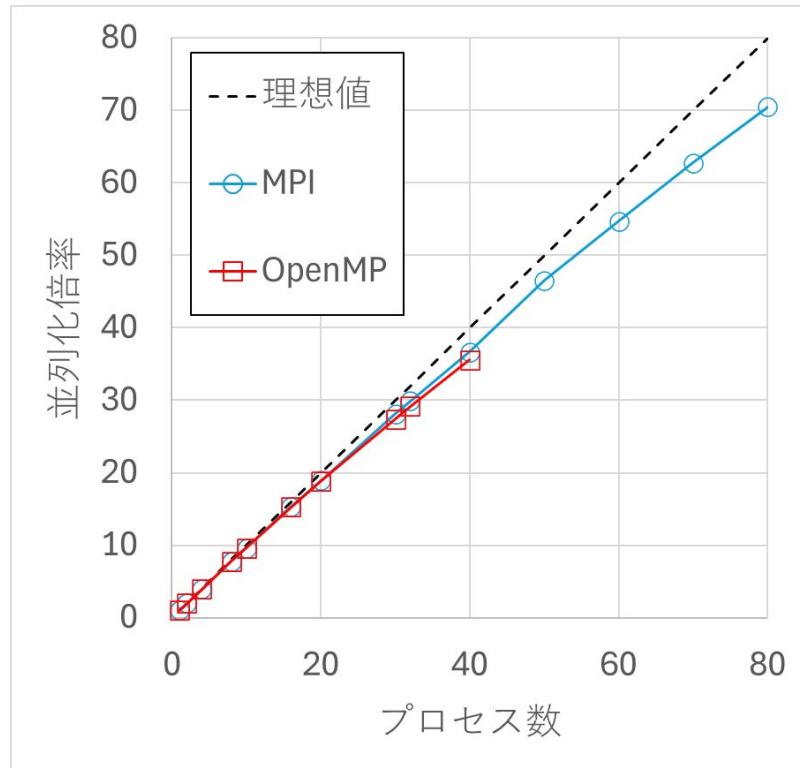


図 1 並列化倍率の変化

並列化の効果を確認するため、XYZ メッシュで 3500 区画に分割した解析モデルを用い、原子力機構の HPE SGI8600 上で計算時間を比較した。表 1 は、オリジナル版（従来コード）、シリアル版（新規コードで並列処理を無効）、OpenMP 版（新規コードで OpenMP を有効）、MPI 版（新規コードで MPI を有効）の異なる実行ファイルを用いて、同じ 1 コアを用いて実行した計算時間の比較である。シリアル版および MPI 版は、オリジナル版よりも短時間で計算が完了した。これは今回の改良で同時に実施した内部の GOTO 文の DO ループへ置き換えにより、コンパイラ最適化が効果的に働いたためと考えられる。OpenMP 版の計算時間が、シリアル版および MPI 版よりもわずかに長かったが、これはスレッド生成などの OpenMP 特有のオーバーヘッドによるものと考えられる。図 1 では同様の計算を複数の計算コアで並列計算した場合の時間の短縮割合（並列化倍率）を示している。複数コアで実行した際の並列化倍率は、OpenMP・MPI いずれも理想値に近く、良好なスケーラビリティが確認された。これは、各領域の処理が完全に独立しており、ほぼ全体の計算が並列化できたことが原因と考えられる。

DCHAIN-SP に対する並列化処理の導入により、PHITS との連携計算において大規模かつ高解像度な解析が高効率に実行可能となった。今回の成果は、加速器施設など複雑な体系における放射能評価の実用性向上に大きく貢献すると期待される。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

特になし。

### 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確認することで、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、シミュレーションによって妥当性確認に資する詳細かつ忠実な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、核反応を解析するモンテカルロ計算コードである MVP と熱流動を詳細かつ忠実に解析するコードである JUPITER の結合による MVP/JUPITER 連成シミュレーションを実現し、妥当性確認に資するデータを取得することが目的である。

##### (2) 利用内容・結果:

- 達成目標

令和 6 年度の達成目標は反復時間が解析結果に与える影響について評価すること、データ授受方法の検討を行うこと、高解像での核熱連成シミュレーションを実施し、格子解像度の影響を評価することの 3 つであった。

- 研究成果とその重要性

##### 【BWR 単一燃料集合体の MVP/JUPITER 連成シミュレーション】

図 1 に示されるような BWR8×8 単一燃料集合体に対して、MVP/JUPITER 連成シミュレーションを実施した。図 2 は各軸方向断面における VOF（水の体積分率）分布と燃料棒発熱分布を示す。計算領域の下側境界から流入したサブクール水は、発熱する燃料棒によって温められ、やがて水蒸気へと相変化する。そのため、領域上部に向かうにつれて、水蒸気の量が増加する。発熱量は水の多い下部において大きく、水蒸気の多い上部において小さい。水蒸気に比べ水の方が中性子を減速しやすいことを念頭におけば、この傾向は妥当であるといえる。この結果は MVP/JUPITER 連成シミュレーションが定性的に妥当であることを示しており、シミュレーションの信頼性の確認といった観点で重要である。

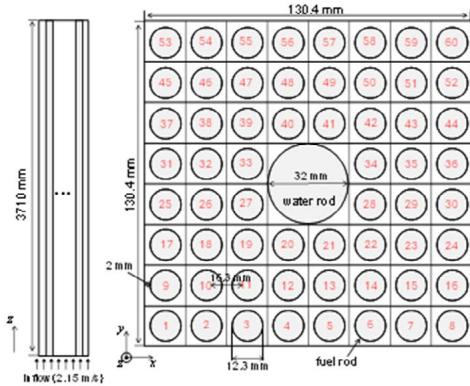


図 1 計算体系

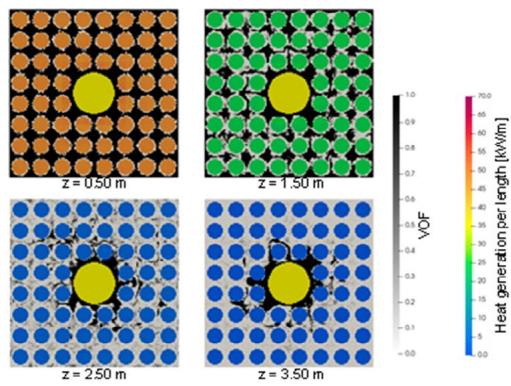


図 2 VOF および燃料発熱分布

### 【反復時間の影響評価】

MVP/JUPITER 連成シミュレーションでは、 $t_{interval}$ 秒間の非定常熱流動計算と定常核計算を繰り返し実施するが、熱流動計算時間 ( $t_{interval}$ ) を反復時間とここでは呼ぶ。反復時間を 0.25、0.5、1.0 秒の 3 パターンで計算した。計算コストの削減のため、計算体系は  $2 \times 2$  燃料バンドルとした。

図 3 は 7 秒間計算したあとの各反復時間に対する軸方向発熱分布を示す。図 3 から発熱分布は反復時間に依らないことがわかる。さらに、図 4 は軸方向 0.5 m の位置での発熱量の時間変化を示す。図 4 から発熱量の時間変化も反復時間に依らないことがわかる。反復時間は核熱連成シミュレーションを実施するにあたり、与えなければならないパラメータである。今回の調査範囲であれば反復時間は計算結果に影響を与えないことが確認されたことは、今後 MVP/JUPITER 連成シミュレーションを行うにあたり重要な知見である。

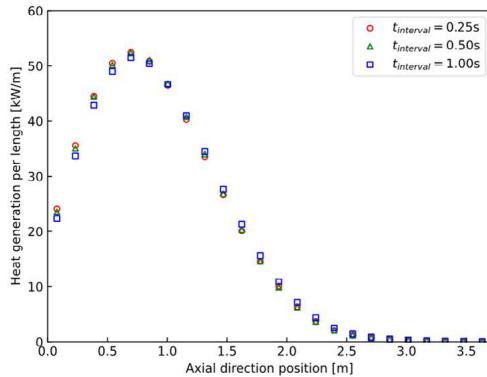


図 3 各反復時間の軸方向発熱分布

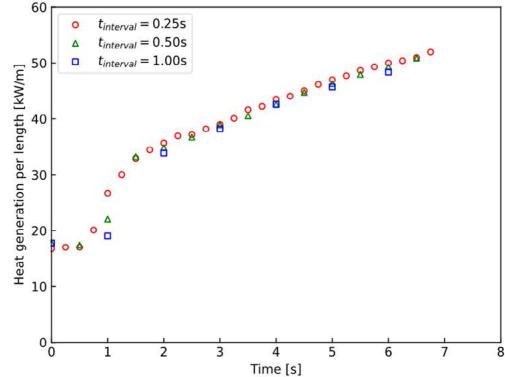


図 4 各反復時間の発熱量の時間変化

### 【データ授受方法の検討】

【反復時間の影響評価】において述べたように MVP/JUPITER 連成シミュレーションでは、非定常熱流動計算を行う。核計算コード MVP の入力は熱流動計算結果をもとに作成されるが、MVP 入力の作成時に瞬時の結果を用いる方法と、時間平均を施した結果を用いる方法が考えられる。そこで、 $8 \times 8$  単一燃料集合体体系に対して両者の計算を行い、5 秒後のボイド率

分布を比較した（図 5）。図 5 から両者の結果に差がないことが確認された。データ授受方法についての知見は今後 MVP/JUPITER 連成シミュレーションを行うにあたり重要である。

#### 【格子解像度の影響】

熱流動解析コード JUPITER の格子解像度を変化させた計算を実施し、その計算結果のボイドを比較した（図 6）。この図から格子解像度を変更しても、ボイド率分布は概ね同様であることが確認された。熱流動計算において格子解像度の依存性を確認することはその計算の信頼性において重要である。

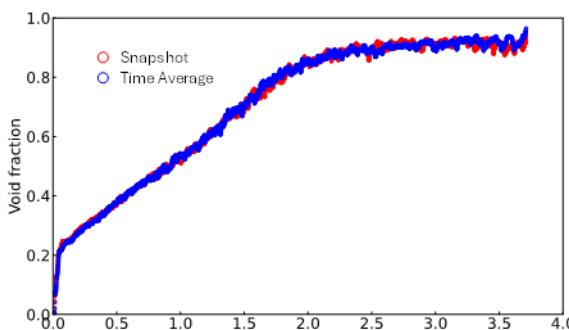


図 5 データ授受方法の検討における  
軸方向ボイド率分布

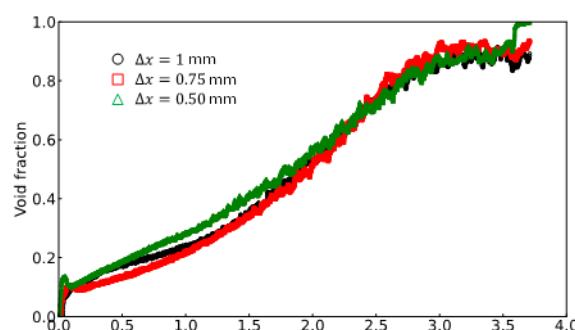


図 6 データ授受方法の検討における  
軸方向発熱分布

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等) :

- 1) 【口頭発表】福田貴斎、吉田啓之、神谷朋宏、鈴木貴行、多田健一、長家康展、先進的核熱連成シミュレーションシステムの開発(13) MVP/ACE-3D を用いた BWR 燃料集合体核熱連成解析、原子力学会春の年会、2025.
- 2) 【AA20240566】【投稿中】【査読有】Tomohiro Kamiya, Taku Nagatake, Ayako Ono, Kenichi Tada, Ryoichi Kondo, Yasunobu Nagaya, Hiroyuki Yoshida, “Neutronics/thermal-hydraulics Simulation Using JAMPAN in a Single Fuel Assembly”, ICONE31 の特集号.
- 3) 【プレス発表】バーチャル・リアクター実現に向けた大きな一歩—原子炉の炉心設計を加速するシミュレーション・プラットフォーム「JAMPAN」を開発—, <https://www.jaea.go.jp/02/press2024/p24110103/> (accessed 2025-10-22).
- 4) 【BB20231412】【出版済】【査読有】Tomohiro Kamiya, Taku Nagatake, Ayako Ono, Kenichi Tada, Ryoichi Kondo, Yasunobu Nagaya, Hiroyuki Yoshida, “Neutronics/thermal-hydraulics Simulation Using JAMPAN in a Single Fuel Assembly”, Proceeding of the 31th International Conference on Nuclear Engineering, 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、吉田 啓之、上澤 伸一郎

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熱流動シミュレーション技術の開発・検証が実施されている。燃料集合体の熱設計は実機集合体を模擬した試験装置を高温・高圧の実機条件で運転し、局所的な温度や圧力を取得することで実施してきた。このような試験には、事故時を含む評価に限界があること、設計変更毎に試験が必要であること、多額の費用、長い実施期間が必要であることなど多くの課題がある。このような課題から、原子炉集合体のサブチャンネル内の二相流について、二相CFDを用いたデータ取得および現象把握ならびに設計に用いられるサブチャンネル解析コードに用いられる相関式の改良が期待される。二相CFDを用いて原子炉集合体のサブチャンネル内の二相流のデータ取得および現象把握するためには、数値シミュレーション結果において二相流の素過程がその機構から再現されていることが必要である。そこで本研究の目的は、サブチャンネル内の二相流を模擬した数値シミュレーションにおける素過程の再現とした。この二相流は比較的長い時間および流路で起きるものであり、数値シミュレーションはこれを高い時空間解像度で再現する必要がある。非常に高い計算負荷を要することから、本数値シミュレーションを達成するために大型計算機（HPE SGI8600）を利用した。

##### (2) 利用内容・結果:

###### 【令和6年度課題の達成目標】

令和5年度は、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て取り組んだ。この結果を踏まえ、素過程の理論評価や試験との比較による現象の確認、流路長の適正化や空間解像度の詳細化を課題として抽出した。また環状噴霧流の数値シミュレーションは液滴密度の観点から準定常な状態に達していない可能性が得られた。このため令和6年度は、以下の目標を掲げて実施した。また、令和6年度の途中で、液滴形成機構評価のために必要な液滴等分散相を追跡するデータ処理において、使用する計算機性能の向上が課題となった。このためデータ処理に関わる達成目標を一つ追加した。

- 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  
➤ 環状噴霧流の数値シミュレーションの実施

- 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
  - 流路長を試験に合わせた環状流の数値シミュレーションの実施
- 対象とする素過程：準定常な液滴分布の形成  
達成目標
  - 流路を延長した環状噴霧流の数値シミュレーションの実施
- 液滴等分散相を追跡するデータ処理  
達成目標
  - 大型計算機上でのデータ処理
  - 環境の整備

#### 【令和 6 年度の研究成果とその重要性】

速度差を有する界面における液滴形成を対象として、環状噴霧流の数値シミュレーションを実施し、液滴形成機構の理論評価を実施した。この結果、数値シミュレーションで再現された環状噴霧流 (Fig. 1)において、素過程である液滴形成の機構を理論的に評価できた (Fig. 2)。この評価過程において、環状噴霧流のようにバルク相（気体）の流速が高い場合、分散相（液滴）の形成直後の移動速度を代表速度とする評価結果に対するバルク相の流速の影響が無視できなくなることが分かった。今後の課題としてこの代表速度の見直しを得た。

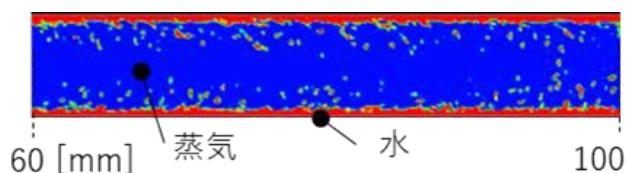


Fig. 1 環状噴霧流における液滴形成

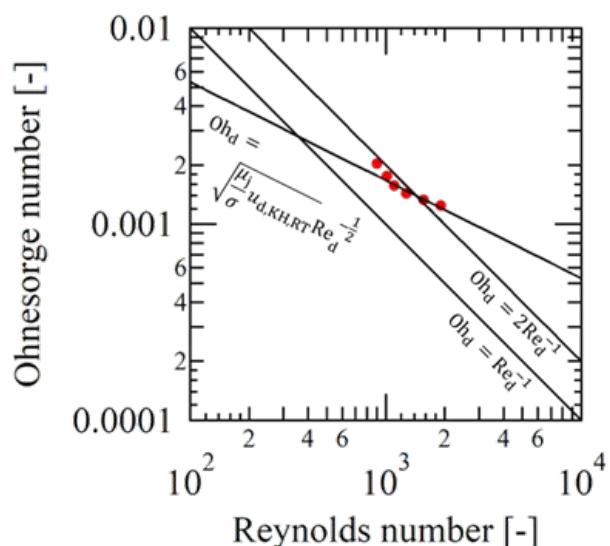


Fig. 2 液滴形成機構の評価

速度差を有する界面におけるじょう乱波形成を対象として、流路長を試験に合わせた環状流の数値シミュレーションを実施した。この結果、試験と数値シミュレーションを適切に比較することが可能となり、数値シミュレーション結果に対する信頼性が向上した。

準定常な液滴分布の形成を対象として、流路を延長した環状噴霧流の数値シミュレーションを実施した。この結果、準定常な液滴分布が形成されたことを定性的に確認した。

液滴等分散相を追跡するデータ処理に関し、大型計算機上でのデータ処理環境を整備した。これにより、従来の計算機環境では困難であった数百以上の分散相を百ステップ以上にわたり処理することが可能となった。この一例として、処理した液滴数を Fig. 3 に、処理により得られた結果を Fig. 4 に示す。これは浅水プールにおける微粒化を伴う壁面衝突噴流の実験データに対して液滴を追跡する処理を適用したものである。

以上の結果から、本利用課題で開発する解析手法は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可能と言え、対象素過程の充足も期待できる。これは、実機を模擬した試験を二相 CFD に代えて二相流のデータ取得や現象把握などを実施していく上で重要な成果である。

[1] N. Horiguchi, H. Yoshida, A. Kaneko, Y. Abe, Atomization mechanisms in the vortex-like flow of a wall-impinging jet in a shallow pool, Physics of Fluids, 2025, 033333.

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

雑誌論文

- 1) N. Horiguchi, H. Yoshida, A. Kaneko, Y. Abe, Atomization mechanisms in the vortex-like flow of a wall-impinging jet in a shallow pool, Physics of Fluids, 37, 3, 2025, 033333.

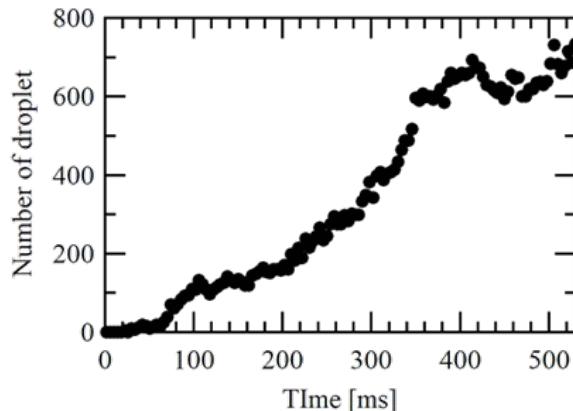


Fig. 3 追跡処理された液滴数の時間変化[1]

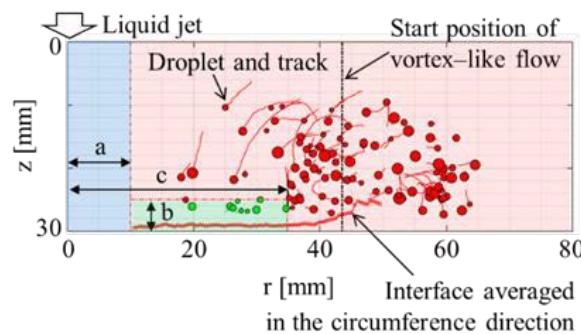


Fig. 4 追跡処理で得た液滴の軌跡の例[1]

### 5.1.10 過酷事故時及び定常時における原子炉内非定常熱流動事象解析手法の開発と応用

#### 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 貴斎、上澤 伸一郎、堀口 直樹  
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、これまで過酷事故 (Severe Accident, SA) 解析コードで用いられてきた事故進展シナリオ（典型的シナリオ）とは異なる非典型的シナリオに基づき炉心溶融が起きたことが分かりつつあり、機構論的な詳細解析コードを用いた精緻な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。SA 解析コードによる事故進展および定常時の原子炉内熱流動挙動に対する不確かさを機構論的に解析し、アクシデントマネージメントへの貢献と原子炉の安全性向上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。

##### (2) 利用内容・結果:

令和 6 年度は、JUPITER の SA 時炉内構造物溶融挙動解析として XR2-1 試験解析による妥当性確認、RPV 下部ヘッドの熱流動構造連成解析、気泡上昇流解析を実施した。2024 年度の達成目標として上記研究を実施し、以下の成果を得た。

- XR2-1 試験解析

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、 $200 \text{ mm} \times 200 \text{ mm} \times 1056 \text{ mm}$  の解析規模を有する XR2-1 試験解析を実施した。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る。図 1 は燃料集合体内部へ溶融物を流入し 1010 秒経過した時の溶融・凝固物とその温度分布である。図より、集合体内部で複雑な移

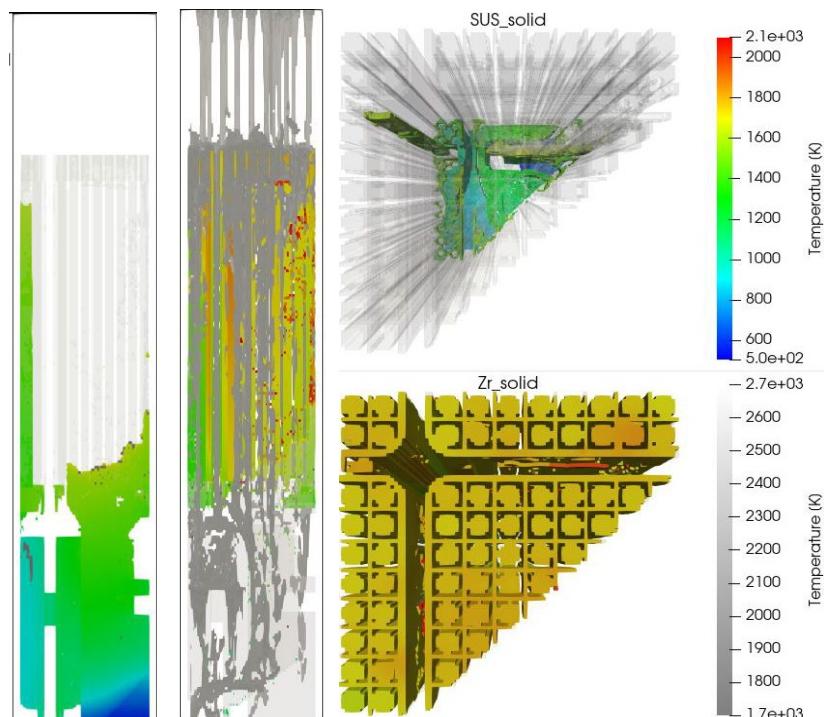


図 1  $t = 1010 \text{ s}$  における SUS と Zr の固相、液相分布。左側二つは溶融物の縦断面分布、右図は上面視点の溶融物分布

行挙動を示していることが分かる。溶融物の移行経路は実験結果と概ね整合する結果となつた。

XR2-1 試験は実験時間が合計 2000 秒および、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、安定且つ高速な計算が必須である。本解析により、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、大規模溶融試験の代替として利用することにより数億円以上の費用の削減に貢献できるだけでなく、SA 解析コードが有する溶融・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物の分布割合、熱電対データ）と定量的に比較する予定である。

- ・熱流動解析および熱構造解析との連成解析

圧力容器底部の熱変形による破損モードを詳細解析により解明することを目的として、令和 6 年度に作成した JUPITER および構造解析コード FrontISTR を用いた連成解析プラットフォームを適用した。予備解析として、先ず、図 2 (左) に示す下部ヘッドの 4 分の 1 領域の底部に溶融物

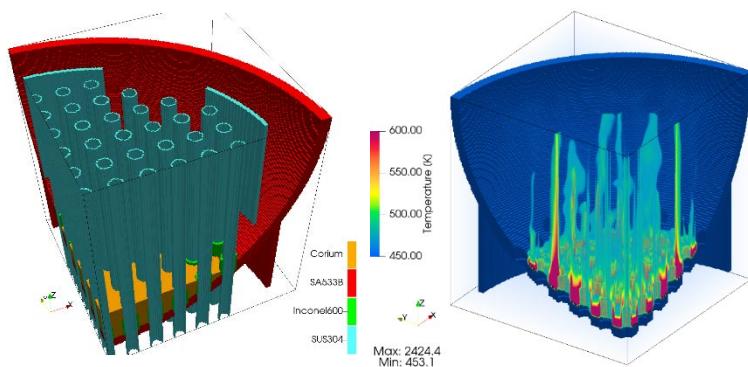


図 2 流動解析体系（左）と温度解析結果（右）

(橙色領域) を設置し熱流動計算を実施した。計算領域長さと格子点数は x, y, z 方向にそれぞれ、 $2520 \text{ mm} \times 2520 \text{ mm} \times 2900 \text{ mm}$ 、 $189 \times 189 \times 128$  である。図 2 (右) に示すように熱伝導や周囲雰囲気および溶融物の対流の効果により、溶融物の熱が構造物や雰囲気中へ輸送されていることが分かる。得られた温度分布と圧力分布を使用し、FrontISTR による熱変形解析を実施した。JUPITER による解析データは 10 s 時点での温度および圧力分布を使用した。図 3 は、下部ヘッドにおけるミーゼス応力分布（左）および変位量分布（右）である。荷重が集中する圧力容器底部でミーゼス応力および変形量共に大きくなつたことから概ね妥当な結果が得られることが分かった。以上より、開発したプラットフォームにより下部ヘッド破損モード解明に適用できる見通しを得た。今後は、先行解析結果や実験結果との比較を行うとともに、

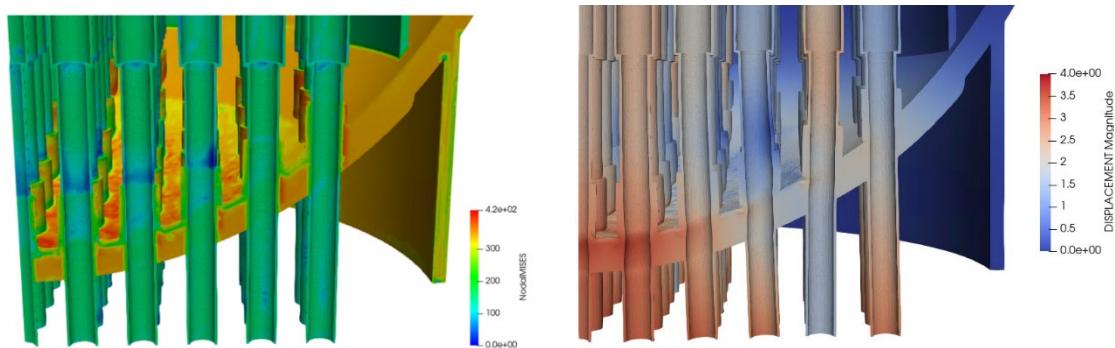


図 3 下部ヘッド熱変形解析結果：ミーゼス応力分布（左図）、変位量分布（右図）

破損モードに対するパラメータ解析を実施する。

- ・単管流路内気泡上昇流

JUPITER の気液二相流解析機能の妥当性確認の一環として、単管流路内気泡上昇流解析を実施した。本年度は、新たに開発した VOF 値の拡散の少ない界面捕獲スキームを JUPITER に導入し、気相速度が気泡流条件よりも速い条件であるスラグ流解析に適用した。また、スラグの形成の可否とスラグの大きさを実験結果と比較した。計算体系は、直径 30 mm 長さ 1500 mm の円管流路である。気相の見かけ流入速度を  $j_g = 0.18 \text{ m/s}$  および  $0.33 \text{ m/s}$ 、液相の見かけ流入速度を  $j_l = 0.21 \text{ m/s}$  および  $0.22 \text{ m/s}$  のとした。図 4 より、スラグが形成できることを確認した。また、各流速条件におけるスラグの長さは、実験値と概ね一致することを確認した。気泡上昇流解析において流動様式を気泡流だけでなく、スラグ流においても再現できたことは、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。また、プラントメーカーが詳細解析コードをプラント設計の参照コードとして利用するといった社会実装にも貢献できる成果であると言える。今後は、他の比較項目についても定量的な比較を実施する。

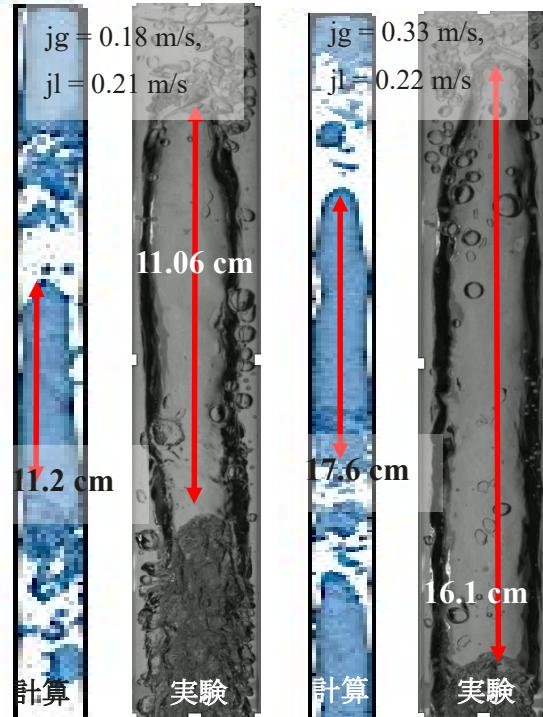


図 4 単管流路内の slug 長さ比較

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 【5082971】【under review (Submitted October 24, 2024)】【peer reviewed】【IF=3.8】  
【No acknowledgement】T. Fukuda, S. Yamashita and H. Yoshida, Development of a new THINC/WLIC method based on a separate evaluation of the geometrical fidelity and the interface sharpness, *J. Comput. Phys.*
- 【5081273】【published】【peer reviewed】【IF=1.5】【Acknowledgement extraction : Part of this study was conducted using a supercomputer at the Japan Atomic Energy Agency, SGI8600.】S. Uesawa, A. Ono, T. Nagatake, S. Yamashita and H. Yoshida, Numerical investigation of the accuracy of a conductance-type wire-mesh sensor for a single spherical bubble and bubbly flow, *J. Nucl. Sci. Technol.*, Vol.62, 2025, pp.432-456, DOI: 10.1080/00223131.2024.2447366

### 5.1.11 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 紗子、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:

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、注水量低減なら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、原子炉格納容器（PCV）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 PCV 内の燃料デブリ熱挙動推定技術の開発として、圧力容器（RPV）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することにより多孔質体の熱流動解析を可能にした。

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、PCV 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 JUPITER では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解析コードの検証など、解析コードの発展としての意義も大きい。

##### (2) 利用内容・結果:

###### 令和 6 年度課題の達成目標

福島第一原子力発電所の PCV 内の燃料デブリ熱挙動推定技術の開発を進めており、これまでに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 PCV 内の熱挙動解析を実施してきた。令和 6 年度では、令和 5 年度に引き続き、デブリの有効熱伝導率や透過係数をパラメータとした解析を行い、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ことを目標とした。

