JP0550133

JAERI-Review
2005-008

# 平成15年度
# 大型計算機システム利用による研究成果報告集

2005年3月

計算科学技術推進センター

日 本 原 子 力 研 究 所
Japan Atomic Energy Research Institute

編集兼発行　日本原子力研究所

# 平成１５年度
# 大型計算機システム利用による研究成果報告集

日本原子力研究所
計算科学技術推進センター

（2005 年 1 月 31 日受理）

日本原子力研究所計算科学技術推進センターでは、研究活動を推進するためにスーパーコンピュータをはじめとする大型計算機システムを導入し、所内における研究活動に役立たせるとともに、計算機システム及びネットワークシステムの運用管理を行っている。
本報告書は、原研の大型計算機の利用実績を集計し、多くの CPU 時間を利用したユーザーに研究の内容、大型計算機の利用及び成果についてまとめたものである。

---

日本原子力研究所：〒110-0015　東京都台東区東上野 6-9-3
住友不動産上野ビル 8 号館

# Summaries of Research and Development Activities by Using JAERI Computer System in FY2003 (April 1, 2003 – March 31, 2004)

Center for Promotion of Computational Science and Engineering

Japan Atomic Energy Research Institute
Higashiueno, Taito-ku, Tokyo

(Received January 31, 2005)

Center for Promotion of Computational Science and Engineering (CCSE) of Japan Atomic Energy Research Institute (JAERI) installed large computer system included super-computers in order to support research and development activities in JAERI. CCSE operates and manages the computer system and network system. This report presents usage records of the JAERI computer system and big users' research and development activities by using the computer system in FY2003 (April 1, 2003 – March 31, 2004).

Keywords: JAERI Computer System, Super Computer, Computational Science and Engineering, User's Research and Development

# 目　次

Contents

# まえがき

日本原子力研究所（原研）では、計算科学技術推進センターが運用管理する６機のスーパーコンピュータを含む11機のコンピュータ等から成る大型計算機システム及びネットワークシステムにより、研究活動を支援しています。

本報告書は、平成15年度の原研大型計算機システムの利用状況及びこれらを利用して得られた主な研究成果の概要をまとめたものである。

原研において大型計算機システムがどのような研究活動にどのように利用され、成果が得られているか、すなわち、どのように研究活動を支援しているかをご理解頂ければ幸いです。また、本報告書が、解析や数値シミュレーションをはじめとする計算科学の発展の一助となれば幸いです。

日本原子力研究所　計算科学技術推進センター長
矢川　元基

# 1．概要

日本原子力研究所（原研）計算科学技術推進センターでは、研究活動を推進するためにスーパーコンピュータをはじめとする大型計算機システムを導入し、所内における研究活動に役立たせるとともに、計算機システム及びネットワークシステムの運用管理を行っている。

スーパーコンピュータは今や研究活動にとって欠くことのできないインフラストラクチャとなっており、実験、理論に次ぐ第三の方法としてこれまで実験不可能だった現象の解明などに利用されるようになってきている。

原研における大型計算機システム設置状況は平成 15 年度においては、東海研究所 VPP5000 システム及び SR8000 システム、那珂研究所 Origin3800 システム、関西研究所 SC/ES40 システム及び VPP300 システム及び ITBL システム、東京地区 pSeries 及び SX-6 システムである。

本報告書は、原研の大型計算機の利用実績を集計し、多くの CPU 時間を利用したユーザーに研究の内容、大型計算機の利用及び成果についてまとめたものである。

第２章では原研大型計算機システムの構成について、第３章では平成１５年度おける計算機利用実績について、そして、第４章では大型計算機システムの大口ユーザーによる研究成果６１件について報告する。

# 2.　原研大型計算機システム環境

原研における平成 16 年 4 月 1 日 現在の大型計算機システムの構成を表２．１に示す。この中で、いわゆるスーパーコンピュータは、VPP5000、SR8000（東海研）、Origin3800（那珂研）、AlphaServer SC/ES40、PRIMEPOWER（関西研）の５台である。これらスーパーコンピュータを含む１１機からなる原研大型計算機システムは、図２．１に示すようにネットワークで繋がれ、青森県から関西地区まで散らばる原研各事業所から利用することができる。

表２．１　原研大型計算機システム構成

| 地区 | 機　種 | タイプ | システムの性能(GFLOPS) | 主記憶タイプ、総主記憶容量(GB) | PE 間結合方式、データ転送速度(MB/S) | 磁気ディスク容量(GB) | OS | コンパイラ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 東海 | VPP5000 | ベクトル | 614.4 | 分散型 512 | クロスバ 1600 | 10000 | UXP/V | Fortran77/VPP, Fortran90/VPP |
| | SR8000F1 | スカラ | 240 | 共有/分散 240 | クロスバ 1000 | 4000 | HI-UX/MPP | Fortran90 Fortran77 |
| | PC クラスタ | スカラ | 78 | 分散型 0.256 | ファーストイーサネット 12.5 | 300 | ReadHat (Linux) | Fortran77, Fortran90 |
| | GS21-200 | スカラ | 0.006 | 共有型 0.256 | ― | 75 | MSP/EX | FORT77EX |
| 那珂 | Origin3800 | スカラ | 768 | 共有分散型 768 | GSN 1600 | 15000 | IRIX | Fortran90 |
| | SP3/16 | スカラ | 24 | 分散型 24 | 多段結合 150 | 250 | AIX | Fotran90 |
| 関西 | AlphaServer SC/ES40 | スカラ | 1513 | 分散型 2056 | システムインターコネクト 200 | 27900 | Tru64 UNIX | Fortran77,90 HPF |
| | PRIMEPOWER | スカラ | 1128 | 共有/分散 1152 | クロスバ 4000 | 15000 | 日本語 Solaris8 | Fortran c ,c++ |
| | VPP300/16 | ベクトル | 35.2 | 分散型 32.0 | クロスバ 570 | 250 | UXP/V | Fortran90/VP Foratran90/VPP |
| 東京 | SX-6 | ベクトル | 96 | 共有/分散 48 | IXS 8000 | 1000 | Super-UX | Fortran C,C++ |
| | pSeries690 | スカラ | 83.2 | 共有型 96 | 多段結合 128 | 2000 | AIX5L | Fortran C,C++ |

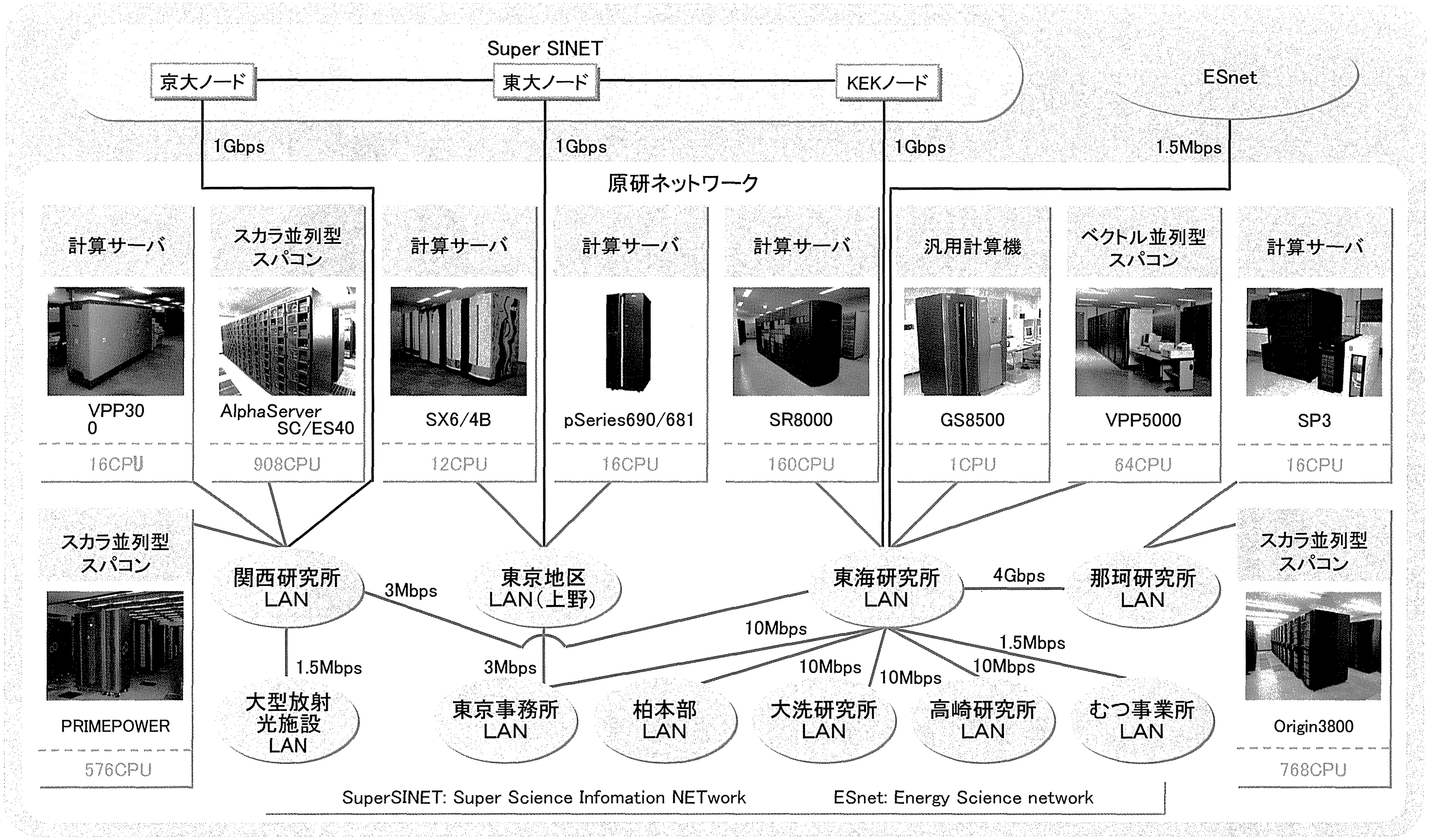



図2.1　原研大型計算機システムとネットワーク構成

# 3．平成15年度における計算機利用実績

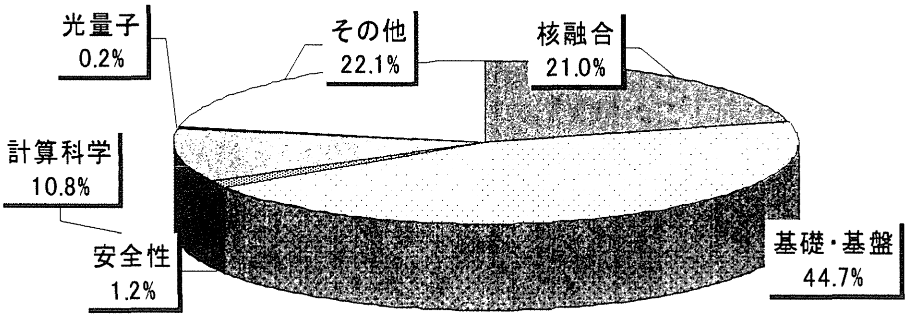
## 3.1 東海研究所システム

(1) 利用者数

登録ユーザ：1,046人 利用実績ユーザ：505人

**(2) 処理件数及びCPU利用実績(月別)**

| | VPP5000システム | | | GS8500システム | | | SR8000システム | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | TSS件数 | バッチ件数 | CPU時間 | TSS件数 | バッチ件数 | CPU時間 | TSS件数 | バッチ件数 | CPU時間 |
| 4月 | 4,617 | 10,943 | 37,380 | 15,999 | 3,670 | 133 | 2,099 | 4,244 | 54,355 |
| 5月 | 5,083 | 12,426 | 43,974 | 14,938 | 3,904 | 185 | 1,410 | 2,508 | 71,667 |
| 6月 | 6,388 | 14,757 | 41,070 | 12,444 | 3,713 | 102 | 1,781 | 3,090 | 74,403 |
| 7月 | 7,738 | 12,982 | 43,720 | 12,094 | 3,843 | 125 | 1,869 | 4,485 | 74,717 |
| 8月 | 5,893 | 12,221 | 43,025 | 10,335 | 2,239 | 101 | 1,792 | 3,699 | 64,233 |
| 9月 | 6,551 | 16,214 | 40,950 | 11,019 | 2,584 | 93 | 1,530 | 2,029 | 61,510 |
| 10月 | 6,901 | 23,523 | 37,412 | 11,891 | 3,349 | 145 | 2,007 | 3,559 | 70,247 |
| 11月 | 6,792 | 12,778 | 43,984 | 10,191 | 3,212 | 92 | 1,735 | 4,718 | 80,226 |
| 12月 | 7,623 | 12,441 | 43,964 | 11,834 | 2,964 | 158 | 1,797 | 4,066 | 75,855 |
| 1月 | 8,476 | 13,260 | 45,507 | 11,951 | 3,794 | 127 | 1,855 | 4,335 | 80,651 |
| 2月 | 8,878 | 10,547 | 40,257 | 12,275 | 4,065 | 146 | 1,614 | 3,710 | 79,690 |
| 3月 | 7,753 | 10,961 | 40,489 | 14,262 | 3,784 | 127 | 1,972 | 3,157 | 80,686 |
| 合計 | 82,693 | 163,053 | 501,732 | 149,233 | 41,121 | 1,534 | 21,461 | 43,600 | 868,240 |




各部門別CPU時間利用実績（3システム合計）

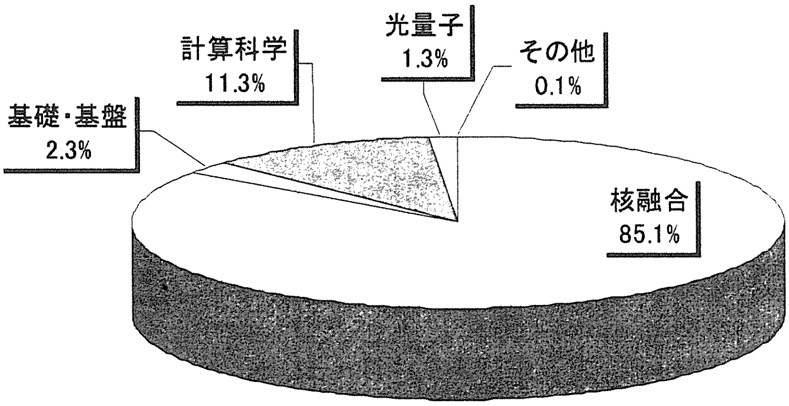
## 3.2 那珂研究所システム

### (1) 利用者数

登録ユーザ：310 人　利用実績ユーザ：133 人

### (2) 処理件数及び CPU 利用実績(月別)

| | Origin3800 システム | | | SP3 システム | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | TSS 件数 | バッチ 件数 | CPU 時間 | TSS 件数 | バッチ 件数 | CPU 時間 |
| 4 月 | 6, 355 | 5, 310 | 326, 663 | 1, 893 | 314 | 2, 279 |
| 5 月 | 5, 858 | 6, 511 | 449, 513 | 1, 489 | 593 | 4, 507 |
| 6 月 | 17, 765 | 5, 429 | 475, 249 | 1, 781 | 353 | 2, 502 |
| 7 月 | 17, 939 | 7, 830 | 366, 498 | 745 | 338 | 2, 175 |
| 8 月 | 13, 111 | 5, 096 | 428, 185 | 1, 479 | 148 | 4, 817 |
| 9 月 | 9, 453 | 4, 448 | 373, 260 | 2, 226 | 254 | 8, 887 |
| 10 月 | 8, 610 | 4, 842 | 504, 185 | 1, 722 | 264 | 2, 436 |
| 11 月 | 45, 363 | 7, 071 | 396, 808 | 1, 687 | 321 | 4, 329 |
| 12 月 | 7, 488 | 5, 276 | 472, 441 | 2, 243 | 293 | 3, 453 |
| 1 月 | 12, 794 | 5, 043 | 524, 114 | 2, 392 | 144 | 3, 039 |
| 2 月 | 9, 254 | 2, 825 | 466, 604 | 1, 597 | 86 | 2, 629 |
| 3 月 | 8, 845 | 3, 183 | 400, 027 | 2, 063 | 131 | 3, 498 |
| 合計 | 162, 835 | 62, 864 | 5, 183, 547 | 21, 317 | 3, 239 | 44, 551 |




各部門別 CPU 時間利用実績(2 システム合計)

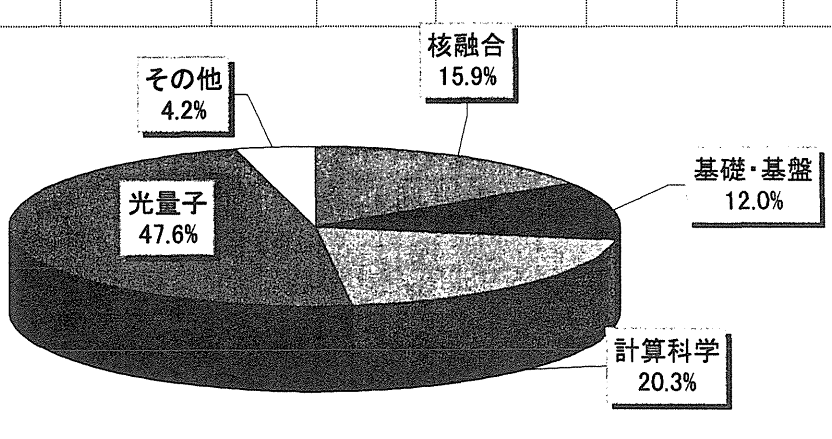
### 3.3 関西研究所システム

**(1) 利用者数**

登録ユーザ:415 人　利用実績ユーザ:142 人

**(2) 処理件数及び CPU 利用実績(月別)**

| | AlphaServer システム | | | PRIMEPOWER システム | | | VPP300 システム | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | TSS 件数 | バッチ 件数 | CPU 時間 | TSS 件数 | バッチ 件数 | CPU 時間 | TSS 件数 | バッチ 件数 | CPU 時間 |
| 4 月 | 2,110 | 815 | 119,245 | 1,275 | 1,970 | 47,975 | 264 | 815 | 763 |
| 5 月 | 2,337 | 631 | 245,659 | 1,772 | 9,118 | 135,869 | 257 | 91 | 1,067 |
| 6 月 | 2,183 | 982 | 374,184 | 2,111 | 4,585 | 170,221 | 460 | 157 | 5,386 |
| 7 月 | 3,062 | 2,956 | 253,297 | 2,418 | 6,171 | 195,370 | 555 | 517 | 7,288 |
| 8 月 | 2,593 | 866 | 417,606 | 1,562 | 8,702 | 212,502 | 348 | 472 | 9,888 |
| 9 月 | 2,389 | 897 | 216,403 | 1,805 | 7,356 | 138,679 | 387 | 444 | 10,551 |
| 10 月 | 2,113 | 1,298 | 274,366 | 2,155 | 5,054 | 112,278 | 209 | 306 | 7,560 |
| 11 月 | 2,085 | 8,041 | 385,353 | 1,970 | 13,244 | 143,501 | 175 | 251 | 9,351 |
| 12 月 | 1,903 | 2,888 | 392,302 | 2,281 | 22,140 | 159,991 | 313 | 325 | 10,938 |
| 1 月 | 1,653 | 1,951 | 491,033 | 2,844 | 3,794 | 179,410 | 318 | 540 | 11,057 |
| 2 月 | 2,030 | 998 | 354,374 | 2,279 | 37,978 | 204,931 | 214 | 153 | 9,903 |
| 3 月 | 2,006 | 1,184 | 338,746 | 1,998 | 12,421 | 166,517 | 357 | 163 | 10,237 |
| 合計 | 26,464 | 23,507 | 3,862,568 | 24,470 | 132,533 | 1,867,244 | 3,857 | 4,234 | 93,989 |




各部門別 CPU 時間利用実績(3システム合計)

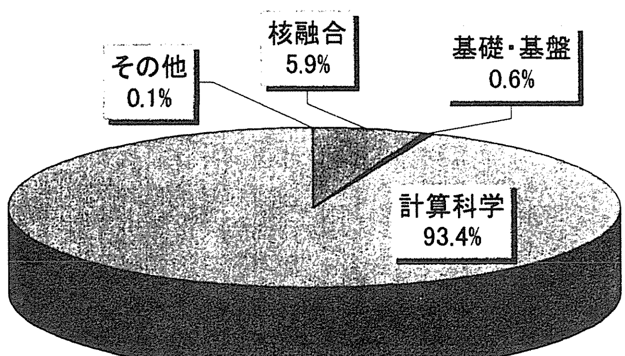
### 3.4 上野地区システム

#### (1) 利用者数

登録ユーザ:110 人　利用実績ユーザ:50 人

#### (2) 処理件数及び CPU 利用実績(月別)

| | SX-6 システム | | | P690 システム | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | TSS 件数 | バッチ 件数 | CPU 時間 | TSS 件数 | バッチ 件数 | CPU 時間 |
| 4 月 | 1, 449 | 461 | 250 | 316 | 70 | 706 |
| 5 月 | 1, 000 | 1, 305 | 69 | 281 | 85 | 12 |
| 6 月 | 1, 337 | 2, 281 | 982 | 264 | 354 | 7, 298 |
| 7 月 | 1, 777 | 2, 641 | 3, 952 | 325 | 488 | 2, 524 |
| 8 月 | 1, 078 | 3, 222 | 3, 168 | 176 | 274 | 1, 761 |
| 9 月 | 949 | 2, 165 | 792 | 324 | 454 | 203 |
| 10 月 | 1, 260 | 3, 265 | 1, 730 | 426 | 304 | 1, 443 |
| 11 月 | 914 | 2, 048 | 1, 695 | 246 | 676 | 35 |
| 12 月 | 570 | 1, 316 | 1, 473 | 362 | 482 | 3, 586 |
| 1 月 | 556 | 2, 003 | 1, 752 | 200 | 193 | 288 |
| 2 月 | 1, 418 | 1, 988 | 1, 829 | 331 | 596 | 4, 815 |
| 3 月 | 2, 088 | 2, 164 | 3, 733 | 331 | 184 | 2, 503 |
| 合計 | 14, 396 | 24, 859 | 21, 426 | 3, 582 | 4, 160 | 25, 174 |




各部門別 CPU 時間利用実績(2システム合計)

# 4．大型計算機利用による主な研究成果

前章で報告した原研大型計算機システムの利用実績から、ユーザーは 830 人に及ぶ。原研の研究者は約 800 人なので、ほぼ全員が何らかの形で計算機を利用していることになる。

利用の目的は、解析、数値計算、データ整理等々、様々である。それら全てが何らかの形で研究に役立っていることと考えられるが、それらの中で、平成１５年度に多くの CPU 時間を利用したユーザーに計算機を利用した研究の概要及び成果の報告をお願いした結果、６１件が集まった。

次ページ以降に掲載する。これらは、１年間に数万時間から百万時間以上という膨大な CPU 時間を必要とする解析、計算が重要な役割を果たしている研究である。原研大型計算機システムがどのような研究にどのように利用され、研究成果が得られているか、すなわち、原研の研究活動の支援システムとしての役割をご理解いただければ幸いである。

また、成果報告の依頼に対して、快く応じてくださったユーザーの方々に感謝する。

4.1　エネルギーシステム研究部

# 4.1.1　14MeV 中性子直接問かけ法による廃棄物中核分裂物質の非破壊検出法のシミュレーション

炉物理研究グループ
春山満夫、高瀬操

## 1．利用の概要（要約）：

炉物理研究グループでは「炉心特性に関する研究」のテーマのもとに「１４ＭｅＶ中性子直接問かけ法」によるＴＲＵ及びウラン廃棄物の非破壊測定法の開発を測定実験及び中性子輸送コード「ＭＶＰ」を用いて行っている。

「１４ＭｅＶ中性子直接問かけ法」の開発において、測定実験の妥当性検証のために、実験と同様な体系・模擬廃棄物を用いたシミュレーションが不可欠である。

また、多様なＴＲＵ及びウラン廃棄物に対応可能な測定法を開発するには、数多くの模擬試験体と測定体系の組み合わせのシミュレーションは不可欠である。

ＴＲＵ及びウラン廃棄物の非破壊測定法の開発は急務であり、他ケース、長時間のシミュレーションが必要となっている。

## 2．利用の内容・結果

当テーマにおける大型計算機の利用は中性子輸送コード「ＭＶＰ」を用いたシミュレーションが主なものである。以下に利用例と結果を示す。

１４ＭｅＶ中性子直接問い掛け法では、タイムディペンデントな計算が必要であり、誤差の少ない計算結果を得るには長時間の計算が必要である。

ＮＵＣＥＦ実験棟内に設置している測定装置を使用した実験の検証シミュレーションの例として、コンクリート固化模擬試験体中のＴＲＵ核種が局在した場合の例を図１にあげる。この結果でわかるように測定実験とシミュレーションはよく一致している。

実験とシミュレーションは非常によく一致する。これらのことから、実験が目的通りに実行されていることが検証できる。

他に図２に示すような廃棄物にガドリが混入しているときの検出特性のシミュレーションなど、多種の廃棄物と測定体系の組み合わせのシミュレーションを行っている。

## 3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）

1）．春山満夫，他：14MeV 加速器中性子直接問いかけ法による Gd 混入ウラン廃棄物

の測定、日本原子力学会　2004年春の年会　要旨集（C15）
2）．春山満夫，他：14MeV加速器中性子直接問いかけ法による高感度検出（Ｉ），日本原子力学会和文論文誌Vol.3，No.2，185～192（2004）

## 4．今後の利用予定：

今後も同様なシミュレーションを行い、多様な廃棄物に適応可能な測定装置の開発を進めて行く。

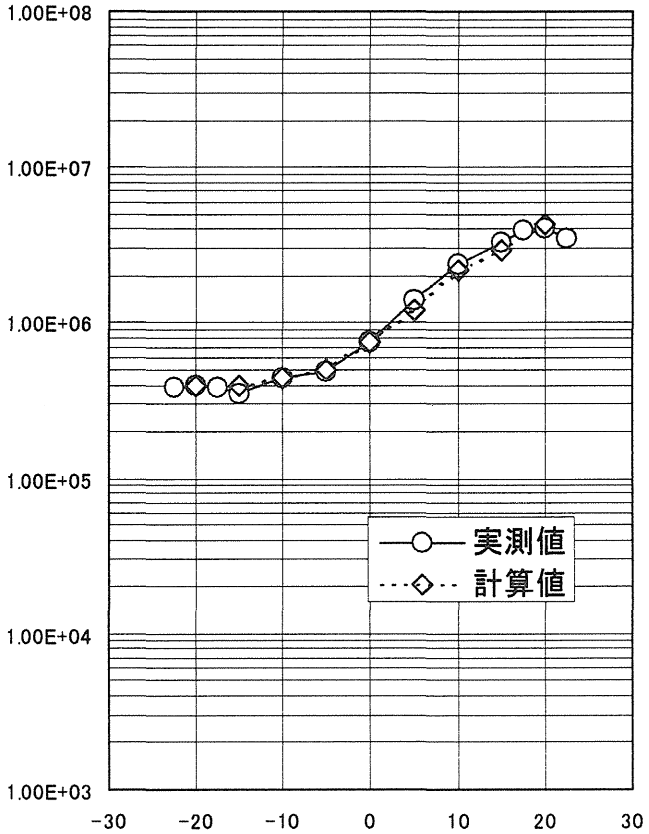



図1　実測値の検証計算例(中性子検出数)

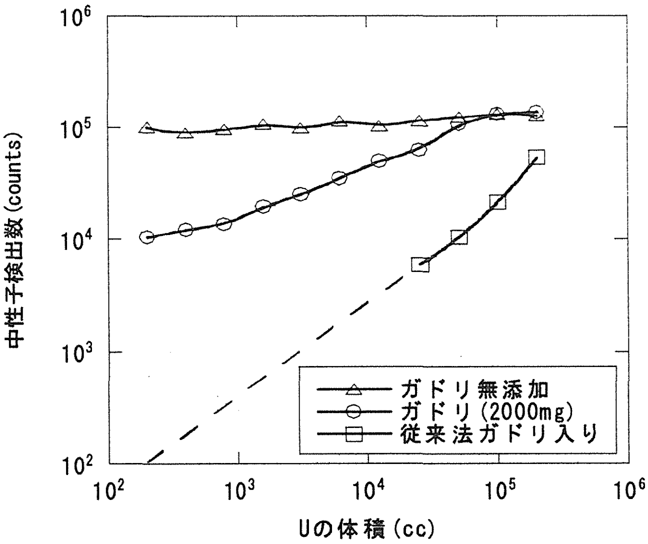



図2　コンクリート中の U-235[1g]（ガドリ添加）の体積の変化による中性子検出数の変化（問かけ中性子数 3.7E10）

## 4.1.2 詳細二相流解析コードの開発

熱流体研究グループ，将来型炉研究グループ
吉田啓之，永吉拓至，大貫晃，秋本肇，光武徹

1．利用の概要（要約）

熱流体研究グループでは，低減速軽水炉などの稠密炉心内の二相流挙動を明らかにし，解析コードにより形状効果などを把握するために，詳細二相流解析手法の一つである界面追跡法を用いた詳細二相流解析コードの開発を行っている。信頼できるコードの開発に当たっては，高精度の解析手法の構築と同時に，実験結果などとの比較による検証が重要である。この検証作業では，大規模、長時間のシミュレーションを多数ケース実施し実験と比較する必要があり，大型計算機の利用が不可欠である。

2．利用の内容・結果：

原子炉内などの二相流を，気液界面の挙動を追跡することにより表現する界面追跡法による解析コードを開発した。開発した解析コードを用い，VPP5000 上でベクトル計算を実施した。界面追跡法は多くの計算資源を必要とする解析手法であり，実験解析による検証を進める上で大型計算機が不可欠であった。15 年度に得られた主な成果は以下の通りである。

・ 原子炉燃料集合体内のサブチャンネル間の流体混合を，解析コードで予測するための検証解析を実施した。解析体系は，図 1(a)に示す 2 つの流路をスリットで結合したものである。この中を流れる二相流の解析を行い，実験結果と比較した。図 1(b)に示すように，解析により流路間の気泡の移動を再現できることを確認した。解析は気泡の移動量を過小評価する傾向にあるが，その差は最大でも実験の誤差範囲程度であることを確認した。
・ 原子炉燃料集合体内などで見られる液膜流の挙動を，解析コードで予測するための検証解析を実施した。図 2(a)に示すように，45° に傾斜した平板上を流体が流下する。開発した解析コードが，実験(K. Moran, et al., Int. J. Multiphase Flow 28(2002) 731)で見られた，3 次元的な波立ちを再現できる(図 2(b))。また，その液膜厚さの確率密度関数についても，2 つのピークが存在することを含めて実験を良く再現できることを確認した（図 2(c)）。

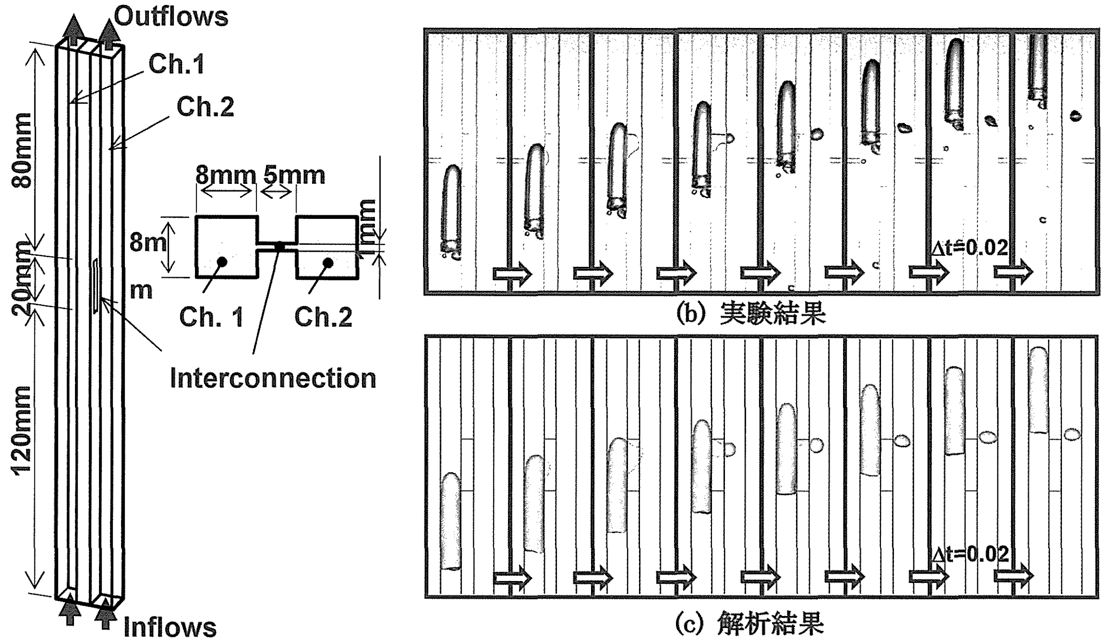
3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1). 吉田啓之、他：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解析手法の開発－、日本原子力学会和文誌、3[3] (2004).
2). H. Yoshida et al.: “Development of Mechanistic Boiling Transition Model in Rod Bundles”, ICONE-11, 36097 (2003).
3). H. Yoshida et al.: “Numerical Simulation of Film around Grid Spacer with

Interface Tracking Method", GENES4/ANP2003, 1111 (2003).
4). H. Yoshida et al.: "Numerical Simulation of Void Drift Using Interface Tracking Method", NURETH-10, E00208 (2003).
5). H. Yoshida et al.: Development of Predictable Technology for Thermal/Hydraulic Performance of Reduced-Moderation Water Reactors (3) - Current Status of Development of Three-Dimensional Two-Phase Flow Simulation Method -", ICAPP'04, 4057 (2004).
6). 吉田啓之、他：界面追跡法によるボイドドリフト機構の数値的解明、第 40 回日本伝熱シンポジウム、A234 (2003).
7). 吉田啓之、他：高稠密格子水冷却炉心の除熱技術の開発(3)-3 次元二相流解析技術開発の現状-、日本機械学会 2003 年度年次大会、2238 (2003).
8). 吉田啓之、他：稠密炉心内流体混合現象の数値的解明、第 17 回数値流体力学シンポジウム、B8-2 (2003).

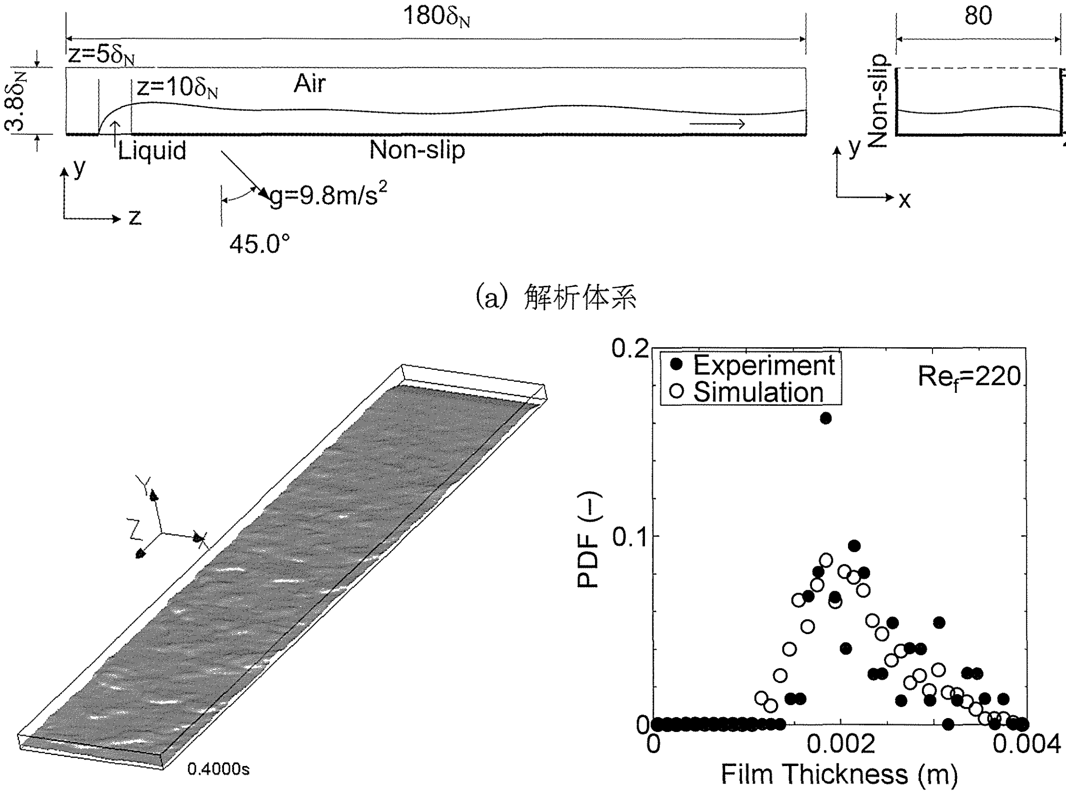
**4. 今後の利用予定**：

次期導入予定の計算機を用い，より大規模かつ詳細な解析を継続して実施するとともに，気液間の相変化についても考慮した解析を実施する予定である。




(a) 解析体系　(b) 実験結果　(c) 解析結果

図１　２つの流路間の流体の混合




(a) 解析体系

(b) 液膜形状の一例　(c) 液膜厚さの確率密度関数

図２ 傾斜平板上の液膜流解析

## 4.1.3 原子炉内における複雑二相流挙動に関する大規模シミュレーション

熱流体研究グループ
高瀬和之

**1．利用の概要（要約）：**

研究対象は、原研が開発を進めている革新的水冷却炉の燃料集合体内の二相流挙動である。革新的水冷却炉の炉心には直径 13mm ほどの燃料棒が 1mm 程度の燃料棒間ギャップで三角格子状に稠密に配置される。炉心熱設計精度を高めるためには、稠密燃料集合体をフルサイズで模擬した体系で冷却材流路内の二相流の速度分布、圧力分布、温度分布、ボイド率分布などを３次元予測することが必要である。今回の利用では、稠密燃料集合体の鉛直方向の数箇所に設けられるスペーサ周辺の液膜流挙動の詳細を大規模シミュレーションによって調べた。計算は 3 次元で行うため膨大な記憶容量が必要であり、大型並列計算機の使用が不可欠であった。

**2．利用の内容・結果：**

一連の計算は VPP5000 で最大 32 並列で行った。Fig. 1 に稠密燃料集合体の解析体系を示す。本体系は稠密炉心限界熱流束実験装置の構造仕様を模擬している。燃料集合体は、長さ 1260 mm、厚さ 1 mm、一辺の長さが約 52 mm の六角形断面を有するステンレス製ケーシングと直径 13 mm の燃料棒 37 本から構成される。各燃料棒間のギャップは 1.3 mm である。冷却材である水は燃料集合体内を下から上に流れる。燃料集合体内には流れ方向 4 箇所にスペーサが設置される。スペーサの役割は、燃料棒間ギャップを一定に保つこと及び半径方向及び周方向への燃料棒の移動を制限することである。解析は熱の影響がない非加熱等温流条件に対して、燃料集合体入口の流速やボイド率を変えて実施した。気相及び液相の物性値は、低減速軽水炉の炉心条件（炉心入口で水単相、温度約 283℃、圧力 7.2 MPa、燃料集合体 1 カラムあたりの総流量と総加熱量は約 400 kg/m$^2$s 及び 550kW）を模擬した。

Fig.2 に燃料棒周りの二相流構造を示す。ここで、赤は蒸気、青は水の領域を示す。Fig.2(a)は水平断面方向の水と蒸気の分布である。丸で示す燃料棒表面は薄厚の液膜で覆われ、その外側を蒸気が流れる。燃料棒間隔が狭い場所では、隣り合う燃料棒が液膜によって接続される架橋現象が見られる。一方、蒸気は燃料棒三角ピッチ配列の中心部を流れる。ここは狭隘部に比べて摩擦抵抗が低いため、蒸気は流れ易い。Fig.2(b)は軸方向の水と蒸気の分布例である。手前側は燃料棒表面である。燃料棒表面は鉛直方向に対しても液膜で覆われるが、液膜厚さは一定ではなく、所どころに極

端に薄い液膜が存在することがわかる。

Fig.3 に軸方向の流速分布の予測結果を示す。Fig.4(a)は燃料集合体の入口近傍の結果であり、断面方向に流速はほぼ一様である。Fig.3(b)はスペーサ領域（Fig.1 の No.1 Spacer）の結果である。スペーサの存在による流路断面積の縮小によって流速が加速される様相がわかる。

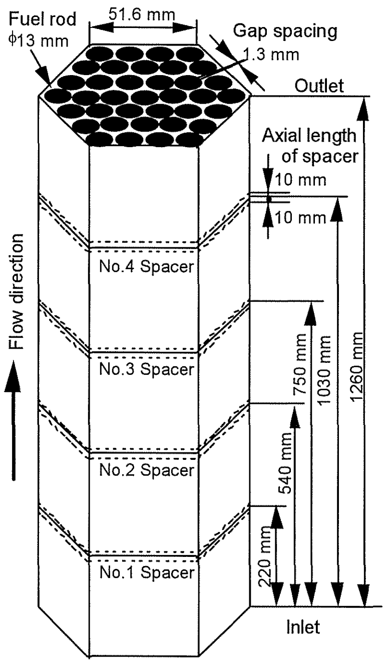
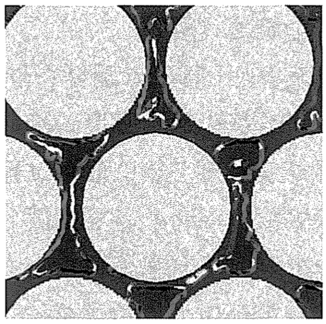
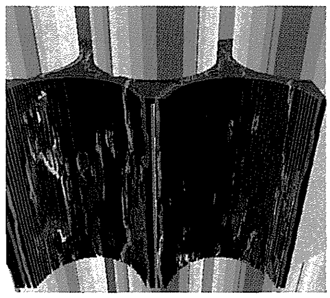



Fig.1 Analytical geometry of a tight-lattice fuel bundle.

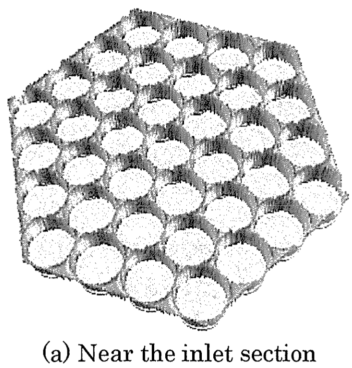


(a) Horizontal direction

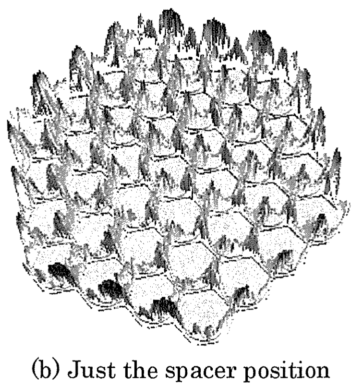


(b) Axial direction

Fig.2 Water and Vapor distributions around fuel rods in a tight-lattice fuel bundle



(a) Near the inlet section



(b) Just the spacer position

Fig.3 Axial velocity distributions in the horizontal direction

3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1）． K. Takase, H. Yoshida, Y. Ose, H. Tamai, Numerical Analysis of a Water-Vapor Two-Phase Film Flow in a Narrow Coolant Channel with a Three-Dimensional Rectangular Rib, ICONE11-36232, (2003).

2). 高瀬和之, 吉田啓之, 小瀬裕男, 玉井秀定, 叶野琢磨, 秋本　肇, 低減速軽水炉の燃料集合体内二相流挙動の大規模数値シミュレーション, 日本混相流学会年会講演会, (2003).

3). 高瀬和之, 小瀬裕男, 吉田啓之, 叶野琢磨, 秋本　肇, 稠密バンドル内の流動特性に関する大規模直接解析, 日本機械学会流体工学部門講演会, (2003).

4). K. Takase, H. Yoshida, Y. Ose, H. Tamai, H. Akimoto, Large-Scale Numerical Simulations on Two-Phase Flow Behavior in a Fuel Bundle of RMWR with the Earth Simulator, International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications (SNA2003), Paris, France, (2003).

5). K. Takase, H. Yoshida, Y. Ose, S. Satake, Liquid Film Flow Behavior in a Narrow Channel with Roughness under a Two-Phase Turbulent Flow Condition, 56th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics in American Physical Society, East Rutherford, USA, (2003).

6). K. Takase, H. Yoshida, Y. Ose, H. Tamai, H. Akimoto, Numerical Analysis of Two-Phase Flow Characteristics in a Reduced-Moderation Light Water Reactor, 2003 ANS/EMS International Winter Meeting, New Orleans, USA, (2003).

7). 小瀬裕男, 高瀬和之, 吉田啓之, 玉井秀定, 叶野琢磨, 大森雅彦, 狭隘多並列流路内二相流構造に関する数値予測, 第17回数値流体力学シンポジウム, B7-1, 日本流体力学会, 東京, (2003).

## ４．今後の利用予定：

次期導入予定の大型並列計算機を用いて、より大規模な解析体系下で二相流シミュレーションを継続して実施する予定。

## 4.1.4 相変化を含む液膜流挙動の解析

熱流体研究グループ
功刀　資彰

**1．利用の概要（要約）**：

加熱壁に沿って流下する液膜流を加熱あるいは蒸発させる過程においては、液膜破断が問題となる。液膜が破断した場合、その部分は乾き面となり熱伝達率が著しく低下することが問題となる。これは多くの化学工業過程にあらわれ、また原子炉の冷却系のおける限界熱流束などの諸問題とも深く関わっており、原子炉の経済性、安全性とも深く関係している。今回の利用では、加熱壁を流下する相変化を伴う液膜流挙動に関する2次元および3次元数値解析を行い、その界面波構造および伝熱特性について検討した。特に3次元解析では莫大な計算能力が必要となるため、大型計算機の使用は不可欠である。

**2．利用の内容・結果**：

垂直自由落下液膜流の界面波は本質的に全て3次元界面波へ遷移する。しかし、従来の数値解析による液膜流の内部構造に関する研究では 2 次元界面波構造の解析に留まっている場合がほとんどであり、3次元界面波の界面波特性および内部流動構造については全く検討されていない。多相熱流体直接解析手法である MARS 法を用いて加熱壁に沿って流下する液膜流の3次元解析を行った。計算容量はおよそ 6GB 程度必要となり、定常状態へと達するために必要なおよそ 100 万ステップを計算するためには大型計算機の能力が必要となる。

Figure 1 に液膜界面の可視化像を示す。本研究により、上流部分での2次元波が下流へ進むに従って3次元波へと遷移して行く様子が数値解析によって始めて捉えられた。さらに、Figure 2 では界面波の前方には3次元的な渦構造があることを示している。これらの渦構造は2次元解析にでも確認されており、伝熱特性に影響を与える可能性が指摘されている。また、3次元界面波の伝熱特性解析では、人工的に制御された擾乱による2次元波が、不安定性に起因する3次元波に比べて高い伝熱促進効果を有することを指摘した。しかし、その3次元波の内部構造の詳細は不明であり今後の研究対象である。これら液膜流界面波構造と伝熱特性の詳細な検討は、将来、さらなる液膜流の工学的応用に向けて必要不可欠なものとなろう。

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）**：

国内学会

*1 功刀　資彰（京都大学大学院・助教授）　木野　千晶（京都大学大学院生）
芹澤　昭示（京都大学大学院・教授）　“垂直自由落下液膜流の界面波構造と伝

熱特性”第17回数値流体力学シンポジウム講演論文集(2003), B11-1
2003年12月17日～19日　(東京・国立オリンピック記念青少年センター)

国際会議
*2 T.Kunugi (京都大学大学院・助教授), C.Kino (京都大学大学院生) and A.Serizawa (京都大学大学院・教授) “Surface wave structure and Heat Transfer of Vertical Liquid Film Flow” The 56th Annual Meeting of the Division of Fluid Dynamics (November 23-25, 2003) Vol.48, No.10, 198

論文
*3 T.Kunugi (京都大学大学院・助教授)., C.Kino (京都大学大学院生) “Numerical simulation of oscillatory falling liquid film flows” Fusion Engineering and Design (2003) Vol.65-3 387-392

**４．今後の利用予定：**

Reynolds 数や界面波の振動数の条件を変化させ、その影響を検討する。また、メッシュサイズをさらに細かくした計算を行う。

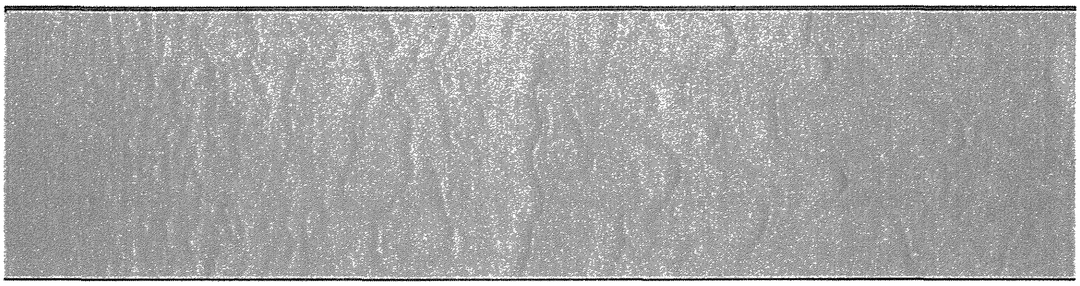
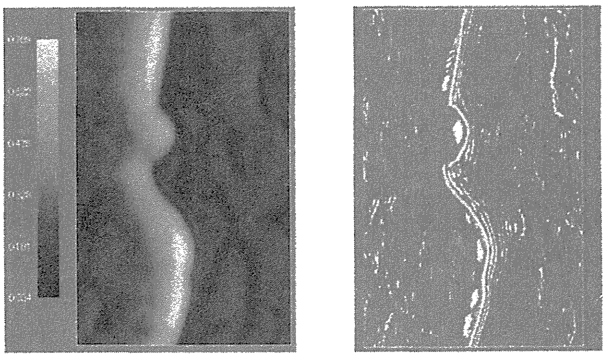
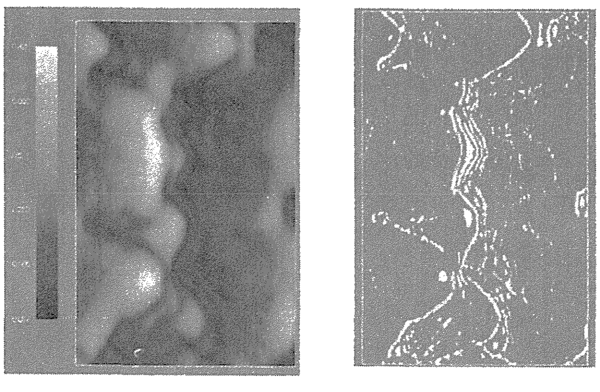


**Fig.1 Visualization of free surface for Re=75**



**(a) Film thickness** **(b) 2nd invariant**

**Fig.2 The contour of Film thickness and 2nd invariant between $X(x/\delta_0) = 330$ and 450 for Re=75, $f$= 0Hz**



**(a) Film thickness** **(b) 2nd invariant**

**Fig.3 The contour of Film thickness and 2nd invariant between $X(x/\delta_0) = 330$ and 450 for Re=75, $f$= 20Hz**

## 4.1.5 原子炉燃料集合体内スペーサ周りの液滴/液膜挙動の数値シミュレーション

熱流体研究グループ
玉井秀定

**1．利用の概要（要約）：**

熱流体研究グループでは、文部科学省の公募特会事業「超高燃焼水冷却増殖炉用燃料集合体に関する技術開発」の一環として、高稠密格子炉心での伝熱的、流動的限界を決定できる熱特性予測技術の開発を実施している。その一部として、粒子法に基づく詳細二相流解析コードを用いたスペーサ効果解析技術の開発を進めている。原子炉燃料集合体内に設置するスペーサの本来の役割は燃料棒を所定の格子位置に保持することであるが、従来のBWRにおいてはスペーサの存在により炉心除熱性能が向上することが経験的に知られていた。本スペーサ効果解析技術開発では、複雑な燃料集合体内の二相伝熱流動現象に対してスペーサ効果の解析的評価が可能な高精度の二相伝熱流動解析技術の開発を目指している。本解析では、複雑な流路形状と気液界面形状を模擬するために大規模、長時間のシミュレーションを実施する必要があり、大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

**2．利用の内容・結果：**

原子炉燃料集合体内スペーサ周りの液滴/液膜挙動の数値シミュレーションを行うため、粒子法に基づく詳細二相流解析コードの開発を行った。本手法は、流体を粒子の集まりで表現し、流れの支配方程式に対する離散的な計算を周囲の複数の粒子との相互作用モデルを通じて行う手法である。15 年度は、解析コードの開発および予備解析と大規模計算を実施するためのベクトル化/並列化を実施した。稠密格子炉心内の液滴/液膜挙動を解析するには、直径数十μm程度の液滴を模擬するための十分な粒子数（空間解像度）が必要であり、この様な解析は大型計算機の利用により始めて可能となる数値実験である。15年度に得られた主な成果を以下に示す。

- スペーサ近傍の液膜/液滴挙動を解析的に解明する初期段階として、粒子法コードに粘性力モデルを導入し、障害物を含む流れ場の解析を行った。その結果、障害物近傍での流動挙動、特に障害物後流の速度欠損の様相を解析的に把握できた（図1)。また圧力損失は摩擦損失の理論値とほぼ一致することを定量的に確認できた。
- 気液二相流解析の重要な支配因子である気液界面挙動を解析するのに不可欠な表面張力を計算するため、表面張力評価に用いる曲率を幾何学的に求める表面張力モデルを組み込んだ粒子法を開発した。液膜/液滴流解析に適用した結果、液滴の形状変化、液滴と液膜流の干渉などを解析できる見通しを得た（図2)。
- 稠密格子炉心におけるスペーサ近傍の液膜/液滴挙動を解析的に解明し、スペーサ形状による除熱性能への影響を評価するため、スペーサ周りの液滴飛散挙動の予備

解析を実施した。その結果、気流への液滴の飛散、液滴とスペーサの干渉などの現象を解析でき、スペーサ近傍の液膜/液滴挙動を解析的に評価できる見通しを得た。（図 3）

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）**：

1)．　玉井秀定、
“粒子法によるスペーサまわりの液滴飛散挙動に関する 3 次元解析”、
第 22 回日本シミュレーション学会大会、7-5、pp. 237-240、東京、6 月 19 日(2003).

2)．　鈴木貴行、
“粒子法を用いた障害物を含む流れ場の解析”、
日本機械学会山梨講演会、402、pp. 79-80、山梨、10 月 25 日(2003).

3)．　鈴木貴行、
“粒子法を用いた液滴/液膜流解析”、
第 17 回数値流体力学シンポジウム、B9-3、pp. 77、12 月 19 日(2003).

**4．今後の利用予定**：

次期導入予定の並列計算機を用い、より大規模な体系における現実的な条件での液膜/液滴挙動のシミュレーションを継続して実施する予定。

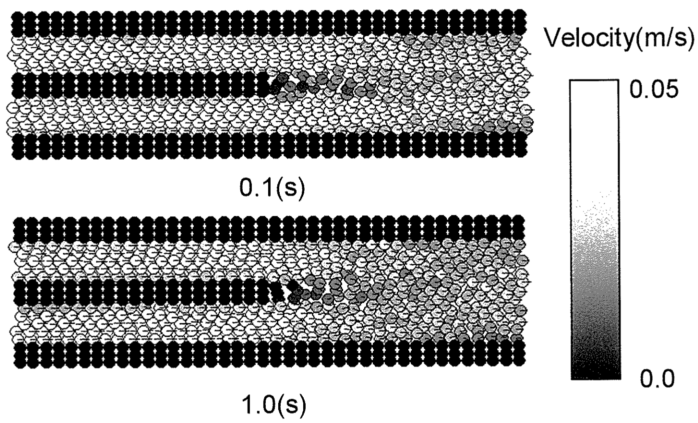



図 1. 障害物を含む流れ場の解析

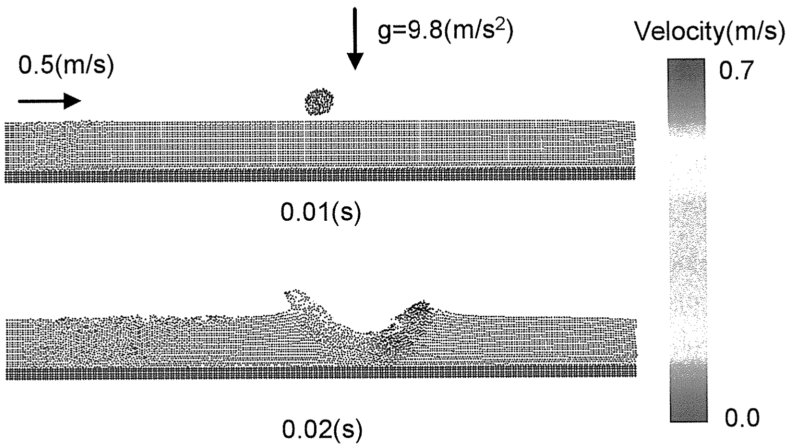



図 2. 液滴と液膜流の干渉の解析

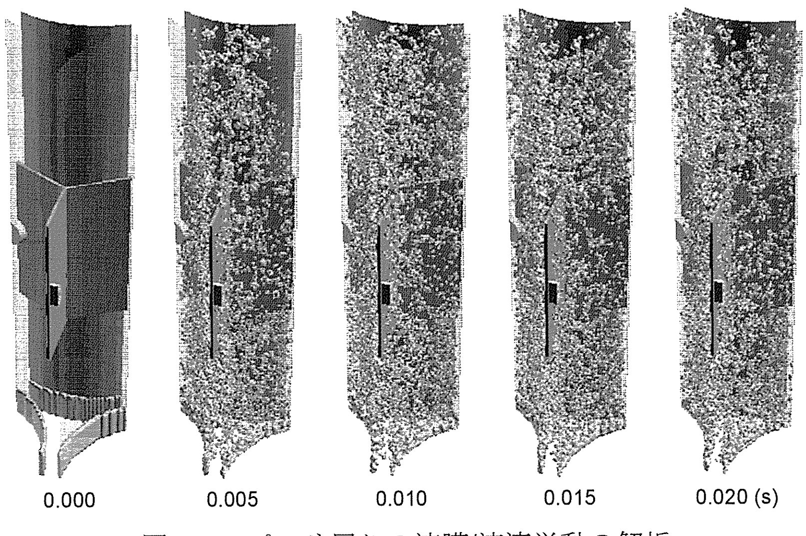



図 3. スペーサ周りの液膜/液滴挙動の解析

## 4.1.6 原子炉内熱流動現象に関する数値シミュレーション

熱流体研究グループ
佐竹信一

**1．利用の概要（要約）**：

原子炉の熱流動現象で重要な乱流熱伝達のＤＮＳを行っている。特に大規模乱流構造が生じる高レイノルズ数乱流現象に注目し大規模並列計算を行っている。

**2．利用の内容・結果**：

ＶＰＰ５０００で８並列を行っている。チャネル乱流の初期流れ場を構築した。また、同台数により地球シミュレータ用の円管内乱流の初期流れ場を構築した。このデータをもとに地球シミュレータにて計算格子を増やし１４４ノード、2テラバイトを達成した。この計算結果の一部として図１の低圧分布を示す。円管壁付近に小さな無数の渦構造が見られる。さらに円管中心では大きな渦構造が確認できる。

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）**：

1)．高瀬和之, 吉田啓之、玉井秀定、小瀬裕男、叶野琢磨、秋本肇、功刀　資彰，佐竹信一, 直接解析手法による原子炉内複雑熱流動挙動の大規模数値シミュレーション，日本原子力学会「２００３年秋の大会」予稿集，2003、総23.

2)．Satake, S., Kunugi, T., Takase, K., Ose, Y., and Naito N., " Large Scale Structures of Turbulent Shear Flow," Lecture Notes in Computer Science 2858 , High Performance Computing, A. Veidenbaum et al. (Eds.), Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2003, pp.468-475.

3)．佐竹信一，功刀資彰，高瀬和之，小瀬裕男，内藤宣仁，地球シミュレータを用いた円管内乱流のＤＮＳ，第17回数値流体力学シンポジウム，A3-3，日本流体力学会，東京，(2003).

4)．佐竹信一，功刀資彰，内藤宣仁，高瀬和之，小瀬裕男，地球シミュレータによる大規模乱流計算の可視化, 計算工学講演会論文集　Vol.9 (2004).

