



平成 28～29 年度
スーパーコンピュータシステム ICE X
利用による研究成果報告集

平成 30 年 11 月
量子科学技術研究開発機構
情報基盤部 システム計画・科学情報課
(スパコン利用検討委員会事務局)

本研究成果報告集は国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構が不定期に発行する、JAEA 設置のスーパーコンピュータシステム"ICE X"を利用した成果の報告書です。本研究成果報告集の全文電子データ(pdf) は国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構ホームページ (<http://www.qst.go.jp/publication/research-report/index.html>) にて公開されています。

国立研究開発法人 量子科学技術研究開発機構
情報基盤部 システム計画・科学情報課
(スパコン利用検討委員会事務局)

目次

平成 28 年度 大口利用課題 研究成果報告.....	4
量子ビーム科学研究部門.....	5
レーザーによる固体中での超高速現象解明のための第一原理シミュレーション	6
核融合エネルギー研究開発部門	8
トカマクプラズマの新古典・乱流輸送計算の新しいアプローチ	9
核融合プラズマにおけるトロイダル回転に関する研究.....	12
核融合プラズマ閉じ込め特性の水素同位体効果	14
簡約化 5 場モデルを用いた非局所輸送のシミュレーション研究	17
平成 29 年度 大口利用課題 研究成果報告.....	19
量子ビーム科学研究部門.....	20
電子制動輻射測定による治療用粒子線モニタリング手法の開発	21
Delbrück Scattering Calculation.....	24
アルミ薄膜ターゲットを用いたレーザー加速の PIC シミュレーション	25
レーザーと固体の非線形相互作用シミュレーション	27
重粒子線による DNA 損傷の物理過程シミュレーション研究.....	29
大型生体高分子の構造、ダイナミクス解析のためのシミュレーション技術の開発とその実行	32
放射線影響に対処する大型生体高分子の機能発現メカニズム解析.....	35
第一原理分子動力学法に基づいた材料解析手法の開発.....	37
核融合エネルギー研究開発部門	40
日本が調達する ITER 計測装置の予備設計のための核解析	41
トカマクプラズマの新古典・乱流輸送計算による輸送の解析と予測	44
運動論的效果を取り入れた核融合プラズマにおける磁気島・外部磁場相互作用	47
トカマクプラズマにおける密度分布形成機構の解析	50
大域的ジャイロ運動論モデルによる多種粒子系新古典計算	53
核融合原型炉のダイバータプラズマ特性に関する研究.....	56
簡約化 MHD モデルを用いた非局所輸送のシミュレーション研究	59
トカマク周辺 MHD 安定性の抑制・小振幅化に向けた理論・シミュレーション研究	62
First-principle simulation of energetic-particle-driven modes in tokamak plasmas	65
高エネルギー粒子・MHD 連結モデルによる電磁流体现象とディスラプションの研究	67
周辺輸送障壁形成/ペDESTAL 崩壊モデルの確度向上のためのシミュレーション研究	70
イオン伝導体による革新的リチウム同位体分離技術に関する研究開発.....	73
一般利用者研究成果一覧	77

平成 28 年度 大口利用課題 研究成果報告

量子ビーム科学研究部門

レーザーによる固体中での超高速現象解明のための第一原理シミュレーション

乙部 智仁

量子ビーム科学研究部門 関西光科学研究所
光量子科学研究部 超高速光物性研究グループ

(1) 利用目的:

固体（主に誘電体）に強いレーザー電場を照射した時に起きる光物性変化を第一原理シミュレーションにより明らかにする。

(2) 利用内容・結果:

前年度までに、強いレーザーを固体に照射した際、その電場周期より早い光物性変化が起きる。それが動的 Franz-Keldysh 効果 (DFKE) の時間分解での応答: Tr-DFKE であり、物理過程の詳細を第一原理計算と解析的計算から明らかにしてきた。今年度では Tr-DFKE のレーザーの偏光依存性 (成果リスト 1))、光の伝搬の効果 (成果リスト 2))、励起子準位への拡張 (成果リスト 3)) を行った。それらの研究で得られた知見をそれぞれ以下に示す。

偏光依存性: Tr-DFKE による超高速な物性変化はレーザーの偏光を直線偏光から円偏光に変えるに従い小さくなって行くことが明らかとなった。これは偏光による物性制御の指針を与える結果であり、レーザー強度、波長と偏光という 3 つの要素により光物性をアト秒領域で変化させる新たな研究分野の発展に繋がるものである。

伝搬の効果: 薄膜にレーザーを照射した際の Tr-DFKE を Maxwell 方程式と時間依存コーン・シャム方程式を同時に解く多階層シミュレーションを行うことで解析した。その結果、透過光反射光共に Tr-DFKE による超高速変調が強く現れる事が分かった。

励起子準位への拡張: Tr-DFKE の知見を、半導体の光物性を決定づける励起子へ拡張した。励起子準位はエネルギー位置が比較的变化しないため、サイドバンド応答が顕に観測できる事を示した。この成果は京都大学廣理准教授グループによる実験との共同研究である。

上記で示した Tr-DFKE に関する成果の他に、新たな非線形・非摂動光学現象として注目されている固体高次高調波についても第一原理計算から解析を行い以下の知見を得た (成果リスト 4)。

固体高次高調波発生: α 水晶からの高次高調波発生過程を、時間依存密度汎関数理論を用いて解析した。その結果バンドギャップより上のエネルギー領域では電子-空孔相互作用による分極が主な発生源である事をしめした。また、高次高調波のスペクトル強度が弱くなるカットオフエネルギーとバンド構造を比較した所、価電子帯の深いエネルギー準位と伝導帯のバンド端の相互作用により決定されている事が明らかとなった。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) T.Otobe, Time-resolved dynamical Franz-Keldysh effect produced by an elliptically polarized laser, *Physical Review B*, Vol. 94, 165152, 2016
- 2) T.Otobe, Multi-Scale Simulation for Transient Absorption Spectroscopy under Intense Few-Cycle Pulse Laser, *Photonics*, Vol. 3, 63, 2016
- 3) K.Uchida, T. Otobe, T.Mochizuki, C.Kim, M.Yoshida, H.Akiyama, L.N.Pfeiffer, K.N. West, K.Tanaka, and H.Hirori, Subcycle optical response by dressed state with phase-locked wave functions, *Physical Review Letters*, Vol.117, 277402, 2016
- 4) T.Otobe, High-harmonic generation in α -quartz by electron-hole recombination, *Physical Review B*, Vol.94, 235152, 2016
- 5) 矢花 一浩、佐藤 駿丞、篠原 康、乙部 智仁、高強度超短パルスレーザーと誘電体の相互作用を記述する第一原理計算、*固体物理*、Vol.52, 21, 2017

(4) 今後の利用予定:

レーザー加工の初期過程である電子励起状態の空間分布評価に向けた電子温度評価手法の開発と計算。及びそれを初期値とした確率方程式の開発と分子動力学計算。

電子励起を伴う場合の Tr-DFKE を扱うモデル構築及び計算。

核融合エネルギー研究開発部門

トカマクプラズマの新古典・乱流輸送計算の新しいアプローチ

本多 充

核融合エネルギー研究開発部門 那珂核融合研究所
先進プラズマ研究部 先進プラズマモデリンググループ

(1) 利用目的:

解析の目的

核融合プラズマにおける輸送機構の理解や輸送レベルの定量予測は、ITER に代表される次世代装置でのプラズマ閉じ込め性能を評価／改善する上で重要な課題のひとつである。輸送現象は大きく分けて、トーラス磁場構造中を動く粒子の衝突によって引き起こされる新古典輸送と、微視的な揺動によって引き起こされる乱流輸送に大別され、それぞれに研究が進められてきた。

新古典輸送に関しては、トカマクの軸対称性を活かして、ドリフト運動論方程式の流体モーメントをとったモーメント法に基づくコードによって広く評価されてきた。しかし、実際のトカマクは完全な軸対称ではなく 3 次元性（非軸対称性）を有しており、近年非軸対称性が引き起こす輸送現象が注目されるようになってきた。複雑な 3 次元磁場中の新古典輸送はこれまでのトカマクに対応したコードでは対応しきれず、生来的に非軸対称であるヘリカルプラズマ向けの新古典輸送コード **FORTEC-3D** を導入して実験解析とシミュレーションが行われてきた。ITER に向けたプラズマ性能予測能力の向上には、非軸対称性も考慮した新古典輸送計算が必須と言える。

乱流輸送に関しては、これまでに核融合プラズマの第一原理モデルであるジャイロ運動論に基づく乱流輸送シミュレーション研究が展開され、局所モデルによる輸送機構や帯状流形成過程の詳細解析に加え、大域モデルによる分布形成過程や閉じ込めスケールが調べられている。イオン温度勾配駆動(ITG)モード等に代表される微視的不安定性から駆動される乱流輸送は新古典輸送とも相まって外部加熱や粒子供給とバランスし、定常的な温度・密度分布を形成する。これら一連の輸送過程を厳密に追跡するには大域的 full-f モデルに基づく輸送シミュレーションが必要となるが、計算コストが膨大であるため多数の加熱条件における解析を実行することは困難となっている。他方、局所 delta-f モデルでは比較的低い計算コストで熱輸送に加えて粒子輸送も計算することが可能であるが、背景分布を固定した局所解析であるため、大域的な分布形成を追跡することができない。

そこで、本課題では新古典輸送と乱流輸送のそれぞれに第一原理に基づくコードを用いることでシミュレーションモデルを精緻化し、プラズマ性能の予測能力向上を目指す。新古典輸送では、**FORTEC-3D** コードを用いて ITER における複雑な 3 次元磁場を取り込んだシミュレーションを行うことで、非軸対称性によるプラズマ性能への影響を定量化する。乱流輸送では、多数の局所 delta-f 計算による磁気面ごとの輸送フラックス評価と 1D 輸送計算による背景分布の時間発展追跡を結合させた連成計算コード **TRESS+GKV** を用いて、新

たな枠組みで大域的輸送解析を実施する。TRESS+GKV は局所ジャイロ運動論コード GKV と、GKV との結合のために新しく作られた輸送コード TRESS から成っている。外部加熱の下で駆動される ITG 乱流に対する準線形および非線形解析を実施し、非定常な温度分布の形成過程や大域的な揺動伝搬の特性などを詳細に調べる。輸送特性や分布形成の加熱パワー依存性の定量評価のみならず、大域的 full-f モデルの本質的な物理過程の抽出も可能となる。

今年度の課題と解析によって得られる研究成果

FORTEC-3D コードを用いて ITER における複雑な 3 次元磁場を取り込んだ新古典輸送シミュレーションを行うことで、非軸対称性によるプラズマ閉じ込め性能への影響を定量化する。特に、非軸対称性を考慮したときにのみ生じる新古典トロイダル粘性によるトルクが、閉じ込め性能に大きな影響力を持つプラズマ回転にどれほどの影響を与えるかに着目する。TRESS+GKV を用いて外部加熱の下で駆動される大域的な ITG 乱流輸送過程を解析し、定常温度分布や揺らぎの伝搬特性の加熱パワーや加熱分布依存性を定量的に明らかにするため、複数の加熱条件での大域的輸送シミュレーションを実施する。

(2) 利用内容・結果:

断熱的電子応答を仮定した ITG モード駆動型乱流を模擬した、GKV で計算された線形成長率から輸送係数を見積もる簡易的な準線形モデルによって、イオン温度の定常シミュレーションを TRESS+GKV で行った。収束を加速させる適応型加熱ソースの有り無しで収束に至る速度を比較した結果、図 1 にある通り適応型加熱ソースによってより早く目標となる熱流束に到達していることが確認され、適応型加熱ソースの有効性が確認された。

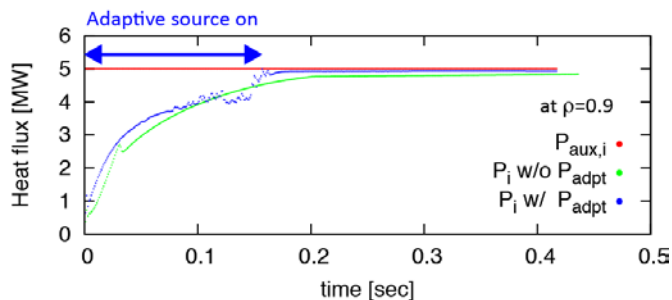


図 1: 目標値 (赤) に対して、適応型加熱ソース有り (青) は無し (緑) に比べて早く正確に目標となる熱流束に到達していることが分かる。

ITER ではリップル磁場を抑制するためのフェライト鋼や、将来の炉に向けた研究のためにテストブランケットモジュール (TBM) を挿加する。これらはトロイダル方向に不均一な摂動磁場を惹起するため、それによる NTV 生成を評価することはトロイダル回転分布の予測のためにも重要である。3 次元平衡コード VMEC による解析の結果、TBM が作り出す摂動磁場はその他の原因と比べてよりプラズマ中心部まで浸透しているという事がわかった。これはコア部まで NTV が生成される可能性があることを意味しており、FORTEC-3D による NTV 解析を行った結果、図 2 のように TBM を挿加したケースのみコア部で有意な NTV が生じている事が確認されたと共に、周辺部においてもその他のケースと比べて 2 倍程度の NTV の増大が見られた。トロイダル方向に 3 箇所局在して置かれているだけの TBM が

NTV に対して大きな影響を与えていることが分かった。この NTV を用いて回転計算を行った結果、TBM の有り無しで比較すると有意に回転速度を減速させることが分かったが、熱輸送に影響を与えるほどの変化ではなかった。