## 令和 6 年度の研究成果とその重要性

本課題では、東京電力が行った炉心状況の評価「福島第一原子力発電所 1~3 号機の炉心状況について」及び技術研究組合国際廃炉研究開発機構が行った燃料デブリ取り出し代替工法に関する公募提案の参考資料に基づいて、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（図 1 中のコリウムならびに  $\text{UO}_2$ ）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 35kW とした。燃料デブリは多孔質体とし、炉心外周部（空隙率  $\varepsilon=0.30$ ）、RPV 下部 ( $\varepsilon=0.30$ )、ペデスタル内 ( $\varepsilon=0.60$ ) の 3箇所に堆積しているとした。ペデスタル内の燃料デブリは最大高さ 0.7m で傾斜して堆積していると仮定した。

多孔質体の内部構造により、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。昨年度ま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した。その結果、モデルにより燃料デブリの除熱量が大きく異なることがわかった。そこで本年度は、より具体的な内部構造について検討を行うため、考え得る燃料デブリの多孔質体の内部構造として、気泡分散型、トラス構造型、粒子充填層型を仮定したときの PCV 内熱挙動へ与える影響について検討した。図 2 は各内部構造における断面の瞬時温度分布と鉛直方向流速分布である。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。特に、粒子充填層型（図(c)）が、最も燃料デブリの温度（図(c)中 A）が高かった（最高約 900K）。これは、粒子充填層型では燃料デブリの点接触を仮定しており、有効熱伝導率が低く評価されたことに起因する。一方、気泡分散型（図(a)）では、燃料デブリが結合しているため有効熱伝導率が高く、最も温度が低かった（最高約 600K）。トラス構造型（図(b)）では、気泡分散型よりも有効熱伝導率が低く見積もられるため、両構造の中間値程度（最高約 750K）であった。流速分布については、どの構造型であっても上昇流が生じ（図中 B）、自然対流が生じた。このように燃料デブリの多孔質体構造により除熱量が大きく異なることが確認された。

RPV 下部において溶融したジルカロイと  $\text{UO}_2$  が密度比により 2 層に分離している可能性も考えられる。そこで本解析手法を用いて、ジルカロイ層と  $\text{UO}_2$  層に分離した場合（共に  $\varepsilon=0.30$  の多孔質体。ただし、ジルカロイ層は非発熱。）についても解析を実施し、瞬時温度分布と流速分布を求めた（図 3）。各内部構造で比較すると、図 2 の RPV 下部に均一にコリウムが形成しているときと同様に、粒子充填層型が最も燃料デブリの温度が高かった（最高約 1200K）。しかしながら、均一にコリウムが形成している場合よりも、ジルカロイ層と  $\text{UO}_2$  層に分離し

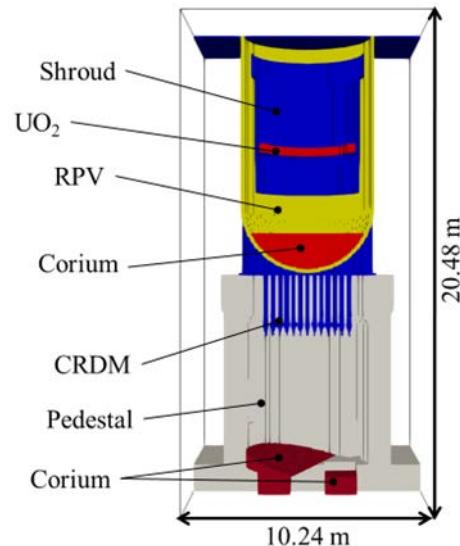


図 1 解析体系

た場合のほうがどの内部構造においても燃料デブリの温度は高かった。これは、 $\text{UO}_2$ 層上部にある多孔質体のジルカロイ層が発熱している  $\text{UO}_2$  層の除熱を阻害したためと考えられる。

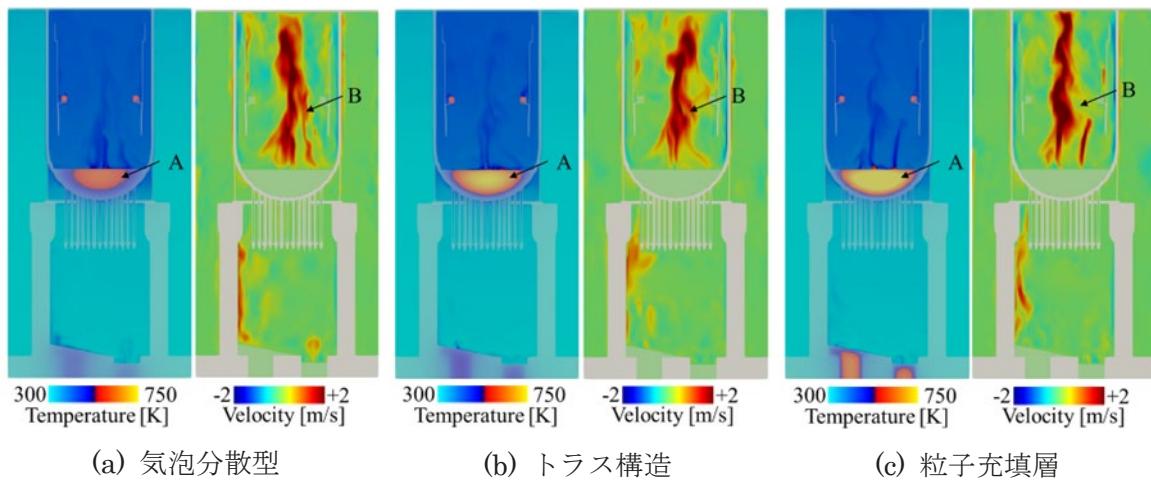


図 2 各多孔質体内部構造における瞬時温度・流速分布

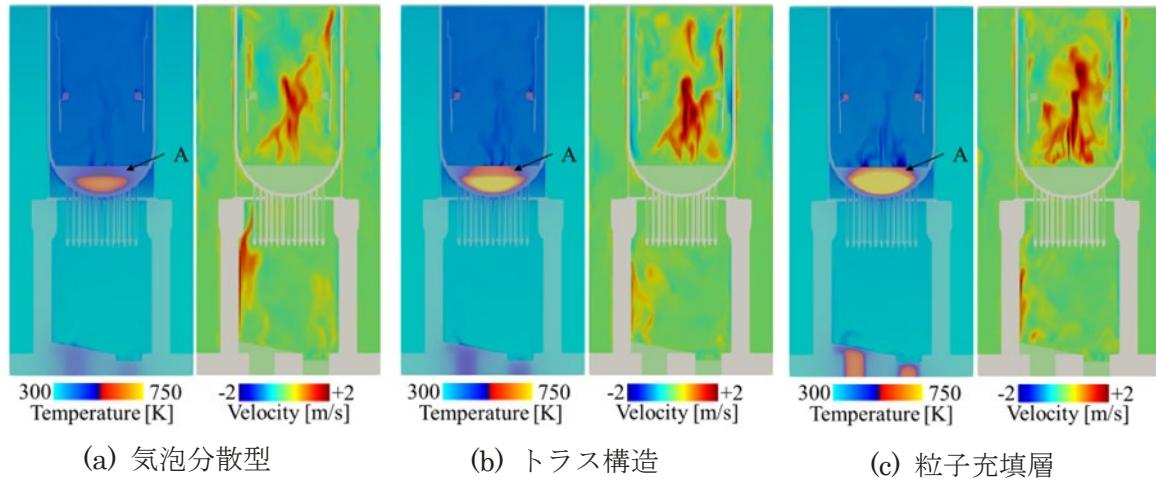


図 3 各多孔質体内部構造における瞬時温度・流速分布

(RPV 下部でジルカロイ層と  $\text{UO}_2$  層が密度比により 2 層に分離している場合)

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 投稿論文発表 (査読有)

- 1) Shinichiro Uesawa, Susumu Yamashita, Ayako Ono, Yoshihiko Sano and Hiroyuki Yoshida, Numerical analysis of natural convective heat transfer with porous medium using JUPITER, Journal of Nuclear Science and Technology, 62, 6, pp.523-541, 2025. 【掲載可】

- 講演発表及び口頭発表 (査読無)

- 2) 上澤伸一郎, 小野綾子, 山下晋, 佐野吉彦, 吉田啓之, 空冷時における燃料デブリ熱挙動推定技術の開発 (7) 原子炉格納容器内熱挙動における燃料デブリの多孔質体内部構造の影響, 日本原子力学会 2024 年秋の大会, 仙台, 2024.

### 5.1.12 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 to Establish the CHF Prediction Method Based on the 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。

JUPITER を始めとする界面追跡法に基づく詳細解析を行うような計算コードにおいて、沸騰を再現する解析は、数十 $\mu\text{m}$  の伝熱面上の微小なくぼみを核とした微小な気泡の発泡挙動からの解析となるために、長軸方向に4メートル程度の長さがある原子炉の燃料集合体を解析対象にする場合、計算コストが莫大となることが容易に予測できる。そのため、当グループでは、現実的に計算可能な程度に低コストで沸騰解析を行う方法を確立するための研究を行っている。

大規模なスケールの計算体系で沸騰解析ができるように発展させた JUPITER が開発されれば、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ができるため、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与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。

以上の研究を遂行するために、燃料集合体を対象とした JUPITER による大規模計算を行うため大型計算機を利用する。

##### (2) 利用内容・結果:

###### 【令和 6 年度課題の達成目標】

当課題の最終目標は、機構論的限界熱流束（Critical Heat Flux: CHF）評価手法や核熱カップリングシステムの中で必要となる、軽水炉の実機スペーサ付きバンドルと同等の体系でのマクロな沸騰二相流挙動解析について、JUPITER を用い、現実可能な低コストでシミュレーションする方法を確立することである。これを実現させるために、令和 6 年度は、これまでに開発した発熱体表面からの沸騰現象を比較的低コストで模擬する簡易沸騰モデルについて、サブクール沸騰への拡張を行う。また、上記拡張において簡易沸騰モデルの JUPITER コードの組合せにおけるサブクール強制対流沸騰解析を行い課題抽出する。

## 【令和 6 年度研究成果とその重要性】

これまで申請者は、気泡の成長と離脱を物理的に一次元的にモデル化した上で、離脱する小合体泡を JUPITER 上で解析する最小ユニットとする簡易沸騰モデルを提案してきた。これは、モデルから求めた離脱する小合体泡と同等の蒸気量について、JUPITER 解析体系内の伝熱面上に境界条件を設定して、蒸気を吹出す方法である[1]。気泡核から発泡する一次気泡から解析する方法に比べ、数ミリ程度の離脱気泡を蒸気吹き出しにより JUPITER 上の解析対象とするため低コスト化が図られたものの、モデルの性質上、熱流束が増大すると離脱気泡径が小さくなることなどから、数メートル単位の燃料集合体体系で高熱流束域を対象とするとコストが莫大となる課題を明らかにした。そこで、本年度は他のアプローチにより、一次気泡同士の接合によりできる合体泡よりもさらに大きな蒸気泡の形成に着目した簡易沸騰モデル（以下、ここでは「改良型モデル」と呼ぶ。）を開発することとした。

改良型モデルでは、一次気泡が出現する発泡点をポアソン分布に基づきあらかじめ具体的な座標を乱数で与えて設置する。配置する発泡点数は実験相関式から与えるとする。発泡点からは、一次気泡が発生して成長し、しばらくすると伝熱面から離脱する。離脱してから再度発泡するまでの時間の長さを、*waiting time* と呼ぶが、この時間の長さは周囲のサブクール度等の条件によって変化する。*Waiting time* については、Han and Griffith [2] の研究を参考に決定し、*waiting time* の休止時間のうち発泡を開始する。発泡する順番は、乱数で決定する。

各発泡点から生じ、成長をする気泡の形状は切り欠き球を仮定する。気泡底部と固体面と液相が接触する「三相界線」からの蒸発による気泡成長が支配的であると仮定する。サブクール沸騰の場合、気泡表面では、飽和温度よりも低い液体に接すると凝縮が起こる。実験等において周囲サブクール度は伝熱面から離れたバルクの部分での平均温度として定義されることが多い。本研究においても、モデルに与えるサブクール度は伝熱面から数～数十mm程度離れた部分の温度を想定する。これは、数値解析において伝熱面ごく近傍の温度分布を与えることが、条件によっては、解像度的に困難であると考えるためである。しかしながら、伝熱面から発生して成長する気泡は数mm程度以下の大きさであり、気泡表面での凝縮量は、伝熱面ごく近傍の温度分布によって決まるため、伝熱面近傍の温度分布を把握する必要がある。本研究では、伝熱面近傍の温度分布に対して実験式[3]を用いることとした。将来的には、伝熱面ごく近傍の温度分布については機構論に基づいたモデルを考案し、汎用的に計算できるようにすることを考えている。気泡の成長速度は、以上のような蒸発による体積の増加と凝縮による体積の増加のバランスによって決定される。気泡の運動について、気泡が伝熱面に付着している間は伝熱面に対して垂直方向の力学バランスのみを考慮して、気泡の浮上について一次元の計算を行う。気泡の重心と半径が等しくなるときに、気泡が伝熱面から離脱すると仮定する。離脱した後は、蒸発による成長はせず、下流側に凝縮をしながら流れるため、流れ方向の抗力のみを考慮する。

気泡と気泡の表面が接触する場合に気泡が接合する。この時、2つの体積が保存される。また、大きい気泡と小さい気泡が接合するときは、小さい気泡が大きい気泡に取り込まれるものとする。すなわち、大小二つの気泡が接合した後生成する合体泡は、大きい気泡があつ

た座標上に形成されるものとする。以上のような仮定を経て、計算を行った。

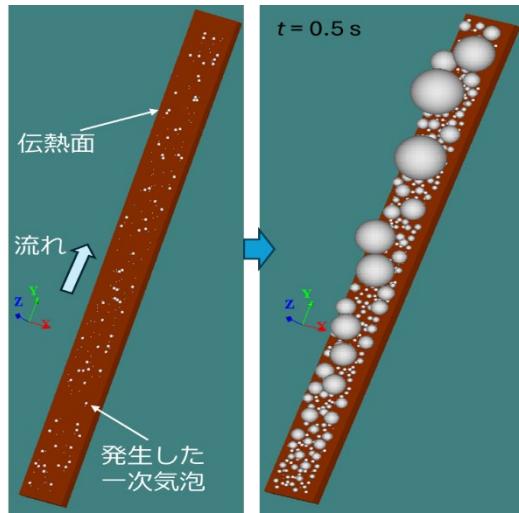


図 1 伝熱面上からの気泡発泡と合体泡の形成の様相

図 1 に計算した伝熱面上の気泡挙動について示す。計算条件は、熱流束  $q = 1.00 \text{ MW/m}^2$ , 周囲サブクール度  $\Delta T_{sub} = 20 \text{ K}$ , 流速  $u = 0.32 \text{ m/s}$  である。左図は、計算直後の様相であり、伝熱面上に白く見えるのが、発泡直後の微小気泡である。気泡は、仮定に従い成長し、垂直方向に浮上して伝熱面から離脱する。離脱後は、流れに従い下流側に流される。その間で接合が起こり、右図に示すような大きな気泡が形成されるようになる。この大きな気泡の大きさや成長速度を計算結果から統計的に算出し、これを解析の最小ユニットとして、以前の簡易沸騰モデルと同様に JUPITER での解析につなげることとする。

参考文献 :

- [1] Ono et al., Mechanical Engineering Journal, Vol.11, No.4, (2024), p.1.
- [2] Han, C.Y. and Griffith, P., Int. J. Heat Mass Transf. Vol.8, (1965), p.887.
- [3] Ono, A and Sakashita, H., Heat Transfer Asian Research, 39-1, pp.27-42, (2010).

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等) :

- 1) 【AA20230861】【published】【peer reviewed】【IF=0.4】【Acknowledgement extraction : This research was conducted with the supercomputer HPE SGI8600 in the Japan Atomic Energy Agency.】 A.Ono, H.Sakashita, S.Yamashita, T.Suzuki, H.Yoshida, “Development of the simplified boiling model applied for the large-scale detailed two-phase flow simulation based on the VOF method”, Mechanical Engineering Journal, Vol.11, No.4, (2024), pp.1-12.  
・講演発表および口頭発表
- 2) 【BB20241530】【未発表】【査読無】【謝辞：本研究成果は、日本原子力研究開発機構のスーパーコンピュータ「HPE SGI8600」を利用して得られたものです。】小野, 大川, “二相流 CFD に基づく機構論的 DNB 予測手法の開発, 8;強制対流沸騰下における大気泡形成予測解析” 日本原子力学会 2025 春の年会, オンライン (2024 年 3 月) .

### 5.1.13 MicroAVS による ACE-3D 用可視化用ソフトウェアの開発

#### Development of Visualization Software for ACE-3D using MicroAVS

小野 綾子

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、核熱連成シミュレーションの実現に向けて、三次元二流体モデル解析コード ACE-3D の開発を行っている。これまで、ACE-3D による流動解析結果を汎用可視化ソフトウェア MicroAVS を用いて可視化する際には、field データを作成し、各物理データを構造格子型データとして読み込ませ、カラ一面コンターなどを用いて表示させていた。しかし、その方法ではセル間の物理量を自動的に補完処理してしまうため、正確な可視化処理とは言えない。さらに、手続きが煩雑であるため、処理速度も遅かった。そこで、ACE-3D で得られた解析結果を MicroAVS で可視化処理をする際に、解析データを非構造格子型データ (UCD) フォーマットに変換するプログラムを作成する。可視化処理結果の正確性や処理速度の向上を目的に、上記の変換プログラムを作成する。

##### (2) 利用内容・結果:

ACE-3D が出力する計算結果データのフォーマットは、数値が定義された座標軸の交点上に配置されており、MicroAVS 等で可視化を行う場合、直交不等間隔な構造格子型データとして扱うこととなる。しかしながら、計算により出力されるデータは、計算領域を分割したセルに割り当てられたものであるため、データの実態に沿うよう非構造格子型にフォーマットを変換するアプリケーションを開発し、計算結果の可視化を物理的に正確に、かつ簡便に行えるようにした。本作業で作成したアプリケーションは「Re:COMP (REstructure COMPonents of ACE-3D calculation result)」(以下、Re:COMP) と称する。

図 1 に Re:COMP 起動後のダイアログ画面を示す。ダイアログはいくつかの GUI から成り立つ。「入力データ」「データシーケンス」「座標系」「物理量」「出力データ」などが可能となっており、ユーザーが直感的に使用しやすい設計となっている。また、UCD データの変換は ACE-3D の解析結果が保存されているディレクトリをそのままドラッグ&ドロップすることでも自動的に各種設定が読み込まれる仕様であり、利便性が高い設計となっている。

図 2 および図 3 に Re:COMP を用いて変換した UCD データを MicroAVS で可視化処理した例を示す。セル間の補完処理がないコンターが描かれており、当初の目的が達成されていることがわかる。また、全断面での可視化処理も簡単かつ高速に可能であることを確認した。

今後は、本課題で作成したアプリケーションを活用し、さらに大規模な解析データの可視化処理も行っていく予定である。

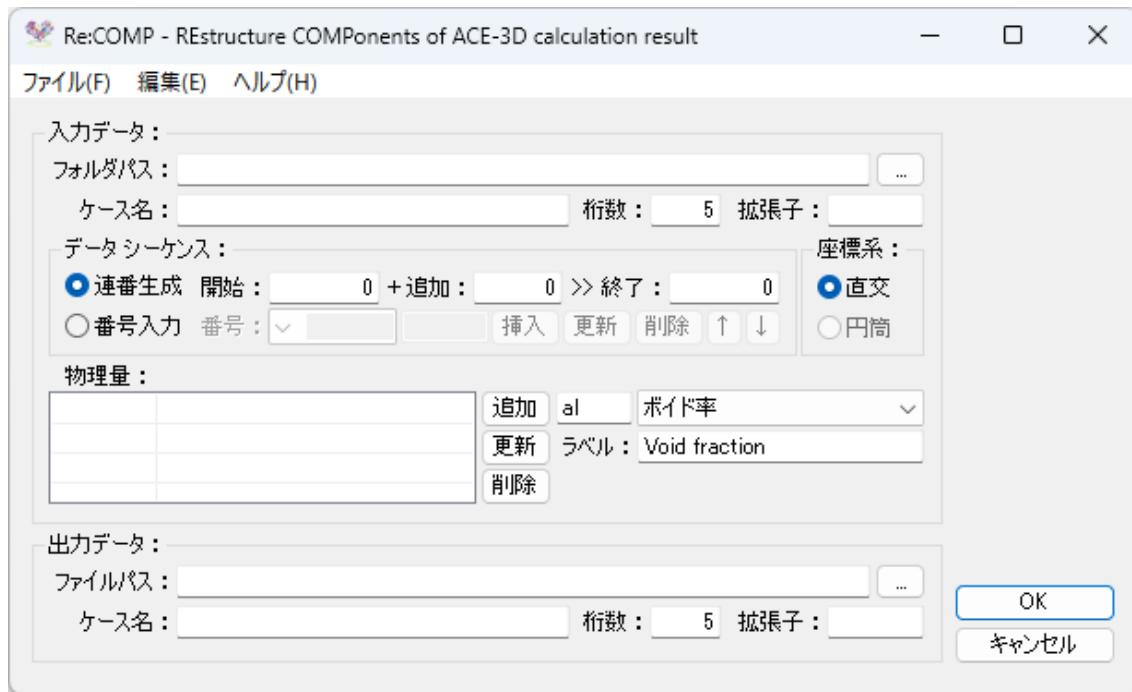


図 1 Re:COMP 起動後のダイアログ

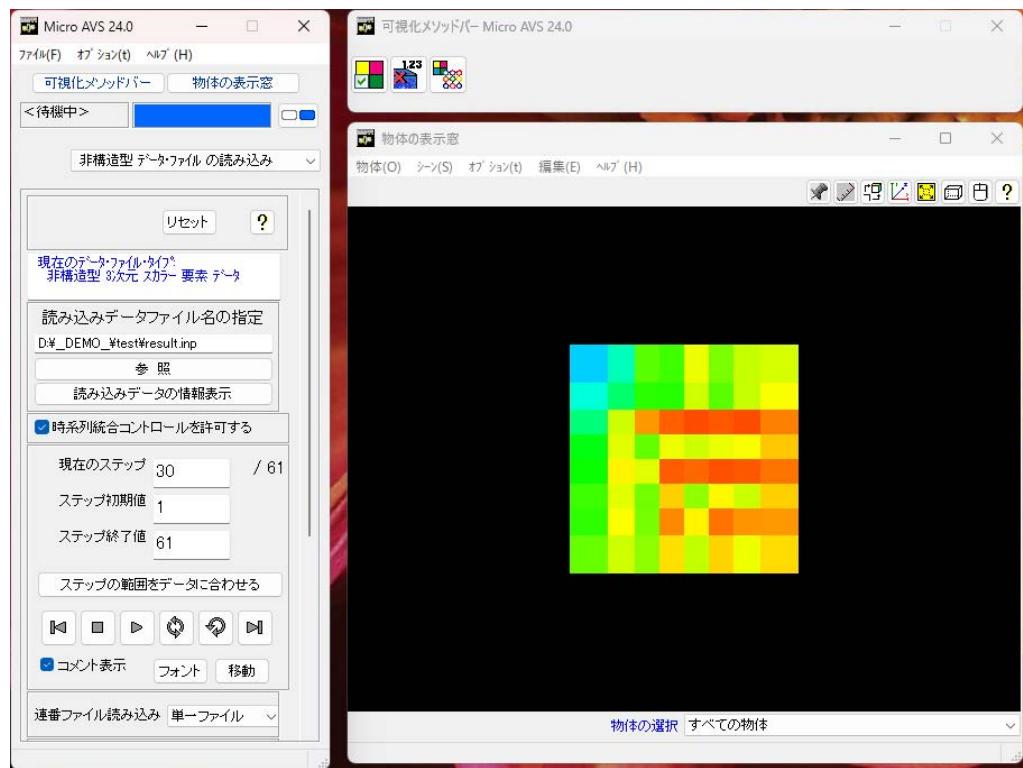


図 2 Re:COMP で変換した UCD データの MicroAVS による可視化例(1)

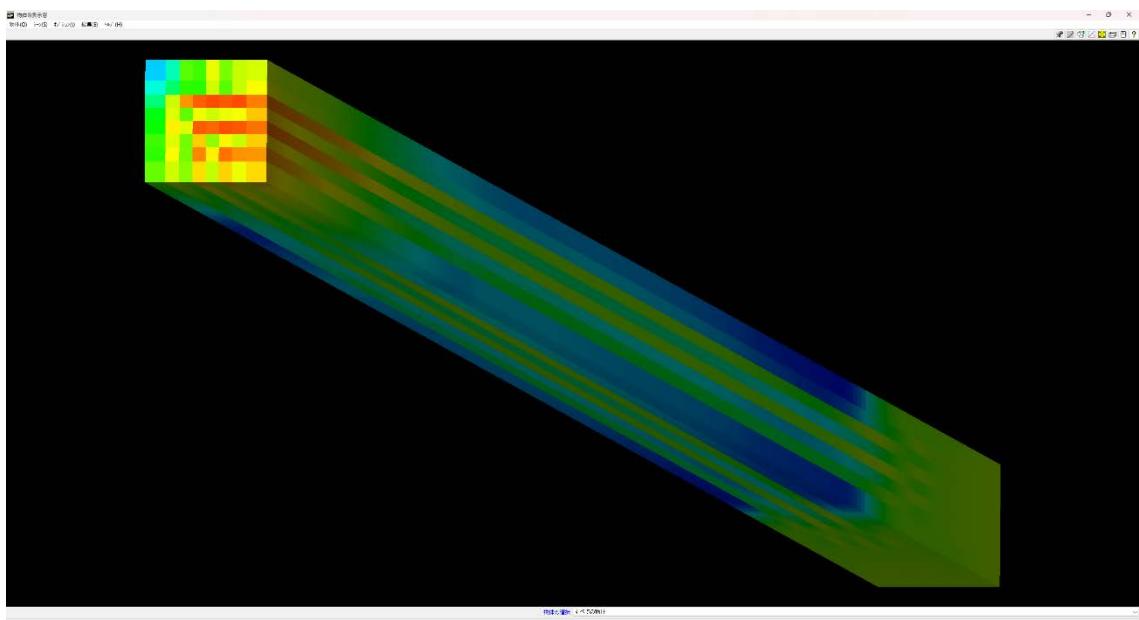


図 3 Re:COMP で変換した UCD データの MicroAVS による可視化例(2)

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

本課題に伴う外部発表成果はなし。

### 5.1.14 三次元二流体解析コード ACE-3D の 3 方向並列化と性能評価

#### Three-Directional Parallelization and Performance Evaluation of the Two-Fluid Thermal-Hydraulic Code ACE-3D

福田 貴斉  
炉物理・熱流動研究グループ

##### (1) 利用目的:

原子力機構では、三次元二流体モデルに基づく熱流動解析コード「ACE-3D」の原子炉炉心全体への適用のための開発を進めている。ACE-3D は、原子炉内の気液二相流挙動を数値シミュレーションするためのコードである。気相と液相の粗視化支配方程式をそれぞれ独立に解く二流体モデルを採用しているため、三次元の複雑な気液二相流現象を、比較的低い計算コストでシミュレーションできるという特長を持つ。

しかし、従来の ACE-3D は Z 軸方向のみの並列化に対応しており、X および Y 軸方向には未対応であった。このため並列計算による計算規模向上に限界があり、原子炉炉心全体のような大規模解析への適用が困難という課題があった。そこで本課題では、図 1 に示すように計算領域を多次元的に分割し、X・Y・Z の 3 方向での並列化に対応させることで、スーパーコンピュータ HPE SGI8600 の計算資源を最大限に活用するための技術基盤の整備を目的とした。

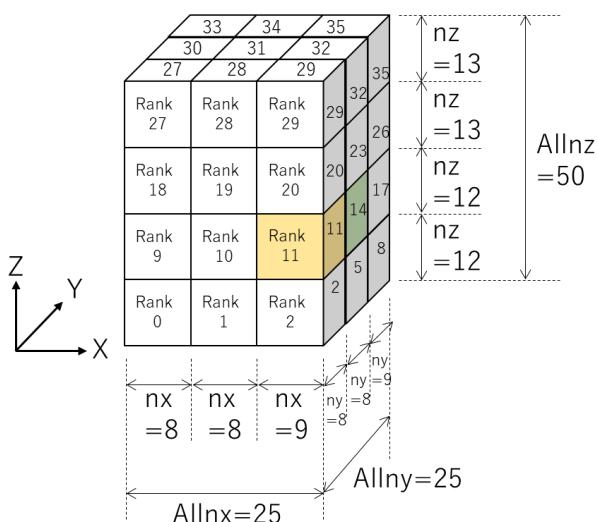


図 1 3 方向計算領域分割の例

##### (2) 利用内容・結果:

ACE-3D コードに対して、従来の Z 軸方向のみの並列化から、X・Y・Z の 3 方向並列化を実装した。並列化の実装にあたっては、同研究グループで以前に開発された TPFIT コード[1]における三次元領域分割の手法を参考にし、袖領域 (halo 領域) のデータ交換処理や MPI 通信の最適化を行った。

性能評価では、 $8 \times 8 \times 180$  格子の小規模データおよび  $16 \times 16 \times 240$  格子の大規模データを用い、並列数を変化させながら実行時間および並列化効率を測定した（図 2 参照）。その結果、小規模・大規模いずれのケースにおいても、並列数の増加に伴って並列化倍率が向上し、並列

化効率が改善されることが確認された。

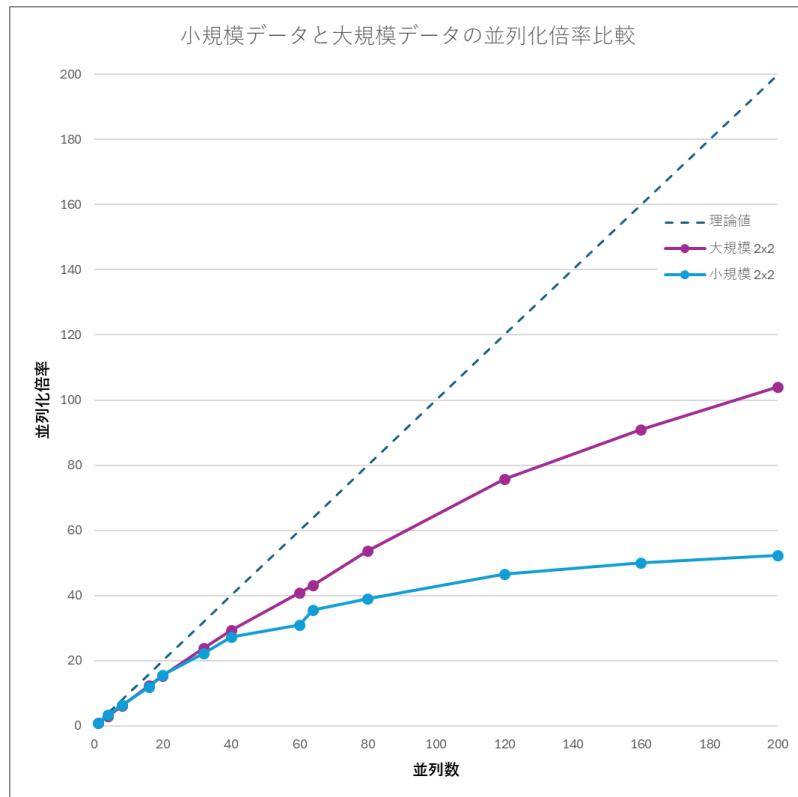


図 2 並列化効率の評価

一方で、3 方向並列化の実装により通信の同期処理が必要となったため、非同期通信による計算と通信をオーバーラップすることができず性能が若干低下した。これは、領域を 3 方向に分割したことで通信回数が増加し、同期処理の頻度が高まったことが主な要因と考えられる。また、MPIInside を用いた MPI 通信の詳細解析により、通信処理の偏りや計算負荷の不均衡が性能に影響を与えていていることも明らかとなった。

今後は、本課題で実装した 3 方向並列化機能を活用し、これまでの検証用・性能測定用データよりもさらに大規模な、全炉心スケールの解析体系への展開を進める予定である。これにより、従来の Z 軸方向のみの並列化では実現が難しかった大規模計算が可能となり、本手法の効果がより明確に発揮されることが期待される。

#### 参考文献

- [1] 吉田 啓之, 永吉 拓至, 小瀬 裕男, 高瀬 和之, 秋本 肇, 1174. 大規模シミュレーションによる稠密炉心内気液二相流特性の解明,(I)改良界面追跡法を用いた二相流直接数値解析手法の開発, 日本原子力学会和文論文誌, 3(3), 2004, pp.233-241.