**4．今後の利用予定**：

乱流熱伝達を考慮したＤＮＳを行う予定である。

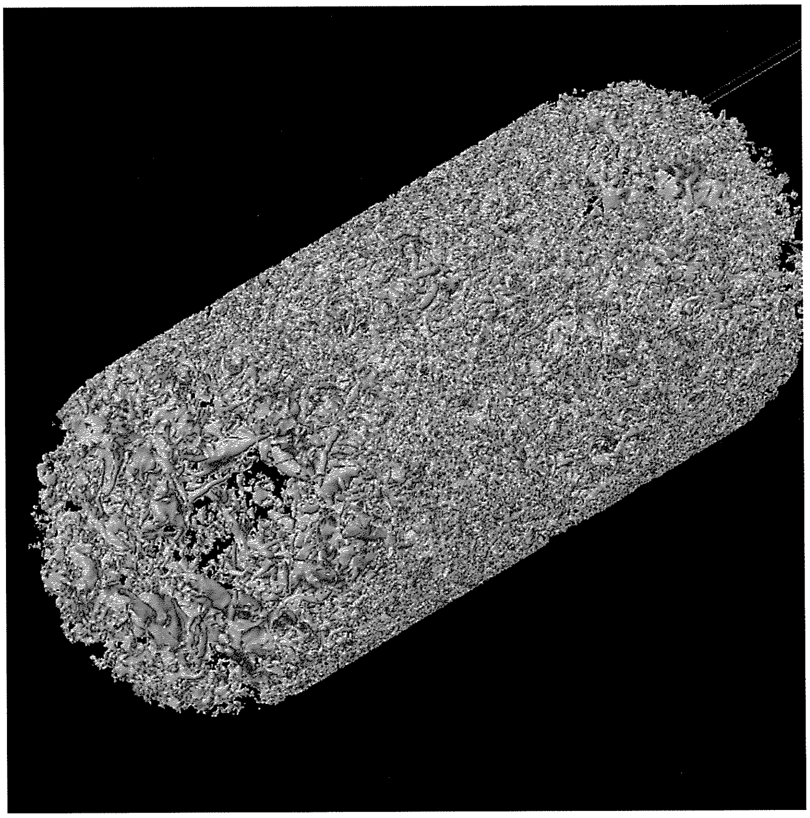


図１　地球シミュレータによる大規模渦構造

4.2 物質科学研究部

## 4.2.1 相対論密度汎関数法を用いたアクチノイド化学研究

抽出分離化学研究グループ
平田勝

**1．利用の概要（要約）**：

相対論電子状態計算法を用いて、さまざまなアクチノイド化合物の電子状態を計算し、化学結合状態を解明する。また、得られた分子軌道エネルギーや軌道電子数などの情報をもとに、分光分析実験の理論的解釈に役立てる。

**2．利用の内容・結果**：

カッセル大学のフリッケ教授のグループによって開発されたスピン分極を考慮した相対論密度汎関数法を VPP5000 および ITBL に導入した。ランタノイド元素とアクチノイド元素の有機配位子との化学結合状態を調べ、配位子窒素原子とアクチノイド元素との共有結合性はランタノイド元素のそれと比較してわずかに強いことがわかった。また、非常に重いアクチノイド元素であるノーベリウム２価の水和イオンの構造最適化を行い、その化学的挙動がアルカリ土類金属である Ca に類似していることを明らかにした。この結果は、ノーベリウム２価イオンのイオン交換実験では Ca に類似しており、溶媒抽出実験では Sr に類似しているという過去の報告のうち、イオン交換実験による結果をサポートする。

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）**：

M. Dobler, M. Hirata:
"Molecular dynamics simulations of lanthanide (III) diphenyldimethylpyridinyl-dicarboxyamide complexes in water and in methanol: evidence for both first and second sphere complexes"
Phys. Chem. Chem. Phys., 6 (2004) 1672-1678.

M. Kurihara, M. Hirata, R. Sekine, J. Onoe, H. Nakamatsu:
"Theoretical study on the alloying behavior of α-uranium metal:
α-uranium alloy with 3d transition metals"
J. Nucl. Mater. 326 (2004) 75-79.

J. Anton, M. Hirata, B. Fricke and V. Pershina:
"Improved density functional calculations including magnetic effects for RfCl4 and its homologues."

Chem. Phys. Lett. 380, (2003) 95-98.

M. Dobler, M. Hirata and S. Tachimori:
"Quantum chemical study of $Ln^{3+}$(pyridine-dicarboxy-amide)1 complexes"
Phys. Chem. Chem. Phys., 5, (2003) 2499-2504.

**4．今後の利用予定**：

今後、引き続き本研究を継続し、重元素の化学的挙動を計算化学的に解明する。

## 4.2.2 使用済み核燃料の乾式再処理プロセスにおいて使用される溶融塩系の分子動力学計算

アクチノイド科学研究グループ
岡本芳浩

### 1．利用の概要（要約）：

アクチノイド科学研究グループでは、使用済み燃料の新しい再処理法として、溶融塩技術を駆使した乾式再処理法の開発を進めている。同時に、乾式再処理プロセスにおいて使用される溶融塩系の構造や物性の情報取得にも力を入れている。放射光XAFSなどによって明らかにした構造情報の解析や、構造情報をもとに計算モデルの最適化を行い、拡散係数、粘性率や電気伝導度などの計算を実施した。

### 2．利用の内容・結果：

イオンの分極効果を考慮した分子動力学計算コードをVPP5000上で並列化し、8並列を利用した大規模・大統計量計算を実施した。

(1) 分極モデルによるウラン塩化物融体の構造と電気伝導度

従来の剛体球モデルでは良好に再現できなかった $UCl_3$ 融体の構造を、塩化物イオンの分極効果を考慮することにより再現することができた。図1に $UCl_3$ 融体のX線回折測定による相関関数G(r)と、分極モデルと剛体球モデルによるMD計算の結果を示す。剛体球イオンモデルでは、$U^{3+}$-$U^{3+}$相関による第2ピークが強いクーロン反発で再現できなかったが、塩化物イオンの双極子分極による $U^{3+}$-$U^{3+}$対の遮蔽効果により良く一致しているのが分かる。

このモデルでは、単純な分極効果を与えるのではなく、塩化物イオンの置かれた環境に応じて双極子分極の度合いを計算によって決定している。そのために、通常のMD計算に比べて極めて長い演算時間を必要とし、大きな系の取り扱いや大統計量を必要とする物性計算ができなかった。VPP5000上でのベクトル・並列化によって数千にも及ぶ大きな系で100万MDステップを超える統計量の取得が可能になり、粘性率や電気伝導度のような動的性質の計算も可能になった。図2に $UCl_3$ 融体の電気伝導度の計算結果を示す。構造解析によって最適化されたモデルは電気伝導度においても実験報告値と良好に一致している。今後は、このような計算技術を用いて、データの乏しい希土類やアクチノイドなどの多価金属塩化物融体の物性予測を目指す予定である。

(2) 無秩序系のXAFSシミュレーション

SPring-8を利用した放射光X線吸収微細構造(XAFS)測定は、溶融塩系の構造解析ツールとして大変有効である。また、XAFSは相互作用ポテンシャルに非常に敏感

であり、MD 計算との相互利用の効果は大きい。しかしながら、高温融体の XAFS は解析が複雑でありデータの解釈を困難にしている。その解決策として MD 計算から XAFS 信号を導出する手法を考案した。結晶系の XAFS 信号計算には、ワシントン大学で開発された FEFF があり、幅広く用いられている。本研究では、高温の融体ではそのまま適用することができないと考えられていた FEFF を、MD 計算の各ステップにおけるイオンの配列を結晶と見なして、多くの統計量について平均化することにより XAFS 信号を取り出す手法として利用した。図３に測定温度 1000℃で取得した白金の XAFS スペクトルと、MD 計算と FEFF を組み合わせて平均化して得たスペクトルを示す。クラスターの数、すなわち FEFF の計算蓄積数 2500 回では一致していないが、数を重ねるごとに改善され、20000 回ほどで収束して実験値と良く一致したことが分かる。この手法を用い高温の溶融塩の XAFS 計算を実施して、放射光 XAFS データの解析を進めている。

## ３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1). Y.Okamoto, T.Yaita, K.Minato
"High-temperature XAFS study of solid and molten $SrCl_2$",
Journal of Non-Crystalline Solids,**333**(2004)182.

2). Y.Okamoto
"XAFS simulation of highly-disordered materials",
Nuclear Instruments and Method in Physics Research A, 526(2004)572.

3). 岡本芳浩、矢板毅、塩飽秀啓、湊和生
"分子動力学法と FEFF による高温融体の XAFS 解析"
第 17 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム、平成 17 年 1 月、つくば

4). Y.Okamoto, P.A.Madden,
"Structural Study of Molten Lanthanum Halides by X-ray diffraction and Computer Simulation Techniques"
International IUPAC Conference on High Temperature Materials Chemistry(HTMC-XI), 平成 15 年 5 月、東京

5). Y.Okamoto, P.A.Madden, K.Minato,
"X-ray diffraction and molecular dynamics simulation studies of molten uranium chloride"
11th Symposium on Thermodynamics of Nuclear Materials（STNM-11）平成 16 年 9 月、カールスルーエ・ドイツ

## ４．今後の利用予定：

本報告では乾式再処理において代表的な金属塩化物 $UCl_3$ といった単体の計算結果について示した。しかしながら、実用上重要なのは、単体の状態ではなく、例えば

LiCl-KCl 共晶塩に微量溶けた $UCl_3$ であり、いわゆる多成分系である。MD 計算における多成分系の取り扱いは、モデル自体が複雑になるだけでなく、より多くの粒子数の取り扱いが要求される。現在、新しい MD 計算コードをスカラー並列化する作業を進めており、多成分系の計算に利用する予定である。

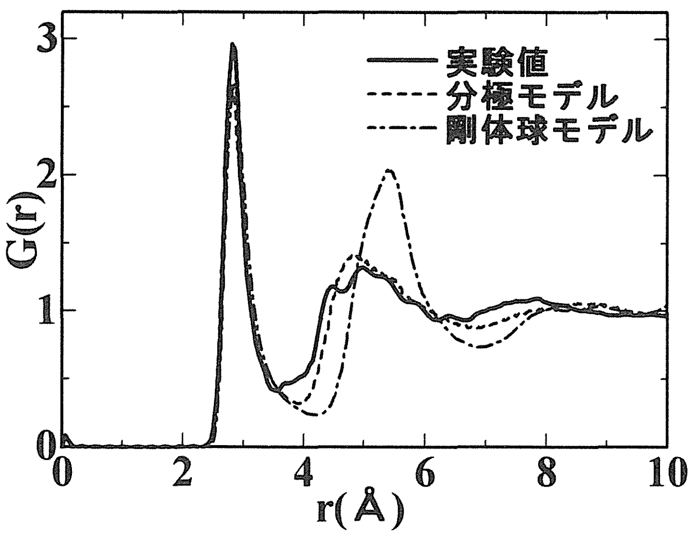



図 1　$UCl_3$ 融体の 1200K における相関関数 G(r)

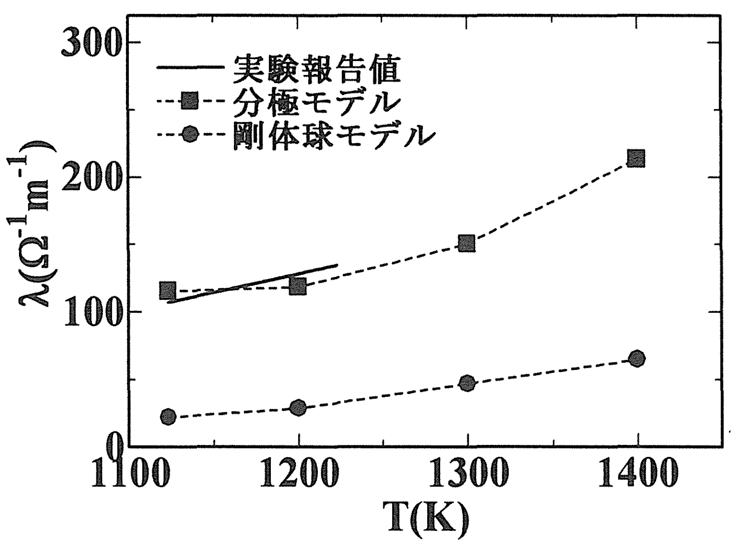



図 2　$UCl_3$ 融体の電気伝導度

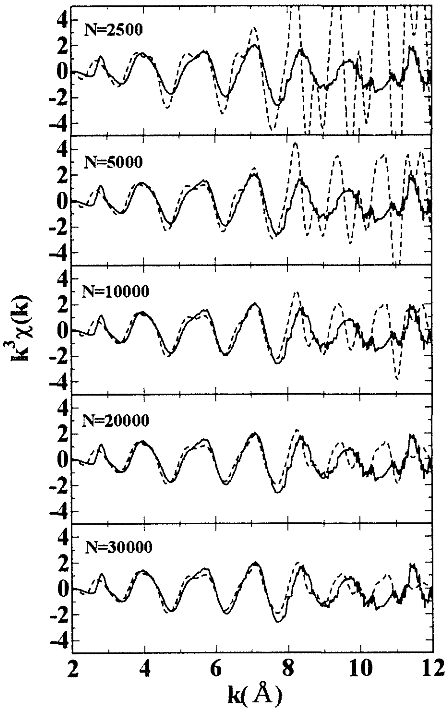



図３　白金の 1273K における $L_3$ 吸収端 XAFS スペクトル
N は使用したクラスターの数すなわち FEFF の計算回数、20000 回を超えるとスペクトルの計算値は収束した。

## 4.2.3 相対論電子状態計算法の開発研究

抽出分離化学研究グループ
田中久美子

### 1．利用の概要（要約）:

相対論 DV-DFS 法を用いて MgO 中の Mg 原子を An, Ln 原子で置換したときの電子状態の計算を行った。これらの計算を行うことによって、MgO 中の An または Ln の結合の特徴を把握し、挙動を予測することを目的としている。

### 2．利用の内容・結果：

計算方法には、相対論 DV-DFS 法を用いた。まず、MgO5x5x4 層原子数 100 個のクラスターを、基本の MgO クラスターモデル（Fig. 1）として決定し、基本のモデルの周囲に 1352 個の点電荷を配置し、MgO のみと中心の Mg1 原子を An(= U, Np, Pu, Am, Cm) と Ln（= Ce, Nd, Sm, Eu, Gd）で置換した計算を行った。An, Ln どちらも初期電荷を３価とし、置換した構造の An(Ln)-O 距離は、各元素の３価・６配位イオンの結合半径より推定した。

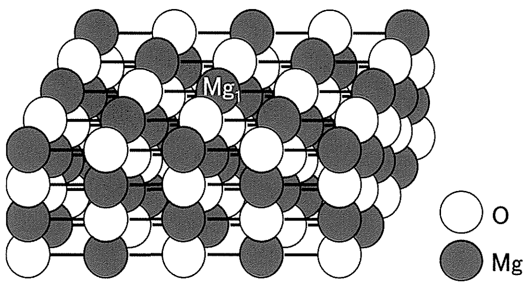



Fig. 1. Calculated model cluster for An+MgO system

MgO のみと An で置換したときの各原子(Fig. 2)の有効電荷を Table 1 にまとめた。中心原子 Mg を An で置換すると、基盤 MgO のイオン結合性が弱くなり、広い範囲に渡って電荷移動が起こることが推測された。また、MgO 中での An 間の有効電荷を比較すると、U ＞ Np ＞ Pu ＞ Am ＞ Cm と原子番号が大きくなるにつれてイオン性が小さくなるということが分かった。

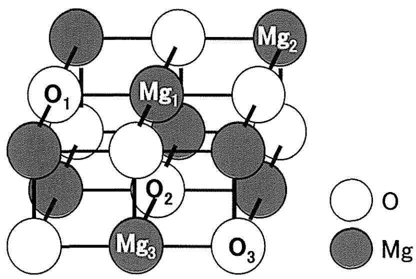



Fig. 2. A part of model cluster

また、Am, Cm 間の有効電荷の変化はそれ以外のものに加えて小さいことが読み取れる。これは、U － Pu 原子が高い価数を取りやすいのに対して、Am, Cm は3価安定という性質を示唆している。

Table 1. Effective Charged for An+MgO system

| | Mg+MgO | U+MgO | Np+MgO | Pu+MgO | Am+MgO | Cm+MgO |
|---|---|---|---|---|---|---|
| $Mg(An)_1$ | **0.71** | **0.64** | **0.58** | **0.53** | **0.50** | **0.49** |
| $Mg_2$ | 0.72 | 0.36 | 0.37 | 0.37 | 0.38 | 0.38 |
| $Mg_3$ | 0.64 | 0.27 | 0.28 | 0.28 | 0.29 | 0.29 |
| $O_1$ | -0.74 | -0.19 | -0.20 | -0.21 | -0.23 | -0.23 |
| $O_2$ | -0.70 | -0.23 | -0.23 | -0.25 | -0.26 | -0.26 |
| $O_3$ | -0.72 | -0.37 | -0.37 | -0.37 | -0.38 | -0.38 |

同様に Ln の有効電荷を解析し、An, Ln についてまとめたものが Fig. 3 である。この図より、An は原子番号とともに単調に有効電荷が減少するのに対して、Ln では Ce, Nd で異なる傾向が見られる。また、Pu の代替物質として利用される Ce が Pu と同等の有効電荷を示していることは、この2元素がよく似た傾向を持つことが示唆される。全体的に Ln よりも An が大きな有効電荷をもつ傾向があり、MgO 中では Ln の方が還元されやすい事が分かった。

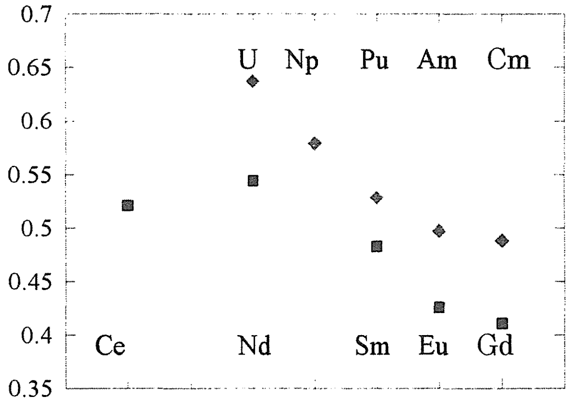



Fig. 3. Effective Charges for An and Ln atoms

Fig. 4 は An (U － Cm) +MgO の An−O における Bond overlap population を図示した。この図より、HOMO より−8 eV 付近に結合に最も関与する軌道が分布し、HOMO 付近の軌道は Am, Cm の系で反結合性が現れることが分かった。

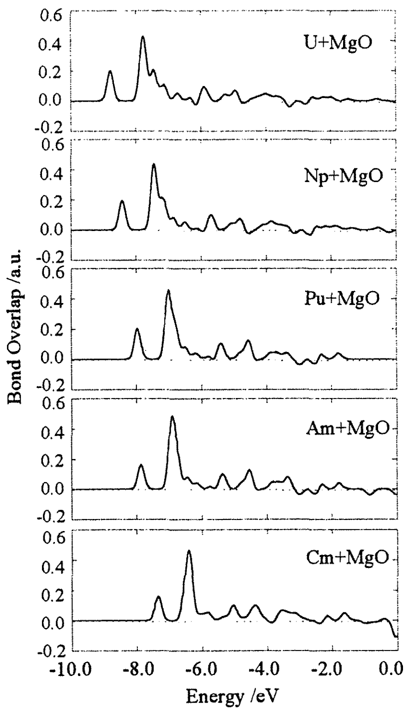



Fig. 4. Bond overlap population between An(U – Cm)-$O_1$

さらに詳細に解析するために Am+MgO 系での Bond overlap population と価電子帯の主成分である O*2p*, Am*5f*, Am*6d* の状態密度を比較した (Fig. 5)。この図より結合性軌道のほとんどは、Am*6d*-O*2p* の相互作用より生じており、化学結合において大きな役割を果たすことが分かった。An*6d* 電子数は U > Np > Pu > Am >Cm であるため、原子番号の小さい An 原子ほど結合が強いことが推測される。また、HOMO 付近の反結合性軌道は Am*5f*-O*2p* の相互作用のためであり、このレベルでの分子軌道が原子番号とともに反結合性を示すため、Am, Cm の系における結合がさらに弱まることが分かった。

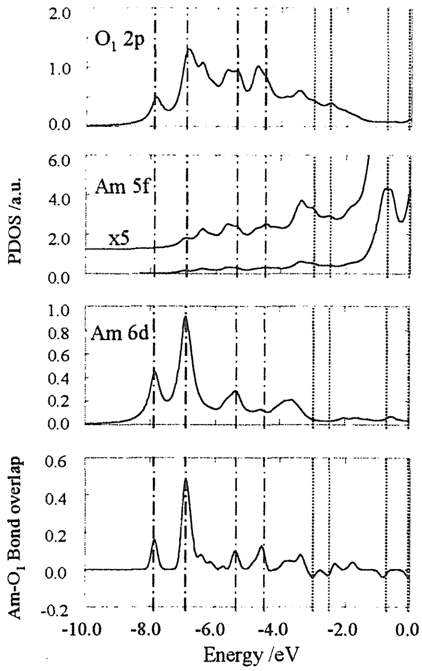



Fig. 5. Bond overlap population of $Am-O_1$ with PDOS

Fig. 4, 5 により明らかになった An*5f*、*6d* 電子の基本的な寄与を Ln と比較するために電子数と Orbital overlap population への寄与を Fig. 6 に図示した。横軸に *d*, *f* 電子数をとり縦軸に *d*, *f* 軌道と O*2s*, *2p* 間の Orbital overlap population を取った。*d* 電子数は Orbital overlap population と正の相関があり、その傾きは An と Ln で代わらない。一方、*f* 電子数は Orbital overlap population と負の相関があり、その傾きは An の方が大きく Ln の２倍程度であることが明らかになった。

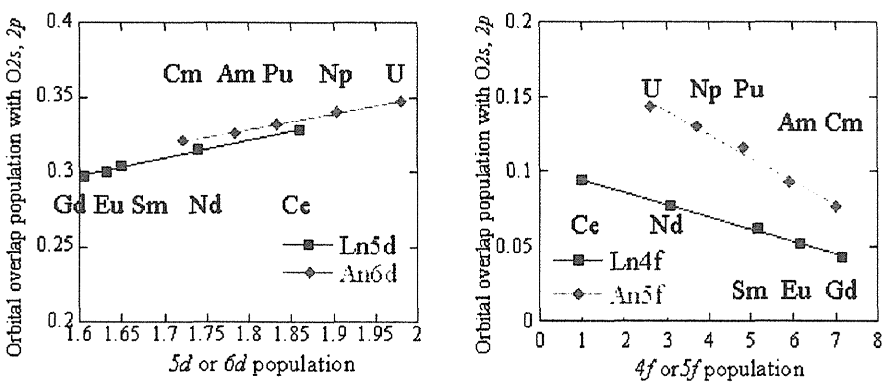



Fig. 6. Correlation between *d* (*f*) population of An (Ln) and its orbital population with O*2s*, *2p*

**３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）**：

2004.08.06　第17回DV-Xa研究会　（関西学院大学）

K. Tanaka, M. Hirata, R. Sekine, J. Nucl.Radiochem. Sci. 投稿中.

**４．今後の利用予定**：

今年度で終了の予定です

## 4.2.4　溶液内化学反応シミュレーション技術の開発及びシミュレーション

抽出分離化学研究グループ
池田隆司

### 1．利用の概要（要約）:

抽出分離化学研究グループでは，使用済み核燃料中に含まれるアクチノイド等長寿命核種や高価値元素の分離プロセスを確立することを目的に，アクチノイドに高選択的な新抽出剤の分子設計など分離技術の開発を行っている。抽出剤の分子設計には水溶液中でのイオンの水和構造とその動的挙動に関する知見が不可欠である。また，水溶液中での錯形成を理解するにはイオンの加水分解，脱水和などの化学反応をよく理解する必要があるが，実験だけでは困難である。本研究では，第一原理分子動力学法に基づきイオンの加水分解など基礎的な化学反応のシミュレーションに必要な技術開発を行い，イオンの水和構造とその動的挙動を調べる。

### 2．利用の内容・結果：

平成 15 年度は，HITACHI SR8000 と SGI Origin3800 に第一原理分子動力学コード CPMD を移植し，$AlCl_3$ 水溶液の分子動力学シミュレーションを実行した。HITACHI SR8000 ではノード内要素並列，ノード間 MPI 並列で擬似ベクトル化などの最適化を実施した後，4 ノードを用いてシミュレーションを実行した。Origin3800 では MPI のみで並列化し 64 プロセッサを用いた。本研究では，重水中での $Al^{3+}$イオンと $Cl^{-}$イオンの水和構造とその動的挙動を詳細に検討した後，$Al^{3+}$イオンの加水分解を拘束条件付き分子動力学により調べた。

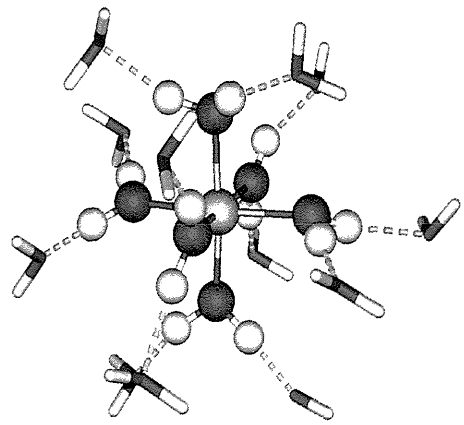


図 1. 第一原理分子動力学シミュレーションにより得られた $Al^{3+}$イオンの水和構造

第一原理分子動力学シミュレーションから得られた $Al^{3+}$イオンの水和構造は，第一水和圏に水 6 分子，第二水和圏に 12 分子を含む構造となっている（図 1)。第一水和圏の 6 分子は $Al^{3+}$イオンに正八面体状に配位する結果となっており，実験結果をよく再現している。$Al^{3+}$イオンの水和構造の特徴としては，$^{17}O$ NMR 実験から配位数を 6.0 と求められることから，配位水交換反応は極めて遅く，硬い構造をとっていると推測されている。シミュレーションから得られた $Al^{3+}$イオンの水和の性質として，

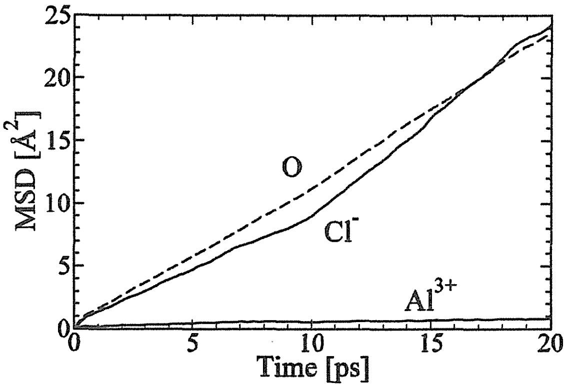



図 2. $AlCl_3$ 水溶液中での $Al^{3+}$ と $Cl^-$ イオンの平均自乗変位（MSD）

- $Al^{3+}$ イオンの拡散は 28 ps のシミュレーションではほとんど認められない（図 2）。
- 水和水の結合長と結合角にバルク水からの変化が認められる。特に第一水和圏の水分子に顕著である（図 3）。
- 水和水の双極子モーメントがバルク水のそれと比較して極めて大きい（図 4）。
- 第一水和圏の水分子の伸縮振動数が約 250 $cm^{-1}$ ほど低振動数側にシフトしている（図 5）。

を挙げることができる。これらは，$Al^{3+}$ イオンと第一水和圏の水分子間に特に強い静電相互作用が働いていることを示している。また，水分子の伸縮振動数に顕著な低下がみられることから OD 結合がバルクに比べかなり弱くなっていると考えられる。

そこで，$Al^{3+}$ イオンに関するプロトンの配位数を反応座標とする拘束条件付き分子動力学

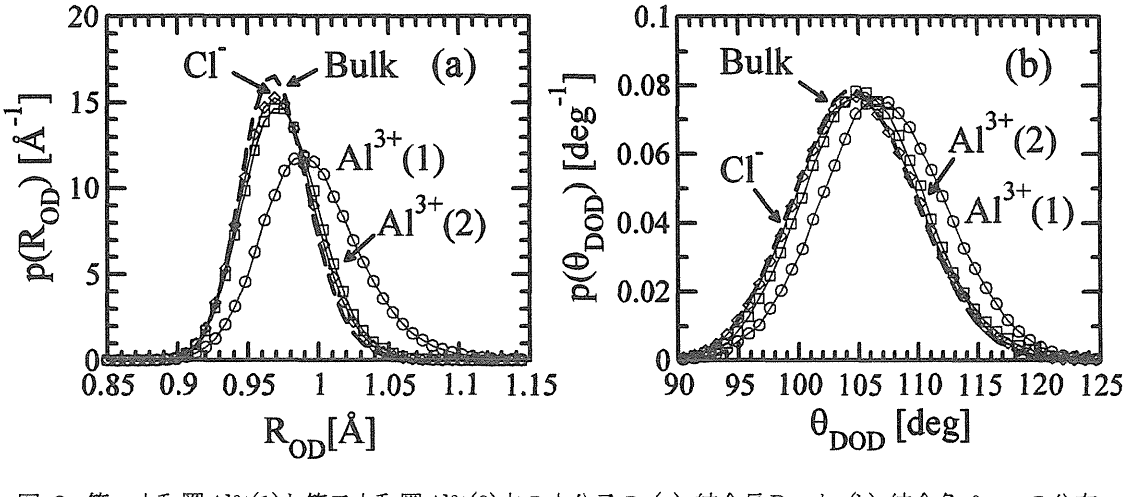



図 3. 第一水和圏 $Al^{3+}(1)$ と第二水和圏 $Al^{3+}(2)$ 内の水分子の（a）結合長 $R_{OD}$ と（b）結合角 $\theta_{DOD}$ の分布。比較のために $Cl^-$ イオンに配位している水とバルク水での分布も示した。

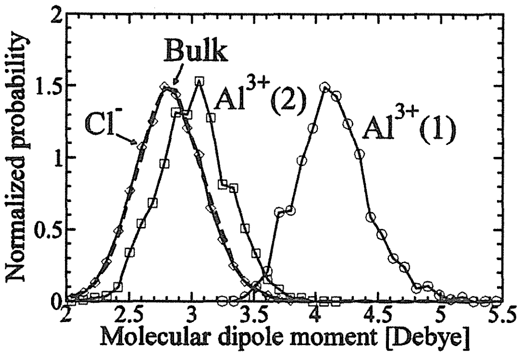



図 4. 第一水和圏 $Al^{3+}(1)$ と第二水和圏 $Al^{3+}(2)$内水分子の双極子モーメントの分布

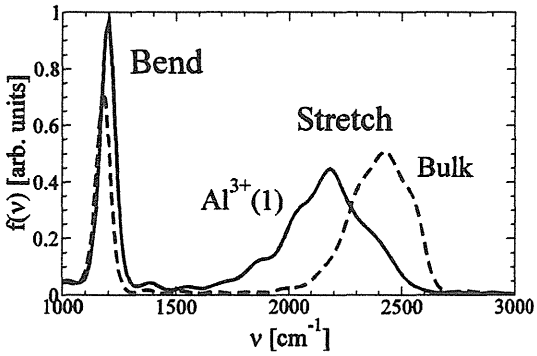



図 5. 速度の自己相関関数から求めた振動状態密度 f(ν)

を用いて，$Al^{3+}$イオンの加水分解 $Al(D_2O)_6{}^{3+} \rightarrow Al(D_2O)_5OD^{2+} + D^+$に対する自由エネルギー差$\Delta G^0$を求めたところ，8.0 kcal·mol$^{-1}$を得た。この値は加水分解定数の文献値から得られる値（6.9 kcal·mol$^{-1}$）とほぼ一致している。また，同様の手法で得られるバルク水の自己解離に対する$\Delta G^0$は 19 kcal·mol$^{-1}$であり，水のイオン積をよく再現する（$pK_w$=13.8）ことから，イオンの加水分解は，当該イオンに関するプロトンの配位数を反応座標として用いることにより，良く記述できることが分かった。また，加水分解が起きると脱水和が起き易くなり反応性が増大することが分かった。

## 3．利用の成果（学会，プレス発表，論文等）：

1) T. Ikeda, M. Hirata, and T. Kimura,
"*Ab initio* molecular dynamics study of polarization effects on ionic hydration in aqueous $AlCl_3$ solution",
J. Chem. Phys. **119**, 12386-12392 (2003).
2) T. Ikeda, M. Hirata, and T. Kimura,
"Hydration of $Y^{3+}$ ion: A Car-Parrinello molecular dynamics study",
submitted to J. Chem. Phys.
3) 池田隆司，平田勝，木村貴海,
"$AlCl_3$水溶液の第一原理分子動力学シミュレーション II",
日本物理学会 2003 年秋季大会，September 20-23, 2003/岡山
4) 池田隆司，平田勝，木村貴海,
"$AlCl_3$水溶液の第一原理分子動力学シミュレーション III",
日本物理学会第 59 回年次大会，March 27-30, 2004/福岡

## 4．今後の利用予定：

次期導入予定の並列計算機を用いて，水溶液中での希土類イオンなどの酸化還元反応，錯形成過程などのシミュレーションを実施する。

4.3 環境科学研究部

## 4.3.1 海洋中での物質の移行挙動の解明に関する数値シミュレーション

海洋環境研究グループ
小林　卓也

### 1. 利用の概要（要約）:

海洋環境研究グループでは、「海洋中での物質の移行挙動の解明」のテーマのもとに、海洋環境に存在する放射性物質等の移行挙動に対して計算科学的手法による研究を実施している。特に日本海、太平洋における広域海洋を対象とした海水循環機構の解明及び若狭湾、下北海域における沿岸海域を対象とした詳細な海水循環機構の解明を目的としたシミュレーション研究を実施している。本研究では大規模、長時間のシミュレーションを多数ケース実施することにより、計算結果を海洋観測結果と比較検討する必要があり、大型計算機の利用が必要不可欠である。

### 2. 利用の内容・結果:

プリンストン大学が開発した海水循環モデルPOMを並列化しVPP5000のvpdクラス(32PE)を利用した並列計算を行い、多数のパラメータ解析を経て安定した流れ場を作成した。また、高解像度領域計算手法（ネスティング）により日本海/北太平洋全域の計算結果を用いて若狭湾/下北海域の詳細解析を実施するプログラムを開発した。同時に気象庁が提供する再解析気象データ（領域客観解析データ）を入力とし、任意期間における海況の再現シミュレーションを実施するプログラムを開発した。これらのプログラムの開発により、平成16年度に完成する海洋環境評価システムの海水循環モデル部分をほぼ構築した。

### 3. 利用の成果（学会、プレス発表、論文等）:

1) Kobayashi, T., S, H, Lee and M, Chino: Development of Ocean Pollution Prediction System for Shimokita Region - Model Development and Verification -, J. Nucl. Sci. Technol., 39[2], 171-179(2002).

2) Kobayashi, T. and O, Togawa: Marine Environmental Assessment System of Radionuclides around Japan, Proc. of Int. Conf. on Radioactivity in the Environment,
Monaco, 2002.

3) 小林卓也: 原研における海洋シミュレーション研究, 放射線医学総合研究所シンポジウム「海洋環境における放射能研究の現状と未来」、千葉、3月 (2003)

4) Takuya Kobayashi, Haruyasu Nagai, Masamichi Chino and Orihiko Togawa: DEVELOPMENT OF SPEEDI-MP AND ITS APPLICATION TO A HYPOTHETICAL ACCIDENT OF A NUCLEAR

SUBMARINE IN THE JAPAN SEA, International Symposium on Radioecology and Environmental Dosimetry, Rokkasyo, 2003.

## ４．今後の利用予定：

海水循環モデル POM に波浪推算モデル WW3、大気循環モデル MM5 を動的結合したシミュレーションシステムの検証計算及びそれらを利用した汚染物質循環研究シミュレーションを実施する予定。

## 4.3.2 三宅島から噴出する二酸化硫黄の大気拡散予測と環境影響評価

大気環境研究グループ
西沢匡人

### 1．利用の概要（要約）:

大気環境研究グループでは、「大気中物質の動態予測に関する研究」のテーマのもとに、大気中に放出される放射性物質等の環境中での動態予測手法の研究開発を行っている。特に、２０００年７月の三宅島雄山の噴火に伴い、それ以降発生している大量の二酸化硫黄（$SO_2$）の環境影響を評価するためのコード開発を行ってきた。ここでは３年間の長期にわたる $SO_2$ の大気拡散、化学反応、地表面沈着を東アジア全体について評価する必要があり、大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

### 2．利用の内容・結果:

開発コードは、三宅島噴火で発生した $SO_2$ の大気中濃度や地面への沈着量を長期的なスパンで予測することを目的とする。$SO_2$ などの化学物質は中国大陸や日本の工業地帯からも発生するため、予測領域を広域と狭域の二領域に設定し、粗い計算格子の広域で汚染物質の大局的な挙動を予測し、その結果を取り入れながら、細かい計算格子の狭域内の詳細な汚染予測を、三宅島からの発生も考慮して行う。

使用したコードは、ペンシルベニア州立大学と米国立大気研究センターの開発した気象力学モデル MM5 に、大気化学物質の移流，拡散，化学反応，沈着の各過程を追加することにより、気象場と大気化学物質の濃度および沈着量を同時に計算可能にしたコードである。大気化学物質のモデルでは、$SO_2$ が OH との気相化学反応により硫酸イオン（$SO_4^{2-}$）に変化し、これが降雨による湿性沈着と乱流による乾燥沈着により地表に降下する過程を計算することで、大気中濃度や地表蓄積量を予測する。このモデルでは降水過程や化学反応まで含む大規模計算を長期間にわたり行うことになるため、プログラムの並列化により高速化を図っている。

１５年度はこのコードを三宅島の噴火に適用して、噴火から 3 年間の酸性物質降下量を地図化した。$SO_2$ の発生源には火山噴火のような自然起源のほかにも化石燃料の燃焼による人為起源のものがあるため、計算領域を東アジアと国内評価領域の二領域とした。そして、東アジアでの $SO_2$ の挙動を予測し、その結果を境界条件として考慮しながら、国内評価領域の計算で火山と領域内の工業地帯等からの $SO_2$ の挙動を予測した。国内評価領域は、本州中部 800 km 四方を 10 km 格子で分割しており、東アジアからの寄与評価のためには東アジアの東西 5,400 km、南北 4,000km を 40 km 格子で分割した（図１参照）。本計算は、3 年間にわたる長期間についての解析であり、関西研究所の並列計算機（(株) 富士通製プライムパワー）16 プロセッサを使用した。比較のため、三宅島の噴火がないと仮定した場合の３年間の計算も行い、三宅島噴火

に起因する湿性沈着量の増加を明らかにした。

解析により、噴火1年目の硫酸イオンの湿性沈着量は、噴火のない場合に比べ、関東平野で2～ 3倍、東海・北陸地方でも1.5～ 2倍増加していることを明らかにした(図2参照)。2年目以降は$SO_2$の放出量の低下とともに増加割合は減少傾向にあり、3年目には本州中部で三宅島噴火に起因する湿性沈着量の増加はほとんどなくなっている。火山活動が最も活発だった2000年8月から12月の関東平野での湿性沈着量は、中国で大気汚染が深刻な重慶や西安の1/5から1/10程度であり、噴火当初の$SO_2$の放出が長期間継続すれば将来の環境影響が懸念されたところであるが、現在の放出量で推移する限り、今後、本州中部で顕著な環境影響が現れることはないことを示した。

## 3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

学会発表、論文

(1) 西沢、茅野：三宅島火山ガスによる東アジアにおける硫酸イオンの沈着量増加の推定、第44回大気環境学会年会、2003.

(2) 西沢、茅野：メソスケール気象モデルと結合した大気化学物質輸送モデルの開発と三宅島火山ガスの大気拡散への適用、大気環境学会誌、39, PP. 34-42, (2004).

プレス発表

2003年9月18日：三宅島噴火により、関東平野の酸性物質の効果量がほぼ倍増

表彰

2004年6月9日：日立環境財団、日刊工業新聞社主催「第３１回環境賞（優良賞)」

## 4．今後の利用予定：

次期導入予定の並列計算機を用い、放射性物質や酸性雨物質などを対象に、より大規模な体系における現実的な条件でのシミュレーションを継続して実施する予定。

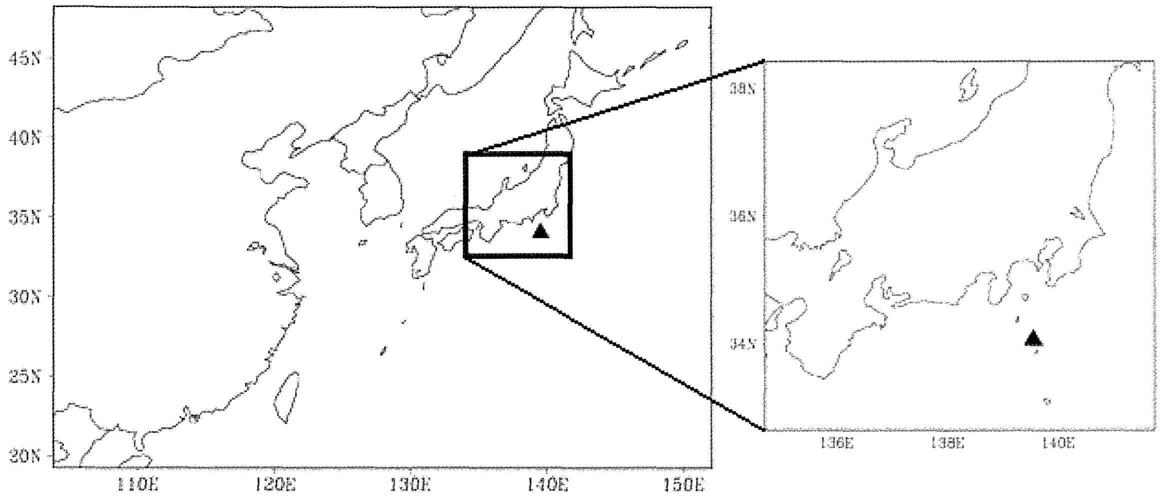



図１　環境影響評価の計算領域。国内評価領域（右図）は、本州中部 800 km 四方。
東アジア(左図)は東西 5,400 km、南北 4,000km。

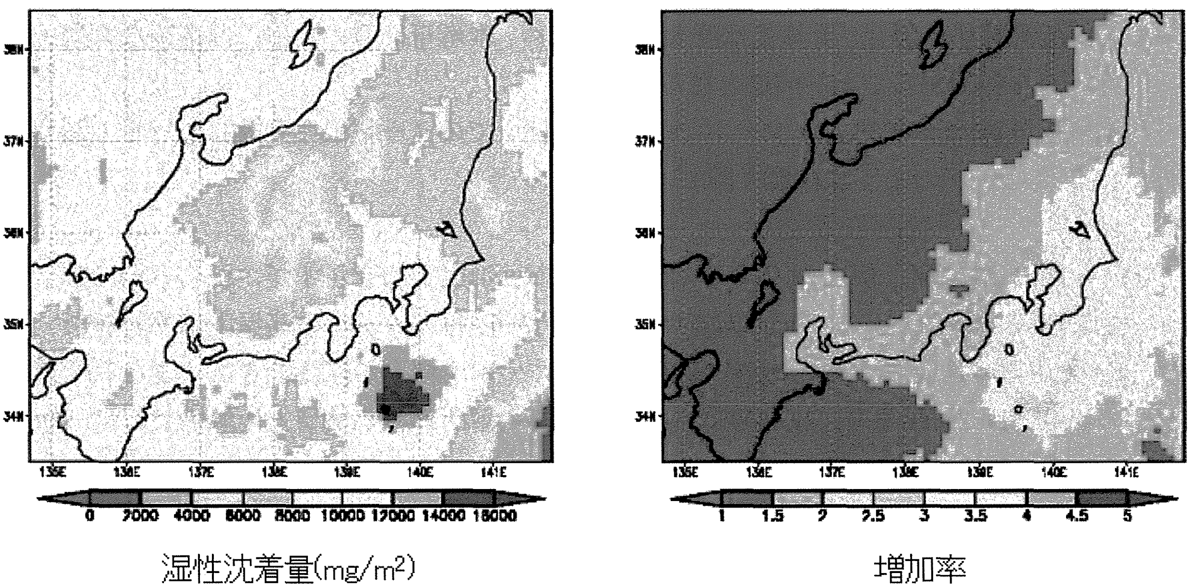



図２　噴火から３年間の硫酸イオンの湿性沈着量を積算した分布図と、三宅島火山ガスによる硫酸イオンの湿性沈着量の３年間の増加率。関東地方で 1.5 ~ 2.5 倍の増加、東海地方でも 1.5 ~ 2.0 倍の増加が見られる。

4.4　高温工学試験研究炉開発部

## 4.4.1 高温ガス炉内の伝熱流動現象に関する数値シミュレーション

HTTR 技術開発室
菊池　裕

### 1．利用の概要（要約）：

高温工学試験研究炉開発部では、文部科学省からの委託研究「高温ガス炉固有の安全性の定量的実証に関する技術開発」のテーマのもとに、高温ガス炉が有する固有の安全性を実証する安全性実証試験を高温工学試験研究炉で行っている。この安全性実証試験より得られた結果を基に高温ガス炉内熱流動現象の予測手法の開発・改良を行っている。ここでは、汎用の有限体積・熱流動解析コード「STAR-CD」を用いて炉内の熱流動現象に関する解析を行い、その再現可能性を検討し、将来の高温負ガス炉設計に資する計画である。

### 2. 利用の内容・結果：

本解析では、汎用熱流体解析コード STAR-CD を用いて、HTTR における圧力容器内熱流動現象の数値シミュレーションを行った。
図 1(a)に解析モデルを示すが、ここでは、炉心、固定反射体ブロック等の炉心構造物、圧力容器および圧力容器が設置されている圧力容器室までを解析対象空間としている。なお、HTTTR の炉心の対称性より 1/6 炉心を実際の解析モデルとしているが、計算セル数は約 157 万セルと比較的多い。また 1 次冷却材の流量を喪失するような過渡的な挙動を解析計算する場合、計算量は莫大となるため、本解析計算の実施には高速な大型並列計算機を利用することが前提となる。
本解析計算は SR8000 の 1 ノード（8 プロセッサ）でのノード内並列計算で行っており、15 年度は以下のような結果を得ている。

・図 1(b)に原子炉出力 9MW 定常時の鉛直断面温度分布を示すが、圧力容器内部では主に燃料棒および下部プレナムブロック部の温度が高く、その最高温度は燃料棒で　約 370℃となるなど圧力容器内外の温度分布全体の示す傾向が確認できた。また実測値との比較（図 2）により、圧力容器内構造物温度の解析値は実測値と比較的良好に一致することを明らかにした。
・原子炉出力 9MW 定常状態から循環機 3 台停止により 1 次冷却材ヘリウム流量を喪失した場合の非定常計算を行い、圧力容器内各所の温度変化挙動を明らかにした（図 3）。

### 3．今後の利用予定：

炉容器冷却設備、圧力容器周りコンクリートなども解析範囲に加え、より大規模な解析モデルでの数値シミュレーションを実施する予定。

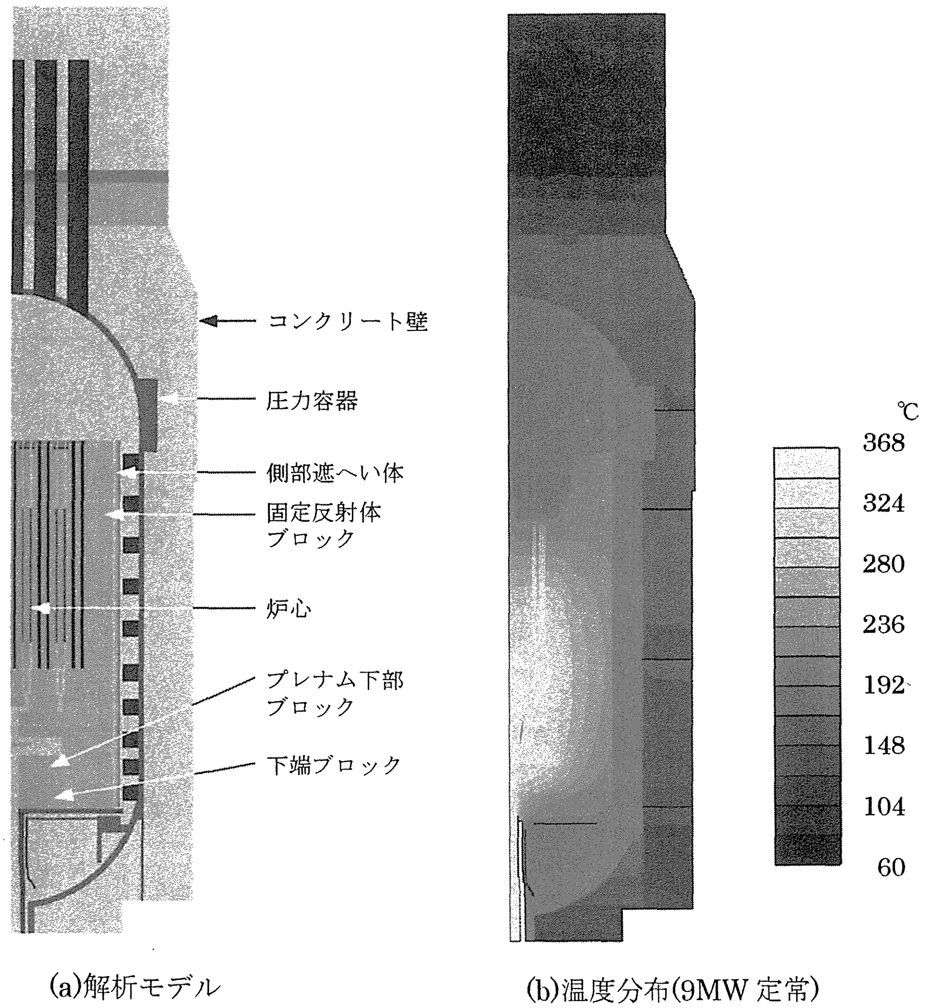



図 1. 解析モデル及び温度分布

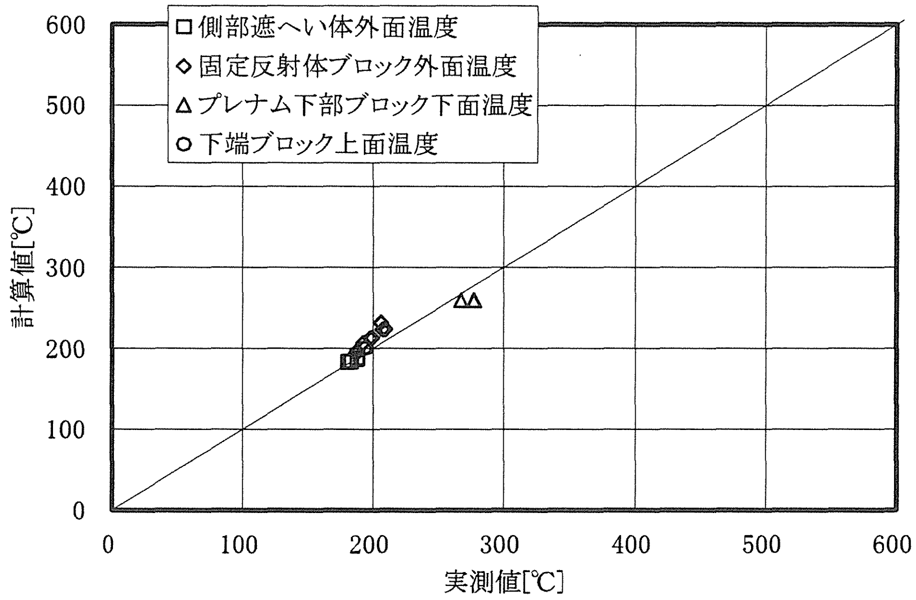



図 2. 圧力容器内構造物温度の比較(9MW 定常)

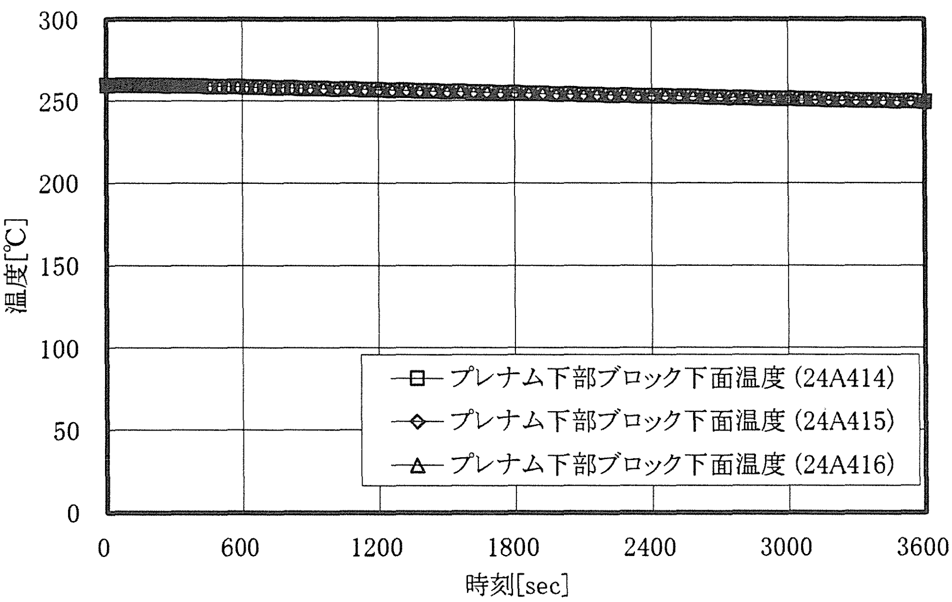



図 3. プレナム下部ブロック下面温度の時間変化(9MW、循環機 3 台停止時)

4.5 核熱利用研究部

# 4.5.1 熱流動解析コードFLUENTによる電力水素併産プロセス用熱交換反応器の化学反応を伴った反応流体の伝熱流動解析

将来型高温ガス炉システム開発グループ
シンロン　ヤン

**1．利用の概要（要約）：**

Parallel computations of FLUENT on Application Server (APSV-Tokai) and ITBL.

**2．利用の内容・結果：**

Enhanced safety goal for high temperature gas-cooled reactor (HTGR) considers rupture of large primary coolant piping as an important design basis accident, from which fuel failure is excluded. In such loss of coolant accident, air ingress in HTGR occurs and is known to follow two sequential phases, starting with molecular diffusion and convection and, once sufficient buoyancy is present, quickly developing into natural circulation. Only in the second phase of natural circulation could air ingress amount to a significant rate that could damage fuel structure by graphite oxidation. The present study evaluates by CFD of a newly proposed mechanism of sustained counter air diffusion (SCAD) for prevention of significant air ingress in HTGR. The theory and performance of the SCAD mechanism is evaluated and visualized by a scale model of the reactor system using the computational fluid dynamics code FLUENT running on parallel computer processors.

The SCAD method for air ingress prevention in HTGR is evaluated using the experimentally benchmarked reactor core simulator model shown in Figure 1. The system interior is initially filled in a gas mixture of 75% helium and 25% air by volume. The ambient boundary condition outside the system is assumed 100% air at constant temperature (20℃) and pressure (0.103MPa). The tube wall temperatures are set to the same experimental conditions.

Figure 2 displays the distribution of air in time sequences during two cases of computation. Figure 2(a) shows, in Case A, the calculated molar fraction changes of air without employment of the SCAD method. As expected, the air ingress proceeds in the first phase of molecule diffusion and natural convection. This phase continues with increase in the molar fraction of air and density of gas mixture until the second phase of natural circulation begins in just less than 5 hours after opening the system to ambient air. Figure 2(b) shows, in Case C, the effect of SCAD with the theoretical helium injection rate. The air ingress proceeds in initial quick diffusion and natural convection but soon subdues into a steady state of SCAD due to the helium injection.

The following general observations have been made from the results of the present study:

a) The first phase of air ingress by diffusion and natural convection can result in the fraction of air in the system to exceed a threshold value such that buoyancy force is sufficient to produce the second phase of natural circulation. The threshold value is system specific, depending on flow path design and temperature conditions.

b) Early during the first phase of air ingress, continuous minute injection of helium to the top of the system can provide stable SCAD simultaneously in the heated and cold tubes, which keeps air content from exceeding the threshold fraction of natural circulation occurrence.

c) There is a minimally required helium injection rate with which a stable SCAD is possible. The minimum value is a function of the threshold air fraction of natural circulation occurrence. A greater than the minimum helium injection rate makes the SCAD more stable. On the other hand, an insufficient helium injection rate would only postpone but not prevent eventual advent of natural circulation.

## ３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1). X. Yan, T. Takeda, K. Kunitomi and S. Shiozawa, "A passive method to prevent air ingress in large primary pipe rupture accident of HTGR," Proceedings of the 6th International Conference on Nuclear Thermal Hydraulics, Operations and Safety, Nara, Japan, October 4-8, 2004.

2). Paper submission to journal publication is planned.

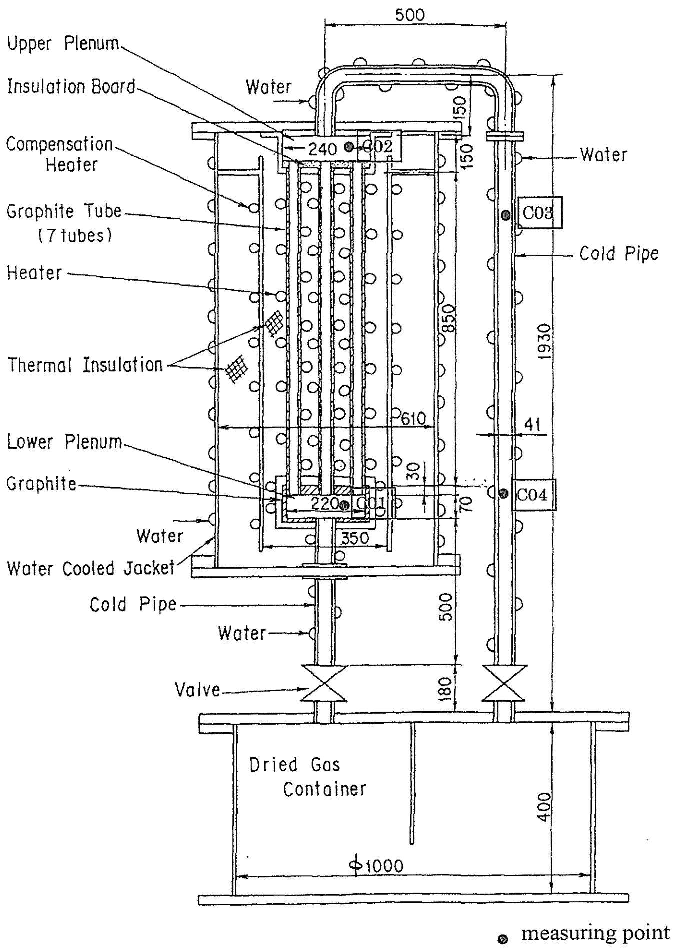
3). 発明考案：空気浸入を防止する対向拡散機構（SCAD）を有する高温原子炉システム

## ４．今後の利用予定：

The present study plans to evaluate full-scale reactor model using Fluent parallel computations on APSV and ITBL.

Figure 1:

Experimental apparatus (left) and analytical model of a reactor core simulator used in study of air ingress by diffusion and convection in HTGR.



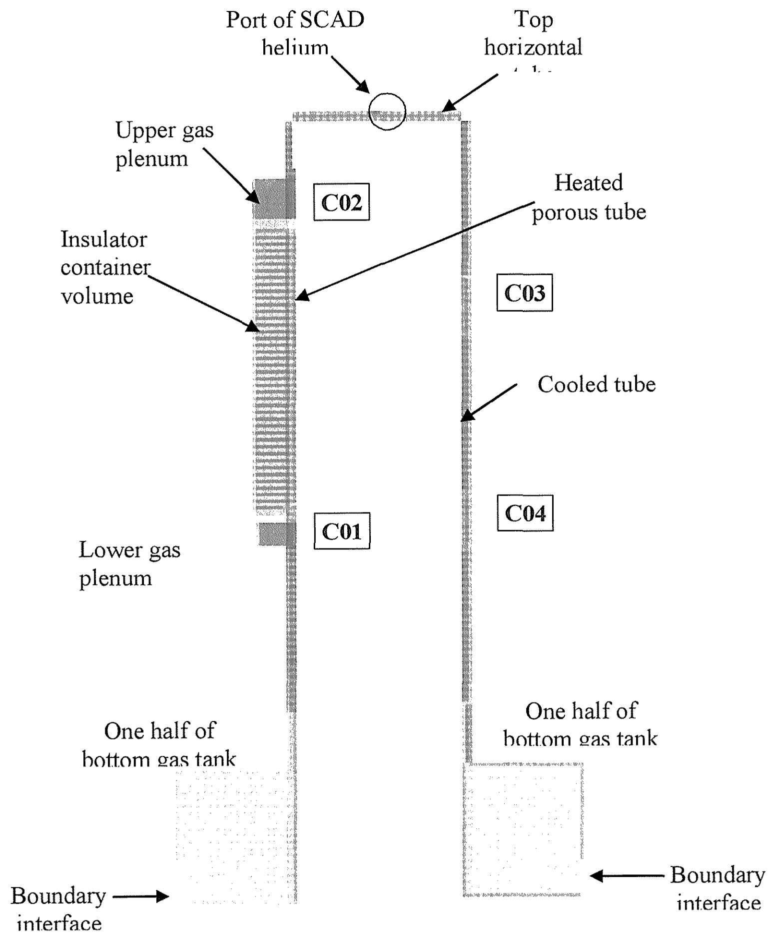
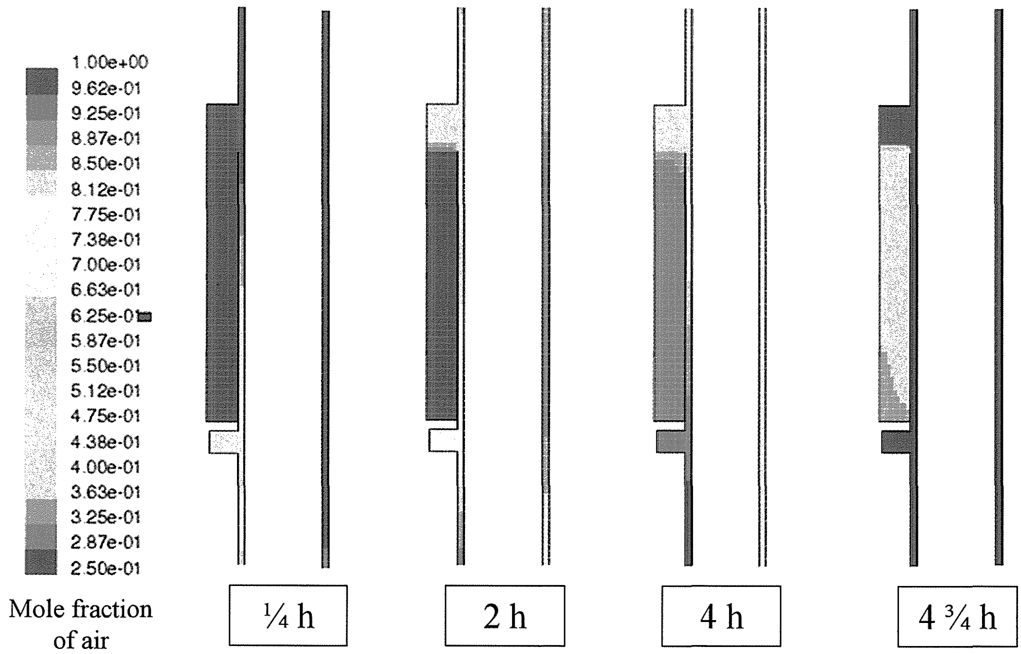



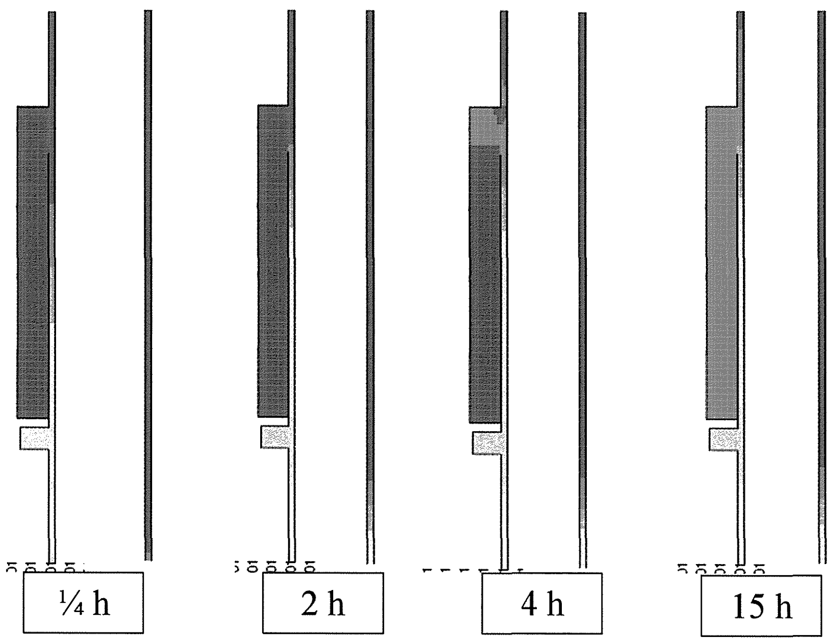
Figure 2:

Distributed air molar fraction during diffusive and convective air ingress in the reactor simulator model; (a) In Case A, natural circulation occurs without the SCAD and (b) In Case C, natural circulation of air is prevented by the SCAD method.