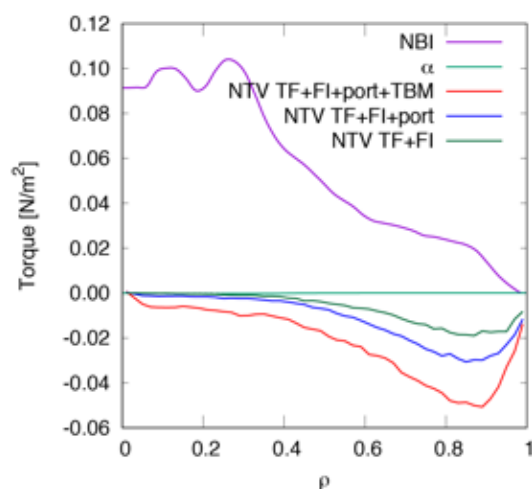


図 2：トルクの径方向分布。紫は中性粒子ビーム入射 (NBI)、緑は α 粒子、赤はトロイダル磁場コイル (TF)、フェライト鋼 (FI)、加熱ポート (port)、TBM の影響を全て含んでいるケース、青は TBM を省いたケース、緑は加熱ポートの影響も省いた理想的なケースを表している。TBM を挿加したケースは中心部、周辺部共に NTV の増大が確認出来る。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 本多 充, 仲田 資季, ITG/TEM 不安定プラズマにおける大域的電子・イオン熱輸送シミュレーション, 2016 年日本物理学会秋季大会, 石川, 2016
- 2) M.Honda, S.Satake, Y.Suzuki, K.Shinohara, M.Yoshida, N.Aiba, J.Shiraishi, N.Hayashi, G.Matsunaga, M.Nakata, A.Matsuyama, S.Ide, Predictions of Toroidal Rotation and Torque Sources Arising in Non-axisymmetric Perturbed Magnetic Fields in Tokamaks, Proceedings of 26th IAEA Fusion Energy Conference, TH/P3-9, Kyoto, 2016

(4) 今後の利用予定:

- TRESS+GKV の計算速度をさらに向上させるために、他の収束加速手法の開発に取り組む。
- JT-60SA や ITER では外部から能動的に摂動磁場を印加して周辺局在モードの発生を抑制する運転が行われる。JT-60SA の誤差磁場補正コイルに通電する電流量や通電パターンを変化させることで発生する NTV も変化するため、効率的な NTV 生成・抑制を行える方策を検討する研究を進める。

核融合プラズマにおけるトロイダル回転に関する研究

成田 絵美

核融合エネルギー研究開発部門 那珂核融合研究所
先進プラズマ研究部 先進プラズマモデリンググループ

(1) 利用目的:

トカマク型核融合プラズマにおいて、トロイダル回転はエネルギー閉じ込めと MHD 安定性の観点から重要視され、これまで多くの研究がなされてきた。トロイダル回転の輸送に対する影響は、回転することで生じる慣性力による直接的な影響と、回転の方向や速度の変化に起因する小半径方向の電場(径電場)の勾配などを介した間接的な影響に分類される。JT-60U において緩やかな内部輸送障壁(ITB)を持つ放電では、回転方向をプラズマ電流と順・逆向きと変えたときに、プラズマ中心部において、順方向回転時の方で電子温度勾配が急になることが報告されている[N. Oyama *et al.*, Nucl. Fusion, **47**, 689 (2007)]。このとき、プラズマ中心部における径電場の勾配は緩やかであり、その熱輸送を抑制する効果は小さく、径電場の勾配を用いて回転の影響を表現している従来の乱流輸送モデルでは、この ITB 放電の実験結果の再現は困難である。

本研究では、トロイダル回転の影響が観測された ITB 放電において直接的な回転の影響である慣性力が熱輸送に与える影響を調べる。また、回転方向によって不純物密度の量が変わっていることが実験観測からわかっているため、不純物密度の影響にも着目する。これらの慣性力と不純物密度の影響は、ジャイロ運動論コード GKW[A. G. Peeters *et al.*, Comput. Phys. Commun. **180**, 2650 (2009)]を用いた乱流輸送解析から明らかにすることができる。GKW は高並列計算が不可欠であるため、大型計算機 ICE X による計算が必要となった。

(2) 利用内容・結果:

GKW による乱流輸送計算は、3 粒子種(電子・重水素・炭素不純物)を対象とし、衝突の効果と Miller 平衡モデルを通じた形状効果を含めて行なった。まず慣性力の影響は、回転速度 V_ϕ とその勾配 Ω' から考慮される。解析対象の ITB 放電では、順方向回転時の V_ϕ と Ω' の組み合わせが熱輸送を駆動する不安定性の抑制に働く一方、逆方向回転時には不安定性を促進することが明らかになった。次に不純物密度は実験では順方向回転時の方が低くなっている。解析対象の ITB 放電では、不純物密度の増加によって不安定化される特徴を持つ捕捉電子モードの影響を受けているため、より不純物密度が低い順方向回転時の方が捕捉電子モードが抑えられ、電子の熱流束が低下することがわかった。以上の慣性力と不純物密度の電子熱輸送に対する影響は実験と定性的に一致する。

図 1 は GKW の非線形計算から電子熱流束を評価した結果である。ここでは順/逆方向回転時の慣性力と不純物密度の実験値を与えており、慣性力と不純物密度以外は両ケースで共通であると仮定している。逆方向回転時は電子温度勾配の増加で支配的な不安定性がイオン温度勾配モードから捕捉電子モードに変わるため、電子熱流束に極小値が現れる。実験では両ケースで電子への加熱吸収パワーが近いことから、同じ電子熱流束を持つと仮定すると、図 1 から順方向回転の方が高い温度勾配を持つことが予測でき、実験と一致する傾向が得られた。

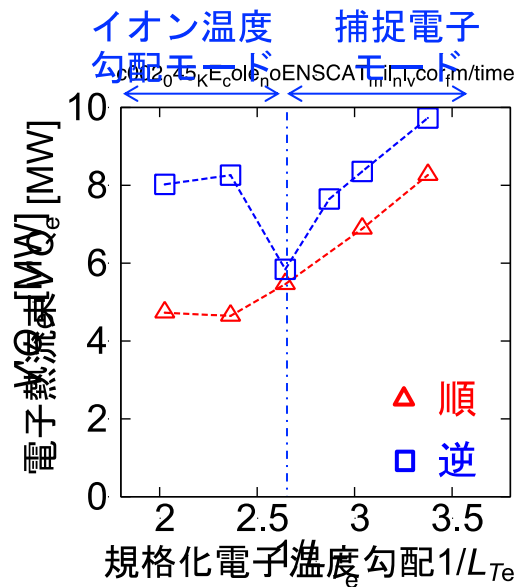


図 1 電子熱流束の電子温度勾配依存性。順/逆方向回転時の慣性力と不純物密度の実験値を与えている。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) 成田 絵美, 本多 充, 吉田 麻衣子, 林 伸彦, 浦野 創, 井手 俊介, JT-60U における慣性力を通じた回転分布の熱輸送への影響, 第 11 回核融合エネルギー 連合講演会, 福岡, 2016
- 2) 成田 絵美, 本多 充, 吉田 麻衣子, 林 伸彦, 浦野 創, 井手 俊介, JT-60U におけるトロイダル回転に由来する密度と慣性力の変化が熱輸送に与える影響, 日本物理学会 2016 年秋季 大会, 石川, 2016
- 3) 成田 絵美, 本多 充, 吉田 麻衣子, 林 伸彦, 浦野 創, 井手 俊介, JT-60U における慣性力と密度の変化を通じたトロイダル回転の熱輸送に対する影響の解析と予測研究, 第 33 回プラズマ・核融合学会年会, 宮城, 2016

学術誌掲載論文

- 4) E.Narita, M.Honda, M.Yoshida, N.Hayashi, H.Urano and S.Ide, Effects of toroidal rotation on electron heat transport via changes in inertial force and impurity density, *Plasma Physics and Controlled Fusion*, vol.59, 044012, 2017

(4) 今後の利用予定:

本研究で明らかにした慣性力と不純物密度が電子熱輸送に与える影響をモデル化し、電子温度分布の予測に反映させることを予定している。そのため、より広いパラメータ領域において慣性力と不純物密度を変化させた GKW の非線形計算を ICE X で実施する。

核融合プラズマ閉じ込め特性の水素同位体効果

井戸村 泰宏、浦野 創、林 伸彦、松岡 清吉、本多 充
核融合エネルギー研究開発部門 那珂核融合研究所
先進プラズマ研究部 先進プラズマモデリンググループ

(1) 利用目的:

本研究ではジャイロ運動論的 full-f オイラーコード GT5D の開発を推進している。本課題では GT5D を用いて以下の研究課題に取り組む。

閉じ込め特性の水素同位体効果の研究

これまでの L モード実験のデータベースでは $\tau_E \sim M^{1.67} \rho^*{}^{-1.85} \sim M^{0.75}$ というエネルギー閉じ込め時間のスケーリングが報告されている。ここで、 M はイオンの規格化質量、 $\rho^* = \rho_i/a$ はプラズマ半径 a で規格化したイオン軌道半径 $\rho_i \sim M^{0.5}$ を示す。このスケーリングによると、同じ磁場、温度の水素プラズマ ($M=1$) と重水素プラズマ ($M=2$) では閉じ込め時間の比率が $\tau_{ED}/\tau_{EH} \sim 1.7$ となり、三重水素プラズマ ($M=3$) では更なる閉じ込め性能の向上が予測されるため、ITER の性能予測を行う上で、非常に重要な問題になっている。昨年度までに断熱的電子モデルを用いたイオン系乱流の数値実験を重点的に行なってきたが、断熱的電子モデルでは実験的に観測されている水素同位体効果を再現することができず、運動論的電子モデルが必要となることがわかった。このため、平成 28 年度は運動論的電子モデルを含むイオン系乱流の数値実験を実施し、閉じ込め特性の M 依存性を調べる。

VMEC インターフェース開発

昨年度までに円形断面トカマクに摂動磁場を印加したモデル配位において新古典トロイダル粘性 (NTV) の評価を行い、3 次元新古典モンテカルロコード FORTEC-3D とのベンチマークに成功した。FORTEC-3D は、現在、JT-60 の NTV 解析に用いられているが、現状の計算モデルでは電子の新古典輸送を含めた無撞着な電場の決定が行えないという問題がある。この問題の解決に向けて、3 次元摂動磁場配位の計算で用いられる VMEC コードのインターフェースを整備し、GT5D を 3 次元磁場配位に拡張する。

(2) 利用内容・結果:

閉じ込め特性の水素同位体効果の研究

プラズマ乱流の特徴的スケールはイオン軌道半径によって与えられるため、質量が軽く軌道半径が小さい水素プラズマにおいてより細かい渦構造が形成される。この渦のサイズを拡散の特徴的スケールと考える局所拡散理論では、閉じ込め時間のスケーリングが $\tau_{GB} \sim M^{-0.5}$ となり、水素プラズマで輸送が低減するという結果を与える。しかしながら、大域的乱流シミュレーションでは臨界安定な温度分布が形成され、乱流輸送による熱流束が雪崩的にプラズマ半径方向に伝搬することから、結果的に輸送現象の特徴的な時空間スケールが大幅に増大し、断熱

的電子モデルを用いた解析では $\tau_{\text{ion}} \sim M \rho^{*-2} \sim M^0$ というスケーリングが得られ、水素と重水素はほぼ同じ温度分布を示した (図 1(a))。しかしながら、実験的には $\tau_E \sim M^{0.75}$ という質量依存性が観測されていることから、このスケーリングの違いは電子系の有無に起因すると考えられる。運動論的電子モデルの場合には、乱流を励起する微視的不安定性の衝突安定化効果にイオンと電子の質量比に起因する同位体効果が加わるため、同位体効果による閉じ込め改善が期待できる。この点を検証するために、運動論的電子モデルを用いた数値実験を実施した。この数値実験では電子系乱流の励起やイオン系と電子系の間でのエネルギー移行を勘案して JT-60 における同位体実験[Urano,NF2012]で観測されたプラズマ分布と加熱条件に基づいてプラズマサイズを 1/2 にスケールした計算条件を採用した。この結果、図 1(b)、(c)に見られるように重水素プラズマで温度が上昇することを確認した。

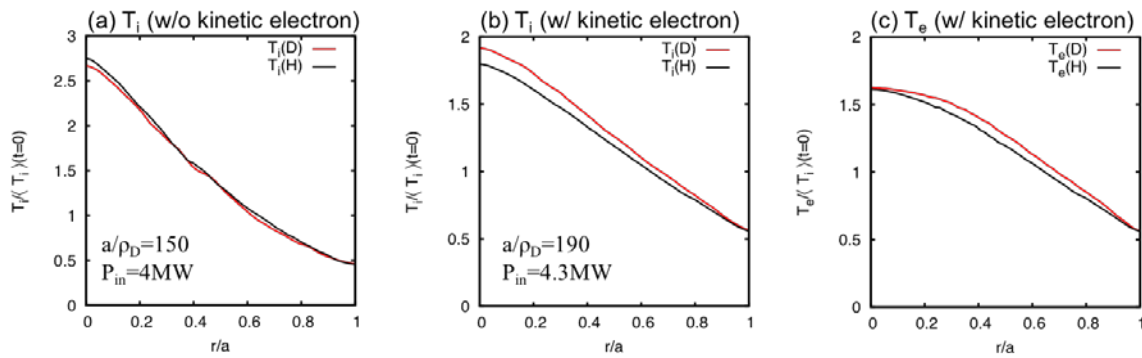


図 1：水素プラズマ(H)と重水素プラズマ(D)におけるイオン系乱流の数値実験で観測した温度分布。(a)は断熱電子モデルで計算したイオン温度、(b)、(c)は運動論的電子モデルを用いて計算したイオン温度と電子温度を示す。

VMEC インターフェース開発

3次元磁場配位の磁場計算では VMEC が標準的に使用されるが、このコードでは 2次元磁場配位の磁場計算と異なる特徴がある。通常、2次元磁場配位の磁場計算は真空領域を含む自由境界条件で行われ、その出力データとしては磁場のベクトルポテンシャルの情報 (ポロイダル磁束、および、トロイダル磁束関数) が得られる。一方、VMC ではプラズマ表面に固定境界条件を与えて MHD 平衡を計算するため、プラズマ外部の真空領域が計算領域から除外され、その出力データとしては磁場の情報 (磁場形状のスペクトル) が得られる。これまで、2次元磁場配位を対象として開発されてきた GT5D では、円筒座標 (R, ζ, Z) において磁場のベクトルポテンシャルを離散化してジャイロ運動論方程式を計算している。これを VMEC の 3次元磁場データに拡張するには、1) VMEC の固定境界条件と整合する磁束座標系の採用、および、2) 磁場の情報をベクトルポテンシャルに変換するインターフェースの開発が必要となった。1)については GT5D の座標系を円筒座標系 (R, ζ, Z) から磁束座標系 (ψ, θ, ϕ) に変更したが、この座標系の変更にあたり磁気軸 $\psi=0$ の取り扱いが大きな問題となった。GT5D では 4次精度無散逸保存型差分スキームを用いている。このスキームを一般曲線座標系である磁束座標系において磁気軸を含めて適用するには、磁気軸における粒子フラックスの釣り合いはもちろんのこと、磁場の非圧縮条件や位相空間体積保存条件も磁気軸を含めて満たす必要があった。こ