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

本課題に伴う外部発表成果はなし。

## 5.2 パイオニアラボ

### Pioneer Laboratory

---

#### 5.2.1 新型BWR熱水力評価技術開発

##### Key Technology Development for Novel BWR Thermal-hydraulic Design

堀口 直樹、小野 綾子、吉田 啓之  
新型BWR热水力評価技術開発ラボ

###### (1) 利用目的:

新型BWRの設計における热水力設計・評価においては、現行BWRあるいはABWRで用いられた設計・評価手法が改良して適用される。燃料集合体に対して1次元の基礎式、モデルなどを適用する現行の設計・評価手法は、過去の実規模相当の実温・実圧二相流試験をベースに開発および評価がなされていることから、異なる設計の新型BWRに対しては、設計形状や条件に合わせて、その適用性を確認することが求められる。この適用性確認においては、設計形状や条件に合わせた試験などでのデータ取得が必要となるが、開発段階での試験の実施は、時間的、経済的に効率的では無く、詳細な二相流数値シミュレーションにより試験を代替・補完するデータを取得し、これにより設計開発を効率化することが期待されている。新型BWR热水力評価技術開発ラボは、原子炉メーカーとの研究協定に基づき、新型BWRのため詳細二相流数値解析コードを用いた热水力評価技術を開発している。本大口利用課題においては、サブチャンネル内の二相流の詳細な把握および評価を目的とし、原子力機構が開発した詳細二相流数値解析コードを用いて、原子炉メーカーが開発する新型BWRなどの設計・評価に資する二相流数値シミュレーションを実施した。この二相流は比較的長い時間および流路で起きるものであり、数値シミュレーションはこれを高い時空間解像度で再現する必要がある。非常に高い計算負荷を要することから、本数値シミュレーションを達成するために大型計算機（HPE SGI8600）を利用した。

###### (2) 利用内容・結果:

###### 【令和6年度課題の達成目標】

原子炉メーカーが開発する新型BWRの燃料集合体設計の評価を想定した詳細二相流数値シミュレーションを実施するため、以下の達成目標を掲げて実施した。

- ・ 流動条件および流路寸法の選定
- ・ 数値シミュレーション手法の開発
- ・ 数値シミュレーションの実施

### 【令和 6 年度の研究成果とその重要性】

まず流動条件および流路寸法を選定した。次に解析体系の構築および数値発散問題の解消を経て数値シミュレーション手法を開発した。数値シミュレーションのプロダクションランを実施した結果を Fig. 1 に示す。これは模擬流体として空気および水を用いたサブチャンネル内二相流数値シミュレーションの結果の一部を抜き出したものである。気液界面をシアンで、サブチャンネルを構成するロッド表面をグレーの等価面で描画した。多数の気泡がサブチャンネル内を流れたことから、想定された低クオリティの流動様式が数値シミュレーションによって再現された。以上の結果から、新型の燃料集合体設計の評価を想定した詳細二相流シミュレーションの実施が達成された。今後、流動条件を変更して複数の流動様式の再現に取り組む。さらに試験で取得されるデータに相当するものを数値シミュレーション結果から抽出するためのポスト処理手法を開発し、詳細な二相流数値シミュレーションにより試験を代替・補完していくために検討する。これらの取り組みにより、原子力機構が開発する数値解析コードによって原子炉の設計開発を効率化することが期待できることから、本成果は重要である。

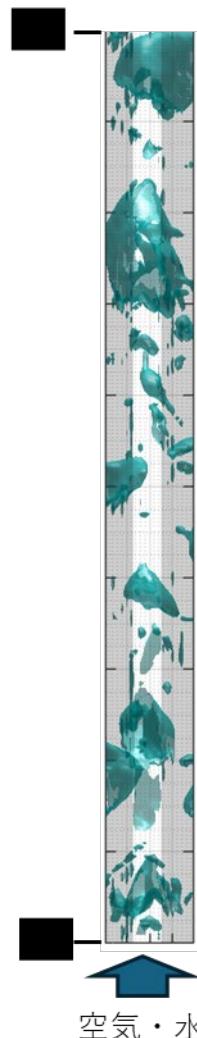


Fig. 1 サブチャンネル  
内二相流の解析結果  
※守秘義務のため数値を墨消

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

初年度のためなし。

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

---

### 5.3.1 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  
スピネルエネルギー科学研究グループ

#### (1) 利用目的:

低次元強相関系は、強い量子揺らぎと多体相関効果に起因して、絶対零度でも秩序化しない量子液体や隠れた秩序など、通常のバルクの3次元系では現れない特異な振る舞いを示すことから、物性物理分野のメインテーマの一つとして精力的に研究されている。本研究は、低次元強相関系の磁性に焦点を当て、量子磁性やスピントロニクス分野の横断的・融合的研究を展開し、スピントロニクスが関与する様々な物性の発現機構を明らかにすることを目的としている。多自由度が相関効果で絡み合うことで発現する現象の微視的メカニズムを解き明かすことで、高効率なスピントロニクスの開発、レーザー光照射によるスピントロニクスの超高速制御、新しいタイプの準粒子が媒介する高効率スピントロニクスなど、新機能・多機能・高効率材料開発に繋がる知見が得られると期待される。

低次元強相関系では、強い量子揺らぎのため平均場理論などの伝統的な手法を単純に適用できず、数値的手法による取り扱いが有効な手段として広く適用されている。本研究で使用する行列積状態変分法・密度行列繰り込み群法は、低次元強相関系の有効多体模型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 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、スピントロニクス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をするため、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:

### (a) 拡張長岡強磁性のホールドープ効果

遍歴強磁性が出現する厳密な例として、ハバード模型でハーフフィリングから電子を一個取り除いた（ホールを一個加えた）場合に生じる長岡強磁性が知られている。一方、ハーフフィリングではモット絶縁体反強磁性状態が実現する。これらの大きく性質の異なる状態間の転移を、ホール一個でなく有限のホール密度で引き起こす機構として、系の実効的な電子数を制御するための粒子浴を付け加えた模型を提案して、そこで磁気状態の性質を研究してきた。これまでに、弱ドープ領域において拡張長岡強磁性が実現することを明らかにし、有限温度効果についても詳細な知見を得てきた。

今回我々は、強磁性が消失するホール密度が大きい領域での磁気状態を調べた。強ドープ領域では、部分偏極状態や非磁性状態など、様々な興味深い磁気状態が実現することを見出した。これらの磁気状態の発現機構を理解するために、粒子浴を取り除いた部分系に相当する梯子系との比較により、部分系の性質を解析した。さらに、磁気相図の微視的な起源を理解するために、ハバード模型から電子ホッピングの2次過程を考慮して導出された有効t-J模型の基底状態を調べた。その結果、ペアホッピング項を含む有効t-J模型によって磁気相図を良く再現できることが分かった[図1]。エネルギー項を分類して調べることで、ポテンシャルエネルギー、運動エネルギー、磁気エネルギーなどの異なるエネルギー寄与間の競合によって磁気転移が生じていることを明らかにした。本研究成果は、遍歴強磁性の起源に迫る基礎科学的側面にとどまらず、本機構により系の全スピンを高い操作性で制御できれば、スピントロニクスデバイスやスピニ量子ビットの開発に貢献寄与すると期待される。

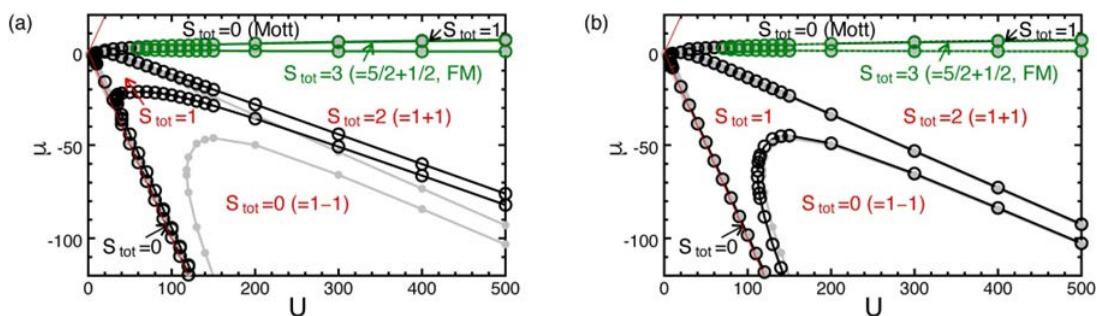


図1: 粒子浴のあるハバード模型（淡色グレー）と有効t-J模型（濃色）の磁気相図  
(a)ペアホッピング項を無視した場合, (b)ペアホッピングを考慮した場合

### (b) スピン四極子励起の観測理論

スピニ液晶の直接証拠となる四極子励起は、通常の磁気プローブでは観測困難だが、これを共鳴非弾性X線散乱（Resonant Inelastic X-ray Scattering, RIXS）で観測できる可能性に着目している。候補物質 LiCuVO<sub>4</sub> の酸素 K 吸収端 RIXS 実験との比較を念

頭に置いて、これまで取り組んできたスピン励起スペクトルと四極子励起スペクトルの研究を発展させて、酸素 K 吸収端 RIXS スペクトルの数値対角化計算を遂行した。昨年度までに、酸素 K 吸収端 RIXS スペクトルを厳密対角化法によって計算するための計算コードを開発して、少数サイト系の予備的計算を進めていた。今年度は、ランチョス法の計算コードを新たに開発して、より大きな系の解析を進めてサイズ効果を検討した[図 2]。四極子励起スペクトルと対応する運動量・エネルギー領域 ( $q = \pi$  近傍の連続励起) に強度が生じることが分かり、四極子励起が RIXS スペクトルに寄与することを示唆している。系を大きくしていくと収束に向かっている様子が伺え、さらに大規模系の計算により有限サイズ効果を排除したプロットを得たい。現在、厳密対角化法やランチョス法よりもさらに大きな系を扱える密度行列繰り込み群法の計算コードの開発に取り組んでおり、これにより大規模系の計算を実行予定である。また、RIXS 実験との詳細な比較・検討のため、スピン励起スペクトルと四極子励起スペクトルの磁場依存性についても解析を進めた。

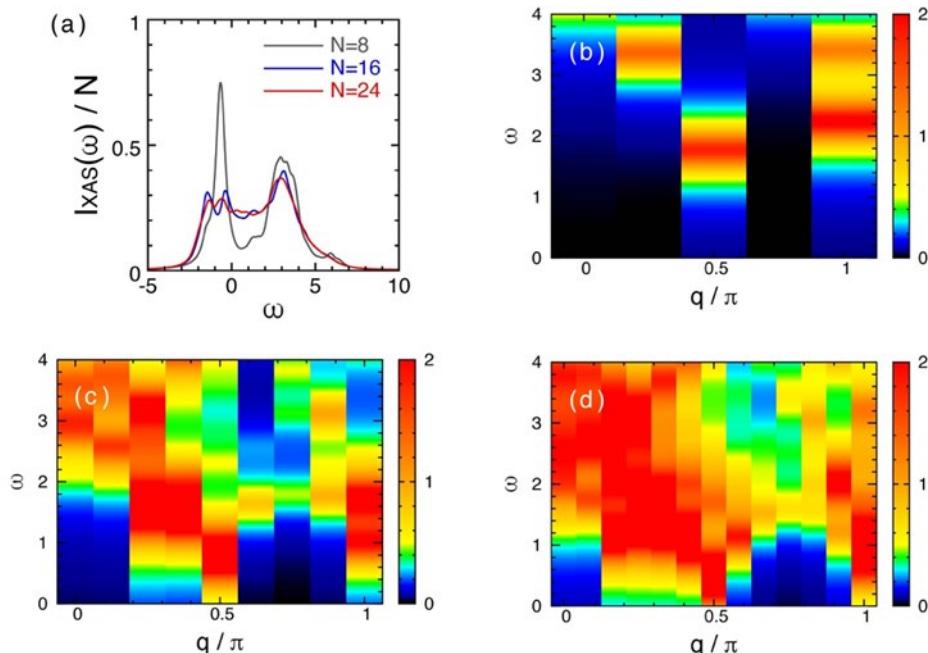


図 2: スピン液晶が実現するフラストレート強磁性鎖模型の酸素 K 吸収端 RIXS スペクトルの数値対角化による計算結果 (a)光吸収スペクトルのサイズ依存性, (b)8 サイト系, (c)16 サイト系, (d)24 サイト系の RIXS スペクトル, 横軸  $q$  運動量, 縦軸  $\omega$  エネルギーの強度分布のカラーマップ

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学術論文

- 1) H. Onishi and S. Miyashita, "Magnetic ground states of highly doped two-leg Hubbard ladders with a particle bath", Phys. Rev. B 111, 174452, 2024.

- 2) H. Onishi, "Wavepacket Approach for Spin Transport in Zigzag Spin Chain", To appear in Springer Proc. Phys.

国際会議

- 3) S. Kimura, H. Onishi, K. Okunishi, M. Akaki, Y. Narumi, M. Hagiwara, K. Kindo, and H. Kikuchi, "High field ESR measurements of the S=1/2 one dimensional Ising-like antiferromagnet CsCoCl<sub>3</sub>", 13th International Conference on Research in High Magnetic Fields RHMF2024, Nijmegen, Netherlands (July, 2024).
- 4) H. Onishi, "Exact diagonalization study of RIXS spectrum of CuO<sub>2</sub> spin chain", International Conference on Magnetism ICM2024, Bologna, Italy (June, 2024).

## 5.4 安全研究センター

### Nuclear Safety Research Center

---

#### 5.4.1 振発性ルテニウムと硝酸の気相における反応機構の量子化学計算による検討

A Reaction Pathway from RuO<sub>3</sub>(OH) or RuO<sub>2</sub>(OH)<sub>2</sub> to Ruthenium Tetroxide by Nitric Acid in Gas Phase with Quantum Chemistry Computations

城戸 健太朗

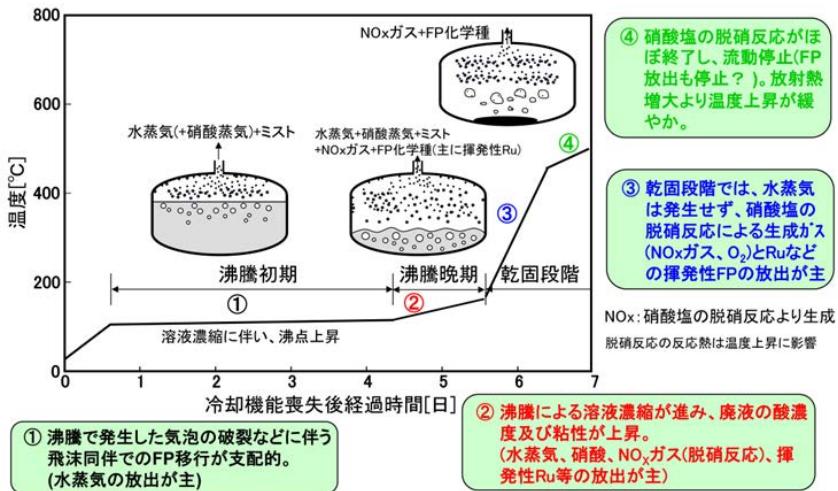
シビアアクシデント研究グループ

#### (1) 利用目的:

##### 研究目的

高レベル放射性廃液(HLLW)の沸騰乾固事故は核燃料再処理施設の代表的なシビアアクシデントであり、事故時の核分裂生成物の挙動をモデル化する取り組みが継続して行われてきた。HLLW の沸騰乾固事故において、ルテニウムは揮発性の高い酸化物(RuO<sub>4</sub>)として放出され、半減期の長い同位体の存在により、その挙動の把握には特に定量性が求められる。図 1 に示すように、再処理施設が HLLW の冷却能力を喪失し、廃液が沸騰して高度に濃縮されるまではルテニウムの放出は顕著ではない。一方で、極めて硝酸濃度が高い沸騰晚期になると盛んに揮発する。これまで濃硝酸水溶液や模擬廃液を用いた実験によって様々な知見が得られ、再処理施設の安全性評価のため、それらに基づく相関式が提案されている。しかしながら、廃液内の RuO<sub>4</sub> の生成過程や廃液から放出された RuO<sub>4</sub> が NO<sub>2</sub> や硝酸ガスとの共存によって安定化される理由など、実験的なアプローチが難しい現象については極めて限られた情報しかなく、ルテニウム挙動を精緻にモデル化する妨げになっている。本課題では、RuO<sub>4</sub> が硝酸ガスと水蒸気を含む気相中で安定化される理由を明らかにするために、量子化学計算を用いて反応メカニズムを検討する。文献[1]で示されているように、RuO<sub>4</sub> を含む反応過程のエネルギー評価には Coupled Cluster 法のようなコストの高い高精度計算が必要であり、大型計算機の利用が必須である。

[1] K. Kido, “A theoretical investigation on the intermolecular potential curve between ruthenium tetroxide and NO<sub>X</sub> (X = 1, 2),” Int. J. Quant. Chem. 121(21), No. e26781 (2021).



## (2) 利用内容・結果:

$\text{RuO}_4$  ガスに対して硝酸ガスと水蒸気が豊富に存在する条件で生成すると考えられる  $\text{RuO}_3(\text{OH})$  または  $\text{RuO}_2(\text{OH})_2$  と硝酸分子が反応して  $\text{RuO}_4$  となる経路について量子化学計算によって検討した。これらの過程は高レベル廃液の沸騰乾固事故におけるルテニウムの移行(つまりソースターム)を評価する上で不可欠な情報であるが、実験的手法によって明らかにすることはそもそも難しい。

構造最適化は GAMESS パッケージを用いて密度汎関数法(M06)によって行い、得られた反応前駆体、遷移状態、生成物のエネルギーを M06 法の他に TPSSh 法及び locally-normalized coupled-cluster single and double excitations with perturbative triples (LR-CCSD(T))法によって評価した。この計算には NWChem 7.0.2 パッケージを用いた。構造最適化には LANL2TZ(Ru)/aug-cc-pVTZ(H, N, O) 基底関数、エネルギー評価には cc-pVQZ-pp(Ru)/cc-pVQZ(H, N, O) 基底関数をそれぞれ用いた。 $\text{RuO}_4$  を含む系においては動的電子相関の効果が非常に大きいことが既に報告されている[1]。高い信頼性を持ってそれを取り込むため、本研究では LR-CCSD(T) 法を採用した。この方法の計算コストは基底関数の 7 乗に比例するため、小規模なクラスタ計算機では実行そのものが難しく、大型計算機の使用は必須である。

紙面の都合上、ここでは  $\text{RuO}_3(\text{OH})$  から  $\text{RuO}_4$  へ反応経路について説明する。この反応は形式的には硝酸分子による  $\text{RuO}_3(\text{OH})$  の酸化である。図 2 に本研究において見出された硝酸分子との相互作用による  $\text{RuO}_3(\text{OH})$  から  $\text{RuO}_4$  への反応経路(上)及びその自由エネルギーダイヤグラム(下)を示した。自由エネルギーは室温(25°C)で計算された。反応経路はそのほとんどが水素移動過程(硝酸分子からの水素引き抜きと分子内水素移動)であり、5 から  $\text{RuO}_4$  までの間に二酸化窒素の脱離過程が 1 回含まれる。出発分子は 3 種

類(1、2、3)あるが、どの前駆体を通っても5に収束し、そこから先は同じ過程を経てRuO<sub>4</sub>に至る。エネルギーダイヤグラムにはM06(黒)、TPSSh(オレンジ)、LR-CCSD(T)(緑)の結果が示されているが、ここではLR-CCSD(T)のエネルギーに基づいて議論する。前駆体1、2、3は硝酸分子との衝突によって生成すると考えられる。生成後は、例えば、TS2-3(32.4 kcal/mol)が示すように、前駆体同士はその高い活性障壁によって変換されにくい。前駆体1、3より2はわずかに安定(1: 3.7 kcal/mol、2: 1.6 kcal/mol、3: 3.4 kcal/mol)であり、2を経由する経路の律速段階のエネルギー(TS2-5、19.5 kcal/mol)も低いため、この経路を最も通りやすいと考えられる。

ここでは示さなかったが、同様の検討方法によってRuO<sub>2</sub>(OH)<sub>2</sub>からRuO<sub>3</sub>(OH)及びRuO<sub>4</sub>への反応経路も既に得られており、これらの成果を1報の雑誌論文としてまとめている。

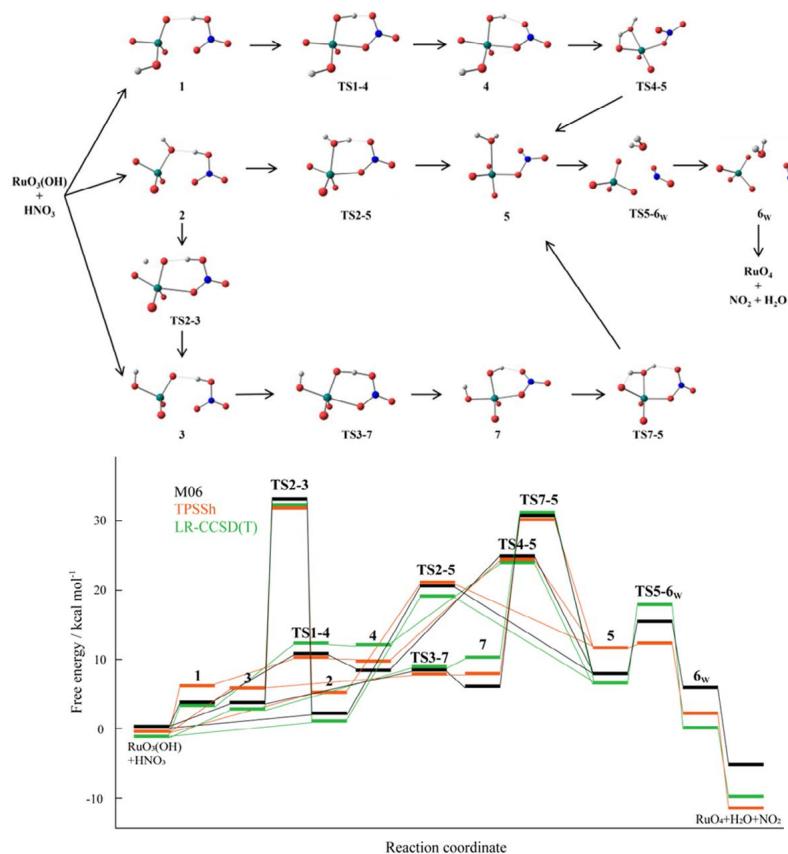


図 2 本研究において見出された硝酸分子との相互作用によるRuO<sub>3</sub>(OH)からRuO<sub>4</sub>への反応経路(上)及びその自由エネルギーダイヤグラム(下)。自由エネルギーは室温(25°C)で計算された。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし。

## 5.4.2 格納容器内自然対流に関する CFD 解析

### CFD Analysis of Natural Convection in a Nuclear Containment Vessel

安部 諭  
熱水力安全研究グループ

#### (1) 利用目的:

軽水炉シビアアクシデント（以下、SA）時における熱および多成分気体の輸送挙動は、原子炉格納容器の過温破損リスクと密接に関連しており、原子力安全の観点から極めて重要な研究課題である。とりわけ、沸騰水型原子炉（BWR）においては、SA 時に格納容器を冷却し、閉じ込め機能を維持するための有効な対策の一つとして、原子炉ウェル（格納容器上部空間）への注水による外面冷却が挙げられている。この冷却手法において、格納容器全体にわたる大規模な自然対流が生じるか、あるいは局所的な循環にとどまるかは、冷却効果の広がりや効率に直結する重要な要素である。

本研究では、熱水力安全研究グループが保有する模擬格納容器試験装置 CIGMA を用いて実施された、空気単体系および空気一ヘリウム混合系における外面冷却による自然対流実験に対し、Large-eddy simulation（以下、LES）を適用し、試験容器内における自然対流の発達過程、乱流構造ならびに熱・物質輸送挙動の詳細把握を目的とした解析を実施している。

具体的には、空気単体系の解析においては、外面冷却開始以降における自然対流の発達プロセスとそれに伴う流れ場の構造変化に注目し、冷却効果の空間的広がりを調査した。また、空気一ヘリウム混合系に関しては、試験容器上部に初期密度成層を形成したのちに冷却を開始し、実験により観測された密度成層の崩壊およびその時間発展過程を精緻に再現し、多成分気体における流れ場及び混合挙動の詳細な理解を図った。

#### (2) 利用内容・結果:

熱水力安全研究グループが実施した外面冷却により駆動される自然対流に関する CIGMA 試験装置を用いた実験に対し、LES による数値解析を実施した。CIGMA 装置は、シビアアクシデントにおける格納容器内の熱流動挙動を把握することを目的として設計された実験装置であり、直径 2.5 m、高さ 11 m、内部容積 48 m<sup>3</sup> の試験部を有する。本報告では、空気単体系で冷却面を高さ 8.1 m 以上に設定した CC-PL-26 について説明する。実験条件の詳細は既往研究<sup>1)</sup>に記載されている。解析の具体的な実施内容は以下のとおりである。

- 解析コードには、オープンソースの数値流体解析ソフトウェアである OpenFOAM ver.10 を用いた。

- 乱流モデルには、近年の自然対流解析において有効性が実証されている Coherent Structure Smagorinsky Model<sup>2)</sup>を実装し、その動作確認を行った。
- 流れ場の速度パワースペクトルを算出した結果、 $-3/5$ 乗則に従うことが確認され、乱流モデルおよびメッシュ解像度が十分な精度を有していることが示唆された（図1）。
- 数値解析結果と実験データとの比較として、試験中に観測された圧力の時間変化、試験装置内部のガス温度分布を評価対象とし、全体的には実験結果との良好な一致が確認された。

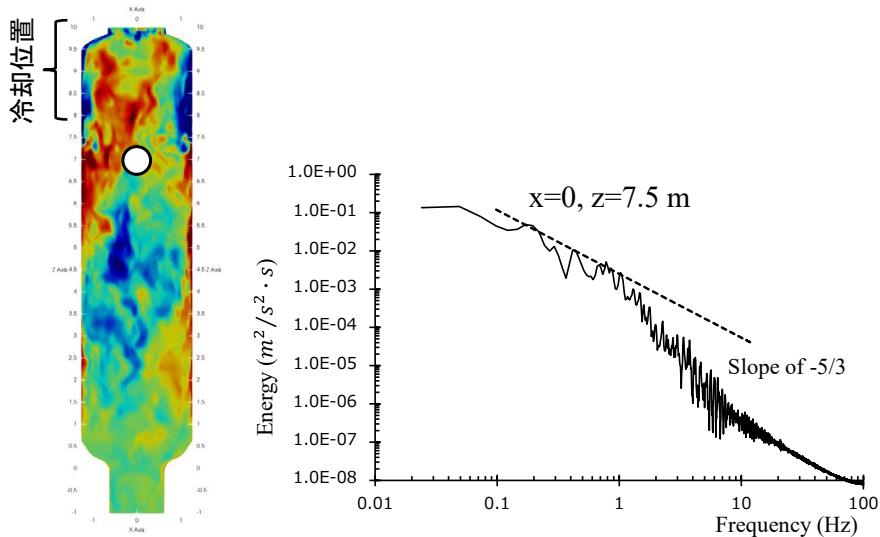


図1 外面冷却による試験容器内の対流挙動 (CC-PL-26) と乱流スペクトル

得られた成果については、令和7年12月にOECD/NEAのWGAMA(Working Group on Analysis and Management of Accidents)と安全研究センターが共催するCFD4NRS-10(数値流体力学と原子力安全に関する国際ワークショップ)にて発表し、国際的な専門家との意見交換を通じて成果の妥当性および今後の展開等について議論する予定である。

以上のことから、令和6年度下期に配分された大口計算資源(CPU演算部配分時間：40,909ノード時)を活用して得られた成果は、準備段階としては費用対効果の面でも十分意義のあるものであったと考えている。

#### 参考文献

- 1) S. Abe, A. Hamdani, M. Ishigaki, Y. Sibamoto, Experimental investigation of natural convection and gas mixing behaviors driven by outer surface cooling with and without density stratification consisting of an air-helium gas mixture in a large-scale enclosed vessel, Annals of Nuclear Energy, Vol. 166, 2022, 108722.

- 2) H. Kobayashi, F. Ham, X. Wu, Application of a local SGS model based on coherent structures to complex geometries, International Journal of Heat and Fluid Flow, Vol. 29, No. 3, 2008, pp. 640–653.

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

- 1) S. Abe, Y. Sibamoto, A. Hamdani, S. Soma, E. Studer, S. Kudriakov, A LES-Based Investigation of Natural Convection in the CIGMA Vessel under Localized Outer Surface Cooling: Application to the CC-PL-26 Experiment, proceeding of CFD4NRS-10, 2025, Mito city (Accepted).