(a) Case A: <u>No SCAD</u> without any helium injection




(b) Case C: <u>SCAD</u> with a minimally required helium injection rate of $4 \times 10^{-8}$kg/s



4.6 材料試験炉部

# 4.6.1 JMTRを用いた照射試験における中性子束、スペクトル等照射パラメータの評価

材料試験炉部・計画課、照射第1課
長尾美春、新見素二、竹本紀之、松井義典、雨澤博男

## 1. 利用の概要（要約）:

計画課では、「JMTRの計画管理」のテーマのもとに、JMTRを利用した照射試験に関し、照射場の設定、照射パラメータの予測、評価等のため、3次元モンテカルロコードMCNPによる解析を実施している。利用者に報告された解析データは、軽水炉、核融合炉等の開発研究に生かされている。照射パラメータ評価データを利用者へ報告するにあたっては、詳細で正確なデータを迅速に提供することが求められており、そのための技術開発及び正確な評価データを迅速に提供していくためには、大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

照射第1課では、照射試験に必要な照射試料を入れる容器である照射キャプセルの設計において、照射試料部の温度を評価するために必要なJMTR炉内の核加熱率（γ加熱率及び中性子による加熱率）の解析を3次元モンテカルロコードMCNPにより実施している。利用者が要求する試料部温度で照射試験を行うためには、正確かつ詳細な核加熱率データが必要であるため、大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

## 2. 利用の内容・結果:

JMTR炉心を3次元でモデル化（図1参照）し、3次元モンテカルロコードMCNP（核データライブラリについては、中性子についてFSXLIBJ3R2、γ線についてMCPLIBを使用）によりSR8000の1ノード（4プロセッサ）を利用した並列計算により、JMTRを利用して行われた中性子照射試験に関して、照射試料位置における照射パラメータを解析評価している。その結果は、利用者に報告している。なお、定常業務として解析評価している照射パラメータは、高速／熱中性子束及び照射量であるが、特に利用者からの希望により、中性子スペクトル、γ線量、γ線スペクトル、照射損傷量（dpa、He生成量等）の評価も実施している。

MCNPにより計算した中性子束の評価精度については、照射試料と共に照射キャプセルに封入され照射された中性子照射量を測定するためのフルエンスモニタとの比較による検証が行われている。図2に示すように1998年から2001年までに検証されたMCNPによる中性子束の計算値はフルエンスモニタによる測定値と比較して、高速中性子束（1MeV以上）について±10%、熱中性子束（0.683eV以下）について±30%となっている。

平成15年度においては、16本の照射キャプセルについて、684点の照射試料位置に対して照射パラメータの評価結果を利用者に報告した。なお、利用者へ報告した結果については、照射利用の契約に基づいて実施されている、という性格上、所内、所

外を問わず計画課からその内容について紹介することは原則として不可能である。

照射キャプセルの設計に必要な核加熱率の計算は、３次元モンテカルロコード MCNP により SR8000 の１ノード（4 プロセッサ）を利用した並列計算により行われている。その結果は、照射キャプセルの設計に反映されている。

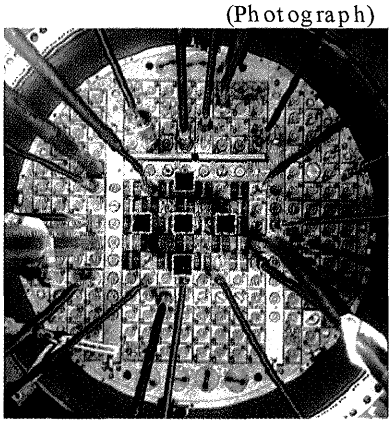
## ３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1). Y.Nagao and M.Niimi
"Influence of impurities in beryllium on tritium production rate in neutron irradiation tests of fusion blanket in the JMTR", JAERI-Conf 2004-006, p157-162.

## ４．今後の利用予定：

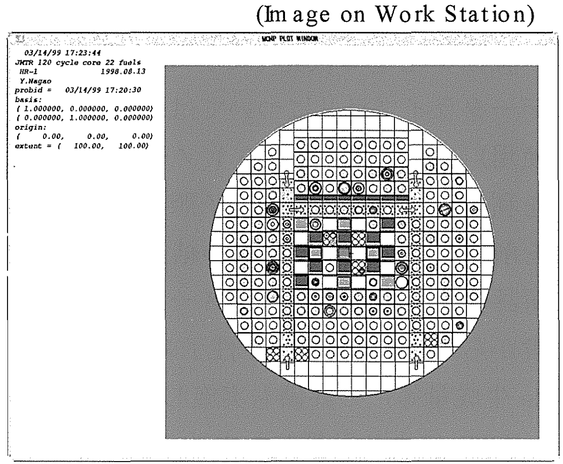
次期導入予定の並列計算機を用い、引き続き JMTR を用いた照射試験における照射パラメータの解析評価、照射キャプセル設計における核加熱率評価を継続して実施する予定。

(Photograph)



Top view of JMTR core

(Image on Work Station)



MCNP calculation model

図１　JMTR 炉心の MCNP 計算モデル

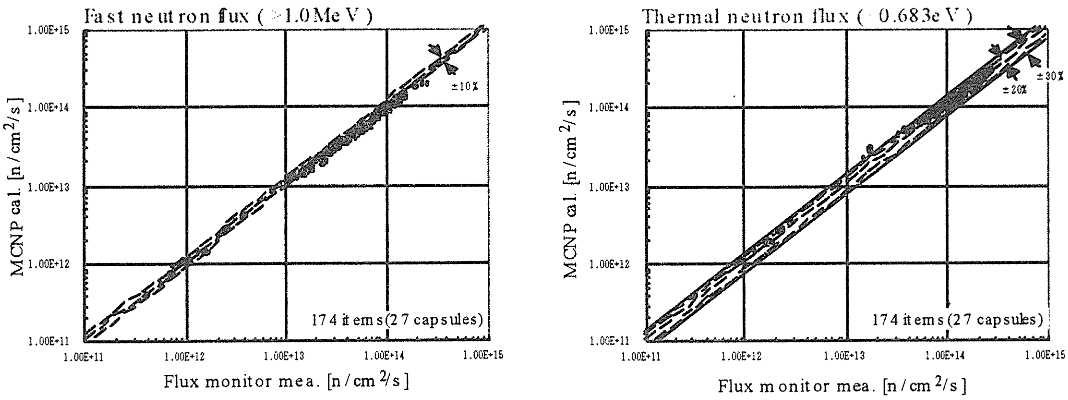



図2　MCNPで計算した中性子束のフルエンスモニタ測定値との比較（1998-2001）

4.7　保健物理部

## 4.7.1　ボクセルファントムを用いた臓器における放射線の吸収割合評価

内部被ばく防護研究室
佐藤　薫

1．利用の概要（要約）：

内部被ばくの線量評価を行うためには、線量係数（Sv/Bq）が必要である。線量係数は、ある臓器中の放射性核種から放出される放射線のエネルギーのうち標的となる臓器で吸収される割合（吸収割合）、及び体内動態モデルに基づいて計算された臓器における放射性核種の核変換数を用いて計算される。吸収割合は、コンピュータ上に再現した人体ファントム（3次元人体模型）を用いて計算する必要がある。また、臓器形状及び臓器位置等の人体構造が吸収割合に影響することがこれまでに報告されている。そのため、内部被ばく線量を的確に評価するためには、個人差、体格及び姿勢等に由来する人体構造の違いが吸収割合に及ぼす影響を定量的に明らかにする必要がある。このため、日本人成人男性及び女性のボランティアより得られた CT 画像データを用いて、小直方体（ボクセル）で全身を表現した精密ボクセルファントムを大型計算機の中に数値データとして展開し、線源臓器からの放射線をモンテカルロシミュレーションにより追跡し標的臓器における吸収割合を計算評価している。

2．利用の内容・結果：

ボクセルファントムを用いて人体臓器中の放射線の吸収割合を計算するために原研で開発したモンテカルロコードである UCSAF の並列版を用いて、ITBL 計算機による並列計算を行った。吸収割合は、平成 12 年度から平成 13 年度に原研において開発した日本人成人男性の平均的体格を有する精密ボクセルファントムである JM ファントム、及び単純な数式で記述されたボクセル化された MIRD 型ファントム（Voxel-MIRD ファントム）を用いて計算した。JM ファントムは、線量係数の計算に必要な 27 の臓器領域と 5 つの胃腸管内容物領域を含む全身の臓器組織を約 1mm 角サイズの小直方体により精密に再現しており、臓器組織におけるより精度の高い吸収割合評価が可能である。Voxel-MIRD ファントムも 1mm 角サイズの小直方体によりその人体構造を表現しているが、その形状は、数式で表現されている。これらのファントムを用いて計算を行うためには、大容量のメモリー及びハードディスクを必要とする。線量係数は、0.01-4.0MeV の 10 段階のエネルギーの単色光子の吸収割合を 32 の線源臓器と 27 の標的臓器の組み合わせについて計算する必要がある。さらに必要な計算精度を得るためには、長時間の計算を行う必要がある。特に、低エネルギー領域においては、人体構造による吸収割合への影響が顕著であり、計算精度が低くなることから、精度を保証するために必要な計算時間はさらに長くなる。そこで、必要な計算時間を考慮した結果、ITBL 計算機において 64 から 120 プロセッサ程度の規模の並列計算を行う必要

があることが明らかになった。平成 15 年度は、JM ファントム及び Voxel-MIRD ファントムを用いた吸収割合計算を行い、以下の様な結果を得た。

・ITBL 計算機上に整備されている並列版 UCSAF に JM ファントムを組み込み、臓器中の光子吸収割合が正常に計算できるように整備した。また、整備後、光子吸収割合の計算において必要な精度を得るためのヒストリー数、計算時間及び並列プロセッサ数の関係を調べた（図 1）。

・JM ファントムと Voxel-MIRD ファントムの膵臓における 0.01 から 4.0MeV 光子の自己吸収割合を図 2 に示す。全エネルギーにおいて、Voxel-MIRD ファントムの吸収割合は、JM ファントムよりも大きく、高エネルギー領域の方が低エネルギー領域よりも差が大きかった。これは、主に両ファントムにおける膵臓重量の違いが影響していると考えられるが、重量の影響だけでは両ファントムの違いを説明できず、膵臓の形状の違いも吸収割合に影響していると考えられる。

・臓器重心間距離が吸収割合に及ぼす影響を調べるため、線源臓器が腎臓であり、標的臓器が下部大腸である組み合わせについて、吸収割合への影響を検討した(図 3)。JM ファントムの下部大腸における吸収割合は、全エネルギーにおいて Voxel-MIRD ファントムよりも大きく、特に低エネルギーにおいては、その差は 1000 倍であった。一方、臓器重心間距離を Voxel-MIRD ファントムと等しくなる様に調整した JM ファントムの吸収割合は、高エネルギー領域において数%以内で良く一致し、低エネルギー領域においては Voxel-MIRD ファントムよりも約 40 倍高かった。これは、位置調整された JM ファントムの方が、Voxel-MIRD ファントムよりも臓器間の最近接距離が短いためであると考えられる。これらのことから、高エネルギー領域においては臓器重心間距離が主に吸収割合に影響するが、低エネルギー領域においては臓器重心間距離のみでなく、臓器間の最近接距離も影響することが明らかになった。

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

1)．「日本人成人男性ボクセルファントムを用いた比吸収割合評価」（第 37 回日本保健物理学会　研究発表会）

2)．「吸収割合に及ぼすファントムの臓器位置の影響」（2004 年日本原子力学会　春の年会）

**4．今後の利用予定：**

今後、さらに体格及び姿勢の違いが内部被ばく線量に及ぼす影響を明らかにするため、複数のボクセルファントムを用いた吸収割合の計算を行う必要があり、ITBL 計算機を用いて吸収割合の評価を進める予定である。

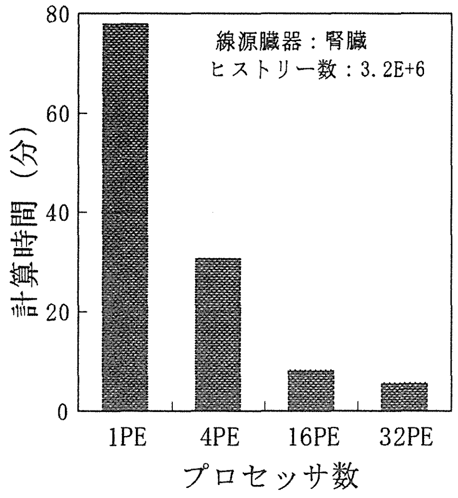



図1. 計算時間とプロセッサ数

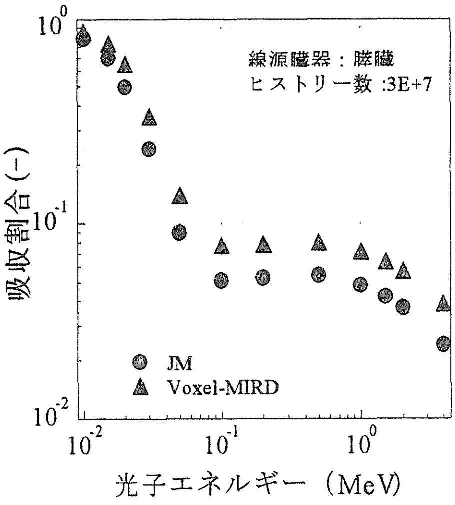



図2. 膵臓における光子自己吸収割合

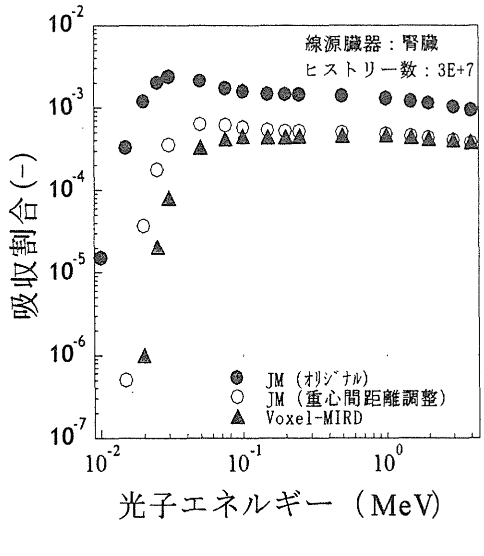



図3. 腎臓を線源臓器とした時の下部大腸における光子吸収割合

# 4.7.2 複数の酸化損傷部位を持つ DNA 分子の構造および静電エネルギーの変化の研究

放射線リスク研究室
斎藤 公明、ミロスラフ・ピナック、藤本 浩文

## 1．利用の概要（要約）：

DNA 分子は、放射線やさまざまな化学物質にさらされることでその構造が変化する。これら DNA 分子の損傷は修復されなければ突然変異原となり、細胞がガン化する原因になると考えられている。放射線による DNA 分子の損傷には、狭い領域に互いに近接した複数個の損傷が同時に起こりやすいという特徴があり（クラスター損傷）、このようなタイプの損傷は単一部位の損傷と比べると修復されにくいことが報告されている。本研究では、クラスター損傷を持つ DNA 分子が細胞内でどのように構造や静電エネルギー特性を変えるか分子動力学的（MD）手法を用いて調べている。

## 2．利用の内容・結果：

複数の損傷を持つ DNA 分子のモデルとして、放射線照射による典型的な損傷である 8-oxoG および AP site を含む DNA 分子を設計し、損傷を持たない対照と共に分子動力学（MD）シミュレーションプログラム AMBER を用い 1 ケースにつき 1 ns（ナノ秒）のオーダーでシミュレーションを行った。 1 fs（フェムト秒）を 1 ステップとし、数万原子の挙動を ns のオーダーで計算を行うには、ワークステーションクラスの計算機では数ヶ月を要し実際的な解析には不適当である。そこで、高速計算によりシミュレーションをより短時間で行うことを目的として、大型計算機による並列計算を実施し、3 名で役割を分担しながらシミュレーションを実施した。

DNA 修復酵素による損傷部位の認識過程は、2 損傷部位間の距離に大きく依存することが、英国 MRC（Medical Research Council）の行った生化学的・分子生物学的実験によって明らかにされている。今年度のシミュレーションでは、MRC の行った実験の解析を目標に、MRC の実験条件をそのまま再現した計算条件を設定してシミュレーションを行った。具体的には、全長 40 塩基対の DNA 分子の中央の相対する鎖上に 2 つの塩基損傷（8-oxoG と AP site）を持つ DNA 分子を 6 種設計し、損傷を持たない対照 DNA と共に MD シミュレーションを行った.

この結果、2 つの損傷間の距離と DNA 構造変化とは密接な関係があり、損傷間の距離が近い程構造変化が大きいことが明らかになった。 特に、1 塩基対の距離をおいて互いに相補鎖側になるよう配置場合には、損傷部位を中心に分子が大きく折れ曲がった。MRC の実験によれば、同じ構造をもつ DNA に対する修復酵素の親和性が最も低いことが明らかになっており、修復酵素と DNA との結合力が DNA 構造変化に深い関係

があることが示唆された。また、損傷部位のフリップ・アウトは損傷部位間の距離によらず比較的ランダムに発生ことが判明した．これら結果は論文としてまとめ投稿中である．

**３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

［ 論文発表等 ］

1). H. Fujimoto, M. Pinak, T. Nemoto, K. Sakamoto, K. Yamada Y. Hoshi and E. Kume: ″Large scale MD simulation of 8-oxoguanine and AP site multiple lesioned DNA molecule combined with biomolecular visualization software″ Journal of Molecular Structure (Theochem), 681, 1-8, 2004.

2). M. Pinak, Impact of Radiation DNA Damage Determined by Computational Simulation. Jpn. J. Health Phys., 39, 35-41. (2004).

3). P. S chwman, P., DANIELSSON, J., PINAK, M. and LAAKSONEN, A. 2004, Theoretical study of human DNA repair protein hOGG1 activity. J. Phys. Chem., submitted

4). M. Pinak and T. Nemoto: “Thymine Glycol and 8-oxoguanine Lesioned DNA – Structural and Energetical Changes as Onset of Enzymatic Recognition and Repair: Large Scale MD Simulations of Biomolecules.” International Conference on Supercomputing in Nuclear Applications SNA2003. Paris, France, September 22-24, 2003.

5). H. Fujimoto, M. Pinak, T. Nemoto, K. Sakamoto, K. Yamada and E. Kume: ″Dynamical Visualization of Lesioned DNA Molecules: Large Scale MD Simulation Combined with Biomolecular Visualization Software″Geometric Modeling, Computing, and Visualization, Roman Durikovic and Alexander Belyaev eds., Technical Report 2003-1-004, The University of Aizu, 28-36, 2003.

6. M. Pinak, P. O'Neill, H. Fujimoto and T. Nemoto: ″Molecular Dynamics of 8-oxoguanine Lesioned B-DNA Molecule - Structure and Energy Analysis″, Slow Dynamics in Complex Systems: 3rd International Symposium, M. Tokuyama and I. Oppenheim eds., American Institute of Physics, 310-313, 2004.

［ 学会発表等 ］

1). H. Fujimoto, M. Pinak, T. Nemoto, K. Sakamoto, K. Yamada and E. Kume: “Dynamical Visualization of Lesioned DNA Molecules: Large Scale MD ２)。 Simulation Combined with Biomolecular Visualization Software ” International Workshop in Geometric Modeling, Computing, and Visualization,

Univ. of Aizu, July 2003.

2). 藤本 浩文, ミロスラフ ピナック, 坂本 清隆, 山田 和幸, 根本 俊行, 星 芳幸, “How Structure of DNA Molecule Changes if Damaged? - Molecular Dynamic Simulation Approach” 日経サイエンス主催「ビジュアル・サイエンス・フェスタ 2003」において佳作に選出

3). 藤本 浩文, ミロスラフ ピナック, 根本 俊行, 坂本 清隆, 山田 和幸, 星 芳幸, 久米 悦雄, 斎藤 公明, 前川 秀彰: “酸化損傷による DNA 分子の構造変化 - 分子動力学シミュレーションによるアプローチ - ” 第 26 回 日本分子生物学会年会, 2003 年 12 月, 神戸

**4. 今後の利用予定：**

放射線に特有な複数の損傷を持つ DNA 分子に対する修復酵素による認識機構の研究を継続して実施する。 16 年度は修復酵素も含めたシミュレーションを、考慮する損傷の条件も様々に変化させて実施する。また、損傷部位認識に直接関与するアミノ酸部位の同定を行う。さらに、損傷修復の次の段階である、グリコシラーゼによる鎖の切断過程に関するシミュレーションを開始する。このために、MD シミュレーションに加え分子軌道法プログラム (MOPAC) を利用した量子力学的シミュレーションを導入する計画である。

これらの計算はいずれも高度な計算環境を必要とするため、原研の大型計算機システムを十分に活用することを予定している。

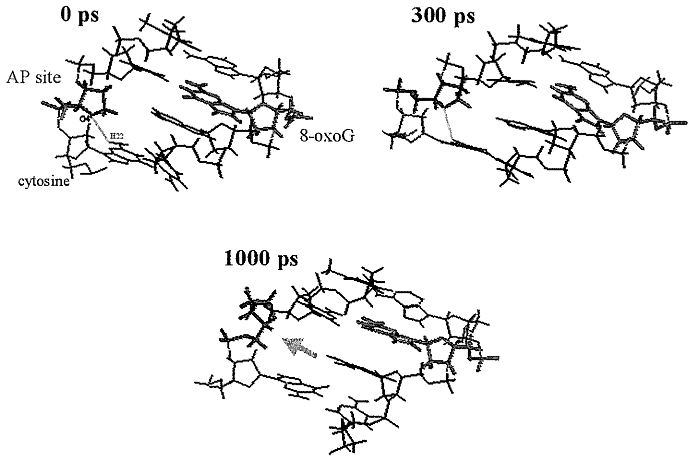



図１ シミュレーションで観察されたフリップアウトの様子（矢印）

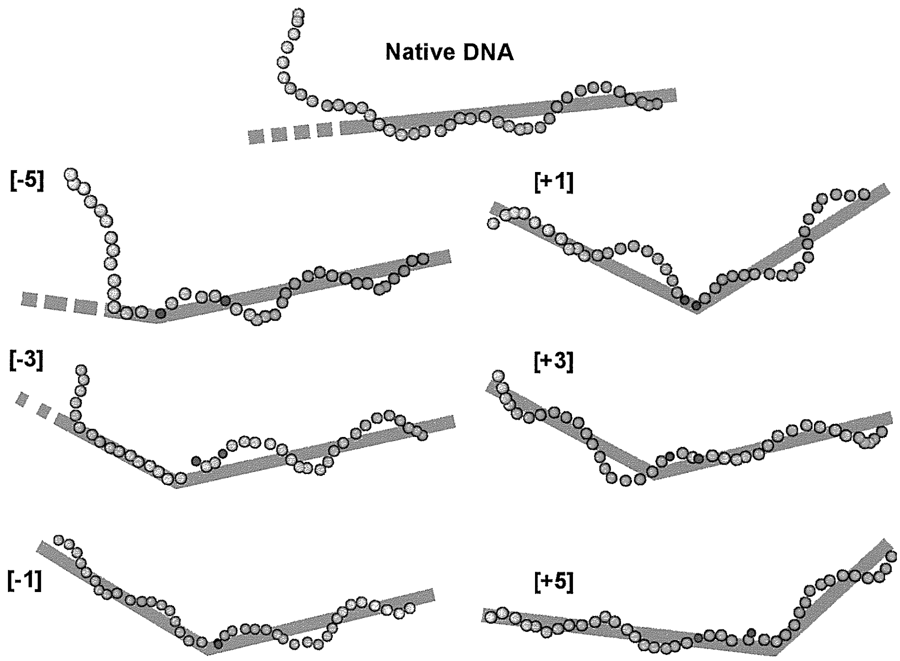



図２　２つの損傷部位間の距離とDNA構造変化の関係

4.8 大強度陽子加速器施設開発センター

## 4.8.1 核破砕中性子源用モデレータ容器内の熱流動解析、衝突噴流熱伝達の解析

中性子施設開発グループ
麻生 智一

**1．利用の概要（要約）：**

中性子施設開発グループでは、大強度陽子加速器計画（J-PARC）の中核施設である物質・生命科学実験施設及びここに設置する核破砕中性子源の設計・建設を行っている。この中性子源の中性子性能を大きく左右する水素モデレータの温度を精度良く予測するために、水による模擬実験を踏まえて汎用の解析コードの検証を行い、コードの有効性を確認した後に熱流動設計の最適化を図っている。本解析では、複雑な実機モデレータ形状を模擬した３次元解析モデルを使用するため及び詳細な温度分布を求めるために格子数を多く設け、また形状や境界条件等を変更し多数ケースを実施する必要があるため大型並列計算機の利用が不可欠である。

**2．利用の内容・結果：**

アプリケーションサーバ及び SR8000 にインストールされている汎用の３次元熱流体解析コード STAR-CD を利用して熱流動解析を行った。解析コードの検証用の解析モデルは実験モデルを模擬した３次元の流体モデル、実機温度評価用の解析モデルは容器及び流体の両方を模擬した３次元モデルとして、両者に核発熱を与えるため、固体・流体の熱連成解析として計算を行った。解析モデルの格子数は、数 10 万から 100 万セルと多いため（特に実機モデル）、これらの解析を 1 プロセッサで実施すると計算時間が膨大となる。そのため、４～８プロセッサを用いて効率的な並列計算を実施した。

平成 14 年度までは核破砕中性子源に設置するモデレータ（図１）のうち、扁平形状の非結合型モデレータを中心に模擬容器を使用した水による可視化実験を行い、容器内の流れ場を明らかにするとともに、解析による流れ場も実験結果をよく再現することを確認した。平成 15 年度は、原研で独自に提案した円筒形状の結合型モデレータを中心に、流れ場と温度場を予測する上で重要となる熱伝達特性に関して実験及び解析を行い、以下の結果を得た。

・ 模擬容器を使用して水による可視化実験を行い、再循環流や流れの停滞する領域など容器内の流れ場を明らかにするとともに、標準 k－ε モデルを用いた解析結果は実験結果を良く再現した（図２）。
・ 模擬容器の底面に設置したヒータ及び熱電対によって容器底面の熱伝達率を実験的に求め、ヒータの発熱条件を模擬した解析モデルによる解析を行った結果、解析値が実験値の約 1/2 となった。これによって本解析コードによる温度評価は実際には高く評価されるため安全側の設計となる。ただし、安全裕度を過剰に見込

んでいるため、今後さらに最適化を目指した検討を進める必要がある。

以上の結果を基に、実機の水素モデレータの熱流動解析を行った結果、中性子ユーザーの要求する条件を満足することが確認できた（図３）。本成果によってモデレータ内部形状をほぼ決定し、構造強度の観点から容器構造を設計し、最終的に製作設計にかかる予定である。

**３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

1).T. Aso, M. Kaminaga, R. Hino, M. Monde
"Thermal-Hydraulic Experiments and Analyses for Cold Moderators"
11th International Conference on Nuclear Engineering (ICONE-11), Tokyo, Japan, April 20-23, 2003.

2).T. Aso, H. Sato, M. Kaminaga, R. Hino, M. Monde
"Thermal-Hydraulic Design of J-PARC Cold Moderators"
16th Meeting of the International Collaboration on Advanced Neutron Source (ICANS-XVI), Neuss, Germany, May 12-15, 2003.

3).麻生智一、佐藤博、神永雅紀、日野竜太郎、門出政則
"核破砕中性子源用結合型減速材容器の熱流動実験及び解析評価"
日本機械学会茨城講演会講演論文集、206、p45-46、日立、9月19日（2003）

4).麻生智一、佐藤博、神永雅紀、日野竜太郎、門出政則
"核破砕中性子源用減速材容器内の衝突噴流挙動　－可視化と熱伝達予備実験－"
可視化情報学会全国講演会（宇都宮2003）講演論文集、A113、p13-16、宇都宮、10月31日（2003）

**４．今後の利用予定：**

温度評価の精度を上げるため、実験を通じた解析評価を継続して行い、解析条件の最適化を行う。

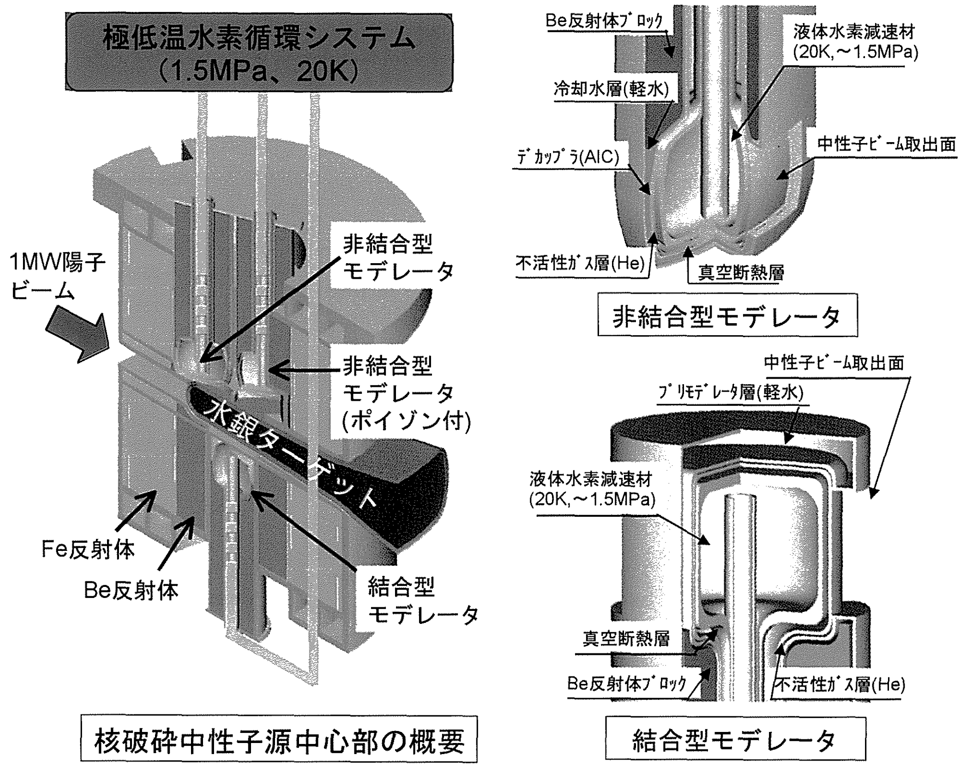
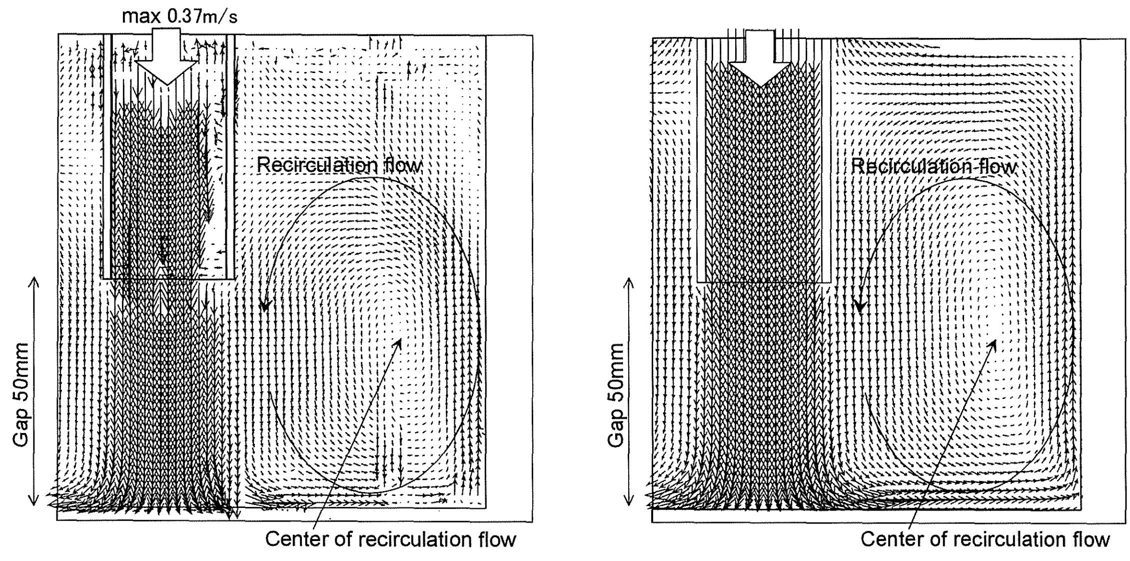
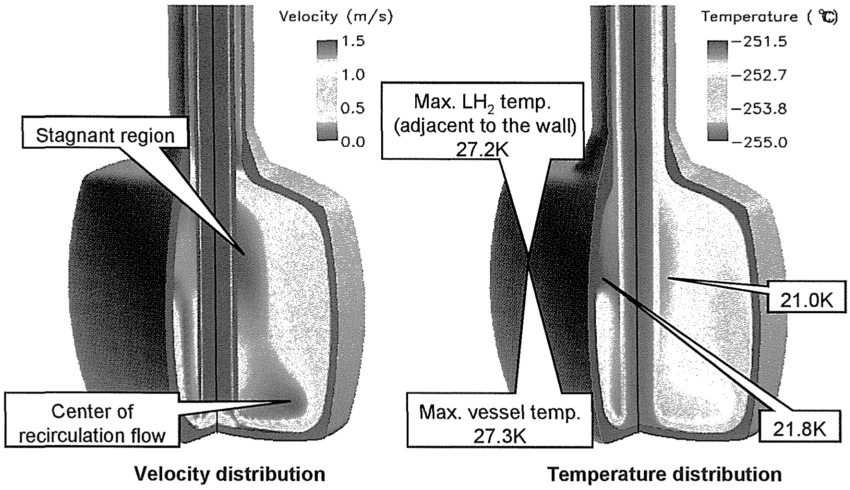



図１　核破砕中性子源中心部及びモデレータの概要

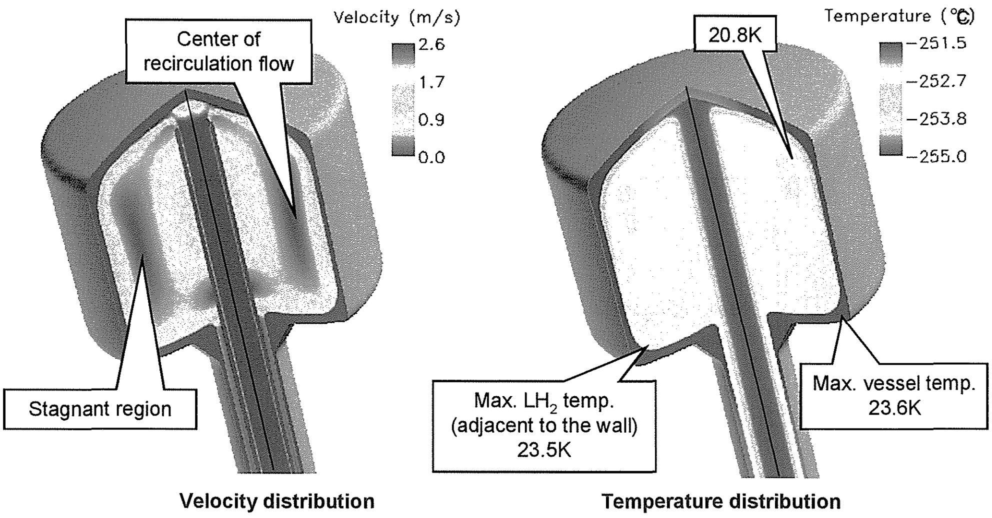



(a)実験結果　　(b)解析結果

図２　可視化実験及び解析による容器内の流れ場（噴流レイノルズ：約 $10^4$）




(a)非結合型モデレータ




(b)結合型モデレータ

図 3　実機水素モデレータの流速分布及び温度分布解析結果

## 4.8.2 核破砕中性子源用水銀ターゲット及び冷減速材容器内の 3 次元熱流動解析

中性子施設開発グループ
佐藤　博

**1．利用の概要（要約）**：

中性子施設開発グループでは、大強度陽子加速器計画の中核施設である物質・生命科学実験施設に設置する装置の熱流動設計を行っている。特に、中性子性能に大きな影響を与える水銀ターゲットと冷減速材については詳細な３次元熱流動解析を実施し、その結果を基に設計を行っている。本解析では、複雑な実機形状を模擬した３次元の解析モデルを使用するため格子数が多く、また形状や境界条件等を変更し多数ケースを実施する必要があるため大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

2．利用の内容・結果：

アプリケーションサーバ及び SR8000 にインストールされている STAR-CD システムを利用して３次元熱流動解析を行った。解析対象は水銀ターゲット、結合型減速材、非結合型減速材である。容器及び流体の両方に核発熱を与えるため、固体・流体の熱連成解析として計算を行った。各解析モデルの格子数が水銀ターゲット：約 180 万セル、結合型減速材：約 170 万セル、非結合型減速材：約 130 万セルと多いため、これらの解析を１プロセッサで実施すると計算時間が膨大となる。そのため、大型並列計算機を利用しての並列計算の実施が計算時間の短縮には不可欠である。

平成 15 年度は以下のような結果を得ることが出来た。

- 水銀ターゲット容器（図 1）に発生する動的応力を低減するため入射する陽子ビームの形状を変更した。これに伴い水銀ターゲットに生じる核発熱の条件（発熱密度分布）が変わったが、熱流動解析の結果（図 2）から変更後の発熱密度分布において設計条件を満足していることを明らかにした。
- 構造強度の観点から結合型及び非結合型減速材容器（図 3）の肉厚が決定したことをうけ、熱流動解析を実施し減速材の温度（図 4）が設計条件を満足していることを明らかにした。

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）**：

1). 佐藤博、麻生智一、粉川広行、日野竜太郎
“核破砕中性子源用非結合型減速材容器の熱流動解析”
茨城講演会講演論文集、207、p47-48、日立、9 月 19 日（2003）
2). 佐藤博、麻生智一、粉川広行、勅使河原誠、日野竜太郎
“ポイズン付き冷減速材容器の熱流動解析　第 1 報：ポイズン板配置の検討”
JAERI-Tech2004-18（2004）

3).佐藤博、粉川広行、神永雅紀、羽賀勝洋、木下秀孝、日野竜太郎
"核破砕中性子源用水銀ターゲットの熱流動解析"
日本原子力学会 2004 年春の年会要旨集第Ⅰ分冊、K30、p228、岡山、3 月 31 日(2004)

**4．今後の利用予定：**

施設運転条件を検討するための参考資料を作成するため、流量や発熱密度等の条件を変更した熱流動解析を継続して実施する予定である。

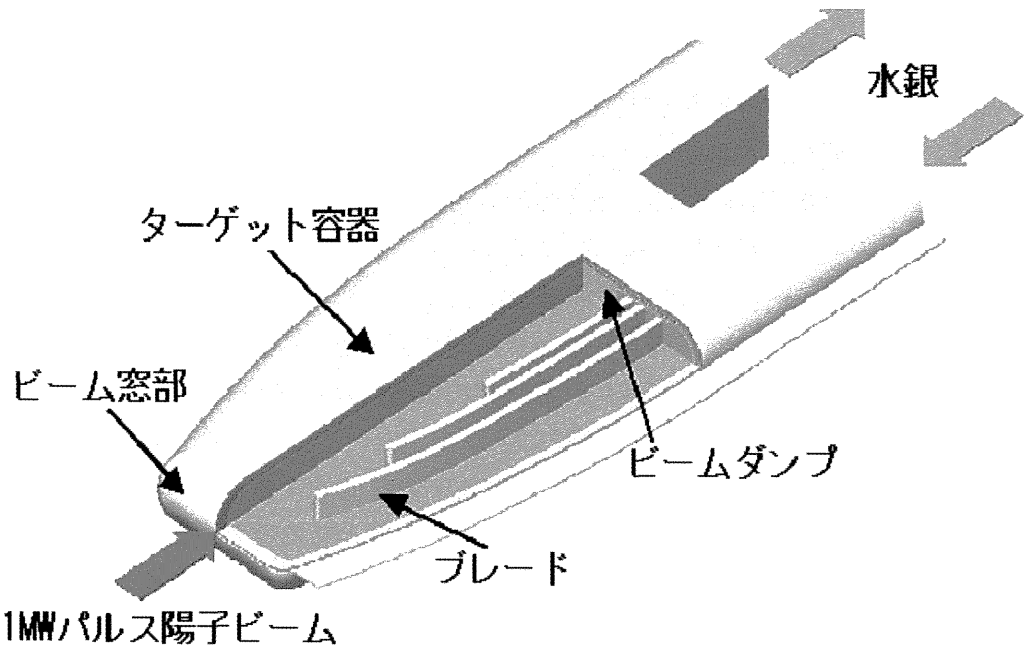



図 1. 水銀ターゲット容器の概略

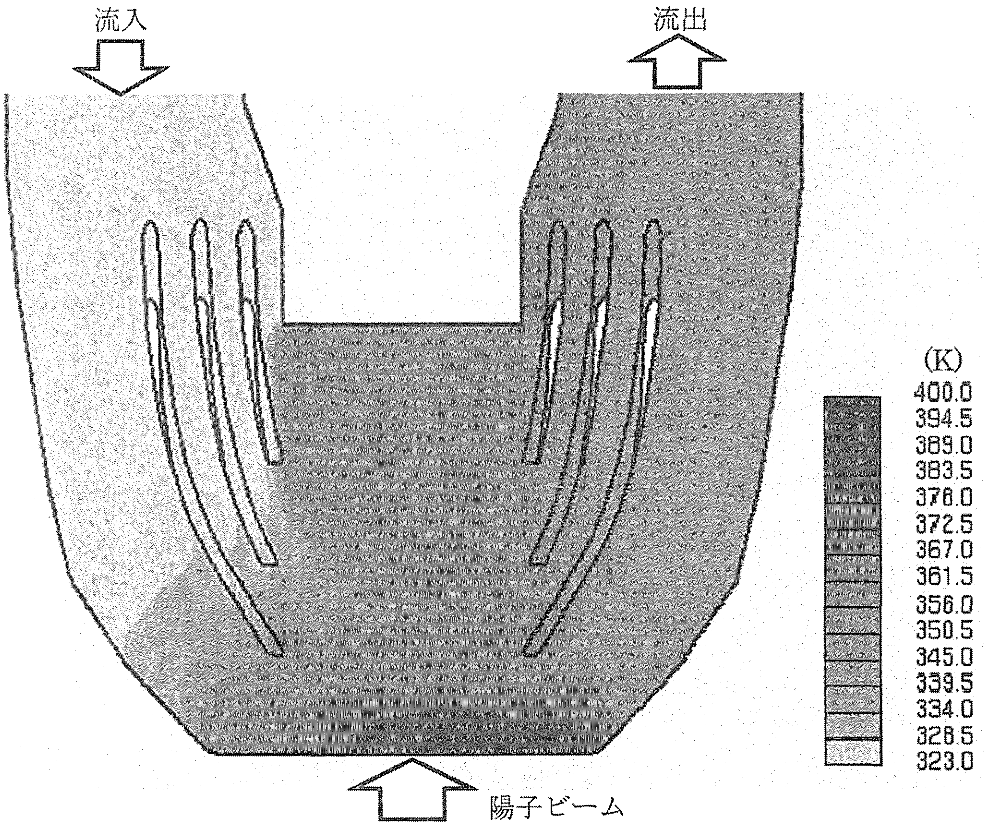
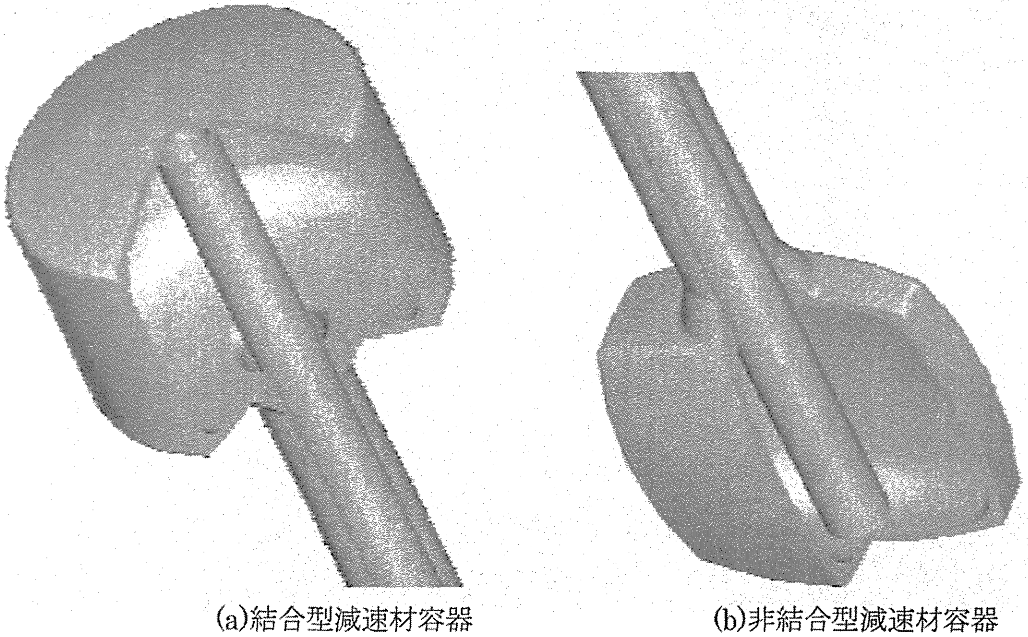
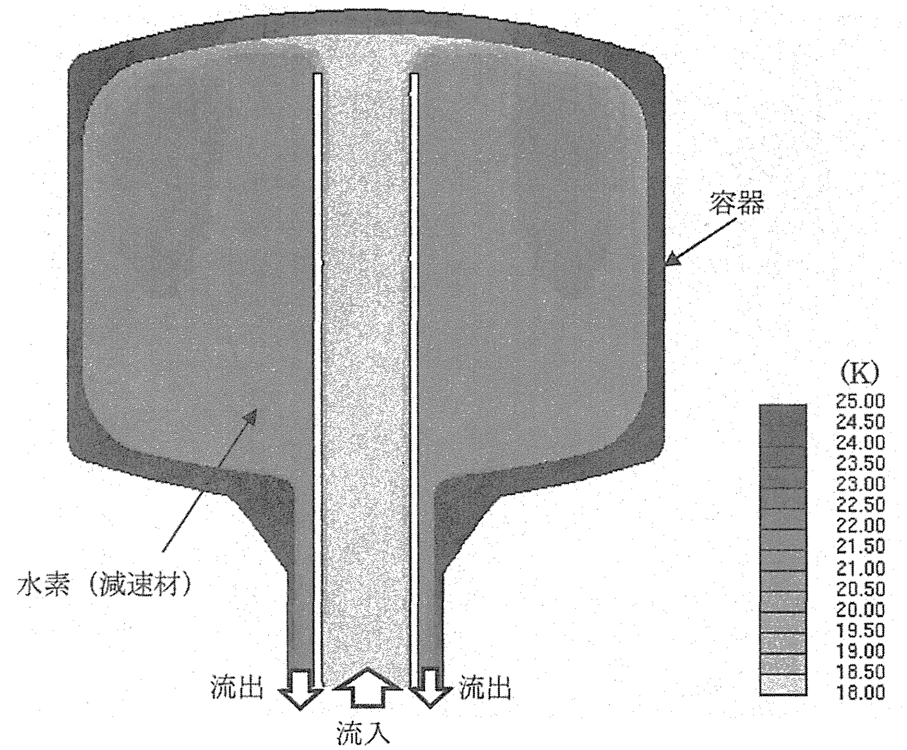



図 2. ターゲット容器内壁面の温度分布

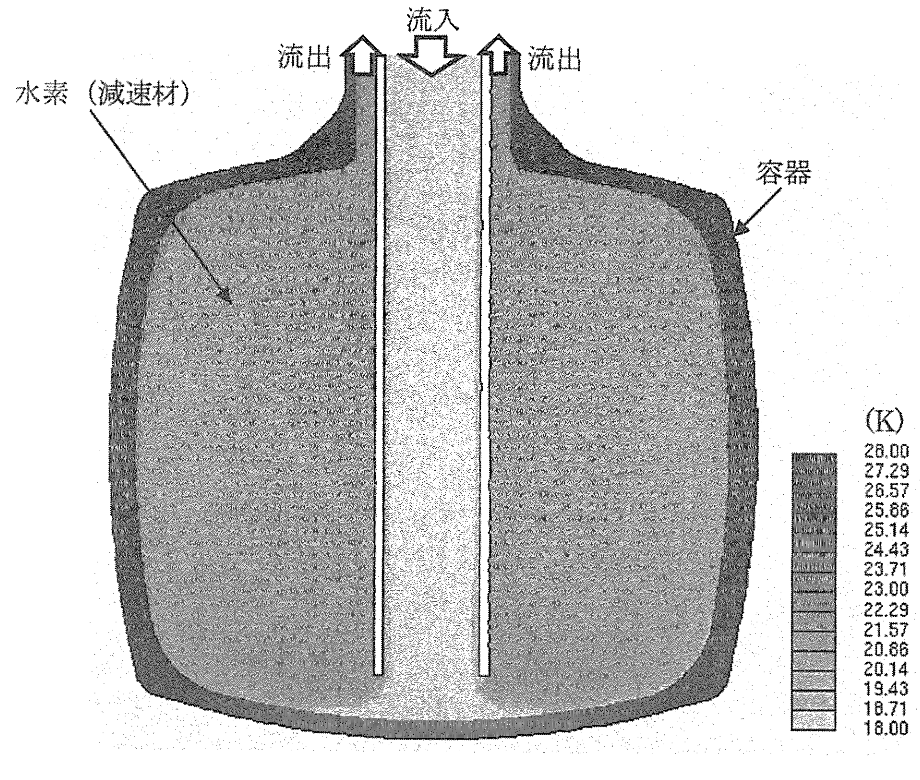


(a)結合型減速材容器　(b)非結合型減速材容器

図 3. 結合型及び非結合型減速材容器の概略




(a) 結合型減速材




(b) 非結合型減速材

図 4. 減速材（水素）および容器の温度分布

## 4.8.3 核破砕中性子源用水銀ターゲットの動的構造解析

中性子施設開発グループ
石倉　修一

### 1．利用の概要（要約）：

中性子施設開発グループでは、大強度陽子加速器計画の中核施設である物質・生命科学実験施設を建設するための設計作業の一貫として構造設計を行っている。特に、中性子の発生源である水銀ターゲットは 1μs のパルス陽子ビームが入射する時の核破砕発熱により圧力波が発生し、ターゲット容器に過大な負荷を与える（図 1)。従って、ターゲット容器の構造健全性を評価する上で、水銀と容器の相互作用を考慮して圧力波の挙動を予測するのは重要な課題であり、詳細な動的構造解析を実施し、その結果を基に設計を行っている。本解析では、複雑な実機形状を模擬した解析モデルを使用するため要素数が多く、また陽子ビーム条件や水銀の状態方程式や境界条件等を変更し多数ケースを実施する必要があるため大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

### 2．利用の内容・結果：

SR8000 にインストールされている有限要素法による衝撃解析コード LS-DYNA とアプリケーションサーバにインストールされている LS-DYNA のプリ・ポスト J-VISION とを利用して動的構造解析とそのデータ処理を行った。解析評価対象は水銀ターゲット容器である。容器は薄肉シェル要素、水銀は 6 面体ソリッド要素でモデル化し、シェル要素とソリッド要素の構造連成解析として計算を行った（図 2)。解析モデルはターゲット容器の幾何学的・力学的対称性を考慮して、計算効率化を図るため 1/4 モデルとした。要素数は水銀のソリッド要素が 66.3 万要素で容器のシェル要素が 5.2 万要素である。これらの解析を 1 プロセッサで実施すると計算時間が膨大となる。そのため、大型並列計算機を利用しての並列計算の実施が計算時間の短縮には不可欠である。

平成 15 年度は以下のような結果を得ることが出来た。

- 最適なビーム窓形状を決めるために、形状をパラメータ（図 3）に発生応力を比較した（図 4)。
- ORNL が LANL の陽子加速器を利用して実施した圧力波伝播のモデル試験の実験結果を確認解析し、適切な水銀の状態方程式を設計評価に反映した（図 5)。
- 実験結果を反映して水銀ターゲット容器に発生する動的応力を低減するため、ビーム窓形状と入射する陽子ビームの形状を見直した。この変更の過程で、加速器側で実現可能なビーム条件を満たして構造が成立しそうなビーム条件をパラメータサーベイし、適切なビーム条件を明らかにした（図 6)。

**３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

1）.石倉修一、粉川広行、二川正敏、その他
“水銀球衝突によるマイクロピット形成挙動に関する考察”
日本原子力学会和文論文誌、Vol. 3、No. 1 (2003)

2).今井隆太、石倉修一、荒川忠一、粉川広行、日野竜太郎
“水銀ターゲットを対象とした流体構造連成解析コードの開発”
計算工学会、Transactions of JSCES, Paper NO. 20030014 (2003).

3).石倉修一、二川正敏、粉川広行、その他
“ターゲット容器の構造強度及び寿命評価に関する技術資料”
JAERI-Tech2004-028 (2004)

１．　　　石倉修一
“液体水銀ターゲットの圧力波伝播に伴なう衝撃挙動に関する研究”
学位論文、筑波大学 (20004/5).

**４．今後の利用予定：**

今後、加速器側の運転開始からコミッショニングで予想されるビーム条件を基に、ターゲット容器の構造設計で重要となる荷重条件（発熱量、発熱分布、発生圧力、etc）を検証するために必要な実験計画を策定するための解析と、大出力で予想されるキャビテーションの発生を考慮した、より詳細かつ大規模な解析モデル（数100万要素）による解析が必要となる。

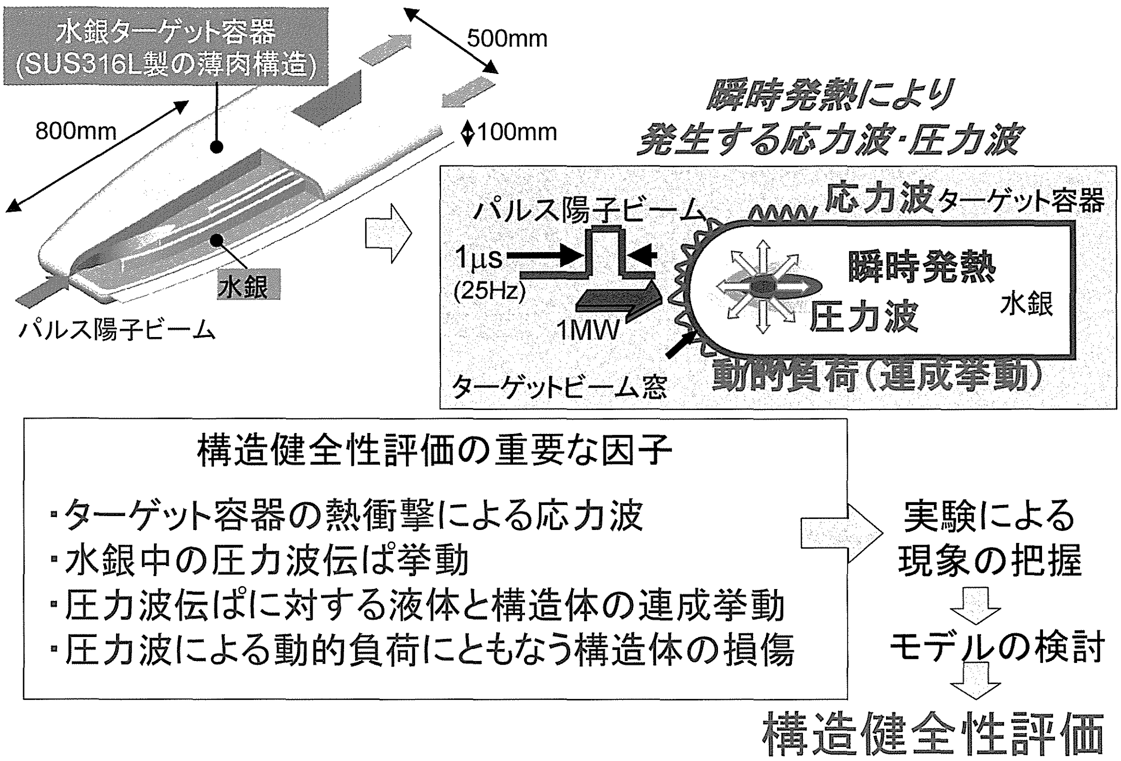



図 1. 水銀ターゲット容器の概略と課題

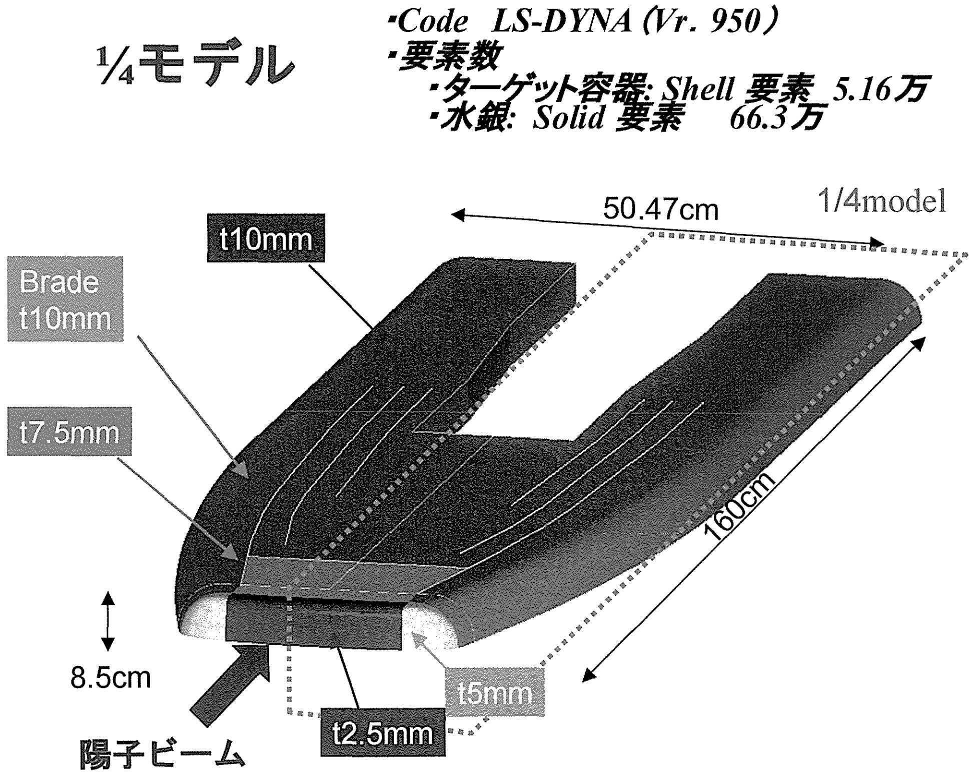



図 2. 水銀ターゲット容器の解析モデル

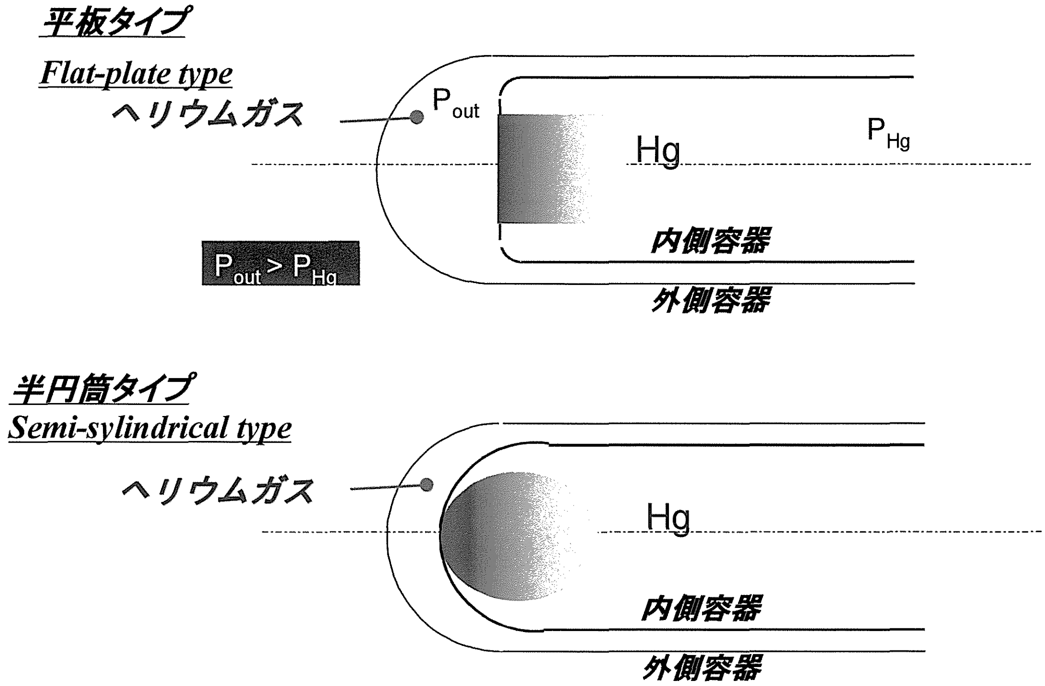
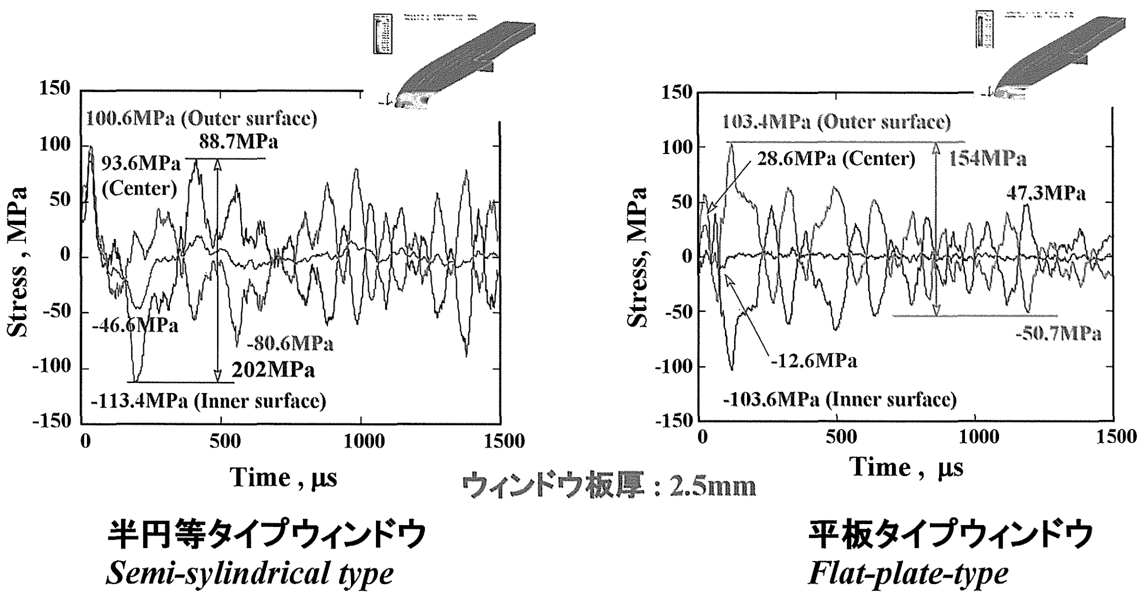



図 3. ビーム窓の形状の違い




・応力強さ範囲は平板タイプのほうが低い → 疲労寿命に有利である。

・膜応力強さ(引張り)が平板タイプのほうが低い
→ 照射脆化時の瞬時破断に対して有利である.