の条件を無撞着に満たすために、磁気軸における電磁場と粒子分布関数の境界条件を新たに開発した。2)については VMEC から出力される磁場形状スペクトルデータを磁場のベクトルポテンシャルに変換する定式化を新たに構築し、磁場データのインターフェースを開発した。3次元磁場配位に拡張した GT5D の精度検証を目的として、LHD を対象とする衝突性輸送解析を実施し、LHD における実験解析で標準的に利用されてきた大域的衝突性輸送解析粒子コード FORTEC-3D と解析結果を比較した。図 2 はこのベンチマーク計算で得られた粒子束の時間発展、および、空間分布を示すが、2つのコードで定量的な一致が確認できた。粒子束以外にも熱流束や電場の時空間発展についても定量的な一致が確認できた。

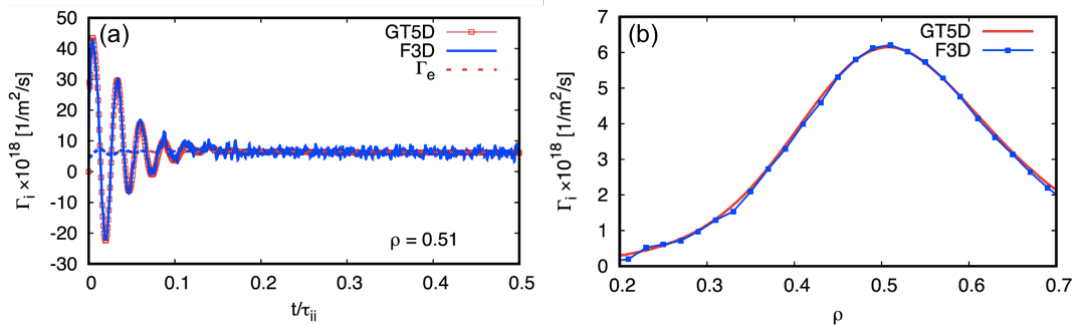


図 2 : LHD 配位における GT5D と FORTEC3D の衝突性輸送ベンチマーク。(a)は粒子束の時間発展を示し、(b)は定常状態における粒子束の空間分布を示す。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) S.Matsuoka, Y.Idomura, and S.Satake, Global kinetic simulations of neoclassical toroidal viscosity in low-collisional perturbed tokamak plasmas, *Phys. Plasmas* 24, 102522, 2017
- 2) S.Matsuoka, Y.Idomura, and S.Satake, Neoclassical transport benchmark of global full-f gyrokinetic simulation in stellarator configurations, *Phys. Plasmas* 25, 022510, 2018
- 3) Y.Idomura, Y.Asahi, N.Hayashi, H.Urano, Full-f gyrokinetic simulation including kinetic electrons, Proceedings of 26th IAEA Fusion Energy Conference, TH/P3-1, Kyoto 2016
- 4) Y.Idomura, Progress of full-f gyrokinetic simulations including kinetic electrons, 13th Asia Pacific Physics Conference (APPC13), Brisbane, Australia, 2016

(4) 今後の利用予定:

今年度開発した磁束座標版 GT5D をさらに多種イオン系に拡張し、JT-60 における NTV の解析、あるいは、ステラレータにおけるプラズマ輸送解析に活用していく。

簡約化 5 場モデルを用いた非局所輸送のシミュレーション研究

矢木 雅敏

核融合エネルギー研究開発部門 六ヶ所核融合研究所

核融合炉システム研究開発部

(5) 利用目的:

磁場閉じ込めプラズマにおいてプラズマ周辺の摂動が非常に速い速度で中心部へ伝搬し、中心部の電子温度分布が急に増加する現象や中心部の MHD が周辺部の輸送障壁形成のトリガーになる現象等、非局所的なプラズマ応答が観測されている。一方、このような現象をシミュレーションにおいて再現し、その物理機構を明らかにした研究はこれまでのところ報告されていない。本研究の目的はこのような非局所プラズマ応答の一例として周辺部の冷却に伴うプラズマ中心部での電子温度上昇の機構をシミュレーションにより明らかにすることを目的とする。この機構が明らかになれば、それをもとに原型炉における周辺部からのペレットによる燃料供給手法の開発や過渡応答を利用した核燃焼プラズマ制御への応用が期待できる。

(6) 利用内容・結果:

これまで、R4F コード（4 場簡約化 MHD モデル）を用いて周辺部に密度ソースを印加し、それによる非局所輸送を観測し、それが非共鳴モードである $m=1, n=0$ モード（ここで m はポロイダルモード、 n はトロイダルモードを示す）に起因することを明らかにした 1)。一方で、ジャイロ流体コードを用いて周辺冷却をとまなう ITG 乱流シミュレーションを行い、非局所輸送を調べた 2)。この場合、非局所輸送は観測されず、冷却に伴い、イオン温度が急峻化し、ITG 乱流の励起が観測されたが、局所的領域にとどまり、コアのイオン温度の変化は起こらなかった。本研究においては、密度ソースと温度シンクの違いが非局所輸送にどのような影響を与えるか調べるため R5F コードを開発し、密度ソースと電子温度シンクを加え、非局所輸送のシミュレーションを行った 3)。ITG 乱流の場合とは異なり電子温度分布の変化は観測されたが R4F コードで行ったシミュレーション結果と異なる振る舞いを示した。ソース、シンクモデルの改良を進めるとともに、イオン温度揺動を含めた R6F コードの開発に着手した。また、R5F コードのホットスポット解析を行い、コードのチューニングを行った。図 1 に球状の密度ソースと温度シンクを周辺部へ印加したときの温度分布の発展を示す。ソースとシンクの相対的な大きさを変化させ分布の発展を調べた。電子温度を周辺冷却することになり中心温度が上昇することを期待したが、それは実現しなかった。また、ソースとシンクを切った後、急激に温度分布が崩壊していく様子が観測された。解析を行ったところストリーマーが形成され、これが分布の崩壊を引き起こしていることが判明した。

図1 球状の密度ソースと温度シンクを印加後の電子温度分布の時間発展。T=13000 でソースとシンクをスイッチオフ、その後、電子温度分布は崩壊に至る(左図)。

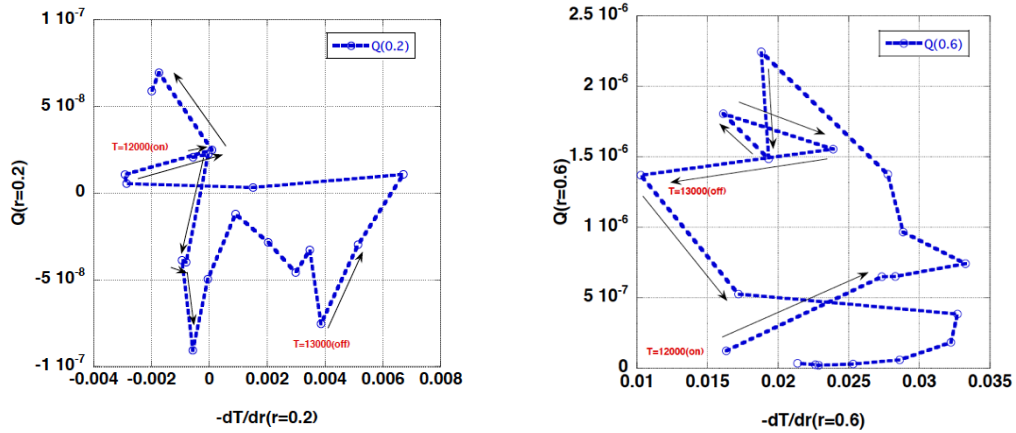


図2 熱フラックスと温度勾配位相空間におけるヒステリシス曲線。T=12000 でソースとシンクを印加し、T=13000 でそれらをオフ。反時計回りに軌跡を描いていることがわかる。

図2に熱フラックスと温度勾配位相空間におけるヒステリシス曲線を示す。単純な拡散過程の場合は直線上を動くはずであるが、複雑な軌跡を描いている。非局所輸送の間接的証拠と考えられる。

(7) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- (1) M.Yagi, N.Miyato, A.Matsuyama, and T.Takizuka, Nonlocal Thermal Transport to Edge Perturbation in Tokamak Plasmas, Proceedings of IAEA Fusion Energy Conference, TH/P3-21, Kyoto, 2016

(4) 今後の利用予定:

周辺冷却を行った場合、中心部の温度が上昇するためには、中心加熱を同時に行う必要がある。現シミュレーションでは初期分布を与え、それが緩和した後に周辺にソースとシンクを印加しており、中心加熱を陽には行っていない。中心加熱を合わせて行い、同時に周辺冷却を行った時にどういう応答をするかを見ていく必要がある。また、ソースとシンクは単純に同じ形状で与えているがペレットのアブレーションやガスパフによるイオン化の物理過程を反映しておらず、実験との比較のためにはさらなるモデルの高度化が必要である。今後、これらを実装していく予定である。

平成 29 年度 大口利用課題 研究成果報告

量子ビーム科学研究部門

電子制動輻射測定による治療用粒子線モニタリング手法の開発

山口 充孝

量子ビーム科学研究部門 高崎量子応用研究所

放射線生物応用研究部

(1) 利用目的:

粒子線治療において治療を計画する際は、ブラッグピーク位置と患部が一致するように粒子線の入射エネルギーを選択する。しかし、臓器や組織等の形状変化等によってブラッグピーク位置が深さ方向にずれる可能性があるため、粒子線軌跡及びブラッグピーク位置をモニタリングする手法が精力的に研究されている。

我々のグループでは、粒子線の軌跡から放出されるエネルギーの低い (30~100 keV) X 線を利用する、独自の粒子線モニタリング手法の研究開発を進めている。平成 22 年度に原理実証研究を開始し、平成 25, 26 年度に大型計算機 FX900 を利用して実施したモンテカルロシミュレーションによって、粒子線治療ビームの軌跡から放出される X 線の主成分が、二次電子の速度変化に付随して発生する X 線 (二次電子制動輻射) であることを突き止めた。この X 線は即発性であるため、治療を行っているまさにその時の粒子線のモニタリングに使用できる。また、エネルギーが低く、物理的コリメータを用いたイメージング装置で容易に画像化できるため、小型かつ安価な装置構成を採用できるという利点もある。

今回、実用性検証のための研究の一環として、ピンホール型 X 線カメラによる粒子線の水中軌跡の画像化可能性を ICE X を利用して検討した。

(2) 利用内容・結果:

モンテカルロ計算コード Particle and Heavy Ion Transport code System (PHITS) version 2.96 (T. Sato et al., *J. Nucl. Sci. Technol.* **55** (2018) 684) を用いてシミュレーションを実施した。図 1 にシミュレーションにおける幾何学配置の模式図を示す。シミュレーション空間に直交座標系を定義し、原点近傍に水ファントムを配置した。水ファントムは 20 cm × 20 cm × 10 cm の天井の空いたアクリル製の容器 (容器の厚さは 0.5 cm) とその内部の水から成り、重心が y 軸上に位置するように配置した。水ファントムの底面および 20 cm × 20 cm の面はそれぞれ xz および xy 平面に平行で、底面及び水面の y 座標はそれぞれ $y = -9$ cm 及び $y = 9$ cm とした。粒子線の中心軸は x 軸と一致させ、進行方向は x 軸の正の向きと一致させた。

水ファントムから約 100 cm 離れた位置に 1 台のピンホール型 X 線カメラを、z 軸に対して 4 回対称の形状を持つよう配置した。この X 線カメラは直径 0.15 cm、開口角 $\pm 15^\circ$ のピンホールをもつタンダステン製の遮蔽と、その内部に配置された 2 cm × 2 cm × 0.1 cm の板状のガドリニウム・アルミニウム・ガリウム・ガーネット (GAGG) 結晶から成る。GAGG 結晶の中央 1.57 cm × 1.57 cm × 0.1 cm の領域は 32 × 32 個のピクセルに分割し、粒子線軌跡から

放出された電子制動輻射をピンホール型コリメータを通して GAGG 結晶上に結像させ、各ピクセルで 30~60 keV のエネルギー付与の事象数を計数することによって粒子線画像を作成した。

シミュレーションは陽子線及び重粒子線（炭素イオン線）の二種類について行った。陽子線については 100, 139, 171 MeV の 3 つ、重粒子線については 218, 249, 278 MeV/u の 3 つの入射エネルギーについて行った。なお、入射陽子数は順に 2.22×10^{11} , 3.46×10^{11} , 1.40×10^{11} 個、入射炭素イオン数は全ての入射エネルギーで 4.7×10^{11} 個とした。

図 2 に、シミュレーションにより得られた粒子線画像を示す。陽子線、重粒子線の両者について、粒子線の飛跡を明確にとらえており、また、エネルギーの変化に伴うビーム飛跡の長さの変化もはっきりと画像に現れているのがわかる。ピクセル当たりのカウントの最大値は、陽子線が 7~19 個であるのに対し、重粒子線は 480~680 個となった。これは、陽子線に比べて重粒子線のほうが、イオン入射あたりの二次電子制動輻射の発生数が多いことを反映している。