### 5.4.3 燃料挙動解析コード FEMAXI-8 の高速化

#### Optimization and Refactoring of Fuel Performance Code FEMAXI-8

宇田川 豊

燃料安全研究グループ

##### (1) 利用目的:

FEMAXI は、1.5 次元の有限要素力学計算モデル、径方向と軸方向各 1 次元の熱計算、各熱計算メッシュに割り当てられた種々の常微分方程式系の組み合わせ/連成によって構成される、燃料棒の照射挙動解析コードである。同コードとして初めて系統的な検証に付され、軽水炉燃料挙動解析への適用に係る信頼性を確認したバージョンである FEMAXI-8 は、2019 年に外部提供を開始し、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。また 2025 年に入り、事故解析機能を統合した最新バージョン FEMAXI-8.1 の外部提供を開始した。燃料安全研究への適用の他、特に最近は事故耐性燃料の様な新しいタイプの燃料の安全評価・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、昨年度に引き続き、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、FP ガス移行モデルがスレッド並列化された解析が実行できていることを確認できた。

FP ガス移行モデルの稼働範囲である燃料ペレット領域の径方向メッシュ数 9 の条件下、並列スレッド数を 1、2、4 に変更して計算時間（並列化の対象とした FP ガス移行モデル実行部のみ）を比較した所、2 スレッドでは 64%、4 スレッドでは 42% となり、スレッド並列化による顕著な計算速度向上が確認できた。FP ガス移行モデルは通所運転条件から異常過渡、事故条件に至る殆どの解析条件に対して計算負荷に占める比重の大きいモジュールであり、今後は特に計算負荷の大きい解析ケースに対してスレッド並列化が適用されるよう工夫を講じることで、大規模な統計解析・検証解析の全体実行時間の大幅な削減が期待できる。

##### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

なし。

## 5.5 燃料材料開発部

### Fuels and Materials Department

#### 5.5.1 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<sup>1</sup>、中村 博樹<sup>2</sup>、町田 昌彦<sup>2</sup>

<sup>1</sup>燃料材料開発部、<sup>2</sup>システム計算科学センター

##### (1) 利用目的:

日米両政府は、民生用原子力協力に関する二国間委員会の下、日米民生用原子力研究開発ワーキンググループ（CNWG）を発足させている。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やってきた。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している。すなわち、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を目指している。その結果として、得られる妥当な計算式は、酸化物燃料の設計、運転時の燃焼効率、シビアアクシデントの評価等、様々な用途に用いることができる。

この目標を達成するため、具体的には米国ロスアラモス国立研究所のグループが専門とする古典分子動力学と申請者等が専門とする第一原理計算を組み合わせて、各々の短所を補うだけでなく、長所を活かす形で研究協力をやっている。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。また、燃料物質である二酸化アクチニドに加えて、模擬燃料物質であるフッ化カルシウムやフッ化ストロンチウムの物性予測も実施してきた。

本年度の研究では、二酸化アクチニドに対して、機械学習分子動力学を用いた物性評価を行い、実験から得られた観測データを説明することを目的とした。

## (2) 利用内容・結果:

本研究の目標は燃料物質である二酸化アクチニドに対して機械学習分子動力学法を用い、高温熱物性を評価することである。本年度は二酸化プルトニウムに対して、機械学習分子動力学ポテンシャルを作成し、それを用いて高温物性評価を行った。学習データとして、およそ 300 構造に対して、第一原理計算を用いてエネルギーと原子間力を用意した。この際、強相関効果を考慮し DFT+U を採用し、さらにスピン軌道相互作用も考慮した。磁性に関しては非磁性で行った。また、学習データの数が少ないため、今回はデルタポテンシャル法と呼ばれる、既存の原子間ポテンシャルと第一原理計算の差に対してニューラルネットワークポンテシャルを適用する方法を採用した。ニューラルネットワークは隠れ層 2 層で各層に 20 ノードで構築した。記述子としては Symmetry Function を採用し、1 元素当たり 70 個を使用した。

学習データと予測結果は 1 原子当たりのエネルギーの平均二乗誤差で 0.8meV 以下であり、確認用のデータでも 2.7meV と十分な精度が出た。このポテンシャルを用いて、融点の評価を行った。融点評価の手法としては固液界面を作成し、NPT で分子動力学計算を行い、全体が液相になる温度と全体が固相になる温度の境を探査した。図 1 に示すように、2830K で固相と液相が平衡となった。この 2830K という融点は実験で求められている 2843K や 3017K と近い値である。

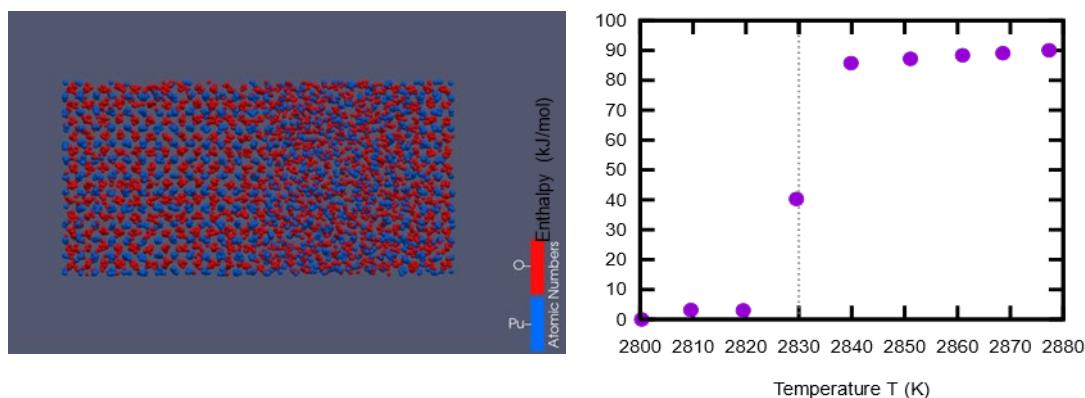


図 1：二酸化プルトニウムの融点評価のシミュレーション。左は 2830K での固液界面のスナップショット。右は固液界面シミュレーションでのエンタルピーと温度の関係。エンタルピーが低い温度領域が固相で、高い方が液相である。2830K でエンタルピーが急激に変化しているのがわかる。

比熱の評価も行い、図 2 に計算結果を示した。2000K 以下では計算結果が測定値より少し小さくなっている。これはショットキー比熱と呼ばれる電子の励起による比熱が原因であり、分子動力学では電子の自由度が入っていないため、ショットキー比熱が含まれず、測定値より小さくなる。また、2000K 以上で比熱の急激な上昇が見られる。これ

は、Bredig 転移と呼ばれる二酸化アクチニドなどで見られる現象であり、欠陥生成と超イオン伝導が原因と考えられている。しかしながら、測定値に比べて計算値の比熱上昇は小さい。これはポーラロン生成が機械分子動力学に含まれていないことが原因ではないかと考えられる。

Bredig 転移は萤石構造を持つ物質ではよく見られるが、そのピークは融点より少し低いところに観測されるのが一般的である。今回の二酸化プルトニウムの計算では融点と Bredig 転移のピークがほぼ同じ温度になった。これは他の萤石構造の物質ではあまり見られないものである。

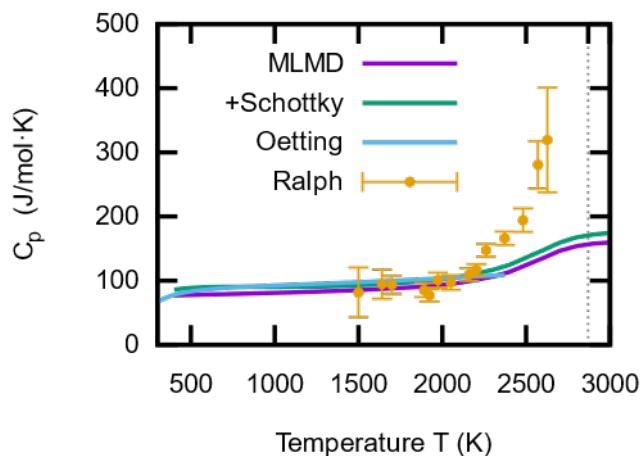


図 2：二酸化プルトニウムの比熱。MLMD が機械学習分子動力学による計算結果。<sup>+Schottky</sup> は電子励起による比熱を MLMD に加えたもの。Oetting と Ralph が文献値。

このように、機械学習分子動力学を用いた高温物性評価と測定値を比較することによって高温物性のメカニズムの理解が可能である。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。更なる燃料物質への信頼性の高い応用が期待できるため、今後は他の二酸化アクチニドや混合酸化物への適用を目指していきたい。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等)：

#### 国内会議

- 1) 中村博樹、小林恵太、奥村雅彦、板倉充洋、町田昌彦、渡部雅、加藤正人「機械学習分子動力学による二酸化プルトニウムの物性評価」、日本原子力学会 2024 年秋の大会、2024 年 9 月、仙台。

## 5.6 高速炉研究開発部

### Fast Reactor Research and Development Department

#### 5.6.1 高速炉蒸気発生器内ナトリウムー水反応現象数値解析コードの高度化

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

小坂 亘、渡部 晃、柳沢 秀樹、内堀 昭寛

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、高圧の水または水蒸気が Na 中へ噴出し、Na と水の化学反応 (Naー水反応) 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 (反応ジェット解析コード SERAPHIM) 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。

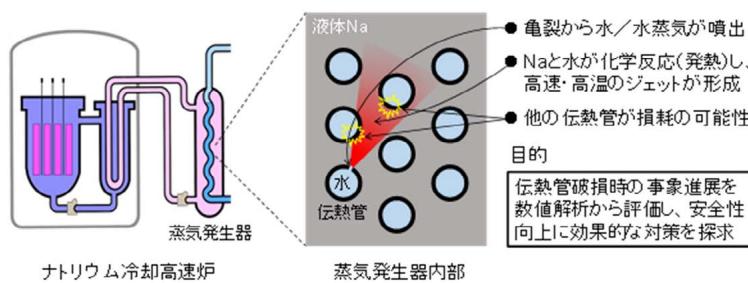


図 1 反応ジェット、隣接管の損傷及び破損伝播



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 6 年度課題の達成目標

Na 冷却高速炉実証炉の SG 設計に向けて、スケールを拡張してより多くの伝熱管が配置された条件での解析を検討している。非構造格子にて全ての伝熱管群を模擬した場合、総メッシュ数は従来の SERAPHIM 解析と比べて、最大 10 倍程度増加する（数百万～1000 万メッシュ超）見込みであり、感度解析の実施は困難となることが予想された。ここで、これまでの実験知見及び解析結果から、伝熱管破損に伴う Na－水反応ジェットは管群及び周囲 Na と相互作用し、高温場が形成される範囲はある程度限定されることが確認されている。そこで、メッシュで模擬する管群は、破損伝熱管周囲の高温場を包含する領域とし、一方で、評価上 Na－水反応の影響が及ばない領域については、伝熱管はメッシュで模擬せずポーラスモデルを導入することで、精度低下を抑えつつ計算時間短縮させることを考えた。

令和 6 年度は、SERAPHIM コードの実機適用性を調べる一貫として、水リーク率について既往解析事例よりも実機に近い条件（水リーク率 1.85 kg/s）となる大規模水リーク試験を対象に、管群中の Na－水反応ジェット影響範囲を評価した。また、ポーラスモデルの導入に向けて SERAPHIM コード改良にも着手した。

### 2) 令和 6 年度の研究成果とその重要性

大規模水リーク試験の再現解析のため図 3 に示す解析体系を用いた。ここで、重力は図の下側を向いている。試験条件と同様に液体 Na 中に伝熱管を 92 本設置し、そのうちの 1 本（図 3 中の赤色の伝熱管）から水蒸気が噴出した状況を解析した。SERAPHIM 解析では、Na－水反応による発熱・成分変化も考慮して多成分気液二相流の時々刻々の変化を評価している。そのうち、伝熱管破損を予測するために重要な定在的な高温領域を評価するため、温度分布について時間平均した評価結果を図 4(b)に示す。ここで、図 4(a)は比較対象とする試験結果であり、管群の各所に設置した熱電対（温度計）の測

定結果から測定中に1度でも1000°Cを超えた領域を示している。図4(a)と(b)は上述の通り高温領域の評価方法に違いがあるため直接の比較は難しいが、全体的な傾向として以下の点について概ね一致することを確認できた。

- ・ 高温領域は噴出孔から少し離れて形成される。
- ・ 主に浮力方向へ延びる傾向を持つ。
- ・ 伝熱管6本分程度の距離(約300 mm)高温が維持される。

以上、令和6年度はSERAPHIMにより評価された管群体系中Na一水反応ジェット影響範囲について、試験結果に整合することを確認した。次年度以降は、ポーラスモデルを導入した上で、伝熱管配置領域を評価するための感度解析に着手する予定である。

ポーラスモデル導入に向けたコード改良について、令和6年度は、流体領域内の伝熱管体積を考慮するためポロシティ(空隙率)を設定できるようにした。今後は、これ加えて管群における流動抵抗計算も可能となるようコード改良し、ポーラスモデルの検証解析を実施する予定である。

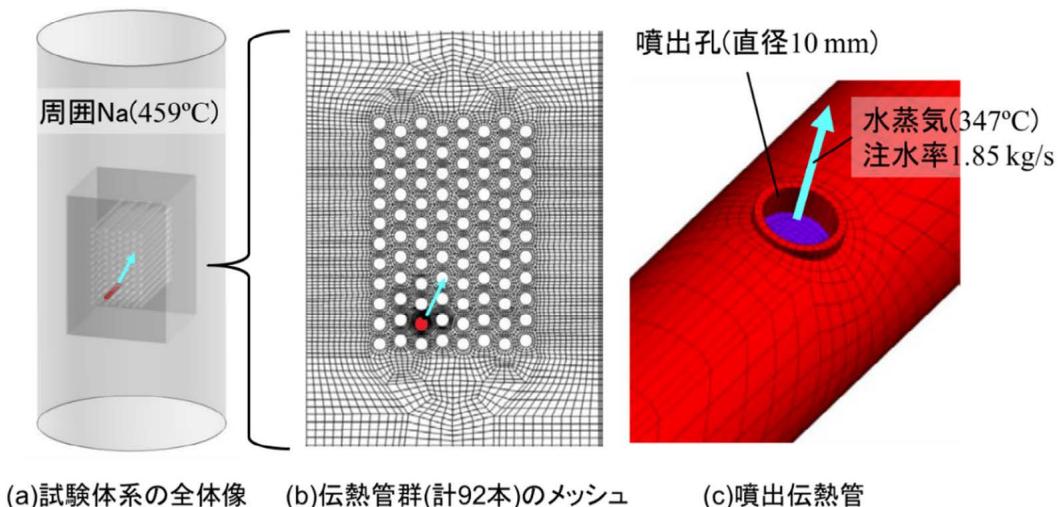


図3 解析体系

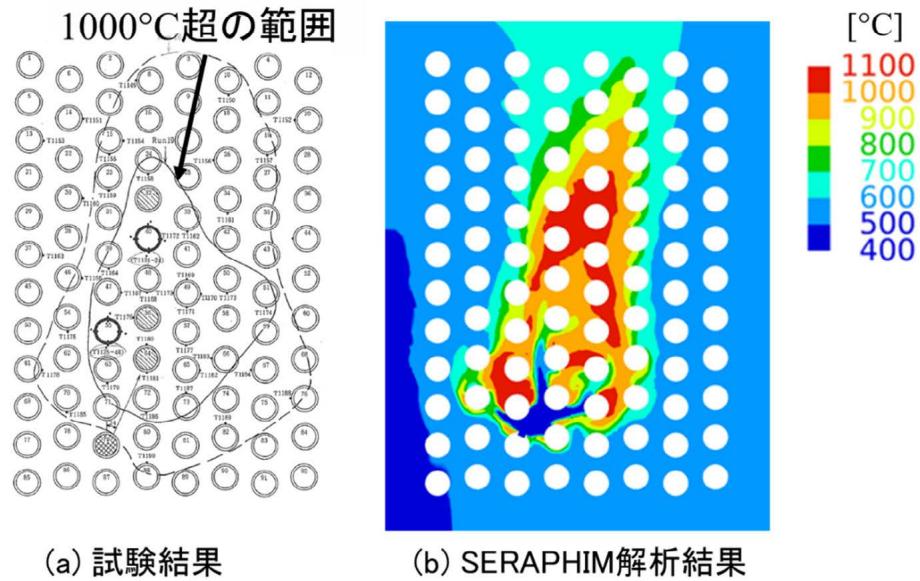


図 4 温度分布の比較

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

#### 【国内会議】

- 1) 内堀昭寛, 柳沢秀樹, 岡野靖 “高速炉蒸気発生器の伝熱管破損時圧力波伝播に対する解析手法の開発”, 日本機械学会 2024 年度年次大会, 2024 年 9 月 8 日～11 日, 愛媛大学 (出版済).

## 5.6.2 SPIRAL コードによる加熱円管内乱流混合対流の層流化現象解析

### Analysis of Laminarization in Heated Vertical Tube at Turbulent Mixed Convection Condition by SPIRAL

吉川 龍志、菊地 紀宏、田中 正暁

システム熱流動工学グループ

#### (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、冷却材の流速分布は浮力に大きく影響され、局所的な乱流一層流遷移が生じ、摩擦損失及び熱伝達性能を変化させる可能性がある。そこで、本研究では、燃料集合体内部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 を用い、乱流領域の混合対流条件での乱流一層流遷移現象の予測特性確認及び浮力による流速分布と乱流粘性係数等乱流諸量の変化を含む熱流動特性評価を実施する。

令和 6 年度は、SPIRAL における乱流モデルの妥当性確認の一環として、浮力による層流化現象が発生する混合対流条件での加熱円管内熱流動解析を実施し、直接数値シミュレーション (Direct Numerical Simulation、DNS) で計算された流速分布及び乱流諸量等と SPIRAL により予測された同パラメーターを比較した。乱流から層流に遷移する距離が必要であるため長い円管を解析領域として採用した。また、流速分布等の遷移過程を精度よく計算するため壁面近傍では細かい要素が必要となり、要素数の増大及びクーラン数と拡散数によるタイムステップの制限があり、現象の進展に長時間を要することから、本解析では、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）の並列計算を実施した。

#### (2) 利用内容・結果:

##### 1) 令和 6 年度課題の達成目標

DNS の解析対象を参考に、SPIRAL を用いて乱流領域の混合対流条件下での等熱流束加熱鉛直円管 ( $L = 120D$ ) 内上向流を対象とした熱流動解析を実施した。動作流体は空気である。図 1 に解析体系及び要素分割を示す。鉛直方向は、加熱部長 8.16m を包含できる 9.60m を対象とした。下部流入境界に対しては、十分に発達させた流速、乱流エネルギー  $k$  及び散逸率  $\varepsilon$  分布を境界条件として設定した。流出境界の圧力は一定値 ( $P = 0 \text{ Pa}$ ) を設定した。流入境界の温度を一定として、壁面の発熱は、鉛直方向均一分布の熱流束条件で模擬した。解析条件は DNS による層流化現象<sup>[1]</sup>の解析条件 ( $Re = 5300$ ,  $Gr_q/Re^2 = 0.348$ ) を参照して決めた。流入境界の冷却材の質量流量は  $M = 6.1 \times 10^{-3} \text{ kg/s}$ 、流入温度は  $T_{in} = 20.0^\circ\text{C}$ 、壁面熱流束は  $q_w = 47.5 \text{ W/m}^2$  をそれぞれ設定した。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  $k$ - $\varepsilon/k_{\theta}-\varepsilon_{\theta}$  モデル<sup>[2]</sup>を採用した。解析で使用した解析モデルの要素総数は約 886 万要素であり、1,024 CPU による並列計算を利用して、タイムステップ  $5 \times 10^{-5}$  秒で定常状態までの準定常解析を実施した。

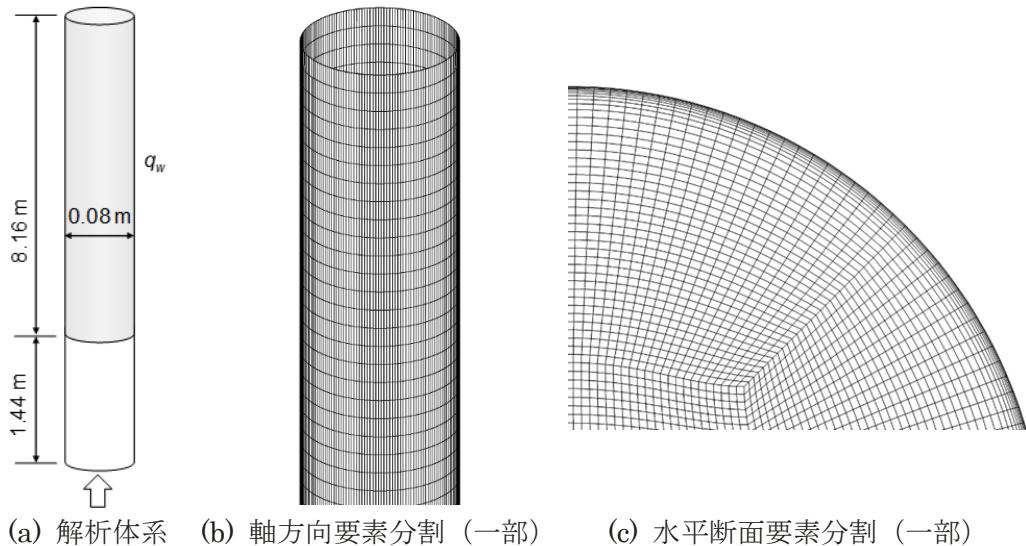


図 1 解析体系及び要素分割

## 2) 令和 6 年度の研究成果とその重要性

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乱流粘性係数分布を示す。発熱部下端から上端に掛けては壁面の加熱によって流体温度が上昇する。下部入口では十分発達した乱流粘性係数分布であるが、発熱部下端から上端に掛けては流体温度差によって浮力が発生し、流速分布に影響することで、乱流粘性係数が減少する傾向を示している。

図 3 に入口断面及び出口断面における鉛直方向速度の径方向分布と DNS の解析結果の比較を示す。SPIRAL による入口断面における乱流の流速分布と比較して、DNS による浮力の影響で層流化した流速分布は壁面近傍 ( $y/R = 0.1$ ) で流速が低く、壁面からやや離れた ( $y/R = 0.1 \sim 0.5$ ) 区域では流速は高く、管中心部 ( $y/R = 0.5 \sim 1.0$ ) では流速は低い傾向である。同様に入口断面の流速分布と比較して、SPIRAL による出口断面の流速分布は、浮力の影響によって管壁近傍では流速が低下し、管中心部では流速が上昇する傾向が現れたが、その差は小さく、DNS と比較して、SPIRAL の解析結果は浮力の影響が過小評価されており、層流化現象は見られなかった。今後、DNS 解析結果との差についてさらに分析を深め、SPIRAL の解析モデルの改良を検討していく。

## 参考文献

- [1] J. You, J. Y. Yoo, H. Choi, "Direct Numerical Simulation of Heated Vertical Air Flows in Fully Developed Turbulent Mixed Convection", International Journal of Heat and Mass Transfer, vol.46, 2003, pp.1613-1627.
- [2] H. Ohshima, Y. Imai, "Numerical Simulation Method of Thermal-hydraulics in Wire-wrapped Fuel Pin Bundle of Sodium-cooled Fast Reactor", International Conference on Fast Reactors and Related Fuel Cycles: Next Generation Nuclear Systems for Sustainable Development (FR17), Yekaterinburg, Russian Federation, June 26-29, 2017.

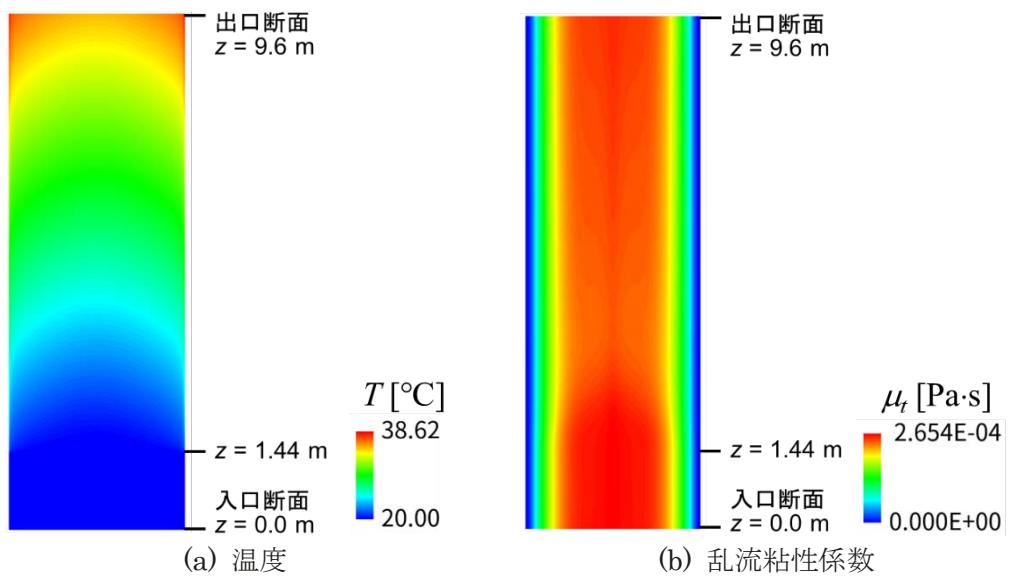


図 2 鉛直断面における温度と乱流粘性係数の分布  
(解析体系について径方向に 41 倍して示している)

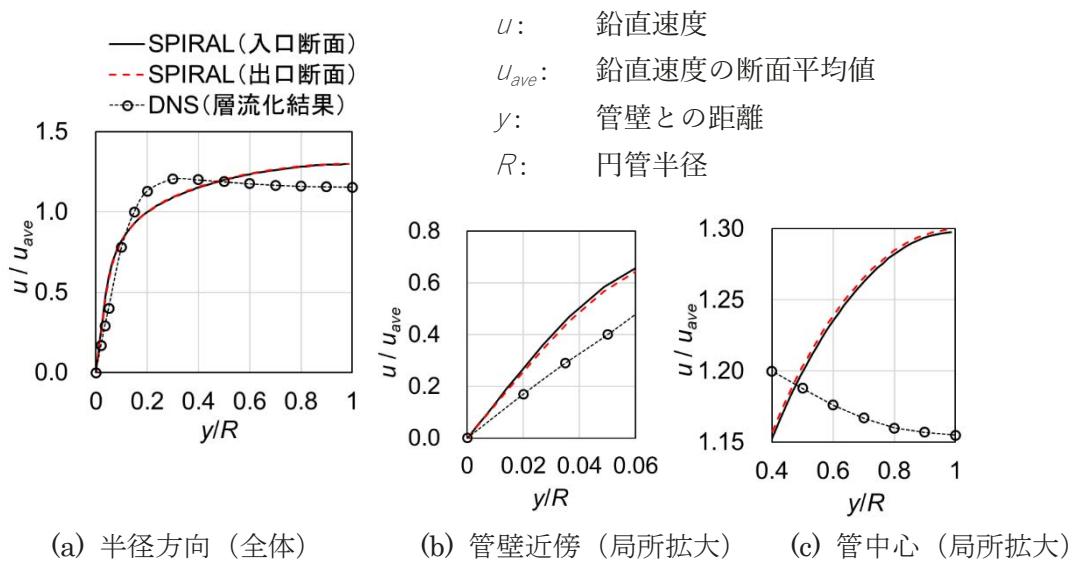


図 3 鉛直方向流速の径方向分布の比較

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) R. Yoshikawa, Y. Imai, N. Kikuchi, M. Tanaka, 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) 吉川龍志, 菊地紀宏, 田中正暁, “混合対流条件下の集合体圧力損失試験解析による熱流動解析コード SPIRAL の妥当性確認”, 日本機械学会 2024 年度年次大会, 愛媛大学, S081-10, 2024/9/8-11.