図 4. ビーム窓の形状の違いによる発生応力の違い

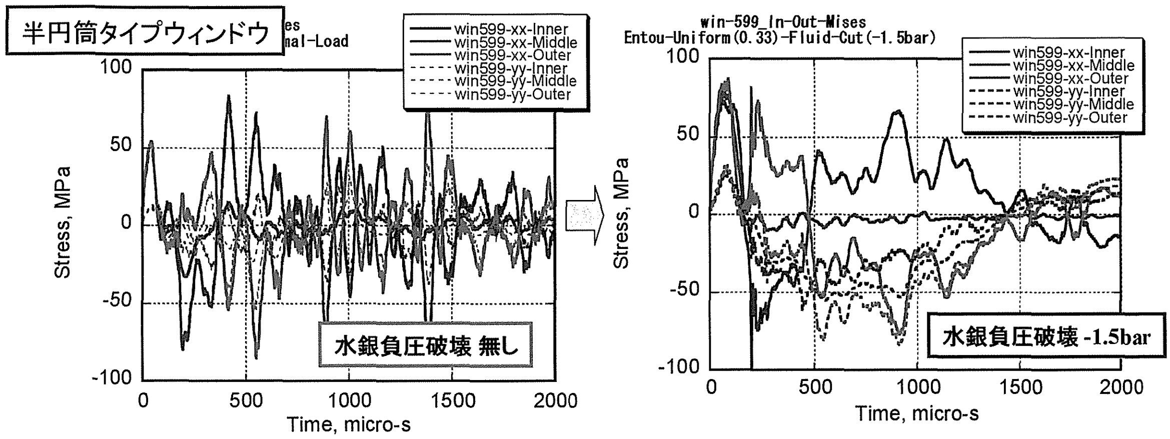



図 5. 水銀の状態方程式の違いによる発生応力の違い（右が実験結果に近い）

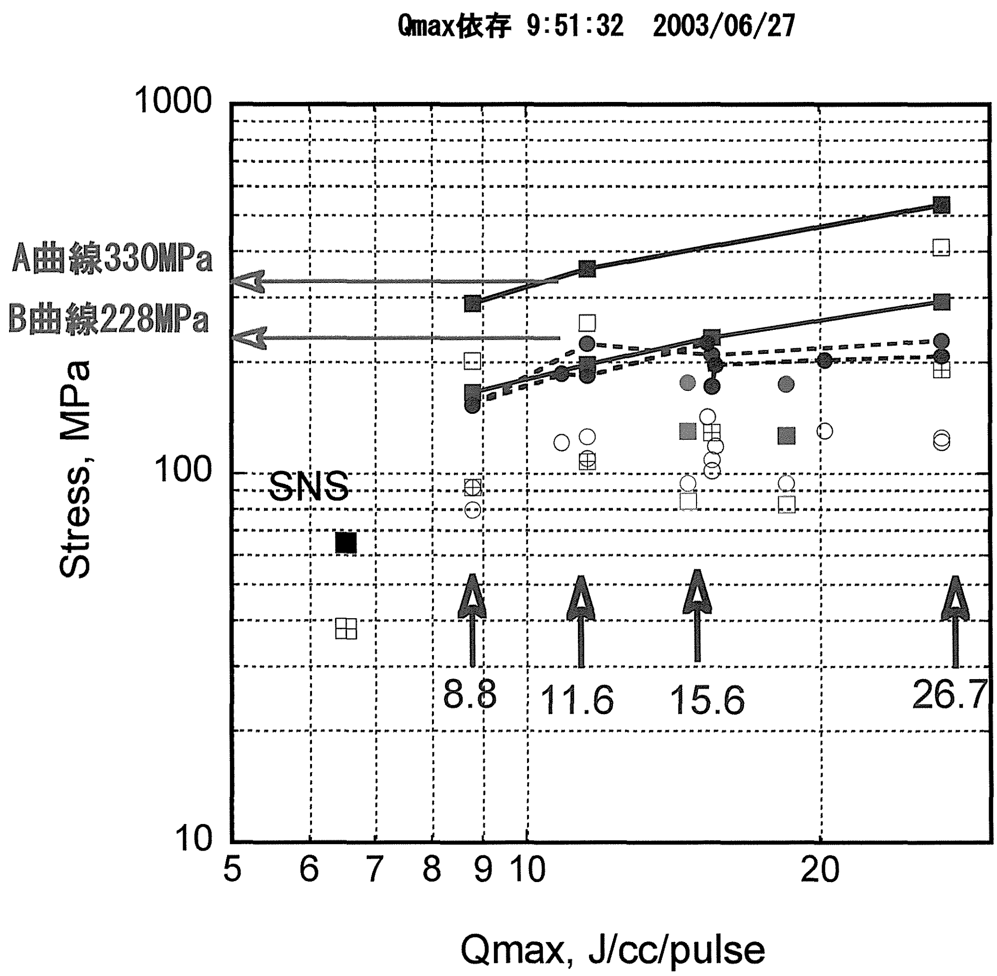



図 6. ビーム条件（最大発熱密度）をパラメータにした発生応力の関係

4.9 中性子利用研究センター

# 4.9.1 Large-scale molecular orbital (MO) calculations with the Gaussian package

(ガウシンアンプログラムを用いた大規模分子軌道計算)

生体物質機能解析研究グループ

Fabio, Pichierri

## 1．利用の概要（要約）:

Density functional theory (DFT) calculations have been carried out on the giant molecule cucurbituril and its sulfur analogue (thia-cucurbituril) in order to investigate their electronic and molecular structures. The results have published in Chemical Physics Letters and presented at two workshops dedicated to large-scale quantum mechanical calculations.

## 2．利用の内容・結果(contents, results)：

DFT calculations have been performed on a giant molecule termed cucurbituril (from the Latin *cucurbita*). This molecule is a macrocycle whose structure resembles that of a pumpkin. Although the atomic structure of this molecule has been characterized by x-ray diffraction analysis, its electronic structure has not been investigated yet. Parallel DFT-MO calculations with the B3LYP/MIDIx method have been carried out on both cucurbitutil and its sulfur analogue thia-cucurbituril, which has not been yet synthesized. The optimized molecular structures of these two molecules are shown in Figure 1. The molecular structure of cucurbituril agrees with the experimental structure. The structure of thia-cucurbituril is similar to that of cucurbituril and both structures posses D6h symmetry.

Figure 2 shows the frontier molecular orbitals of cucurbituril and thia-cucurbituril. The HOMO (Figure 2b) is localized mainly on the glycouril moieties while the LUMO (Figure 2c) is somewhat delocalized along the macrocycle's perimeter. DFT calculations indicate that the HOMO-LUMO energy gap of cucurbituril is about 7 eV while the electron affinity is negative and close to about -2 eV. These results suggest that cucurbituril is exceptionally stable from a thermodynamic point of view and resistant to further reduction. As a matter of fact, electrochemical experiments performed on the complex between CB[7] and the methyl－viologen dication (MV) show that only the guest is being reduced.

### ３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）(references)：

1). F. Pichierri,
"Density functional study of cucurbituril and its sulfur analogue",
Chemical Physics Letters, 390(2004)214-219.

2). F. Pichierri,
"Molecular Nanotechnology with cucurbituril"
IMR (Institute for Materials Research) Workshop, 東北大学、１０月５日（火）—６日（水）.

3). F. Pichierri,
"DFT studies of cucurbituril macrocycles"
International Workshop on "First-Principle Quantum Methods and Applications to Dynamical Processes", 東北大学、１０月12日（火）.

### ４．今後の利用予定(plan in near future)：

In the near future I plan to extend the calculations to important derivatives of cucurbituril as well as to some of its inclusion compounds. Furthermore, other interesting molecules, such as porphyrins and giant hydrocarbons, are being considered for theoretical calculations with the Gaussian package.

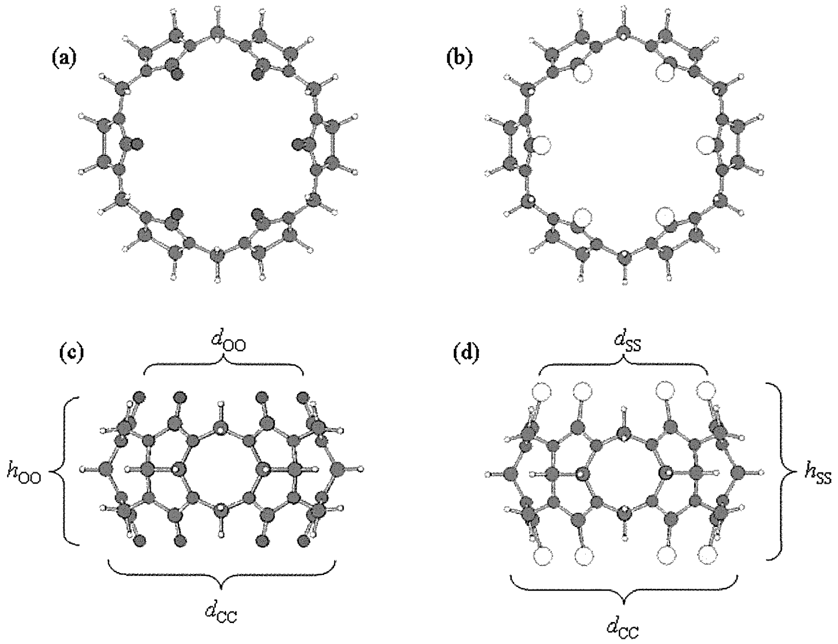



図 1. Optimized molecular structures of (a, c) cucurbituril and (b, d) thia-cucurbituril macrocycles. Color code for atoms: red (O), blue (N), grey (C), and yellow (S).

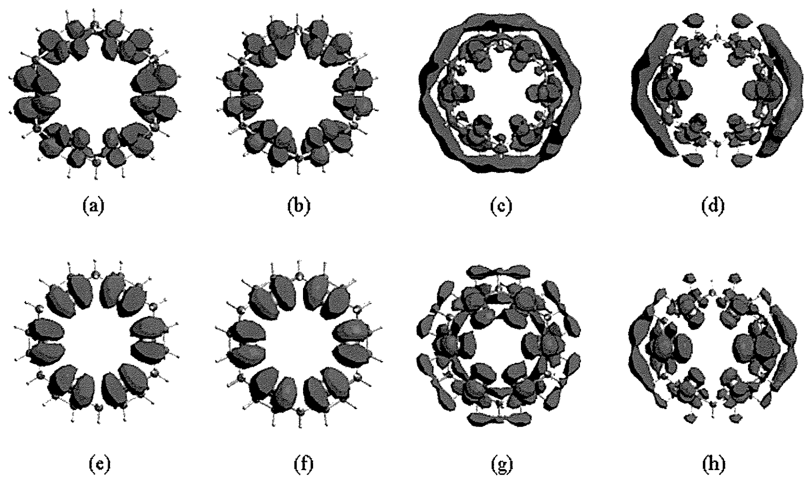



図2. Frontier molecular orbitals of (a-d) cucurbituril and (e-h) thia-cucurbituril macrocycles as calculated with the DFT methods implemented in Gaussian 98.

## 4.9.2 蛋白質の認識機構解明のための分子動力学計算を用いた研究

生体物質機能解析研究グループ
樋口真理子

**1．利用の概要（要約）：**

酵素の働きをするタンパク質 MutT の基質認識の機構を解明するため、基質フリーの MutT、親和性の高い基質との複合体、親和性の低い基質との複合体などについて分子動力学計算を行った。　その結果、基質により MutT の構造を含む結合状態が異なることが分かった。

**2．利用の内容・結果：**

蛋白質 MutT は、突然変異の原因となる 8-oxo-dGTP を加水分解する酵素である。この 8-oxo-dGTP は DNA の材料となる dGTP が酸化したものだが、構造が 8-oxo-dGTP とよく似ている。しかし、MutT は両基質を大きな結合力の差により見分け、8-oxo-dGTP を特異的に認識し結合する。この結合力の差は両基質の構造や水素結合能の違いだけでは説明できない。最近、基質と結合していないフリーの MutT と、基質 8-oxo-dGMP と結合した複合体の MutT の構造がＸ線結晶構造解析でとかれ、結合時には基質を包み込むように大きく構造変化していることが分かった。

我々は、この構造変化が特異的な基質認識に関連があるのではないかと考え、構造がとかれた基質フリーの MutT と 8-oxo-dGMP との複合体の MutT、さらにこれら二つの MutT の構造を基にして結合力の弱い dGMP との複合体のモデル、フリーの MutT に基質を水素結合させたモデル等について分子動力学計算を行った。

その結果、結合時に大きく構造変化すると思われる部分は基質フリーの状態でも大きく揺らいでいること、両基質では MutT との結合時に残基 119Asn の側鎖の向きが変わり、そのため基質の MutT との相対位置が変化し、8-oxo-dGMP との複合体では MutT は基質を囲んだ状態で安定しているが、dGMP との複合体の時には、完全に基質を囲まず揺らぎも大きいことがわかった。この残基 119Asn の向きの違いは、フリーの MutT に基質を水素結合させた状態でも起こった。

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

「分子動力学法による MutT の 8-oxo-dGMP 認識機構解明」

樋口真理子、石田恒、北尾彰朗、山縣ゆり子、郷信広、　日本生物物理学会第４１回年会２００３年９月

「分子動力学法による MutT の基質特異性発現機構解明」

樋口真理子、石田恒、北尾彰朗、山縣ゆり子、郷信広、　分子科学研究会　生体分

子ダイナミクスと機能　立体構造形成研究会　２００３年１２月

「Study of recognition mechanism of MutT by molecular dynamics simulation」

M. Higuchi, H. Ishida, A. Kitao, Y. Yamagata and N. Go, Frontiers in Bioinformatics: Structure, Interaction and Function ２００４年２月

**４．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

今後、エントロピーや自由エネルギー計算等の熱力学的解析も行い、MutT の基質認識の特徴をそれらと動的性質とを関連付けることでさらに詳細に調べる。

# 4.9.3 Simulation of the functional domain movement the enzyme alcohol dehydrogenase upon binding the dinucleotide NAD

(NAD 結合によるアルコール脱水素酵素の機能部位ダイナミクスシミュレーション)

量子生命情報解析グループ
Steven Hayward

1．利用の概要（要約, Summary）：

Molecular Dynamics simulations were performed on the ITBL supercomputer to simulate the functional domain movement in the enzyme alcohol dehydrogenase. The functional movement is a closure of one domain upon the other and is induced by the binding of the dinucleotide, NAD. The simulations show that a specific interaction between Arg369 and the diphosphate of NAD is involved in inducing closure.

2．利用の内容・結果（Results）：

The purpose of the work undertaken was primarily to test the model by Hayward (1) which suggested that for this enzyme NAD binds first to the small domain and induces closure by interacting with specific residues on the large domain. Figure 1 shows the movement of the large domain relative to the small domain to which NAD is bound. Our aim therefore was to simulate this conformational change. Normally, a ligand-induced domain movement of this nature could not be simulated because the event of ligand binding to the protein would be beyond current simulation times. However the sequential model proposed by Hayward suggests a two-phase process, the first: NAD binding to the small domain, the second: the interaction of NAD with regions on the large domain to induce closure. It is this second stage that we originally thought would be within current simulation time with the kind of supercomputing facilities available at ITBL.

The simulations were performed using AMBER 7 Molecular Dynamics simulation software package. The size of the system was approximately 70000 atoms. In all six separate simulations were performed on alcohol dehydrogenase (ADH) spanning a total simulation time of 5 nanoseconds. Two simulations were performed on ADH in the absence of NAD, three with NAD bound in a single subunit (it is a dimer), and finally one with NAD bound in both subunits. All simulations were started from an open conformation. Partial closure of the domains was seen in the wild type simulation with a single bound NAD.

As seen in Figure 2 the observed movement was found to be very similar to the experimentally determined domain movement. Formation of the Arg369·NAD salt bridge was seen to occur after about 100ps, some 100ps before full closure was achieved, suggesting that this interaction plays a role in inducing closure. In order to test this two further simulations were prepared, one a Arg369Ala mutant and the other an unphysical mutant where the side chain charges on Arg369 were "switched off". Both these simulations had a single NAD bound. In contrast to the wild type simulation no domain closure was observed in either of these mutant simulations thus verifying our conjecture that this interaction is involved in inducing closure. This would be the first time that a specific interaction has been found to play an important role in inducing domain closure. However, our analysis is continuing.

## ３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

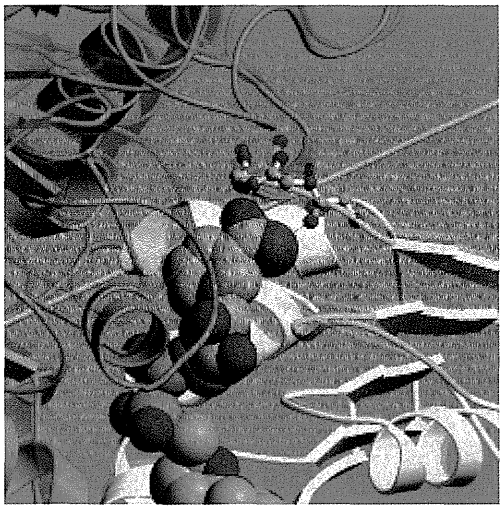
(1) S. Hayward, "Identification of Specific Interactions that Drive Ligand-induced Closure in Five Enzymes with Classic Domain Movements", 2004, J. Mol. Biol., 339, 1001-10021

The work has not been fully completed yet and therefore no paper about this work has been submitted for publication. However, I am completely confident that a publication will be forthcoming given the importance of the result. The work was presented at the annual "Bio Colloquium" at the University of East Anglia, U.K. on June 3, 2004. I also presented this work as an invited speaker at a Summer School on "Advanced Modelling of Biological Function" at the International University Bremen, Germany, 7-13 August 2004.

## ４．今後の利用予定(Future Plan to use JAERI Computer)：

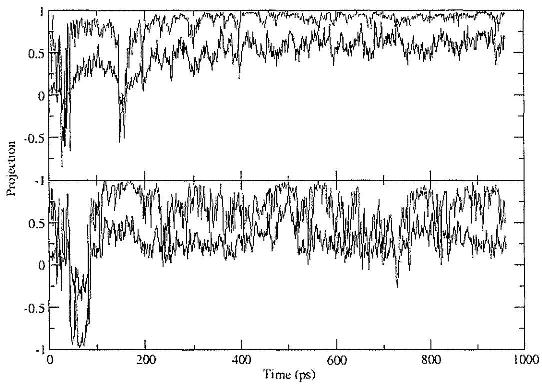
No immediate plans.

Figure 1



Experimentally determined movement of the large domain relative to the small domain as induced by NAD in liver alcohol dehydrogenase. The coenzyme binding domain (small domain) is coloured cyan and the catalytic domain (large domain), orange. The bending regions 176-177, 290-301 and 315-317 are coloured green. The fainter depiction is the open (PDB code: 8ADH) and the stronger, the closed conformation (PDB code: 2OHX, chain A). The hinge axis is shown as the white rod, NAD is in space-filling model, and the backbone atoms of residues 317-319 in ball-and-stick model. The movement of the backbone to form hydrogen bonds (indicated by dashed lines) between Ala317 and Phe319 and the carboxamide of NAD appears to be one of the main interactions driving domain closure. The region 317-319 is located at the terminus of a strand of a β-sheet and the carboxamide group of nicotinamide is positioned as if were extending the neighbouring strand which terminates at Ile291. In this sense the carboxamide is mimicking the backbone of a single amino acid residue. The other bending region, 176-177, is there to help control the domain closure by creating another hinge point. An analogous mechanism is seen in cAMP-dependent protein kinase in its interaction with ATP.

**Figure 2**




Projections onto the experimental domain movement. Top figure is for Monomer A to which NAD was bound, bottom is for Monomer B which remained unliganded. The black line indicates how far along the experimental domain movement the simulated monomer has moved and the red line the extent to which it is in the correct direction. Trajectories start from 0.0, the open domain conformation. If both lines achieve 1.0 then the domain conformation will be identical to the experimental closed conformation.

4.10　先端基礎研究センター

# 4.10.1　ヘリウムクラスター中の量子ダイナミクスに関する計算機シミュレーション

超流動反応場研究グループ
高柳　敏幸

**1．利用の概要（要約）：**

超流動反応場研究グループでは、極低温超流動液体ヘリウムを新しい場とし、化学反応や分子ダイナミクスにおける量子効果の解明を目的として、研究を実施している。このためには、理論シミュレーションと実験結果との比較がきわめて重要であり、新しい量子シミュレーション手法の開発も行っている。ここではヘリウムクラスター中の原子分子ダイナミクスを中心に、その量子効果を探るべく、大規模なシミュレーションを行った。

**2．利用の内容・結果：**

ヘリウムクラスター中、または表面にトラップされた原子の光励起ダイナミクスについてシミュレーションを行った。ヘリウムの量子性を考慮するため、ヘリウムの運動を経路積分セントロイド分子動力学法で取り扱い、原子の電子状態を量子波束法で取り扱う新しいハイブリッド量子シミュレーション法を開発し、主としてＶＰＰ５０００を利用して並列計算を行った。大規模な量子ダイナミクスシミュレーションは、大型並列計算機の利用により初めて実行可能である。典型的な例として、図１にヘリウムクラスターの表面に弱く付着したカリウム原子を非常に短い光パルスで電子励起状態に励起したときのダイナミクスを示す。この場合、励起カリウム原子が表面からヘリウム原子を１個引き抜き、K*He エキサイプレックスを生成する。その時間スケールはおよそピコ秒のオーダーで起こる。この結果はフェムト秒レーザーを用いた実験結果と定性的に一致する。また、クラスター中のヘリウム原子はその量子効果のために、液体のように振舞うのが理解できる。このように、ヘリウムクラウスターに関する化学ダイナミクスについて、極めて興味深い量子効果を観測することができた。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1). T. Takayanagi,
"Ab initio calculations of low-lying potential energy surfaces of the HHeF system,"
*Chem. Phys. Lett.*, 371, 675-680 (2003).

2). T. Takayanagi and M. Shiga,
"Photodissociation of $Cl_2$ in helium clusters: An application of hybrid method of quantum wavepacket dynamics and path integral centroid molecular dynamics,"
*Chem. Phys. Lett.*, 372, 90-96 (2003).

3). A. Wada, T. Takayanagi, and M. Shiga,
"Theoretical simulations on photoexcitation dynamics of the silver atom embedded in helium clusters,"
*J. Chem. Phys.*, 119, 5478-5486 (2003).

4). M. Shiga and T. Takayanagi,
"Quantum path-integral molecular dynamics calculations of the dipole-bound state of the water dimer anion,"
*Chem. Phys. Lett.*, 378, 539-547 (2003).

5). T. Takayanagi,
"Theoretical simulations of dynamics of excess electron attachment to acetonitrile clusters,"
*Chem. Phys.*, 302, 85-93 (2004).

6). K. Yagi, T. Takayanagi, T. Taketsugu, and K. Hirao,
"The effect of spin-orbit coupling on fast neutral chemical reaction, $O(^3P) + CH_3 \rightarrow CH_3O$,"
*J. Chem. Phys.*, 120, 10395-10403 (2004).

7). T. Takayanagi and M. Shiga,
"Theoretical study on photoabsorption dynamics of the K atom attached to helium clusters and the solvation structures of $K^*He_n$ exciplexes,"
*Phys. Chem. Chem. Phys.*, 6, 3241-3247 (2004).

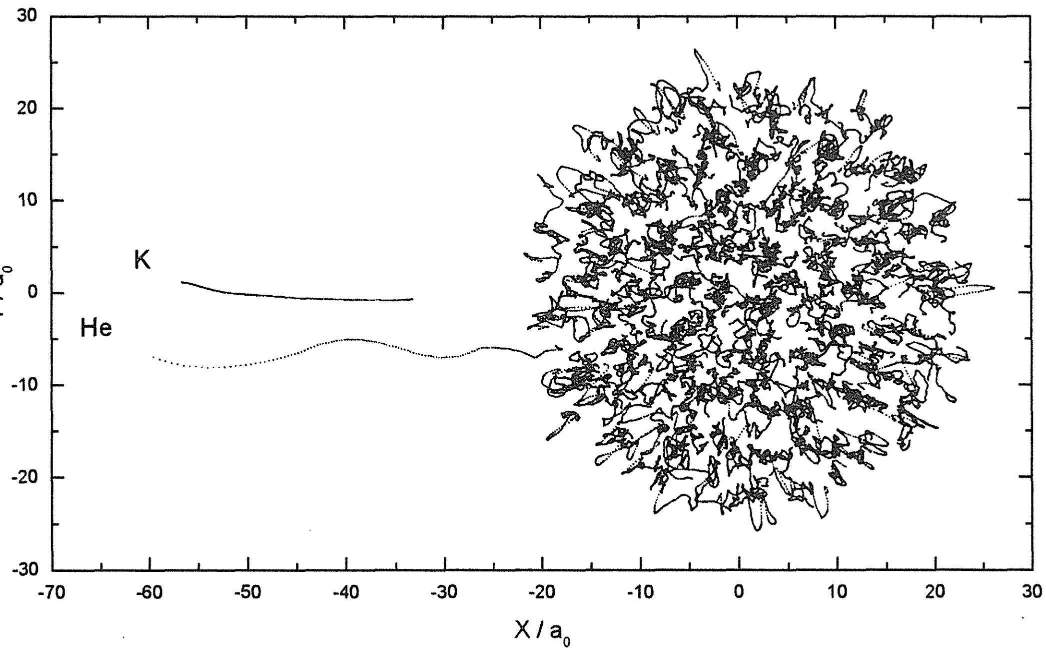
8). T. Takayanagi,
"Quantum-classical wave packet calculations for the $O(^1D) + N_2O \rightarrow NO + NO/N_2 + O_2$ reaction,"
*Chem. Phys.*, in press.

9). T. Takayanagi, M. Shiga, and T. Taketsugu,
"Development of a three-dimensional ab initio potential energy surface for the

He-$Cl_2$(X) system and its application to solvation structures in the $He_nCl_2$ clusters,"
*J. Theo. Comp. Chem.*, in press.

**４．今後の利用予定：**
特になし

図１．ヘリウムクラスターに表面付着したＫ原子の励起ダイナミクスの２０ピコ秒間の軌跡。Ｋ原子を電子的に励起すると、ヘリウム原子１個をを引き抜いて、K*He エキサイプレックスが生成したことがわかる。また、クラスター中のヘリウム原子は液体のように量子的に運動している。



4.11　光量子科学研究センター

## 4.11.1　整形レーザーパルスによる量子制御過程の数値シミュレーション

光量子利用研究グループ
寺西　慶哲

### 1．利用の概要（要約）：

光量子源システム研究グループで行われている、量子制御実験計画に必要な数値計算と実験結果の解析のための理論的研究を行っている。具体的には、Cs 原子の２光子励起過程とＫ原子の１光子励起過程の２つについての計算を行った。レーザーパルスの形状を自在に変化させて最適なレーザーパルスの形状を探索するのが目的であり、パルスを決定する複数のパラメータ（パルス幅、ピーク強度、チャープ速度、パルス間の時間遅延、等）が励起過程に与える影響を調べる必要があった。また、量子制御過程を考えているのでシミュレーションは量子効果を取り入れる必要があった。そのために、時間依存シュレディンガー方程式解法を複数回行う必要があり、そのために並列計算機の利用が大いに役に立った。

### 2．利用の内容・結果：

レーザー場中での量子力学的原子過程を計算するためのシミュレーションコードを開発し、SR8000 を利用した並列計算を行った。具体的には、スピン軌道分裂した２つの準位への励起確率を計算し、パルス整形によって特定のスピン軌道状態への励起を行う、選択励起過程を実現するパルスの探索を行った。また、選択性の破れについて議論するために高精度（励起確率における誤差が$10^{-9}$以下）の計算を行う必要があったが、SR8000 の多ノードシステムの利用により、このような数値計算を多数回行うことが出来た。15 年度は以下のような結果を得ることが出来た。

- チャープのかかっていない２つのパルスを Cs 原子に照射したときの２光子励起過程によって生成される７D(3/2)と 7D(5/2)の２つの存在確率の計算を行った。計算は２つのパルスの位相差と遅延時間を変化させて選択性について調べた。実験結果との比較が図１である。図から読み取れるように、位相差を調節することで特定の準位への励起が選択的に起こすことが出来る。２つのエネルギー差と不確定性関係にある時間よりも短時間で選択できることを理論的に予言し、実験で実証することが出来た。さらに、この方法でピーク強度を大きくしていった場合のシミュレーションも行った。強度が大きくなるにつれ励起確率も当然大きくなるが、選択性も悪くなり、数 GW/cm2 を越える辺りで現在の測定誤差よりも大きな影響を与える事が判った。つまり、２つのパルスの位相差と遅延時間を調節するだけでは、高強度領域においての選択は出来ないことを数値計算によって示唆することが出来た。
- 上記のような高強度領域での選択を可能にするための方法として、２次チャープパルスの利用を提案し数値シミュレーションの結果を基に、実証実験の提案を行った。結果としてＫ原子の 6P(3/2)と 6P(1/2)の２つの状態への１光子励起過程を用いれば、

レーザーの波長や強度などに対する実験条件が現実可能であることがわかった。

**３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）**：

1).K. Yokoyama, Y. Teranishi, Y. Toya, T. Shirai, Y. Fukuda, M. Aoyama, Y. Akahane, N. Inoue, H. Ueda, K. Yamakawa, A. Yokoyama, H. Yamada, A. Yabushita, A. Sugita, "Optimal control of ultrafast selection", J. Chem. Phys. 120 (2004) 9446.

2).寺西慶哲、"分子の動力学過程に対する量子制御"、第５回光量子科学研究シンポジウム、２００３年１１月、木津

3).横山啓一、寺西慶哲、森林健悟、James Koga、黒崎譲、福田祐仁、中村宏樹、Zou Shiyang、"レーザー場による分子の動力学過程制御の理論的研究"、第５回光量子科学研究シンポジウム、２００３年１１月、木津

**４．今後の利用予定**：

より自由度の大きい系（分子、散逸系など）に対する量子制御過程のシミュレーションを継続して実施する予定。

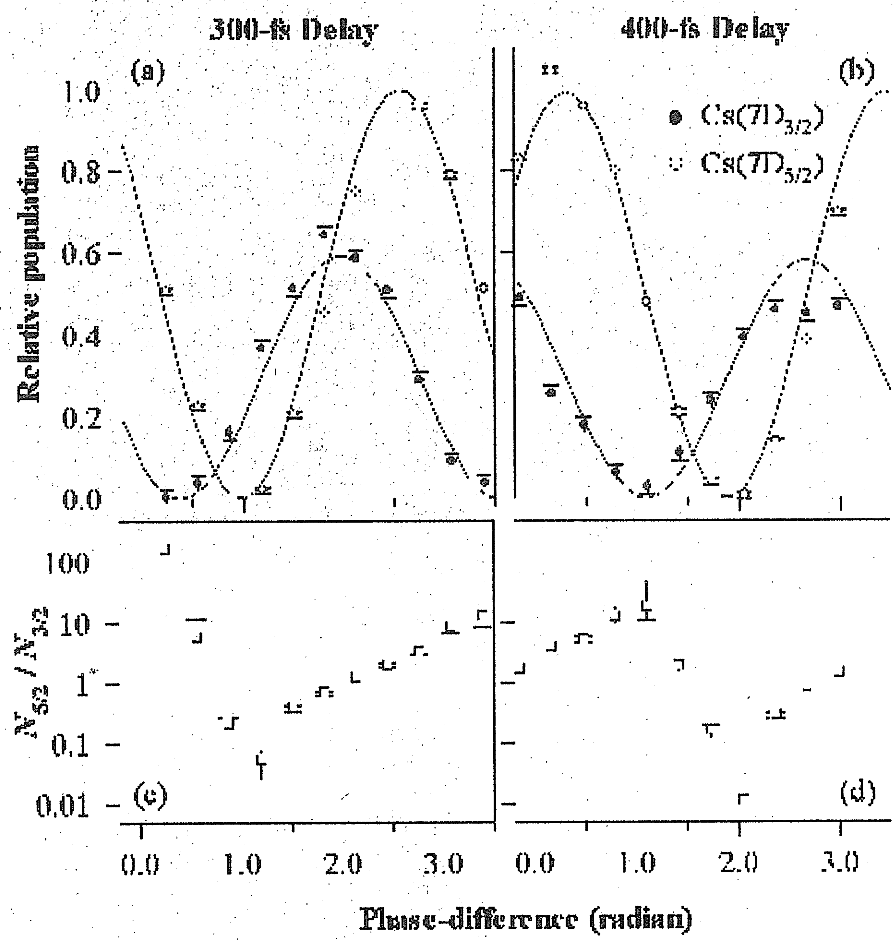



図 1. Cs 原子 7 D 状態への励起確率

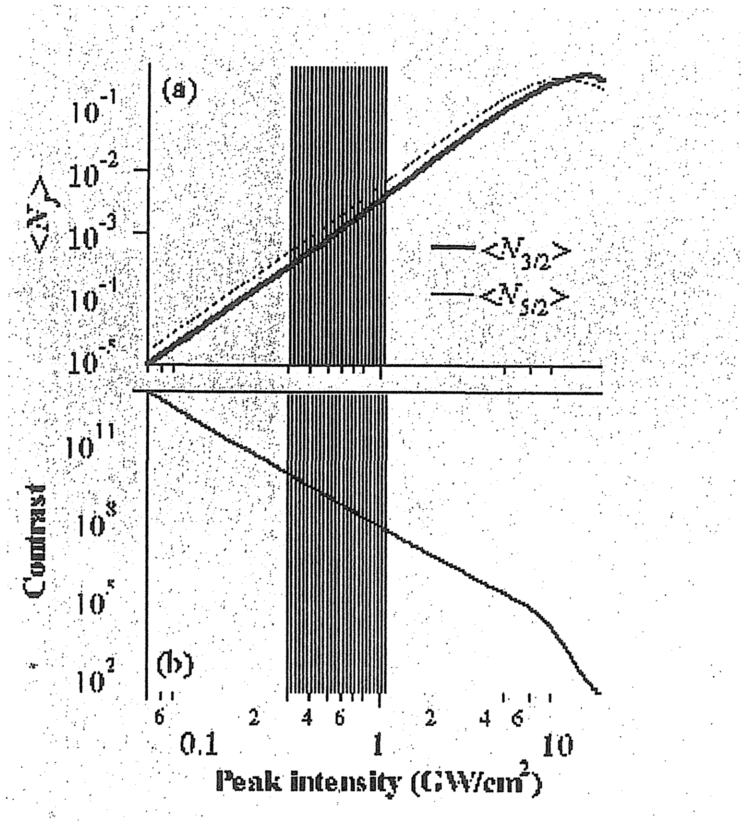



図 2. 平均励起確率とコントラストの強度依存性
(影になっている領域が実験可能な領域)

## 4.11.2 光化学反応の理論計算

光量子利用研究グループ
黒崎　譲

### 1．利用の概要（要約）：

光量子科学研究センターでは、「レーザーによる化学反応制御」を重要なプロジェクトの一つとして位置づけている。筆者は理論計算の観点から当プロジェクトに従事しており、その内容は主に次の三つである。①化学反応のポテンシャル面の構築、②光化学反応の古典トラジェクトリ計算、③レーザーによる最適反応制御理論。これらの理論計算はいずれも極めて大規模であるため、大型並列計算機の利用が必要となる。

### 2．利用の内容・結果：

現在主に利用している大型計算機は、関西研究所のSSCMPPならびにSSCMPPHシステムである。上記①および②のプロジェクトでは同様の計算を多数実行する必要があるが、これらの並列計算システムを用いると、一つの計算を一つのCPUに割り当てることで多数の計算を同時に実行することが可能となる。とりわけSSCMPPHシステムは720個ものCPUからなる並列計算機で、本プロジェクトに対する貢献度は極めて大きい。以下、各プロジェクトについて簡単に述べる。

プロジェクト①では、$BrH_2$系の数千に及ぶgeometryに対して基底状態から第二励起状態まで三つの電子的エネルギーを高精度ab initio分子軌道法により計算し、解析関数にフィットすることによりポテンシャル関数を構築した。得られた基底状態のポテンシャル面を用いて、引き抜き反応の速度定数を遷移状態理論により計算したところ、Table 1 に示したように実測値と非常に良い一致が見られ、このポテンシャル面の正確さが示された。また、ここで得られたポテンシャル面は、将来、レーザーによる反応制御計算などに利用できる。

プロジェクト②においては、$CH_3CHO$および$HCOOH$の光解離反応に関するdirect ab initio molecular dynamics計算を行った。その結果、Fig. 1に示したように$CH_3CHO$の解離生成物のエネルギー分配について、$CH_3$は振動、回転ともに励起されないのに対し、CHOは振動励起はされないが回転は励起されることが予測された。また、Fig. 2に示したように、HCOOHの二つの光解離反応経路、$H_2O$+CO ならびに $H_2$+$CO_2$、の相対並進エネルギー分布は前者より後者の方が大きいことが予測された。

プロジェクト③においては、最適制御理論に基づき開環オゾンから環状オゾン最適なレーザーにより生成することを試みている。本プロジェクトは現在進行中である。

### 3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

(1) Photodissociation of Acetaldehyde, $CH_3CHO \rightarrow CH_3 + HCO$: Direct Ab Initio Molecular Dynamics Study
Y. Kurosaki and K. Yokoyama

*Chem. Phys. Lett.* **371**, 568-575 (2003).

(2) Global Ab Initio Potential Energy Surfaces for the Lowest Three Doublet States ($1^2$A, $2^2$A, and $1^2$A") of the $BrH_2$ system

Y. Kurosaki and T. Takayanagi

J. Chem . Phys. **119**, 7838-7856 (2003).

(3) Direct ab initio molecular dynamics study of the two photodissociation channels of formic acid

Y. Kurosaki, K. Yokoyama, and Y. Teranishi

Chem. Phys. in press.

(4) ギ酸の光分解反応についての direct ab initio molecular dynamics 計算

○黒崎 譲・横山 啓一・寺西 慶哲

分子構造総合討論会、2003 年 9 月、京都

(5) Potential Energy Surfaces and Thermal Rate Constants for the $BrH_2$ System

Y. Kurosaki

Computational Chemical Dynamics: From Gas-Phase to Condensed-Phase Systems,

Oct. 7-9, University of Minnesota, USA

**４．今後の利用予定：**

今後も上記プロジェクトを更に推進するため、今までと同様に主として SSCMPP ならびに SSCMPPH システムを利用する予定である。

Table 1. Theoretical (ICVT/LAG) and experimental rate constants for the abstraction reaction ($10^{-12}$ $cm^3$ $molecule^{-1}$ $s^{-1}$)

| *T*(K) | Lynch | This work | Expt. | *T*(K) | Lynch | This work | Expt. |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | $H + HBr \rightarrow H_2 + Br$ | | | | $D + DBr \rightarrow D_2 + Br$ | | |
| 258 | 3.42 | 4.98 | 4.87 | 250 | 0.71 | 1.80 | 1.9 |
| 300 | 4.48 | 6.75 | 6.00 | 300 | 1.18 | 2.87 | 2.70 |
| | $H + DBr \rightarrow HD + Br$ | | | | $Mu + HBr \rightarrow MuH + Br$ | | |
| 250 | 1.12 | 2.82 | 3.20 | 159 | 13.6 | 4.74 | 10.8 |
| 300 | 1.79 | 4.31 | 4.10 | 240 | 14.2 | 6.99 | 16.5 |
| | $D + HBr \rightarrow HD + Br$ | | | 312 | 14.9 | 9.18 | 20.8 |
| 250 | 1.07 | 2.68 | 3.20 | 376 | 16.0 | 11.17 | 23.0 |
| 300 | 1.67 | 4.05 | 4.70 | 419 | 16.8 | 12.54 | 28.3 |

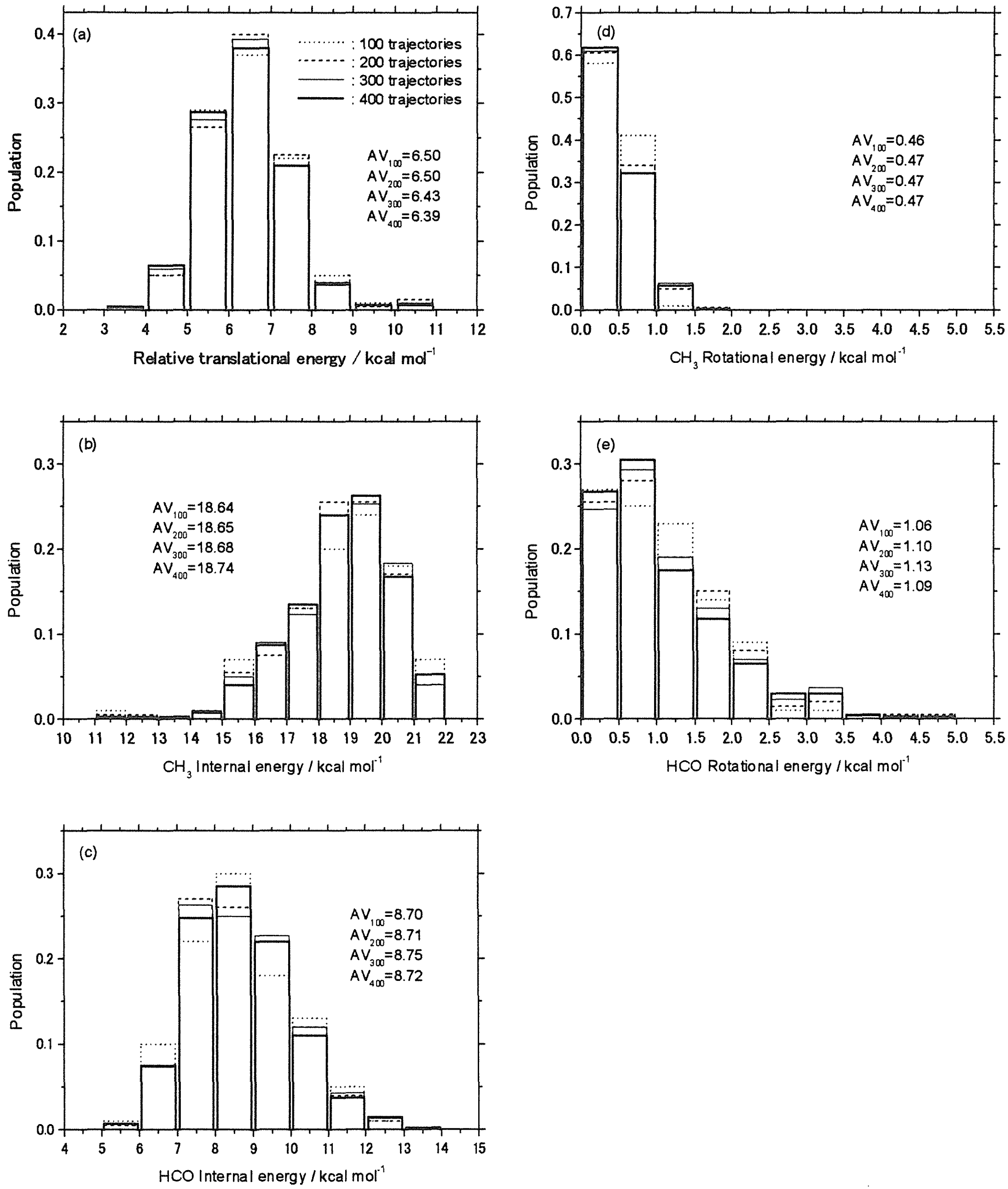



Fig. 1 . Energy distributions of the products for the calculated 100, 200, 300, and 400 trajectories: (a) relative translational energy; (b) $CH_3$ internal energy; (c) HCO internal energy; (d) $CH_3$ rotational energy; (e) HCO rotational energy.

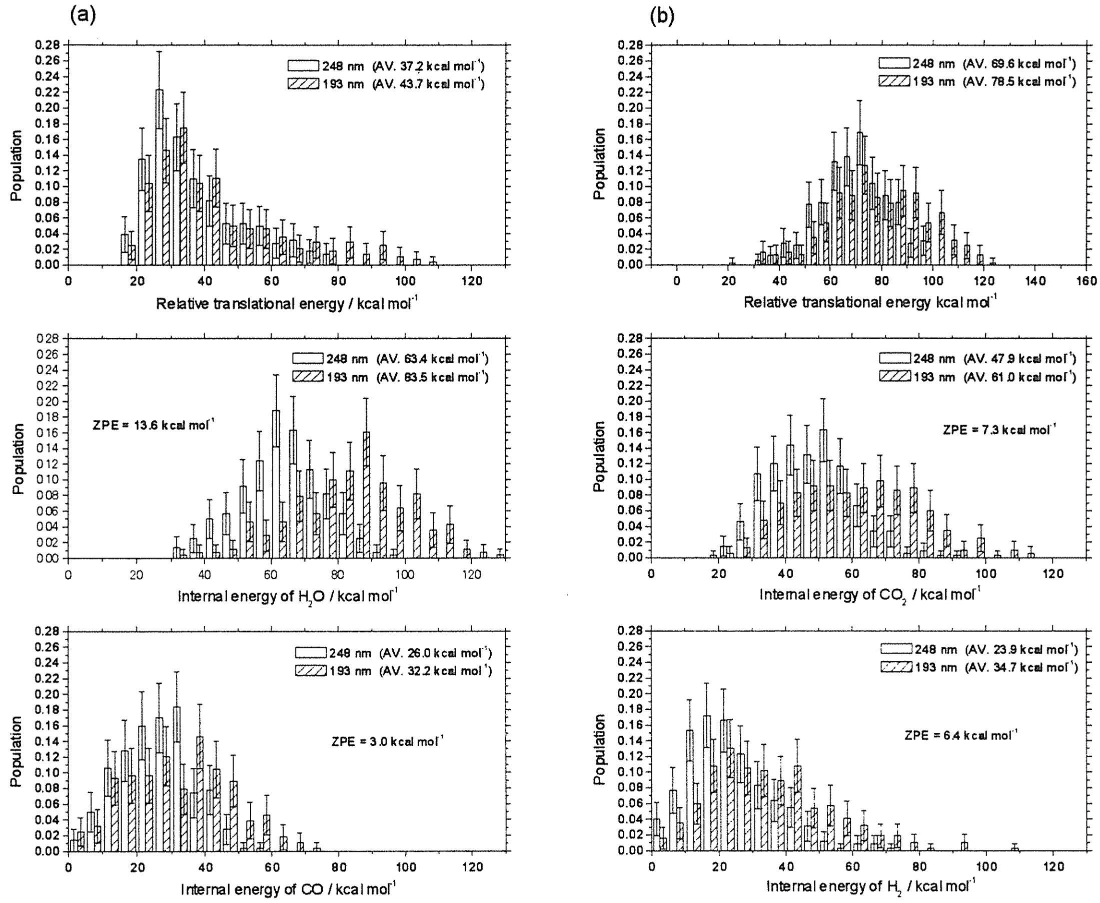



Fig.2. Distributions of product relative translational and internal energies: (a) reaction 1; (b) reaction2.

## 4.11.3 プラズマ粒子シミュレーション

加速研究グループ
Alexei G. Zhidkov

**１．利用の概要（要約）：**

高強度レーザーと物質の相互作用を研究するには、レーザーとプラズマの振る舞いを追跡できる粒子コードが最も有力なツールである。しかし、粒子コードを実験のパラメータと比較できるように、または、正しく実験条件を再現するには、大きな領域で２次元、３次元の大規模なシミュレーションが必要となる。また、イオン化の効果や密度のプロファイルなどの効果を取り入れる必要がある。我々はこれらを満たす、２次元コードを開発し、レーザー・物質の相互作用の研究を行った。

**２．利用の内容・結果：**

物質中（ガス、プラズマ）での高強度レーザーの相互作用を計算するための２次元粒子コードを開発し、関西研の超並列計算機環境において並列検査を行った。空間領域を動くフレームを用いているために、計算領域を小さくし、しかし長い領域まで計算追跡することができる。また、粒子コード中に光電場によるイオン化の効果を取り入れ、計算を行った。以下に主な成果について報告する。

- 単一のレーザーをプラズマ中に集光し、プラズマ中の電子がレーザー航跡場に入射され、結果として単色構造の電子を得る条件を解析的に見いだし、粒子コードとの計算比較によりモデルの正しさを確認した。
- アルゴンプラズマと高強度レーザーの相互作用を光電場によるイオン化の効果を自己無撞着に取り入れた２次元粒子コードで計算した。イオン電荷がレーザーの伝播につれ急激に増加するにも関わらず、プラズマによる発散の効果が抑制され、レーザーの先端部で電子密度とレーザーの自己集束効果が持続することが分かった。これは、レーザーの強度に対して、イオン電荷の横方向依存性が小さいことが原因である。
- 原研レーザー加速グループが行った電子加速実験の条件(20TW, プラズマ密度 $1.4\mathrm{x}10^{20}\mathrm{cm}^{-3}$)で、２次元シミュレーションを行い、実験結果を再現する２温度分布、最大エネルギー35MeV の結果を得た。シミュレーションでは、２温度分布は電子の加速機構に由来し、高温部はフェムト秒、低温部はピコ秒のパルス幅。

**３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

1).A. Zhidkov, J. Koga, K. Kinoshita, M. Uesaka, Phys. Rev. E69, 035401(2004)

2).A. Zhidkov, J. Koga, T. Esirkepov, T. Hosokai, M. Uesaka, T. Tajima,

Phys. Rev. E69, 066408 (2004)

3).A. Zhidkov, J, Koga, T. Hosokai, K. Kinosita, M. Uesaka, Phys. Plasmas 11, December (2004)

4).神門　正城，益田　伸一，山崎　淳，小瀧　秀行，近藤　修司，本間　隆之，金沢

修平，中島　一久，桐山　博光，赤羽　温，林　由紀雄，森　道昭，中井　善基，井上典洋，上田　英樹，山本　洋一，辻　公一，ジェームズ　甲賀，ティムール　エスケポフ，セルゲイ　ブラノフ，山極　満，細貝　知直，アレクセイ　ジドコフ，上坂　充，山川　考一、第５１回応用物理学関係連合講演会、2004 年

**４．今後の利用予定**：

３次元の粒子コードを開発し、超並列環境(720CPU)にて粒子コードの計算を行う予定。

# 4.11.4 Simulation of the relativistically strong laser interaction with plasma

(相対論的高強度レーザーープラズマ相互作用シミュレーション)

Simulation group

Timur Esirkepov

## 1. 利用の概要（要約）：(abstract)

Using extensive three-dimensional (3D) and multi-parametric two-dimensional (2D) Particle-in-Cell (PIC) simulations, we demonstrated the effect of the reflection of light from the strongly nonlinear plasma wake-field entailing extremely high light intensification, we found the new regime of the highly-efficient laser-driven relativistic ion acceleration, and we developed theoretical explanation of the ion-acceleration experiment performed by the group of Prof. H. Daido. We developed the scheme of multi-parametric simulation using the multi-processor system as GRID.

## 2. 利用の内容・結果：(results)

We use the supercomputer HP Alpha Server SC ES40 (720 processors) at JAERI-Kansai and the 3D massively-parallel and fully vectorized Relativistic Electro-Magnetic Particle-mesh code (REMP). In 2003 we performed the following investigations.

1). We suggested a method to generate ultrahigh intense electromagnetic fields, based on the laser pulse compression, carrier frequency up-shift and focusing by a counter-propagating breaking plasma wave, relativistic flying parabolic mirror. This method allows us to achieve the quantum electrodynamics critical field (Schwinger limit) with present day laser systems. To demonstrate the feasibility of the effect we performed 3D PIC simulations (図 1). In the simulations the Gaussian driver pulse has peak intensity $4\times10^{18}$W/cm$^2$, wavelength $\lambda_d$=1μm and FWHM size $3\lambda_d\times6\lambda_d\times6\lambda_d$; it is linearly polarized along the z-axis. The counter-propagating rectangular source pulse has intensity $3.4\times10^{15}$W/cm$^2$, wavelength $\lambda_s=2\lambda_d$ and size $6\lambda_d\times6\lambda_d\times6\lambda_d$; it is linearly polarized along the y-axis. The laser pulses propagate in the underdense plasma slab with the electron density $n_e=0.09n_{cr}$. The slab is localized at $2\lambda_d<x<13\lambda_d$ in the simulation box with size $22\lambda_d\times19.5\lambda_d\times19.2\lambda_d$. The mesh size is $dx=\lambda_d/100$, total number of quasiparticles is $10^{10}$ c The boundary conditions are absorbing on the x-axis and periodic in the transverse directon, both for the electromagnetic fields and quasi-particles. We emphasize that the simulation grid must be and in fact was chosen to be fine enough to resolve the huge frequency up-shift, exhausting all the supercomputer resources.

2). We suggested an intense laser-plasma interaction regime of the generation of high density ultra-short relativistic ion beam. When the radiation pressure is dominant, the laser energy is transformed efficiently into the energy of fast ions. In order to examine the suggested scheme we carried out 3D PIC simulations (図 2). In the simulations the linearly polarized (along the z-axis) almost Gaussian laser pulse propagates along the x-axis. Its dimensionless amplitude is a=316 corresponding to the peak intensity $I=1.37\times10^{23}W/cm^2\times(1\mu m/\lambda)^2$, its FWHM size $8\lambda\times25\lambda\times25\lambda$, its energy $E=10\ kJ\times(\lambda/1\mu m)$. The target is a $1\lambda$ thick plasma slab with density $n_e=5.5\times10^{22}cm^{-3}\times(1\mu m/\lambda)^2$. The ions and electrons have the same absolute charge and their mass ratio is $m_i/m_e=1836$. The simulation box size is $100\lambda\times72\lambda\times72\lambda$, corresponding to the grid size 2500×1800×1800, so the mesh size is $0.04\lambda$. The total number of quasi-particles is $4.37\times10^9$. The boundary conditions are periodic along the y- and z-axis and absorbing along the x-axis for both the EM radiation and the quasi-particles.

3). With the detail hydrodynamics and PIC simulations we investigated the laser proton acceleration in the experiments by group of Prof. Daido with multi-terawatt lasers. We showed that the pre-pulse or pedestal (amplified spontaneous emission) can completely evaporate the irradiated region of a sufficiently thin foil, therefore the main part of the laser pulse interacts with an underdense plasma. Using the multi-parametric 2D PIC simulations we demonstrated that the main pulse generates the quasi-static magnetic field, which in its turn produces the long-living charge separation electrostatic field, accelerating the ions.

We divide the interaction of the intense laser pulse with a sufficiently thin metallic foil into two stages. In the first stage the pre-pulse evaporates the irradiated region of the foil. This stage is treated by two-dimensional (2D) hydrodynamics (HD) simulation (図 3a). The second stage, when the main pulse comes into play, is studied with the 2D PIC simulation (図 3b,c). From the plasma distribution, obtained in the 2D HD simulation, we extract the density profile inside the region, whose size corresponds to the focal spot of the main pulse, and use it as a typical initial density profile for subsequent 2D PIC simulations. We model the cloud formed after the foil evaporation as a slab of inhomogeneous plasma with convex parabolic slopes in the longitudinal direction and a concave parabolic hollow (a channel) in the transverse direction. When the main laser pulse comes into play, the conditions of the plasma cloud are not known exactly, and we need to study a multi-parametric problem, in order to find conditions relevant to the experiment. The most important parameters are the dimensionless amplitude of the laser pulse $a$ (the first parameter) and the normalized density integrated along the channel axis $\sigma=\int n(x,0)dx/(n_{cr}\lambda)$ (the second parameter). A series of 2D PIC multi-parametric simulations, for 720 different pairs $(a,\sigma)$ of the initial parameters, were performed simultaneously on the 720 processors of the supercomputer HP AlphaServer SC ES40. In particular, we found the proton maximal energy and the efficiency of fast protons production depending on the laser pulse dimensionless amplitude $a$ and the target area density $\sigma$ (図 3c). This promising technique of multi-parametric simulation allows us to reveal different mechanisms in different regions of parameters, and tendencies and scaling laws.

### 3.利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：(publications)

1).T. Esirkepov, M. Borghesi, S. V. Bulanov, G. Mourou, and T. Tajima, "Highly Efficient Relativistic Ion Generation in the Laser Piston Regime" // Physical Review Letters, Vol. 92, No. 17, pp. 175003:4, April 30, (2004).

2).S. V. Bulanov, T. Zh. Esirkepov, J. Koga, and T. Tajima, "Interaction of Electromagnetic Waves with Plasma in the Radiation-Dominated Regime" // Plasma Physics Reports, Vol. 30, No. 3, pp. 196-213 (2004). [Translated from Fizika Plazmy, Vol. 30, No. 3, pp. 221-240 (2004).]

3).S. V. Bulanov, T. Zh. Esirkepov, J. Koga, T. Tajima, and D. Farina, "Concerning the Maximum Energy of Ions Accelerated at the Front of a Relativistic Electron Cloud Expanding into Vacuum" // Plasma Physics Reports, Vol. 30, No. 1, pp. 18-29 (2004). [Translated from Fizika Plazmy, Vol. 30, No. 1, pp. 21-32 (2004).]

4).K. Matsukado, T. Esirkepov, K. Kinoshita, H. Daido, T. Utsumi, Z. Li, A. Fukumi, Y. Hayashi, S. Orimo, M. Nishiuchi, S.V. Bulanov, T. Tajima, A. Noda, Y. Iwashita, T. Shirai, T. Takeuchi, S. Nakamura, A. Yamazaki, M. Ikegami, T. Mihara, A. Morita, M. Uesaka, K. Yoshii, T.Watanabe, T. Hosokai, A. Zhidkov, A. Ogata, Y.Wada, and T. Kubota, "Energetic Protons from a Few-Micron Metallic Foil Evaporated by an Intense Laser Pulse" // Physical Review Letters, Vol. 91, No. 21, pp. 215001:4, November 21, (2003).

5).Sergei V. Bulanov, Timur Esirkepov, and Toshiki Tajima, "Light Intensification towards the Schwinger Limit" // Physical Review Letters, Vol. 91, No. 8, pp. 085001:4, August 22, (2003).

### 4．今後の利用予定：(future plan)

In the future we plan to use multi-parametric 2D PIC simulations to quickly find the interesting regions of parameters and to perform 3D PIC simulations for the best set oa parameters found. With the 10 times more powerful supercomputer we will be able to catty out the multi-parametric 3D PIC simulations.