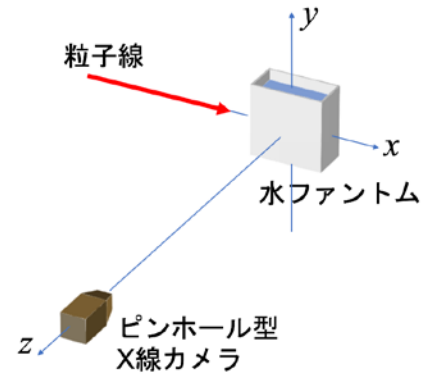


図 1. シミュレーションにおける水ファントム及び X 線カメラの配置

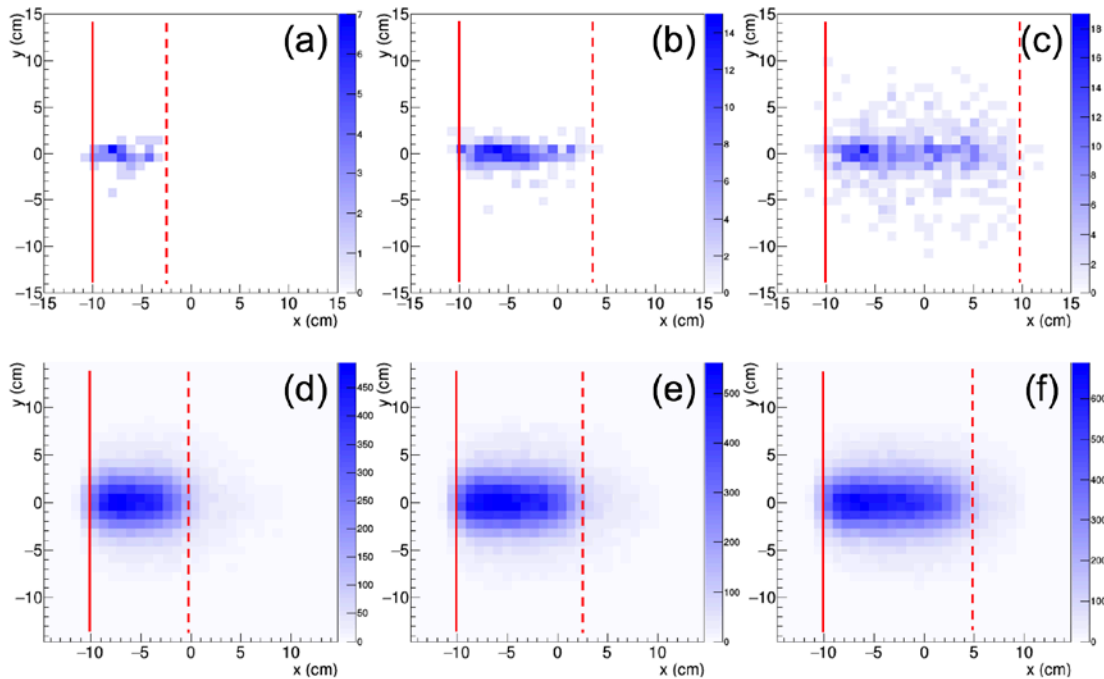


図 2. シミュレーションにより得られた粒子線画像。(a) ~ (f) は順に 100, 139, 171 MeV の陽子線, 218, 249, 278 MeV/u の重粒子線の結果。実線と破線はそれぞれ水ファントムの入射面とブラッグピーク位置を表す。

今回、ピンホール型 X 線カメラを用いた制動輻射計測による粒子線の画像化の可能性をモンテカルロシミュレーションにより評価し、X 線カメラを用いて粒子線軌跡を画像化できる可能性があることを示した。得られた結果は、粒子線治療施設で実施した実測結果とともに 3 本の論文にまとめ、査読付論文誌に掲載された（成果リスト 1-3）。また、同内容について 2 件のプレス発表を行った（成果リスト 4, 5）。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Mitsutaka Yamaguchi, Yuto Nagao, Koki Ando, Seiichi Yamamoto, Toshiyuki Toshito, Jun Kataoka and Naoki Kawachi, Secondary-electron-bremsstrahlung imaging for proton therapy, *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A*, vol. 833, 199, 2016
- 2) Koki Ando, Mitsutaka Yamaguchi, Seiichi Yamamoto, Toshiyuki Toshito and Naoki Kawachi, Development of a low-energy x-ray camera for the imaging of secondary electron bremsstrahlung x-ray emitted during proton irradiation for range estimation, *Phys. Med. Biol.*, vol. 62, no. 12, 5006, 2017
- 3) Mitsutaka Yamaguchi, Yuto Nagao, Koki Ando, Seiichi Yamamoto, Makoto Sakai, Raj Kumar Parajuli, Kazuo Arakawa and Naoki Kawachi, Imaging of monochromatic beams by measuring secondary electron bremsstrahlung for carbon-ion therapy using a pinhole x-ray camera, *Phys. Med. Biol.*, vol. 63, no. 4, 045016, 2018
- 4) (プレス発表) 粒子線治療に役立つ新たなビーム可視化法を開発～目に見えない陽子線や重粒子線の到達位置をオンタイムで画像化～, 量子科学技術研究開発機構, 2018/02/15
- 5) (プレス発表) 粒子線の“リアルタイム見える化”を実現する新手法～飛跡に沿って発生する制動放射線に着目～, 量子科学技術研究開発機構, 2017/03/28

(4) 今後の利用予定:

より高効率なカメラ（平行穴コリメータ型 X 線カメラ等）を用いることで、より少量の入射イオン数においても同程度の画像の取得が可能となることが予測される。今後、ICE X を利用して、その実現可能性を検討する予定である。

Delbrück Scattering Calculation

James Koga

量子ビーム科学研究部門 関西光科学研究所

光量子科学研究部 高強度レーザー科学研究グループ

(1) 利用目的:

We wish to calculate the scattering cross section of gamma ray photons off of nuclei at photon energies around 1 MeV with high resolution in angle and energy. By performing such a calculation we will be able to determine the photon energy and scattering angle regimes where the vacuum contribution to photon scattering can be isolated. This would lead to precise measurements of the vacuum and the possibility for the discovery of new physics.

(2) 利用内容・結果:

We performed Monte Carlo integrations for equations of the differential scattering cross section of Delbrück Scattering. We surveyed various scattering angles, photon polarizations, and photon energies. Via these results we have shown that linearly polarized photons irradiating materials having sufficiently low atomic number and photon energies to avoid higher order corrections with polarizations parallel to the scattering plane, can be used to measure the vacuum contribution to the elastic scattering, Delbrück scattering, with near isolation and high precision. With such precise nearly isolated measurements possible deviations from quantum electrodynamics predictions could be seen with high flux linearly polarized sources indicating the need for new physics.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) J. K. Koga and T. Hayakawa, Possible Precise Measurement of Delbrück Scattering Using Polarized Photon Beams, *Physical Review Letters*, vol. 118, 204801 (5 pages), 2017
- 2) プレス発表: 量子ビーム科学部門 2017/05/15 光子と光子の相互作用の検証方法を提案
- 量子電磁力学が 20 世紀に予測した現象の理解が期待される -
<http://www.qst.go.jp/information/itemid034-002196.html>

(4) 今後の利用予定:

We next plan to do the next higher order perturbative calculations of the Delbrück scattering amplitude.

アルミ薄膜ターゲットを用いたレーザー加速の PIC シミュレーション

PIC simulation of laser ion acceleration with an aluminum foil target

守田 利昌

量子ビーム科学研究部門 関西光科学研究所

光量子科学研究部 高強度レーザー科学研究グループ

(1) 利用目的:

レーザーイオン加速で得られているイオンのエネルギーは、その実応用に対してはまだ低く、生成イオンの高エネルギー化が重要課題である。高エネルギーイオンを生成するには、単純にはより強いレーザーを用いることで可能である。しかし、現在利用可能なレーザー強度は、単純に照射することで、実応用可能となる高エネルギーイオンを生成するにはまだ低く、また、高強度レーザーはコスト的にも非常に高価である。そこで、効率的に高エネルギー陽子（イオン）を生成する条件をシミュレーションにより研究し、より低い強度のレーザーで、より高いエネルギーの陽子（イオン）を発生させる条件を解明することが重要となる。また、レーザーイオン加速は、現象時間及び空間が非常に微細であるため、実験だけで現象理解及び検討を行なうのは困難である。そこで、コンピューターシミュレーションを用いた現象解明と検討が重要となる。

現在、関西光科学研究所において、新レーザーシステムである J-KAREN-P が稼働中である。ここでは、この新しいレーザーシステムによるイオン加速の 3 次元 PIC シミュレーションの結果を報告する。

(2) 利用内容・結果:

最初に、実験結果とシミュレーション結果の比較を示す。条件は、旧レーザーである J-KAREN レーザー（出力=196 TW、強度=2×10²¹ W/cm²、エネルギー=7.5 J）を 0.8μm 厚のアルミ薄膜に 45° 入射である。図 1 にターゲット構成を示す。ターゲット表面に非常に薄い鉄の層が付着しており、さらにその上に水素の層が定義されている。図 2 にシミュレーション結果を示す。断面表示の目的で縦方向に半分をカットして表示している。陽子はそのエネルギー値で色分けされており、赤い部分は高エネルギーであることを示している。計算で得られた陽子エネルギー=38 MeV、鉄イオンエネルギー=13 MeV/u であり、実験での測定値はそれぞれ 40 MeV、16 MeV/u であった。シミュレーション結果は実験値と良く一致した。

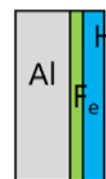


図 1 Target

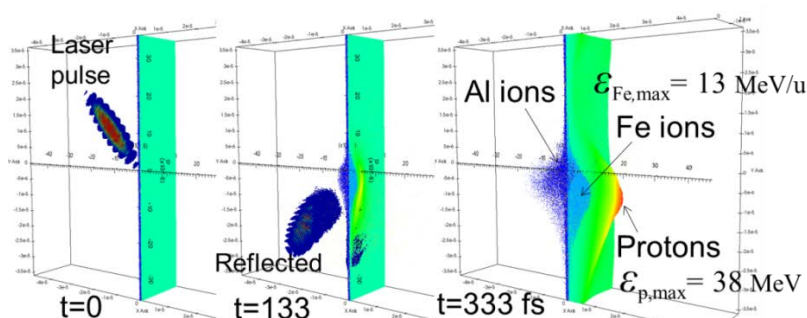


図 2 J-KAREN 実験のシミュレーション結果

次に、同じ実験を、新レーザーである J-KAREN-P を用いて実施した場合のシミュレーション結果を示す。条件は、レーザーを J-KAREN-P (出力=783 TW、

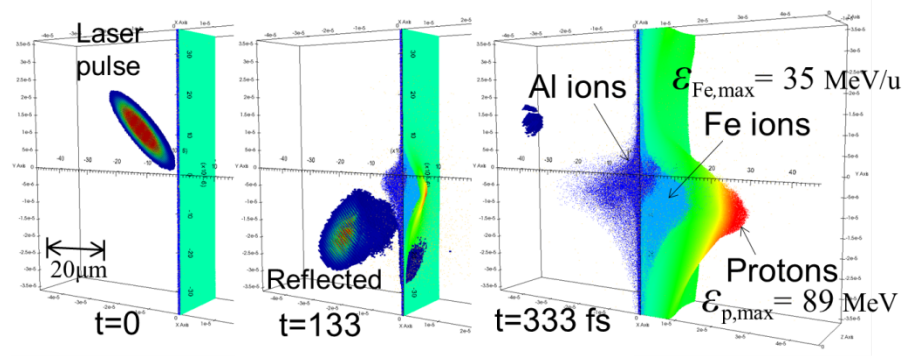


図3 J-KAREN-P を用いた場合のシミュレーション予測

強度= 1×10^{22} W/cm²、エネルギー=25 J) に変更した以外は上と同じである。図3にシミュレーション結果を示す。J-KAREN-P を 0.8 μm 厚のアルミ薄膜に照射した場合、陽子エネルギー=89 MeV、鉄イオンエネルギー=35 MeV/u のイオンが得られるとのシミュレーション予測を示した。ターゲットに CH₂, H₂O 等の水素を多く含む物質を用いることで、J-KAREN-P で最大約 160 MeV の陽子が得られることを以前の研究で示した。金属ターゲットは、高エネルギー陽子生成という観点からは有利ではないと言える。

本研究により、PIC シミュレーションで良好な解が得られることが分かった。また、その加速過程における現象を詳細に示し理解を深めた。さらに、J-KAREN-P レーザーによるシミュレーション予測を示した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) 守田 利昌, 薄膜を用いたレーザーイオン加速の PIC シミュレーション, 光・量子ビーム科学合同シンポジウム 2016, 大阪, 2016

学術誌掲載論文

- 2) T. Morita, Proton energy behavior by variation of the target density in laser acceleration, *Physics of Plasmas*, **24**, 083104, 2017

(4) 今後の利用予定:

これまでの成果を生かし、より高エネルギーかつ高品質なイオンビーム生成条件の研究を進める。関西光科学研究所においては、J-KAREN-P を用い世界最高エネルギーのイオン生成を実現することが重要課題となっている。高エネルギーイオンを得るためには、最適な条件の採用が重要である。PIC シミュレーションで、現象をより正確に解明し、生成イオンのエネルギーを正しく評価するには、3D 計算が必要である。2D 計算に比べ、3D 計算では次元が増えることにより、空間領域と用いる粒子数が著しく増加する。それにともない、必要とする計算機資源は増大し、高い計算能力を有する大型計算機が必要となる。また、多くの計算時間も必要となる。今後も大型計算機を用いて 3D 大規模計算を実施して行く予定である。

レーザーと固体の非線形相互作用シミュレーション

乙部 智仁

量子ビーム科学研究部門 関西光科学研究所
光量子科学研究部 超高速光物性研究グループ

(1) 利用目的:

a. 単層 MoS₂ の高強度レーザー場中で誘起される非線形スピン-軌道相互作用の解析

本研究では、近年スピン軌道相互作用による偏光操作素子として期待されている単層 MoS₂ のサブ fs 領域で起きる超高速非線形現象の解明と応用可能性を探る。

そのためにまずスピン軌道相互作用を考慮した実時間固体電子ダイナミクス計算コードを開発する。これは 2 成分スピノールを使った、初めての non-collinear な固体電子ダイナミクス計算となる。

単層 MoS₂ に強レーザー場を照射した時に直線偏光から円偏光へと変換される効率及びそのレーザー電場強度依存性を明らかにし、光電場周期より速い光変調が可能であるか解析する。

b. 半導体のレーザー加工におけるダブルパルス照射の影響: SiC の加工閾値低下効果の解明

九州大学の林グループとの共同研究から、パルス間隔を調整したダブルパルス照射により SiC の加工効率が上がる事が明らかとなってきた。

本解析では二つ目のパルス到達時の電子状態分布が加工現象に与える効果を明らかにすることを目的とする。

まず電子緩和が考慮しない 2 パルス照射をシミュレートする。次にある電子温度に対応するフェルミ分布を用意し、そこにレーザーを照射することで電子励起効率がどれだけ変化するかを明らかにする。

(2) 利用内容・結果:

Spin-noncollinear な実時間・時間依存コーンシャム方程式計算プログラムを開発し、単層 MoS₂ の非線形レーザー応答のシミュレーションを行った。その結果 4fs の超短パルスレーザーによる第二高調波が励起レーザーと垂直な偏光を持って放射される事がわかった。現在実験をエアランゲン大にて行っており、詳細の記載は控えたい。