## 5.7 高速炉解析評価技術開発部

### Fast Reactor Life-Cycle Safety and Integrity Evaluation Technology Development Department

#### 5.7.1 「常陽」炉外試験データを用いたナトリウム冷却高速炉の炉心湾曲コードの妥当性確認; 単体ダクト湾曲のベンチマーク

#### Validation Study on SFR Core Bowing Codes using Joyo Ex-core Experiment Data: Single Duct Bowing Benchmark

吉村 一夫<sup>1</sup>、堂田 哲広<sup>1</sup>、上羽 智之<sup>1</sup>、田中 正暁<sup>1</sup>、三浦 孝充<sup>2</sup>  
炉心・プラント解析評価グループ<sup>1</sup>、高性能計算技術利用推進室<sup>2</sup>

#### (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。特に大型の炉心において燃料集合体等（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6年度は FINAS の大規模炉心体系への適用のため、拡張書式への対応、リストア機能整備及びソルバの高速化を実施した。本稿では、「常陽」炉外試験データ（単体ダクト）を用いた、FINAS の炉心湾曲コードとしての妥当性を確認した内容について述べる。

#### (2) 利用内容・結果:

FINAS の炉心湾曲コードとしての妥当性確認のため、「常陽」炉外試験（単体ダクト）のベンチマーク解析結果と試験データとの比較を行った。

##### ① ベンチマーク試験体系

図1(a)に「常陽」炉外試験（単体ダクト）の試験体系を示す。ダクトは六角管であり、図1(a)の左側の1辺の内側にヒーターが取り付けられ、六角管の対面間温度差が生じることにより右側に湾曲する。水平方向変位をレーザートランジットで軸方向に10箇所計測しており、ダクト間距離を確保するために設けられた構造材である上部及び下部パッドとダクトの接触荷重をロードセルで計測している。

図1(b)に「常陽」炉外試験（単体ダクト）の解析モデルを示す。ダクトはビーム要素

で模擬し、ダクトの曲げ剛性及び周方向温度分布を考慮した。また、炉心支持板での集合体のダクトの傾き、上部及び下部パッドとの接触ならびにエントランスノズル下端での連結管との接触を考慮した。

表1及び表2にそれぞれ、各試験ケースの上部及び下部パッドでのダクトとの初期ギャップ幅とダクトの対面間温度差を示す。ケースS1からS5は初期ギャップ幅を持ち、ケースS6とS7は初期ギャップ幅がゼロ（パッドとダクトが接触）となっている。ケースS8からS10はパッドが無い自由湾曲試験となっている。

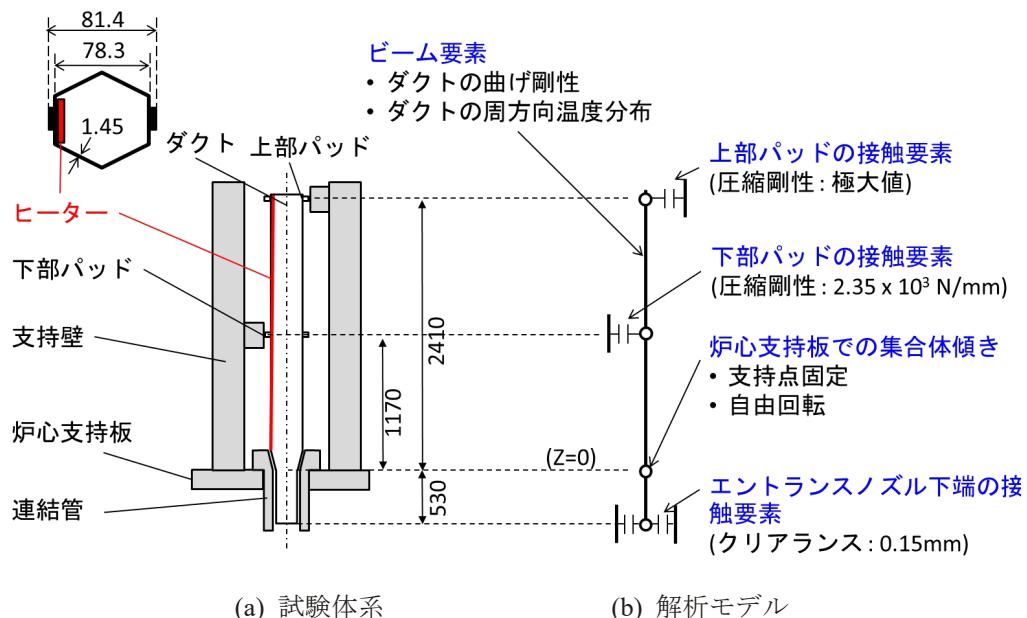


図1 試験体系と解析モデル

表1 上部及び下部パッドでの初期ギャップ幅

パッド位置	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10
上部パッド(右側)	1.2	3.05	3.05	3.05	3.05	0	0	-	-	-
下部パッド(左側)	1	0.8	0.8	0.8	0.8	0	0	-	-	-

(単位:mm)

表2 ダクトの対面間温度差

Z (mm)	S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10
800	33.8	32.5	41.3	35	55	40	67.5	15	37.5	55
1040	37.8	37.5	43.7	38.8	60	45	70	20	42.5	60
1340	30	27.5	35	30	47.5	37.5	60	15	35	50
1840	35	32.5	37.5	40	60	47.5	72.5	17.5	40	55
2310	3.76	2.5	2.5	2.5	5	5	7.5	2.5	2.5	5

(単位:°C)

## ② 解析結果

図2にケースS5、S7及びS10におけるダクトの水平方向変位のFINASの解析結果と試験データの比較を示す。ケースS5、S7及びS10は、各拘束条件で対面間温度差が最も大きくなるケースである。どのケースにおいても、FINASの解析結果は試験データをおおよそ再現した。

表3に水平方向変位量の最大値(Dmax)及び誤差の絶対値平均(MAE)を示す。ここでMAEは解析結果( $P_i; i=1,2,\dots,n$ )と実験結果( $O_i; i=1,2,\dots,n$ )を用いて以下で表される。

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |P_i - O_i|. \quad (1)$$

ケースS1、S6及びS7はMAEとDmaxの比が20%~40%となったが、それ以外のケースではMAEとDmaxの比が10%以内に収まった。ケースS1、S6及びS7は、図1のとおり、上部及び下部パッドとダクトとの初期ギャップ幅が小さいもしくはゼロのケースであり、他のケースに比べて湾曲形状にダクトの製作公差の影響が出やすいことが考えられる。

本試験は、ダクト長さ約3000mmに対して水平方向変位は最大約15mmであり、炉心支持板での傾き等による不確かさを考慮に入れると、FINASは試験データを良く再現していると判断できる。

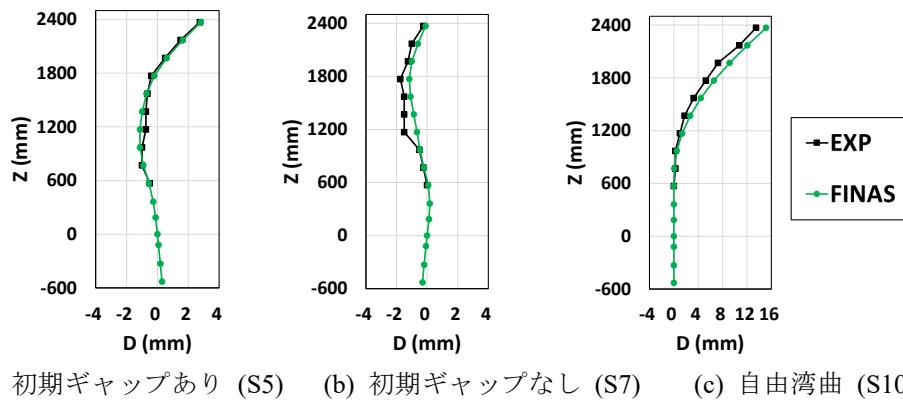


図2 ダクトの水平方向変位

表3 水平方向の最大変位量(Dmax)と誤差の絶対値平均(MAE)

	Case		S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10
Exp	Dmax	mm	1.8	3.0	3.0	2.8	2.8	1.0	1.8	5.5	9.8	13.5
FINAS	MAE	mm	0.4	0.2	0.2	0.2	0.1	0.2	0.3	0.2	0.6	0.9
	MAE/Dmax	-	23%	6%	7%	6%	5%	20%	20%	4%	6%	7%

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) K. Ohgama, N. Doda, T. Uwaba, S. Futagami, M. Tanaka, H. Yamano, H. Ohta, T. Ogata, N. Wozniak, E. Shemon, and B. Feng, "Validation Study on SFR Core Bowing Codes using Joyo Ex-core Experiment Data: Single Duct Bowing Benchmark," Proc. of GLOBAL2024, Tokyo, Japan, 2024.

## 5.8 核変換ディビジョン

### Nuclear Transmutation Division

#### 5.8.1 加速器駆動システムの低エネルギーbeam輸送のためのbeam過渡現象の研究

#### Beam Transients Studies for the Low-Energy Beam Transport of the Accelerator Driving System

イー レンドン ブルース、近藤 恭弘、田村 潤、明午 伸一郎、前川 藤夫  
核変換ディビジョン

##### (1) 利用目的:

The Japan Atomic Energy Agency (JAEA) is designing a 30MW continuous-wave proton linear accelerator (linac) for a subcritical accelerator-driven system (ADS). Since this is the highest beam power ADS accelerator proposed, minimizing beam loss is crucial for successful operation. Most of the ADS linac has been completed, the remaining part is the low-energy beam transport (LEBT) that connects the proton source with the radio-frequency-quadrupole (RFQ), as shown in Figure 1. The design of the LEBT is essential for analyzing beam behavior under varying conditions to reach a steady state (i.e., transient time). This optimization aids in accelerator design and the development of operational strategies to achieve optimal performance. Thus, this research aims to perform transient beam space charge compensation studies on the LEBT of the JAEA-ADS linac.

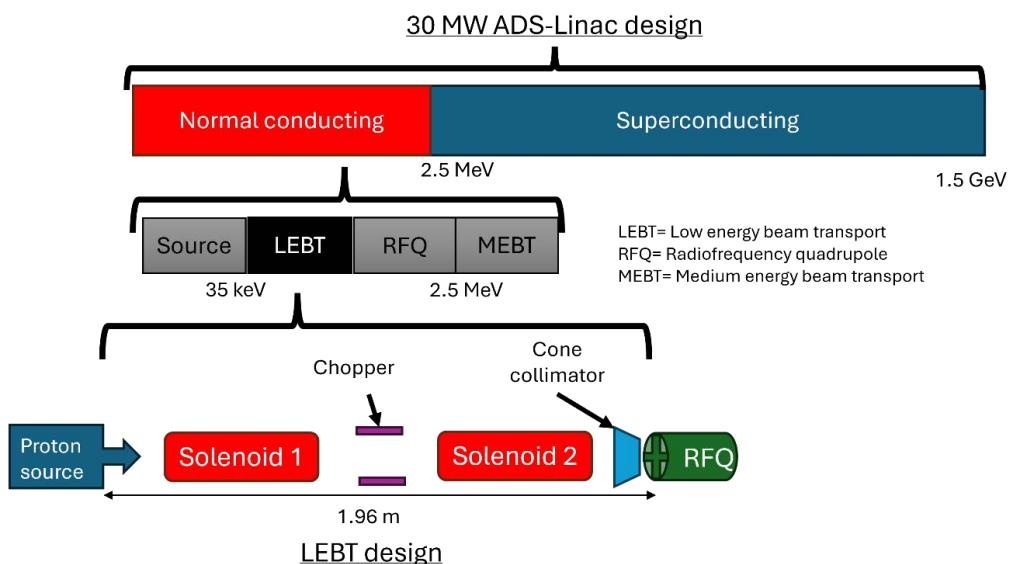


Figure 1. ADS linac schematic proposed by JAEA.

## (2) 利用内容・結果:

### Research targets of the FY2024 project:

High-intensity proton linacs utilize space-charge compensation (SCC) to counteract the Coulomb repulsion between the particles in the beam at the earliest stage of the acceleration. This process prevents large beam sizes that lead to significant losses, consequently ensuring a safe accelerator operation.

SCC is a build-up process that consists of the accumulation of electrons generated from the interaction of the beam with residual gas. During this process, the beam parameters exhibited a transient behavior, thus representing a potential beam loss risk. Additionally, during the accelerator commissioning stage, the beam will use a chopper to control bunch length for a safety linac tuning with lower beam power. However, the chopper operation will destroy the SCC and lead to temporary changes in the beam's performance. Therefore, it is essential to conduct beam transient studies for the JAEA-ADS LEBT to assess the potential losses in the accelerators during these non-steady-state conditions.

Simulations must meet the criteria in Table 1 to ensure good accuracy. As a result, an average case took about 41 days on a 24-core workstation. Thus, to complete multiple simulations in a reasonable timeframe, we used the JAEA Supercomputer (HPE SG8600).

Table 1: Simulation conditions.

Condition	Significance
Self-consistent electromagnetic field interaction	<ul style="list-style-type: none"> <li>• 3D PIC benchmarked plasma code: Warp</li> </ul>
Physics process	<p>Include the dominant reactions:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• Ionization (Beam-gas, electron-gas, etc.)</li> <li>• Charge exchange</li> </ul>
Simulation stability & convergence	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Simulation time step: <math>\Delta t = 0.1 \text{ ns} &lt; 2/\omega_{(p,e)}</math> (electron plasma frequency)</li> <li>• Mesh size: 4 mm to 0.5 mm <math>&lt; 3\lambda_D</math> (electron Debye length)</li> <li>• Large number of Macroparticles (computational particles that represent many real particles) <math>\sim 10^7</math></li> </ul>

### Results from FY2024 and their significance:

#### 1) SCC build-up

This simulation explored the initial operation of the linac and determined the conditions necessary for the LEBT operation. Figure 2 (top) illustrates the evolution of the root mean square (rms) beam size at the end of the LEBT. The bottom plots show the horizontal distribution along the LEBT at the beginning (left) when the SCC is weak, resulting in a wider beam, and at the steady state when the SCC is strong, leading to a more compact beam. The beam loss recorded was below the limit of 1 W/m.

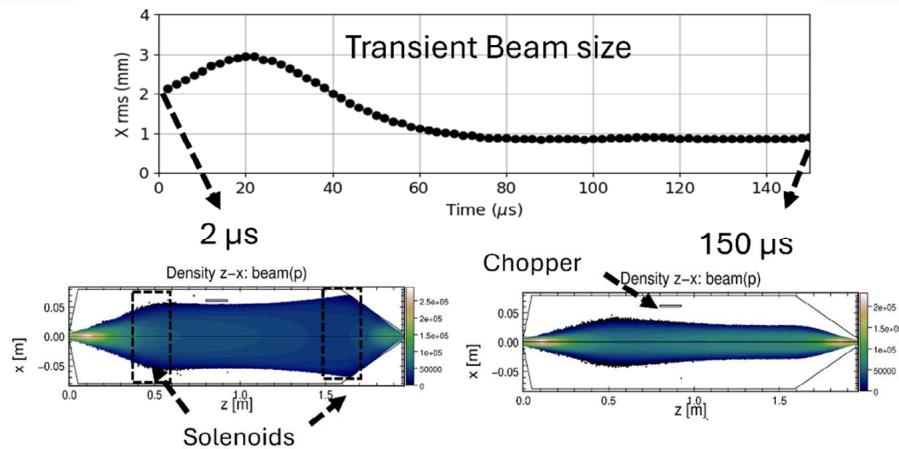


Figure 2. The top plot shows the variation of the final rms beam size. The bottom left is the horizontal beam distribution at 2  $\mu$ s and the right one is at 150  $\mu$ s.

#### 2) Chopper operation

This study presents guidelines for appropriate steps in ramping up beam power, specifically recommending an increase of 0.5% every 100 seconds. Additionally, it evaluates the beam tails generated when the beam is removed and concludes that their length is adequate for measuring the subcriticality of the reactor, a condition necessary for the operation of ADS. The recorded losses were below the safety limit.

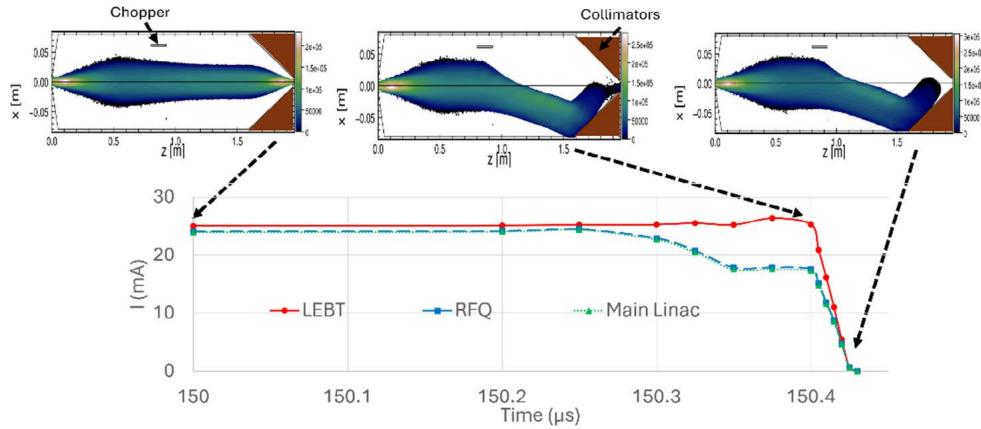


Figure 3. The top shows the evolution of the beam kick produced by the chopper. The bottom plot shows the beam current at the LEBT, RFQ, and main linac. The beam tails were estimated to be 180 ns, which fulfills the requirement to be less than 1  $\mu$ s.

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) B. Yee-Rendon, Y. Kondo, J. Tamura, F. Maekawa, and S. Meigo, Design and beam dynamics studies of a chopper for the JAEA-ADS LEBT, the 21st Annual Meeting of Particle Accelerator Society of Japan, Yamagata, 2024, pp. 205 – 209.
- 2) B. Yee-Rendon, Y. Kondo, J. Tamura, F. Maekawa, and S. Meigo, Beam Transient Studies for the JAEA-ADS LEBT, the 32nd Linear Accelerator Conference, Chicago, 2024, pp. 488 – 491, doi: 10.18429/JACoW-LINAC2024-TUPB07

## 5.9 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

---

#### 5.9.1 遅発ガンマ線の応用研究と分析

#### Delayed Gamma-ray Final Application Studies and Analysis

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:

A primary aspect of nuclear safeguards is to verify in a timely manner the amount of U and Pu in state facilities through measurement of nuclear material samples. This is relatively easy for low-radioactivity nuclear material, like fresh reactor fuel, but becomes a significant challenge for irradiated fuel. Specifically, the build-up of minor actinides (e.g. Cm) and long-lived fission products (e.g.  $^{137}\text{Cs}$ ) passively emit significant amounts of neutrons and gamma-rays. These passive emissions hide the direct signatures of the U and Pu of interest, requiring verification of the U and Pu to be primarily performed through correlations to these passive emissions. During reprocessing of the irradiated fuel, the nuclear material is dissolved and the U and Pu separated and purified, though the dissolved fuel must be characterized beforehand. The International Atomic Energy Agency (IAEA) currently uses Isotope Dilution Mass Spectrometry (IDMS) to evaluate the nuclide content and Hybrid K-Edge Densitometry (HKED) to determine the U and Pu elemental masses [1]. However, IDMS is a chemical process requiring a long time to prepare and analyze the sample, extending the time to return a result [2]. Consequently, the IAEA seeks supplements for improve safeguarding capabilities, not just for the solution samples, but also to evaluate material throughout the entire facility.

Toward this goal, the Integrated Support Center for Nuclear Nonproliferation and Nuclear Security (ISCN) is developing Delayed Gamma-ray Spectrometry (DGS). DGS is an active-interrogation technique that uses neutrons to induce fission in the nuclear material of interest, creating prompt neutrons and gamma rays along with pairs of fission products. Many of these fission products will decay with short half-lives, on the order of a few seconds to a few minutes, and emit gamma rays above  $\sim 2,700$  keV. Shielding the low energy passive emissions, these high-energy gamma rays could be used as the observable signature of the fissionable nuclear material. To

perform DGS interrogations, we must design instruments to create the short-lived fission products and observe the gamma rays.

## (2) 利用内容・結果:

The DGS research performed on the CCSE HPE SGI8600 supercomputer focused on instrumentation studies using MCNP [3]. Significant time was spent on characterizing the ISCN Fission Signature Assay Instrument (FSAI) that was designed as the final prototype for deployment in reprocessing plants. Presently, FSAI is used for experiments with small samples of U-235 to determine the associated signatures using a deuterium-deuterium (D-D) neutron generator. Two studies were performed for FSAI. First, the generator is undergoing an upgrade in emission rate to  $10^9$  n/s, requiring evaluation of the dose rates for operational relicensing that was performed in the FY2024 fiscal year. Specifically, our goal was to ensure that the dose rate was below the regulation limit outside of the window in our laboratory by adding additional Pb shielding (see Figure 1).

Additionally, we ran MCNP simulations related to our He-4 detector that is used as the FSAI source monitor. As a fast-neutron detector it can distinguish fission neutrons from the neutrons emitted by the generator (energy) or  $^{252}\text{Cf}$  (intensity). The MCNP models simulated energy-correlation experiments performed at the MONNET Tandem Facility the European Commission Joint Research Centre (EC/JRC) in Geel (Belgium) and sensitivity profile experiments performed in the ISCN lab using collimated  $^{252}\text{Cf}$ . Final analysis is underway for publishing the results from characterizing the FSAI neutron detectors, including the He-3 detectors used for prompt and delayed neutron counting.

Beyond FSAI studies, we are also working on DGS studies for full irradiated assemblies. In the early 2010s, the US DOE complex started a broad investigation into different techniques that could best be used for assembly material accountancy, prior to final disposition. For this program Los Alamos National Laboratory created the Spent Fuel Library (SFL) MCNP models providing standard candles for evaluating assemblies with a broad range of burn-up, initial enrichment, and cool-



Figure 1. Improved dose shield for the FSAI upgraded emission rate.

down (BEC) [4]. We are using these SFL models to extend our DGS studies from our preliminary focus of small-sample interrogations. Specifically, we are studying fission-rate differences between using  $^{252}\text{Cf}$  inside the guide tubes, emulating a rabbit system, to using the FSAI D-D neutron generator on the side of the assembly (see Figure 2). Studies of different generator and detector stand-off distances were under evaluation for in-pool interrogations under minimal interference conditions of no moderator/reflector collar. We started studies on pseudo-rotating the assembly so different sides of each assembly are irradiated and measured to evaluate geometry and material distribution effects to determining the entire assembly composition. In FY2024, two sides have been simulated and processed with ROOT [5] on the CCSE HPE SGI8600 supercomputer to begin this study.

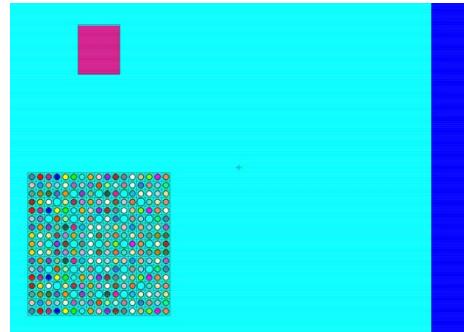


Figure 2. The SFL assembly (lower left) inside the water (light blue) near the pool wall (dark blue) with a detector nearby (pink) and the source simulated on the opposite of the detector.

- [1] International Atomic Energy Agency, “Safeguards Techniques and Equipment: 2011 Edition”, Int. Nucl. Verif. Series No. 1, Rev. 2, 2011.
- [2] Itoh T et al., “Enhanced Cooperation between SSAC and IAEA through Joint Operation of On-Site Laboratory for Safeguarding Rokkasho Reprocessing Plant”, IAEA-CN-184/70, 2010.
- [3] J.T. Goorley, M.R. James, T.E. Booth, et al., “Initial MCNP6 Release Overview”, Nuclear Technology 180, 2012, pp.298-315.
- [4] M.L. Fensin, S.J. Tobin, N.P. Sandoval, et al., “A Monte Carlo based spent fuel analysis safeguards strategy assessment”, Global, 2009, Paper 9278.
- [5] R. Brun, F. Rademakers, “ROOT: An Object-Oriented Data Analysis Framework,” Nuclear Inst. and Methods, A, vol. 389, no. 1-2, pp. 81-86, Apr. 1997.

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) D.C. Rodriguez, S. Akamatsu, F. Rossi, et al., “Preliminary Status and Results of the JAEA/ISCN Fission Signature Assay Instrument for Delayed Gamma-ray Spectrometry Nuclear Safeguards”, 65th Annual Meeting of the Institute of Nuclear Material Management, Jul. 21-24, 2024.

## 5.10 システム計算科学センター

### Center for Computational Science & e-Systems

---

#### 5.10.1 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

AI・DX 基盤技術開発室

##### (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行い、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:

体心立方晶の鉄の空孔や対応粒界などにおける水素トラップエネルギーは、現在では第一原理計算から比較的容易に計算される。一方鉄の転位芯については、歪場・応力場の広がりの小さいらせん転位芯に関する計算はすでになされており、最も安定ならせん転位芯構造に対しては約 0.25 eV/atom と比較的小さめの水素トラップエネルギーが得られている[1]。ところが転位芯周囲の歪場・応力場の広がりが大きい刃状転位芯を第一原理計算で扱った例はまだほとんどない。筆者らの知る限りでは Flexible Boundary Condition (FBC)を用いた転位芯構造の計算[2]があるものの、これは真空領域を含む 900 原子ほどの鉄原子を扱った大規模な計算であり、現在でも容易には実行できない計算である。

本研究では、周期境界条件 (Periodic Boundary Condition = PBC) を満たすユニットセルを用いて刃状転位芯構造を第一原理から計算し、水素トラップエネルギーの計算を試みた。用いたセルは 378 原子からなり、上記の計算と比較するとセルサイズで 1/4 程度であり小さいが、サイズ効果を検討しつつ計算を行っている。Bcc Fe 中で最もよく観察される、バーガースベクトルが<111>、すべり面が{110}、転位線方向が<112>の刃状転位(1/2a<111>{110} edge dislocation)を 2 つ異符号に配置し、Fig. 1 のように並べた四

重極配置のユニットセルを用い、原子位置及びセルサイズ・形状を含めた構造緩和計算を行った。第一原理計算には VASP コードを用い、カットオフエネルギー 360 eV、 $\Gamma$  点を含む  $2\times 2\times 6$  k-point mesh を用い、セルサイズは辺の長さがおよそ 0.25 nm, 0.25 nm, 0.7 nm の直方体である。同時に、公開されているニューラルネットワークポテンシャル (NNP)[3]を用いた LAMMPS による計算も行った。

Fig. 1 の構造は DFT 計算の構造緩和後のものであり、原子列に対して縦に線で結んで転位芯の位置を見やすくしたものである。転位芯が 3 つの部分転位芯に分かれているように見えるが、5~10 Ang.程度の広がりをもつことを示している。[211] 方向から Bcc 構造を見ると、[1-1-1]/2 バーガースベクトル内に原子列が縦に 3 列含まれることから、3 本の線が余ってこのように見えている。前出の計算[2]と比較すると転位芯付近では構造がよく一致している。NNP 計算を用いてもほとんど同じ構造が得られる。

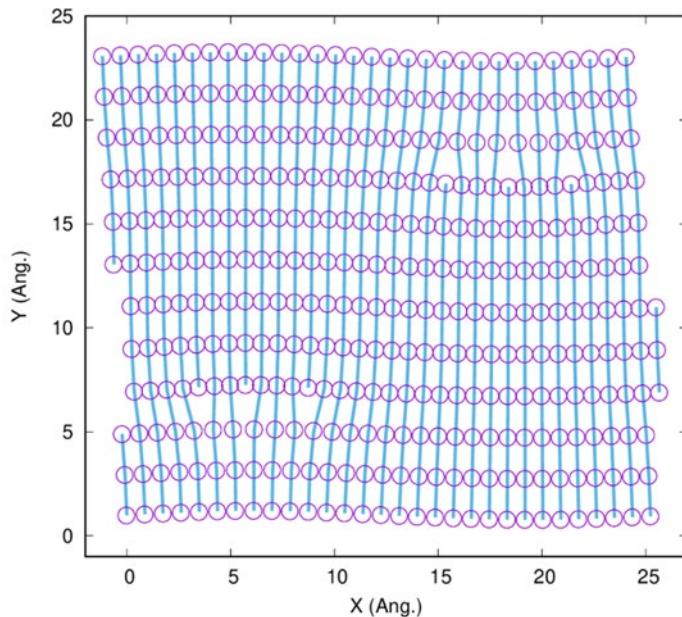


Fig. 1: Atomic arrangement seen from the direction of dislocation line [211] for  $1/2a<111>\{011\}$  edge dislocation of bcc Fe. X // [1-1-1], Y // [01-1].

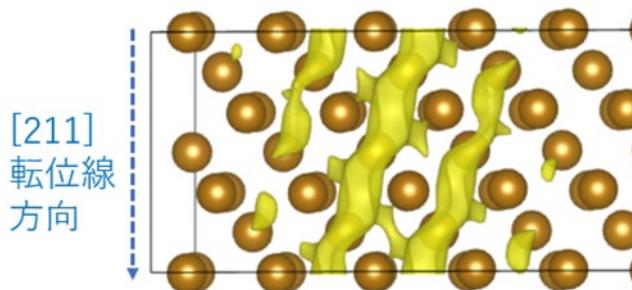


Fig. 2: Equal electron density surfaces (yellow) around edge dislocation core.

Fig. 2 に転位芯付近の電子密度のある特定の値の等価面を示す。黄色い領域が電子密度の低い領域を意味する。興味深いことに、電子密度の最も低い領域は転位線方向に連なるというより、[111] 方向に延びる傾向があり、水素や炭素等格子間元素の転位芯周囲の拡散の振る舞いに影響することが示唆される。水素トラップエネルギー

は、現在得られているところではゼロ点振動補正も加えて最大で約 0.45 eV/atom であるが、セルサイズに関するさらなる検討が必要である。

種類の異なる鉄の刃状転位芯も含めて水素トラップエネルギーを計算した。 $1/2a<111>\{110\}$ 刃状転位芯はもっともよく見られる転位芯とされるが、 $a<100>\{110\}$ と $a<100>\{100\}$ は二つの刃状転位芯が合体したジャンクションとされており、転位芯の広がり（空隙）が大きいと考えられる。水素トラップエネルギーは確かに $a<100>\{110\}$ と $a<100>\{100\}$ 転位芯の方が大きくなっている、転位芯の空隙の大きさを反映して水素トラップエネルギーが大まかには決定されていると考えられる。最近の実験において、鉄中の刃状転位芯に対する精密な水素トラップエネルギーの測定がなされ 0.52 eV/atom 程度の値[4]が得られており、計算結果に近い。セルサイズ効果については LAMMPS による計算によって検証している最中である。

刃状転位芯のその他の種類に関しても計算を継続していく予定だが、鉄の刃状転位芯の水素トラップエネルギーを第一原理から計算するという初期の目標は達成できたと考えている。四重極配置セルを用いた数百原子程度のセルサイズでもほぼ信頼できる水素トラップエネルギーが得られることが分かった点が、他の系に適用可能な重要な成果と考えている。令和 7 年度中に論文として投稿する予定である。今後、この計算手法を生かし燃料被覆管ジルコニウム合金中の転位芯の水素トラップ挙動についても計算を進める予定であり、ジルコニウム中転位芯に関する溶質元素との相互作用などの挙動解明が期待される。

#### 参考文献

- [1] M. Itakura, H. Kaburaki, M. Yamaguchi, T. Okita: The effect of hydrogen atoms on the screw dislocation mobility in bcc iron: A first-principles study, *Acta Materialia* 61(2013)6857-6867.
- [2] M. R. Fellinger, A. M. Z. Tan, L. G. Hector, Jr., D. R. Trinkle, Geometries of edge and mixed dislocations in bcc Fe from first-principles calculations, *Phys. Rev. Materials* 2(2018)113605.
- [3] F. S. Meng, J. P. Du, S. Shinzato, H. Mori, P. Yu, K. Matsubara, N. Ishikawa, S. Ogata, General-purpose neural network interatomic potential for the  $\alpha$ -iron and hydrogen binary system: Toward atomic-scale understanding of hydrogen embrittlement, *Phys. Rev. Materials* 5(2021)113606.
- [4] 秋山、杉山、齋藤、高井、「鉄中の転位芯近傍における水素脱離の活性化エネルギー評価」, CAMP-ISIJ vol.37(2024)-679.

#### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 山口正剛、海老原健一、板倉充洋、鉄刃状転位芯の水素トラップエネルギーの第一原理計算、日本鉄鋼協会 2025 年春季大会、2025 年 3 月 8-10 日、東京。

## 5.10.2 水素材材料の第一原理分子動力学計算

### First-Principles Molecular Dynamics of Hydrogen-Related Materials

志賀 基之、Thomsen Bo

AI・DX 基盤技術開発室

#### (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材料の物性を微視的に解明するために、水素材材料に対する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は、幅広い課題に取り組むものである。具体的には、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評価、廃炉作業におけるマイナーアクチナイドの分離技術の開発、核融合炉の開発において不可欠な放射性水素の拡散防止対策、金属材料の水素脆化や応力腐食割れ、さらには地層処分時の地下水による腐食リスクの評価などが挙げられる。水素の物性はこれらの多くの場面で極めて重要な役割を果たしており、その基盤となる水素の微視的な振る舞いを解明することが不可欠である。一方で、環境・エネルギー問題への関心が高まる中、水素を次世代のエネルギー源として活用する取り組みも注目されている。日本政府は 2020 年に温室効果ガス排出量を実質ゼロにする「脱炭素社会」を目指すことを宣言し、2022 年にはグリーントランスフォーメーション (GX) 実現に向けた基本方針を策定した。この動きを受け、次世代燃料電池やバイオマス変換技術を含む水素利用技術に関連した材料設計のため、固体および液体材料中における水素の振る舞いを深く理解するための基礎研究と応用研究の重要性がますます高まっている。水素は、水などの液体、金属内部の固体、有機物質を含む生体分子など、様々な環境に広く存在する元素である。水素の特徴は、量子性を持ち、原子価を環境下で変化させ、物質内を移動しやすいことなどが挙げられる。これらの特性が、水素材材料の物性を多様で豊かなものにしている。一方で、水素は X 線に反応しないなど観測が難しい元素であり、計算科学に対する期待が高まっている。

申請者は、水素に関する計算科学的研究および計算科学技術の開発に取り組んできた。これまでの研究では、「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) や「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) を受賞するなど、成果を上げてきた。また、水素関連プロジェクトとして、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」(2018~22 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」(2021 年度~23 年度)、基盤研究 B「量子論的モデリングと機械学習の融合による水素エネルギー材料の第一原理設計の深化」(2024~26 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」(2023~25 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」(2023 年度~25 年度)などを進めている。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」(2020~22 年度)にも関わってきた。計算機利用成果は、国際誌論文などを通じて多数発表している。プロジェクト遂行にとって原子力機構の大型計算機利用は欠かせない。

## (2) 利用内容・結果:

当初研究計画に沿って、水素同位体系、固体材料中の水素拡散、水溶液系の第一原理分子動力学計算開発をそれぞれ行った。以下では、その成果を列挙する。

### a) 水素同位体系

第一原理分子動力学法は、原子の集団運動を追跡しながら電子状態を計算するシミュレーション手法として広く用いられてきた。しかし、この手法では、物質中の水素の振る舞いを正確に表現することが難しい。これは、軽い水素原子核が電子と同様に量子力学的な影響を強く受けるためである。特に、同位体の熱物性を正確に評価するには、ゼロ点振動やトンネル効果など、量子揺らぎを考慮することが不可欠である。このような背景から、量子統計力学に基づく経路積分法が開発されてきたが、計算コストが非常に高いため、適用可能な時間スケールに制約がある。

そこで、第一原理計算を模倣可能な機械学習ニューラルネットワークポテンシャルに着目した。このポテンシャルは、エネルギー誤差を 1 meV 程度に抑えながら第一原理計算を再現でき、さらに大幅に高速であるため、長時間のシミュレーションが可能となる。従来は無機材料系に主に適用されてきたが、技術の進展により分子系への応用が広がっている。本研究では、機械学習ポテンシャルを自動生成する自己学習法を改良し、経路積分法を取り入れた「自己学習経路積分ハイブリッドモンテカルロ法」を確立した。これにより、第一原理経路積分分子動力学計算の精度を落とすことなく 30 倍程度加速することに成功した(図 1)。さらに、これを用いて軽水と重水の構造解析を行って、密度汎関数依存性を検証した。その結果、RPBE/D3 および RPBE0/D3 汎関数を用いたモデルが実験結果を最もよく再現することが明らかになった(J. Chem. Phys., 161, 204109 (2024))。

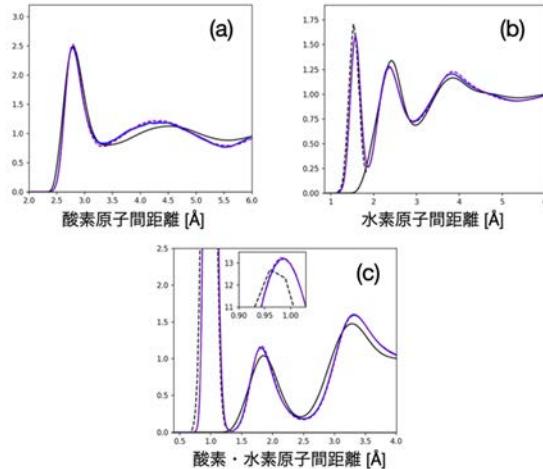


図 1：水の動径分布関数：実験（黒）、第一原理経路積分分子動力学計算（紫）、自己学習経路積分ハイブリッドモンテカルロ計算（青）

### b) 固体材料中の水素拡散系

水溶液中の水素が金属表面に吸着すると、原子状の水素が表面上を速やかに移動して高い化学活性を示すと考えられている。そのため、金属表面での水素の拡散挙動を理解することは、水・金属界面での化学反応による炉材や電極の腐食問題の観点から基礎的に重要である。実験的測定によると、金属表面における水素の拡散係数は非アレニウス型の温度依存性を明確に示す。これは、高温で見られるべき熱拡散と低温で見られるべき量子拡散（トンネリング）という二つのメカニズムが共存するためであると説明されている。しかし、この仮説を検証すべく水素拡散係数の温度依存性を系統的かつ定量的に評価することには実験的限界があり、その推定を理論計算で実現することが長らく求められていた。

これには、正確な原子間相互作用に基づき、熱拡散と量子拡散の両方を考慮したシミュレーションを行う必要がある。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た上で、熱・量子効果を考慮した経路積分分子力学法で計算を行った（Phys. Rev. Res., 6, 043224 (2024)）。水素貯蔵金属として使用される面心立方パラジウム（Pd）表面での水素拡散を計算した結果、トンネル効果のため 200 K 以下では量子論での拡散係数が古典論とずれていることがわかった（図 2）。このトンネル効果は Pd 内部拡散の場合に比べて著しく大きい。また、高温では表面拡散経路に加えて、サブ・サーフェスの拡散経路が分岐して現れることを新たに見出した。

### c) 水溶液系の第一原理分子力学法開発

セルロースは、大量に廃棄されるバイオマスの主要成分であり、その再利用はグリーンケミストリー分野における長年の課題である。セルロースは、一般的な酵素による加水分解が困難であるため、水溶液中での環境に優しいセルロース変換経路の探求が進められている。その中でも、高圧水素と担持金属触媒の存在下で、セルロースが水中で加水分解と水素化反応を起こし、医薬品の前駆体であるソルビトールを高い選択性で生成する経路が注目されている。しかし、担持金属触媒の種類によって反応効率が大きく異なるなど、そのメカニズムに関する知見が不十分な状態である。このような背景から、

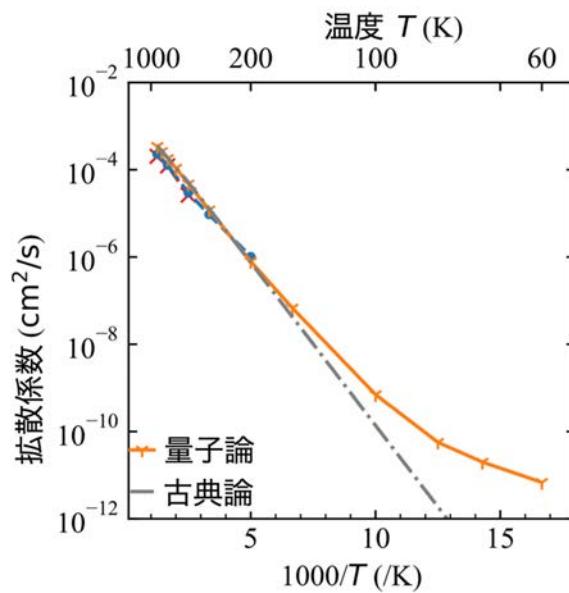


図2：Pd(111)表面上の水素拡散係数の温度依存性

水溶液や固体表面における反応機構の計算科学的研究が重要視されている。

本研究では、密度汎関数理論計算およびメタダイナミクス計算を活用し、セルロースのモデル化合物であるセルロビオースの金属触媒による加水分解および水素化のメカニズムを検討した (Chem. Phys. Lett. 845, 141285 (2024))。具体的には、白金 (Pt) およびパラジウム (Pd) の金属/水界面に吸着した水素原子が関与する反応経路ならびにシリカ支持体/水界面に漏出した水素イオンが関与する反応経路を解析した。Pt および Pd 搅拌シリカ触媒を用いて、水溶液中でのセルロビオース加水分解およびグルコース水素化を調査した結果、これらの反応において、Pt/水界面での自由エネルギー障壁が Pd/水界面での障壁よりも大幅に低いことが明らかとなった。この結果は、Pt が Pd よりも優れた触媒であるという実験結果を支持するものである。また、セルロビオース加水分解に関しては、金属/水界面での直接反応に加え、シリカ支持体に漏出した水素イオンが関与する反応も発生し得ることが示唆された。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等) :

- 1) Thomsen, B., Nagai, Y., Kobayashi, K., Hamada, I., Shiga, M., "Self-Learning Path Integral Hybrid Monte Carlo with Mixed Ab Initio and Machine Learning Potentials for Modelling Nuclear Quantum Effects in Water", J. Chem. Phys., 161, 204109 (2024).
- 2) Kataoka, Y., Haruyama, J., Sugino, O., Shiga, M., "Predictive evaluation of hydrogen diffusion coefficient on Pd(111) surface by path integral simulations using neural network potential", Phys. Rev. Res., 6, 043224 (2024) .
- 3) Tsuchiya, J., Shiga, M., Tsuneyuki, S., Thompson, E. C., "Nuclear quantum effect on the elasticity of ice VII under pressure: A path-integral molecular dynamics study", Phys. Rev. Res., 6, 023302 (2024).
- 4) Nagai, Y., Iwasaki, Y., Kitahara, K., Takagiwa, Y., Kimura, K., Shiga, M., "High-temperature atomic diffusion and specific heat in quasicrystals", Phys. Rev. Lett., 132, 196301 (2024).
- 5) Nakata, Y., Sasaki, T., Thomsen, B., Shiga, M., "Theoretical Study of Cellobiose Conversion by Supported Metal Catalysts", Chem. Phys. Lett., 845, 141285 (2024) .
- 6) 【国内会議】志賀基之, "ハイドロジェノミクス x 機械学習ポテンシャル", 第 34 回 MRS-J 年次大会 (2024/12/17), 横浜, 招待講演.
- 7) 【国内会議】志賀基之, "Quantum molecular dynamics with neural network potentials", 化学系学協会東北大会 (2024/9/15), 秋田大学, 招待講演.

### 5.10.3 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

AI・DX 基盤技術開発室

##### (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、福島第一原子力発電所での燃料デブリの物性評価にも適用が期待される。

本年度は二酸化プルトニウムの第一原理計算を効率化するための手法開発と機械学習分子動力学を用いた熱伝導率評価手法の開発について報告する。

##### (2) 利用内容・結果:

本研究の最終的な目標は、二酸化アクチニドに対する機械学習分子動力学ポンティシャルの構築とそれを用いた物性評価法の開発である。今年度は学習データ作成のための第一原理計算手法の整備および機械学習分子動力学を用いた熱伝導評価手法の構築の2つの成果について報告する。

## 1. スピン軌道相互作用を考慮した非磁性状態に拘束した第一原理手法の構築

二酸化プルトニウムは常磁性体であることが知られている。この状態は強相関効果を取り入れた密度汎関数法(DFT+U)に、さらにスピン軌道相互作用を考慮することで再現することが可能である。しかし、強磁性等の磁気秩序を持った状態の方がより低いエネルギーが得られてしまう。つまり、計算上は基底状態であるはずの非磁性状態は準安定状態となってしまう。そのため、第一原理分子動力学などでは、非磁性状態で計算を始めても、より安定な磁性状態へと遷移するため、非磁性のままで計算を行うことが困難である。そこで、強制的に非磁性に拘束するような第一原理計算を開発した。具体的には、ポテンシャル中に含まれる磁場に相当する部分を常に0にすることによって、磁性が発生しないようにした。この手法を第一原理計算コードVASPに導入し、二酸化プルトニウムに対して適用した。図1に示すような少し歪んだ結晶構造を持つ二酸化プルトニウムに対して、第一原理計算を行うと、初期状態を非磁性にしても、最終的には強磁性になってしまう(表1参照)。これに対して、非磁性に拘束する第一原理計算を用いると、エネルギーが強磁性に比べて高くなるものの、非磁性状態が得られた。これによって、機械学習分子動力学のための学習データに磁性、非磁性の状態が混ざることなく非磁性に統一したデータを構築できるようになり、信頼性の高い機械学習分子動力学が可能となった。

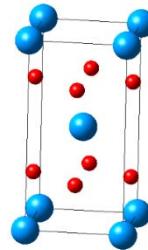


図1：表1の計算に用いた歪んだPuO<sub>2</sub>の結晶構造。大きい球がPu、小さい方がO原子を表す。

表1：非磁性拘束がある場合とない場合で、第一原理計算で得られる磁気モーメントとエネルギー

非磁性拘束	初期状態	磁気モーメント( $\mu_B$ )	エネルギー差(eV)
なし	強磁性	0.45	-0.3
なし	非磁性	0.46	-0.3
あり	非磁性	0	0.0

## 2. 機械学習分子動力学を用いたグリーン久保法による熱伝導率評価手法の開発

分子動力学で熱伝導率を求める方法はいくつかあるが、グリーン久保公式を用いた方法では、平衡系での計算であり、シミュレーションサイズの効果などが小さく、比較的信頼性の高い熱伝導率の評価が可能である。しかし、この方法では熱流を厳密に定義する必要があるが、機械学習分子動力学でよく用いられるBehler-Parinelloの高次元ニューラルネットワークポテンシャルに対する熱流の定義が明らかにされていなかった。こ

れに対して、まず熱流の定義を明らかにし、それを分子動力学ソフト LAMMPS に実装した。実際に  $\text{CaF}_2$  の機械学習ポテンシャルを用いて、熱伝導率を計算した結果が図 2 である。計算結果は概ね実験値と一致している。これにより、今後、平衡系を用いた熱伝導率の計算に対して機械学習ポテンシャルを利用することが可能となった。

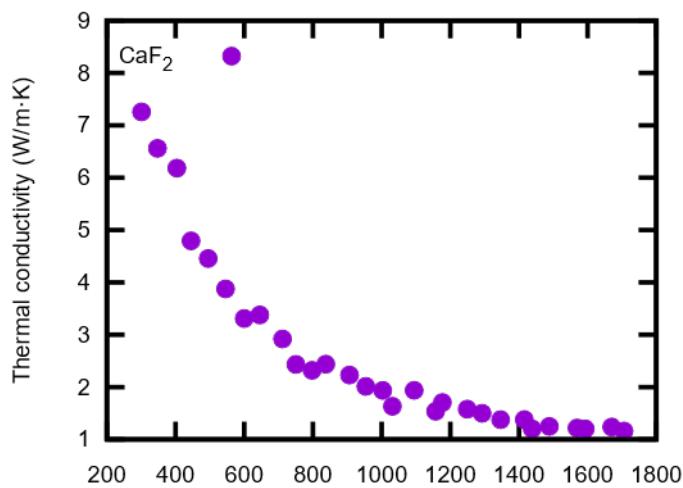


図 2 :  $\text{CaF}_2$  の熱伝導率

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等) :

#### 査読付き会議録

- 1) Hiroki Nakamura, Masahiko Machida, "EFFECTS OF MAGNETIC ORDERING ON THE GROUND-STATE ENERGY OF PLUTONIUM DIOXIDE: A STUDY USING ADIABATIC CONNECTION FLUCTUATION-DISSIPATION THEORY", Proceedings of the 31st International Conference on Nuclear Engineering, 2024, 134660.

### 5.10.4 粘土鉱物へのラジウムの吸着構造の解明

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

山口 瑛子、奥村 雅彦、小林 恵太  
AI・DX 基盤技術開発室

##### (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。さらに近年、がん治療薬の原料としても  $^{226}\text{Ra}$  は着目を集めており、Ra の環境動態解明の重要性は益々高まっている。しかし、Ra に安定同位体が存在せず、一定量あたりの放射能が高いこと、さらに  $\alpha$ 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、その吸着様態や吸着機構には未解明な点が多く残されている。そこで本課題では、大型計算機を用いて Ra の粘土鉱物吸着反応を明らかにすることを目指し研究を進めている。粘土鉱物は複雑な構造をしているため、その詳細を解明するには実験だけでは難しく、大型計算機を用いた第一原理計算が重要である。これまでの研究成果から、ラジウムが粘土鉱物に強く吸着すること、セシウム (Cs) と同様の挙動であることが明らかになった。そこで令和 6 年度では、より扱いやすい Cs に着目し、実験と第一原理計算を相補的に利用することで、吸着濃度に依存した構造変化を詳細に明らかにすることを目指した。

##### (2) 利用内容・結果:

粘土鉱物は様々な元素の環境動態を支配する重要な鉱物であるにも関わらず、その吸着反応にはまだ未解明な点が多く残されている。その原因の一つは、粘土鉱物がミクロスケールで複雑な構造を持ち、複数の吸着サイトを持つことである。吸着サイトは、それぞれ吸着容量と Cs に対する親和性が異なるため、Cs の吸着濃度に応じて主要な吸着サイトが変化することが知られている。一般に、粘土鉱物に吸着した Cs についてミクロスケールの情報を得るために、高濃度で吸着した試料を用いた分子レベルの実験が必要になるが、環境試料中では低濃度で吸着していることが多い。そのため、分子レベルの実験で得られたミクロスケールの情報が、環境中では成り立たない恐れがあった。

一般に粘土鉱物は、ケイ素(Si)の酸化物などで構成された四面体シートとマグネシウム(Mg)の酸化物などで構成された八面体シートが組み合わさって層を構成している(図)

1)。特に吸着容量が大きく環境中で重要な粘土鉱物(vermiculiteやsmectiteなど)は2:1型粘土鉱物であり、八面体シートを四面体シートがサンドイッチするような構造の層を持つ。元素の置換によって層は負電荷を持ち、その負電荷を補うために陽イオンが層間に吸着する。その際、脱水したイオンが吸着した場合は層間距離が1.0 nm程度に収縮し、水和したイオンが吸着した場合は層間距離が1.4 nm程度に膨潤する。両者に挟まれた楔形のエリアをFrayed edge site(ほつれたエッジサイト; FES)と呼ぶ。これまでの研究から、Cs<sup>+</sup>が吸着する際、低濃度であればFESに吸着し、高濃度であれば収縮した層間サイトに吸着すると考えられているが、中程度の濃度における吸着構造は不明で、どのように吸着サイトが移り変わっていくかも未解明であった。

そこで本研究では、比較的低濃度でミクロスケールの構造が得られるExtended X-ray absorption fine structure(広域X線吸収微細構造; EXAFS)法を用い、幅広い濃度で粘土鉱物に吸着したCsを測定した。その結果、Csとその隣接する酸素の距離(Cs-O)が系統的に変化する様子が捉えられた。この結果を説明するためには、2つのシナリオが考えられる(図2)。1つは、層間が少しだけ開いたサイト(拡張したFES)への吸着で、もう1つは層間が大きく開いたサイト(膨潤した層間)への吸着である。両者の違いがCs-Oに及ぼす影響を調べるために、層間が

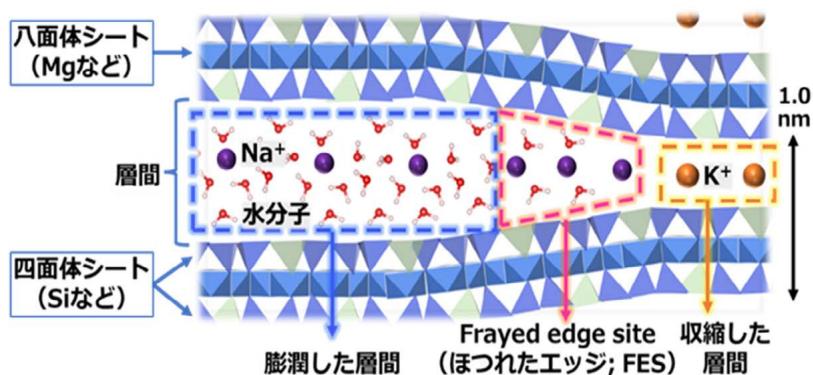


図1 粘土鉱物のミクロスケールの構造と吸着サイト

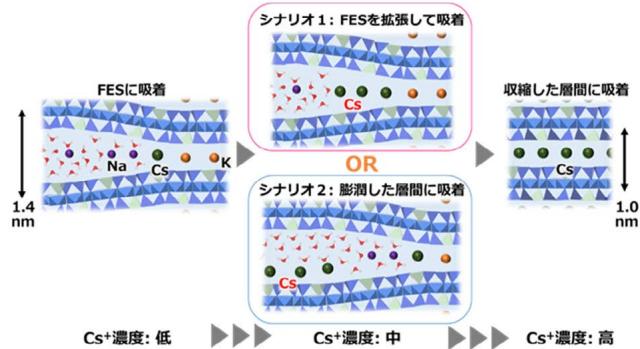


図2 考えられる2つのシナリオ

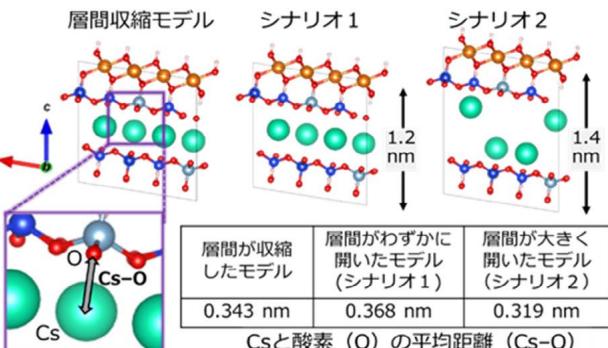


図3 Csが粘土鉱物に吸着したモデルとCs-O

わずかに開いた場合と大きく開いた場合の粘土鉱物のモデルを作成し、第一原理計算によって構造最適化を行った。その結果、層間が少しだけ開いた場合は、Cs が中心に存在し Cs-O が大きくなる一方で、層間が大きく開いた場合は、Cs が片方の層に寄って存在し Cs-O が小さくなることがわかった（図 3）。EXAFS の実験結果では、Cs-O が増加していく様子が捉えられていたことから、層間が少しだけ開いたサイトに吸着する、シナリオ 1 がより現実的であることがわかった。

さらに本研究では、Cs の結合性についても評価を行った。これまでの研究から、Cs が粘土鉱物に強く吸着することは知られているが、その原因については複数の主張があり、共有結合を原因とする主張もあった。そこで本研究では、High-energy resolution fluorescence detection X-ray absorption near edge structure（高分解能蛍光検出 XANES; HERFD-XANES）を用い、粘土鉱物に吸着した Cs の結合性を評価した。その結果、Cs は吸着サイトに依らずイオン結合性が高いことが明らかになった。さらに、第一原理計算による結合性の評価も行ったところ、整合する結果が得られた。これらのことは、Cs が粘土鉱物に強く吸着する原因是共有結合ではなく、Cs+のイオン半径が大きいために粘土鉱物の層構造への親和性が高いことと Cs+が脱水しやすいことが原因であるとする、これまでの我々のグループの研究結果を支持するものである。また、濃度によらず結合の性質が変わらないことから、高濃度試料の実験で得られたミクロスケールの知見を環境中の試料にも応用できると考えられる。これらの結果はまとめて国際学術誌に掲載され、プレス発表を行った。

#### 参考文献:

- [1] F.M. Michel et al., The structure of ferrihydrite, a nanocrystalline material. Science 316, 1726–1730 (2007).
- [2] A. Manceau et al., PDF analysis of ferrihydrite: critical assessment of the under-constrained akdalaite model. Am. Mineral. 99, (2014).
- [3] M. Sassi et al., Roles of Hydration and Magnetism on the Structure of Ferrihydrite from First Principles. ACS Earth Space Chem 102–108 (2019).
- [4] D. Langmuir Aqueous environmental geochemistry; Prentice Hall: Upper saddle river, 1997.
- [5] Z. Szabo et al., Occurrence and geochemistry of radium in water from principal drinking-water aquifer systems of the United States. Appl. Geochemistry 27, 729–752 (2012).
- [6] M.A. Chen et al., Radium sorption to iron (hydr)oxides, pyrite, and montmorillonite: Implications for mobility. Environ. Sci. Technol. 52, 4023–4030 (2018).

**成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

## [論文]

- 1) A. Yamaguchi, M. Okumura, N. Kawamura, Y. Takahashi, Adsorption structures and bonding states of cesium and barium adsorbed on various sites of vermiculite, *Science of The Total Environment*, 964, 2025, 178585.

## [国内会議]

- 2) 山口 瑛子, 高橋 嘉夫, 奥村 雅彦, 高分解能測定とシミュレーションの相補的利用による XANES の新展開; 黒雲母風化反応の解明, 日本地球惑星科学連合 2024 年大会(JpGU Meeting 2024), 2024/05 (招待講演).
- 3) 山口 瑛子, 高橋 嘉夫, 奥村 雅彦, XANES のシミュレーションと高分解能測定による風化黒雲母中の Fe 酸化反応の解明, 日本放射化学会第 68 回討論会(2024), 2024/09.
- 4) 山口 �瑛子, 高橋 嘉夫, 奥村 雅彦, 黒雲母風化作用における素過程の解明; XANES の高分解能測定と第一原理計算の相補的利用, 2024 年度日本地球化学会第 71 回年会, 2024/09.

## [国際会議]

- 5) A. Yamaguchi, M. Okumura, Y. Takahashi, Advancing understanding of biotite weathering reactions: XAFS and ab initio simulation insights, 61st Annual Meeting of The Clay Minerals Society, 2024/06.
- 6) A. Yamaguchi, M. Okumura, Y. Takahashi, Oxidation of iron in mica induced by weathering investigated by HERFD-XANES measurements and ab initio calculations, Goldschmidt Conference (Goldschmidt 2024), 2024/08.

## [プレス発表]

- 7) 「セシウムはどのように土に吸着するのか?—高精度なシミュレーションと実験が解き明かすナノスケールの世界—」 2025 年 2 月 6 日.

## 5.10.5 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、山口 瑛子  
AI・DX 基盤技術開発室

#### (1) 利用目的:

原子力分野においては、既存の分子シミュレーション技術では扱いが難しい多様で複雑な物性に対し、高精度なシミュレーションの実施が求められている。例えば、コンクリートや粘土鉱物における放射性物質の移行・吸着過程を理解するためには、水溶液および物質内部での放射性核種の拡散や化学反応を考慮した分子シミュレーションが必要である。また、福島第一原子力発電所での過酷事故のような状況下では、溶融燃料の詳細な物性を把握することが重要となる。さらに、高精度シミュレーションの実現は、中性子やX線回折などを用いた複雑・非晶質物質の構造解析を補完する意味でも重要である。

これらの複雑な物性を原子レベルで解析するには、古典分子動力学が有用と考えられる。しかし、古典分子動力学は経験的パラメーターに強く依存するため、シミュレーション結果の信頼性を十分に検討する必要がある。一方で、経験的パラメーターに依存しない高精度な手法として量子力学計算に基づく第一原理計算があるが、その計算コストの高さから、扱えるシステムサイズやシミュレーション時間に大きな制約がある。

本課題では、第一原理計算データを学習することで、第一原理計算と同等の精度を保ちながら大規模分子動力学シミュレーションを可能とする機械学習分子動力学法を用い、原子力分野における複雑物性の高精度解析を目指す。この際、第一原理計算データの作成には大型計算機の利用が不可欠である。具体的な研究対象には、核燃料物質の融解を含む超高温物性、アモルファスシリカおよびアルミナの高精度な構造解析、セメントや粘土鉱物における放射性核種の吸着挙動が含まれる。また、核燃料の融解・凝固現象を明らかにするため、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。さらに、セメントや粘土鉱物が非晶質的な構造を持つことから、こうした複雑な非晶質構造を解析するための機械学習分子動力学法の開発を進める。

#### (2) 利用内容・結果:

##### アモルファスシリカにおける元素置換が熱膨張率に及ぼす影響の解析

アモルファスシリカにチタン元素を添加した場合の物性評価を可能とする機械学習力場の開発を行った。アモルファスシリカにチタン元素を少量添加することで熱膨張率が減少することが知られている。このような低熱膨張ガラスは、低温から高温までの極限環境下で使用可能な高性能レンズなどにおいて重要である。本課題では、Si-Ti-O三元素系の

非晶質力場を開発し、チタン添加ガラスの線熱膨張率を計算した。図1は、チタン添加シリカガラスの線熱膨張率における組成および温度変化を示したものである。チタンの添加により熱膨張率の減少を再現できていることが確認された。また、アモルファスシリカの熱膨張率にはガラス中の局所構造が大きな役割を果たしていることを明らかにした。

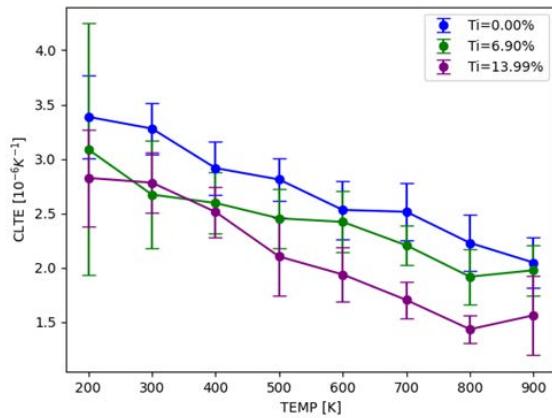


図1. アモルファスシリカの線熱膨張率(CLTE)に対するチタン添加の影響

### 核燃料の融解現象を記述可能な機械学習力場の構築に向けた技術開発

二酸化プルトニウムなどでは、局在したf軌道が開殻となることから、f電子間の強相関効果が強く働く。また、これに加え、その重い原子系として相対論効果の考慮も必要となる。これらの効果を含む第一原理計算は、通常の方法に比べ計算時間が大幅に増加する。そのため、本研究では機械学習力場の構築に必要なデータ生成を効率化する技術の開発を行った。

具体的には、Farthest Point Sampling、Bootstrap法、△機械学習を組み合わせることで、少ないデータ数で二酸化プルトニウムの機械学習力場を構築する手法を開発した。また、この手法を基に、同様の(逆)萤石構造を有する二酸化トリウムおよび酸化リチウムの機械学習力場を構築し、それぞれの高温熱物性を解析した。約1000件の第一原理計算データを用い、各種物性値を高精度に再現可能であることを確認した(表1)。二酸化トリウムおよび酸化リチウムの高温物性解析では、主に高温での比熱異常を対象とした。核燃料物質や酸化リチウムでは、高温で酸素(リチウム)の異常拡散が発生し、プレディック転移と呼ばれる比熱異常が引き起こされる。この現象は秩序無秩序転移の一種であるが、複数の酸素(リチウム)原子が短時間で複雑に移動するため、特徴付けは容易ではない。本研究では、液相・液相転移の解析に用いられる局所秩序変数の方法を援用

表1. 酸化リチウムの物性値に対する計算値と実験値

物性値	計算	実験
格子定数 (300K) [Å]	4.601	4.610, 4.628
線熱膨張率 [ $10^{-6} \text{K}^{-1}$ ]	34.01	33.6
超イオン電導開始温度 [K]	1210	1200
ブリディック転移温度(比熱ピーク) [K]	1560	None
融点 [K]	1720	1711
フレンケル欠陥形成エネルギー [eV]	2.29	2.10, 2.6
拡散活性化エネルギー [eV]	2.44	2.52

二酸化トリウムおよび酸化リチウムの比熱異常を特徴付けた。二酸化トリウムおよび酸化リチウムについては、酸素（リチウム）原子が形成する局所的な八面体構造を特徴付ける秩序変数を定義し、比熱異常時の局所秩序状態の変化を計算した。図2(a)-(b)は、二酸化トリウムおよび酸化リチウムにおける酸素（リチウム）の局所八面体秩序変数の分布を示している。 $Q \approx 1$  は八面体秩序が保たれている状態を示し、 $Q < 0.75$  は八面体秩序が崩れた状態に対応する。ブレディック転移温度( $T_c$ )前後において、局所秩序変数分布が八面体秩序状態に対応するピーク( $Q \approx 1$ )から不規則な状態に対応するピーク( $Q < 0.75$ )へと遷移していく様子が確認され、局所秩序変数によりブレディック転移（秩序無秩序転移）を特徴付けることが可能であることが示された。また、図2(a)-(b)では、八面体秩序が崩れた領域( $Q < 0.75$ )に特徴的な二つのピーク構造( $Q_2, Q_3$ )が存在することが確認された。 $Q_2$ は格子欠陥的な局所構造を、 $Q_3$ は液体的な特徴を持つ局所構造を表すことを明らかにした。さらに、 $Q_2$ および $Q_3$ のピークは相転移点において融合し、ブレディック転移後は液体的な局所構造が主要となることを確認した。

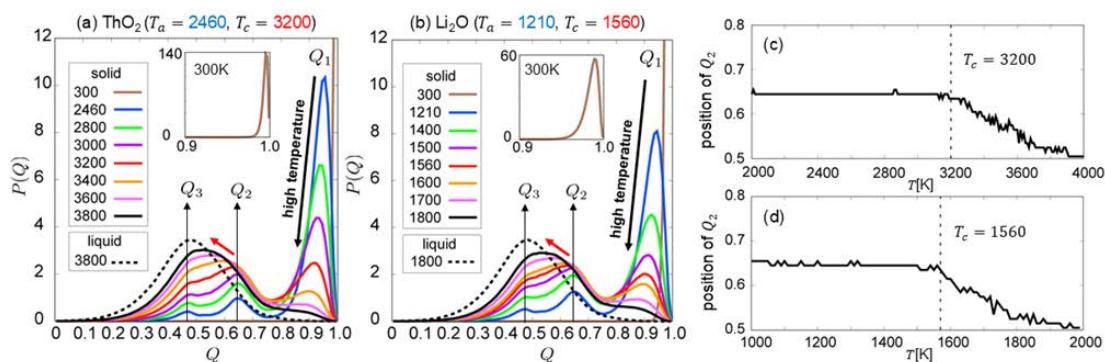


図 2. (a):二酸化トリウムにおける酸素局所八面体秩序変数分布の温度変化。(b):酸化リチウムにおけるリチウム局所八面体秩序変数分布の温度変化。(c)-(d):二酸化トリウム(c)と酸化リチウム(d)における $Q_2$ ピークの位置の温度変化。相転移点において $Q_2$ ピークと $Q_3$ ピークが融合することが解る。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

[論文]

- 1) 【AA20240628】【投稿中】【査読有】【IF=3.1】【謝辞: This calculations were mainly performed on the supercomputing system HPE SGI8600 in the Japan Atomic Energy Agency.】 Keita Kobayashi, Hiroki Nakamura, Masahiko Okumura, Mitsuhiro Itakura, and Masahiko Machida, Specific Heat Anomalies and Local Symmetry Breaking in (Anti-)Fluorite Materials: A Machine Learning Molecular Dynamics Study (投稿時期: 2025 年 1 月, 投稿先: The Journal of Chemical Physics).