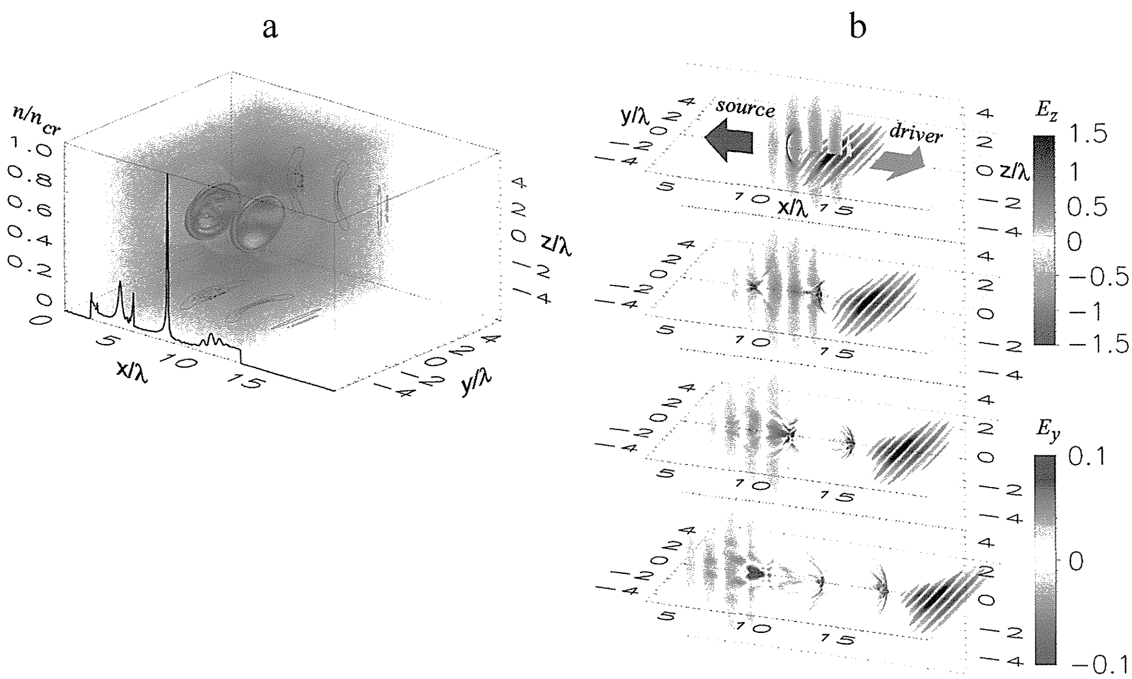



図 1. (a) The electron density: plasma wake-field driven by the short laser pulse (not shown). (b) The electric fields of the driving laser pulse and of the source pulse: reflection, frequency up-shifting and focusing at $t = 16,18,20,22 \times 2\pi/\omega$ (top-down).

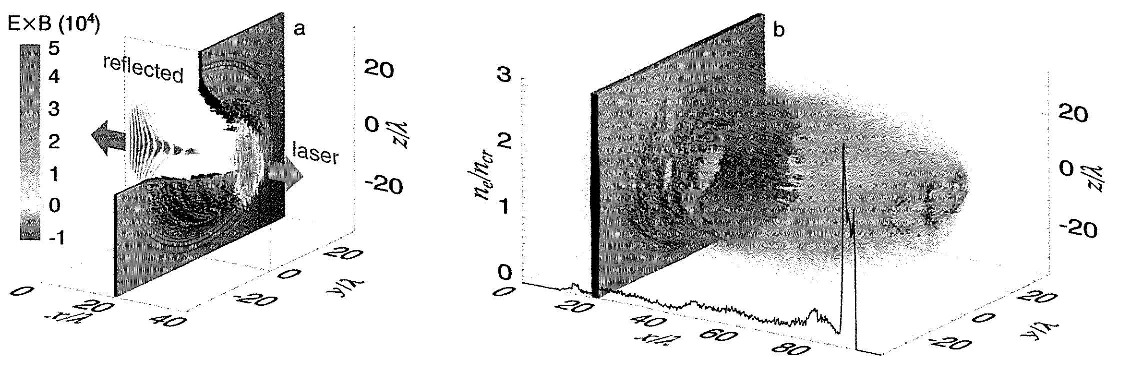



図 2. Laser Piston regime. (a) The ion density isosurface for $n = 8n_{cr}$ (a quarter removed to reveal the interior) and the $x$-component of the normalized Poynting vector E×B in the plane $y = 0$ at $t = 40 \times 2\pi/\omega$. (b) The isosurface for $n = 2n_{cr}$, green gas for lower density at $t = 100 \times 2\pi/\omega$, the black curve shows the ion density along the laser pulse axis.

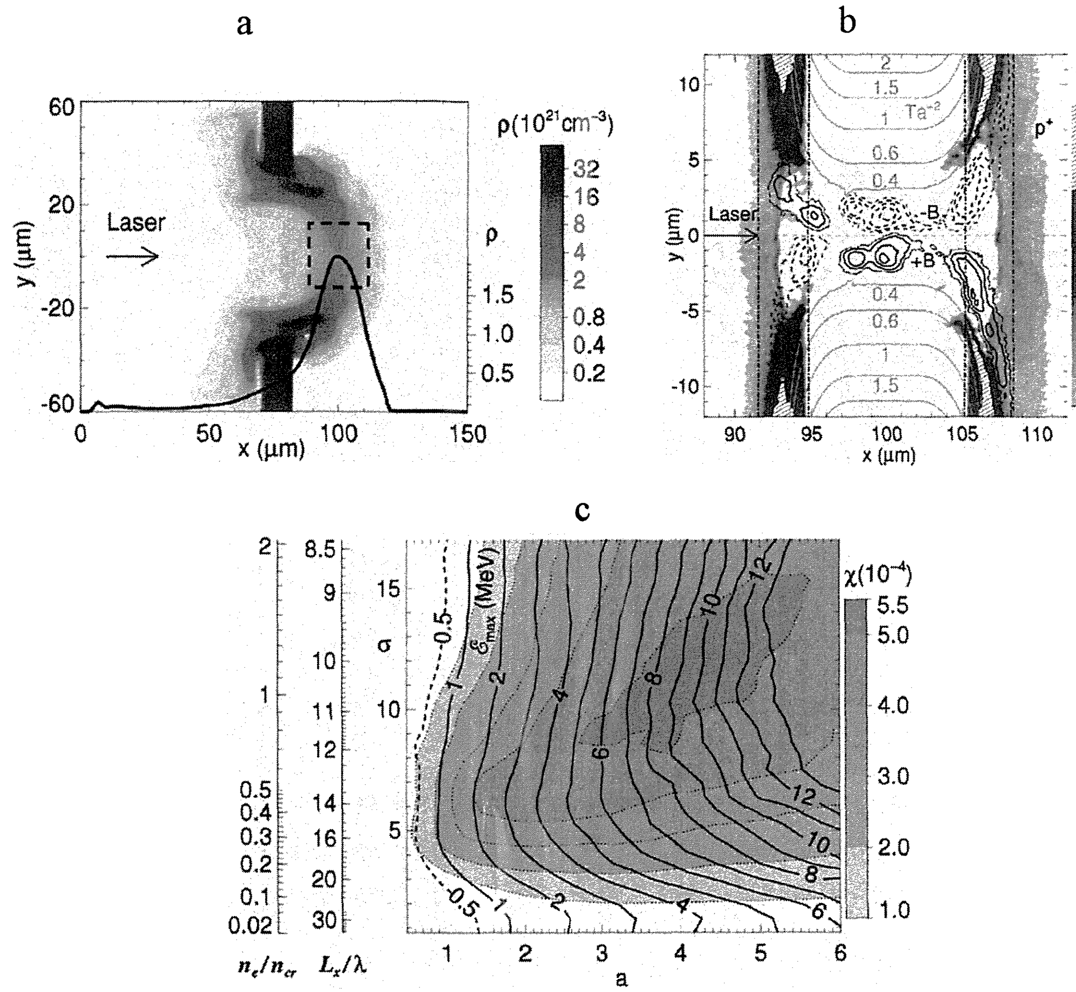



図 3.

(a) Plasma density distribution in the 2D hydrodynamics simulation of the 5 μm foil irradiated by the pre-pulse at t1 = 3 ns. The black curve for density along the symmetry axis. (b) 2D Particle-in-Cell simulation of the plasma in the dashed box shown at the frame (a) after the main laser pulse passed through. The contour plot of the $Ta^{+2}$ density (gray lines), and the proton density (grayscale) at t = t1 + 1 ps. The density is normalized to the critical density. Black contours for the magnetic field values $\pm B = 0.5, 1, 2, 3 \times 10^7$ Gs (solid curves for positive values, dashed curves for negative values) at t = t1 + 0.4 ps. The dash-dot vertical lines denote the initial boundaries of the two proton layers, modeling the water contaminations. (c) The proton maximal energy in MeV (curves), and the efficiency of fast protons production (grayscale) obtained in the 2D multi-parametric PIC simulations.

## 4.11.5 高強度レーザーパルスの中性ガス中の伝播の直接シミュレーションにおけるスーパーコンティニュウム生成

光量子シミュレーション研究グループ
J.K. コーガ

### 1. 利用の概要（要約）:

The propagation of high power short pulse laser pulses in neutral gases is a surprisingly complex phenomenon. In order to study the detailed propagation dynamics a code has been developed which explicitly solves Maxwell' s equations including the finite response time background neutral gas polarization and optical field ionization. In large scale two dimensional simulations of a high power laser pulse propagating in hydrogen-like gas the generation of ultra-broadband white light, the so-called supercontinuum generation, is observed.

### 2. 利用の内容・結果:

We performed two dimensional simulations using 720 CPU's on the ES40 supercomputer for the propagation of a 1 μm wavelength 26 GW linearly polarized laser pulse propagating in a hydrogen-like neutral gas at 1000 times atmospheric pressure $2.73 \times 10^{22} cm^{-3}$. The pulse was temporally and spatially Gaussian with a duration of 266 fs and spot size of 200 μm. The wavelength of the laser was resolved by ten grid cells so that the total simulation box size was 4000 by 18 000 grids in the x and y directions where x is the propagation direction. The boundaries were periodic in y and absorbing in x. The initial pulse intensity is $1.73 \times 10^{13}$ W/cm$^2$, which is far below the threshold ionization intensity of $1.43 \times 10^{14}$ W/cm$^2$. Figure 1 shows the laser pulse after it has propagated 200 μm (left) which is past the neutral density ramp and after propagating 0.5 cm (right) in the gas. The simulation box is moving with the laser pulse at nearly the speed of light. We can see that the back of the laser pulse has been strongly modified. This is what has been previously referred to as an optical shock at the back of the pulse. This shock has been proposed as the source of the supercontinuum generation. The effective spot size of the laser pulse has increased by a factor of 2. All fields are below the theoretical ionization threshold field. In conclusion we have performed a large scale direct solution of Maxwell' s equations with finite response time gas polarization and optical field ionization of the propagation of high power laser pulses in neutral gas. We have reproduced supercontinuum generation without envelope or unidirectional propagation approximations.

### 3. 利用の成果（学会、プレス発表、論文等）:

1). J. Koga,
"Observation of supercontinuum generation in the direct simulation of an intense

laser pulse propagating in a neutral gas,"
Physical Review E, 70(2004)056404-1-056404-5.

4．今後の利用予定：

Perform the same type of simulations with initially strong focusing to reproduce experimental results which include blue-shifting of the laser pulse.

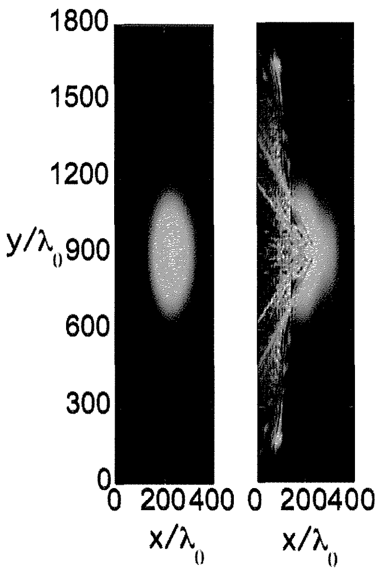



Figure 1. Laser field after propagating 200 μm (left) and after propagating 0.5 cm (right) in the neutral gas.

# 4.11.6 Preliminary analysis of electron bunch formation by a short-pulse high intensity laser propagating through an underdense plasma layer

（アンダーデンスプラズマレイヤーを伝播する短パルス高強度レーザーによる電子バンチ生成の予備解析）

光量子シミュレーション研究グループ
山極　満

## 1．利用の概要（要約）：

Electron acceleration with a short-pulse (20 fs) intense laser propagating through an underdense plasma layer is studied by two-dimensional particle-in-cell simulation. The high energy electron distribution is analyzed for moderate to high intensity. For the electron density around $10^{19}$ $cm^{-3}$, where the pulse length is almost half of the plasma wavelength, dramatic changes of the density structure occur with cavity and bunch formation by incrementation of the laser intensity.

## 2．利用の内容・結果：

We use a two-dimensional fully relativistic PIC simulation code which self-consistently solves Maxwell's equations along with both the particle motion of electrons and ions. The system size is 300□ in the x (laser propagation) direction and 288□ in the y (transverse) direction, where □ is the incident laser wave length. Hereafter x and y are normalized by □. We assume that the initial laser pulse length is 20 fs and the diameter of the waist is 10 □. The optimum density for large wakefield generation is around 1019 cm-3. The linearly polarized laser pulse is normally incident to the plasma layer. The laser intensity I is taken to be 1019-1020 W/cm2. The length of the plasma layer in the x direction is 150□. There exists a vacuum region on both sides of the plasma layer. The length of the left (right) vacuum region in the x direction is 50□ (100□). The electron density ne is taken to be 1018-1020 cm-3.

First let us look into the possibility of the electron bunch formation for the parameters relevant to the experiment of high energy electron generation with a short-pulse intense laser. We have compared among the density profiles of electrons ejected outside the plasma layer for I=1019 W/cm2 and ne=1018-1020 cm-3 at □=400 with □ being the time normalized by the plasma frequency for the density of 1020 cm-3. For the density of ne=1018 cm-3, a clear electron bunch is not formed, while for ne=1019 cm-3 and 1020 cm-3, the electrons are bunched. For ne=1018 cm-3 the electrons are not trapped efficiently by the wakefield, since the phase speed of the wake is higher. For higher density cases the bunched electrons are accelerated mainly in the x direction, as shown in Fig. 1 depicting the phase space plots in the (a) x-Px and (b) Px-Py planes (with P indicating the momentum) in the case of ne=1020 cm-3. The value of P=665 corresponds to the energy of 50 MeV. The energy spectrum of the bunched electrons in the region 260<x<290 is shown in Fig. 2. The electron energy reaches up to 45 MeV, which is consistent with the experimental observation.

Next the aspects of electron bunch formation are examined by changing the laser intensity. We are interested in the transition from the medium intensity case to the high intensity case. The electron density is taken to be 1019 cm-3 for which the wakefield is anticipated to be excited efficiently. For this value of the density, the matching condition gives a critical intensity around 1020 W/cm2. The matching condition is approximately expressed by a0 > ( 2□ / □p )1/2, which is almost identical to that of Zhidkov, where a0 is the normalized laser field, □ the laser frequency, and □p the plasma frequency. Figures 3 and 4 show (a) the electron density image plot in the x-y plane at □=200, (b) at □=300, and (c) the phase space plot in the x-Px plane at □=400 for I=1019 and 1020 W/cm2, respectively. In Fig. 3a we see the wakefield structure in a plasma and a seed of electron bunch in the forefront cavity . The electron bunch is ejected outside the plasma layer in Fig. 3b. The phase space plot in Fig. 3c shows that the attainable energy is lower than that for higher density (Fig. 1a) while the spatial spread is smaller. The cavity formation becomes more pronounced with the increase of the laser intensity and the cavity size becomes larger, as shown in Fig. 4a. Formation and ejection of the electron bunch are also more clearly seen in Figs. 4a and 4b. Although higher energy electrons are generated in Fig. 4c than in Fig. 3c, the location of the high energy tail is further behind the laser pulse (lower x) for higher intensity. This is because the cavity size is larger and electron acceleration occurs further backward. Therefore, the spread in x of the high energy tail is larger for higher intensity.

## ３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

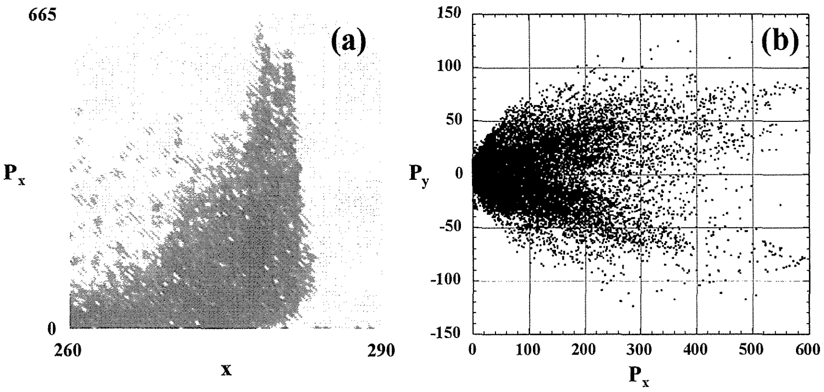
山極 満, J. Koga, 神門正城, S.V. Bulanov, T. Esirkepov, 上島 豊, 斎藤寛二, 若林大輔

高強度短パルスレーザーによる電子バンチ生成シミュレーション

第３回科研費学術創成研究会「ペタワットレーザーによる高エネルギー密度プラズマのワークショップ」(泉佐野, 2004.10)

## ４．今後の利用予定：

The electron stagnation in the real and momentum space will be studied aiming at a better understanding of the formation of the fast electron component confined in the phase space.



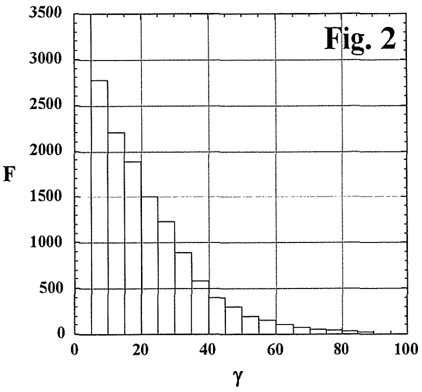




Fig. 1 Phase space plots of electrons in the (a) x-$P_x$ and (b) $P_x$-$P_y$ planes for $n_e=10^{20}$ $cm^{-3}$.

Fig. 2 Energy spectrum of the bunched electrons in the region 260<x<290 for $n_e=10^{20}$ $cm^{-3}$.

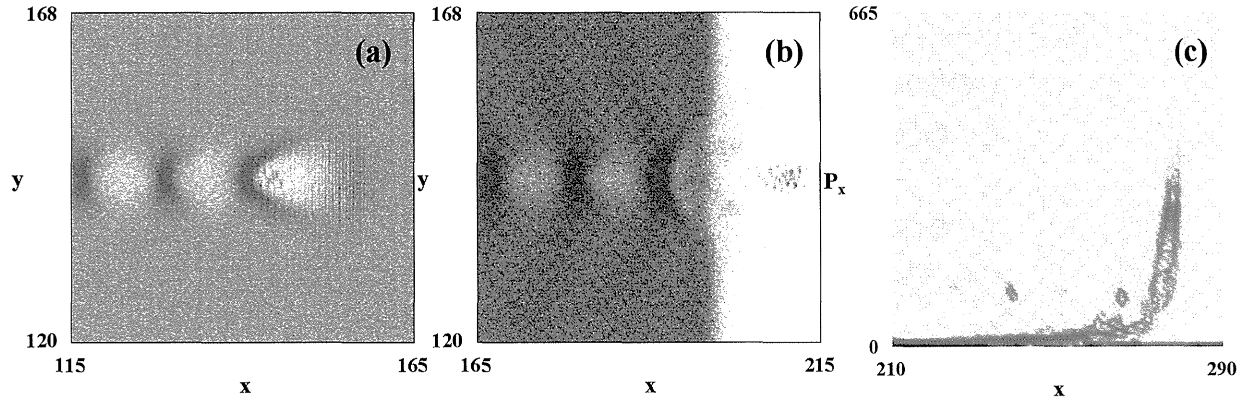



Fig. 3 (a) the electron density image plot in the x-y plane at τ=200, (b) at τ=300, and (c) the phase space plot in the x-$P_x$ plane at τ=400 for $I=10^{19}$ $W/cm^2$. $n_e=10^{19}$ $cm^{-3}$.

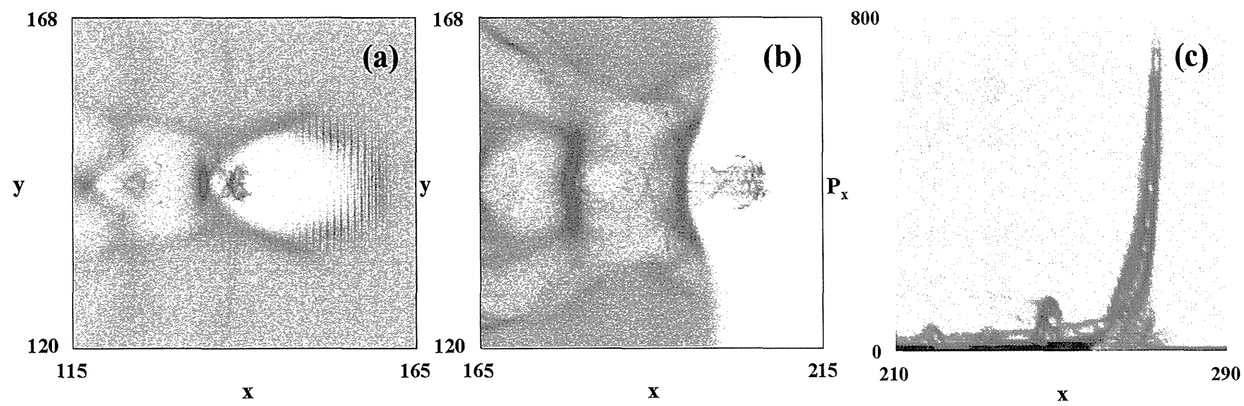



Fig. 4 Same as Fig. 3 except $I=10^{20}$ $W/cm^2$.

## 4.11.7 高強度レーザーと物質の相互作用によるイオン加速シミュレーション

光量子シミュレーション研究グループ
上島　豊

### 1. 利用の概要（要約）:

関西研究所光量子科学研究センターで開発され、さらに進化しつつある極短パルス超高強度レーザーを薄膜に照射した時に、発生する光子・加速粒子等の評価を行う。評価方法としては、レーザー強度、薄膜物質、薄膜の厚さを様々変えてパラメターサーベイを行うと共に、その結果を基にいくつかの代表的なパラメータについて大規模シミュレーションを実施し、高精度の結果を蓄積する。それらの結果を関西研のみならず多くの関係研究者と議論し物理機構解明のための詳細な研究に利用する。
このような現象を解明するためには、中規模のパラメータラン（1 ラン：2-8 時間）を最低でも 100 ラン程度行う必要がある。このようなシミュレーションは、通常運用であれば、半年以上の期間が必要となる研究である。

### 2. 利用の内容・結果:

以下のシミュレーションをデータベースと連携しさせ、実行できた。

○高調波発生の密度、レーザー強度依存性の調査

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 電子密度 | $cm^{-3}$ | $4.2\times10^{25}$ | $10^{24}$ | $10^{23}$ | $10^{22}$ |
| レーザー強度 $a_0$ | | 100 | 1, 10, 100 | 1, 10, 100 | 1, 10, 100 |
| 格子精細度 | 格子 | 3200 | 1000 | 320 | 100 |
| パルス長 | $\lambda$ | 1 | 1 | 1, 3 | 1, 3 |

○格子精細度における thermal instability の影響評価

| | | |
|---|---|---|
| 電子密度 | $cm^{-3}$ | $10^{24}$ |
| レーザー強度 $a_0$ | | 10 |
| 格子精細度 | 格子 | 320, 100, 40 |
| パルス長 | $\lambda$ | 1 |

○超長距離伝播シミュレーション（21 万メッシュ＝1 万波長）

| | | |
|---|---|---|
| 電子密度 | | $10^{19}$ |
| レーザー強度 $a_0$ | | 10 |
| 格子精細度 | 格子 | 24 |
| パルス長 | $\lambda$ | 10 |

このような広いパラメータ空間でのシミュレーション研究を支援するための機能分散シミュレーション支援システムを使ってこれらのシミュレーションを実施しており、結果のデータベース化および検索がシミュレーション直後にできるようになっている。

さらに、実験グループのCCDデータを解析、格納、検索するための光量子理論・実験データベースシステムも同時に開発しており、別のプロジェクトIDを取得し、平成16年10月から実験グループが利用開始している。

### 3. 利用の成果（学会、プレス発表、論文等）:

上島豊, 城和貴
大規模シミュレーションのための分散制御PSE環境構築, JAERI-CONF 2003-008 p.169

上島豊
第4回創造的研究のための大規模データマネージメントシンポジウム論文集,
JAERI-CONF 2004-003

上島豊
大規模データマネージメント関連研究会合同論文集, JAERI-CONF 2004-002

上島豊、近藤孝夫、磯貝健太郎
大規模シミュレーションをマネージメントする機能分散制御システム, IPSJ Symposium Series Vol.2003 No.14 ISSN 1344-060,P151

上島豊
『グリッドへの期待』
SS研ニュースレター選集2004, pp.1 - 10(2004)

○上島豊 1)、斎藤寛二 1)、若林大輔 2)、松田行正 3)、武田康宏 4)、辰知明 5)、木村隆介 5)、下原弘文 5)
機能分散型光量子理論実験データベースシステム
計算工学会　(代々木　5.25.2004)

○上島豊 1)、斎藤寛二 1)、若林大輔 2)、松田行正 3)、武田康宏 4)、辰知明 5)、木村隆介 5)、下原弘文 5)
機能分散型光量子理論実験データベースシステム

計算工学会 (代々木 5.25.2004)

○上島豊、長島章、井原均、西村昭彦、加道雅孝、匂坂明人、石野雅彦、助川辰樹[1]、磯貝健太郎[2]、石田恒[2]、大塚徹[3]、田島俊樹[4]、川村 康文[5]
科学技術振興調整費 「サイエンスメディエーター制度の推進」
計算工学会 (代々木 5.24.2004)

○上島豊、長島章、井原均、西村昭彦、加道雅孝、匂坂明人、石野雅彦、助川辰樹[1]、磯貝健太郎[2]、石田恒[2]、大塚徹[3]、田島俊樹[4]、川村 康文[5]
科学技術振興調整費 「サイエンスメディエーター制度の推進」
計算工学会 (代々木 5.24.2004)

小金山美賀，松岡有希，松山仁美，上島豊，城和貴
GRIDの効率的な運用管理を目指したエージェントシステム
合同エージェントワークショップ＆シンポジウム2003

小金山美賀，松山仁美，松岡有希，上島豊，渡辺知恵美，城和貴
Grid上大規模シミュレーションユーザに巧みに助言する知識自動獲得型エージェント
The 3rd IEEE/ACM International Symposium on Cluster Computing and the Grid (5.12-15 2003)

松山仁美，松岡有希，小金山美賀，上島豊，城和貴
大規模シミュレーションサイクルを統治する知識自動獲得型エージェントプロトタイプの設計と実装,
情報処理学会 第42回MPS研究会, 2002-MPS-42, Vol.2002, No.114, pp.17-20 (2002).

松山仁美、松岡有希、小金山美賀、上島豊、城和貴
大規模シミュレーションサイクルを統治する知識自動獲得型エージェントプロトタイプの設計と実装
第42回 数理モデル化と問題解決(MPS)研究会 (調布市 11.28.2002)

松岡有希，松山仁美，小金山美賀，上島豊，城和貴：
大規模シミュレーションデータベース用パラレルI/O制御エージェント
情報処理学会 第43回MPS研究会, 2003-MPS-43, Vol.2003, No.151, pp.160 (2003).
EuroPVM/MPI 2003, Venice, Italy, Sep. 29- Oct. 2, 2003.

**4．今後の利用予定：**

2次元シミュレーションのパラメーターサーベイを継続し、医療応用のためのイオン加速条件を明らかにしていく。

現在のシミュレーションコードの3次元版を稼動させる。

実験データとシミュレーションデータの比較ができるようにシミュレーション支援システムと光量子理論・実験データベースシステムの統合を図る。

## 4.11.8 光量子-物質相互作用シミュレーション

光量子シミュレーション研究グループ
内海　隆行

**1．利用の概要（要約）：**

光量子-物質相互作用をミクロからマクロレベルでシミュレーションするために、（1）高強度レーザーによる固体ターゲット照射のマクロな連続体モデルによる溶融・蒸発現象のシミュレーション、（2）強電場中でのミクロな電子状態解析のための高強度レーザー場中の原子の非線形イオン化現象の非摂動論的シミュレーション（3）原子のエネルギー準位、自然崩壊確率、光励起・電離断面積、電子衝突励起・電離断面積、自動イオン化確率といった原子-電子-光量子相互作用の素過程データ計算コードの開発を行った。

**2．利用の内容・結果：**

連続体モデルによる溶融・蒸発現象のシミュレーションでは、レーザー駆動小型イオン加速器開発のために、薄膜ターゲットへのプリパルス照射によるプラズマ生成の最適条件を見いだすためのパラメトリック・ケース・ランを行った。(利用の成果[1]、[2]、[3]、[4]、[5]、[6]、[7]）非線形イオン化現象の非摂動論的シミュレーションでは、時間依存シュレディンガー方程式コードや古典的電子衝突モンテカルロコードを開発して非線形イオン化確率を計算した。(利用の成果[11]、[13]）原子-電子-光量子相互作用の素過程データ計算コードを開発し、Ni-様イオンのエネルギー準位を精密に計算した。(利用の成果[8])

また、流体方程式、シュレディンガー方程式などの偏微分方程式の新しい汎用数値解法として CIP-基底関数法を考案し、その有用性を証明するためのコード開発と計算を行った。(利用の成果[9]、[10]、[12]、[14]、[15])

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

[1] K. Matsulado, T. Esirkepov, H. Daido, T. Utsumi, Z. Li, A. Fukumi, Y. Hayashi, S. Orimo, M. Nishiuchi, S.V. Bulanov, T. Tajima, A. Noda, Y. Iwashita, T. Shirai, T. Takeuchi, S. Nakamura, A. Yamazaki, M. Ikegami, T. Mihara, A. Morita, M. Ueshaka, K. Yoshii, T, Watanabe, K. Kinoshita, T. Hosokai, Z. Zhidokov, A. Ogata, Y. Wada, and T. Kubota, Energetic Protons from a Few Micron Metallic Foil Evaporated by Intense Laser Pulse, Phys. Rev. Lett., vol.91(2003)215001.

[2] T. Utsumi, K. Matsukado, H. Daido, T. Zh. Esirkepov, and S. Bulanov, Numerical Simulation of Melting and Evaporation of the Cold Foil Target Irradiated by the Pre-pulse, The 7 th International Conference on Laser

Ablation, COLA03, Oct. 5, 2003, Crete, Greece.

[3] T. Utsumi, K. Matsukado, H. Daido, T. Zh. Esirkepov, S. V. Bulanov, Numerical Simulation of Melting and Evaporation of the Cold Foil Target Irradiated by the Pre-pulse, Applied Phys. A79(2004)1185.

[4] A. Sagisaka, H. Daido, K. Ogura, S. Orimo, Y. Hayashi, M. Nishiuchi, M. Mori, K. Matsukado, A. Fukumi, Z. Li, S. Nakamura, K. Takagaki, H. Hazama, T. Utsumi, S. Bulanov, and T. Esirkepov, Characterization of preformed plasmas for ultra-short high-intensity laser-plasma interactions, Applications of High Field and Short Wavelength Sources X (HFSW X), Oct. 12 - 15, 2003,Biarritz, France.

[5] A. Sagisaka, H. Daido, K. Ogura, S. Orimo, Y. Hayashi, M. Nishiuchi, M. Mori, K. Matsukado, A. Fukumi, Z. Li, S. Nakamura, K. Takagaki, H. Hazama, T. Utsumi, S. Bulanov, and T. Esirkepov, Characterization of preformed plasmas for ultra-short high-intensity laser-plasma interactions, Applied Phys. B78(2004)919.

[6] H. Daido, S. Orimo, Y. Hayashi, A. Sagisaka, K. Ogura, M. Nishiuchi, E. Yanase, T. Zh. Esirkepov, S. Bulanov, T. Utsumi, K. Yamakawa, T. Kimura, K. Matsukado, A. Fukumi, and Z. Li, Strong-Fileld Science and Thechnology at Advanced Photon Research Center, JAERI, CLEO/Pacific Rim2003, July 22, 2003, Taipei, Taiwan.

[7] A. Fukumi, H. Daido, K. Matsukado, Z. Li, Y. Hayashi, S. Orimo, M. Nishiuchi, A. Sagisaka, K. Ogura, M. Mori, K. Takagaki, T. Tajima, T. Utsumi, S. Bulanov, T. Esirkepov, M. Uesaka, K. Yoshii, T. Watanabe, T. Hosokai, K. Kinoshita, A. Zhidkov, A. Noda, Y. Iwashita, T. Shirai, T. Takeuchi, S. Nakamura, A. Yamazaki,M. Ikegami, T. Mihara, A. Ogata, Y. Wada, T. Kubota, A. Morita, Development of laser-driven ion source for compact cancer therapy accelerator Joint 6th ICFA Advanced & Novel Accelerators and 29th ICFA Advanced Beam Dynamics Workshop on Laser-Beam Interactions, July 7th -11th 2003, St Catherine's College, Oxford, England.

[8] Noboru Hasegawa, Tetsuya Kawachi, Takayuki Utsumi, Akira Sasaki, Momoko Tanaka, Masataka Kado, Kouta Sukegawa, Lu Peixiang, Maki Kishimoto, Tai Renzhong, Keisuke Nagashima, Masato Koike, Hiroyuki Daido, and Yoshiaki Kato, High Precision Measurement of the wavelength of a Nickel-like Silver X-ray laser, Jpn. J. Appl. Phys., 43(5A)(2004)2519-2522.

[9] T. Utsumi, T.Yabe, J. Koga, T. Aoki, M. Sekine, Accurate basis set by the CIP method for the solutions of the Schr¥"odinger equation Comput. Phys.

Commun., Vol 157/2 pp 121-138(2004)

[10] T. Utsumi, T.Yabe, J. Koga, T. Aoki, M. Sekine, Y. Ogata, E. Matsunaga, A Note on the Basis Set Approach in the Constrained Interpolation Profile Method, J. Comput. Phys., vol.196(2004)1-7.

[11] K. Yamakawa, Y. Akahane, Y. Fukuda, M. Aoyama, N. Inoue, H. Ueda, T. Utsumi, Many-electron dynamics of a Xe atom in strong and super-strong laser fields, Phys. Rev. Lett., vol.92(2004)123001.

[12] 内海隆行、矢部孝、ジェームス甲賀、青木尊之、関根優年、CIP 法の基底関数、第 16 回計算力学講演会、2003,11.

[13] 内海隆行、ジェームス甲賀、関根優年、高強度レーザー場中の高次高調波発生シミュレーション、第 5 回光量子科学研究シンポジューム、2003.11.

[14] 内海隆行、新計算手法、CIP 基底関数法、NEXT 研究会、2004.3.

[15] 矢部孝、内海隆行、尾形陽一、「ＣＩＰ法」原子から宇宙までを解くマルチ・スケール解法、2003.11 森北出版

**４．今後の利用予定：**

連続体モデルについては、より詳細な吸収過程を取り込むためにメッシュ数を増やした大規模シミュレーションを実施する。また、原子・分子の量子過程計算では波動関数の展開基底数を増やした大規模シミュレーションを実施する。

4.12　炉心プラズマ研究部

# 4.12.1　イオン勾配駆動不安定性により駆動されるイオン系乱流による異常イオン熱輸送現象の評価

プラズマ理論研究室
井戸村　泰宏

**1．利用の概要（要約）:**

本研究ではプラズマ理論研究室で推進している数値トカマク実験(NEXT)計画の一環として、トカマクプラズマの微視的不安定性・乱流現象を記述するジャイロ運動論的モデルに基づく第一原理シミュレーションの開発を進めている。コードは粒子法を採用しており、スカラー型超並列計算機に対して最適化されている。典型的なシミュレーションはOrigin3800システム上で256CPU あるいは512CPU を用いて1 ショット約１週間〜1 ヶ月と非常に大規模な計算になっている。本年度はコード開発における計算結果の収束性の確認、様々な磁場配位におけるシミュレーション結果の比較のために、このような大規模計算を複数ショット実行した。

２．利用の内容・結果：

本年度はジャイロ運動論的グローバルトロイダル粒子コードGT3D の開発およびそれを用いた微視的不安定性の解析、プラズマ乱流シミュレーションを通して以下の結果を得た。

上記開発において精度の向上を図る手法として最適化粒子配分法、準バルーニング展開を実装し、粒子・エネルギー保存を満たすイオン系乱流シミュレーションを実現した(図1)。

イオン系乱流シミュレーションにおける非線形飽和状態を決定する上で重要なEr×Bシア流(径電場Er)の応答を正しく再現するために、正準マックスウェル分布に基づく新たな計算手法を開発した。(図2)

コードをOrigin3800 システムに対して最適化した結果、512CPU まで非常に良いスケーラビリティで約40%という高い実効性能を維持できた。(図3)

プリンストン大学、カリフォルニア大学アーバイン校と共同ベンチマーク計画を実施し、開発したコードの妥当性を検証した。(図4)

正磁気シアトカマクと反転磁気シアトカマクにおいてイオン系乱流を駆動するイオン温度勾配駆動不安定性の特性の違いを明らかにした。(図5)

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

1). Y. Idomura, M. Adachi, K. Gorai, Y. Suzuki, and X. Wang, “Development of large scale fusion

plasma simulation and Storage Grid on JAERI Origin3800 system", J. Plasma Fusion Res. 79, 172-187 (2003).

2). Y. Idomura, S. Tokuda, and Y. Kishimoto, "Global gyrokinetic simulation of ion temperature gradient driven turbulence in plasmas with canonical Maxwellian distribution", Nucl. Fusion 43, 234-243 (2003).

3). G. Rewoldt, Z. Lin, and Y. Idomura, "Linear comparisons of GTC, GT3D, and FULL with trapped electrons" 45th APS Annual Meeting of the Division of Plasma Physics, October 27-31 Albuquerque, New Mexico (poster).

4). Y. Idomura, S. Tokuda, and Y. Kishimoto, "Global gyrokinetic simulation of ion temperature gradient driven turbulence in plasmas with canonical Maxwellian distribution" 18th International Conference on Numerical Simulation of Plasmas, 7-10 September 2003, Cape Cod, Massachusetts (oral).

5). Y. Idomura, S. Tokuda, and Y. Kishimoto, "Gyrokinetic simulations of tokamak micro-turbulence including kinetic electron effects" 13th International Toki Conference, 9-12 December 2003, Toki, Japan (invited).

6). 井戸村泰宏, "ジャイロ運動論的トロイダル粒子コードによるトカマク中の微視的不安定性のシミュレーション", 第7 回シミュレーション・サイエンス・シンポジウム, 招待講演, 2003 年10 月17 日, 土岐

7). 井戸村泰宏, 徳田伸二, 岸本泰明, "捕捉電子モード及びトロイダル電子温度勾配駆動モードのジャイロ運動論的解析", プラズマ・核融合学会第20 回年会、2003 年11 月26 日、水戸

## 4. 今後の利用予定：

平成16 年度はイオン系乱流に対して開発したジャイロ運動論的グローバルトロイダル粒子コードGT3D をより微視的な電子温度勾配駆動不安定性により駆動される電子系乱流シミュレーションに向けてモデルの拡張をおこない、Origin3800 上で主に電子系乱流シミュレーションを実施する予定。

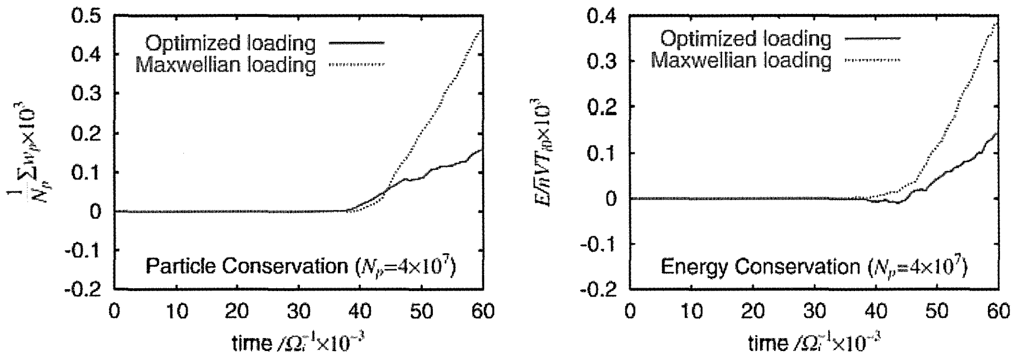



図1:最適化粒子配分法と従来のマックスウェル分布による粒子配分法における粒子保存特性(左図)、エネルギー保存特性(右図)の比較。

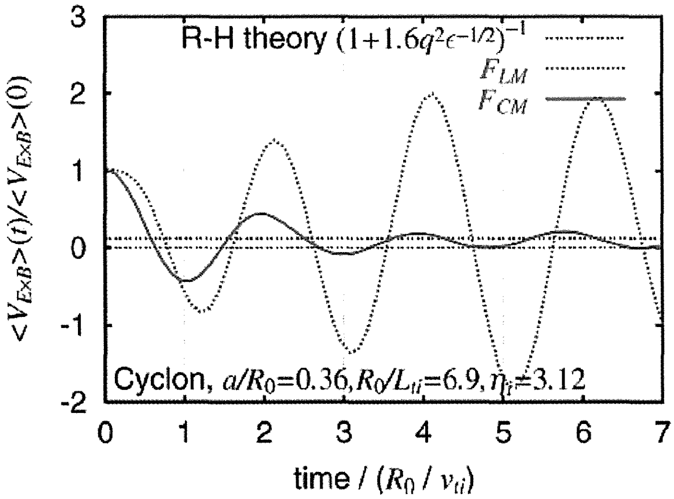



図2:E×B シア流の減衰テスト。局所マックスウェル分布FLM に基づく従来の手法ではE×B シア流は減衰しないが、正準マックスウェル分布FCM に基づく新たな手法では、E×Bシア流は減衰し理論値(R-H theory)に近づいてゆく。

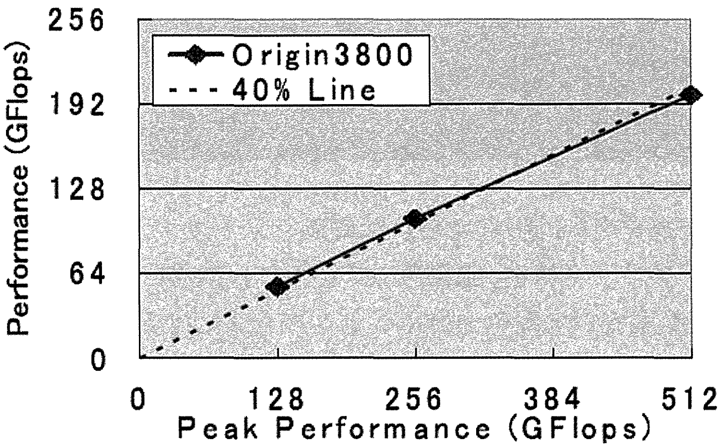



図3：Origin3800 システムにおけるGT3D コードの実効性能評価。

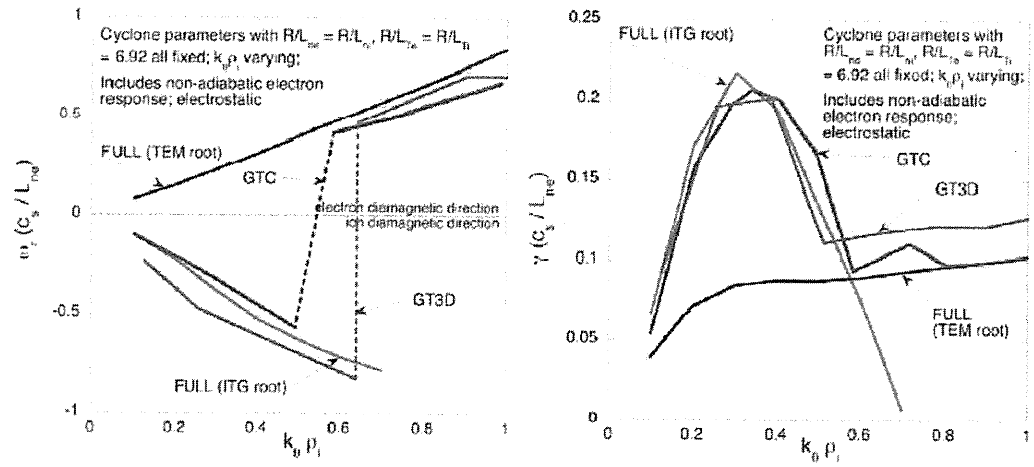



図4:GT3D(原研)、FULL(プリンストン大学)、GTC(カリフォルニア大学アーバイン校)のイオン温度勾配駆動－捕捉電子モード不安定性のベンチマーク計算結果。周波数スペクトル(左図)、成長率スペクトル(右図)共によく一致している。

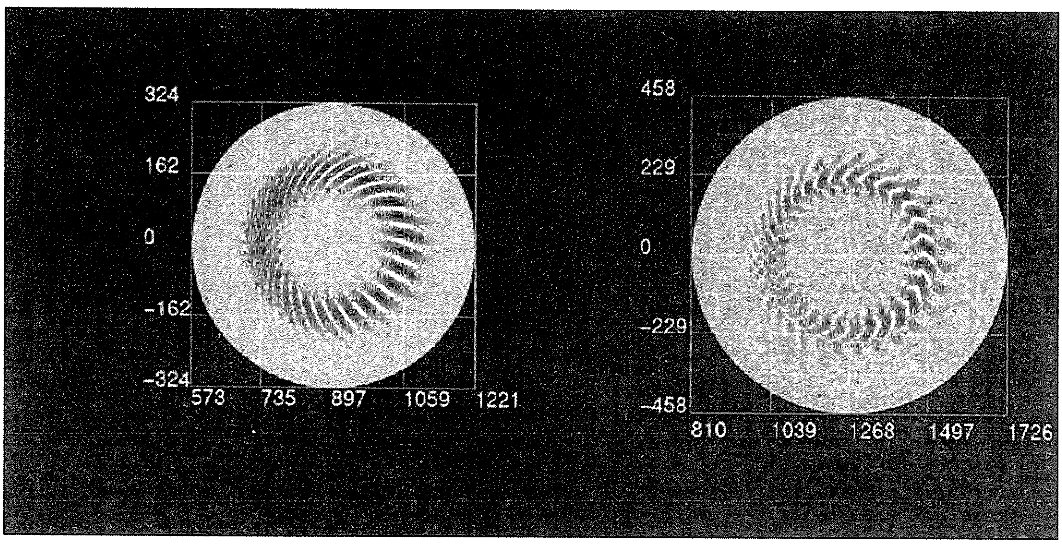



図5:正磁気シアトカマク(左図)および反転磁気シアトカマク(右図)におけるイオン温度勾配駆動モードのモード構造。正磁気シア配位では典型的なバルーニング構造が見られるのに対し、反転磁気シア配位ではポロイダル方向に対称なスラブモード的な性質を示す。

## 4.12.2 プラズマの閉じ込め性能を左右する乱流輸送現象の流体モデルに基づく大規模シミュレーション

プラズマ理論研究室
J.Q. Li

### 1．利用の概要（要約）：

トカマク装置の閉じ込めを左右するイオン系及び電子系の圧力勾配に起因する乱流構造を同定するとともに、それらの乱流に起因する輸送過程を評価する電磁効果（磁場の揺動）を考慮したジャイロ流体モデルに基づくコードによるシミュレーションを実施した。特に平成１５年度は、ミクロスケールの電子系の輸送を支配する電子温度勾配モードに起因する乱流シミューションをベクトル型計算機 VPP5000 の 8-32 並列 JOB クラス（１パラメータの CPU 時間 10-20 時間）を用いて相当数実施した。これにより揺らぎの乱流成分と層流成分の割合等、乱流輸送制御実現に向けた重要な物理機構を明らかにした。

### 2．利用の内容・結果：

電磁的なジャイロ流体モデルに基づくシミュレーションにより、トカマクプラズマの電子系の乱流構造と輸送ダイナミックスに関して、特に輸送制御の観点から幾つかの重要な知見を見出した。主要な成果は以下の通り。

１） 電子系の輸送に重要な役割を果たしていると考えられている電子温度勾配モードのシミュレーションを行い、輸送レベルに対して本質的影響を与える対流渦の発生と磁場構造の関係を明らかにした。特に、磁気シアの弱いプラズマに対しては輸送を抑制する帯状流が、また磁気シアの強いプラズマに対しては輸送を増徴させるストリーマが発生することを示し、磁場構造による電子系乱流輸送の制御の可能性を示した。（図１参照）

２） 電磁効果を取り入れたジャイロ流体モデルに基づくシミュレーションを行い、乱流輸送に重要な影響を及ぼす帯状流に対する電磁効果の影響を明らかにした。これまで電子温度勾配モードに基づく乱流輸送研究では、大河スケーリングに従って電磁効果（プラズマのベータ値）は輸送を抑制することが知られていたが、帯状流に支配されるプラズマでは電磁効果は帯状流の発生を抑制するため、大河スケーリングと逆の依存性を示し、輸送は増大することを明らかにした。

３） トカマクのトロイダル効果を取り入れたジャイロ流体コードの開発を行い、このコードによる電子温度勾配モード乱流のシミュレーションを行った。トカマク中に発生する揺らぎはトロイダル形状効果によって領域に依存して様々な構造とダイナミックスを示すことが分かった。不安定性の強いトカマクの外側領域に

おいては等方乱流となる一方、不安定性の比較的弱いトカマクの内側領域においてはストリーマ的な乱流が発生することがわかり、現在これらの現象を説明する理論研究が進められている。

### 3. 利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

[1 ] J. Li and Y. Kishimoto, "Pattern selection in electron temperature gradient driven turbulence", submitted to Phys. Lev. Lett.(2004)

[2] J. Li and Y. Kishimoto, "Numerical study of zonal flow dynamics and electron transport in electron Temperature gradient driven turbulence", Physics of Plasmas 11, 1493 (2004),

[3] J. Li, Y. Kishimoto, Y. Idomura, N. Miyato, and T. Matsumoto, "Saturation of zonal flow in gyro-fluid simulations of electron temperature gradient turbulence", Journal of Plasma and Fusion Research SERIES, Vol.6, in press (2004)

[4] J. Li and Y. Kishimoto, "Stabilization of ion temperature gradient mode by small-scale zonal flows", Physics of Plasmas 10, No.4 (2003), in printing (2003).

[5] Y. Kishimoto, Y. Idomura, and J.Q.Li, "Prospect for multiple time and spatial scale simulaton research in magnetic fusion plasma", Journal of Plasma and Fusion Research Vol.79, 478 (2003)

会議報告

[1] J. Li, Y. Kishimoto, N. Miyato, and T. Matsumoto, "Dynamics of large scale structure and electron transport in tokamak micro-turbulence simulation", 20th IAEA Fusion Energy Conference, IAEA-CN-(2004) (oral presentation).

[2] J. Li, Y. Kishimoto, N. Miyato, and T. Matsumoto, "Role of magnetic shear in Dynamics of large scale structure in electron temperature gradient turbulence", 45th annual meeting of the division of plasma physics of the American Physics Society (APS), Albuquerque, November, 2004 (Poster).

[3] J. Li, Y. Kishimoto, N. Miyato, and T. Matsumoto, "Formation of large scale structure in electron temperature gradient turbulence -zonal flow or streamer-", 31th European Physics Society (EPS) conference on Plasma Physics, UK, June 28-July 2 (200) (Poster).

[4] J. Li, "Numerical simulation and theoretical study on plasma micro-turbulence and transport", 5th Japan-China Workshop on physics and control toward the burning plasma, Naka JAERI, Feb. 2-4 (2004)

## 4．今後の利用予定：

本研究は J.Q.Li 博士が原研フェローシップとして滞在中実施してきたものであ。同博士のフェローシップは平成１６年９月において終了するが、本研究は2004年11月開催の IAEA 主催核融合エネルギー会議における理論・シミュレーション分野の口頭発表に作用されていることから、引き続き NEXT プロジェクトの主要課題の一つとして今原研スタッフと協力してシミュレーション研究を継続する。

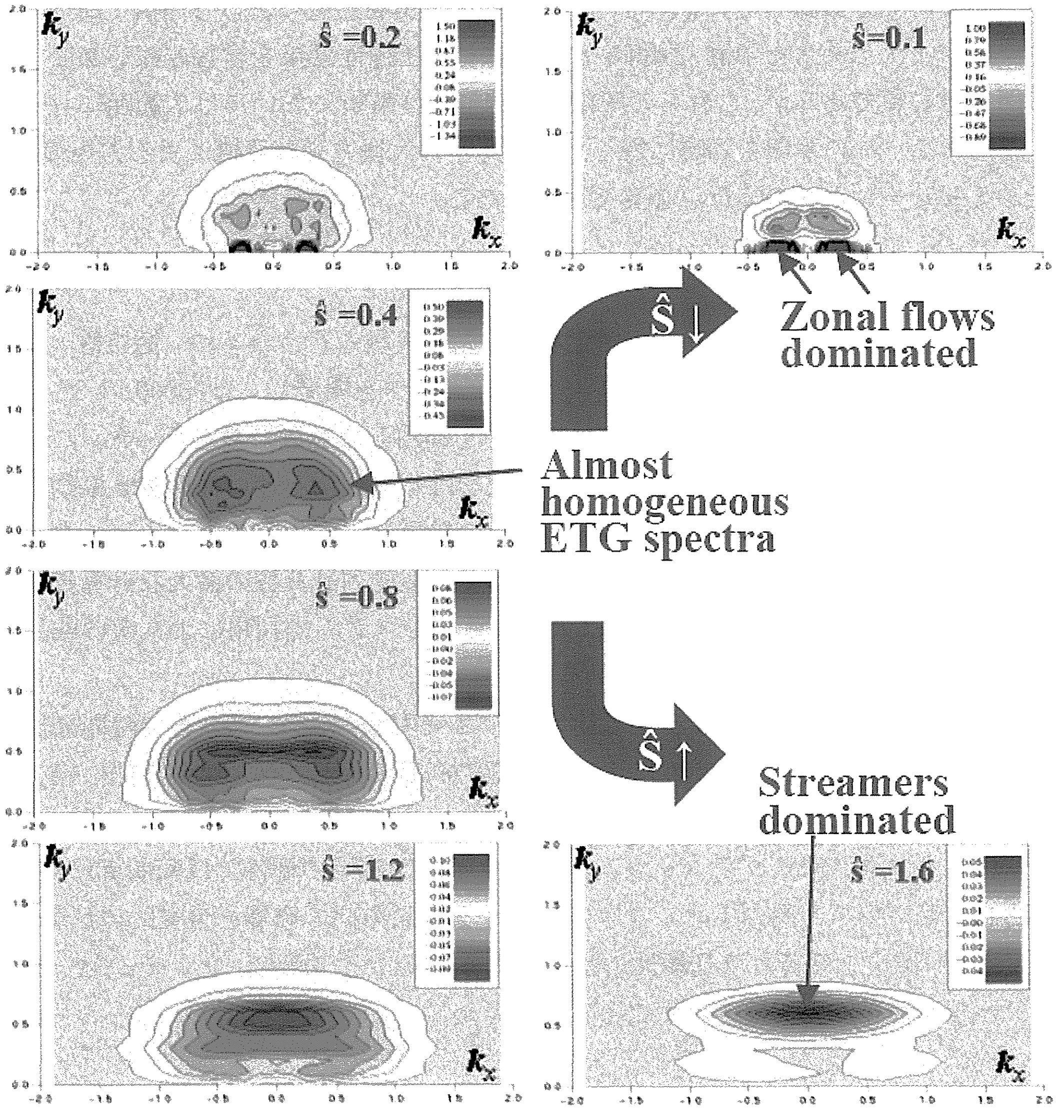



図１．電子温度勾配乱流の２次元波数空間スペクトルの磁気シア依存性。弱い磁気シアにおいては帯状流が形成される。

## 4.12.3　核融合炉心プラズマの圧縮性磁気流体現象に関する3次元シミュレーション

プラズマ理論研究室
影井　康弘

### 1. 利用の概要（要約）:

数値トカマク（NEXT）研究グループでは、トカマク型核融合炉心プラズマの磁気流体（MHD）ダイナミクスの解明と制御手法の確立を目指した数値シミュレーションコードの開発研究を実施している。特に、将来の大型実験装置における高温・高性能プラズマのダイナミクスを予測・制御するためには、圧縮性効果を含む非線形 MHD コードの開発が必須であるが、これらの圧縮性非線形 MHD 解析においては広範囲に亘る時間・空間スケールの事象を同時に解く必要があり、大型並列計算機による大規模な 3 次元シミュレーションの実行が必要不可欠である。

### 2. 利用の内容・結果:

高温・高性能プラズマの MHD 不安定化現象の数値実験を行うために、抵抗性・圧縮性の MHD 方程式を解く 3 次元シミュレーションコードを開発し、VPP5000 の 32 プロセッサ、及び Origin3800 の 64,128 プロセッサを利用した並列計算を行った。これらの数値実験においては、圧縮性アルフヴェン波をはじめとする速い線形 MHD 振動に対して高い分解能を保持しつつ、それら線形現象の発展として生じるグローバルな非線形現象を再現せねばならず、計算の実行に際して大型並列計算機の多大な計算資源の利用が必然的に求められる。15 年度は大型計算機システムの利用により次の成果が得られた。

- 内部に高温・高圧プラズマを閉じ込めたトカマク配位について、その時間発展を計算し、抵抗性 MHD 不安定性によって内部の高温・高圧プラズマが外部に掃きだされて閉じ込めが崩壊する過程のダイナミクスを明らかにした（図 1）。
- 球状トカマク（ST）プラズマが、真空トロイダル磁場の極性の反転制御に伴い、閉じ込めプラズマ内のトロイダル・ポロイダル両方向の磁場を自発的に反転し、反転 ST 配位と呼ばれる逆極性の配位へ遷移すること（図 2）をシミュレーションとして世界に先駆けて示すことに成功した。

### 3. 利用の成果（学会、プレス発表、論文等）:

1). Y. Kagei, et al., “MHD simulation of relaxation to a flipped ST configuration”, Plasma Phys. Control. Fusion 45, L17-L22 (2003).
2). 影井、他, “低アスペクト比プラズマの磁場極性反転に伴う緩和構造の解析”, プ

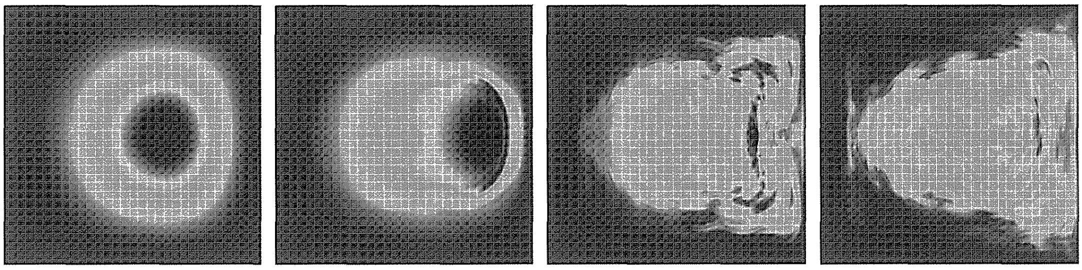
ラズマ・核融合学会第20回年会予稿集 28pB05, 271, 水戸, (2003).

3). Y. Kagei, et al., "MHD Relaxation to the flipped state in low aspect ratio toroidal plasmas", 13th International Toki Conference on Plasma Physics and Controlled Nuclear Fusion PII-37, 99, Toki, Japan, (2003).

4). Y. Kagei, et al., "Self-organization into the flipped state in helicity-driven spherical tokamak plasmas", 5th Japan-China workshop on physics and control toward the burning plasma, Naka, Japan, (2004).