3C-SiC のダブルパルス照射による励起過程のシミュレーションを行った。ダブルパルス照射の時間差で起きる電子緩和がまず伝導帯と価電帯で独立に起きることから、各バンド内での内部エネルギーと電子-空孔対密度を用いて電子温度を算出するコードを作成した。その結果、多光子励起が主要な励起過程となるレーザー強度での 1 パルス励起では空孔と電子の温度に大きな乖離があり、SiC では空孔温度が高くなる事が分かった。得られた電子空孔それぞれの温度を用いた有限温度 DFT 計算結果を初期値とした 2 パルス目の照射シミュレーションを行ったところ、電子空孔温度が低い程電子励起効率が上がる事が明らかとなった。この結果を更に詳細に調べた結果、プラズモン振動数が電子温度によって変化することが影響している

ことが分かった。これは有効質量が小さいバンド端に電子が集中することで実行的な電子質量が小さくなり、プラズモン振動数が上がる事に対応していると推測される。

以上の結果から 2 パルス照射は電子励起効率を向上させるが、電子温度を制御できればさらなる効率の向上が見込まれる事が明らかとなった。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) T.Otobe, Analytical formulation for modulation of time-resolved dynamical Franz-Keldysh effect by the electron excitation in dielectrics, *Physical Review B*, Vol. 96, 235115, 2017
- 2) T.Otobe, T. Hayashi, and M. Nishikino, Effect of plasma formation on the double pulse laser excitation of cubic silicon carbide, *Applied Physics Letters*, Vol. 111, 2017
- 3) M.Nakano, T.Otobe, and R. Itakura, Anomalous photoelectron angular distribution in ionization of Kr in intense ultraviolet laser fields, *Physical Review A*, Vol. 95, 063404, 2017
- 4) H.Akagi, T.Kumada, T.Otobe, *et. al.*, Isotope-selective ionization utilizing field-free alignment of isotopologues using a switched nanosecond laser pulse, *Applied Physics B-LASER AND OPTICS*, Vol. 124, 14, 2018
- 5) 乙部 智仁, レーザー場中にある誘電体における時間分解動的 Franz-Keldysh 効果によるサブサイクル応答, *レーザー研究*, Vol. 45, 226, 2017

(4) 今後の利用予定:

半導体や誘電体表面での励起電子数および電子温度のマクロな分布の計算を行い、それを初期値とした分子動力学計算に繋げる。これにより、加工深さや加工痕形状の評価とその形成過程を数値計算から明らかにすることを目指す。

ナノ構造に光を照射した際に局所的な近接場が形成される。近接場は普通の光では禁制な励起も可能にすることが期待される。まずは酸素分子の近接場励起シミュレーションをスピンを考慮して行い、スピン反転を伴う励起の可能性を探る。

超高速光物性制御のさらなる拡張を図るべく、機能性非線形材料の **Tr-DFKE** の計算を行う。その際に起きる物質の異方性や高調波発生特性について解析し、新たな光学過程の予測を目指す。

重粒子線による DNA 損傷の物理過程シミュレーション研究

森林 健悟

量子ビーム科学研究部門 関西光科学研究所

量子生命科学研究部 放射線 DNA 損傷研究グループ

(1) 利用目的:

重粒子線によるがん治療は高い治療効果を持つことが知られており、その理由の一つはクラスターDNA 損傷を作るからと考えられている。しかしながら、クラスターDNA 損傷の生成機構は分かっていない。この機構が分かれば、より高い治療効果をもつがん治療の実施につながるのではないかと考え、シミュレーションで炭素線でのクラスターDNA 損傷の生成機構を調べることを目指す。

クラスターDNA 損傷の研究をするには、DNA 損傷の空間分布を調べる必要がある。DNA 損傷は、重粒子線による衝突電離で発生する二次電子の直接相互作用、及び二次電子と水との相互作用から生じた OH ラジカルによる間接相互作用から生じると考えられており、この分布は二次電子がどのような運動をするかが重要であると考え、この運動のシミュレーションモデル開発を行うことにした。

重粒子線衝突電離により二次電子だけでなく、標的中の分子イオンを生成するが、この分子イオンが局所的に高密度に生成するので、これらのイオンが作るトラックポテンシャルが二次電子の運動に影響するのではないかと考え、この電場の影響を考慮した二次電子の運動のシミュレーションモデルの開発を行った。ここで、トラックポテンシャルとは、重粒子線照射で重粒子線の軌道付近に生じる電場が作るポテンシャルのことである。その結果、この影響は、非常に大きいことがシミュレーションで予測できた。そこで、シミュレーションの妥当性を検証するため、トラックポテンシャルの定量性の研究を行った。さらに、この影響の大きいことを示唆した観測を掲載した論文[Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B193, 661(2002)] を発見し、我々のシミュレーションとその観測値との比較を行った。

(2) 利用内容・結果:

トラックポテンシャルが二次電子の運動に影響を与える観測値が存在するにもかかわらず、従来のシミュレーションモデルでは知る限り、トラックポテンシャルを取り入れたものはなかった。そのため、従来のシミュレーションでは二次電子は入射粒子線の軌道から離れる一方であった。ここで開発したモデルでは遅い二次電子はトラックポテンシャルに束縛され、長い間、軌道付近でエネルギーを標的に付与する。

我々の新しいシミュレーションモデルでは、(i)分子を液体密度になるように標的中に分布させ（従来のモデルでは標的は連続体が用いられた）、(ii)個々の分子に対して入射粒子による衝突過程を取り扱い、(iii)発生した個々の二次電子と個々の荷電粒子（分子イオンと他の二次電子）とのクーロン相互作用を取り扱う。このクーロン相互作用がトラックポテンシャルになる。

我々のモデルを使用したシミュレーションは現在のスーパーコンピューターを使用しても1つのイオンに数週間の時間が掛かる。すなわち、従来のモデルを構築した1970-80年代のコンピューターで我々のモデルを使用した場合、計算時間が掛かりすぎて研究にならないと考えることができる。

重粒子が照射されると標的中の分子が重粒子の軌道上で電離され、多くの分子イオンがトラックポテンシャルを形成する。図1にトラックポテンシャルを作る電場の強度を示す。この図から、電場は σ_{ion}/r に比例することがわかった。ここで、 σ_{ion} 、 r は、それぞれイオン衝突電離断面積、入射粒子の軌道からの垂直距離を表す。点電荷が作る電場は、 $1/r^2$ に比例するので、ここで生成した電場は、図1に示されるように点電荷よりも長距離に作用することがわかった。この長距離力により遅い二次電子が容易にトラックポテンシャルに束縛されることができると考えることができる。すなわち、トラックポテンシャルが遅い二次電子を捕獲できる理由を定量的に明らかにした。

図2では σ_{ion} の関数としてのトラックポテンシャルからの脱出確率を示した。トラックポテンシャルを考慮した場合と無視した場合の $r = 10 \text{ nm}$ に二次電子が到着する数の比が脱出確率に相当する。ここで、 r は重イオンの軌道からの距離を表す。 $r = 10 \text{ nm}$ でトラックポテンシャルの効果はほぼなくなることは確認済みである。図2から、脱出確率は、ほぼ、 $\sqrt{\sigma_{\text{ion}}}$ に反比例することがわかった。さらに、この結果は、前述の観測値の傾向と良い一致を示し、シミュレーションが正常に動作していることが検証できた。図2では、入射粒子のエネルギー(E_i)を500 keV/uとしたが、粒子のエネルギーが変わってもこの関係が成立することもわかった。

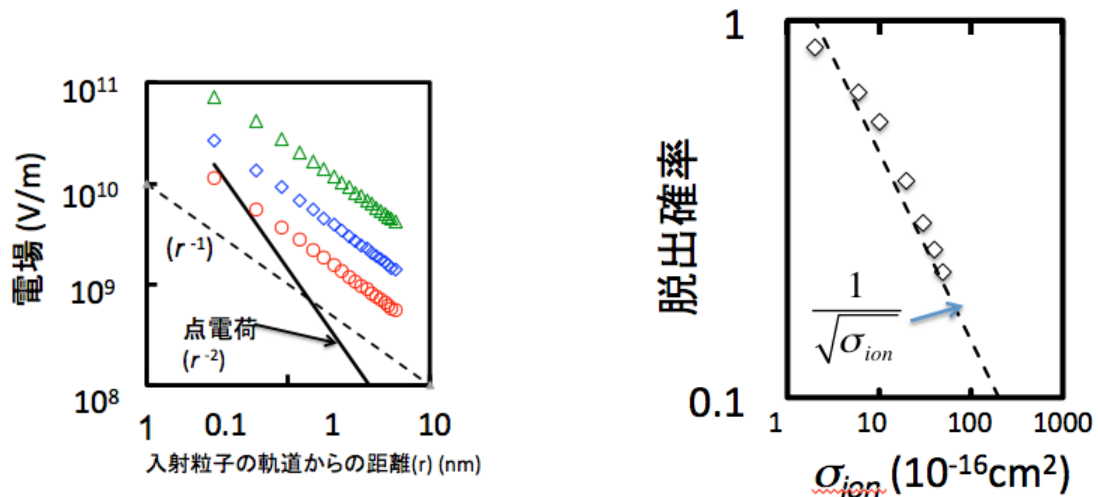


図1 σ_{ion} に対するトラックポテンシャルを形成する電場と r との関係: $\sigma_{\text{ion}} = 3 \times 10^{-15} (\triangle)$, $10^{-15} (\diamond)$, $4 \times 10^{-16} (\circ) \text{ cm}^2$ であり、点線は $1/r$ に比例する関数、実線は点電荷の電場 ($\propto 1/r^2$) を表す。

図2 $E_i = 500 \text{ keV/u}$ の入射粒子に対して σ_{ion} と二次電子のトラックポテンシャルからの脱出確率の関係: \diamond は、我々のシミュレーション結果、点線は $\sigma_{\text{ion}}^{-0.5}$ を表す。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

・ 学会リスト

- 1) K.Moribayashi, Simulation study for the motion of secondary electrons into materials, IUMAR-ICAM 2017, 京都大学 (京都市), 2017 年 7 月
- 2) K. Moribayashi, Role of ion impact ionization cross sections in the irradiation of swift heavy ions into condensed matter, International Conference on Photonics, Electronic and Atomic Collisions, ケアンズ (オーストラリア), 2017 年 8 月
- 3) 森林 健悟, 「重イオン照射によるプラズマ生成モデルのクラスターイオンへの応用」, TIA 連携プログラム探索推進事業シンポジウム:準相対論的巨大大クラスターイオンビームが拓く世界, 筑波大学 (つくば市), 2017 年 9 月
- 4) 森林 健悟, 「重イオンの軌道付近で生成する ナノプラズマ中の電子の総エネルギー」, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 岩手大学 (盛岡市), 2017 年 9 月

・ 論文リスト

- 5) K. Moribayashi, Simple formulas for heavy-ion-irradiation-induced electric field, *Nucl. Instru. Methods Phys. Res. B*, vol.408, pp.241 – 243, 2017
- 6) K. Moribayashi, Effect of track potentials on the movement of secondary electrons due to irradiation of heavy ions, *J. Phys. Soc. Jpn.*, vol.86, pp.024301/1-6, 2017
- 7) K. Moribayashi, Effect of the track potential on the motion and energy flow of secondary electrons created from heavy-ion irradiation, *Radiat. Phys. Chem*, vol.146, pp.68-72, 2018
- 8) K. Moribayashi, 'Proposal for experiment systems using laser driven heavy ions and XFELs to understand physical phenomena occurring near the incident ion path, *Proceedings of the 15th International Conference on X-ray lasers*, vol.202, pp.121 -123, 2018

(4) 今後の利用予定:

現在のシミュレーションモデルは、できる限り現実に近くするために、近似を使わず、効率性を無視しているため、わかりにくくなっている。すなわち、我々の作成したモデルは世界唯一であるが再現することが難しい。そこで、論文リスト[1]で求めたトラックポテンシャルの簡便式をシミュレーションコードに導入すれば、モデルがわかりやすくなり、計算時間も短縮できると考えた。この簡便式を導入したコードを作成し、このコードで計算した結果と現在のコードの結果を比較する。さらに、このコードをクラスターイオンビームや EUV-FEL など様々な量子ビーム照射用が作り出すトラックポテンシャルを解析するモデルに改良し、トラックポテンシャルと飛跡構造 (エネルギー付与の空間分布) の関係の解明を目指す。

大型生体高分子の構造、ダイナミクス解析のためのシミュレーション技術の開発とその実行

河野 秀俊、Li Zhenhai、Luo Di

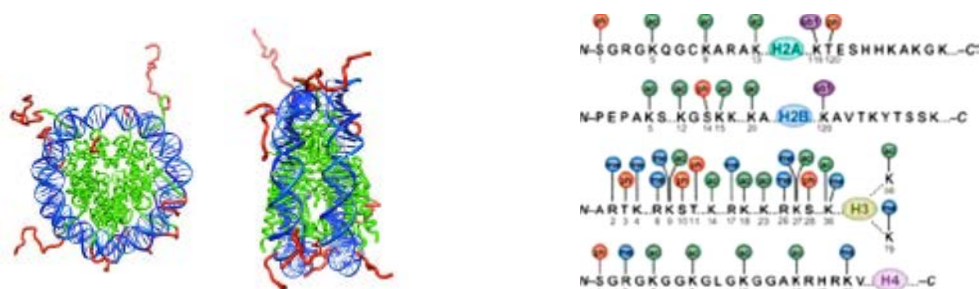
量子ビーム科学研究部門 関西光科学研究所

量子生命科学研究部 生体分子シミュレーショングループ

(1) 利用目的:

DNA の転写、複製、修復、組み換えは、生命活動の根幹をなす現象である。ヒトを含め、真核生物の DNA は、全長数メートルに及ぶ DNA が直径約数ミクロンの核の中にコンパクトに収納されている。その収納された構造の基本単位構造がヌクレオソームである。このヌクレオソーム構造は、転写、複製、修復、組み換えなどの過程で絶えず位置を変えたり、壊されたりしているが、その制御機構はよくわかっていない。本シミュレーションでは、各過程で特異的に現れるヌクレオソーム及びその化学修飾の違いが構造の安定性や位置の変化にどのような違いを生み出しているのか明らかにする。

本研究では、特に、ヌクレオソームを構成しているヒストンタンパク質の N 末端領域の構造と化学修飾が構造に与えるインパクトについて調べる。N 末端領域の約 30 アミノ酸残基長の部分はヒストンテールと呼ばれ、さまざまな化学修飾を受け、ヌクレオソームの分子認識に重要な役割を果たしている。しかしながら、その構造の揺らぎが非常に大きく、結晶構造解析などの方法によって実験的に構造を決定することができない。我々は、2014 年高効率に構造サンプリングができる ALSD 法を開発した。この方法を用いて、ヒストンテールの構造の全様を明らかにする。また、エピジェネティクスの実体であるヒストンテールの化学修飾がヌクレオソーム構造に与えるインパクトを調べることで、ヌクレオソームの動態を明らかにする。特に、ヒストンコード説（ヒストンの化学修飾状態が細胞の運命（分化）を決めているという仮説）に対して、修飾の違いとヌクレオソーム構造に対する影響の違いに相関があるのかないのかを明らかにする。