[国内会議]

- 2) 小林 恵太, 中村 博樹, 奥村 雅彦, 板倉 充洋, 町田 昌彦, 機械学習分子動力学法を用いた萤石構造における高温比熱異常の解析, 第 38 回分子シミュレーション討論会, 姫路, 2014 年 12 月.
- 3) 小林 恵太, 中村 博樹, 奥村 雅彦, 板倉 充洋, 町田 昌彦, 萤石構造における比熱異常の局所秩序変数を用いた特徴づけ; 機械学習分子動力学法による解析, 日本原子力学会 2024 年秋の大会, 東北大学, 2014 年 9 月.

[国際会議]

- 4) Keita Kobayashi, Akiko Yamaguchi, and Masahiko Okumura, Machine learning molecular dynamics study of hydrated kaolinite under high pressure, 61st Annual Meeting of The Clay Minerals Society, 2024/06.

[解説記事(依頼)]

- 5) 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の構造解析”, NEW GLASS, 39 卷, 2 号(2024).

## 5.10.6 構造材料の第一原理計算

### DFT Calculation of Structural Materials

板倉 充洋、阿部 陽介、都留 智仁、山口 正剛、

海老原 健一、奥村 雅彦、小林 恵太、中村 博樹

AI・DX 基盤技術開発室

#### (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。その原因是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:

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。この課題を解決するための研究ロードマップを図 1 に示す。令和 5 年度には磁性を取り入れた機械学習ポテンシャルを開発、これを用いてステンレスの完全結晶における有限温度でのフォノン分散を 6000 原子を用いた計算により評価し実験と高精度に一致する結果を得てその有効性を実証した。

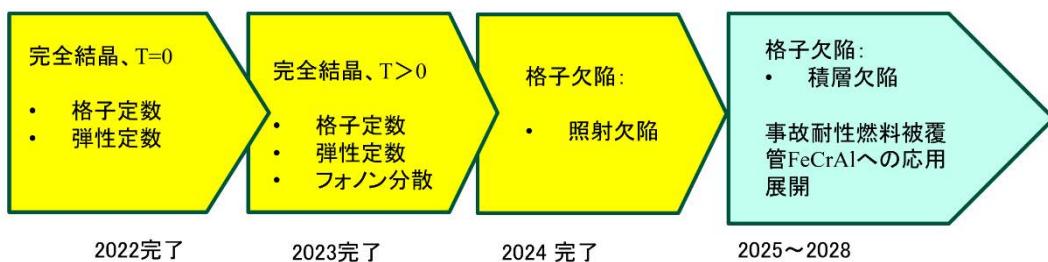


図 1：ステンレス鋼の機械学習ポテンシャル開発ロードマップ

本年度はこの手法を発展させ、さらに照射挙動のモデル化を可能にするため、完全結晶に加えて空孔や格子間原子の計算を可能にするための計算手法を開発した。さらにこの手法を用いて多数の第一原理計算を行い機械学習の教師データを生成、機械学習ポテンシャルを開発し、ステンレス鋼における照射欠陥の拡散定数を評価し実験と比較することを行った。具体的には欠陥を含む、約 2000 ケースの第一原理計算の結果を学習して機械学習ポテンシャルを開発、これを用いて格子欠陥の移動エネルギーを評価した。

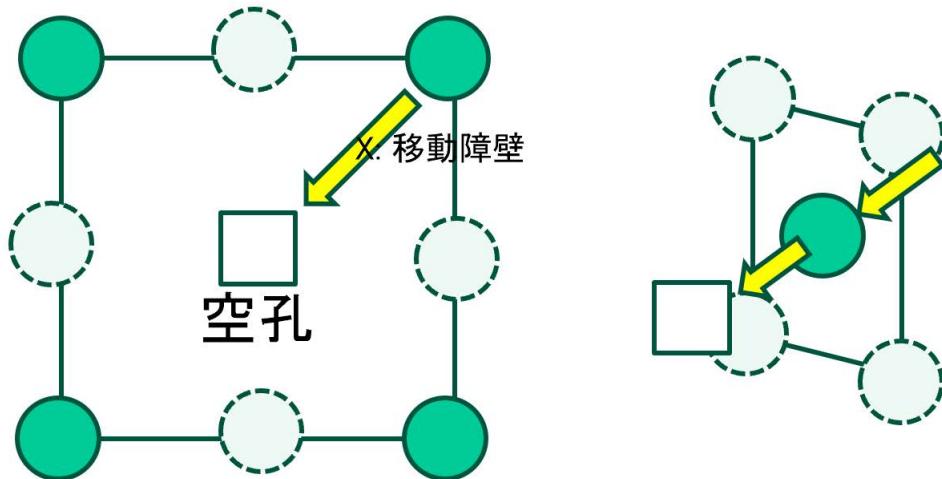


図 2：空孔の移動過程の模式図

図 2 に格子欠陥である空孔の移動過程を示す。ステンレス鋼は面心立方格子構造であり、原子空孔がある位置に隣接する原子が移動してくることで空孔位置が移動する。このとき、ちょうど中間の位置では薄い色で示した近隣の 4 原子に通常の原子間距離の 86%まで接近するため、反発によってエネルギーが高くなり、移動の障壁となっている。この障壁は移動する原子の種類および隣接する 4 原子の種類によって変化する。

格子空孔の移動エネルギーは合金配置の影響を受けてランダムな幅があるが、それを上回るような、磁性状態の違いによる有意な差が見られ、Cr20%, Ni15%の場合、平均の値は常磁性状態で 1.0eV、強磁性状態で 0.8eV、反強磁性状態で 1.2eV であった。既往文献ではほぼ同じ組成の SUS-321 合金が 1.21eV[1]、SUS-316L 合金が 0.9eV[2]と報告されている。また Cr, Ni を含まない γ 鉄では 1.0eV となっている[3]。これらの値との比較から、空孔の拡散は周囲の原子が強磁性状態に変化すれば低いエネルギーで可能であるが、そのような状態が実現するには長い時間がかかり、常磁性状態のまま高い障壁を越えて空孔が拡散するという過程を想定すると実験と一致することが分かった。

- [1] Dryzek et al., "Migration of vacancies in stainless steel measured by positron annihilation", Mater. Lett., 21, 209 (1994).
- [2] Holtzwarth et al., "Positron annihilation studies on the migration of deformation induced vacancies in stainless steel AISI 316 L", Appl. Phys. A73, 467 (2001).
- [3] Bowen and Leak, "Solute diffusion in alpha-and gamma-iron", Metal. Trans., 1 1696 (1970).

**(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):**

■ 口頭発表

- 1) 板倉充洋, 「マルチカノニカル法によるレアイベント発見手法の開発」 日本原子力学会 2025 年春の年会.

## 5.10.7 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  
AI・DX 基盤技術開発室

#### (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、土壤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壤の処理処分が新たな問題となっている。今後、除染除去土壤の一部は再利用される予定であり、残った除去土壤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事で、物質の様態を把握する。しかし、放射性物質を研究対象とする場合、測定自体が制限される。その一方、理論的手法は、研究対象をモデル化する必要があるため、現実の複雑な様態の把握が課題となる場合がある。しかし、第一原理計算手法等を用いる事で、物質の電子状態を知る事が可能になり、分子動力学計算を行うことによって、原子・分子のダイナミクスを知る事が可能になる。これらの特徴により、理論的手法は、物理・化学現象の根本的なメカニズム解明が可能である他、放射性物質の物性を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する。第一原理計算は高精度であるが計算コストが高いため、複雑な構造を持つ現実の物質を再現する事が難しい場合がある。そこで、高精度かつ低計算コストである計算手法である機械学習分子動力学法を用いる計算も並行して実施する。この手法は、第一原理計算の計算結

果を人工ニューラルネットワーク等に学習させて、それを用いて高精度かつ低計算コストの分子動力学法シミュレーションを実現する手法である。本課題では、機械学習分子動力学法コードの開発、コードの高速化及びGPU化も併せて実施する。

## (2) 利用内容・結果:

第四期中長期計画に基づき、本申請が対象とする廃炉、新型炉燃料、構造材料、地層処分に共通する原子・分子スケールシミュレーション手法である、機械学習分子動力学法に係る手法開発を実施する。また、これまで用いてきたオープンソースの機械学習分子動力学法コード n2p2 と我々の開発コードを用いて、廃炉、新型炉燃料、構造材料、地層処分に関する機械学習分子動力学法シミュレーションを実施する。

### 1. 機械学習分子動力学法コードの開発：達成度 30%

#### 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、将来の機械学習分子動力学法の発展を見越して、教師データのデータベースを作成する。そして、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 6 年度結果

令和 5 年度まで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 スクリプトのパッケージリリースを目指す。

令和 6 年度結果：統合 Python パッケージ作成ツール nbdev を導入し、コード開発、テスト、ドキュメント作成の統一的な実施体制を整えた。また、第一原理計算コード VASP の結果を json 形式に変換し、データベースソフトウェア MongoDB に格納する Python スクリプトを作成した。一方で、すぐにパッケージリリースできる程開発は進展しなかった。

### 2. 機械学習分子動力学法シミュレーション研究：達成度 20%

2.1. 廃炉関係： 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 6 年度は、上記機械学習分子動力学法 Python パッケージを用いて、機械学習ポテンシャルの完成を目標とする。

#### 令和 6 年度結果

今年度は下記 2.3 に集中したため、本項目は未達成。

2.2. 新型炉燃料関係：当室で開発した、 $\text{ThO}_2$ の機械学習ポテンシャルについて、より大きな系、より長い時間のシミュレーションを目指して、高速化する。令和6年度は上記 Python パッケージを用いて、自動で  $\text{ThO}_2$  の機械学習分子動力学ポテンシャルを作成することを目標とする。

#### 令和6年度結果

今年度は下記 2.3 に集中したため、本項目は未達成。

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。また、第一原理計算等を用いて有機物と放射性核種の相互作用を調べる。令和6年度はパイロフィライトの機械学習分子動力学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。

#### 令和6年度結果

今年度は粘土鉱物パイロフィライトを対象とする予定であったが、最近、高圧下のカオリナイト系の粘土鉱物について、新たに「ナクライトにおける層間水分子の氷化」という実験結果 (H. Huang et al., ACS Earth Space Chem. 4, 183 (2020).) の存在を知った。昨年度まで継続して開発していたカオリナイトはナクライトと同系列の粘土鉱物(カオリン系)であるため、開発済みの高圧化カオリナイトのための機械学習ポテンシャルを拡張して、この新しい現象の解析を試みた。

学習データは第一原理計算ソフトウェア Vienna Ab initio Simulation Package (VASP)、機械学習ポテンシャルの作成には n2p2、分子動力学法の実行には分子動力学コード Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) と n2p2 の LAMMPS インターフェースを用いた。

新たに、高圧化において層間に水分子を含むカオリナイトについて、第一原理計算を実施して追加の教示データを作成し、昨年度までのデータに加え、n2p2 で学習させた。作成した機械学習力場を用いて、LAMMPS で温度 300K における NpT 分子動力学シミュレーションを実施した。

その結果、圧力を高めていくと徐々に水分子の位置が固定されていくことがわかった(図 1(a)-(c))。圧力が 2.5 GPa の時は、水分子中の酸素原子の分布は、偏りがあるがはつきり定まっていない(図 1(a))。圧力が 5 GPa まで高まると、水分子中の酸素原子の分布はほぼ定まっていることがわかる(図 1(b))。そして、圧力が 7.5 GPa に到達すると、水分子中の酸素原子の分布ははつきりと一箇所に定まる(図 1(c))。これらの傾向は実験結果とコンシスティントであるが、粘土鉱物の微妙な構造の違い(実験はナクライト、計算はカオリナイト)については、さらなる検討が必要である。

本成果は国際会議で発表し、現在論文執筆中である。

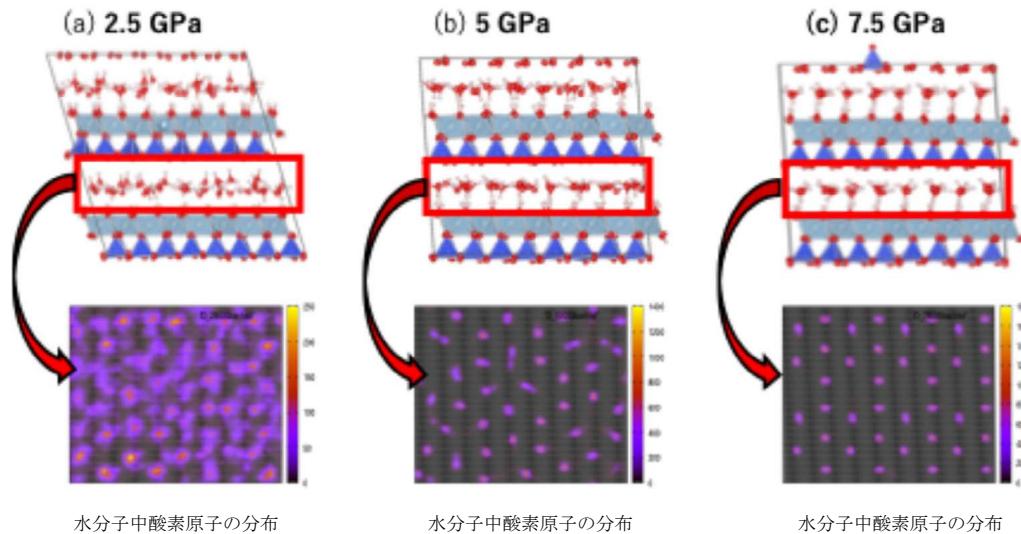


図 1. (a)2.5 GPa、(b)5 GPa、(c)7.5 GPaにおけるカオリナイト層間水分子中の酸素原子分布。白、赤、青、グレーの球はそれぞれ水素、酸素、珪素、アルミニウム原子を表す。

#### 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

##### 査読付き論文

- 1) 【5082557】【掲載決定】【査読有】【IF=2.2】M. Okumura, "Machine Learning Molecular Dynamics Simulations of Materials with Complex Structures," accepted for publication in Journal of Electronic Materials.
- 2) 【AA20240299】【投稿中】【査読有】【IF=3.1】Y. Nagai, M. Okumura, "Kolmogorov-Arnold networks in molecular dynamics," submitted to Physical Review Materials.

##### 国際会議

- 3) 【BB20240255】【招待公演】M. Okumura, "Machine learning molecular dynamics simulations; An Application of machine learning for material science," 51st IEEE International Conference on Plasma Science & 4th Asia-Pacific Conference on Plasma and Terahertz Science (ICOPS & APCOPTS 2024), Beijin, China, June 17th, 2024.
- 4) 【BB20240255】M. Okumura, K. Kobayashi, "Molecular dynamics study of ice in/on kaolinite under extreme conditions," 61st Annual Meeting of The Clay Minerals Society, Honolulu, USA, June 6th, 2024.

##### 国内会議/学会

- 5) 【AA20240299】【招待公演】奥村雅彦, 「機械学習分子動力学法: 基礎と応用」, 集積回路研究会(ICD), 金沢, 2024年09月27日.
- 6) 【BB20240784】奥村雅彦, 山口瑛子, 小林恵太, 「機械学習分子動力学法による粘土鉱物-水分子相互作用の解析」, 日本原子力学会 2024 年秋の大会, 仙台, 2024 年 09 月 11 日.

## 5.10.8 二相格子ボルツマン法による高速炉における気体巻き込みシミュレーションの効率向上

### Enhancing Efficiency of Gas Entrainment Simulation for Fast Reactors using Two-phase Lattice Boltzmann Method

Sitompul Yos、杉原 健太、井戸村 泰宏  
HPC・DX 基盤技術開発室

#### (1) 利用目的:

Japan is advancing the development of sodium-cooled fast reactors, aiming to operate a demonstration reactor by the 2040s. A key challenge in these reactors is preventing gas entrainment (GE), where argon gas is drawn into the sodium coolant by free-surface vortices, as shown in Fig. 1. Accurate numerical simulations are essential for predicting and mitigating this geometry-sensitive phenomenon.

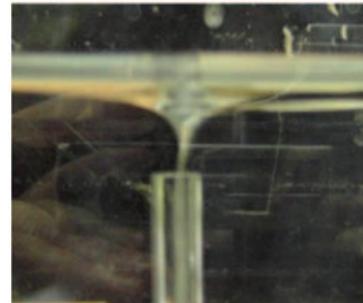


Fig. 1 . Gas entrainment phenomena  
(Oshima, H., TAESJ, 2012)

The NERGAL code has been used to simulate GE but is computationally expensive, requiring 2.5 months for a single analysis. To address this, the project explores the free-surface Lattice Boltzmann method (free-surface LBM), achieving similar simulations in less than an hour. However, the free-surface LBM struggles with surface tension modeling, leading to inaccuracies at high resolutions.

To improve accuracy, the project is transitioning to a two-phase LBM model that is better suited for capturing gas-liquid interfaces. Additionally, Adaptive Mesh Refinement (AMR) will be implemented to focus computational resources on regions near the gas-liquid interface and vorticities, enhancing accuracy and efficiency. These advancements aim to overcome GE challenges and support the safe development of sodium-cooled fast reactors.

The allocated large-scale computing resources will be used to validate the accuracy of GE simulations using the proposed two-phase LBM. The computing resources will be also used for testing a wide range of scenarios and developing our two-phase LMR/AMR code.

#### (2) 利用内容・結果:

##### 1) Goals to be achieved in FY2024

In FY2024, we aimed to efficiently simulate GE phenomena using LBM on a multi-GPU system and simulate the existing experiments. We specified four items: (a) free-

surface LBM simulation of basic experiments, (b) LMR and multi-GPU implementation, (c) simulation of JSFR test apparatus, and (d) extension to two-phase LBM. We set our achievement goal as to complete implementation of items (a)-(c), and partially of (d). We aimed for one domestic conference presentation and one peer-reviewed international proceeding or journal paper.

## 2) Research results for FY2024 and their importance

### (a) Free-Surface LBM Simulation

The free-surface Lattice Boltzmann method (LBM) was implemented and validated using Moriya et al.'s experiments (Moriya, CRIEPI, 1998). Simulations were performed with grid spacings ( $\Delta x$ ) ranging from 5mm to 0.625mm. Two free-surface LBM models were tested: one without a turbulence model and another with a CSM-LES model. Using CSM-LES, dissipation is added at small scales (grid size) and helps stabilize the computation, especially near the gas core tip.

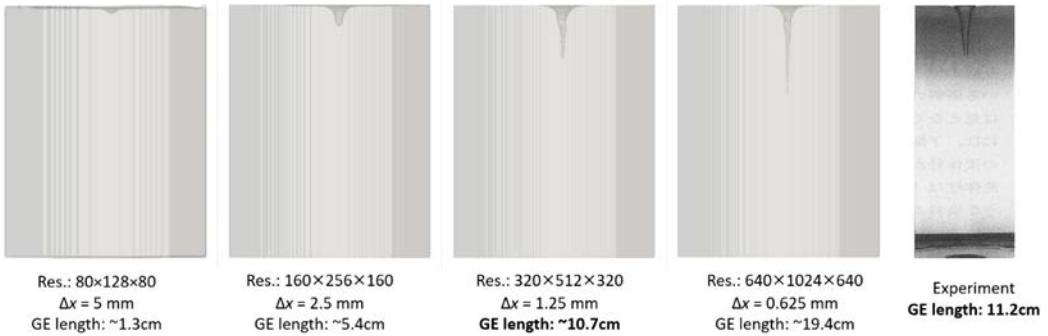


Fig.2. GE length simulated by free-surface LBM with CSM-LES on various resolution.

When the free-surface LBM was used without a turbulence model, thin gas layers formed at a medium resolution ( $\Delta x = 1.25$  mm). In contrast, the CSM-LES achieved good agreement with experiments at the same medium resolution. However, at higher resolutions ( $\Delta x = 0.625$  mm), thin gas layers reappeared even with the use of CSM-LES (Fig. 2). This issue was traced to the method's inability to accurately model surface tension, leading to the adoption of the more robust two-phase LBM for simulating gas-liquid interfaces. Performance-wise, a 250-second simulation with one million cells was completed in about one hour on a single NVIDIA V100 GPU, a significant improvement over NERGAL (Ito, K., PNST, 2011) that took 2.5 months on 64 HPC2500 CPUs.

### (b) LMR and Multi-GPU Algorithm Implementation

Furthermore, we have implemented multi-GPU algorithms, fully completed for free-surface LBM, and partially completed for two-phase LBM. For free-surface LBM, LMR implementation showed good agreement with uniform grids and achieved a 3x speedup using four refinement levels. Two-phase LBM requires further testing for higher refinement levels. Results, including uniform grid comparisons, were presented at two domestic and one international conference and published in a peer-reviewed proceeding.

### (c) JSFR test apparatus

We had to postpone this task to a later stage of research, as my focus shifted from free-surface LBM to two-phase LBM. Before conducting large-scale computations, it is essential to validate the two-phase method and confirm grid convergence. However, based on simulations of basic experiments, we anticipate that large-scale problems can be successfully simulated in the future within a few days using multi-GPUs.

### (d) Two-Phase LBM Simulation

In FY2024, we shifted to and implemented two-phase LBM, which provides improved simulation of gas-liquid interfaces. Validation confirmed that two-phase LBM more accurately captures surface tension effects. Unlike free-surface LBM, it avoids the issue of thin gas layers and delivers accurate results for flow profiles and GE depth using fine meshes ( $\Delta x = 0.625$  mm) as shown in Fig. 3. Although computation time increased by 30%, it remains feasible to simulate GE phenomena in fast reactors within few days. This marks the first successful application of two-phase LBM for GE simulations.

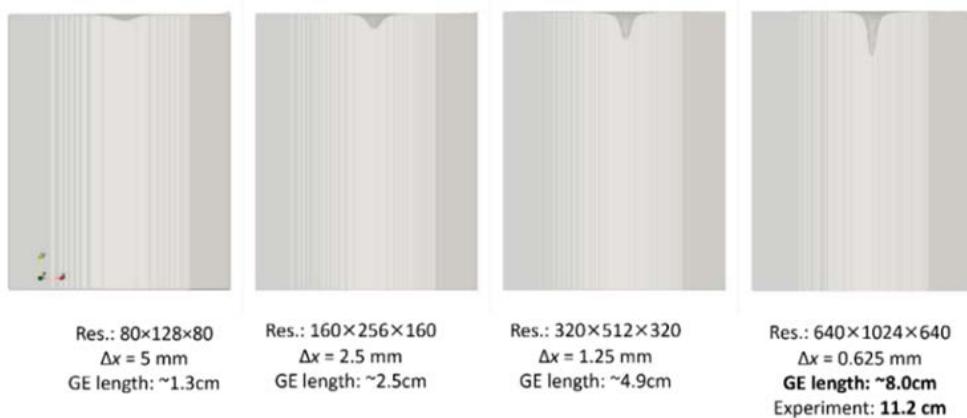


Fig.3. GE length simulated by two-phase LBM on various resolution.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 【5080918】【published】【peer-reviewed】【Numerical computation in this work was partially carried out on the supercomputer HPE SGI8600 at the Japan Atomic Energy Agency.】Y. Sitompul, K. Sugihara, N. Onodera, and Y. Idomura, "Gas Entrainment Simulation for Fast Reactors using Freesurface Lattice Boltzmann Method", EPJ Web of Conferences, Vol. 302, 2024, p. 05004, 10p.
- 2) 【5081078】【published】【non-peer-reviewed】【Numerical computation in this work was carried out on the supercomputer HPE SGI8600 at the Japan Atomic Energy Agency.】Y. Sitompul, K. Sugihara, S. Watanabe, N. Onodera, and Y. Idomura, "Towards Efficient Gas Entrainment Simulation for Fast Reactors: A Shift from Navier Stokes to Lattice Boltzmann Method", 計算工学講演会論文集 日本計算工学会, Vol. 29, 2024, pp. 648-652.

## 5.10.9 界面捕獲法を用いた気液二相流体計算における気泡合体モデルの開発

### Development of a Bubble Coalescence Model for Gas–Liquid Two-Phase Fluid Calculations Using the Interface Capture Method

杉原 健太、Sitompul Yos、井戸村 泰宏、伊奈 拓也、山下 晋

HPC・DX 基盤技術開発室

#### (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 格子解像度のバンドル体系の多相流体解析、さらに 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[Ren et al., Meas. Sci. Technol., 2018]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事が判明した



図 1 5x5 バンドル解析

(図 1 参照)。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)法を導入した。MPF 法は気泡同士の合体は取り扱えないため、気泡合体の理論モデルと組み合わせて利用することで、数値的合体ではなく理論モデルに基づいた気泡合体现象を取り扱える界面モデルの開発を進めている。

本研究における気液二相流計算は高密度比の気液界面を直接解析するため計算コストが高いため GPU スパコンを利用した。

#### (2) 利用内容・結果:

令和 6 年度課題の達成目標

令和 6 年度は以下の 2 点を達成目標として設定した。

- (a) Multi-Phase Field 法を用いた気泡合体モデルの構築
- (b) 国内会議発表 1 件、査読付国際会議論文あるいは雑誌 1 件

## 令和 6 年度の研究成果とその重要性

令和 5 年度に JUPITER-AMR コードに実装した界面モデルをベースに気泡合体モデルの開発を進めた。気泡流解析を実施してボイド率分布や速度分布などを実験と比較し妥当性検証を行った。

### (a-1) 円管内気泡流の基礎検証解析

気泡同士の合体を抑制することが可能な界面捕獲手法である MPF 法の基礎検証問題として図 2 に示すような円管内気泡流解析を実施し、実験結果との比較を実施した。実験における直径 40mm、長さ 3.17m の領域をそのまま解析領域とするのは非効率的であるため、本計算では周期境界条件を用いて定常解を求めた。しかしながら周期境界条件を適用すると計算境界において流速を固定することができないため、実験条件における流量を再現することが難しい。そこで、制御理論で広く用いられている PID 制御を利用した圧力勾配の動的制御により、指定流量の解析を可能とした（図 3 参照）。

図 2 のように流路方向を周期境界条件とし、重力を鉛直した方向に定義した。基礎方程式である Navier-Stokes 方程式の外力項を  $F_b = -\beta z + (\rho - \rho_{ave}) g$  のように系全体に一様に働く力  $\beta$ （平均圧力勾配と重力加速度の合算）と浮力項で定義した。Colin 等による実験の下降気泡流条件 “D3” と同様に、ボイド率 7.5%、気泡径 4.2mm、体積流束 0.823m/s を設定した。図 2 の計算領域に対して直交格子（256x256x384）を用いた。計算の各ステップで計測した体積流束  $j$  と目標値  $j_{target}$  との差を制御偏差  $e=j-j_{target}$ 、操作量を  $\beta$  と定義して  $e$  が減少するようにフィードバック制御を行った。図 4 に示すように体積流束はほぼ一定値を保ち、約 0.5 s で定常状態となった。また、本解析のボイド率と平均流速を Colin らの実験結果と比較した結果、良い一致が確認された（図 4、図 5 参照）。

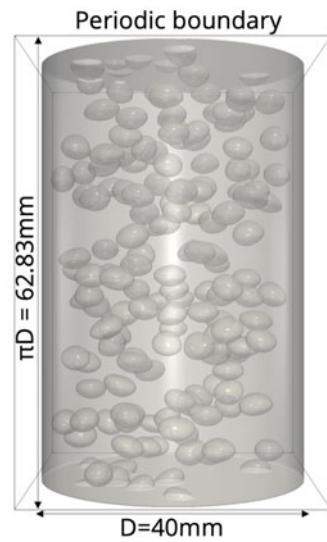


図 2 気泡流解析領域

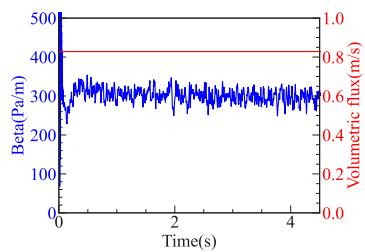


図 3  $\beta$  と体積流束の時間変化

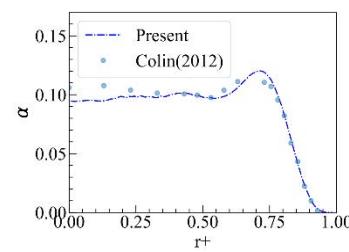


図 4 半径方向のボイド

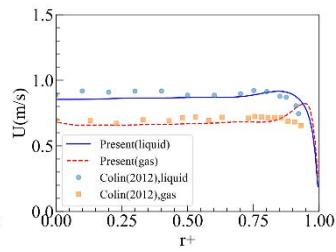


図 5 半径方向の速度

### (a-2) 気泡合体モデルの開発

気泡合体モデルを JUPITER-AMR コードに組み込むためには、流体計算の各時間ステップにおいて各気泡の物理情報を計測し、接触した気泡のペア毎に合体の可否判定を行う。気泡合体が発生する条件であれば、MPF 法の気泡 ID を同じ値に変更することで、表面張力計算における幾何計算において同一の相として計算されるため、表面張力によって 2 つの気泡が合体する。令和 6 年度課題では(a-1)の基礎検証解析に多くの開発期間を要したため、上記モデルの完成には至らなかった。

#### 【主な開発項目】

- 各種気泡サイズの取り扱い
- 各種気泡データ（位置、速度、直径）の取得
- 各種気泡の符号付距離関数の作成
- 接触判定
- 合体条件の設定
- 気泡 ID の変更と ID の並び替え

気泡合体モデルの主な開発項目の内、図 6 に示すようにサイズの異なる気泡の計算、気泡の位置・速度・直径データの計測などは完了した。各気泡のサイズや位置・速度などは気泡の流体率から計算した。残りの開発項目は令和 7 年度課題において実施し、モデルの開発および検証までを完了させる予定である。



図 6 計測した気泡情報の確認

#### 研究成果の重要性

気液界面の形状や動きを直接計算するタイプの気液二相流体計算は、原子力工学分野において広く用いられている平均化モデルを発展させる手法である。しかし、既存の界面モデルでは異なる界面同士が 2~3 格子程度まで接近すると数値的に合体してしまい、気泡同士の反発現象が再現できないという課題がある。本研究成果(a-1)によって気泡合体が発生しないような条件の気泡流解析が可能となり、(a-2)によって物理モデルに基づく気泡合体が可能な界面モデルの開発を進めることができた。また、実験条件として設定すべき流体の流量を陽的に与えることが難しい周期境界条件の計算に対して、PID 制御理論に基づくフィードバック制御を行うことで指定流量の解析を可能とした（成果 a-1）。本フィードバック手法は液体の温度を一定に保つような加熱調整などのような、より複雑な体系に対しても応用が期待できる。

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 【BB20240099】【出版済】【謝辞：本研究の計算の一部は日本原子力研究開発機構の大型計算機「HPE SGI8600」を使用した。記して謝意を示す。】杉原 健太、小野

寺 直幸、シトンプル ヨス、井戸村 泰宏、山下 晋、"Multi-Phase Field 法を用いた気泡流解析"、第 29 回計算工学講演会（6/10-12、神戸）.