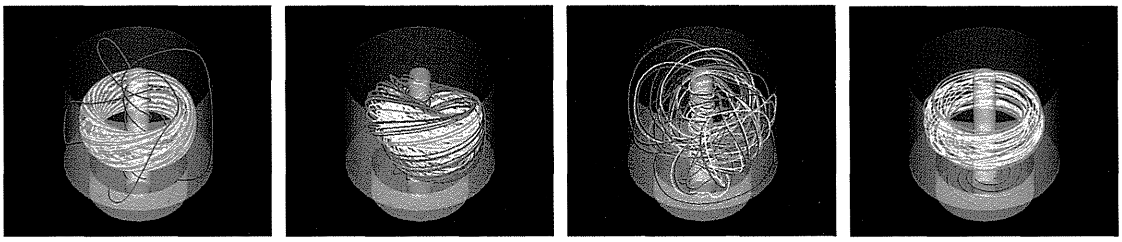
## 4. 今後の利用予定：

次期導入予定の並列計算機を用い、より高温の現実的な条件下のプラズマに対するMHD不安定化現象のシミュレーションを継続して実施する予定である。



(a) $t=0$　(b) $t=1600$　(c) $t=1700$　(d) $t=1800$

図1　磁気流体（MHD）不安定性による閉じ込め配位崩壊の例



(a) $t=0$　(b) $t=117$　(c) $t=222$　(d) $t=820$

図2　通常型の球状トカマク（ST）配位から反転球状トカマク（反転ST）配位への自発的遷移の例

## 4.12.4 プラズマ生成・緩和過程を取り入れた電磁粒子モデルに基づく拡張型粒子コード(EPIC3D)を用いたシミュレーション

プラズマ理論研究室
岸本　泰明

**1．利用の概要（要約）**：

原子過程に代表されるプラズマ生成過程を自己無撞着に取り入れた粒子手法に基づく拡張型粒子コード（EPIC3D：３Dimensional Extend PIC code）を用いて、(1) ネオンやアルゴン等の希ガス媒質における放電・雷過程のシミュレーション、及び(2) 高強度レーザーとクラスター媒質との相互作用のシミュレーションを実施した。この“EPIC3D”は、電磁場や電子衝突による電離過程や粒子間の相対論的衝突緩和過程を任意価数のイオンに対して計算することから大きな計算機資源を必要とする。またこれらの過程はモンテカルロ法によってモデル化されていることからスカラー型計算機 Origin3800（１パラメータの CPU は 50 時間程度）を主に利用した。

**2．利用の内容・結果**：

本研究では、完全電離を過程して取り扱いでは再現されない原子・緩和過程に関わる基礎的な物理過程を明らかにすることを目的に EPIC3D によるシミュレーションを行い、これまで解明されていない様々な新しい物理的知見が明らかとなった。主要な成果は以下の通り。

1) 原研・光量子科学センター(JAERI-APR)において実施されている集光強度 $10^{17} \sim 10^{18}\ \mathrm{W/cm^2}$ の極短パルスレーザー（パルス幅 20-500fsec）と Xe 及び Ar クラスターとの相互作用実験に即したシミュレーションを行った。これにより実験結果をほぼ再現することに成功するとともに、複雑なエネルギーの吸収過程やクラスターの膨張過程を支配する物理機構を明らかにした。(図１参照)

2) 近年、球状トカマクを中心に核融合プラズマの初期プラズマ着火過程や地球大気や電離層で観測される放電・雷（Lightning）現象が注目を集めている。本研究では EPIC3D を用いて、高圧ネオン(Ne:Z=10)ガス中での放電シミュレーションを行い、放電に関わる複雑なプラズマのダイナミックスを再現することに成功した。これにより放電に関わる突発的特性や雪崩的電離現象、あるいはプラズマ着火過程におけるフラクタル的な構造形成現象を見出すとともに、それらの背後にある物理機構を明らかにした。(図２参照)

## ３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

[1] Y. Fukuda, Y. Kishimoto, T. Masaki, et al., submitted to Phys. Rev. A (2004)

[2] Y. Fukuda, K. Yamakawa, Y. Akahane, M. Aoyama, N. Inoue, H. Ueda, and Y. Kishimoto, "Optimized energetic particle emissions from Xe clusters in intense laser fields", Phys. Rev. **A** 67, 061201(R) (2003)

[3] Y. Kishimoto, *Control of Molecules in Intense Laser Fields*, Scientific Research on Priority Area (2003), **科学研究費補助金　特定領域研究　平成15年度報告書**

[4] Y. Kishimoto, *Resarch on Structure Formation of Plasmas Dominated by Multiple Hierarchical Dynamics*, Annual Report of the Earth Simulator Centor, April 2003-March 2004, p199 (2004)

会議報告

[1] Y. Fukuda、K. Yamakawa, Y. Akahane, M. Aoyama, N. Inoue, H. Ueda, and Y. Kishimoto, "Generation of energetic ions and x rays from clusters irradiated by ultrafast high-intensity laser pulses", ULTRASHORT HIGH-ENERGY RADIATION AND MATTER, Varenna, Italy, October 7 -10, 200

## ４．今後の利用予定：

平成１６年度は那珂研究所の NEXT 研究及び関西研究所の光量子シミュレーション研究との協力研究のもとで、Origin3800 及び ES40 等を用いて引き続き大規模シミュレーション研究を継続する。

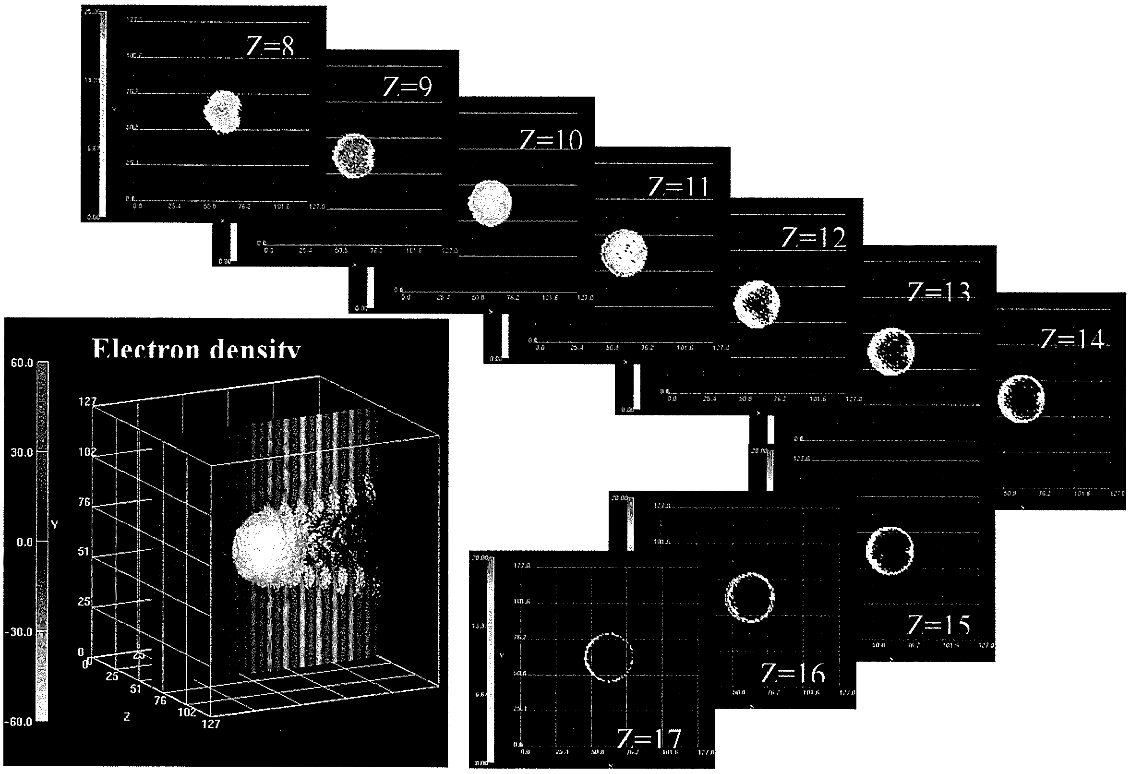



図１. アルゴンクラスターに照射された高強度レーザーによる相互作用ダイナミックス。高強度レーザーによるクラスターの電離度合いの空間分布を表す。

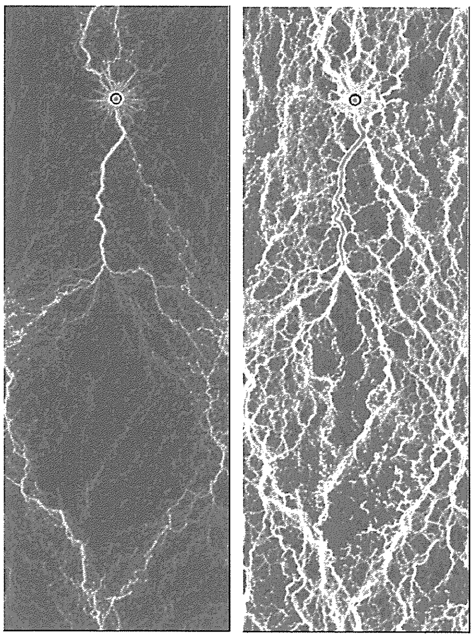


図１. EPIC3D シミュレーションで再現した高圧ネオンガスの放電過程

## 4.12.5 プラズマ中の乱流輸送現象の3次元電磁流体シミュレーション

プラズマ理論研究室
宮戸　直亮

**1．利用の概要（要約）：**

高効率の核融合発電を実現するためには、核融合プラズマ内の圧力勾配に起因する乱流による熱・粒子の輸送を抑制することが不可欠である。近年の実験において、乱流輸送の減少（輸送障壁の形成）が観測されているが、そのメカニズムは明らかではない。輸送障壁形成のメカニズムの解明と乱流輸送の制御法の確立を目指し、３次元電磁ランダウ流体コードを用いた乱流シミュレーションを行っている。核融合プラズマ内の電磁乱流から形成される帯状のプラズマ流（帯状流）が乱流輸送の抑制の鍵となるが、その振る舞いはグローバルな磁場構造の影響によって変わるため、プラズマ全体を計算する必要があり、大型計算機の利用が必須である。

**2．利用の内容・結果：**

トカマクプラズマ内のプラズマ密度揺動、静電ポテンシャル揺動、磁場揺動、磁力線方向のイオン流速、イオン温度の時間発展をグローバルに解くコードを開発し、ベクトル並列計算機VPP-5000において32プロセッサを用いたトカマクプラズマ中のグローバルな電磁乱流シミュレーションを行った。トカマクの装置サイズから微視的なイオンの回転半径のサイズまでのプラズマの非線形ダイナミクスの計算には大型計算機の利用は不可欠であった。平成１５年度の成果は以下のようなものである。

- 核融合プラズマ中でイオンの熱輸送を引き起こしていると考えられるイオン温度勾配（ＩＴＧ）駆動乱流シミュレーションを行い、安全係数（磁力線の巻き方の強さをあらわすパラメータ）の空間的な変化によって、ＩＴＧ乱流から生成される帯状流の振る舞いが変化する様子を捉えることが出来た（図１）。図１の周辺領域に現れている振動帯状流は、近年、実験計測においても注目されている。
- 最近、振動帯状流と乱流との間のエネルギーの流れの向きについての議論があるが、図２に示されているようなＩＴＧ乱流－振動帯状流間のエネルギーの流れを同定した。

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

1) 宮戸直亮，岸本泰明
　”ランダウ流体モデルを用いたトカマクプラズマのグローバル電磁乱流シミュ

レーションˮ
日本物理学会, 岡山大学, 2003 年 9 月 20 日－23 日

2) N. Miyato, J. Li and Y. Kishimoto,
"Global Simulation of Electromagnetic Microturbulence Based on Reduced Landau Fluid Model",
45th Annual Meeting of the Division of Plasma Physics of the American Physical Society,
Albuquerque USA (October 27-31, 2003).

3) 宮戸直亮，李継全，岸本泰明
ˮランダウ流体モデルを用いたトカマクプラズマの電磁的微視的不安定性の非線形シミュレーションˮ
プラズマ・核融合学会, 茨城県立県民文化センター(水戸), 2003 年 11 月 25 日－28 日

4) N. Miyato, J. Li and Y. Kishimoto,
"Electromagnetic Effect on Turbulent Transport in Tokamak Based on Landau Fluid Global Simulation",
13th International Toki Conference on Plasma Physics and Controlled Nuclear Fusion,
Toki Japan (December 9-12, 2003).

5) N. Miyato, J. Li and Y. Kishimoto
"Electromagnetic Effect on Turbulent Transport in Tokamak Based on Landau Fluid Global Simulation",
Journal of Plasma and Fusion Research SERIES Vol. 6 に掲載予定

**４．今後の利用予定：**

平成１５年度に行った計算は、磁場の圧力に対するプラズマ圧力の比（ベータ値）が小さな場合であった。今後はこのベータ値を大きくした場合の計算をする予定である。ベータ値を大きくするとより細かな時間ステップが必要となり、より計算量が増えることが予想される。

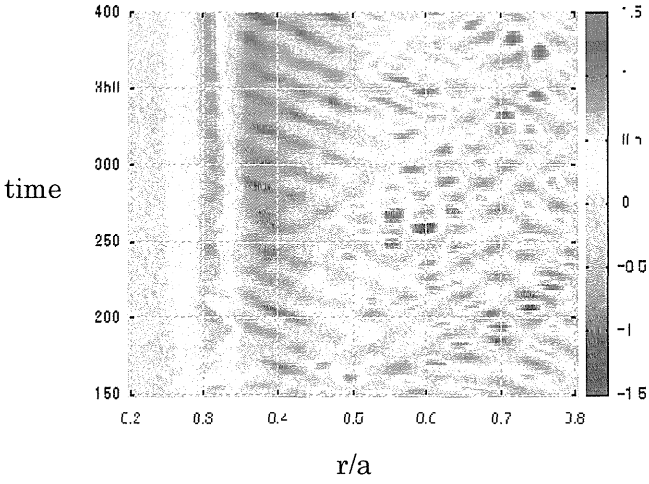



図１　帯状流の時間空間変化
安全係数の小さい内側領域では帯状流の方向は変化せず静的である一方、安全係数の大きな周辺領域では帯状流は振動している。

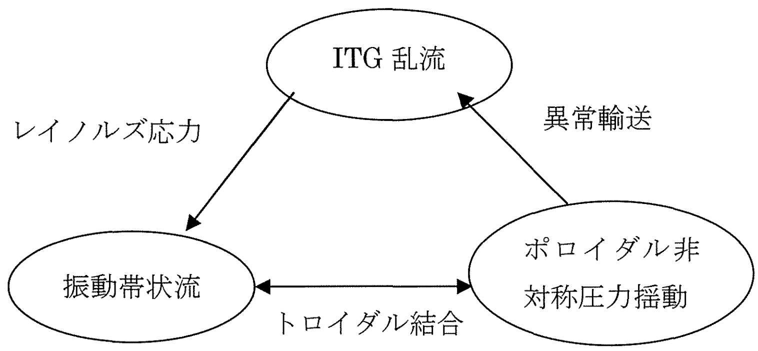



図２　振動帯状流とＩＴＧ乱流間のエネルギーの流れ

# 4.12.6 トカマクプラズマ中の乱流輸送に関する流体シミュレーション

プラズマ理論研究室
松本　太郎

## 1．利用の概要（要約）：

炉心プラズマ研究部で推進している数値トカマク実験(NEXT)計画では、プラズマの振舞いを規定している基礎方程式にできるだけ忠実に従うことにより、プラズマ中で展開している複雑現象を計算機上に再現し、物理的解明を図ることを目的としている。本研究では、トカマクプラズマの電子温度勾配(ETG)により駆動される微視的な揺らぎのジャイロ流体シミュレーションを行い、トカマクの輸送・閉じ込めを支配する乱流状態の統計量と乱流構造との関係を明らかにすることを目的としている。

## 2．利用の内容・結果：

三次元スラブシアー配位における非線形乱流を計算できるジャイロ流体コード(GFS)を、磁場の空間変化(磁気シア)や温度の空間変化(温度勾配)等が異なる条件に対して実行し、ETG モードを始めとする電子系のダイナミクスによって形成される乱流のシミュレーションを行った。また、乱流プラズマの新たな解析手法として、プラズマが包含する自由度及び揺動の間歇性が着目されているため、それらを同定するためのフラクタル次元及び確率密度関数を解析するコードを開発し、GFS の結果に適用した。これらの計算には、大型ベクトル及び並列計算機が不可欠であり、平成１５年度は VPP5000 を用いて以下のような結果を得る事ができた。

強い電子加熱等により電子温度勾配が急峻になると、微視的な不安定性が駆動され、「異常輸送」と呼ばれる大きな乱流輸送を引き起こすと考えられている。このような電子系乱流の空間構造及び輸送は磁気シアや温度勾配に大きく依存する。図１は静電ポテンシャルの等高線を示したものであるが、磁気シアが小さいまたは温度勾配が小さい場合は、生成及び消滅を繰り返す等方的な渦乱流(左)が生じる。一方で、磁気シアが小さく温度勾配が大きいプラズマにおいては、プラズマ自身が自由エネルギーを非等方的な流れに転換し、帯状流(右)を作り出すために、乱流輸送が大きく減少する。

揺動の時系列データに対して、自由度の定量的な同定手法であるフラクタル次元解析を適用すると、乱流状態の強い系は、９程度の高い次元により支配されていることが明らかとなる一方、帯状流が形成されて系に秩序性が出現すると、フラクタル次元は３程度まで減少することが確認された(図２)。また、確率密度関数(PDF)解析を適用すると、乱流状態の強い系では、熱流束の揺動がプラズマ外側に向けて、ガウス分布より逸脱したテール成分を持つことが明らかとなった(図３)。これは、大きな熱流

束が間歇的に生じていることを意味している。

これらの成果により、1地点計測で得られる揺動のフラクタル次元及びPDFが、帯状流及び間歇性等の巨視的な乱流構造を反映していると考えられるため、今後トカマク実験における乱流状態の新たな同定手法としての応用が期待される。

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）**：

1). T. Matsumoto, Y. Kishimoto and J. Li,
"Statistical Characteristics from Gyro-fluid Transport Simulation",
J. Plasma and Fusion Res. Series Vol. 6, (2004).

2). T. Matsumoto, Y. Kishimoto and J. Li,
"Statistical Characteristics from Gyro-fluid Transport Simulation",
13th International Toki Conference, Toki, Japan, 2003, P2-41.

3). 松本太郎、岸本泰明、李継全、
"ＥＴＧ乱流プラズマのフラクタル次元"、
プラズマ核融合学会第20回年会、水戸、11月26日(2003)

4). T. Matsumoto, Y. Kishimoto and J. Li,
"Statistical Characteristics from Gyro-fluid Transport Simulation"、
Workshop on "Plasma Turbulence and Anormalous Transport：Prospect for Fusion Plasmas"、Kyushu Univ.，Japan、Dec. 22, 2003.

**4．今後の利用予定**：

次期導入予定の並列計算機を用い、より大規模な体系における現実的な条件でのトカマク乱流輸送の流体シミュレーション及び電磁流体力学的不安定性の粒子シミュレーションを継続して実施する予定。

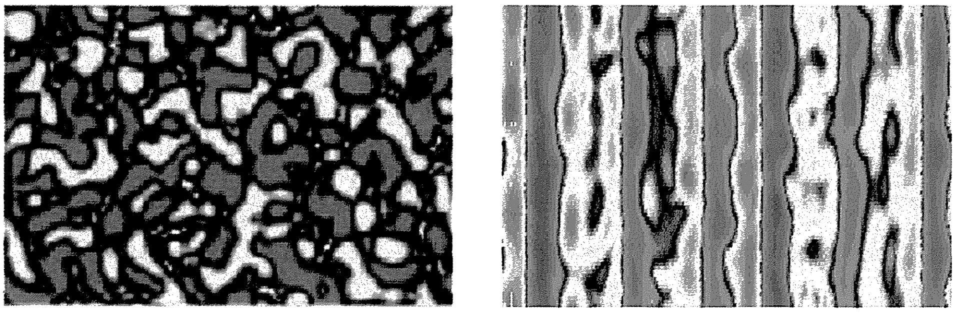


図 1. ポテンシャルの等高線。

磁場と温度の空間変化に依存して、乱流状態(左)と帯状流状態(右)が形成される

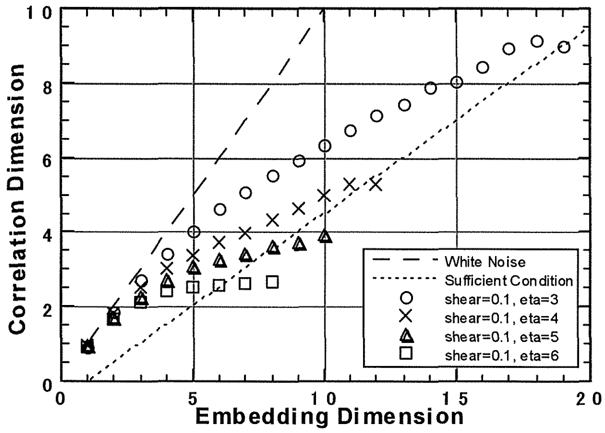



図 2. 異なる圧力勾配に対して得られたフラクタル次元。

乱流状態が強いと高い次元を示すが、帯状流の形成により秩序が生まれると低い次元となる。

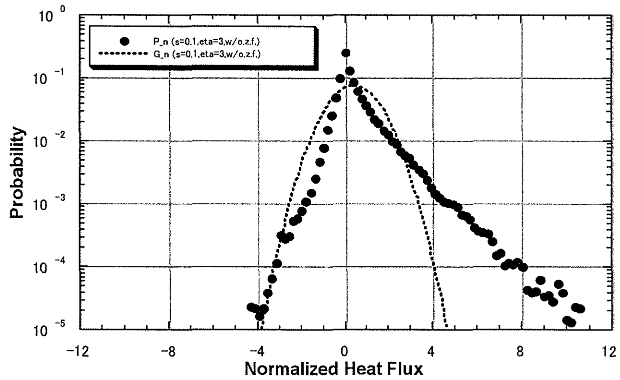



図 3. 熱流束の確率密度関数。

正の領域に広がるテール成分が高頻度大振幅の間歇的熱流束の存在を示している。

## 4.12.7 ジャイロ運動論的グローバルトロイダル粒子コードGT3Dに捕捉電子の運動論的応答効果を拡張する電子モデルの開発

プラズマ理論研究室
徳田　伸二

### 1．利用の概要（要約）：

本研究ではプラズマ理論研究室で推進している数値トカマク実験(NEXT)計画の下で開発を進めているジャイロ運動論的グローバルトロイダル粒子コードGT3D における運動論的電子モデルの開発を行う。現時点では、主に、開発モデルを検証するための線形計算が中心であるが、電子応答の時間スケールは非常に短いため線形計算であっても非常に大きい計算コストになる。この結果、1 ケースの周波数・成長率スペクトルを出すのにOrigin3800 システム上で256CPU を用いて4～5 日の計算時間が必要となる。本年度はコード開発における計算結果の収束性の確認、様々なパラメータに対する周波数・成長率スペクトルの依存性を調べるために、このような大規模計算を複数ショット実行した。

### 2．利用の内容・結果：

本年度はジャイロ運動論的グローバルトロイダル粒子コードGT3D の開発およびそれを用いた微視的不安定性の解析、プラズマ乱流シミュレーションを通して以下の結果を得た。

運動論的電子モデルとしてドリフト運動論的捕捉電子モデル、バウンス平均捕捉電子モデルの開発を行った(図1)。

これらのモデルを用いた捕捉電子モード不安定性の線形計算の結果、どちらのモデルでも同様の周波数・成長率スペクトルが得られ(図2)、かつ、バウンス平均捕捉電子モデルでは計算コストを大幅に削減できることを示した。

Pade 近似を用いて場の方程式を定式化することにより、非常に短波長領域で捕捉電子モード不安定性を再現することに成功した(図3)。

**３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

1). Y. Idomura, S. Tokuda, and Y. Kishimoto, "Global gyrokinetic simulation of ion temperature gradient driven turbulence in plasmas with canonical Maxwellian distribution", Nucl. Fusion 43, 234-243 (2003).

2). Y. Idomura, S. Tokuda, and Y. Kishimoto, "Global gyrokinetic simulation of ion temperature gradient driven turbulence in plasmas with canonical Maxwellian distribution" 18th International Conference on Numerical Simulation of Plasmas, 7-10 September 2003, Cape Cod, Massachusetts (oral).

3). Y. Idomura, S. Tokuda, and Y. Kishimoto, "Gyrokinetic simulations of tokamak micro-turbulence including kinetic electron effects" 13th International Toki Conference, 9-12 December 2003, Toki, Japan (invited).

4). 井戸村泰宏，徳田伸二，岸本泰明，"捕捉電子モード及びトロイダル電子温度勾配駆動モードのジャイロ運動論的解析"，プラズマ・核融合学会第20 回年会、2003 年11 月26 日、水戸

**４．今後の利用予定：**

平成16 年度は計算資源の制約内で可能であれば、捕捉電子駆動乱流の非線形シミュレーションを行い、トカマクプラズマにおける異常電子輸送を評価したい。

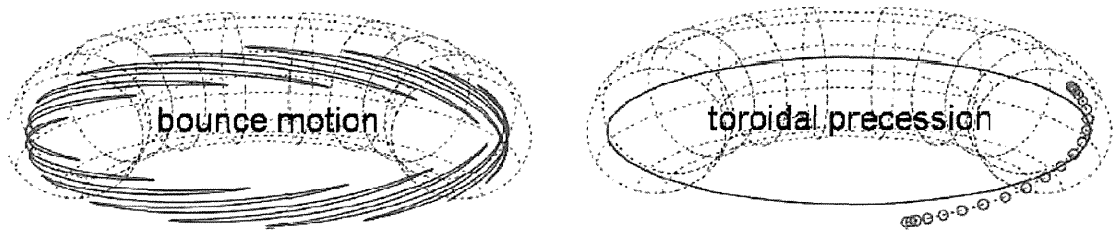



図1:ドリフト運動論的捕捉電子モデルとバウンス平均捕捉電子モデルの模式図。バウンス平均捕捉電子モデルでは高周波の捕捉電子バウンス運動が平均化されているので計算コストが格段に低くなる。

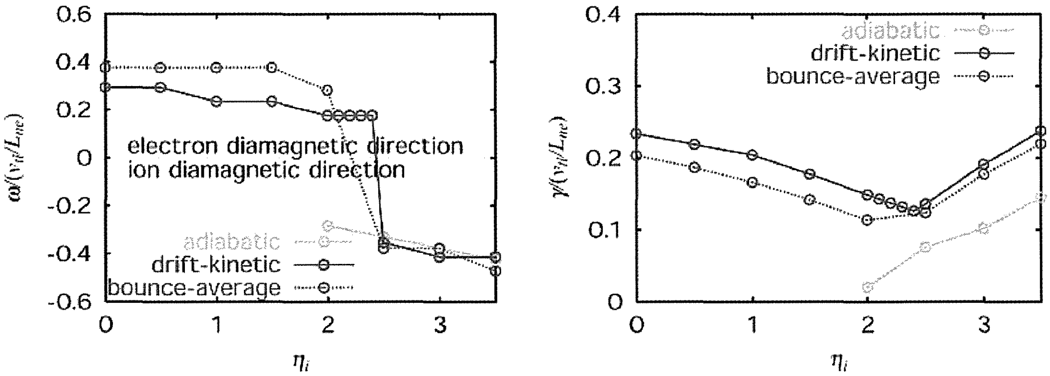



図2:イオン温度勾配駆動－捕捉電子モード不安定性の周波数(左図)、成長率(右図)の温度勾配パラメータηi 依存性。ドリフト運動論的捕捉電子モデル、バウンス平均捕捉電子モデル、どちらの結果も一致している。

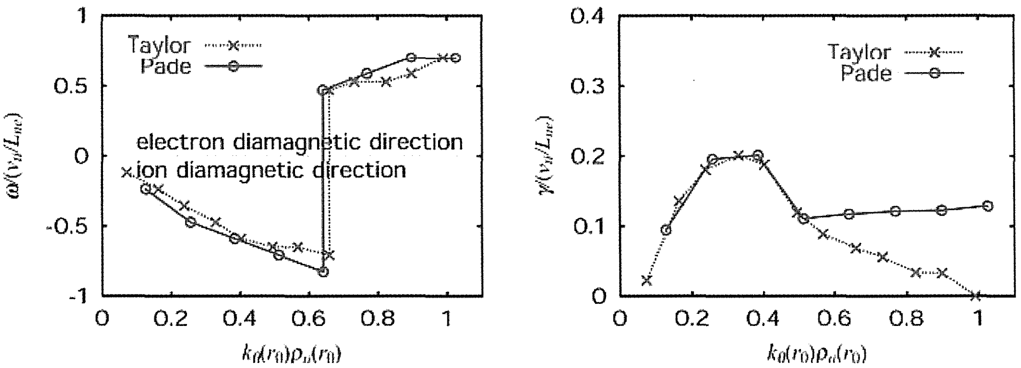



図3:イオン温度勾配駆動－捕捉電子モード不安定性の周波数(左図)、成長率(右図)のポロイダル波数依存性。イオン分極密度に対してTaylor 展開を用いる従来の手法では捉えることのできなかった短波長領域の捕捉電子モード不安定性をPade 近似を用いる新しい手法では捉えることに成功している。

4.13　核融合工学部

# 4.13.1　大型超電導導体の安定解析、クエンチ解析及び大型超電導コイルの臨界電流値試験結果の解析

超電導磁石研究室
小泉　徳潔

## 1．利用の概要（要約）：

１）核融合炉用超電導導体の安定解析、クエンチ解析

核融合炉用超電導導体の安定解析、クエンチ解析コードを開発、改良し、解析を実施した。本年度は、大型超電導導体の安定性、クエンチ解析を実施した。今後も、超電導導体の導体内電流分布に起因する不安定現象の解析、ITER 超電導導体の安定性、クエンチ解析等の課題がある。

これらの解析では、通常、100 m 超の超電導導体に対して、流体方程式、熱伝導方程式、分布常数回路方程式を数値的に解くため、計算量が膨大となり、大型計算機の利用が必要不可欠である。

２）大型超電導コイルの臨界電流値解析

大型超電導コイルの臨界電流値試験結果の解析を行い、大型超電導コイルの臨界電流性能を評価した。解析では、導体断面内の臨界電流値の分布を考慮し、解析を行っているため、超電導導体の断面内の多数のメッシュに対して、個別に臨界電流値を計算する。

実験解析では、複数のパラメーターを振って、実験結果とフィッティングさせる必要がある。このため、計算量が膨大となり、大型計算機の利用が必要不可欠である。

本成果を基に、ITER で使用される大型超電導コイルの臨界電流値の詳細計算を行う解析コードを開発している。

## 2．利用の内容・結果：

１）核融合炉用超電導導体の安定解析、クエンチ解析

核融合炉用超電導導体は、導体内に超臨界圧ヘリウムを強制的に流して、超電導線を冷却する構造としている。このため、その安定性、クエンチ解析では、超臨界圧ヘリウムに対する流体方程式、超電導線およびコンジット（ステンレス鋼製管状構造材）に対する熱伝導方程式、各超電導線の電流に対する分布常数回路方程式を解く必要がある。これらの方程式を、差分法を用いて数値的に計算するための解析コード（POCHI）を開発し、SR8000 を利用して計算を行った。

本コードを用いて、15 年度は以下のような結果を得ることが出来た。

・$Nb_3Al$ インサート・コイルに対して、安定性、クエンチ解析を実施し、実験結果と良く模擬できることを示した（図１、２）。これらの成果は、平成 16 年度の国際応用超電導学会で報告した。

2）大型超電導コイルの臨界電流値解析

大型超電導コイルの臨界電流値試験結果を解析するために、簡易化した流体方程式、熱伝導方程式を差分法で解き、温度分布等を解析するためのコード(KORO)を開発し、SR8000 を利用して計算を実施した。本解析は、上記の１）の解析が数百ミリ秒～数十秒の時間に対する解析であるのに対して、数千秒以上の時間を対象とした計算である。

本コードを用いて、15 年度は以下のような結果を得ることが出来た。

・ITER 工学設計活動の一環として開発した $Nb_3Al$ インサート・コイルの臨界電流値試験において、測定した導体入口温度から、導体内の温度分布を計算し、臨界電流値を評価した。図１は、計算と実験の結果の比較を示す。両者は良く一致し、本解析結果を基に、$Nb_3Al$ インサート・コイルの臨界電流値を評価することができた。本成果は、Superconducting Science Technology 誌、低温工学学会誌に投稿するとともに、Symposium of Fusion Engineering で発表した。

３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1). N. Koizumi, Y. Nunoya, K. Matsui, H. Nakajima, et al.
"Evaluation of strain applied to strands in a 13 T-46 kA $Nb_3Al$ cable-in-conduit conductor,"
Superconducting Science and Technology, 16 (2003) 1092-1096.

2). 小泉徳潔, 布谷嘉彦, Makoto Takayasu, 杉本誠, 他
"$Nb_3Al$ インサート・コイルの臨界電流値性能評価,"
低温工学, 38 (2003) 399-409.

3). N. Koizumi, T. Ando, N. Nakajima, K. Matsui, et al.,
"Development of a $Nb_3Al$ conductor for Toroidal Field coils,"
20th IEEE/NPSS Symposium of Fusion Engineering.

**４．今後の利用予定：**

次期導入予定の計算機を用い、超電導導体の導体内電流分布および臨界電流値分布を考慮した安定性、クエンチ解析を実施できるように、コードを改良する予定。また、これまでに開発したコードを、ITER 超電導導体の設計に使用する予定。

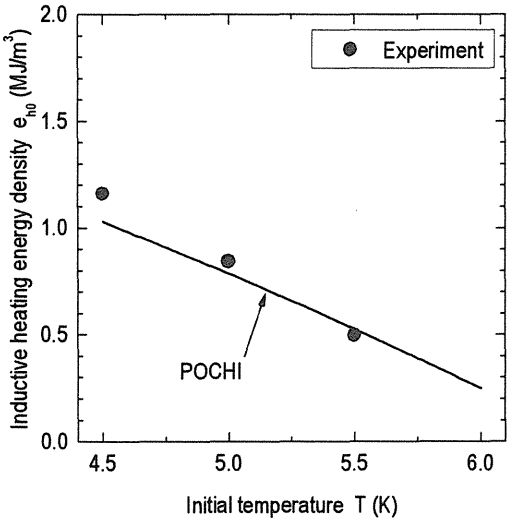



図1．$Nb_3Al$ インサート・コイルの安定性実験結果と解析結果

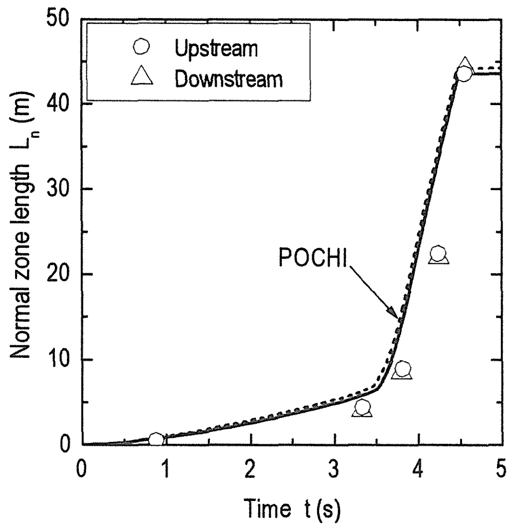



図2．$Nb_3Al$ インサート・コイルのクエンチ実験結果と解析結果。初期の常電導部は導体中央で発生させ、その後、上流側と下流側への常電導部の伝播の様子を測定、および解析。測定結果（○：上流、△：下流）は、計算結果（実線：上流、破線：下流）と良く一致。

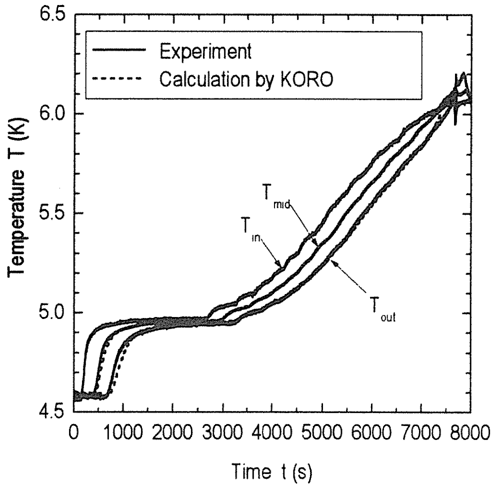



図３．Nb3Alインサート・コイル臨界電流値試験時温度分布の計算結果例。計算結果（破線）は実験結果（実線）と良く一致する。

## 4.13.2 ITER-CS モデル・コイルにおける導体性能の電磁力依存性の数値解析

超電導磁石研究室
名原 啓博

### 1．利用の概要（要約）：

国際熱核融合実験炉（ITER）で用いる中心ソレノイド（CS）コイルの実現性は、CS モデル・コイルの定格運転およびパルス運転により実証された。しかし、CS モデル・コイルは定格運転を達成することを第一目標としたため、ターン間絶縁確保のため巻線部内の計測素子はなく、その導体性能を実験結果だけで評価するのは困難である。そこで、2000年から2002年の間に行われた8回の分流開始温度計測実験を対象とし、数値シミュレーションによる導体性能の評価を行った。その結果、超伝導線にかかる電磁力による超伝導性能の劣化（臨界電流密度の低下・n 値の低下）の度合いを初めて定量的に示した。本結果は、ITER で用いられる超伝導コイルがクエンチ（コイル全域にわたる超伝導状態の破壊）を起こすことなく、定格運転を実現するために必要な設計裕度（安定性マージン）について重要な情報を与えた。

### 2．利用の内容・結果：

中心ソレノイド（CS）・モデル・コイルの概観図を図 1 に、そこで用いられているケーブル・イン・コンジット型超伝導導体を図 2 に示す。図 1 のコイルは図 2 の導体を約 32 ターン巻線し、それを 18 層並べて構成されている。また図 2 の導体は、直径が 1mm 程度の超伝導線を約 1,000 本撚りあわせたケーブルを金属製の管（コンジット）に封入した構造で、冷媒として、極低温（4K）の超臨界ヘリウムを金属管内部に循環させることで超伝導状態を維持する。ここで、もし熱的擾乱などによって超伝導状態の部分的な破壊が引き起こされると、導体内では超伝導線間の電流の再配分と偏流、ジュール発熱、熱伝導、超臨界ヘリウムへの熱伝達などが重畳して起きるため、実験や単純な解析モデルだけではこのような現象を解明することはできず、数値シミュレーションは非常に有効な研究手法といえる。しかし、上述のような導体内で起きる現象をモデル化した支配方程式は複雑な上、コイルの総導体（流路）長は 5050.4m と極めて長く、また一回の実験時間は 4 時間以上になることもあり、シミュレーションを行うためはかなりの計算速度が必要となる。本報告の数値シミュレーションは東海研所有のベクトルスーパーコンピュータを用い、ベクトル化率 98%の高速計算を行うことによって初めて可能となった。

本報告では、2000 年から 2002 年の間に行われた 8 回の分流開始温度（Tcs）計測実験を対象とし、数値シミュレーションによって導体性能を評価した結果を示す。Tcs 計測実験とは、モデル・コイルの最内層および第 2 層の冷媒の入口温度をヒータにより上昇させることで部分的に超伝導状態を壊し、発生電圧から分流開始温度を調べる

実験である。コイルの通電電流は1kA、30kA、40kA、46kA（定格電流）の4通りである。一例として2002年4月27日に行われた46kA通電時のTcs計測実験において、最内層（導体長83.8m）で生じた電圧の経時変化の実験結果とシミュレーション結果を図3に示す。この図から、実験で計測された電圧波形を数値シミュレーションで非常によく再現できたことがわかる。同様に8回のTcs計測実験をシミュレーションにより再現することで、CS モデル・コイルの導体性能を初めて定量的に明らかにすることができた。超伝導線にかかっている歪みの電磁力依存性を図4に、超伝導線のn値の電磁力依存性を図5に示す。歪み（の絶対値）が大きいほど超伝導線の臨界電流密度が低下し、超伝導性能が低下していることを表す。n値は超伝導線の抵抗遷移の鋭さを表すもので、n値が大きいほど超伝導性能が高いことを表す。また、コイルの通電電流が高いほど超伝導線に作用する電磁力は高くなる。図4から、超伝導線に作用する電磁力が強くなるほど、歪みが増加（すなわち臨界電流密度が低下）することがわかる。また図5から、電磁力が強くなるほどn値も素線の値（本来とるべき値：図中▲印）より低下することがわかる。この原因として、電磁力が強くなると、図6に示すような超伝導線にかかる局所的な曲げも大きくなるために、超伝導性能が低下するものと考えられる。

本計算結果により、電磁力によって導体性能がどの程度低下するかを定量的に知ることができ、国際熱核融合実験炉（ITER）で用いられる超伝導コイルがクエンチ（コイル全域にわたる超伝導状態の破壊）を起こすことなく、定格運転を実現するために必要な設計裕度（安定性マージン）について重要な情報を与えた。

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

(1) ITER－CSモデル・コイルにおける導体性能の電磁力依存性の数値シミュレーションによる解析

名原啓博，小泉徳潔，礒野高明，布谷嘉彦，杉本誠，濱田一弥，奥野清

第71回2004年度秋季低温工学・超電導学会講演概要集，2B-a04,（発表予定）、2004年

(2) ITER－CSモデル・コイルの分流開始温度の数値シミュレーションによる解析

名原啓博，小泉徳潔，布谷嘉彦，濱田一弥，礒野高明，奥野清

第70回2004年度春季低温工学・超電導学会講演概要集，2B-p03，p115、2004年

(3) ITER－CSモデル・コイルの分流開始温度の数値解析による評価

名原啓博，濱田一弥，礒野高明，小泉徳潔，奥野清

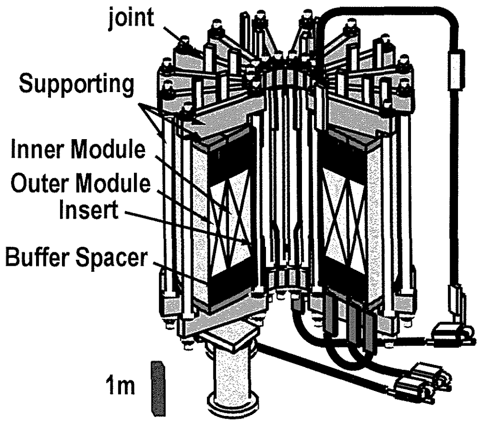
第69回2003年度秋季低温工学・超電導学会講演概要集，2B-a07，p158、2003年

**4．今後の利用予定：**

国際熱核融合実験炉（ITER）で用いられる大型超伝導コイル（トロイダル磁場コイル、中心ソレノイド・コイル、ポロイダル磁場コイル）の冷却安定性について数値シ

ミュレーションにより研究する。これらのコイルはモデル・コイルよりも遥かに大きく、また運転時間も長いため、さらに大規模な計算が必要となる。

また、現在、高磁束密度大型超伝導磁石システムの設計はトライアンドエラーの実験的検証により行われているが、それには極めて莫大な費用を必要とする。今後、現計算コードを設計に資するものに発展すれば、実験的検証をできる限り省力化することで、大幅な設計コストの低減を図ることができる。



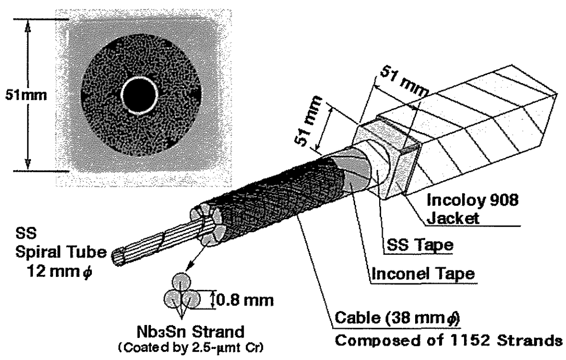
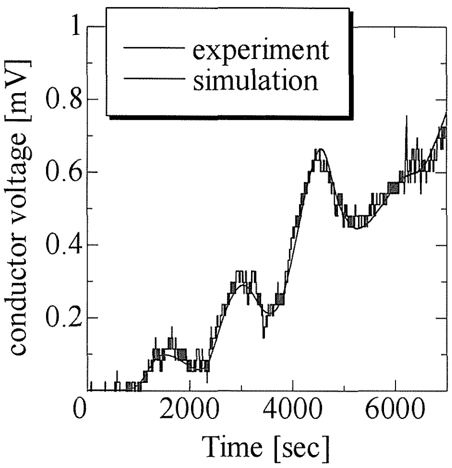




図1. 中心ソレノイド・モデル・コイル　図2. ケーブル・イン・コンジット型超伝導導体



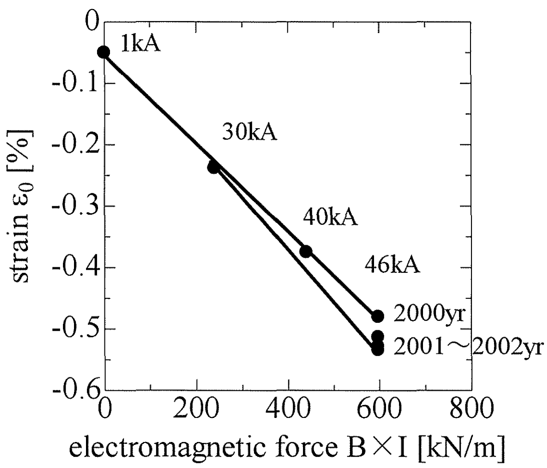




図3. 最内層で発生した電圧の経時変化　図4. 超伝導線にかかる歪みの電磁力依存性

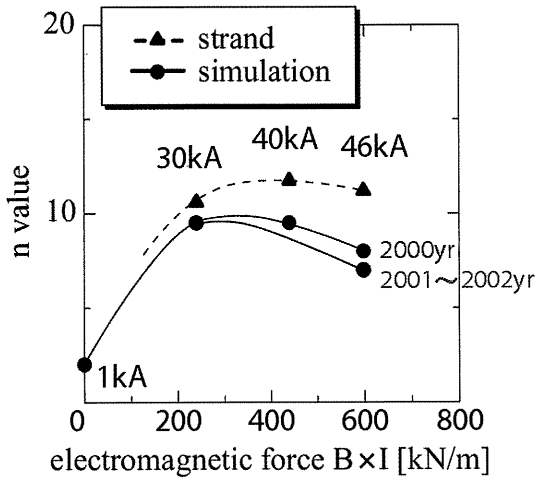



図５．超伝導線のｎ値の電磁力依存性

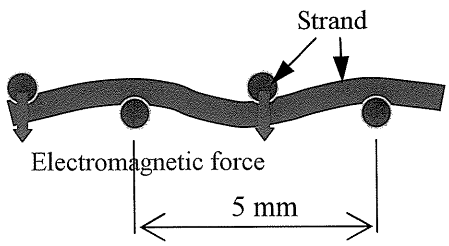



図６．超伝導線にかかる局所的な曲げ

4.14 ITER 開発室

## 4.14.1 ＩＴＥＲ装置の核解析

ＩＴＥＲ協力調整室
飯田　浩正

### １．利用の概要（要約）：

エネルギー機関である核融合装置は炉心プラズマ廻りに大きな発熱を伴う。核分裂炉の発熱が燃料ピンに集中しており、核分裂分布の評価（臨界計算）が重要であるのに比べ、核融合装置では総発熱の８０％以上が中性子により、廻りの機器に運ばれ主要な熱負荷となる。中性子の挙動を解析する核解析は炉心廻りの機器設計にとって基本的かつ必須の要件の一つである。

また、炉停止後に作業員の近接可能性を確保するための装置内外遮蔽は、極めて限られた空間の中で行われる為、非常に高い計算精度が要求される。

上記問題は装置の複雑さ、ボイド開口部の多さ等から、現在ではモンテカルロ法が唯一の解析手法である。ＩＴＥＲでは約３０００から８０００のセルで構成されるモデルを使用しており、既存の他の装置の解析にくらべると一桁以上複雑なモデルとなっている。このような解析で意義の有る結果を得る為には、使用する計算機の速度が決定的に重要である。

### ２．利用の内容・結果：

モンテカルロ法放射線輸送計算コードＭＣＮＰを用いＩＴＥＲ装置の以下の諸量を計算し、機器設計の熱負荷条件等を確立しＩＴＥＲプロジェクトに貢献している。

＊ 炉心廻り機器（ブランケット、ダイバータ、真空容器等）の詳細な発熱分布。
＊ 極低温（４ｋ）機器（超伝導コイル等）の熱負荷分布
＊ トカマク装置廻りの停止後放射線線量の分布
＊ トカマク建家内放射線分布
＊ トカマク装置内外機器の放射線損傷
＊ 装置現場溶接部のヘリウム生成量

上記項目のうち、停止後放射線線量率の計算は、従来の方法では計算不可能である。ＩＴＥＲプロジェクトでは、装置運転中の中性子輸送解析と停止後の崩壊ガンマ線の解析を一遍に行ってしまう「1-step Monte Carlo 法」考案し、改良したＭＣＮＰ、及び核データファイルを作成し、ＩＴＥＲ遮蔽計算に適用している。

### ３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1). H. Iida,, L.Petrizzi, V. Khripunov, G. Federici, E. Polunovskiy"Nuclear Analyses of Some Key Aspects of the ITER Design with Monte Carlo Codes ",23rd Symposium on Fusion Technology, 20 - 24 September 2004 - Fondazione Cini, Venice, Italy

2). Hiromasa Iida, "Study of Additional Shielding Requirement around the Equatorial Port with Diagnostic Plug", IdoMS:N 73 RI 7 03-07-03 W 0.1 (NAG-231),April 2003

3). Hiromasa Iida, "Nuclear Heat Distribution in the Housing of Flexible Joints", IdoMS:N 73 RI 9 03-07-03 W 0.1 (NAG-233),Junel 2003

4). Hiromasa Iida, "Fast Neutron Flux and Nuclear Heat in the TF Coil Inboard Legs vs. Gap Width among Blanket Modules", IdoMS:N 73 RI 14 03-09-12 W 0.1 (NAG-236),Sep. 2003

5). Hiromasa Iida, "Transmutation Rate from Au to Hg in ITER Blanket Region", IdoMS:N 73 RI 16 03-11-19 W 0.1 (NAG-238),Nov. 2003

6). Hiromasa Iida, "Re-assessment of Nuclear Heat in the TF coils for Design Specification", IdoMS:N 73 RI 18 04-01-16 W 0.1 (NAG-240), Jan. 2004

7). Hiromasa Iida, "Fast neutron fluxes on the PF coils", IdoMS:N 73 RI 19 04-03-01 W 0.1 (NAG-241), March. 2004

8). Hiromasa Iida, "Surface heat Load on the F/W due to Bremsstrahrung and Line Radiation", IdoMS:N 73 RI 29 04-10-26 W 0.1 (NAG-243), April. 2004

9). Hiromasa Iida, "Wider Gap Effect between #1 Blanket Module and Divertor Cassette on the Nuclear Heat in the TF coil and the Vacuum Vessel", IdoMS:N 73 RI 30 04-10-26 W 0.1 (NAG-243), May. 2004

10). Hiromasa Iida, "Nuclear Response Peaking on the Inboard Vacuum Vessel due to Gaps between Blanket Modules (Nuclear Heat, Fast neutron Flux, DPA & Helium Production)", IdoMS:N 73 RI 31 04-10-26 W 0.1 (NAG-243), July. 2004

## ４．今後の利用予定：

現在のモデル化でも充分な計算精度で解析が出来ていない為、また、トカマク建てや外の計算も必要になってくる為、更に大きく詳細な計算モデルが必要である。これを可能とする為、ＣＡＤ図面からＭＣＮＰ入力自動作成を行うツールの開発が勧められているが、更に高速、大容量（メモリー）計算機が使用可能となることも必須の条件である。

4.15 計算科学技術推進センター

# 4.15.1 微小き裂、複雑流路内の二相流流動様式変化に関するシミュレーション

数値実験技術開発グループ
海老原　健一

## 1. 利用の概要（要約）:

数値実験技術開発グループのサブテーマの１つである「微小き裂、複雑流路内の流動様式変化に関する研究」のもと、メソスコピックな計算手法である格子ボルツマン法によって、水平層状二相流における界面成長や界面変形に関するシミュレーションを行なうため、大型計算機を利用している。格子ボルツマン法は、十数年前に提案されているが、実際的な二相流動への適用は未だ多く見られていないため、その手法の有用性や計算結果の妥当性を、既存の理論や実験結果を比較し、検討する必要ある。このことから、大規模計算を多くの場合に対して行なう必要があり、大型並列計算機の利用が必要である。

## 2. 利用の内容・結果:

格子ボルツマン法の一成分二相流体モデルを用いて、矩形断面を持つ水平な流路内を軽い相と重い相が上下の二相に分かれて同一方向に流れる水平層状二相流の数値計算を行なっている。計算は、主に、ORIGIN3800 のプロセッサを 32 並列または 64 並列で利用している。流路断面の大きさや流路長さによって計算資源の利用状況は異なるが、格子ボルツマン法が粒子分布を計算することによって流動挙動をシミュレーションすること、また実験結果や理論解析との比較するために、十分な計算格子サイズを用いた多数の場合の計算を行なうことから、多くの計算資源が必要となる。以下に平成 15 年度に得た結果を示す。

- 水平層状二相流の界面成長のシミュレーション[図 1]を行ない、流動状態に関する無次元数と界面成長を測定し、両者の関係が、理論的な考察から導かれた相関図の界面成長に関する曲線を再現することが分かった。[図 2(a)]
- 矩形断面流路の流路の幅を狭めた場合の上記の関係は、理論的考察から導かれる界面成長に関する曲線の上方へずれることが明らかとなり、これは、流路が狭くなることにより流れの三次元性が顕著となるためであることが分かった。[図 2(b)]
- 水平層状二相流の界面がちぎれ、液滴が発生する、複雑な界面変形を伴うシミュレーション[図3]を行ない、流動状態と液滴発生の関係を記述する実験相関式を、ほぼ再現した。[図 4]

## 3. 利用の成果（学会、プレス発表、論文等）:

1). 海老原健一、渡辺正、”格子ボルツマン法による矩形断面流路における水平層状二相流の界面成長に対する流路幅の影響の評価”
日本機械学会B編70巻、1393-1399(2004).

2). 海老原健一、渡辺正、”格子ボルツマン法による水平層状二相流における液滴発生のシミュレーション”
第17回数値流体力学シンポジウム講演論文集、63(2003).

3). 海老原健一、渡辺正、” 格子ボルツマン法による水平層状二相流における液滴発生のシミュレーション”
日本流体力学会誌「ながれ」23巻、253-261(2004).

**4. 今後の利用予定：**

さらに実際的な狭隘流路やき裂内の流動のシミュレーションを行なうことを予定している。

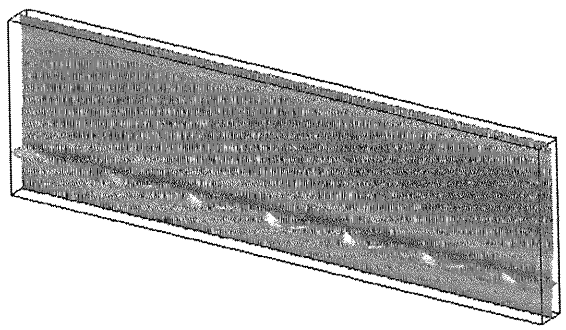


図１水平層状二相流における界面成長

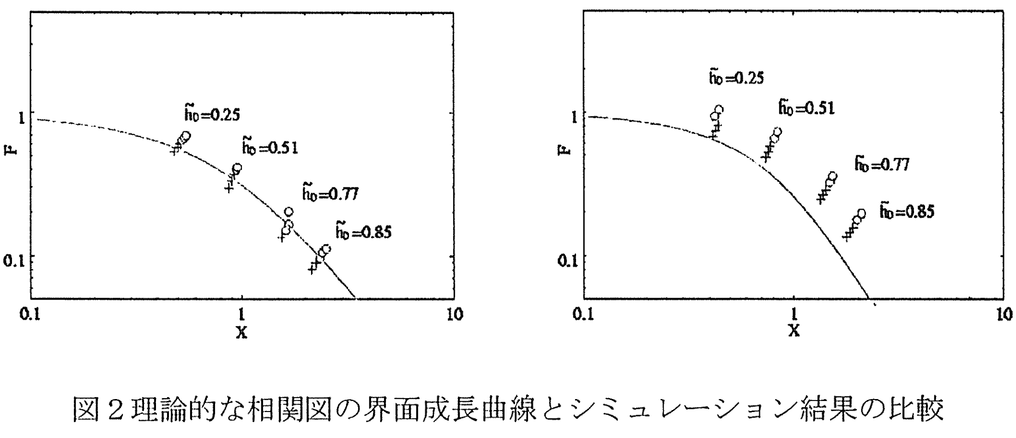



図２理論的な相関図の界面成長曲線とシミュレーション結果の比較

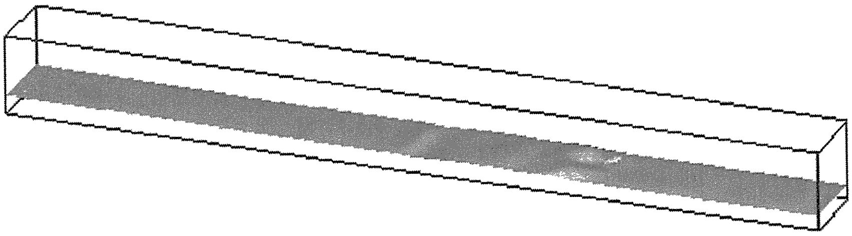


図3液滴発生シミュレーション

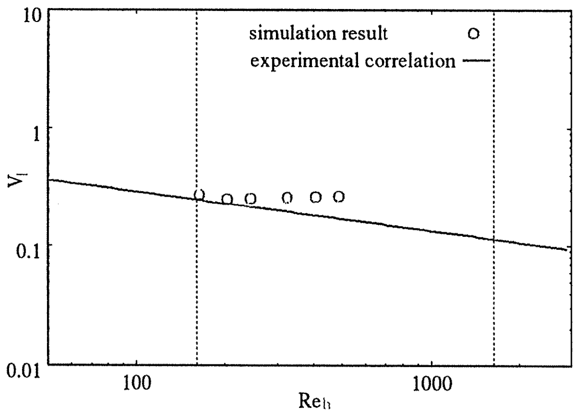



図4液滴発生に関する実験相関式とシミュレーション結果の比較

## 4.15.2 原子炉材料におけるひび割れ現象の微視的解明

数値実験技術開発グループ

山口　正剛

**1．利用の概要（要約）：**

数値実験技術開発グループでは、「計算科学的手法による原子力施設における物質挙動に関する研究」のテーマのもとに、近年社会問題となった原子炉シュラウドにおけるひび割れの基本的メカニズム解明に取り組んでいる。具体的には、量子力学の基本方程式であるシュレーディンガー方程式を数値的に解いて物質の電子構造を計算する「第一原理計算」を行うため、膨大な計算時間が必要であり、大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

**2．利用の内容・結果：**

原子炉材料などの金属材料は、大きさが数十ミクロンの結晶の粒（結晶粒：けっしょうりゅう）の集合体として構成されており、結晶粒同士の境界は結晶粒界（けっしょうりゅうかい）と呼ばれている。微量の硫黄元素が結晶粒の中に含まれていると、それが加熱や中性子照射などによって結晶粒界に集まり、割れをもたらすことが知られているが、「なぜどのようにして硫黄原子は結晶粒界の強度を低下させるのか？」という基本的なメカニズムは未解明のままであった。本研究では、延べ６０万時間にも上る膨大な第一原理計算によってその基本的なメカニズムの解明に成功し、この研究成果は米国科学誌Science（サイエンス）に掲載される予定である。解明したメカニズムの概要は以下のとおりである。

（１）結晶粒界に集まって隣り合った硫黄原子同士は、通常作るはずの共有結合を作らず、逆に反発する。（図１）

（２）上記の反発によって、結晶粒界の引っ張り強度が劇的に低下する。（図２）

この解明は、原子炉材料のひび割れ対策に寄与するものと期待されている。

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

1)．M. Yamaguchi, M. Shiga, H. Kaburaki,
"Energetics of segregation and embrittling potency for non-transition elements in the Ni Σ 5(012) symmetrical tilt grain boundary; A first-principles study.
Journal of Physics: Condensed Matter 16, 3933-3956(2004)

2)．M. Yamaguchi, M. Shiga, H. Kaburaki

“Grain Boundary Decohesion by Impurity Segregation in a Nickel-Sulfur system”,
accepted in Science (2004.12.7).

## 4．今後の利用予定：

引き続き、割れメカニズムの解明を多種多様な物質において行うため、膨大な計算時間を必要としている。

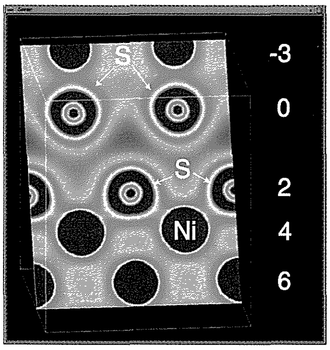



図１：電子密度分布図。赤は高い電子密度、青は低い電子密度を示す。結晶粒界に集まった硫黄原子は、ニッケル原子とは強い結合を作るが、硫黄原始同士ではほとんど結合を作らないことが示されている。

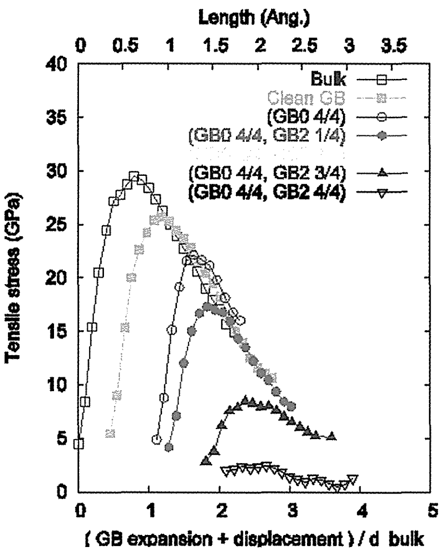



図２：引っ張り試験計算の結果。硫黄がたくさん集まると、粒界の引っ張り強度(Tensile strength)が最終的には最初の１０分の１にまで大幅に低下することを示している。

# 4.15.3 混相熱流動現象の数値シミュレーション

数値実験技術開発グループ
渡辺　正

## 1．利用の概要（要約）:

数値実験技術開発グループでは、「計算科学的手法による原子力施設における物質挙動に関する研究」のテーマのもとに、原子炉の経年変化に関係する熱流動の基本的問題に対して計算科学的手法による研究を実施している。特に、炉内構造物周辺の複雑流路における混相熱流動現象に関して、二相流の相間界面積、ならびに熱対流時の流動パターンと熱伝達量をミクロレベルのシミュレーションにより決定する手法の開発を行っている。ここでは、大規模、長時間のシミュレーションを、多数ケース実施することにより、計算結果を既存の実験相関式と比較検討する必要があり、大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

## 2．利用の内容・結果：

混相流の流動と相間界面の挙動を計算するためのシミュレーションコードを開発し、SR8000 の 4 ノード（32 プロセッサ）を利用した並列計算を行った。また、流動と熱輸送を計算するためのコードを開発し、SR8000 の 1 ノード（8 プロセッサ）を利用したノード内並列計算を行った。いずれのコードにおいても、ボルツマン方程式に基づいて熱流体現象をミクロレベルから計算するための計算手法を用いており、マクロな流体挙動の計算に多大な計算資源を必要とした。ミクロレベルからの流体挙動のシミュレーションは、大型並列計算機の利用により始めて可能となる数値実験であり、15 年度は以下のような結果を得ることが出来た。

- 大きな体積率を持つ連続相の中を、小さな体積率の分散相が流れる分散二相流のシミュレーションを行うために、気泡･液滴が重力により上昇し、合体分裂を起こす際の二相界面の挙動を計算し（図 1)、気泡・液滴の分裂条件が、既存の実験相関式と一致することを明らかにした。
- 上記分散二相流のシミュレーションにおいて、定常な分散二相流を模擬し、界面積の数値的測定を同時に行うための手法を考案した。分散相の体積分率の変化による流動状態の変化を再現するとともに（図 2)、界面積変化を流動パラメータにより表す既存の実験相関式が数値的に得られることを明らかにした。
- 熱対流における流動状態の安定性と対流パターンの遷移を検討し（図 3)、様々な対流パターンの形成と熱伝達量の関係を明らかにした。

## 3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）:

1). T.Watanabe and K.Ebihara,
"Numerical Simulation of Coalescence and Breakup of Rising Droplets,"
Computers and Fluids, 32(2003)823-834.