図：ヌクレオソーム（左）。青が DNA、赤がヒストンテール、緑は残りのテール以外のヒストンタンパク質。ヒストンテールのアミノ酸配列と修飾の位置と種類（右）。赤がリン酸化、緑がアセチル化、青がメチル化を表す。

(2) 利用内容・結果:

平成 28 年度 ALSD 法で明らかになったテールの相互作用の特性

我々は、ヌクレオソーム間を繋ぐ DNA (リンカーDNA) 付近に位置し、その構造に深く影響を与えるヒストン H3 のテールの 1) アセチル化されていない系と、2) 代表的なアセチル化される残基である 14 残基目のリシンがアセチル化された系、の二つの系のシミュレーションを行い (右図 A)、その構造を理解するとともに、アセチル化がテールや DNA の構造に及ぼす影響を調べた。この結果、テールに関する二つの相互作用の特性が明らかとなった。一つ目の特性は、アセチル化の有無に関わらず、テールは DNA から解離しないというものである。ALSD 法では二つの系のいずれにおいても、パラメータ λ の値が変化することにより、テールが DNA から解離した立体構造が得られる (右図 B、C)。しかし、再重法によって計算された $\lambda = 1$ に対応する現実の系では、これらの構造の出現確率は極めて低かった。このことは、テールが解離した構造はエネルギー的に極めて不安定であり、アセチル化による電荷の中和がリシン一残基だけではそのような構造は取り得ないことを示唆している。アセチル化は、テールを DNA から解離させるような構造変化を誘起するのではなく、別のメカニズムでクロマチンの弛緩を引き起こしていると考えられる。

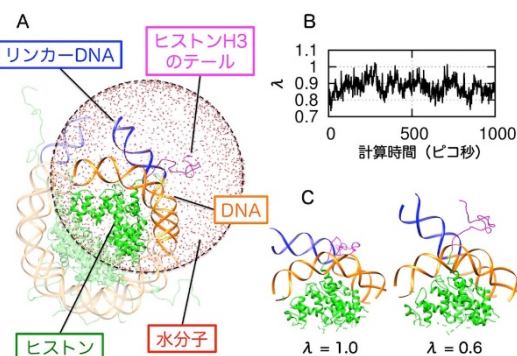


図:シミュレーションの系 (A), パラメータ λ の変化 (B), 代表的な構造 (C)

二つ目の特性は、ともに正電荷をもつリシンとアルギニンの振る舞いの違いである。表面にあるリシンとアルギニンの状態を調べたところ、これらのアミノ酸は二つの系のいずれにおいても、配列上の位置に依らずリシンは溶媒に露出しやすく、アルギニンは DNA と接触しやすいという傾向を持つことが明らかとなった。リシンとアルギニンはともに +1 の正電荷を持つため、似通った性質のアミノ酸と考えられがちである。しかし我々の結果では、リシンは表面に露出して他のヌクレオソームとの相互作用を仲介し、アルギニンはヌクレオソームの DNA と相互作用しその負電荷を中和する傾向がある、という異なる性質があることが分かった。

平成 29 年度 アセチル化、メチル化の影響解析

ヒストン H3 の N 末端領域には、7 つのアセチル化部位と 4 つのメチル化部位がある。この 11 か所すべてについてシミュレーションを実施し、アセチル化部位、メチル化部位それぞれの共通な性質を明らかにした。アセチル化、メチル化に関わらず、N 末端領域はコンパクトな構造をとることがわかった。しかし、コンパクトな構造には性質の違いが見られた。アセチル化の場合、らせん構造をとることが多くなるのに対し、メチル化の場合はそのような特定の構造は見られなかった。その代わりに、N 末端領域の親水性残

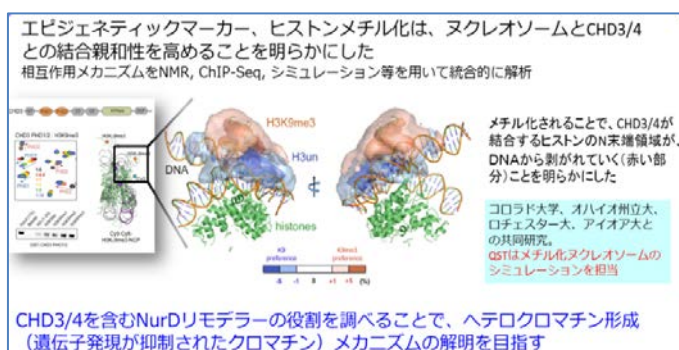


図: K9 メチル化有り無しでの H3 テールの空間分布の

基が溶媒により露出して、メチル化によって失われた溶媒和エネルギーを補うような構造をとることが分かった。9 番目のリジンについては、さらに詳細に解析した。結果、9 番目のリジンのメチル化(K9me3)は、ヒストン H3 の N 末端領域の動きを抑制し、特定の場所に留まりやすいこと、それが DNA をヒストンから剥がすことを見出した (図の赤色部分)。この性質は、NMR などシミュレーションとは独立な実験でも検証された。K9me3 は、細胞核内の DNA の収納状態を変える NurD リモデラー分子のターゲットになっており、我々の分子モデリングから NurD リモデラー分子ひとつが 2 つのヌクレオソームに結合することが示唆された。これらの成果は Cell Reports と Nature Comm. に発表した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) H. Kono, S. Sakuraba, H. Ishida. Free Energy Profiles for Unwrapping the Outer Superhelical Turn of Nucleosomal DNA. *PLoS Comp Biol.* 14, e1006024, 2018
- 2) 池部 仁善, 櫻庭 俊, 河野 秀俊. ヌクレオソーム中におけるヒストンテールの特性とアセチル化の影響 (H3 Histone Tail Structure within the Nucleosome and the Impact of the Acetylation). *日本生物物理学会誌*. 57, 095-7. 2017
- 3) A. H. Tencer, K. L. Cox, D. Luo, J. B. Bridgers, J. Lyu, X. Wang, J. K. Sims, T. M. Weaver, H. F. Allen, Y. Zhang, J. Gatchalian, W. Li, J. Ikebe, P. A. Wade, J. J. Hayes, B. D. Strahl, H. Kono, M. G. Poirier, C. A. Musselman, T. G. Kutateladze, Covalent modifications of histone H3K9 promote binding of CHD3. *Cell Reports*, 21, 455-66, 2017
- 4) D. Kato, A. Osakabe, Y. Mizukami, F. Adachi, Y. Arimura, K. Saikusa, S. Akashi, Y. Nishimura, S.-Y. Park, A. Matsumoto, H. Kono, R. Inoue, M. Sugiyama, H. Kurumizaka, Crystal structure of the overlapping dinucleosome composed of hexasome and octasome. *Science*. 356, 205-8. 2017
- 5) H. Ishida, H. Kono, H4 tails potentially produce the diversity in the orientation of two nucleosomes. *Biophysical J.* 113, 978-90, 2017
- 6) J. Gatchalian, X. Wang, J. Ikebe, D. Luo, M. Gibson, Y. Zhang, K. Cox, C. A. Musselman, M. G. Poirier, H. Kono, J. J. Haynes, T. G. Kutateladze, Accessibility of the histone H3 tail in the nucleosome for binding of paired readers. *Nat Comm.* 8, 1489. 2017
- 7) M. Andrabi, A. P. Hutchins, D. Miranda-Saavedra, H. Kono, Nussinov R, Mizuguchi K, et al. Predicting conformational ensembles and genome-wide Transcription Factor binding activities from DNA sequences, *Scientific Reports*, 7, 4071, 2017
- 8) Z. Li, H. Kono. Distinct Roles of Histone H3 and H2A Tails in Nucleosome Stability. *Scientific Reports*, 6, 31437. 2016
- 9) J. Ikebe, S. Sakuraba, H. Kono. H3 Histone Tail Conformation within the Nucleosome and the Impact of K14 Acetylation Studied Using Enhanced Sampling Simulation. *PLoS Comput Biol.* 12, e1004788, 2016

(4) 今後の利用予定:

質量分析の精度向上により、アセチル化、メチル化以外の翻訳後修飾が見つかってきている。今後は、これらの修飾のヌクレオソーム単体に与える影響やヌクレオソーム同士の相互作用に与える影響を調べていく。

放射線影響に対処する大型生体高分子の機能発現メカニズム解析

石田 恒、松本 淳

量子ビーム科学研究部門 関西光科学研究所

量子生命科学研究部 生体分子シミュレーショングループ

(1) 利用目的:

生体中では、紫外線などの放射線により DNA は常に損傷を受けている。損傷 DNA の誤った遺伝情報から生じる異常タンパク質は癌化を引き起こす可能性があるため、正常な生体機能を維持するための生体反応が必要不可欠である。本研究課題では、平成 27 年度までに進めた生体機能発現を解析する方法論を更に拡張、高速化して、DNA の複製、修復、転写に中心的な働きをするヌクレオソームを対象（図 1）に、放射線影響に対処する大型生体高分子の機能発現シミュレーションを実行し、これらの機能発現メカニズムを明らかにする。

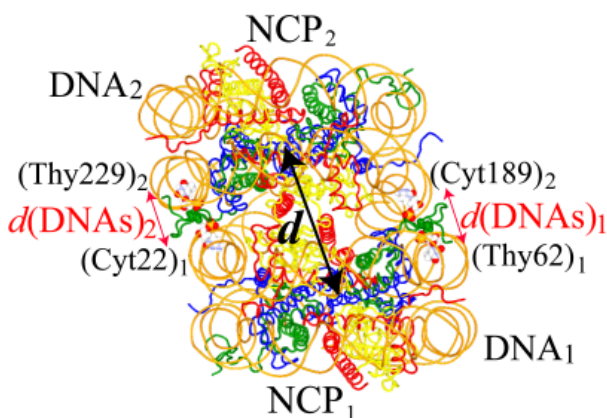


図 1：スタックした 2 つのヌクレオソームの系。DNA（橙色）、ヒストン H3(青)、H4（緑）H2A（黄）、H2B（赤）放射線影響下において、ヌクレオソーム（および、その集合体である染色体）は、DNA の複製、修復、転写に中心的な働きをする。

(2) 利用内容・結果:

本計算の系は、2 つのヌクレオソーム（水、イオンを含めて約 46 万原子系）の系（図 1 参照）について、ヒストン H4 と隣接するヌクレオソームの相互作用様式をシミュレーテッドアニーリングして予測した。計算手法は、それぞれのヌクレオソームの重心の間の距離を反応座標に設定した ABMD 自由エネルギー計算法を用いた。なお、ABMD 自由エネルギー計算法はメタダイナミクス法の一つで、シミュレーション中の反応座標値にガウス型の局所的エネルギーを累積して生成されるバイアスポテンシャルを通常の原子間相互作用ポテンシャルに追加して実行する分子動力学シミュレーション法である。

2 つのヌクレオソームの重心間距離を反応座標に設定し、長時間にわたるサンプリングを行うことにより、ヌクレオソームの相対配座を広く、一様に生成することができた（図 2 参照）。更にアンブレラサンプリングシミュレーションを延べ数十マイクロ秒にわたって実行し、自由エネルギープロファイルを計算した。結果、2 つのヌクレオソームが解離するための相互作用力は数十 pN 以下と見積もられた。そして、自由エネルギーにもっとも寄与するのは、2 つのヌクレオソームのインターフェースに位置するヒストン H4 のテールとヌクレオソームの強い静電相互作用であることがわかった（図 3 参照）。また、スタックしたヌクレオソームの熱揺らぎは、予想に反して、不規則に離れたヌクレオソームの熱揺らぎと同程度であることがわかった。このスタックし

たヌクレオソームの高い運動性は遺伝子転写や DNA 複製に対してヌクレオソーム配向を迅速に
応答させ、更にはヌクレオソームの集合体であるクロマチンの構造変化を促すことで、遺伝子の
発現制御に寄与すると考えられる。

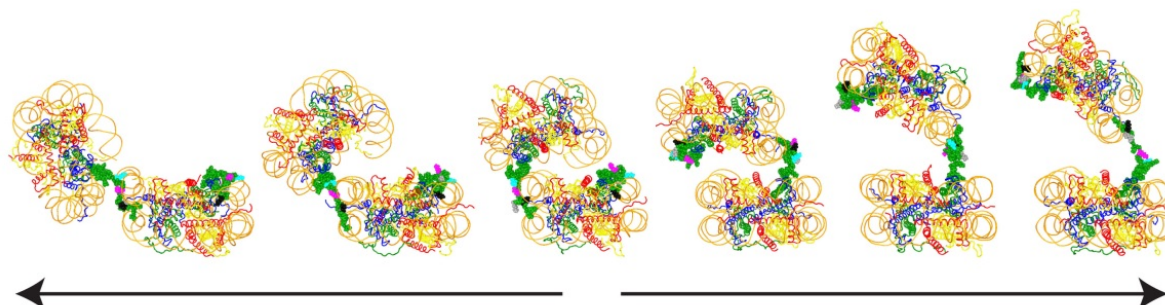


図 2：サンプリングにより得られた、2つのヌクレオソームの相対配座
2つのヌクレオソームは様々な配向を取り得る。このことはヌクレオソームの集合体である
染色体の多型性に大きく寄与すると考えられる。

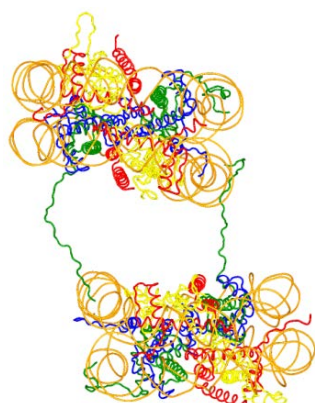


図 3：ヒストン H4 のテール（緑色）とヒストンタンパク質
の相互作用。正電荷を帯びるヒストン H4 のテール（緑色）
と負電荷を帯びる隣接したヌクレオソームとの強い静電相
互作用が、2つのヌクレオソームの相対配座に大きく寄与
している。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学術誌掲載論文