- 2) 【BB20240092】【出版済】【謝辞：本計算は日本原子力研究開発機構の大型計算機「HPE SGI8600」を使用した。記して謝意を示す。】小野寺 直幸、杉原 健太、伊奈 拓也、井戸村 泰宏、"圧縮性 Navier-Stokes 方程式の定式化による気液二相流体計算の Poisson 高速化"、第 29 回計算工学講演会（6/10-12、神戸）.
- 3) 【BB20240083】【出版済】【査読有】【謝辞：Numerical computation in this work was partially carried out on the supercomputer HPE SGI8600 at the Japan Atomic Energy Agency】Kenta Sugihara, Naoyuki Onodera, Yos Sitompul, Yasuhiro Idomura, and Susumu Yamashita, "Bubble flow analysis using multiphase field method", SNA + MC 2024 (10/20-24, Paris), EPJ Web of Conferences 302, 03002 (2024).
- 4) 【BB20241985】【出版済】【謝辞：本研究の計算の一部は日本原子力研究開発機構の大型計算機「HPE SGI8600」を使用した。記して謝意を示す。】杉原健太、シトンプルヨス、井戸村泰宏、山下晋、"マルチフェーズフィールド法を用いた気泡流動解析への PID 制御の適用"、日本原子力学会 2025 年春の年会（3/12-14、オンライン）.

## 5.10.10 GPU 向け乱流アンサンブルデータ同化コード CityLBM-LETKF の開発

### CityLBM-LETKF: Ensemble Data Assimilation for Turbulence Simulations on GPU

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  
HPC・DX 基盤技術開発室

#### (1) 利用目的:

システム計算科学センター  
HPC・DX 基盤技術開発室では、  
GPU スパコン向けの数値流体  
解析に関する研究開発を推進し  
ている。本研究では、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、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<sup>\*1</sup>」の開発を推進  
している。本課題では、特に、  
CityLBM の予測精度向上を目的  
としたアンサンブルデータ  
同化の導入に関する研究開発  
を行う。

これまでに、2 次元等間隔格子において 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; 成果[4, 9])」を開発し、これらの手法が基礎的な乱流問題に対するアン  
サンブルデータ同化手法として有効であることを示した。本課題では、LBM2D-LETKF  
で得られた知見をもとに、3 次元 AMR 格子に基づく CityLBM の 3 次元乱流解析を対  
象として LETKF の移植を進める。

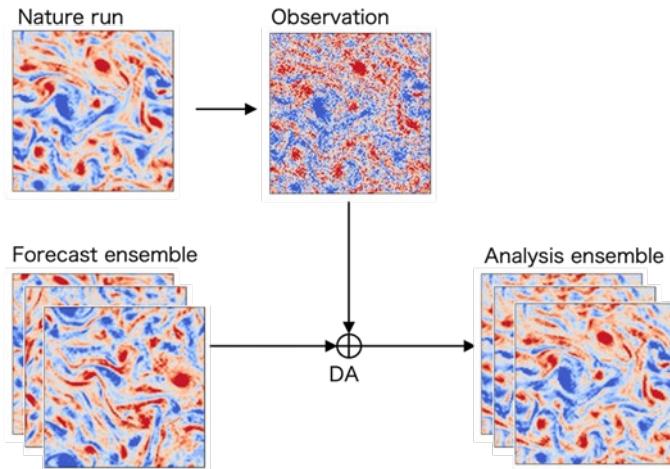


図 1 亂流アンサンブルデータ同化の概念図。Nature run: 正解の乱流場、Observation: ノイズを含む観測  
値、Forecast: データ同化を行う前の計算結果、Analysis: データ同化によって得られた場。

<sup>\*1</sup> 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) 利用内容・結果:

- 1) 令和 6 年度課題の達成目標

令和 6 年度は、研究テーマとして①時間統計量を観測値とするデータ同化の実装、②風洞実験の実験値を用いたデータ同化の検証を設定し、達成目標として、「査読付き論文または査読付き国際会議論文 1 報」を設定した。

## 2) 令和 6 年度の研究成果とその重要性

令和 6 年度は、上記テーマに取り組み、立方体まわり流れの風洞実験体系を用いた観測システムシミュレーション実験（実験観測をシミュレーションで模擬する数値実験）を対象として、乱流場のアンサンブル標準偏差の閾値処理に基づく観測最適化を実現した[成果 1]。昨年度までの研究では、計算格子点と観測点の位置を同一とする全点観測によりデータ同化の精度検証を進めるとともに、観測点の削減手法として、計算格子点を一定の空間間隔でサンプリングする「一様サンプリング」を用いていた。一様観測では、計算格子点に対する観測点の間隔を  $p$  とすると、2 次元格子の場合で  $1 / p^2$  に、3 次元格子の場合で  $1 / p^3$  に観測点数を削減することができる。しかし、この方法では、物体から遠方の流速がほぼ一定の領域（データ同化を必要としない領域）にまで観測点を配置してしまうことから、観測の効率が悪かった。

今年度の研究において、データ同化の必要のない領域から観測点を取り除くための指標として「アンサンブル標準偏差」を導入し、乱流場の変動が大きい領域を重点的にサンプリングする「重点サンプリング」を新たに開発した。ここで、時間統計量の検討も行ったが、もともとアンサンブルデータ同化ではアンサンブル統計量を計算していることから、既存のアンサンブル統計量を用いる手法を採用した。アンサンブル数を  $m=1, 2, \dots, M$ 、 $m$  番目のアンサンブル計算で得られた速度場を  $\mathbf{u}_m$  とすると、アンサンブル標準偏差  $\sigma$  は以下で定義される。

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{m=1}^M (\mathbf{u}_m - \bar{\mathbf{u}})^2}, \quad \bar{\mathbf{u}} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \mathbf{u}_m.$$

$\sigma$  の小さい領域は、速度の変動が小さく瞬時値が自明に定まることから、データ同化を必要としない領域であると解釈できる。すなわち、 $\sigma$  に下限値を設けた閾値処理により、データ同化を必要としない領域中の観測点を削減することができる。立方体まわり流れの風洞実験における  $\sigma$  の分布を図 2 に示す。この例では、床面に立方体が置かれ、物体後方（右側）に乱れた後流が発生する。物体の前方（左側）や上空では、速度が時間的に定常であり、データ同化は不要と考えられる。図 2 (b) に示す  $\sigma$  の分布はこれらの特徴を定量的に良く表現できている。図 2 (c) のように、 $\sigma$  に閾値を設定することで、データ同化が必要な物体の後流の領域をうまく抽出できている。

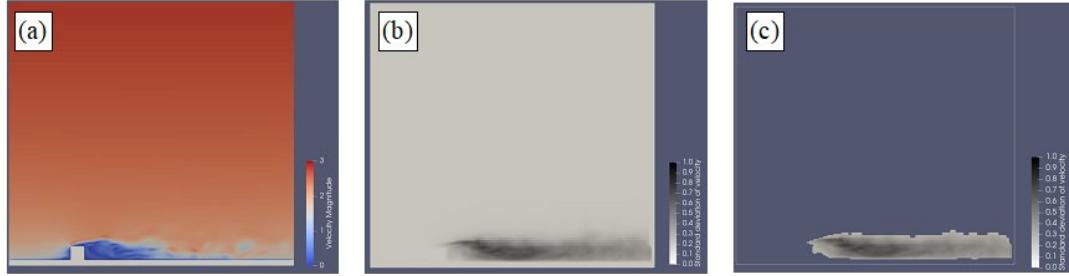


図 2 アンサンブル標準偏差の閾値処理による観測点削減の例。(a) 速度  $|u|$  の鉛直断面分布、(b) アンサンブル標準偏差  $\sigma$  の鉛直断面分布、(c)  $\sigma$  の閾値処理後に残った観測点。

上記手法を適用したデータ同化の精度検証結果を図 3 に示す。精度は、速度場の誤差 (RMSE; root-mean squared error) の時間平均値で評価している。RMSE が観測値のノイズを下回ればデータ同化が成功したとみなせる。全点観測（観測点数 106 万）を起点として、一様サンプリング、重点サンプリングおよびこれらのハイブリッド手法により観測点を削減していく。一様サンプリング ( $p$ ) では、観測点を削減するほど RMSE が上昇するが、 $p = 4$  の観測点数 1.66 万までは RMSE が観測ノイズを下回る精度を達成できた。重点サンプリング ( $\sigma$ ) では、RMSE の上昇がほぼない状態で、 $\sigma = 0.1$  の観測点数 6.21 万まで削減できた。さらに、2 つの観測点削減手法を組み合わせたハイブリッド方法では、 $\sigma = 0.1$  のアンサンブル標準偏差の閾値処理および、 $p = 4$  の一様観測による観測点削減を組み合わせることで、十分なデータ同化精度を保ちながら観測点数を 852 まで削減できた。これは、全点観測の観測点数の 0.08% に相当する極めて少ない数であり、本手法により観測点数の大幅な削減を達成することに成功した。

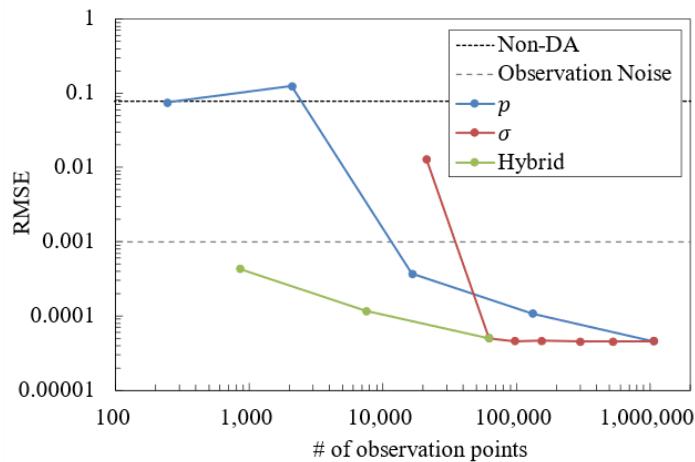


図 3 観測点削減手法におけるデータ同化の誤差評価。Non-DA: データ同化を行わない場合の誤差、Observation Noise: 観測値に含まれるノイズの強さ、 $p$ : 一様サンプリング、 $\sigma$ : 重点サンプリング、Hybrid: 一様サンプリングと重点サンプリングの両方を適用 ( $\sigma = 0.1$ ,  $p = 1, 2, 4$ )。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

【国際会議論文（査読あり）】

- 1) Y. Hasegawa, Y. Idomura, N. Onodera, "GPU-enabled ensemble data assimilation for mesh-refined lattice Boltzmann method", EPJ Web of Conferences 302, 03005 (2024).

【国内会議（査読なし）】

- 2) 長谷川雄太、井戸村泰宏、小野寺直幸、"LBM-LETKF を用いた 3 次元角柱周りの流れの少數観測点に対するデータ同化実験"、第 29 回計算工学講演会（2024/6/10-12、神戸）。
- 3) 長谷川雄太、井戸村泰宏、小野寺直幸、河村拓馬、"乱流データ同化における速度場の可視化による精度評価の試み"、第 52 回可視化情報シンポジウム（2024/7/19-21、沖縄）。

### 5.10.11 複雑な気象条件に対応した局所風況解析手法の開発

#### Local Wind Analysis Method Using Complicated Meteorological Data

小野寺 直幸、井戸村 泰宏、長谷川 雄太、伊奈 拓也

HPC・DX 基盤技術開発室

##### (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において、地表面近傍と上空で風向が異なる気象条件の場合に、解析精度が低下するなどの問題点が新たに見つかった。今年度は、風況デジタルツインを実現する上で必須となる、現実的な気象条件への対応に向けて、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を行いつつ乱流場を再構成する手法を開発する。

##### (2) 利用内容・結果:

###### 1) 令和 6 年度の達成目標

令和 6 年度は「複雑な気象条件に対応した局所風況解析手法の開発」と題して、局所の風況解析手法である CityLBM と広域のメソスケール気象データのデータ同化を高度化することで、上空と地表面近傍の風向が異なるような現実的な流れに対応可能な解析手法の構築を目指した。上記目標の達成に向けて、周期境界を用いない乱流発生手法の実装・精度検証を実施した。

###### 2) 令和 6 年度の研究成果とその重要性

現在の CityLBM では、現実の風況を再現するために、メソスケール気象予測モデルによる風況 (RANS: Reynolds-Averaged Navier-Stokes equation) と周期境界条件により発達させた LBM の風況 (LES: Large Eddy Simulation) に対して、経験的な係数を設定して風況を徐々に近づけるナッジング法を適用している。米国オクラホマシティでの野外拡散実験に対する実証解析<sup>\*1</sup>では、周期境界条件の課される水平 4 面の風向が同様であったため、計算領域端部分で数値的な問題が発生せずに乱流場を再構成できていた。一方、多様な気象場を取り扱う風況デジタルツインでは、計算領域内で風向が変化する条件にも対応する必要があるため、周期境界条件を用いずに乱流を発達させることができ可能な手法の導入が必須となる。そこで、RANS の平均流に対して擾乱を加えることで乱流場の再構成が可能な乱流発生手法 (CPM : Cell perturbation method)<sup>\*2</sup> を実装

した。

CPM の基本的な精度検証として、一様風向を設定した条件に対する解析を実施した。計算領域を主流方向、スパン方向、高さ方向にそれぞれ  $20\text{km} \times 2\text{km} \times 1.5\text{km}$  と設定し、計算解像度として地表面近傍に対して 4m 格子を用いた。地表面には 10m の大きさの立方体を 40m 間隔で設置した。流入条件として、Kanda らの都市に対する対数則モデル<sup>\*3</sup>を使用し、高さ 600m にて風速 10m/s となるように設定し、高さ 800m 以上は一様風速とした。CPM は、計算境界領域を対象とし、高さ 600m 以下の領域に対して適用した。

図 1 に CPM 無しおよび CPM 有りの主流方向断面内の鉛直方向速度分布を示す。流入境界条件であるナッジングおよび CPM 適用領域は、左側の境界部分となる。計算結果から、CPM 無しでは流入境界付近に乱流が存在せず、地上付近から徐々に乱流が発達していく様子が確認できる。一方で、CPM 有りでは、流入境界の直後から CPM によって生成した乱流が確認できる。

図 2 に地表面近傍での速度の標準偏差の主流方向への発達を示す。高さ 55m の結果において、CPM 無しでは、流入境界部分から  $x=2500\text{m}$  程度で乱れが発生し、 $x=5000\text{m}$  程度で定常となる。一方で、CPM 有りでは、流入部分で生成された強い乱れが  $x=2500\text{m}$  程度で定常となることが確認できる。高さ 105m の結果においても同様に、CPM を適用することで、乱れが定常となるまでの区間が大幅に短縮されることが確認できる。上記の結果から、CPM を用いて計算境界領域で効率的に乱流場を生成できることを確認した。

風況デジタルツインの実現に向けたもう一つの課題は、複雑なメソスケール気象データを局所スケール解析にダウンスケールする手法の開発である。CityLBM では、水平 4 面および上面の計算境界領域に対してナッジング法を用いて平均流の境界条件を与えており。この手法は、地表面近傍と上空の風向が同じ条件においては、計算領域の中心部において自然に乱流が発達した流れが得られるが、計算領域内で風向が大きく変化するような条件においては、地表面近傍の風向が上空の風向に引きずられてメソスケール気象データと異なる風況が形成されてしまう問題が発生することがある。そこで、計算領域の全域で、メソスケールの気象データと CityLBM の高解像度風況のうち長波長成分をデータ同化するダウンスケール手法を実装することが必要となる。このようなダウンスケール手法の開発は今後の課題である。

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

\*2 Mazzaro, et al., “Random force perturbations: A new extension of the cell perturbation method for turbulence generation in multiscale atmospheric boundary

layer simulations”, Journal Of Advances In Modeling Earth Systems 11, pp.2311-2329, 2019.

\*3 Kanda, et al., “A New Aerodynamic Parametrization for Real Urban Surfaces”, Boundary-Layer Meteorology 148, : pp.357–377, 2013.

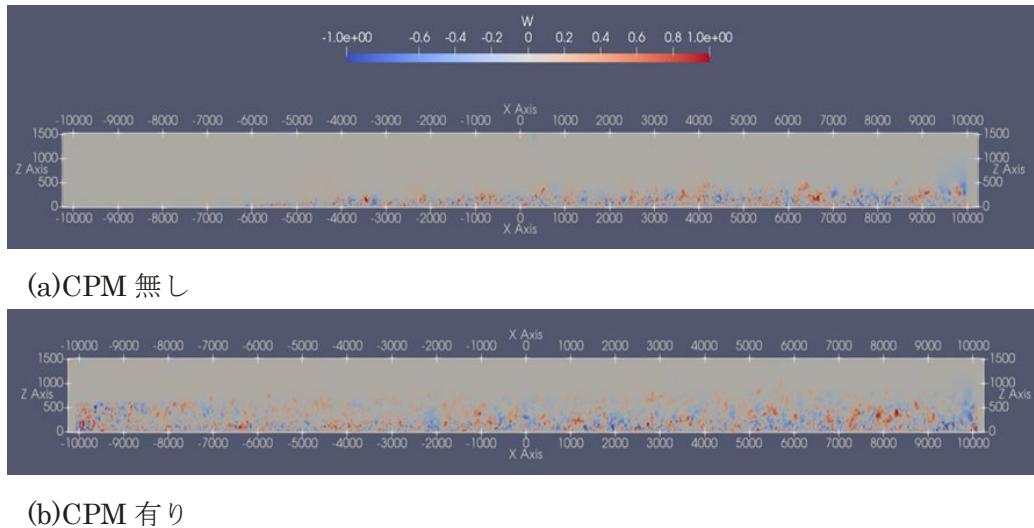


図 1 主流-Z 断面内の Z 方向速度分布

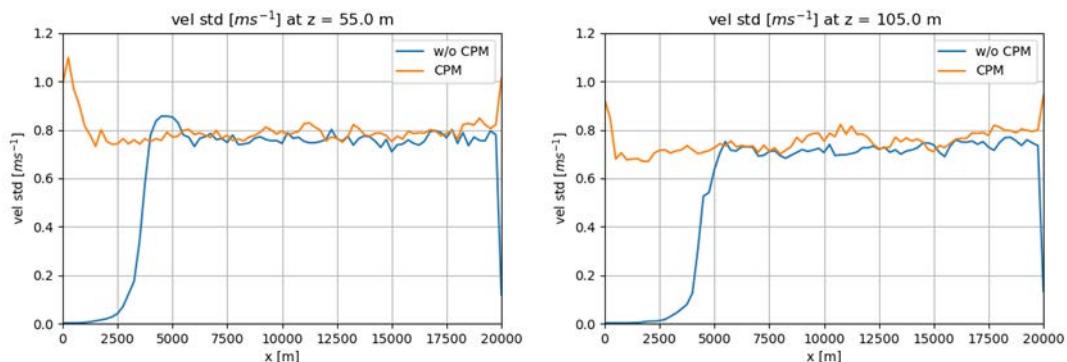


図 2 速度の標準偏差の主流方向への発達。左：高さ 55.0m、右：高さ 105.0m

### (3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等)：

該当なし。

## 6. おわりに

本報告集は、原子力機構における多分野にわたる大型計算機システムを利用した優れた研究成果をまとめたものである。これらの研究成果は、研究者の探究心と努力によることは勿論ではあるが、原子力機構の大型計算機システムが研究開発の現場において必要不可欠であることを改めて示している。本報告集が、原子力機構における大型計算機システムを利用した研究成果のさらなる増進に、また分野を越えた情報共有による更なる研究開発の発展に役立つことを期待する。

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 6 年度における大型計算機システムの大口利用課題の利用者とプログラミング支援作業（プログラム開発整備、プログラム最適化チューニング）の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なら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 7 年 9 月

編集ワーキンググループ

リーダー：坂本 健作

スタッフ：河津 諒平

事務局：桧山 一夫、稻子 秀美

## 付録

### 付録 A

表 A.1 令和 6 年度大型計算機システムの利用実績

	<b>SGI8600</b>		
	バッチ処理 件数	会話処理 件数	ノード時間※ (h)
4月	16,880	4,999	518,768
5月	17,070	4,797	533,646
6月	17,237	4,761	659,252
7月	26,956	4,975	635,720
8月	22,604	4,395	684,562
9月	21,834	4,960	652,983
10月	128,634	5,498	670,973
11月	19,759	5,016	636,042
12月	32,981	5,747	682,780
1月	36,622	4,849	655,033
2月	16,020	4,825	572,727
3月	24,496	4,784	657,047
合計	381,093	59,606	7,559,533

※ノード時間は小数点以下第 1 位を四捨五入している。

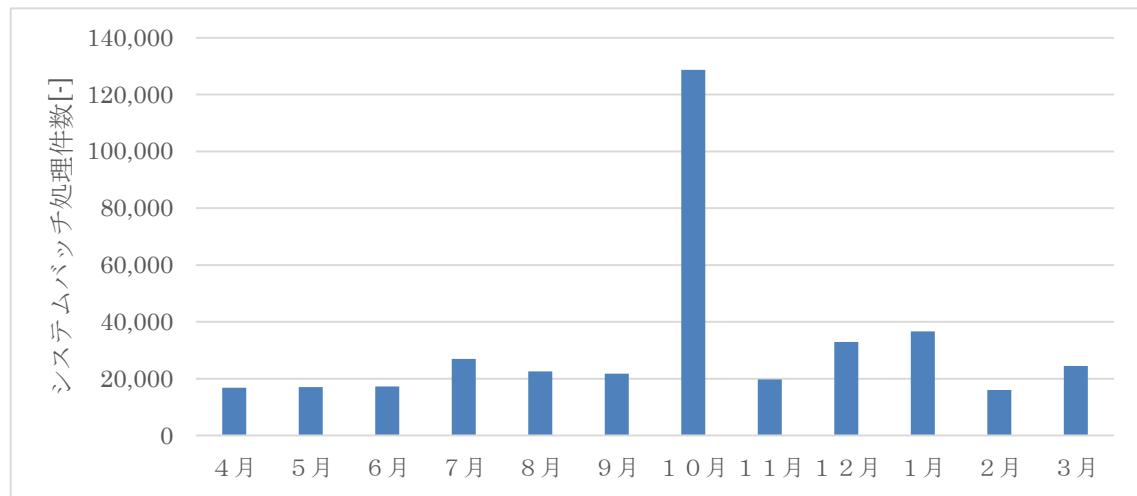


図 A.1 令和 6 年度大型計算機システムバッチ処理件数

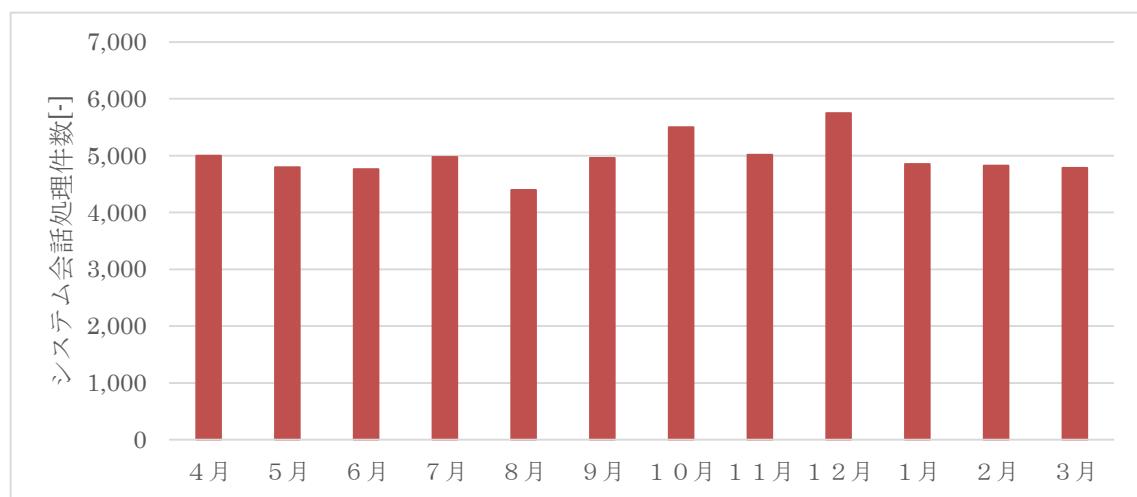


図 A.2 令和 6 年度大型計算機システム会話処理件数

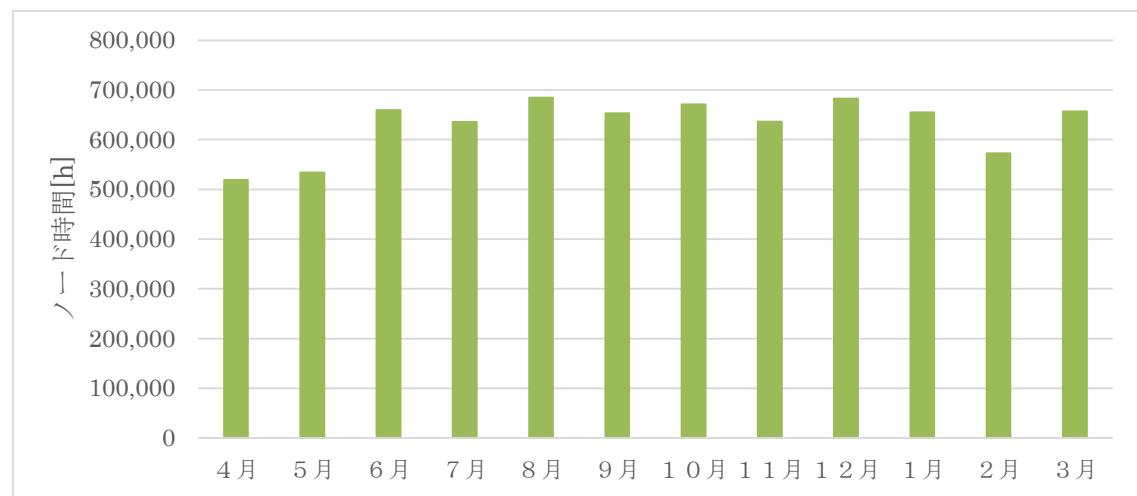


図 A.3 令和 6 年度大型計算機システムノード時間

## 付録 B

表 B.1 令和 6 年度利用相談件数・可視化相談件数

<b>1. 利用相談件数(579 件)</b>
① SGI8600 (366 件)
② Linux、パソコン、network、その他 (213 件)
<b>2. 可視化相談件数(51 件)</b>
③ SGI8600 ISV アプリ処理部及び遠隔可視化用表示装置可視化相談・技術支援 (46 件)
④ PC 版 MicroAVS インストール支援 (1 件)
⑤ PC 版 AVS/Express インストール支援 (4 件)

## 著者名別 論文索引

## A-Z

- Sitompul Yos ..... 120,124  
 Thomsen Bo ..... 98

## あ

- 安部 諭 ..... 69  
 阿部 陽介 ..... 24,113

## い

- イー レンドン ブルース ..... 88  
 板倉 充洋 ..... 113,116  
 井戸村 泰宏 ..... 120,124,128,132  
 伊奈 拓也 ..... 124,128,132

## う

- 上澤 伸一郎 ..... 43,46,49  
 宇田川 豊 ..... 72  
 内堀 昭寛 ..... 76  
 上羽 智之 ..... 84

## え

- 海老原 健一 ..... 113

## お

- 大西 弘明 ..... 62  
 奥村 雅彦 ..... 105,109,113,116  
 小野 綾子 ..... 49,52,55,60  
 小野寺 直幸 ..... 128,132

## か

- 神谷 朋宏 ..... 40

## き

- 城戸 健太朗 ..... 66  
 菊地 紀宏 ..... 80

## く

- 久保 淳 ..... 24

## こ

- 小坂 直 ..... 76  
 小林 恵太 ..... 105,109,113,116  
 近藤 恒弘 ..... 88

## し

- 志賀 基之 ..... 98  
 下村 和也 ..... 128

## す

- 杉原 健太 ..... 120,124,128  
 杉本 貴則 ..... 62  
 鈴木 貴行 ..... 43,46,49,52

## せ

- 関川 卓也 ..... 32

## た

- 田中 正暁 ..... 80,84  
 田村 潤 ..... 88

## つ

- 都留 智仁 ..... 24,28,113

## と

- 堂田 哲広 ..... 84

## な

- 永武 拓 ..... 46  
 中村 博樹 ..... 73,102,113,116  
 中山 梓介 ..... 18  
 中山 浩成 ..... 21

## は

- 橋本 慎太郎 ..... 35  
 長谷川 雄太 ..... 128,132

## ふ

- 福田 貴斎 ..... 46,58  
 古田 琢哉 ..... 38

## ほ

- 堀口 直樹 ..... 43,46,49,60

## ま

- 前川 藤夫 ..... 88  
 町田 昌彦 ..... 73,109,116

## み

- 三浦 孝充 ..... 84

## め

- 明午 伸一郎 ..... 88

## も

- 森 道康 ..... 62

## や

- 柳沢 秀樹 ..... 76  
 山口 瑛子 ..... 105,109,116  
 山口 正剛 ..... 95,113  
 山下 晋 ..... 40,46,49,52,124  
 山田 進 ..... 116

## よ

- 吉川 龍志 ..... 80  
 吉田 啓之 ..... 43,49,52,60  
 吉村 一夫 ..... 84

## ろ

- ロドリゲズ ダグラス チェイス ..... 92  
 ロブゼンコ イバン ..... 24,28

## わ

- 渡部 晃 ..... 76  
 渡部 雅 ..... 73