2). T. Watanabe,
"Numerical evidence for coexistence of roll and square patterns in Rayleigh-
Benard convection,"
Physics Letters A, 321/3(2004)185-189.

3). T. Watanabe,
"Flow pattern and heat transfer rate in Rayleigh-Benard convection,"
Physics of Fluids, 16(2004)972-978.

4). T.Watanabe,
"Simulation of Dispersed Flows and Measurement of Interfacial Area and Volume Fraction,"
11th Int. Conf. on Nucl. Engineering, Shinjuku, Tokyo, Japan, April 20-23, 2003.

5). T.Watanabe,
"Flow Pattern and Heat Transfer Rate in Three-Dimensional Rayleigh-Benard Convection,"
EuroPVM/MPI 2003, Venice, Italy, Sep. 29- Oct. 2, 2003.

6). 渡辺正、
"格子ボルツマン法によるレイリーベナール対流のシミュレーション"、
日本機械学会 2003 年度年次大会、要旨集第 II 分冊、S27-2、1556、徳島、8 月 8 日(2003)

## 4. 今後の利用予定：

次期導入予定の並列計算機を用い、より大規模な体系における現実的な条件での混相流及び熱対流のシミュレーションを継続して実施する予定。

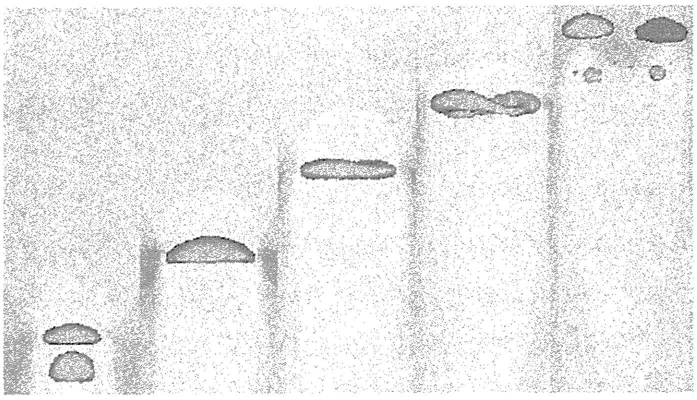



図 1. 上昇液滴の合体と分裂

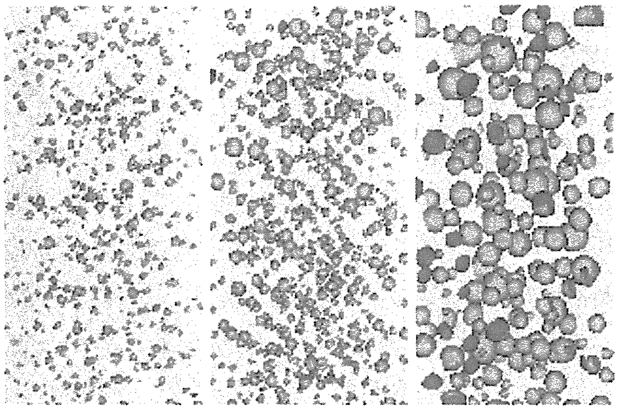



図 2. 体積率の異なる定常分散二相流の例

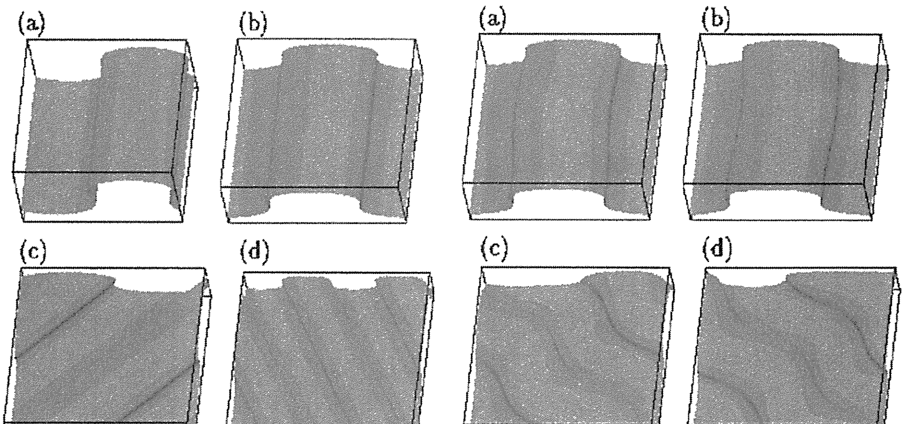



図 3. 熱対流パターンの形成例

## 4.15.4 ナノ多結晶体に関する3次元粒界割れパターンの分子動力学シミュレーション

並列計算法開発グループ
清水 大志

### 1. 利用の概要(要約):

並列計算法開発グループ(現・原子力材料計算科学研究グループ)では、「並列計算法の研究開発」のテーマのもとに、原子炉の経年変化に関係する材料の機械的性質の基本的問題に対して計算科学的、特に並列計算手法の応用による研究を実施している。金属材料の粒界割れのミクロレベル、すなわち原子モデルによるシミュレーションでは、メソレベル、すなわち結晶粒を計算単位とした弾性論的破壊モデルによるシミュレーションに対し、き裂が三次元的に進展するケースをモデル化するための情報を与えることを目指している。ここでは、結晶粒のサイズを十分に確保する必要があり、大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

### 2. 利用の内容・結果:

当グループで開発した並列分子動力学ステンシル(PMDS)を用い、面心立方ナノ多結晶体における三次元粒界割れパターンのシミュレーションを、ES40 システム(16 プロセッサ)および、Origin3800 システム(64 プロセッサ)を用いて実施した。PMDS は、いずれのシステムにおいても 90%を上回る並列化効率を実現している。シミュレーション体系は 24 の結晶粒からなるナノ多結晶体であり、系全体で約 156 万の銅原子を含んでいる(図 1)。原子間相互作用は、第一原理計算の結果などにより調整された原子埋込法(EAM)ポテンシャルを採用した。境界条件は、引張方向および初期き裂に垂直な方向の 2 方向を周期的とし、残りの 1 方向を自由境界(表面)とした。15 万ステップの計算の結果、き裂先端部および 3 つの粒界が 1 つの線上に会する部分における転位の発生、粒内割れ、き裂前方の粒界面におけるボイド発生、き裂先端形状の鈍化と粒界すべりおよび粒界の移動などの現象が観察された(図 2)。このことより、メソレベルのシミュレーションへのフィードバックとして、結晶粒界面上の応力の垂直成分のみならず、粒界面に並行な剪断応力の影響をモデルに取り込む必要性を提示することが出来た。

### 3. 利用の成果(学会、プレス発表、論文等):

F. Shimizu, M. Itakura, H. Kaburaki, and H. Kimizuka, “” Molecular Dynamics Simulation on the Three Dimensional Grain Boundary Fracture Patterns in the FCC Nanocrystals ”, American Physical Society Meeting, Montreal, Canada, March 2004.

4．今後の利用予定：

次期導入予定の並列計算機を用い、結晶粒界、照射欠陥を含む金属のより大規模な体系の破壊、き裂進展シミュレーションを継続して実施する予定。

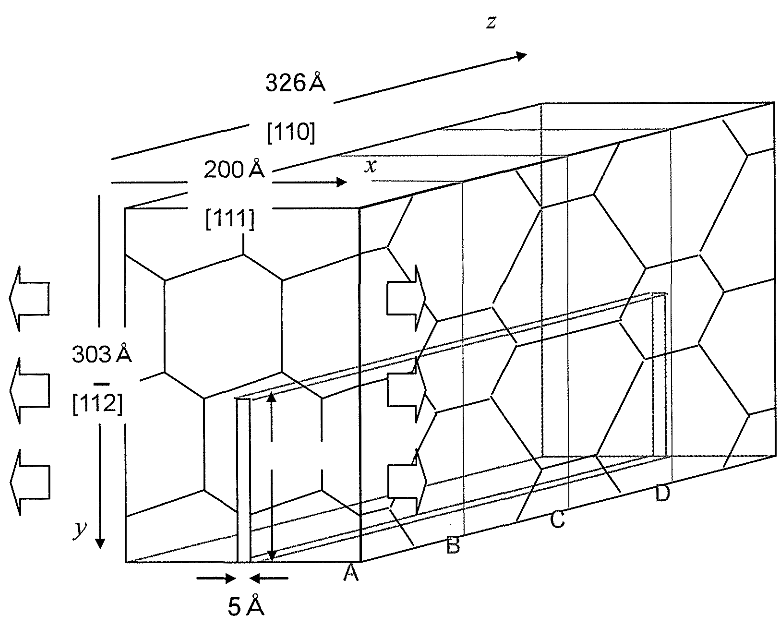



図１ 計算体系

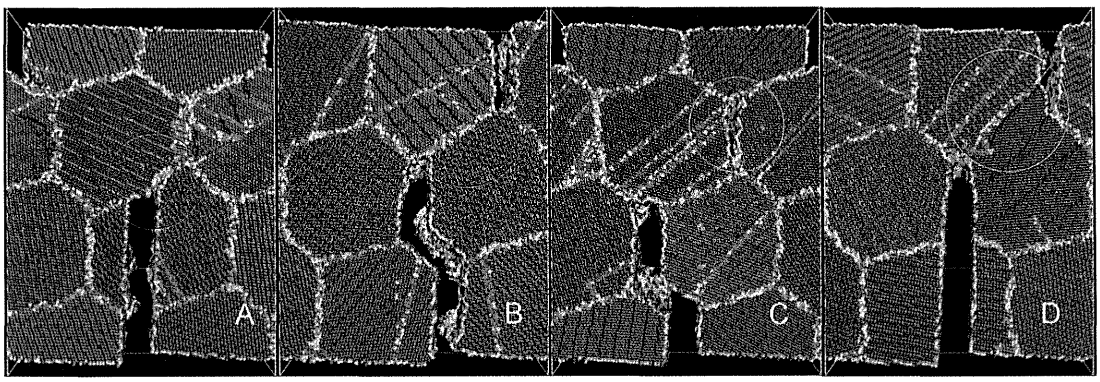



図２ 計算結果

## 4.15.5 応力を制御した分子動力学法シミュレーションの開発と応用

数値実験技術開発グループ
志賀　基之

**1．利用の概要（要約）**：

数値実験技術開発グループでは、計算科学的手法による原子力材料の応力腐食割れに関する研究を行っている。その中のテーマのひとつとして、応力と温度を制御した分子動力学法を開発し、それを用いて金属材料の破壊強度について微視的な立場から研究を進めている。また、金属材料中に含まれる不純物が材料強度に与える影響についても調べている。ここでは、大規模で長時間のシミュレーションを、金属材料の種類、温度、応力、不純物原子といった多数のケースを実施して比較検討する必要がある。そのため、大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

**2．利用の内容・結果**：

以下の内容の並列分子動力学プログラムを ES40 上で走らせた。(1-4 並列)

(1) ニッケル傾角対称粒界中に含まれる水素原子について分子動力学計算を行った。その結果、水素原子は結晶内部から粒界付近に移ることで安定化され、ニッケル金属表面に出るとさらに安定化する。これは、水素が粒界に偏析し、粒界破壊強度を下げる働きがあることを示唆している。

(2) 応力と温度を制御した新しい分子動力学シミュレーション法を開発した。この方法は、原子数、温度 、応力によってあらわされる熱力学的集合を自動的に発生させることができる。これによって、弾性定数など、材料強度に関する分子動力学計算が効率よく行うことができるようになった。

(3) 応力と温度を制御した分子動力学シミュレーションを用いて、ニッケル傾角対称粒界のすべりについて調べた。その結果、応力によって粒界面は粒界の回転軸と垂直な方向にはすべりやすく、平行な方向にはすべりにくいことがわかった。粒界のすべりやすさは、粒界の平行移動を伴うかどうかに関係していることがわかった。また温度上昇とともに

界を動かすのに必要な臨界応力は、温度上昇とともに指数関数的に減衰することが新たにわかった。

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）**：

M. Shiga, M. Yamaguchi, and H. Kaburaki, “Structure and energetics of clean and hydrogenated Ni surfaces and symmetrical tilt grain boundaries using the embedded atom method”, Physical Review B 68, 245402 (2003).

W. Shinoda, M. Shiga, and M. Mikami, “Rapid estimation of elastic constants by molecular dynamics under constant stress”, Physical Review B 67, 134103 (2004).

M. Shiga and W. Shinoda, “Stress-assisted grain boundary sliding and migration at finite temperature: A molecular dynamics study”, Physical Review B 70, 054102 (2004).

**４．今後の利用予定**：

今度とも、より多くの金属材料について大規模な分子動力学シミュレーションを継続して実施する予定である。

# 4.15.6 物質中の電子状態シミュレーション

並列処理基本システム開発グループ
前園　涼

## 1. 利用の概要（要約）：

報告者は「量子拡散モンテカルロ法による第一原理電子状態計算」のテーマのもとに、原子・分子やクラスター、固体周期系を対象とした汎用的な電子状態計算に関しての計算科学的手法による研究を実施している（→Fig. 1)。本システムを用いた研究としては特に、ナトリウム固体やニッケル酸化物といった固体周期系を対象とした電子相関の諸問題に關する精密計算を行い、従来手法の精度では確定した結論を得る事が難しかった定量的問題に取り組んでいる。この問題に対しては、演算能力、メモリ容量共に、ワークステーションやクラスタマシンなど従来レベルの計算設備では到底、到達できない計算量が要求されるため大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

## 2. 利用の内容・結果：

第一原理量子モンテカルロ法の汎用コードである「CASINO」(ケンブリッジ大学リチャード・ニーズ教授らの開発コード。報告者も開発に参加している）を那珂研 SGI ORIGIN3800、関西研 FUJITSU Primepower の両機上でコンパイルし、ジョブ投入スクリプトなど、CASINO の標準ユーティリティ群を整備して稼働を可能とした。那珂研の ORIGIN3800 は平成 15 年度に報告者の用いた大型計算機設備のうち最主力機として最も計算機コストを要するニッケル酸化物の拡散モンテカルロ計算に用いられた (64 プロセッサ)。関西研の Primepower では、16 プロセッサを用いて、ニッケル酸化物の変分最適化計算を行った。ニッケル酸化物の研究は現在も進行中である。また、関西研の Primepower 上で GAUSSIAN98 を用いて炭素原子の基底状態精密計算を行った。この計算によって生成された多次元関数の節線構造を用いて量子モンテカルロ計算を遂行した結果、基底状態の電子配置に関するフントの経験則を実現している機構は、広く信じられているところのスレータ解釈（電子間相互作用による機構）ではなく、ボイド解釈（電子・核間相互作用による機構）が正しい事を明らかにした (→Fig. 2)。この成果は論文として報告した。

## 3. 利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1). Kenta Hongo, Ryo Maezono, Yoshiyuki Kawazoe, Hiroshi Yasuhara, M.D. Towler, and R.J. Needs,
"Interpretation of Hund's multiplicity rule for the carbon atom"
J. Chem. Phys. 121, 7144 (2004).

2). 前園 涼,
"量子モンテカルロ法による第一原理計算法"

固体物理 39 779-790 (2004)、アグネ技術センター.

3). 前園涼, マイク・タウラー、リチャード・ニーズ
“NiO の第一原理量子モンテカルロ計算(1)”
日本物理学会 2004 年秋季大会, 青森大学、青森県青森市, 2004.9.15.

4). K. Hongo, R. Maezono, Y. Kawazoe, and H. Yasuhara,
“Quantum Monte Carlo study of Hunds rule for carbon atom”
IUMRS-ICAM2003, Pacifico Yokohama, Yokohama, Japan, 2003.10.10.

5). R. Maezono,
“Quantum Monte Carlo study on periodic systems”
The 6th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations, Tsukuba International Congress Center,
Tsukuba, Japan, 2003.11.10.

6). R. Maezono, M. D. Towler, and R. J. Needs,
“Quantum Monte Carlo study on Periodic Systems”、
American Physical Society, March Meeting,
Palais des Congres de Montreal, Motreal, CANADA.
2004.3.23.

## 4. 今後の利用予定：

次期導入予定の並列計算機(那珂、東海地区)を用い、ニッケル酸化物の大規模シミュレーションを継続して実施する予定。

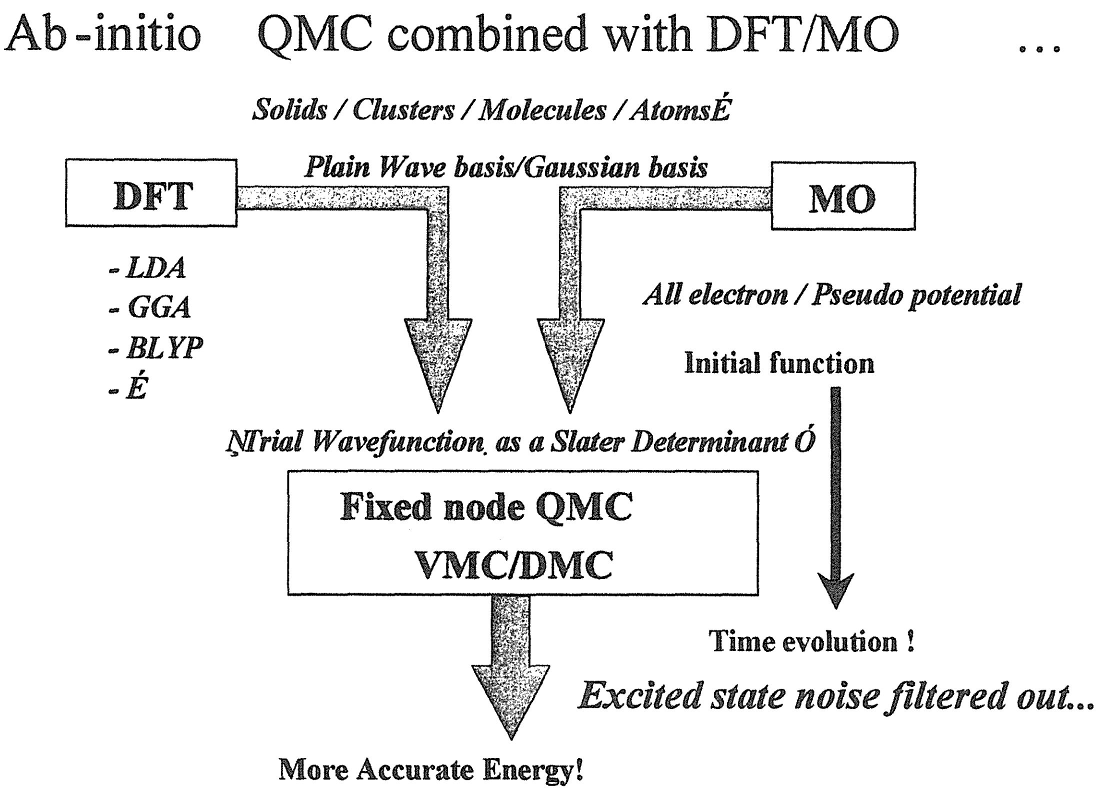



Fig. 1 第一原理量子モンテカルロ法計算の概念図

| | 三重項基底状態(S=1) | 一重項最低励起状態(S=0) |
|---|---|---|
| 全エネルギー | -37.8267(4) | -37.7623(6) |
| 運動エネルギー | 37.811(26) | 37.763(41) |
| 電子間斥力エネルギー | 12.538(6) | 12.464(9) |
| 電子・核引力エネルギー | -88.231(29) | -88.062(45) |
| ビリアル比 | 2.002(2) | 2.002(2) |

Fig. 2 拡散モンテカルロ法による炭素原子のエネルギー（単位は hartree)。三重項基底状態における電子間斥力エネルギーはよく知られた解釈とは反して却って高い。ビリアル比は厳密な波動関数に対して 2.0 となる事が要請される。

## 4.15.7 壁乱流の数値計算アルゴリズム及び乱流モデルの研究

並列計算法開発グループ
大木　武志

### 1. 利用の概要（要約）:

円管内に発生する旋回乱流として回転円管内乱流の Direct Numerical Simulation(DNS)がこれまでにいくつか実施されているが、この流れは軸方向への流れの変化を伴わず、工学・工業上多く見られる軸方向への平均流の変化を伴う旋回乱流の本質の解析には適していない。そこで本研究では旋回発生装置が周期的に配置された直円管内旋回乱流を模擬する流れとして周期的旋回乱流を取り上げ、大型並列計算機を用いたDNSを実行した。さらに比較のため，回転円管内乱流および円管内ポアズイユ乱流に対するDNSも大型並列計算機を用いて実行した。これらのDNSは大規模、長時間のシミュレーションを必要とするので、大型並列計算機の利用により実施可能となったものである。

### 2. 利用の内容・結果:

壁面近傍の乱流挙動を高精度に予測するため、壁乱流の数値計算アルゴリズム及び乱流モデルを研究することを目的に、本研究ではまず、新たな円筒座標系用の差分スキームを構成した。この差分スキームは運動量、運動エネルギーを完全に保存する完全保存形中心差分スキームであり、円管中心の極の取り扱いに関しては、極上で半径方向速度Vの運動方程式を解き、さらに極上でのVの単価性を保障するためにVの再構成を行っている。この差分スキームを用いた円管内乱流の数値シミュレーションコードを作成し、大型並列計算機を利用して検証計算を実行し、以下の結果を得た。

- 本研究で提案された差分スキームは時間離散化誤差を除外すれば非粘性流に対して完全に運動エネルギーを保存し、従来の差分スキームより格段に信頼性に勝るものであることが実証された。

さらにこのシミュレーションコードを高次精度化し、円管内乱流および回転円管内乱流のDNSを実行し以下の結果を得た。

- 円管内乱流および回転円管内乱流ともに安定な計算が実行でき、従来の実験データとの比較を通して、本計算手法の信頼性が確認された。
- 円管内乱流に関しては、従来報告例のない乱流エネルギー散逸率の収支を得ることができた。

現在、旋回乱流の本質を調査するために、このシミュレーションコードを用いて、軸方向へ平均流の変化を伴う周期的旋回乱流のDNSを実行している。周期的旋回乱流においては軸方向への流れの変化を調べる必要があるので、軸方向に大きな計算領域が必要であり、それに伴い非常に多くの計算格子が必要となる。さらに旋回成分により通常の円管内乱流に比べ、時間刻み幅も小さくする必要がある。また、乱

流統計平均量のためのアンサンブル平均は周方向及び時間に関してとられるため、信頼性のある乱流統計平均量を得るためには膨大な計算時間が必要になる。これらの理由により周期的旋回乱流の DNS は大型並列計算機の利用により始めて可能となる数値実験である。これまでに旋回乱流の DNS に関し、以下の結果を得ている。

- 比較的強い旋回を与えても安定して計算を実行することが出来る。
- 軸方向速度に関しては、旋回乱流の特徴である凹型分布を再現することができ、下流に向かって軸方向速度分布の回復も再現することが出来た。
- 周方向速度に関しても、旋回乱流の特徴である円管中心付近で強制渦形、周辺部で自由渦形の分布となるランキン渦形の速度分布が確認でき、下流に向かって周方向速度の減衰も確認できた。

さらに現在、以上で得られた周期的旋回乱流の乱流統計平均量を回転円管内乱流および円管内ポアズイユ乱流のそれと比較することにより、旋回乱流の特徴を考察している。これらの解析で得られた乱流統計平均量のデータを用いることにより、旋回乱流を適切に予測できる乱流モデルの構築が期待される。

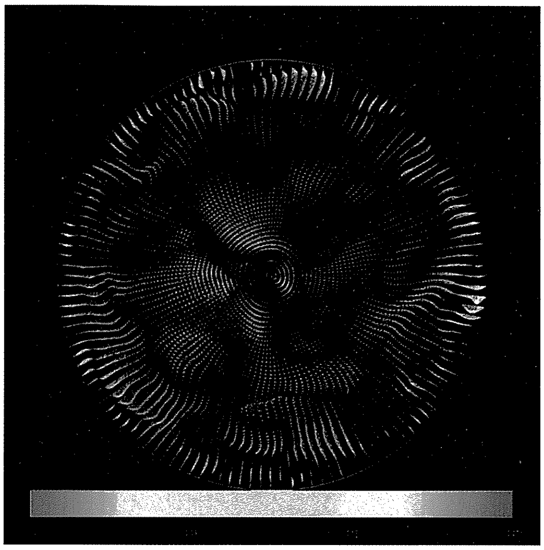
## 3. 利用の成果（学会、プレス発表、論文等）:

1). Youhei Morinishi, Oleg V. Vasilyev, Takeshi Ogi,
"Fully conservative finite difference scheme in cylindrical coordinates forincompressible flow simulations,"
Jornal of Computational Physics, 197(2004), pp.686-710.

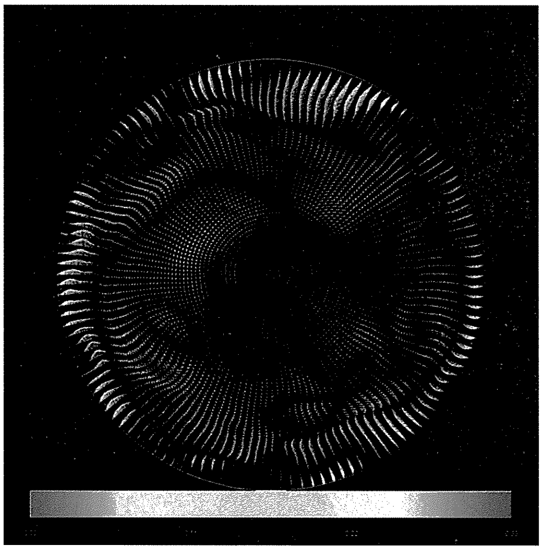
2). 森西 洋平, 大木 武志,
"周期的旋回乱流と回転円管内乱流の比較,"
第18回数値流体力学シンポジウム, 東京12月16日(2004), 発表予定

## 4. 今後の利用予定:

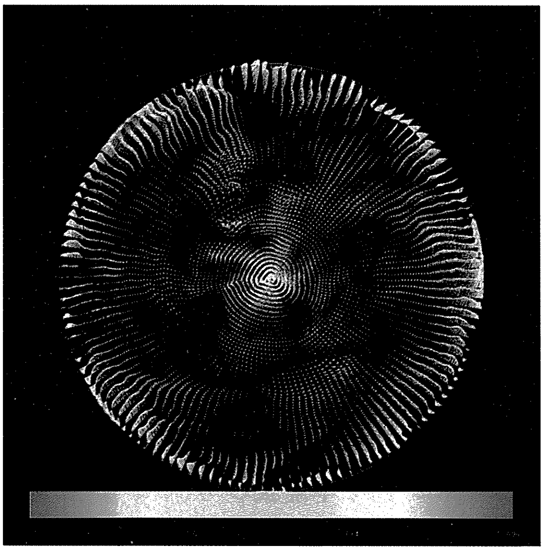
より実験に近い旋回乱流を模擬するために、下流の境界条件に自由流出条件を適用した静止円管内旋回乱流の DNS を実行する予定である。



(a) 円管内ポアズイユ乱流

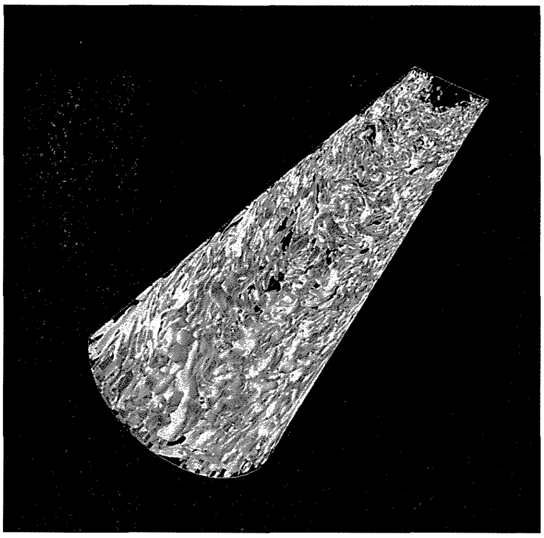


(b) 回転円管内乱流

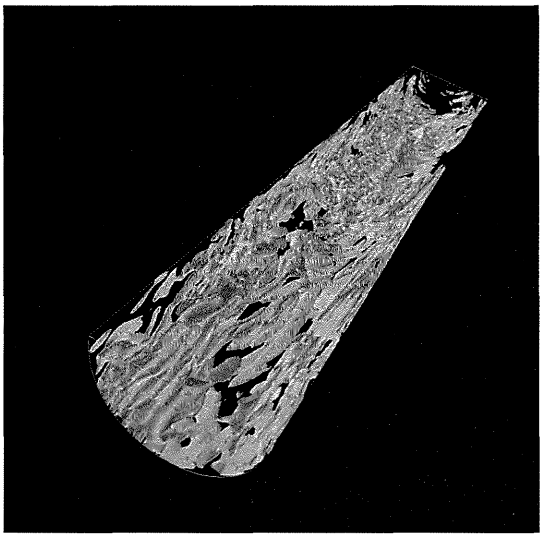


(b) 周期的旋回乱流

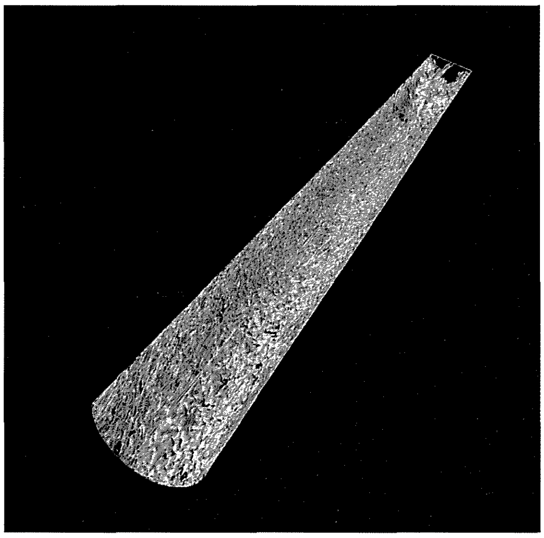
**図 1. 円管断面における変動速度ベクトル(バルクレイノルズ数 : $Re_m$=5300)**



(a)円管内ポアズイユ乱流



(b) 回転円管内乱流



(c) 周期的旋回乱流

**図 2. 速度勾配テンソルの第 2 不変量(バルクレイノルズ数 ： $Re_m$=5300)**

## 4.15.8 並列計算機を利用した高温超伝導体の研究に関するプログラム開発と大規模数値シミュレーション

並列処理基本システム開発グループ

安田 千寿

### 1．利用の概要（要約）:

高温超伝導体で観測されているストライプ状態を記述する有効模型において、スピンの自由度をループアルゴリズム量子モンテカルロ法で、電荷の自由度をワールドラインアルゴリズムで扱うことにより大規模な数値シミュレーションを行った。電荷の自由度の更新には従来のアルゴリズムを用いるため、膨大な計算時間を要する。そのため、本研究において超並列計算機は必要不可欠である。ストライプ状態における電荷秩序と隠れたスピン長距離秩序の相関を詳細に調べた結果、隠れたスピン秩序が「ホールを介したスピン間の有効相互作用」と「ストライプ秩序の再形成」の競合に支配されていることが明らかとなった。

### 2．利用の内容・結果:

反強磁性長距離秩序状態をもつ絶縁体にホールをドープすることにより高温超伝導が発現することが発見されてから、反強磁性とホールのダイナミクスの関係は広く興味を持たれてきた。本研究では、ホールをドープした磁性体で観測されているストライプ状態に注目し、ストライプを形成するストリングのダイナミクスと反強磁性長距離秩序との関係を調べた。ストライプ状態は反強磁性的なバックグラウンドの中で電荷がストリングを形成し、それらが量子的にゆらいでいる有効模型で記述される。この有効模型を量子モンテカルロシミュレーションで詳細に調べることにより、基底状態のスピン長距離秩序と電荷秩序の関係を明らかにした。基底状態の長距離秩序を調べるためには、絶対零度と見なせるほど低温において極めて大きな系のシミュレーションをしなければならない。また、ストリングは各モンテカルロステップで局所的にしか更新されないため、大きなモンテカルロステップ数を必要とする。このため、計算は極めて大規模なものとなる。一方、スピンの自由度に関するモンテカルロ計算には、ループアルゴリズムを用いた。この方法は、従来の計算アルゴリズムに存在した「臨界減速」の問題をほぼ完全に解決しており、より大きな系のより低温や臨界点近傍における物理量の精密な測定が可能である。本研究では、電荷の自由度に対するワールドラインアルゴリズムとスピンの自由度に対するループアルゴリズムを組み合わせたモンテカルロシミュレーションにおいて超並列計算機を用いた計算を行うことにより、基底状態の長距離秩序パラメータを初めて詳細に評価できた。ホールの運動エネルギー t を増加させると、ある臨界値で隠れたスピン長距離秩序をもつ相が誘起し、そのオーダーパラメータの値はホールを介したスピン間有効相互作用に起因して増加する。 ここで、「隠れたスピン長距離秩序状態」とは、ストリングのある

サイトを仮にないと考えたときに、スピンが反強磁性的に並んでいる状態を表わす。一方、ストライプ秩序のオーダーパラメータは、ストリングの運動エネルギーの利得のために小さくなる。この隠れたスピン長距離秩序とストライプ秩序はコンシステントな位相を維持している。しかし、さらに t を増加させると、ストリングの量子ゆらぎのためストライプの再形成が起こる。そのため、一旦増加した隠れたスピン秩序パラーメータは減少しはじめ、ある臨界値で無秩序相へ量子相転移する。以上のように、ホールの運動エネルギーを変化させた時、ストライプ秩序を特徴付ける隠れたスピン長距離秩序の度合いは、ホールを介したスピン間の有効相互作用とストライプの再形成の競合で決まっていることが分かった。

本研究では、ストリングのダイナミクスを強く制限した模型を用いている。その制限を緩和した模型を扱える計算アルゴリズムを開発することにより、より現実的な系のシミュレーションを行うことが今後の課題である。

### 3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）:

1)．「ストライプ状態における超伝導相関と磁性」
安田千寿、田中秋広、胡暁、
日本物理学会 第58回年次大会、東北大学、東北学院大学（2003年3月）.

2)．"Fluctuating Charge Stripes in an Antiferromagnetic Background",
Chitoshi Yasuda, Akihiro Tanaka, and Xiao Hu,
7th International Conference on Materials and Mechanisms of Superconductivity and High Temperature Superconductors (May 2003, Rio de Janeiro, Brazil).

3)．"Quantum Monte Carlo Study of Fluctuating Charge Stripes in High-Tc Superconductors",
Chitoshi Yasuda, Akihiro Tanaka, and Xiao Hu,
International Conference on Magnetism (July 2003, Roma, Italy).

4)．“Fluctuating Charge Stripes in an Antiferromagnetic Background”,
Chitoshi Yasuda, Akihiro Tanaka, and Xiao Hu,
Physica C, 408-410, 447 (2004).

5)．“Quantum Monte Carlo Study of Fluctuating Charge Stripes in High-Tc Superconductors”,

Chitoshi Yasuda, Akihiro Tanaka, and Xiao Hu,
J. Mag. Mag. Mater., 272-276, 193 (2004).

## 4.15.9 ITBL並列計算機における航空宇宙分野アプリケーションソフトウェアの性能評価

並列処理基本システム開発グループ
村山　光宏

**1．利用の概要（要約）：**

ITBL における航空宇宙分野アプリケーションソフトウェア開発へ向け、ITBL 並列計算機システム上におけるソフトウェアの動作・性能確認を行った。また、そのソフトウェアの解析精度信頼性向上のためのプログラム改良を行うために利用した。

**2．利用の内容・結果：**

使用したソフトウェアは航空機全機のような複雑三次元形状周りの計算格子生成が容易である非構造格子法を用いた空力解析ソフトウェアである。航空宇宙分野において、数値計算により高精度な流れ場解析を行うためには、対象となる実形状をより忠実に再現することが必要となる。非構造格子法は格子形状の任意性から複雑形状の融通性に優れており、複雑三次元形状物体においても容易に計算格子を生成することができる。しかし構造格子法と比較し、よりメモリと計算時間を必要とする。そこで領域分割プログラムにより計算領域全体を複数の領域(本解析では 64 領域)に分割し、その分割された各領域を、それぞれ別々のプロセッサ（本解析では 64CPU）に割り当てる。割り当てられた領域は隣の領域と分割境界における計算情報を交換しながら流体計算を行う。分割された計算領域との情報交換には MPI による並列処理を行う。

そのソフトウェアを用い、主に航空機操舵時における舵角変化に伴う航空機周りの空力特性変化を見積もる大規模解析と航空機高揚力装置周りの空力解析を行い ITBL 並列計算機システム上におけるソフトウェアの動作確認・性能評価を行った。
また、その解析結果を用いて本ソフトの解析精度信頼性向上のためプログラムの改良を行った。

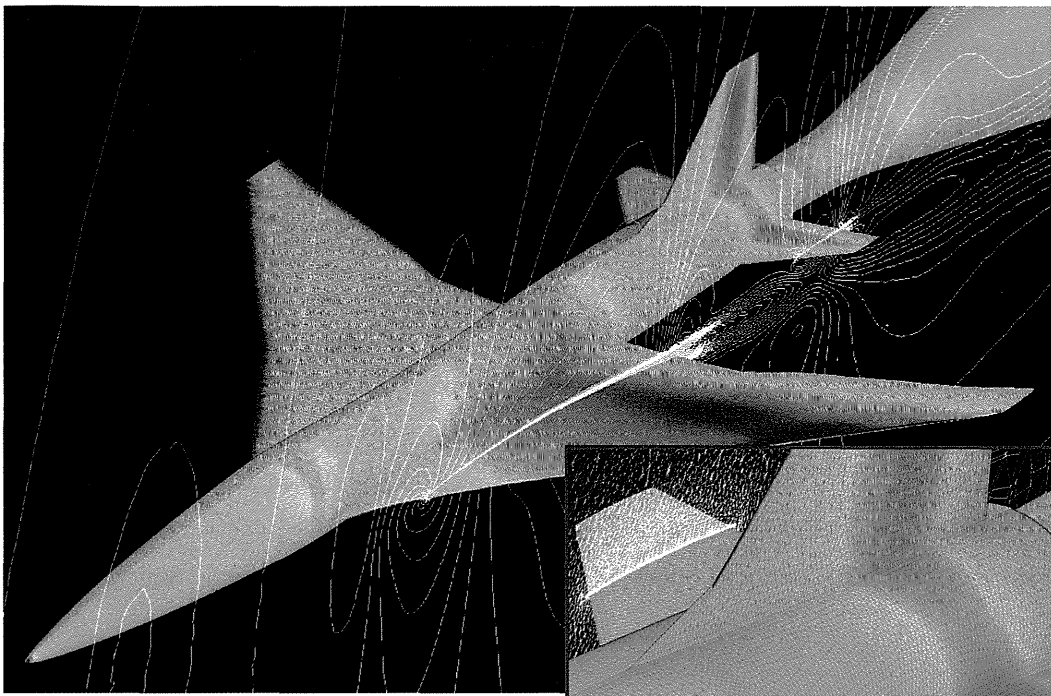
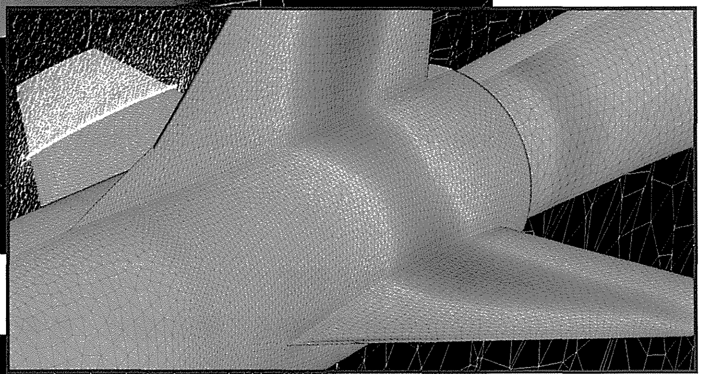



Fig. 1(a) 舵角 0 度

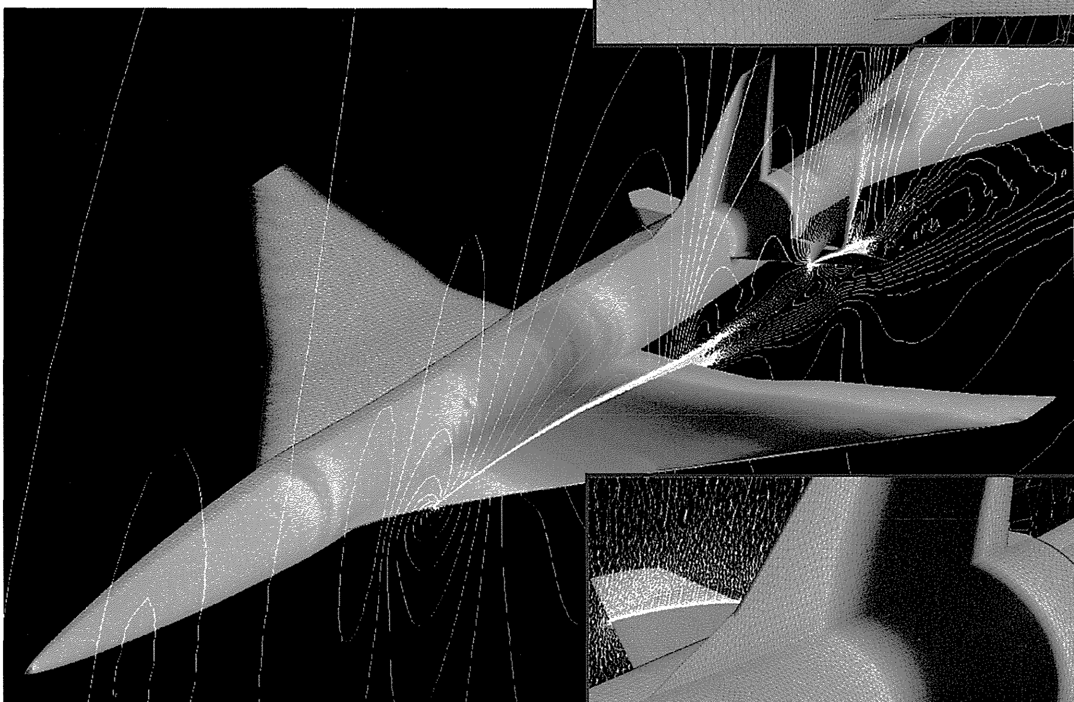
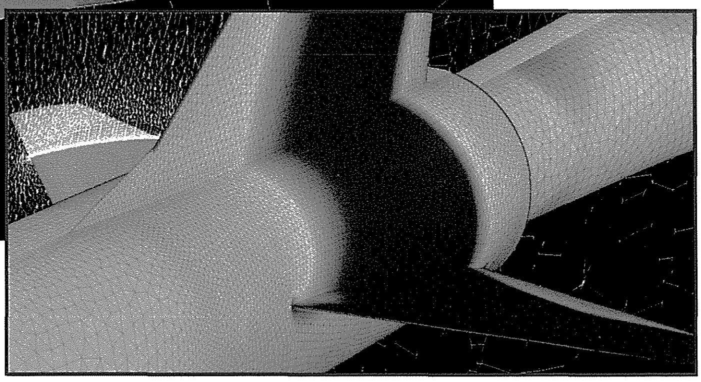



Fig. 1(b) 舵角 10 度

Fig. 1 NAL 小型超音速実験機の舵角変化に伴う空力特性変化の解析結果
(計算格子及び物体表面圧力分布・空間マッハ数分布(主流マッハ数:0.95、迎え角:0度))

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

1). Murayama, M., Ito, Y., Nakahashi, K., Matsushima, K., and Iwamiya, T., "Viscous Flow Computations of Aircraft with Changing Control Surface Deflection Using Unstructured Grids," AIAA Paper 2003-3660, 21st Applied Aerodynamics Conference, Orlando, Florida, June 2003.

2). Murayama, M., Nakahashi, K., Yamamoto, K., and Iwamiya, T., "Simulation of Aircraft with Changing Control Surface Deflection at Near-Sonic Speed," Proceedings of the 8th Japan-Russia Joint Symposium on Computational Fluid Dynamics, Sendai, Japan, September 2003, pp. 55-58.

3). Murayama, M., Nakahashi, K., Yamamoto, K., and Iwamiya, T., "Simulation of Aircraft with Changing Control Surface Deflection," Proceedings of the 4th Asia Workshop on Computational Fluid Dynamics, Tokyo, Japan, March 2004.

**4．今後の利用予定：**

ソフト開発及びその動作確認、性能評価に用いる予定

## 4.15.10　分子の電子励起状態に関する量子化学計算

ITBL 利用推進室
長谷川　淳也

**1．利用の概要（要約）：**

ITBL 計算機において分子の電子励起状態の計算を実行して、応用研究の有効性を検証する。

**2．利用の内容・結果：**

本年は光生物学における量子過程について、分子の電子励起状態計算により解明することを目標とした。結果としては(i)分子生物学で有用な分子マーカーであるGreen Fluorescent Protein の発光スペクトルについて研究した。(ii)植物の光センサーである phytochrome の光異性化過程について、異性体の構造を同定した。(iii)視覚や proton ポンプとして知られるレチナールタンパク質について、光吸収波長の分子制御の原理を明らかにした。

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

分子構造討論会 2004、広島、9/27-30、依頼講演
分子科学研究所研究会“分子機能の物理化学”、岡崎、7/21-23、招待講演
“Frontier of Molecular Science Developed by Advanced Spectroscopy”, Kolkata(India), 12/3-4, 招待講演

**4．今後の利用予定：**

今後も同様に励起状態の分子計算に活用する。

# 4.15.11 水素化マグネシウム MgH2 の脱水素反応プロセスに関する第一原理計算

ITBL 利用推進室
ディニョ　ウィルソン

## 1. 利用の概要（要約）：

本研究グループでは，「新規水素貯蔵材料の脱水素反応プロセスに関する研究」のテーマのもとに，微視的な観点からの新規水素貯蔵材料として有望視されている水素化マグネシウム $MgH_2$ の物性の第一原理計算手法による研究を実施している．特に，物質表面における分子の吸着，および脱離反応プロセスを系のポテンシャルエネルギー曲面(PES)から決定する手法の開発を行っている．ここでは，大規模かつ長時間の計算を，多数の原子を用いた系に対して多次元的に行う必要があり，大型並列計算機の利用が必要不可欠である．

## 2. 利用の内容・結果：

水素化マグネシウム $MgH_2$ の脱水素反応プロセスを解析するため，ITBL 計算機の PRIMEPOWER の 16 プロセッサを利用した並列計算を行った．続いて，3d 遷移金属元素を触媒として用い，Mg-H 結合に対する触媒活性を PRIMEPOWER の 16 プロセッサを利用した並列計算を行った．使用したプログラムは Gaussian 98 である．いずれの計算においても，密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理計算を多数の原子を用いた系に対して多次元的に行うため，多大な計算資源を要した．$MgH_2$ の脱水素反応プロセスを微視的な観点から解明するための第一原理計算は，ITBL 計算機の大型並列計算機により初めて可能となった．

本研究では，DFT に基づいた第一原理計算を行い，ルチル型正方晶構造内で構造最適化した $(MgH_2)_5$ クラスターの物性解析を行った．まず，系の PES から求めた反応経路において，$MgH_2$(001)表面内の $H_2$ 分子脱離に対する活性化エネルギーを見積もると比較的大きく 3.30 eV であった（図 1）．初期状態における Mg 原子と H 原子の全原子電荷から，Mg-H 結合がほぼ完全なイオン結合で結ばれていることがわかり，これが大きな脱離障壁の原因になっていると考えられる．

続いて，メカニカルアロイングされた系を微視的な観点から解明するため，3d 遷移金属元素(Sc-Zn)を触媒として，$MgH_2$ の Mg-H 結合に対する触媒活性を，DFT に基づいた第一原理計算を行うことにより解析した．各 3d 遷移金属元素を相互作用させたときの $MgH_2$ の H 原子を引き抜く反応に対する系のポテンシャルエネルギー曲線(図 2)から，Sc と Ni が比較的大きな触媒活性をもつことがわかった．これは Sc と Ni の電子配置，とくに 3d 軌道の電子の詰まり方に大きく依存していることを解明した．

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

1)．Muneyuki Tsuda, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi and Hideaki Kasai, "*Ab Initio* Study of $H_2$ Desorption from Magnesium Hydride $MgH_2$ Cluster", Journal of the Physical Society of Japan 73 (2004) 2628.

2)．Muneyuki Tsuda, Wilson Agerico Diño, Hideaki Kasai, Hiroshi Nakanishi and Hiroshi Aikawa, "3d transition metal catalytic activity for magnesium hydride $MgH_2$", submitted.

3)．津田宗幸，Wilson Agerico Diño，中西寛，笠井秀明，「水素化マグネシウム $MgH_2$ の水素放出特性」（ポスター），日本物理学会第 59 年次大会，九州大学箱崎地区，2004 年 3 月．

4)．津田宗幸，Wilson Agerico Diño，中西寛，笠井秀明，「3d 遷移金属触媒を用いた水素化マグネシウム $MgH_2$ の水素放出特性」（口頭），日本物理学会 2004 年秋季大会，青森大学，2004 年 9 月．

5)．笠井秀明，中西寛，Wilson Agerico Diño，津田宗幸，特願 2004-316807．

**4．今後の利用予定：**

今後は，これまでの研究成果で得られた知見を基に，第一原理計算により $MgH_2$ をベースにした高水素放出特性をもつ水素貯蔵材料をデザインする．したがって，さらに大規模かつ長時間の計算を継続する予定である．

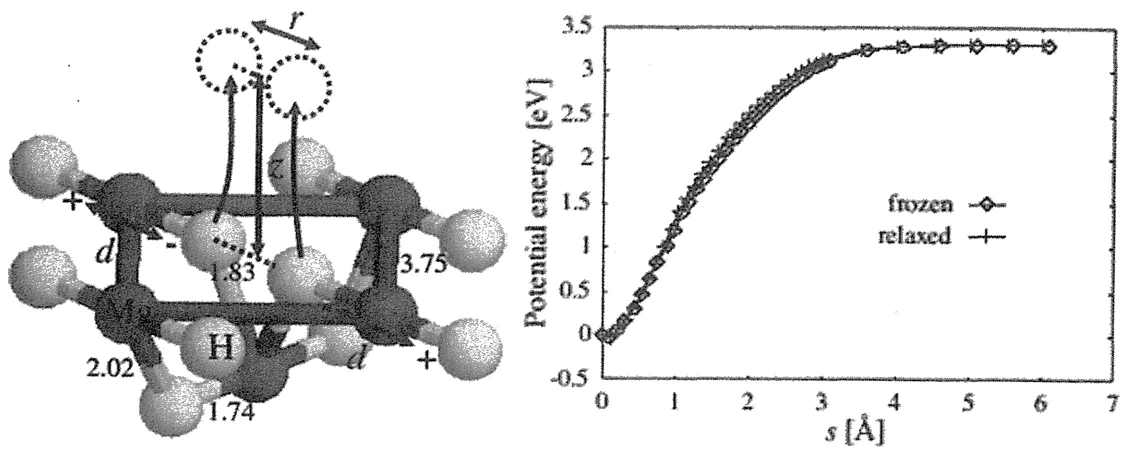



図１．水素化マグネシウム $MgH_2$ からの $H_2$ 脱離に対する系のポテンシャルエネルギー曲線(PEC)．ここで $s$ はPESの最小エネルギーに沿った反応座標である．

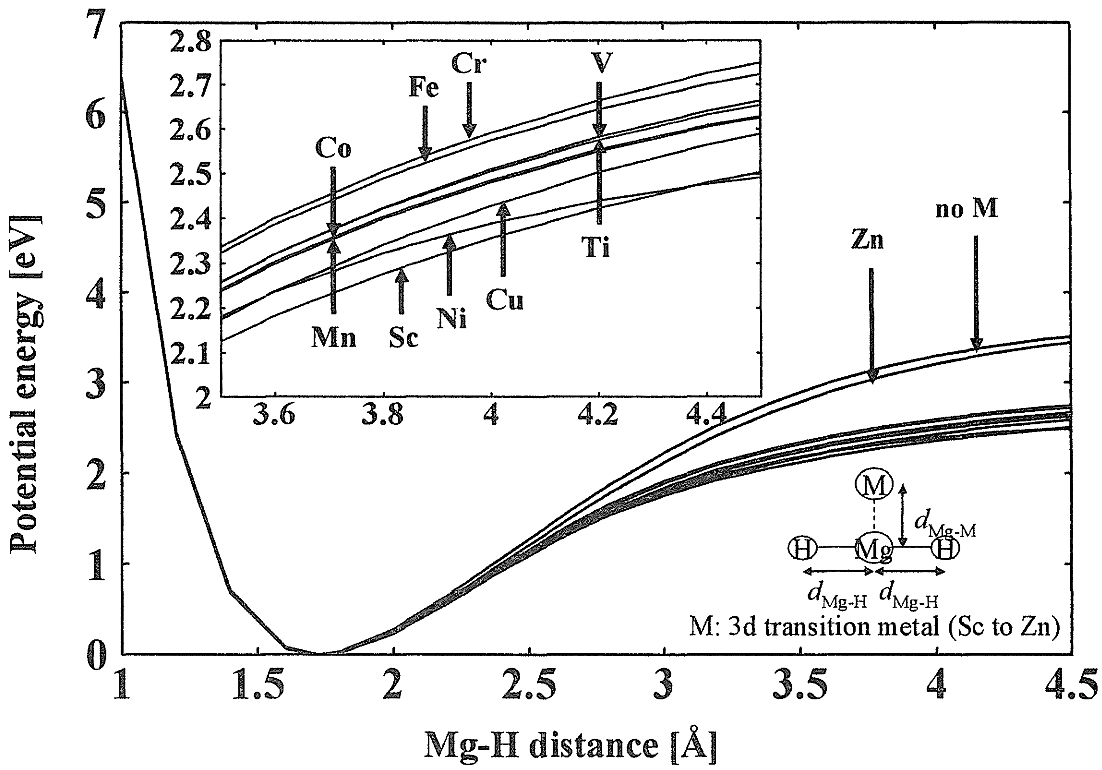



図２．3d遷移金属元素(Sc-Zn)を触媒としたときの $MgH_2$ のH原子の引き抜き反応に対する系のポテンシャルエネルギー曲線．

# 4.15.12　シクロヘキサンの脱水素反応プロセスに関する第一原理計算

ITBL利用推進室
笠井　秀明

## 1．利用の概要（要約）：

本研究グループでは，「新規水素貯蔵材料の脱水素反応プロセスに関する研究」のテーマのもとに，微視的な観点からの新規水素貯蔵材料として有望視されているシクロヘキサンの物性の第一原理計算手法による研究を実施している．特に，物質表面における分子の吸着，および脱離における反応プロセスを系のポテンシャルエネルギー曲面(PES)から決定する手法の開発を行っている．ここでは，大規模かつ長時間の計算を，多数の原子を用いた系に対して多次元的に行う必要があり，大型並列計算機の利用が必要不可欠である．

## 2．利用の内容・結果：

Pt触媒を用いたシクロヘキサンの脱水素反応プロセスを解析するため，ITBL計算機のPRIMEPOWERの16プロセッサを利用した並列計算を行った．続いて，触媒のスピンの影響を解析するため，Ni触媒を用いたシクロヘキサンの脱水素反応プロセスをPRIMEPOWERの16プロセッサを利用した並列計算を行った．使用したプログラムはGaussian 98である．いずれの計算においても，密度汎関数理論(DFT)に基づく第一原理計算を多数の原子を用いた系に対して多次元的に行うため，多大な計算資源を要した．遷移金属触媒を用いたシクロヘキサンの脱水素反応プロセスを微視的な観点から解明するための第一原理計算は，ITBL計算機の大型並列計算機により初めて可能となった．

本研究ではDFTに基づいた第一原理計算を行い，遷移金属M(M: Pt, Pd, Ni, Cu)触媒を用いたときのシクロヘキサンの脱水素反応プロセスを系のPESから導いた（図1）．その結果，シクロヘキサンのM原子への接近に伴い，まずH原子はM原子に引き寄せられ，H-M結合が形成される．次に，M原子からシクロヘキシル($C_6H_{11}$)が分離する過程でC-H結合が解離することがわかった．この反応プロセスはM原子数に依存しない．また，このM原子の触媒作用は，M原子と直接相互作用しているC-H結合にのみ影響する．

さらに，シクロヘキサンの脱水素反応触媒にある程度スピン偏極させたNiを用いると，アップスピン電子がNiから分離するシクロヘキシル($C_6H_{11}$)に移動し，アップスピン電子同士の反発が起こるため，シクロヘキサンの脱水素反応が進行しやすくなることがわかった（図2）．このことにより，Ni表面のスピンを制御することによって，シクロヘキサンの脱水素反応プロセス，およびNiの触媒作用を制御することが可能になると考えている．

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

1). Muneyuki Tsuda, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi and Hideaki Kasai,
"*Ab Initio* Study of Cyclohexane Dehydrogenation with a Transition Metal (Pt, Pd, Ni and Cu) Atom",
Journal of the Physical Society of Japan 73 (2004) 1281.

2). Muneyuki Tsuda, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi and Hideaki Kasai,
"Catalytic Reactivity of a Transition Metal (Pt, Pd, Ni and Cu) Atom on Cyclohexane Dehydrogenation",
Journal of the Vacuum Society of Japan 47 (2004) 155.

3). Muneyuki Tsuda, Wilson Agerico Diño, Susumu Watanabe, Hiroshi Nakanishi and Hideaki Kasai,
"Cyclohexane dehydrogenation catalyst design based on spin polarization effects",
Journal of Physics: Condensed Matter, in press.

4). Muneyuki Tsuda, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi, Susumu Watanabe and Hideaki Kasai,
"First Principles Interpretation of Cyclohexane Dehydrogenation Process Using Pt",
Japanese Journal of Applied Physics, in press.

5). Muneyuki Tsuda, Wilson Agerico Diño, Susumu Watanabe, Hiroshi Nakanishi and Hideaki Kasai,
"Cyclohexane Dehydrogenation Process Design Using Ni -Spin Polarization Effects-",
e-Journal of Surface Science and Nanotechnology 2 (2004) 200.

6). 津田宗幸, Wilson Agerico Diño, 中西寛, 笠井秀明,
「Pt(111)上におけるシクロヘキサンの脱水素反応に関する理論的研究」(ポスター),
日本物理学会第58年次大会, 仙台国際センター, 2003年3月.

7). 津田宗幸, Wilson Agerico Diño, 中西寛, 笠井秀明,
「遷移金属(Pt, Pd, Ni, Cu)表面上におけるシクロヘキサンの脱水素反応に関する理論的研究」(ポスター),
真空に関する連合講演会, 機械振興会館, 2003年11月.

8). 津田宗幸, Wilson Agerico Diño, 中西寛, 笠井秀明,
「Pt(111)表面上におけるシクロヘキサンの脱水素反応に関する理論的研究II」(口頭),

日本物理学会第59年次大会，九州大学箱崎地区，2004年3月.

9).津田宗幸，Wilson Agerico Diño，渡辺晋，中西寛，笠井秀明，
「Niクラスターを用いたシクロヘキサンの脱水素反応におけるスピン分極効果」(ポスター)，
日本物理学会2004年秋季大会，青森大学，2004年9月.

10).Muneyuki Tsuda, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi and Hideaki Kasai, "Spin Polarization Effects on Cyclohexane Dehydrogenation with a Ni Atom" (poster),
International Conference on Nanospintronics Design and Realization, International Institute for Advanced Studies, Kyoto, Japan, May, 2004.

11).Muneyuki Tsuda, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi and Hideaki Kasai, "Theoretical Study of Cyclohexane Dehydrogenation on Pt(111) and Ni(111)" (poster)
16th International Vacuum Congress (IVC-16), Cinema Festival Palace, Venice, Italy, June, 2004.

## 4. 今後の利用予定：

今後は，これまでの研究成果で得られた知見を基に，第一原理計算によりシクロヘキサンをベースにした高水素放出特性をもつ水素貯蔵材料をデザインする．したがって，さらに大規模かつ長時間の計算を継続する予定である．

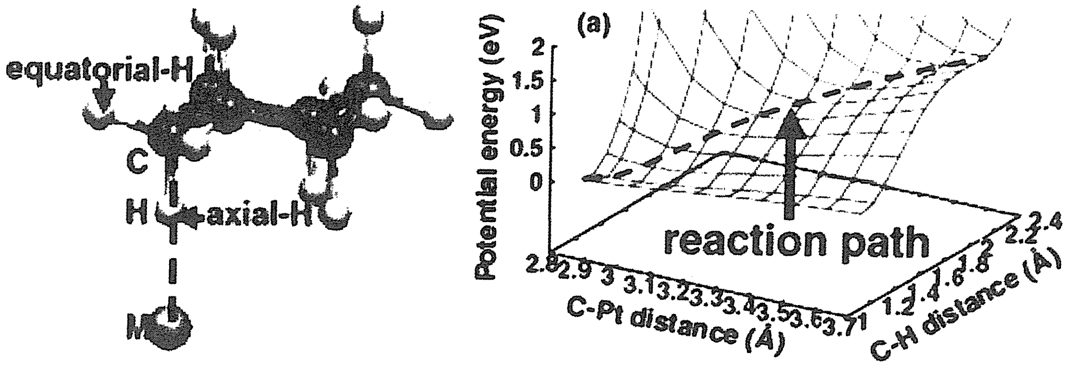



図1．シクロヘキサンのH原子の引き抜き反応に対する系のポテンシャルエネルギー曲面(PES).