- 1) H.Ishida, H.Kono, H4 tails potentially produce the diversity in the orientation of two nucleosomes, *Biophys. J.*, vol.113, 978-990, 2017
- 2) A.Matsumoto, N.Miyazaki, J.Takagi, and K.Iwasaki, 2D hybrid analysis: Approach for building three-dimensional atomic model by electron microscopy image matching, *Scientific Reports*, vol.7, 377, 2017

(4) 今後の利用予定:

今後は、ヌクレオソームに巻き付いた DNA の解離過程、DNA ポリメラーゼの損傷 DNA 乗り越え修復過程などを調べることで、放射線影響に対処する生体分子の機能発現メカニズムを明らかにしていく。

第一原理分子動力学法に基づいた材料解析手法の開発

池田 隆司

量子ビーム科学研究部門 関西光科学研究所

放射光科学研究センター 量子シミュレーション研究グループ

(1) 利用目的:

実験データに頼らない第一原理シミュレーション手法は、高機能材料開発、環境問題、医薬品開発等へ計算科学からアプローチするために必要不可欠な基盤技術である。当課題では、新機能物質・材料の創製等に資するため、高精度密度汎関数電子状態計算法に基づいた第一原理分子動力学法と量子シミュレーション手法を融合し、シミュレーション技術の更なる高度化を図る。開発した手法を駆使して量子物性研究の観点から物質科学のフロンティアを開拓するとともに、新規材料の機能発現機構等の解明を目指す。

平成 28～29 年度は、主に、経路積分により原子核の量子性を考慮可能な第一原理経路積分分子動力学モジュールを整備し、ナノ多孔性物質 $[\text{Ca}_{24}\text{Al}_{28}\text{O}_{64}]^{4+}(4\text{H}^-)$ (C12A7:H^-)中のヒドリド H^- の挙動と高圧氷における構造と物性に対する原子核の量子効果の影響を評価した。なお一部の計算は、文部科学省ポスト「京」萌芽的課題 1「基礎科学のフロンティア — 極限への挑戦」の一環として実施した。

(2) 利用内容・結果:

・ナノ多孔性物質 C12A7:H^- 中のヒドリドの挙動解明

原子核の量子性を考慮可能な第一原理経路積分セントロイド分子動力学コードを開発し、ナノ多孔性物質 C12A7:H^- 中のヒドリド H^- の分布と振動状態に対する同位体効果を調べることでより開発したコードの性能を検証した。原子核を量的および古典的に扱った場合の 100 K における C12A7:H^- 中の H^- の分布の比較を図 1 に示す。低温では原子核の量子性の考慮の有無により H^- の分布に明瞭な違いがあることが示された。原子核の量子性を考慮すると H^- と D^- は 100 K でそれぞれ 0.255 Å と 0.199 Å の慣性半径を持つことが分かった。この慣性半径比は同位体質量比から期待される値に近い。この結果は開発したコードにより妥当な結果が得られることを示している。更に H^- と D^- のラットリングを詳細

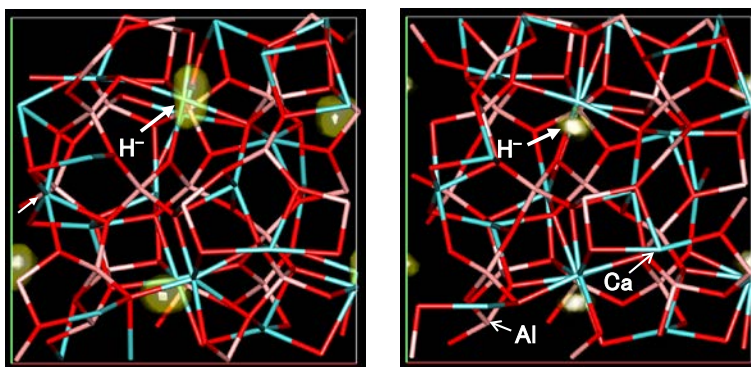


図 1 原子核を量的（左）および古典的（右）に扱った場合の 100 K におけるナノ多孔性物質 C12A7:H^- 中のヒドリド H^- の分布の比較。

に解析したところ、非自明な同位体効果がラットリングに現れ振動分光により検出可能である

ことが示唆された。

・高圧氷における核量子効果の解明

観測が困難な極限環境下での物質の構造と物性の評価に向け、開発した第一原理経路積分セントロイド分子動力学コードの精度を高圧氷に適用することにより検証した。温度を 270 K に保ち圧力を 2 GPa から上げると、氷は VIII 相→VII 相→X 相と逐次相転移を示すことが知られている。原子核を量子的に扱うと古典的に扱った場合よりも VIII 相から VII 相および VII 相から X 相への転移圧力が約 20 GPa 低くなることが分かった。この結果は、270 K という比較的高い温度においても、高圧氷 VIII 相、VII 相および X 相の構造と物性に対して核量子効果が重要な役割を担うことを示している。図 2 に第一原理に基づいた分子動力学シミュレーションにより生成したトラジェクトリに対して密度汎関数摂動論を適用して求めたラマン散乱スペクトルの圧力依存性を示す。原子核の量子性を考慮することにより実験スペクトルの圧力依存性が定量的に良く再現されることが分かった。

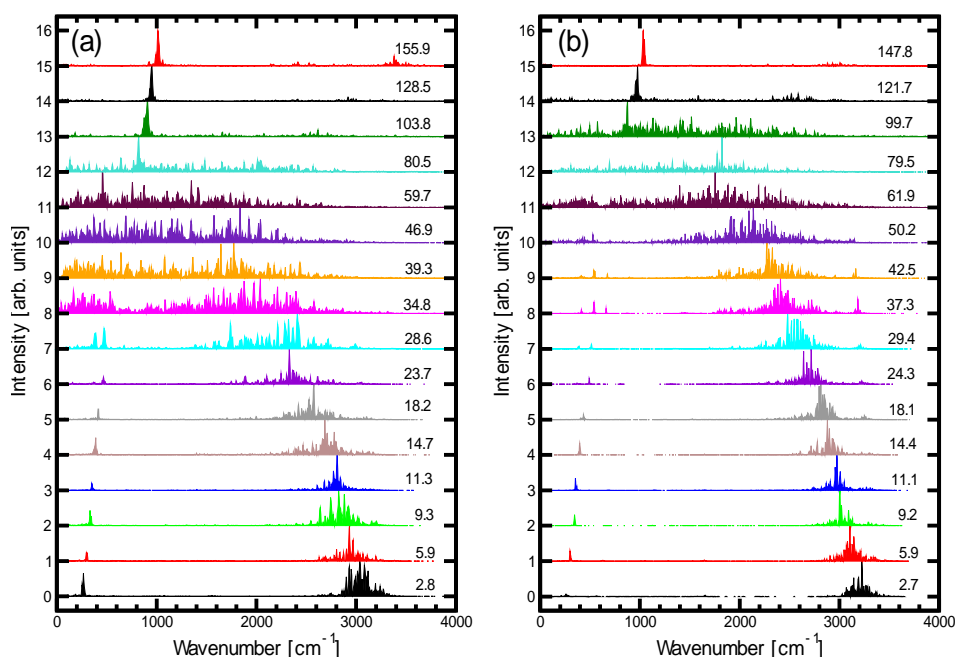


図 2 第一原理計算により求めた原子核を量子的に扱った場合 (a) と古典的に扱った場合 (b) の 270 K における高圧氷のラマン散乱スペクトルの圧力依存性の比較。各スペクトルの右端に計算により求めた内部圧力が GPa 単位で記されている。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表等

- 1) 池田 隆司, 風化黒雲母における層間水とカチオンの第一原理分子動力学研究 II, 日本物理

学会 2016 年秋季大会, 金沢市, 2016

- 2) 池田 隆司, 第一原理分子動力学による粘土鉱物へのセシウムの吸着機構の解明, 光・量子ビーム科学合同シンポジウム 2016, 豊中市, 2016
- 3) 池田 隆司, 電子化物 C12A7 中のヒドリドの第一原理分子動力学シミュレーション, 日本物理学会第 72 回年次大会, 豊中市, 2017
- 4) 池田 隆司, 高压氷の第一原理セントロイド分子動力学シミュレーション, 日本物理学会 2017 年秋季大会, 盛岡市, 2017
- 5) 池田 隆司, 高压氷の第一原理定温定圧セントロイド分子動力学シミュレーション, 日本物理学会第 73 回年次大会, 野田市, 2018

原著論文

- 6) R.Motokawa, T.Kobayashi, H.Endo, *et al.*, Small-angle neutron scattering study of specific interaction and coordination structure formed by mono-acetyl substituted dibenzo-20-crown-6-ether and cesium ions, *J. Nucl. Sci. Technol.*, vol. 53, no. 8, 1205-1211, 2016
- 7) T.Ikeda, First-principles-based simulation of interlayer water and alkali metal ions in weathered biotite, *J. Chem. Phys.*, vol. 145, no. 12, 124703-1-124703-8, 2016
- 8) T.Hirakawa, Y.Uramoto, D.Mimura, *et al.*, First-Principles Molecular Dynamics Analysis of Ligand-Free Suzuki-Miyaura Cross Coupling in Water Solvent: Oxidative Addition Step, *J. Phys. Chem. B*, vol. 121, no. 1, 164-173, 2017
- 9) T.Ikeda, First principles centroid molecular dynamics simulation of hydride in nanoporous C12A7:H, *J. Chem. Phys.*, vol. 146, no. 20, 204503-1-204503-7, 2017
- 10) G.-L. Chai, Z.Hou, T.Ikeda, *et al.*, Two-Electron Oxygen Reduction on Carbon Materials Catalysts: Mechanisms and Active Sites, *J. Phys. Chem. C*, vol. 121, no. 27, 14524-14533, 2017
- 11) T.Hirakawa, Y.Uramoto, S.Yanagisawa, *et al.*, First-Principles Molecular Dynamics Analysis of Ligand-Free Suzuki-Miyaura Cross-Coupling in Water: Transmetalation and Reductive Elimination, *J. Phys. Chem. C*, vol. 121, no. 36, 19904-19914, 2017
- 12) T.Ikeda, First principles centroid molecular dynamics simulation of high pressure ices, *J. Chem. Phys.*, vol. 148, no. 10, 102332-1-102332-8, 2018

解説等

- 13) 池田 隆司, 矢板 毅, 第一原理分子動力学に基づいた粘土鉱物のシミュレーション, 分子シミュレーション研究会会誌アンサンブル, vol. 18, no. 4, 262-267, 2016

(4) 今後の利用予定:

第一原理分子動力学法に基づいた材料解析手法の開発を当面継続する。

核融合エネルギー研究開発部門

日本が調達する ITER 計測装置の予備設計のための核解析

Neutronic Analysis for Preliminary Design of Diagnostics Procured by Japan

嶋田 恭彦

核融合エネルギー研究開発部門 那珂核融合研究所

ITER プロジェクト部 計測開発グループ

(1) 利用目的:

日本が調達を進める ITER の計測装置について、装置の保護や人手による保守の観点から、核解析による放射線（中性子線とガンマ線）遮蔽性能の評価は必須である。日本が調達する各計測装置のうち、光学機器は高温・高磁場・高放射線状態となる炉心プラズマ近傍の計測ポートと呼ばれる遮蔽体の内部や後部に設置される（図 1）。しかし、ITER の運転中にプラズマを光学的に計測するためには、遮蔽体に貫通孔を開けて光学ミラーを設置する必要がある、この貫通孔が放射線の通り道となって計測ポート奥の保守空間（インタースペース）の構造物を放射化し、保守期間中の人の立ち入りを困難にする恐れがある。そのため、本研究では、貫通孔を通過する放射線を低減す

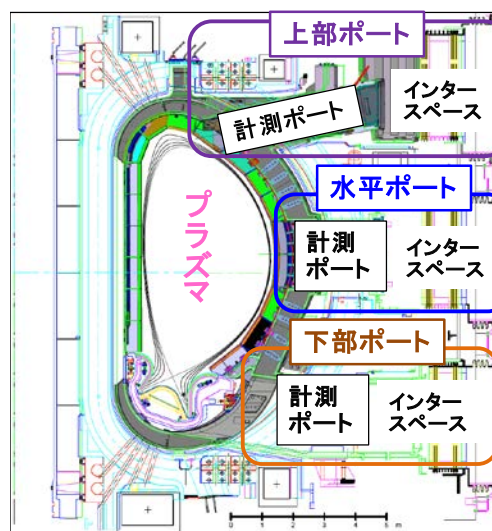


図 1 ITER の断面図とポート位置

るための適切な迷路構造（貫通孔の折り曲げ構造）を有した光学システムの設計指針を与えることを目的に、中性子・光子輸送計算コード MCNP を用いた核解析による遮蔽性能の評価を行った。これにより、測定精度と遮蔽性能の両方の要求を満たす光学機器の設計を達成する事が可能となる。

(2) 利用内容・結果:

平成 29 年度は、日本が調達を進める ITER の計測装置である、ダイバータ不純物モニター及び IR サーモグラフィーの予備設計レビュー会合の実施が予定されていたため、平成 28 年度及び平成 29 年度はこれらの計測装置に対する核解析を実施した。また、平成 28 年度に ITER 機構により核解析ガイドラインが作成され、運転停止後線量率の評価領域が、インタースペース側のクロージャープレート表面および corridor と呼ばれる保守作業用通路を対象とすることとなった（図 2）。ここでは、核解析によって得られた成果の内、ダイバータ不純物モニターが設置される水平ポートに対して行った運転停止後線量率の計算結果について記述する。

ダイバータ不純物モニターは、不純物粒子のダイバータプラズマへの流入束及び密度等を測定する計測装置で、その光学システムは上部ポート、水平ポートおよびダイバータポートに設

置される。本装置では、光学ミラーと貫通孔を有する光学システムを用いて、ITER のダイバータ部のプラズマから放射される光を計測する。ITER では、水平ポートにおけるダイバータ不純物モニターの設計に対して、この貫通孔を通過してやって来る放射線によるインタースペース内の運転停止後線量率への寄与量の目標値が $7\text{ }\mu\text{Sv/h}$ 以下に定められている。当初の設計（オリジナルモデル）による本装置の運転停止後線量率への寄与量は、corridor では設計目標値を満足していた（ $6\text{ }\mu\text{Sv/h}$ ）ものの、クロージャープレート表面では $25\text{ }\mu\text{Sv/h}$ であり、目標値を大きく上回っていた。そこで、クロージャープレート表面の運転停止後線量率への寄与量を低減するため、オリジナルモデル（図 2）に対し、以下のような設計変更を提案（図 3）し、運転停止後線量率への寄与量を評価した。