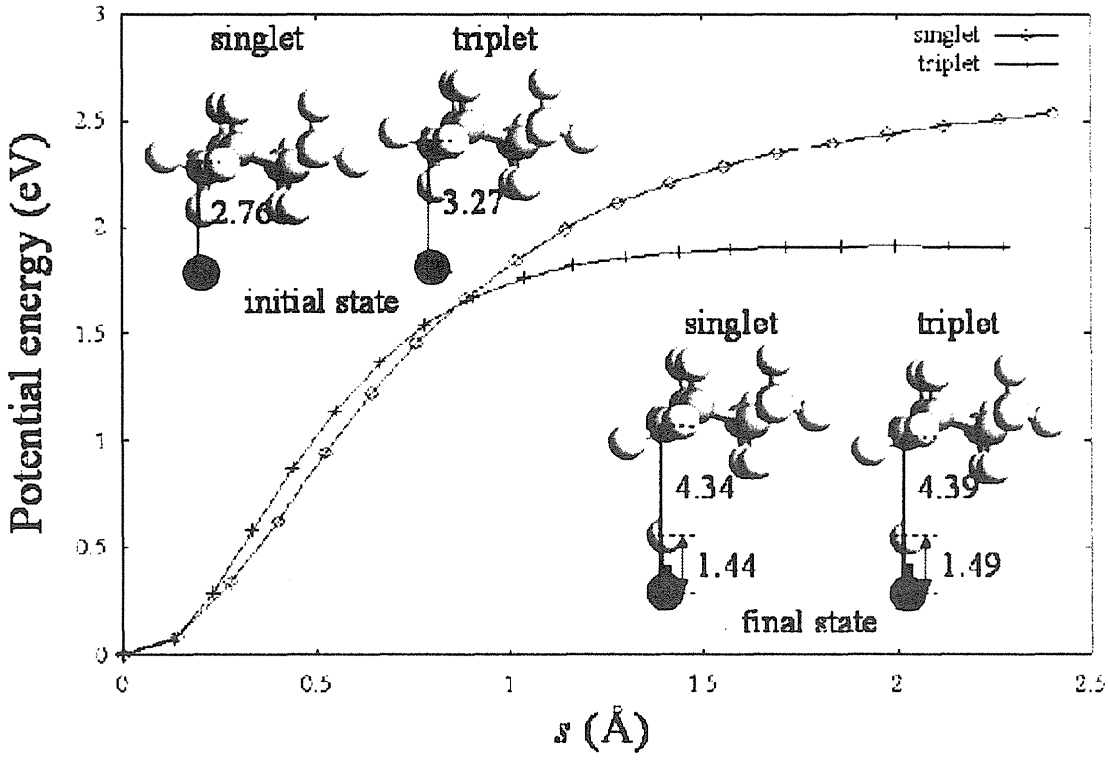



図2．系のスピン状態がsinglet, およびtripletシクロヘキサンのH原子の引き抜き反応に対する系のポテンシャルエネルギー曲線(PEC)．ここで$s$はPESの最小エネルギーに沿った反応座標である.

# 4.15.13 磁性原子内包カーボンナノチューブの電子構造に関する第一原理計算

ITBL利用推進室
笠井　秀明

## 1．利用の概要（要約）：

本研究グループでは、「新規ナノスピントロニクスデバイスのデザイン」のテーマのもとに、その材料として有望視されている磁性原子内包カーボンナノチューブの物性の解明を、第一原理計算手法を用いて行っている。鉄、コバルトといった磁性原子を内包したカーボンナノチューブのバンド構造などの電子状態を決定するためには大規模な計算が必要であり、本研究には大型並列計算機の利用が必要不可欠である。

## 2．利用の内容・結果：

磁性原子内包カーボンナノチューブの電気的性質および磁気的性質を解析するため、ITBL 計算機の PRIMEPOWER の 16 プロセッサを利用した並列計算を行った。計算において、密度汎関数理論（DFT）に基づく第一原理計算を多数の原子を用いた系に対して行うため、多大な計算資源を要した。磁性原子内包カーボンナノチューブの詳細な物性はITBL 計算機の大型並列計算機によって初めて可能となった。

本研究では、DFT に基づいた第一原理計算を行い、磁性原子内包カーボンナノチューブを構造最適化し、その物性の解析を行った。金属的性質を持つことで知られているカイラル指数(3, 3) カーボンナノチューブ（直径約 4Å）に鉄を内包（図１）すると、半導体性質を持つことがわかった（図２）。さらに、直径が大きい(5～8Å程度)のカーボンナノチューブに鉄を内包した場合は、強磁性金属となることがわかった。これらの物性の原因は鉄原子と炭素原子の結合の強さに起因するものと考えられる。

## 3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：

1)．Masanori Kisaku, MD. Mahmudur Rahman, Tomoya Kishi, Daisuke Matsunaka, Tanglaw Abat Roman, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi and Hideaki Kasai
"Diameter size-dependent magnetic and electronic properties of single-walled carbon nanotubes with Fe nanowires", Japanese Journal of Applied Physics, in press.

2)．MD. Mahmudur Rahman, Masanori Kisaku, Tomoya Kishi, Daisuke Matsunaka, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi and Hideaki Kasai
"*ab initio* study of magnetic and electronic properties of Fe-filled carbon nanotube", Journal of Physics: Condensed Matter (2004) in press.

3). MD. Mahmudur Rahman, Masanori Kisaku, Tomoya Kishi, Tanglaw Abat Roman, Wilson Agerico Diño, Hiroshi Nakanishi and Hideaki Kasai
"Electric and magnetic properties of Co-filled carbon nanotube", submitted.

4). 箕作真鑑, 岸智弥, 松中大介, W.A. Diño, 中西寛, 笠井秀明
「Fe内包単層カーボンナノチューブの安定構造および磁性」(口頭)
日本物理学会第59年次大会、九州大学箱崎地区, 2004年3月.

5). M. Kisaku, M. M. Rahman, T. Kishi, D. Matsunaka, W.A. Diño, H. Nakanishi, H. Kasai
「*AB INITIO* STUDY OF MAGNETIC PROPERTIES OF Fe-FILLED CARBON NANOTUBE」(ポスター)
International Conference on Nanospintronics Design and Realization, 2004年5月

6). 箕作真鑑, 岸智弥, 松中大介, W.A. Diño, 中西寛, 笠井秀明
「磁性原子ナノワイヤー内包単層カーボンナノチューブの磁性」(口頭)
日本物理学会2004年秋季大会、青森大学, 2004年9月.

**4. 今後の利用予定:**

今後は、これまでの研究成果で得られた知見を基に、第一原理計算により、磁性原子内包カーボンナノチューブを用いたナノスピントロニクスデバイスのデザインを行う。したがって、さらに大規模かつ長時間の計算を継続する予定である。

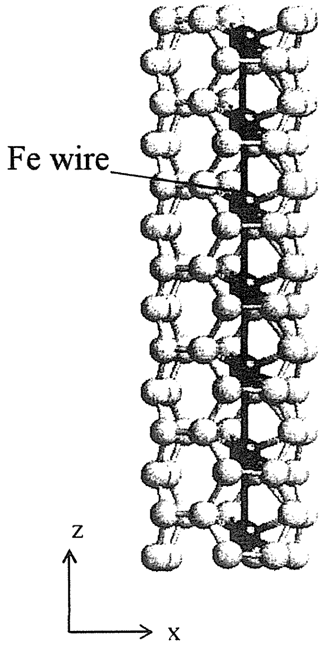



図1.　鉄原子内包カーボンナノチューブ(3, 3)の最適化後の構造

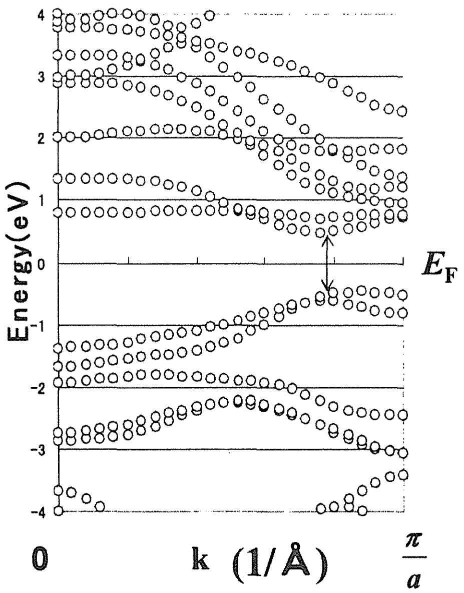



図2.鉄原子内包カーボンナノチューブ(3, 3)のバンド構造

# 4.15.14 ITBL 並列計算機を利用した大規模化学計算 -テロメア DNA の DFT 計算-

ITBL 利用推進室

三谷　昌輝

## 1. 利用の概要（要約）:

日本原子力研究所計算科学技術推進センター情報システム管理課（関西研究所駐在）の依頼により、ITBL 並列計算機を利用した量子化学計算プログラム Gaussian98 による大規模計算に関して、テロメア DNA モデル分子を用いて SCF 計算に対する新旧コンパイラの計算速度および並列化効率について性能比較を行い、新コンパイラによる再コンパイル版の Gaussian98 を有効に活用するための基礎データを収集した。

## 2. 利用の内容・結果:

ITBL 技術普及・利用動向調査委員会計算化学分科会では、ITBL 並列計算機を利用した分子設計・反応設計の現状と将来を議論することを通して、高精度量子化学計算および大規模量子化学計算を実現するための可能性を検討してきた。平成１５年度の三重大学グループは、DNA モデル分子を用いて量子化学計算プログラム Gaussian98 による大規模計算の可能性を検討した。

Na イオンを含有するテロメア DNA モデル分子 $C_{60}H_{60}N_{60}O_{12}Na_2^{2+}$（194 原子・956 電子・2138 基底）を用いて、ITBL 並列 Gaussian98 の SCF 計算に対する計算速度および並列化効率に関する調査を実施した。計算方法は HF/6-31G(d) および B3LYP/6-31G(d) を適用し、ノンラージページ仕様 Gaussian98RevA.11.3 により pg ジョブクラスで 1,2,4,8,16,32 プロセッサ並列の計算を実行した。モデル分子（図１）は、プロテイン・データバンクに登録されている構造からグアニン 12 量体を取り出し水素原子を付加して作成した。

DFT 計算に対する新旧コンパイラによる計算速度および並列化効率の性能比較を、図２および図３に示す。計算速度に関しては、各並列計算において、新コンパイラは旧コンパイラの 1.8-1.9 倍の速度向上を実現している。しかしながら並列化効率に関しては、コンパイラの新旧に関係なく 8 プロセッサ以上の並列計算において、プロセッサ数に見合うだけの計算速度の向上は得られなかった。HF 計算においても、計算速度および並列化効率について、同様の結果が得られた。並列化効率が悪いことの原因を検討した結果、Gaussian98 の link502（SCF 部分）が完全には並列化されていないことが確認された。

本調査の結果から、ITBL 並列計算機を利用した Gaussian98 による SCF 計算は、2000 基底程度の系に対して、現実的な計算時間で実行可能であることが明らかとなった。数千の基底関数を含む巨大分子系の第一原理量子化学計算を単一のワークステーションで実行することは不可能であり、ITBL 並列計算機のような大型計算機を利用す

ることは巨大分子系の電子状態を量子化学的手法により研究するうえで不可欠である。今回、ITBL 並列計算機は実用的な量子化学計算システムとして機能することが確認されたので、量子化学・計算化学の分野における大型計算機の重要性は今後さらに大きくなっていくと考えられる。

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）**：

1)、ITBL 技術普及・利用動向調査委員会計算化学分科会オープンワークショップ（2004 年 1 月 10 日）

**4．今後の利用予定**：

協力研究（ITBL 環境における分子軌道法コード群の共有化の検討）として、ITBL 技術普及・利用動向調査委員会計算化学分科会における委託調査を継続する。三重大学グループでは、量子化学計算プログラム Gaussian の最新版である Gaussian03 を利用し、テロメア DNA のモデル分子としてグアニン 12 量体の構造最適化を行い、グアニン積層様式に対する安定な分子間配向を検討する。

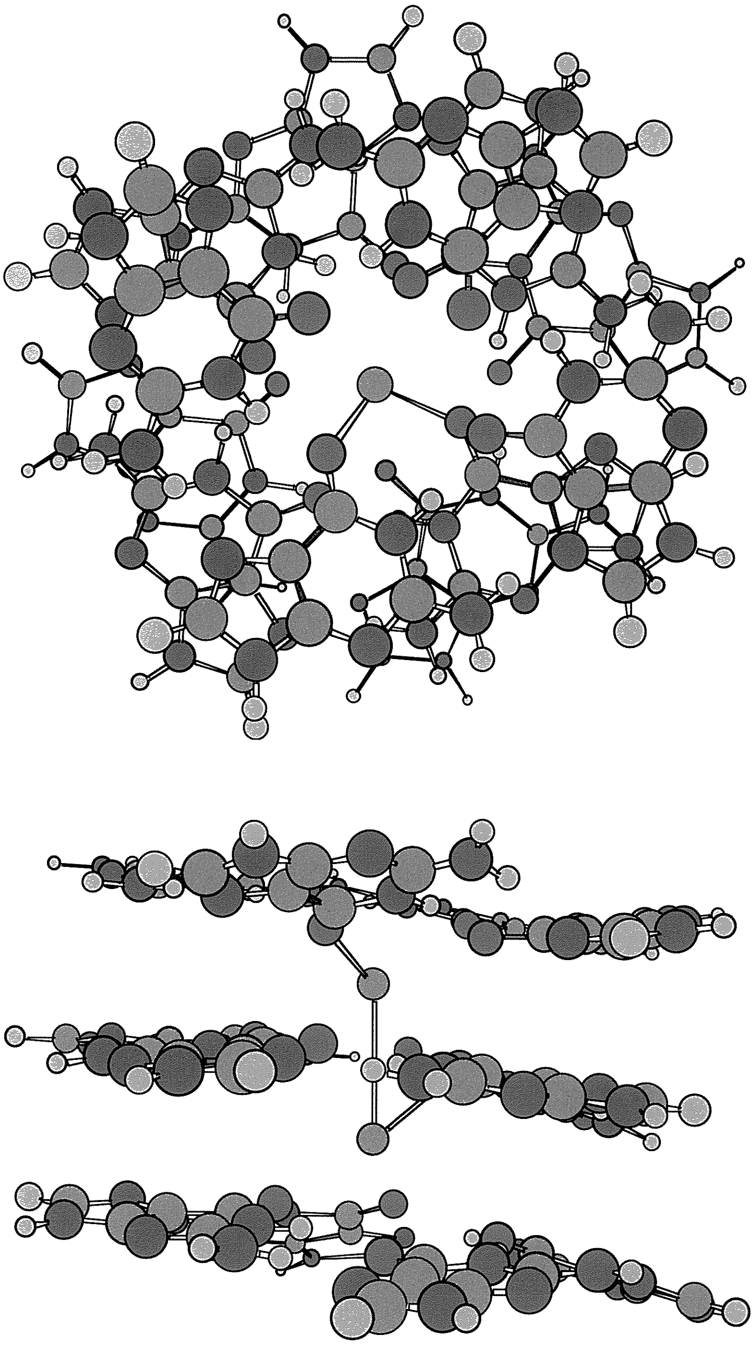


図１．$Na^{+}$含有テロメア DNA のモデル分子

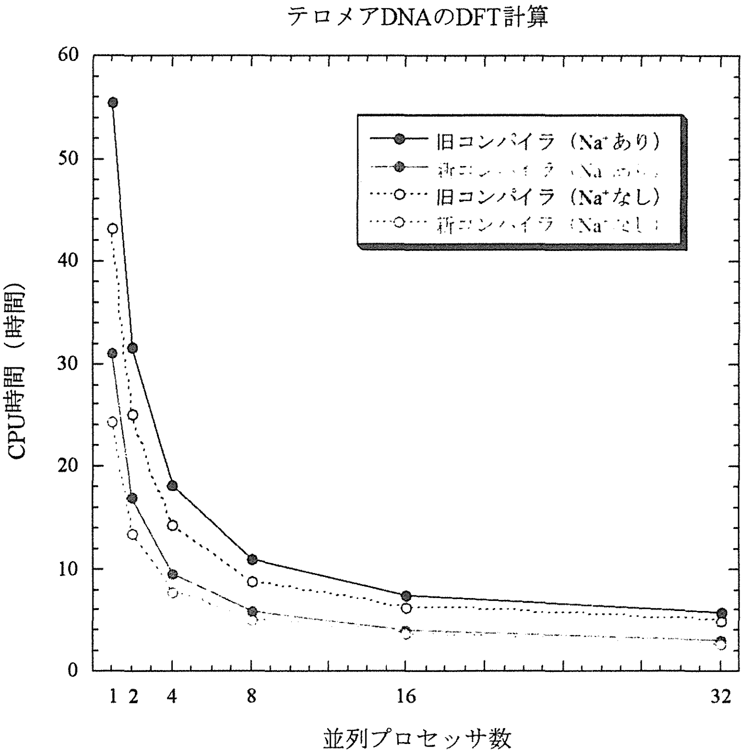



図２．新旧コンパイラによる計算速度

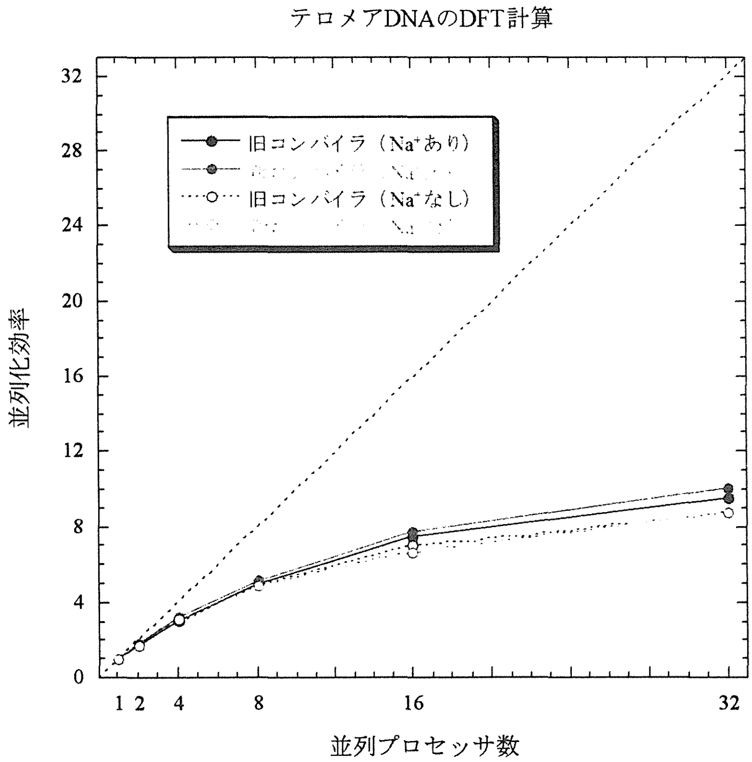



図３．新旧コンパイラによる並列化効率

## 4.15.15 強相関電子系の物理計算

ＩＴＢＬ利用推進室
馬越　健次

**1．利用の概要（要約）：**

ランチョス法による数値的厳密対角化を巨大次元を持つ疎行列に対して実行し、固有ベクトルと固有値の一部を求めた。プログラム言語は Fortran90 を使用し、OpenMP によるスレッド並列を使用して並列化計算を実現した。

2．利用の内容・結果：

ハバード模型は金属強磁性を記述し得る最も簡単な模型の一つである。その中でも、次近接ホッピングを持つ 1 次元鎖には、電子間相互作用が中間的な大きさの場合で、ハーフフィリング近傍の金属相において部分強磁性の基底状態が現れることが分かっている。この基底状態の振る舞いを調べることは、金属強磁性の性質をより良く理解するための格好の題材であると考えられる。

我々は、ホールドープされた金属状態からモット絶縁体であるハーフフィリングに至るこの模型の金属絶縁体転移（モット転移）に着目した。モット転移に関するこれまでの研究の多くは反強磁性的な基底状態を示す場合に行われているのに対して、この模型では、部分強磁性を持つ金属とモット絶縁体の間の転移を調べることが出来るからである。

この部分強磁性は電子相関効果によって出現するが、電子相関は最も難しい多体問題の一つである。そのため、我々は電子相関効果を丸ごと取り込む直接数値シミュレーションである少数系の厳密対角化の計算を実行した。その際、並列化計算の技術を活用することで、取り扱える系を出来るだけ大きくする試みを行った。そのような計算の結果、この金属絶縁体転移の電荷圧縮率がこれまでに知られていたものと異なる指数で発散することなどが明らかとなった。

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

無し

**4．今後の利用予定：**

ITBL 計算機でなければできないサイズに計算を広げる必要が有るので利用を予定している。

## 4.15.16 ITBL 並列計算機を利用した量子化学計算プログラム Gaussian98 による大規模計算

ITBL 利用推進室
吉岡 泰規

### 1. 利用の概要（要約）:

日本原子力研究所計算科学技術推進センター情報システム管理課（関西研究所駐在）の依頼により、ITBL 並列計算機を利用した量子化学計算プログラム Gaussian98 による大規模計算に関して、テロメア DNA モデル分子を用いて Force 計算に対する新コンパイラの計算速度および並列化効率について性能評価を行い、新コンパイラによる再コンパイル版の Gaussian98 を有効に活用するための基礎データを収集した。

### 2. 利用の内容・結果:

ITBL 技術普及・利用動向調査委員会計算化学分科会では、ITBL 並列計算機を利用した分子設計・反応設計の現状と将来を議論することを通して、高精度量子化学計算および大規模量子化学計算を実現するための可能性を検討してきた。平成１５年度の三重大学グループは、DNA モデル分子を用いて量子化学計算プログラム Gaussian98 による大規模計算の可能性を検討した。

K および Na イオンを含有するテロメア DNA モデル分子 $C_{60}H_{60}N_{60}O_{12}K_2^{2+}$ (194 原子・972 電子・2146 基底) および $C_{60}H_{60}N_{60}O_{12}Na_2^{2+}$ (194 原子・956 電子・2138 基底) を用いて、ITBL 並列 Gaussian98 の Force 計算に対する計算速度および並列化効率に関する調査を実施した。計算方法は B3LYP/6-31G(d) とし、ノンラージページ仕様 Gaussian98RevA.11.3 により pg ジョブクラスで 1,2,4,8,16,32 プロセッサ並列の計算を実行した。モデル分子（図１および図２）は、プロテイン・データバンクに登録されている構造からグアニン 12 量体を取り出し水素原子を付加して作成した。

新コンパイラによる再コンパイル版の Gaussian98 を用いた、$Na^+$含有テロメア DNA モデル分子に対する Force 計算部分の計算時間を、表１に示す。計算時間は並列化するプロセッサ数に対応して 1/2 倍ずつ短縮されており、Gaussian98 の link703 (1 次微分) は link502 (SCF 計算) とは異なり完全に並列化されていることが確認された。また、金属イオンおよび水素原子の構造最適化（186 自由度）を実行した結果、$K^+$含有テロメア DNA モデル分子を１日程度の計算時間で、$Na^+$含有テロメア DNA モデル分子を 4 日程度の計算時間で完了することができた。

本調査の結果から、ITBL 並列計算機を利用した Gaussian98 による DFT 計算は、2000 基底程度の系に対して、現実的な計算時間で実行可能であることが明らかとなった。数千の基底関数を含む巨大分子系の第一原理量子化学計算を単一のワークステーションで実行することは不可能であり、ITBL 並列計算機のような大型計算機を利用することは巨大分子系の電子状態を量子化学的手法により研究するうえで不可欠であ

る。今回、ITBL 並列計算機は実用的な量子化学計算システムとして機能することが確認されたので、量子化学・計算化学の分野における大型計算機の重要性は今後さらに大きくなっていくと考えられる。

**3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

1）．ITBL 技術普及・利用動向調査委員会計算化学分科会オープンワークショップ（2004 年 1 月 10 日）

2）．ITBL 技術普及・利用動向調査委員会総合シンポジウム（2004 年 2 月 7 日）

**4．今後の利用予定：**

協力研究（ITBL 環境における分子軌道法コード群の共有化の検討）として、ITBL 技術普及・利用動向調査委員会計算化学分科会における委託調査を継続する。三重大学グループでは、量子化学計算プログラム Gaussian の最新版である Gaussian03 を利用し、テロメア DNA のモデル分子としてグアニン 12 量体の構造最適化を行い、グアニン積層様式に対する安定な分子間配向を検討する。

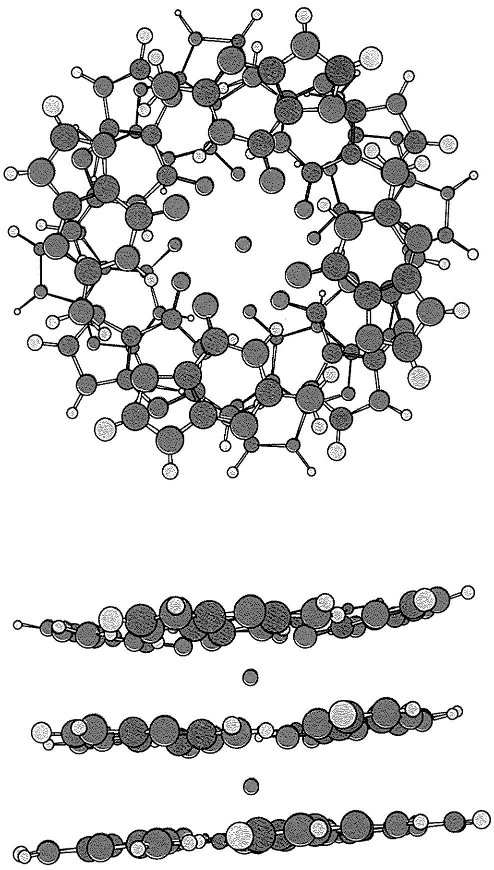


図１．$K^+$含有テロメア DNA のモデル分子

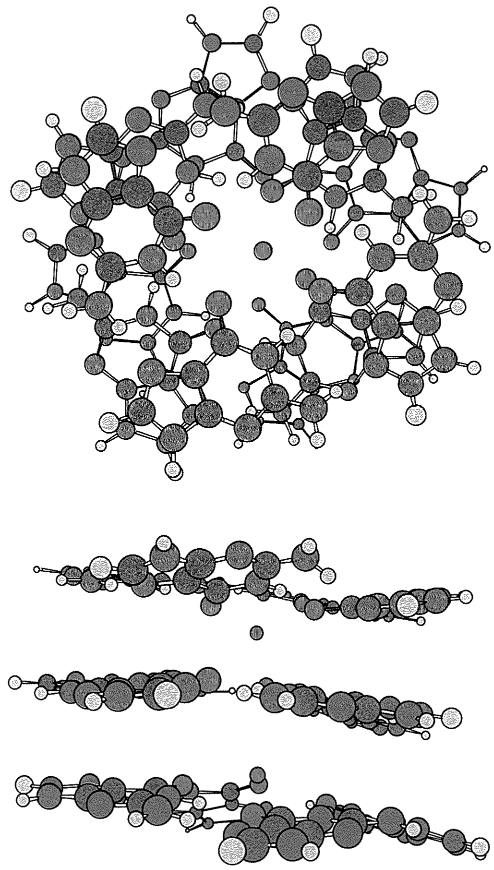


図２．$Na^+$含有テロメア DNA のモデル分子

表１．新コンパイラによる Force 計算の計算速度

| | CPU 時間（秒） | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 並列プロセッサ数 | 1 | 2 | 4 | 8 | 16 | 32 |
| link701 | 51.0 | 38.7 | 30.8 | 25.8 | 24.9 | 25.2 |
| link703 | 53867.0 | 28054.7 | 13542.9 | 6206.7 | 3127.4 | 1571.2 |
| link716 | 18.8 | 20.8 | 18.6 | 17.1 | 17.0 | 17.3 |

# 4.15.17 ITBL 計算機への各種ソフトウェアの移植、利用環境の整備

ITBL 利用推進室
木村　英雄

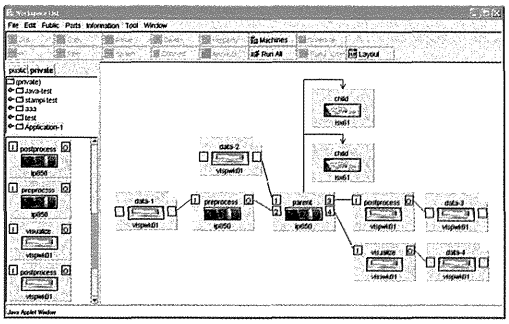
## 1．利用の概要（要約）：

日本原子力研究所と関係機関（理化学研究所、航空宇宙科学研究機構等）で進められている ITBL プロジェクトにおいて、各機関の保持する計算機資源を GRID 技術を用いて連結することによって計算機上に仮想研究環境を構築し、研究の効率化、高度化を目指す試みがなされている。ITBL プロジェクトにおいて、ITBL 利用推進室はソフトウェア等の共有化整備、HPC 技術の利用普及、情報科学技術分野の人材育成を行っているが、ITBL プロジェクトで開発された GRID 技術・ミドルウェアの利用普及と応用ソフトウェアを多数のユーザーによって使用可能にするために汎用解析ソフトウェアの移植・検証を行った。

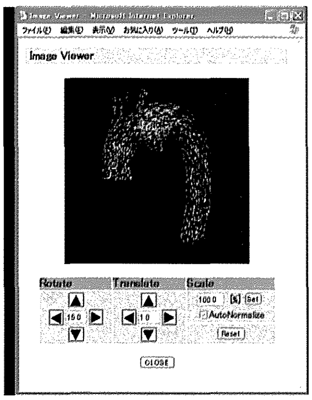
## 2．利用の内容・結果：

（1） ITBL 基盤ソフトウェアの利用方法の習得

ITBL プロジェクトにおいて、ネットワーク上に分散しているアーキテクチャの異なる計算機を ITBL 基盤ソフトウェアと呼ばれるミドルウェアによって接続し、ユーザーから計算機を仮想的に単一の計算機とみなせる環境を提供している。ITBL 利用推進室の活動として、原研関西研に設置された ITBL 共同利用センターにおいての大学や企業の共同研究者に対する ITBL 基盤ソフト利用補助・技術サポートのために ITBL 計算機上で ITBL 基盤ソフトの機能（WEB インターフェースを用いたシングルサインオン認証、GUI を用いたタスク定義システム：TME、計算結果分散可視化機能 ITBL/AVS、異機種計算機間での MPI 通信を実現するライブラリ：STAMPI、複数人での情報共有支援機能：コミュニティ・キャビネット・フォーラム）の実行を行い、利用方法についての習得を行った。



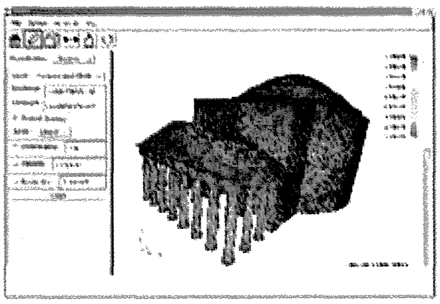

ITBL 基盤ソフトウェア：タスク定義画面



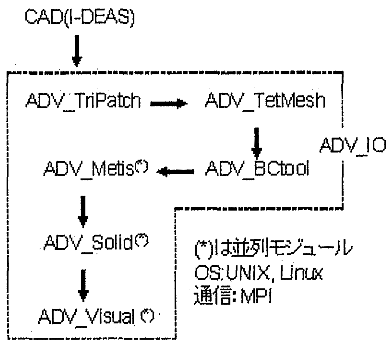

可視化（ITBL/AVS）機能

（2） 汎用構造解析コード「ADVENTURE」の ITBL 計算機への移植と検証

東京大学によって開発されてきた大規模問題用汎用有限要素解析プログラム「ADVENTURE」の ITBL 計算機への移植を行い、動作検証を行った。ADVENTURE はオープンソースコードであり、無料で入手することが出来る。MPI を用いた並列計算を実行することが可能で有り、地球シミュレータを用いて数千万自由度での解析が行われてきている。構造解析ソフトとしては、NASTRAN, ABAQUS 等の商用ソフトが広く使用されているが、ADVENTURE はソースコードの改定をユーザーで行えるため、モデルの改変・ソルバーの改良が容易に行える利点を持つ。ITBL 計算機上で並列計算を実施し、正しく動作することを確認した。



ADVENUTRE 計算例




ADVENTURE モジュール関係図

### 3. 利用の成果（学会、プレス発表、論文等）:

特になし

### 4. 今後の利用予定:

所属課室変更（原子力エネルギー計算科学研究グループ）につき、利用目的が原子力分野における構造・流体連成解析技術を用いた安全性研究に変わるが、引き続き自作コード及び汎用・商用の構造流体解析ソフト利用のために使用してゆく予定。

## 4.15.18 有機化学反応の経路を追跡、反応機構の解明

ITBL利用推進室
山邊　信一

### 1．利用の概要（要約）:

GAUSSIAN03は、既にITBL計算機にインストールいただいているため、有機化学反応のモデル化と経路のシュミレーションが研究の中心的作業となっている。特に、遷移状態の構造決定は技術的に困難であり、試行錯誤的にポテンシャル面での極大点に接近しなければならない。この繰り返し計算は不可避であり、大型計算機資源が要求される。研究水準として、現実の反応体に近い大きなサイズのモデル系と、高い制度の計算が要求される。計算時間を多大に必要とするが、得られた計算結果は、単に実験結果の説明にとどまらず、有機化学反応の予測設計のレベルの高い意義を有している。

### 2．利用の内容・結果:

平成15年度は、有機化学反応で水素結合沿いのプロトンの移動を伴う代表的なものを対象とした。

1つは第三級塩化ブチル(tBu-Cl)の可溶媒分解(SN1)反応である。この経路がSN2のものと同一であるのか異なるのかが未解明であった。水分子集団がクラスターとして反応基質の tBu-Cl に会合すれば、ヘテロリシス(heterolysis)とよばれるイオンついに分解する経路が求められた(図1)。

2つ目として、β-ジケトンでのケト-エノール互変異性の反応経路の追跡である。この追跡も、国際的に報告が無く、反応機構として未解明であった。水分子のクラスターサイズを変えて行き、有利に互変異性を引き起こす経路を追跡した。この結果、2個の反応体と 2 個の触媒的水分子がケト体に会合した結果、極めて小さな活性化エネルギーで異性化反応が進むことが判明した(図2)。

### 3．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）:

1). Satoshi Okumoto and Shinichi Yamabe,
"A Computaional Study of Epoxy-Amine Reactions",
J. Comput. Chem., 24, p244-253 ( 2003).

2). Shinichi Yamabe, and Noriko Tsuchida,
"Proton Transfer Reactions of R－OH.(H2O)n (R=H5C2 and C6H5, n=2,3,4,6 and 12.) A computational Study",
Internet. Electron. J. Mol. Des. 2-1, p1-13 (2003).

3). Kenzo Hiraoka, Tkakashi Shoda, Ichiro Kudaka, Susumu Fujimaki, and Susumu Mizuse,
Shinichi Yamabe, Hiroaki Wasada, Yuko Wasada-Tsutsui,

"Gas-Phase Study of the Clustering Reactions of C2H5+, s-C3H7+, and t-C4H9+with CO2 and N2O: Isomeric Structure of C2H5+, C2H5+(CO2)n, and C2H5+(N2O)n",
J. Phys. Chem. A, 107, #6, p775-781 (2003).

4). Shinichi Yamabe and Noriko, Tsutida,
"A Computational study on interactions between acetic acid and water molecules",
J. Comput. Chem. ,24, p939-947( 2003).

5). Kenzo Hiraoka, Kiyotoshi Takao, Fumiyuki Nakagawa, Tomoyuki Iino, Masayumi Ishida, Kazuo Fujita, Koki Hiizumi and Shinichi Yamabe,
"Thermochemical stabilities of the gas-phase cluster ions H3C+(N2)n",
Internat. J. Mass Spectro. Vol 227, 391-399(2003).

6). Shinichi Yamabe, Naoko Ono, Noriko Tsuchida,
"Molecular interactions between glycine and H2O affording the zwitterion",
J. Phys. Chem . A, 107, 7915-7922 (2003).

7). Shinichi Yamabe, Noriko Tsuchida,
"A computational study of the role of hydrogen bonds in SN1 and E1 reactions",
J. Comput. Chem, 598, No.4, 598-608(2004).

8). K. Hiraoka*, J. Katsuragawa, T. Sugiyama, S. Fujimaki, T. Kojima, S. Yamabe*,
"Gas-Phase Solvation of O2+, O2-, O4-, O3-, and CO3- with CO",
J. Phys. Chem. A. 107, 4817-4825 (2003).

9). Takahisa Machiguchi*, Junko Okamoto, Junpei Takachi, Toshio Hasegawa, Shinichi Yamabe*, Tsutomu Minato,
"Exclusive formation of alpha-methyleneoxetanes in ketene-alkene cycloadditions. Evidence for intervention of both an aloha-methyleneoxetane and the subsequent 1,4-zwitterion",
J. Am. Chem. Soc., 125, No.47, 14446-14448 (2003).

10. K.Hiraoka, K.Fujita, M.Ishida, K.Hiizumi, F.Nakagawa, T.Ichikawa, H.Okada, and A. Wada, S.Yamabe and N.Tsuchida,
"Thermochemical stabilities and structures of the gas phase cluster ions of halide ions with OCS",
Chem. Phys. Letters, 387, 76-80 (2004).

11. Shinichi Yamabe, Noriko Tsuchida and Kenta Miyajima,
"Reaction paths of keto-enol tautomerization of beta-diketones",
J. Phys. Chem. A, 108, No.14, 2750-2757 (2004).

12. Shinichi Yamabe, Noriko Tsuchida, Tsutomu Minato and Takahisa Machiguchi,
"Symmetry or asymmetry in cheletropic additions forming cyclopropanes.",
Theoret. Chem. Accounts, in press.

13) A. Cunje and A.C. Hopkinson*, S. Yamabe*, K. Hiraoka*, F. Nakagawa, M. Ishida, K. Fujita, K. Takao, A. Wada and K. Hiizumi,
"Methyl and Ethyl Cation Affinities of Rare Gas Atoms and N2",
J. Phys. Chem. A, in press.

14). K. Hiraoka, * K. Fujita, M. Ishida, T. Ichikawa, H. Okada, K. Hiizumi A. Wada and K. Takao, S. Yamabe* and N. Tsuchida,
"Gas-phase ion/molecule reactions in C5F8",
J. Phys. Chem. A, in press.

15). Yang Liu, Shoko Yamazaki and Shinichi Yamabe
"Regioselective Hydrosilylations of Propiolate Esters with Tris(trimethylsilyl)silane",
J. Org. Chem., in press.

**4. 今後の利用予定：**

遷移状態の構造決定が困難であるため、多くの有機化学反応機構が未解明のまま放置されている。本利用者は、この決定独特の技術を有すると自負している。今後も、代表的、基礎的な有機化学反応を対象とした反応機構の解明に務めたい。これらの成果が精密･効率的な物質合成を喚起し、日本の化学工業の水準向上に貢献すると信ずる。豊富なITBLの計算資源を利用させていただくことが、この研究推進の鍵と思いますので、よろしくお願いいします。

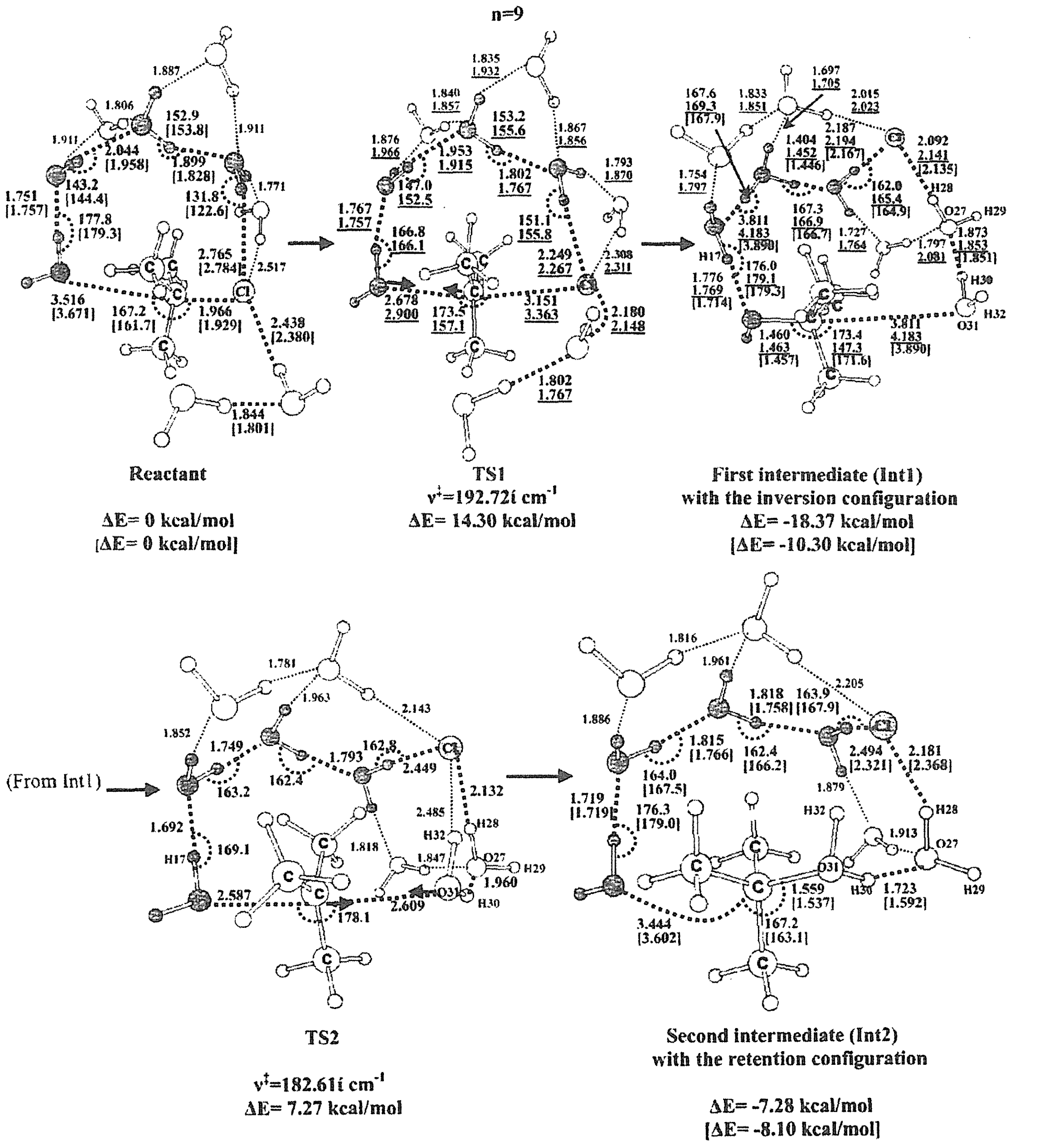



図 1　計算によって求められた水溶媒中での tBu-Cl の置換反応経

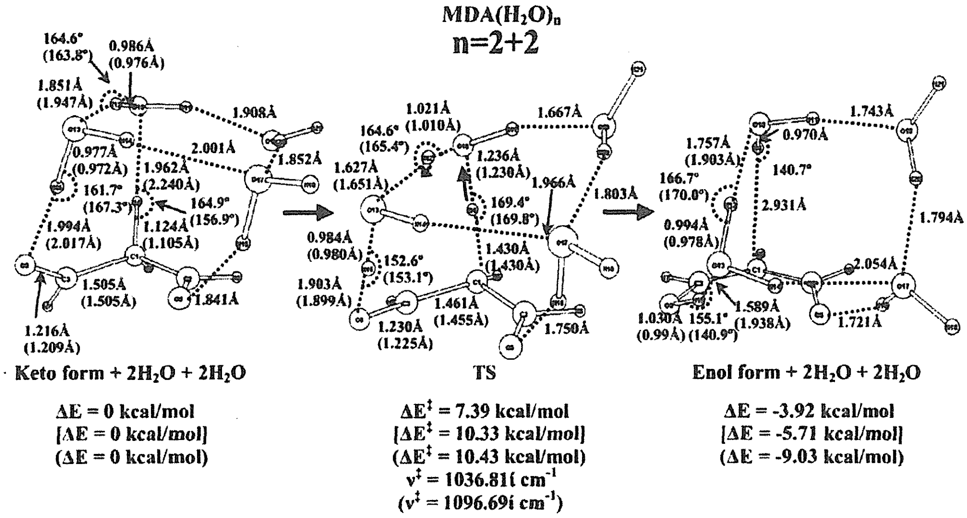



図 2　マロンアルデヒドと（2＋2）個の水分子によるケト-エノール互変異性経路。

## 4.15.19 気液混相乱流場の直接数値シミュレーション手法の確立とその性能評価

ITBL利用推進室
山本　義暢

### 1．利用の概要（要約）：

本グループでは，京都大学・功刀資彰助教授との共同研究の下に，軽水炉・高速炉あるいは核融合炉，炉工学設計における安全性解析・高効率化に密接に関わりがある，気液混相乱流場における統一的直接数値計算手法の確立を目指している．

本年度は，層状性気液乱流場である，高速液膜流（高フルード数開水路乱流場）及び分散性気液混相乱流場である，気泡を伴う一様等方性乱流場に関する直接数値計算コード開発と実際の数値計算を行った．また開発したコードの大規模数値計算への適用を視野に入れた，性能性評価も付随して実施した．

### 2．利用の内容・結果：

・**高フルード数開水路乱流場に関する研究**　この流動場は，核融合炉の実現に欠かせないプラズマ対抗壁保護液膜流との関連性が強く，自由界面変動効果が顕著に現れ，それに伴う乱流変調及び気液界面を通しての熱輸送特性の機構論的現象解明とこれに基づく乱流モデルの構築が重要なテーマとなっている．しかし，時空間に複雑に変形を繰り返す自由表面近傍の乱流及び熱輸送特性を詳細に評価・解析できる実験データ等はほとんどなく，従来は経験式，あるいは自由面効果を全く考慮されていない閉管路流に関する乱流モデルが使用されているのが現状である．そこで，本研究では功刀によるMARS法に基づき高フルード数開水路乱流場の直接数値計算を実行し，DNSデータベースの構築に成功した．以下に得られた主な知見を示す．

1) 低フルード数開水路流に特徴的な鉛直方向乱れの抑制効果は存在せず，むしろ増加傾向を示す．

2) またスパン方向乱れ強度は減少傾向を示す。(乱れエネルギー自体は減少傾向)

3) 散逸率分布は水面近傍で急激に上昇する。

4) また形成される界面波は、緩やかな勾配をもつ低波数成分とその上の細かな高波数成分から構成される。

5) 自由表面近傍における低速領域は、界面波の谷の部分に一致する

ことが判明した．今後は，熱輸送特性に関する詳細解析を行う予定である．

・**気泡を伴う一様等方性乱流場に関する研究**　まず対象とする一様等方性乱流

場を得るために，擬スペクトル法に基づく単相流3次元非定常の直接数値計算コードを開発した．次にこれに基づき，一様等方性乱流場に気泡を投入した計算を実行したが，気泡投入の初期段階における人為的要因による，パラサイト流れの影響を取り除くには，長時間の時間積分を行う必要があることが判明した．従って減衰乱流では対処が難しく定常乱流を得るために数値的な加振を行った．デバッグ等に手間がかり十分なDNSデータベースの構築は実行できなかったものの，発達乱流場が得られることを確認した．

**３．利用の成果（学会、プレス発表、論文等）：**

1). Y. Yamamoto, T. Kunugi and S. Satake: Investigation of surface deformation effects on turbulence generation at air-liquid turbulent shear interfaces, via DNS, ICMF-2004, (2004), paper No. 414, pp. 1-14.
2). 山本義暢，功刀資彰，佐竹信一，山口彰：高フルード数開水路乱流場の直接数値計算，日本流体力学会年会 2004，pp. 1006-1012.
3). Y. Yamamoto and T. Kunugi, Direct Numerical Simulation of a High-Fr Turbulent Open-Channel Flow, APS, 57th, DFD annual meeting (2004), DD. 007.

**４．今後の利用予定：**

高フルード数開水路乱流場に関しては，熱輸送特性に関する詳細解析及び乱流モデルの評価を行う予定である．気泡乱流場に関しては，流動形態，ボイド率の変化に伴う気液間相互作用効果，界面変形に伴う乱流変調及び界面熱移動係数の変化を解析するために，詳細なDNSデータベースの構築を行う予定である．また今年度開発した計算コードの並列化・高速化を実行し大規模計算への拡張を試みる予定である．

以上のように，気液混相乱流場における機構論的詳細解析を行うために必要不可欠な計算手法の確立は，ほぼ達成されつつある．今後は，より複雑な流動場あるいは，設計評価等への応用を図るためには，パラメータを変化させたデータベースの構築が必要であり，現況の計算機能力をメモリ・演算速度の増強を強く切望する．

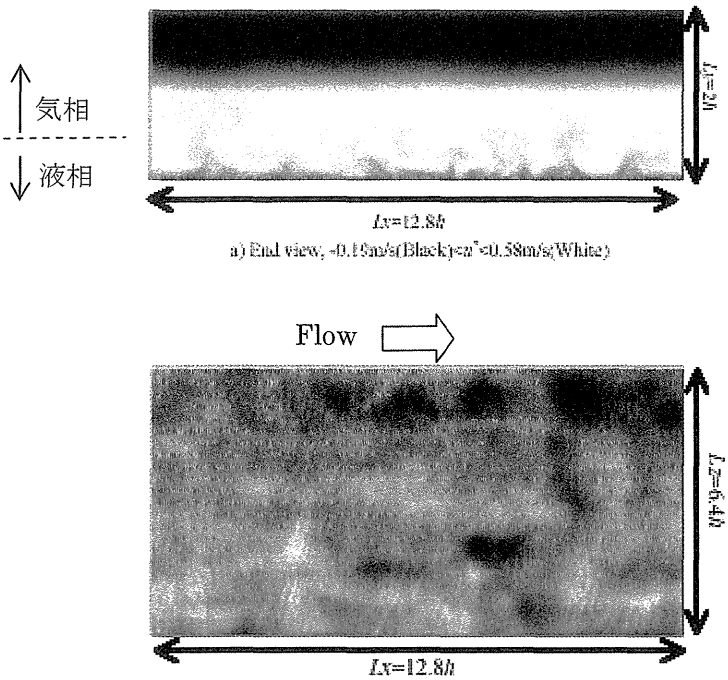



図１　開水路流速度分布断面図（上図）及び自由表面近傍の主流速度分布（下図）

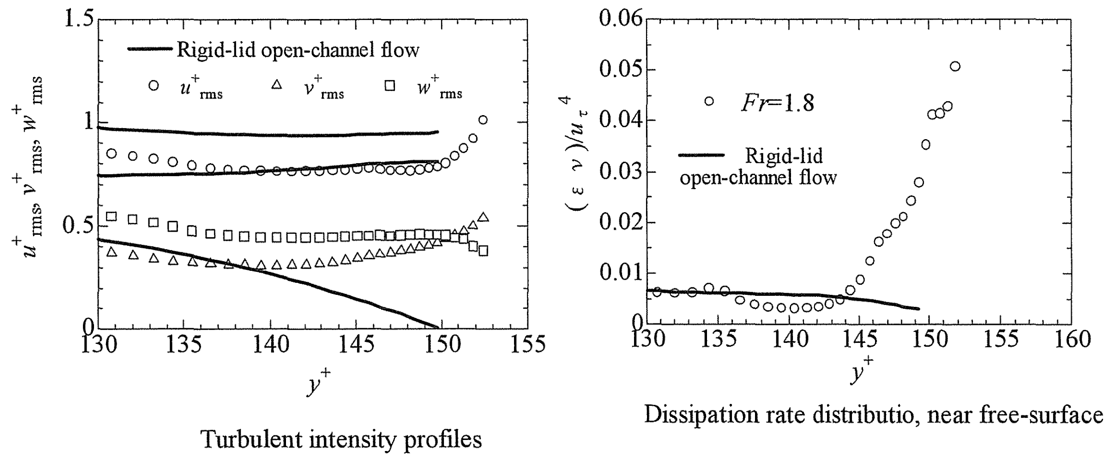



図２　自由表面近傍における乱流統計量分布
（高フルード数開水路乱流場）

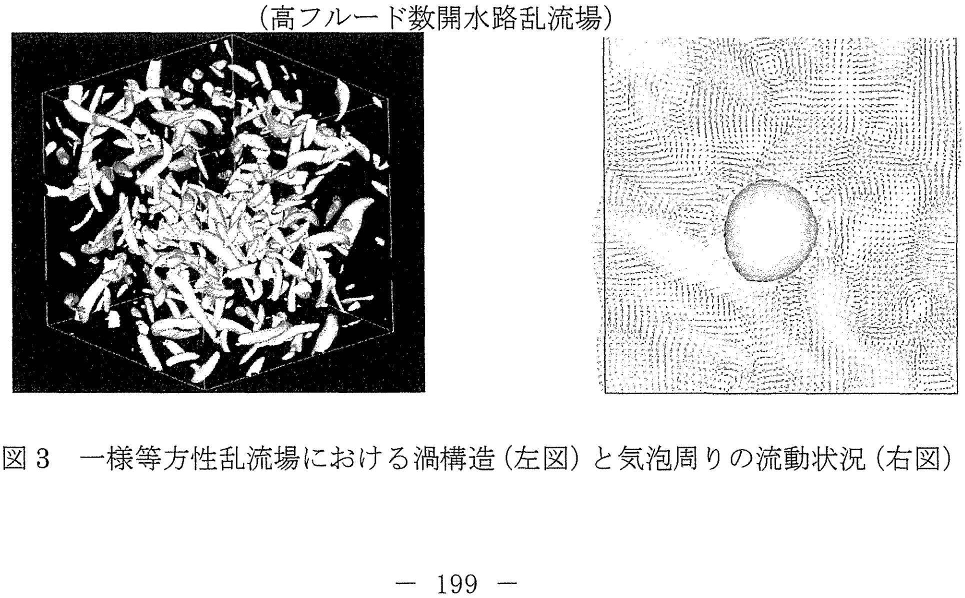


図３　一様等方性乱流場における渦構造（左図）と気泡周りの流動状況（右図）

# 国際単位系 (SI) と換算表

**表 1**　SI基本単位および補助単位

| 量 | 名　称 | 記　号 |
|---|---|---|
| 長さ | メートル | m |
| 質量 | キログラム | kg |
| 時間 | 秒 | s |
| 電流 | アンペア | A |
| 熱力学温度 | ケルビン | K |
| 物質量 | モル | mol |
| 光度 | カンデラ | cd |
| 平面角 | ラジアン | rad |
| 立体角 | ステラジアン | sr |

**表 2**　SIと併用される単位

| 名　称 | 記　号 |
|---|---|
| 分，時，日 | min, h, d |
| 度，分，秒 | °, ′, ″ |
| リットル | l, L |
| トン | t |
| 電子ボルト | eV |
| 原子質量単位 | u |

$1\ \mathrm{eV}=1.60218\times10^{-19}\ \mathrm{J}$

$1\ \mathrm{u}=1.66054\times10^{-27}\ \mathrm{kg}$

**表 3**　固有の名称をもつSI組立単位

| 量 | 名　称 | 記号 | 他のSI単位による表現 |
|---|---|---|---|
| 周波数 | ヘルツ | Hz | $s^{-1}$ |
| 力 | ニュートン | N | $m\cdot kg/s^2$ |
| 圧力，応力 | パスカル | Pa | $N/m^2$ |
| ｴﾈﾙｷﾞｰ, 仕事, 熱量 | ジュール | J | N·m |
| 工率，放射束 | ワット | W | J/s |
| 電気量，電荷 | クーロン | C | A·s |
| 電位，電圧，起電力 | ボルト | V | W/A |
| 静電容量 | ファラド | F | C/V |
| 電気抵抗 | オーム | Ω | V/A |
| コンダクタンス | ジーメンス | S | A/V |
| 磁束 | ウェーバ | Wb | V·s |
| 磁束密度 | テスラ | T | $Wb/m^2$ |
| インダクタンス | ヘンリー | H | Wb/A |
| セルシウス温度 | セルシウス度 | ℃ | |
| 光束 | ルーメン | lm | cd·sr |
| 照度 | ルクス | lx | $lm/m^2$ |
| 放射能 | ベクレル | Bq | $s^{-1}$ |
| 吸収線量 | グレイ | Gy | J/kg |
| 線量当量 | シーベルト | Sv | J/kg |

**表 4**　SIと共に暫定的に維持される単位

| 名　称 | 記　号 |
|---|---|
| オングストローム | Å |
| バーン | b |
| バール | bar |
| ガル | Gal |
| キュリー | Ci |
| レントゲン | R |
| ラド | rad |
| レム | rem |

$1\ \mathrm{Å}=0.1\ \mathrm{nm}=10^{-10}\ \mathrm{m}$

$1\ \mathrm{b}=100\ \mathrm{fm^2}=10^{-28}\ \mathrm{m^2}$

$1\ \mathrm{bar}=0.1\ \mathrm{MPa}=10^5\ \mathrm{Pa}$

$1\ \mathrm{Gal}=1\ \mathrm{cm/s^2}=10^{-2}\ \mathrm{m/s^2}$

$1\ \mathrm{Ci}=3.7\times10^{10}\ \mathrm{Bq}$

$1\ \mathrm{R}=2.58\times10^{-4}\ \mathrm{C/kg}$

$1\ \mathrm{rad}=1\ \mathrm{cGy}=10^{-2}\ \mathrm{Gy}$

$1\ \mathrm{rem}=1\ \mathrm{cSv}=10^{-2}\ \mathrm{Sv}$

**表 5**　SI接頭語

| 倍数 | 接頭語 | 記　号 |
|---|---|---|
| $10^{18}$ | エクサ | E |
| $10^{15}$ | ペタ | P |
| $10^{12}$ | テラ | T |
| $10^{9}$ | ギガ | G |
| $10^{6}$ | メガ | M |
| $10^{3}$ | キロ | k |
| $10^{2}$ | ヘクト | h |
| $10^{1}$ | デカ | da |
| $10^{-1}$ | デシ | d |
| $10^{-2}$ | センチ | c |
| $10^{-3}$ | ミリ | m |
| $10^{-6}$ | マイクロ | μ |
| $10^{-9}$ | ナノ | n |
| $10^{-12}$ | ピコ | p |
| $10^{-15}$ | フェムト | f |
| $10^{-18}$ | アト | a |

(注)

1. 表1－5は「国際単位系」第5版，国際度量衡局 1985年刊行による。ただし，1 eV および 1 u の値は CODATA の1986年推奨値によった。
2. 表4には海里，ノット，アール，ヘクタールも含まれているが日常の単位なのでここでは省略した。
3. bar は，JISでは流体の圧力を表わす場合に限り表2のカテゴリーに分類されている。
4. EC閣僚理事会指令では bar，barn および「血圧の単位」mmHg を表2のカテゴリーに入れている。

換　算　表

| 力 | N(=$10^5$ dyn) | kgf | lbf |
|---|---|---|---|
| | 1 | 0.101972 | 0.224809 |
| | 9.80665 | 1 | 2.20462 |
| | 4.44822 | 0.453592 | 1 |

粘　度　$1\ \mathrm{Pa\cdot s(N\cdot s/m^2)}=10\ \mathrm{P}$(ポアズ)$(\mathrm{g/(cm\cdot s)})$

動粘度　$1\ \mathrm{m^2/s}=10^4\ \mathrm{St}$(ストークス)$(\mathrm{cm^2/s})$

| 圧力 | MPa(=10 bar) | $kgf/cm^2$ | atm | mmHg(Torr) | $lbf/in^2$(psi) |
|---|---|---|---|---|---|
| | 1 | 10.1972 | 9.86923 | $7.50062\times10^3$ | 145.038 |
| | 0.0980665 | 1 | 0.967841 | 735.559 | 14.2233 |
| | 0.101325 | 1.03323 | 1 | 760 | 14.6959 |
| | $1.33322\times10^{-4}$ | $1.35951\times10^{-3}$ | $1.31579\times10^{-3}$ | 1 | $1.93368\times10^{-2}$ |
| | $6.89476\times10^{-3}$ | $7.03070\times10^{-2}$ | $6.80460\times10^{-2}$ | 51.7149 | 1 |

| エネルギー・仕事・熱量 | J(=$10^7$ erg) | kgf•m | kW•h | cal(計量法) | Btu | ft•lbf | eV |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | 1 | 0.101972 | $2.77778\times10^{-7}$ | 0.238889 | $9.47813\times10^{-4}$ | 0.737562 | $6.24150\times10^{18}$ |
| | 9.80665 | 1 | $2.72407\times10^{-6}$ | 2.34270 | $9.29487\times10^{-3}$ | 7.23301 | $6.12082\times10^{19}$ |
| | $3.6\times10^6$ | $3.67098\times10^5$ | 1 | $8.59999\times10^5$ | 3412.13 | $2.65522\times10^6$ | $2.24694\times10^{25}$ |
| | 4.18605 | 0.426858 | $1.16279\times10^{-6}$ | 1 | $3.96759\times10^{-3}$ | 3.08747 | $2.61272\times10^{19}$ |
| | 1055.06 | 107.586 | $2.93072\times10^{-4}$ | 252.042 | 1 | 778.172 | $6.58515\times10^{21}$ |
| | 1.35582 | 0.138255 | $3.76616\times10^{-7}$ | 0.323890 | $1.28506\times10^{-3}$ | 1 | $8.46233\times10^{18}$ |
| | $1.60218\times10^{-19}$ | $1.63377\times10^{-20}$ | $4.45050\times10^{-26}$ | $3.82743\times10^{-20}$ | $1.51857\times10^{-22}$ | $1.18171\times10^{-19}$ | 1 |

1 cal = 4.18605 J (計量法)
　= 4.184 J　(熱化学)
　= 4.1855 J　(15 °C)
　= 4.1868 J (国際蒸気表)

仕事率　1 PS (仏馬力)
　= 75 kgf·m/s
　= 735.499 W

| 放射能 | Bq | Ci |
|---|---|---|
| | 1 | $2.70270\times10^{-11}$ |
| | $3.7\times10^{10}$ | 1 |

| 吸収線量 | Gy | rad |
|---|---|---|
| | 1 | 100 |
| | 0.01 | 1 |

| 照射線量 | C/kg | R |
|---|---|---|
| | 1 | 3876 |
| | $2.58\times10^{-4}$ | 1 |

| 線量当量 | Sv | rem |
|---|---|---|
| | 1 | 100 |
| | 0.01 | 1 |

(86年12月26日現在)

平成15年度大型計算機システム利用による研究成果報告集

R100
古紙配合率100%
白色度70%再生紙を使用していま