[貫通孔を通過する放射線量を低減させるための設計変更案]

- ①クロージャープレート表面から 138 cm の位置で貫通孔を 27 cm の深さで折り曲げる。
- ②クロージャープレート表面から 138 cm の位置で貫通孔を 40 cm の深さで折り曲げる。

[遮蔽物追加による遮蔽性能向上のための設計変更案]

- a. プラズマから見て後部のミラールーム内で、ミラーとミラーの支持構造物及び光路以外の部分を炭化ホウ素（ B_4C ）の遮蔽物で埋める。
- b. クロージャープレート表面（プラズマ側）に B_4C の遮蔽版を設置する。

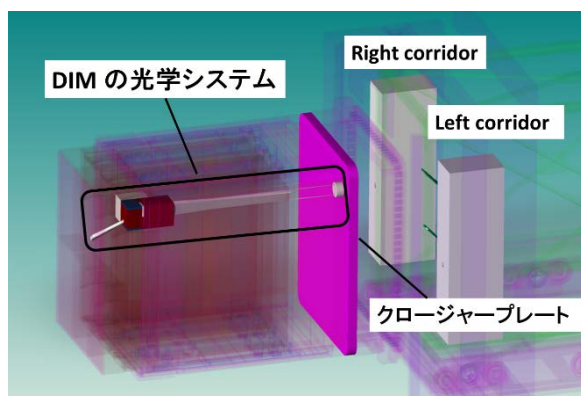


図 2 水平ポートのダイバータ不純物モニターの設置位置と運転停止後線量率の評価領域

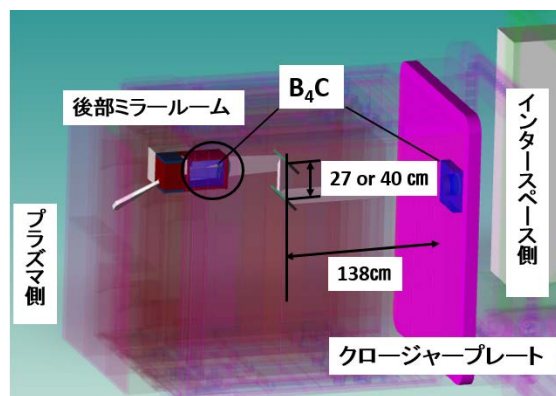


図 3 貫通孔の折り曲げ位置と B_4C 遮蔽物の設置位置

上記設計変更案を組み合わせ実施した各核解析の計算結果を表 1 に示す。計算の結果、ケース番号 9 に示す「② + a + b」のケースで設計目標値を満足することが確認された。この結果は、平成 29 年 11 月に行われた予備設計レビュー会合において報告され、この遮蔽設計を用いてダイバータ不純物モニターの最終設計を進めることが承認された。

表 1 各計算モデルによるクロージャープレート表面の運転停止後線量率への
ダイバータ不純物モニターの寄与量

ケース番号	計算モデル	寄与量 ($\mu\text{Sv/h}$)	統計誤差 (%)	設計目標値 ($7\mu\text{Sv/h}$)を 満足したか？
1	Original	25	9.9	NO
2	Original + a	13	8.0	NO
3	Original + a + b	12	8.6	NO
4	①	13	7.9	NO
5	① + a	10	9.5	NO
6	① + a + b	9.6	10	NO
7	②	10	6.4	NO
8	② + a	7.5	6.7	NO
9	② + a + b	6.2	6.6	YES

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) R.Imazawa, Y.Kawano and K.Itami, Progress on Integrated Design of ITER Poloidal Polarimeter for Current Profile Measurement, Proceedings of 26th IAEA Fusion Energy Conference, FIP/P4-5, Kyoto, 2016
- 2) 石川 正男, 今澤 良太, ITER に関するニュートロニクス活動, *J. Plasma Fusion Res.* Vol.92, No.4, 278-281, 2016

(4) 今後の利用予定:

平成 30 年度からは、日本の調達する各計測装置の設計段階は最終設計の段階に入り、これまで以上に実形状に近い、詳細かつ大規模な計算モデルによる解析計算を行う必要がある。また、同時に計算結果についての正確さが求められることから、ICE X 大型計算機による長時間の並列計算を今後も行っていく予定である。

トカマクプラズマの新古典・乱流輸送計算による輸送の解析と予測

本多 充、成田 絵美、仲田 資季

核融合エネルギー研究開発部門 那珂核融合研究所

先進プラズマ研究部 先進プラズマモデリンググループ

(1) 利用目的:

核融合プラズマにおける輸送機構は大きく分けて、トーラス磁場構造中を動く粒子の衝突によって引き起こされる新古典輸送と、微視的な揺動によって引き起こされる乱流輸送がある。

トカマクにおける新古典輸送の近年の中心的課題は、トカマクの軸対称性の微妙な破れによる磁場の 3 次元性（非軸対称性）が引き起こす新古典トロイダル粘性の評価と、それを用いたトロイダル回転計算にある。複雑な 3 次元磁場を計算に正確に反映させるため、FORTEC-3D コードを用いて 3 次元空間における新古典トロイダル粘性を計算し、実験解析とシミュレーションに応用してきた。プラズマ性能予測には、非軸対称性も考慮した新古典輸送計算はもはや必須と言える。

乱流輸送に関しては、局所ジャイロ運動論モデルによる輸送機構や帯状流形成過程の詳細解析に加え、大域モデルによる分布形成過程が調べられている。イオン温度勾配駆動(ITG)モード等による乱流輸送は新古典輸送とも相まって外部加熱や粒子供給とバランスし、定常的な温度・密度分布を形成する。これら一連の輸送過程を厳密に追跡するには大域的 full-f モデルは要求する計算コストが膨大であるため多数の解析を実行することは困難となっている。他方、局所 delta-f モデルは比較的低い計算コストである一方、背景分布を固定した局所解析であるため、輸送と分布を矛盾しない形で予測する事（フラックスマッチング）が出来ない。

本課題では新古典輸送と乱流輸送のそれぞれに第一原理に基づくコードを用いることでシミュレーションモデルを精緻化し、プラズマ性能の予測能力向上を目指す。新古典輸送では、FORTEC-3D コードを用いて非軸対称性によるプラズマ性能への影響を定量化する。乱流輸送では、多数の局所 delta-f 計算による磁気面ごとの輸送フラックス評価と 1D 輸送計算による背景分布の時間発展追跡を結合させた連成計算コード TRESS+GKV を開発・発展させ、これまで手動で行われてきたフラックスマッチングの自動化を試みる。外部加熱の下で駆動される ITG/TEM 乱流に対する準線形および非線形解析を実施し、JT-60U 実験解析に適用する。

(2) 利用内容・結果:

TRESS+GKV で運動論的電子を考慮したことによって捕捉電子モード (TEM) も扱えるようになり、電子温度とイオン温度の同時シミュレーションが行えるようになった。図 1 の左図に温度分布を、右図に熱流束をそれぞれ示している。2 粒子種で温度発展を解く場合、

粒子種間の熱のやりとりが生じるため目標となる熱流束は徐々に移り変わっていくが、それを含めて TRESS+GKV で最終的な定常温度分布と熱流束が予測できていることが分かる。また、拡散係数を陰的に取り扱う事が出来るニュートン・イタレーション法を導入することにより、数値的な振動が起きやすい硬い輸送モデルにおいても比較的大きな時間刻み幅で安定に解くことが出来ることを確認した。

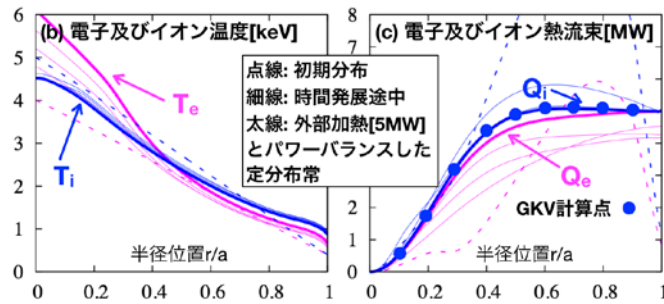


図 1: 左図は温度分布、右図は熱流束分布を示している。破線は初期分布、細線は時間経過、太線は定常の分布を表している。

JT-60SA の誤差磁場補正コイルでは、上下段は 30kA、中段は 45kA まで通電でき、また各コイルで通電の方向を変化させられるため、様々なパターンの摂動磁場を印加することが出来る。ここでは、シナリオ 3 のプラズマに対して解析を行った。トロイダルモード数を n としたとき、 $n=1$ のモードはプラズマ平衡への影響が大きいため、 $n=3$ の偶パリティの摂動磁場を印加し、その電流値を 10kA から 30kA まで 10kA 刻みで変化させたときに生成される NTV 分布を比較した。結果は図 2 にまとめてあり、NTV は径電場に大きく影響を受けることが知られており、径電場が零近辺で NTV が負にピークを迎えていることが分かる。印加しないケースと 10kA の摂動磁場を印加したケースで比較すると、両者にほぼ差が無いことが分かった。どれほど印加すれば NTV に有意な変化が現れるかを見るために、スペック上最大となる 30kA まで引き上げた結果、20kA で周辺での有意な増大が見られ、30kA にするとコア部も含めた全域での NTV 増大が確認された。誤差磁場補正コイルを使った NTV 生成は、誤差磁場の補正に使った後の余力の電流で行われるため、30kA 印加するのは現実的で無く、大きな NTV を生成するためには他のトロイダルモード数のパターンを検討する必要があることが分かった。

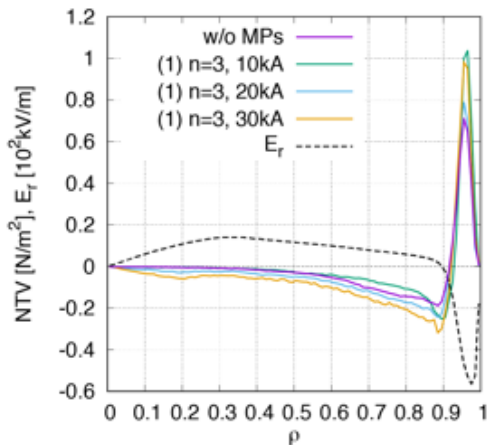


図 2: 径電場 (破線) と NTV の径方向分布。紫は摂動磁場を印加しないケース、緑は 10kA、水色は 20kA、橙色は 30kA のケースで生じた NTV を表している。10kA のケースは印加しないケースとほぼ差が無いが、電流値を引き上げるにつれて径方向全域で NTV が増大していくことが分かる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) M.Honda, S.Satake, Y.Suzuki, K.Shinohara, M.Yoshida, E.Narita, M.Nakata, N.Aiba, J. Shiraishi, N.Hayashi, G.Matsunaga, A.Matsuyama, S.Ide, Predictions of toroidal rotation and torque sources arising in non-axisymmetric perturbed magnetic fields in tokamaks, *Nuclear Fusion*, 57, 11, 116050, 2017
- 2) M.Honda, S.Satake, Y.Suzuki, G.Matsunaga, K.Shinohara, M.Yoshida and S.Ide, Effects of the applied magnetic field phasing on the neoclassical toroidal viscosity and toroidal rotation in JT-60SA, 16th International Workshop on H-mode Physics and Transport Barriers, St. Petersburg, Russia, 2017
- 3) M.Honda, N.Hayashi, S.Satake, Y.Suzuki, K.Shinohara, E.Narita, N.Aiba, M.Nakata, A.Fukuyama, Progress of the integrated transport modeling including the radial electric field and plasma rotation in tokamak, Plasma Conference 2017, Himeji, Hyogo, 2017
- 4) M.Nakata, M.Honda, M.Nunami, Multi-scale coupled simulations of global turbulent transport towards burning plasmas, Plasma Conference 2017, Himeji, Hyogo, 2017

(4) 今後の利用予定:

- 外部加熱の下で駆動される ITG/TEM 乱流に対する準線形および非線形解析を実施し、JT-60U 実験解析や JT-60SA 予測計算に適用する。
- NTV 評価を取り込んだ JT-60SA シナリオにおける回転分布予測を行う。電子 NTV の定量評価を行う。

運動論的效果を取り入れた核融合プラズマにおける磁気島・外部磁場相互作用

井上 静雄

核融合エネルギー研究開発部門 那珂核融合研究所
先進プラズマ研究部 先進プラズマモデリンググループ

(1) 利用目的:

核融合プラズマを崩壊へと導く要因の一つに誤差磁場によって生じる Mode locking/penetration がある。誤差磁場は外部から与える磁場摂動と考える事ができる為、磁場摂動に対するプラズマの応答を調べることが現象の解明につながる。本研究はプラズマ応答を、MHD・運動論双方から研究し現象の解明・及び能動的な制御手法を確立する事を目的とする。

(2) 利用内容・結果:

以下では、MHD シミュレーションにより回転磁場によるフローの能動駆動とその誤差磁場遮蔽効果との関係について調べた結果について述べる。

テアリング不安定性が安定で磁気島が存在しないプラズマ立ち上げ時を想定した状態において、回転磁場によりプラズマ回転を駆動し誤差磁場を遮蔽するシミュレーションを行い、上手く回転磁場の周波数を調節することで誤差磁場を遮蔽することができることを明らかにした(→誤差磁場のしきい値緩和)。結果を下図に示す。計算は量子科学技術研究開発機構で 2020 年から実験が予定されているプラズマ実験装置 JT-60SA 級の高磁気レイノルズ数下($=10^8$)で行い、 $m/n=2/1$ の共鳴成分が 0.1G の誤差磁場を 0.4G の回転磁場で制御可能か検討した。図(a)/(b)に磁気島の成長率/プラズマ回転の回転磁場周波数(ω_{cf})に対する依存性を示す。本計算ではプラズマ回転を 0 としたので、回転磁場がない場合必ずロックモードが生じるが、図において磁気島成長率=0 かつプラズマ回転が維持されている B と D の周波数帯ではロックモードが回避できていることを示している。A の周波数帯のようにゆっくりと回すと回転磁場は誤差磁場のように振る舞うので磁気島が成長する。ある周波数を超えると安定な B の周波数帯が得られるが、速く回しすぎるとプラズマ自身の遮蔽する効果が強まり駆動されるプラズマ回転が低下し C の周波数帯では再びロックモードが生ずる。理論的には速く回せば回す程、プラズマ回転が低下することが予測されたが、プラズマ境界近傍の運動量が拡散的に輸送される効果によりプラズマ回転が再増加することが新しく明らかになり、D の安定な周波数帯の存在が初めて示された。

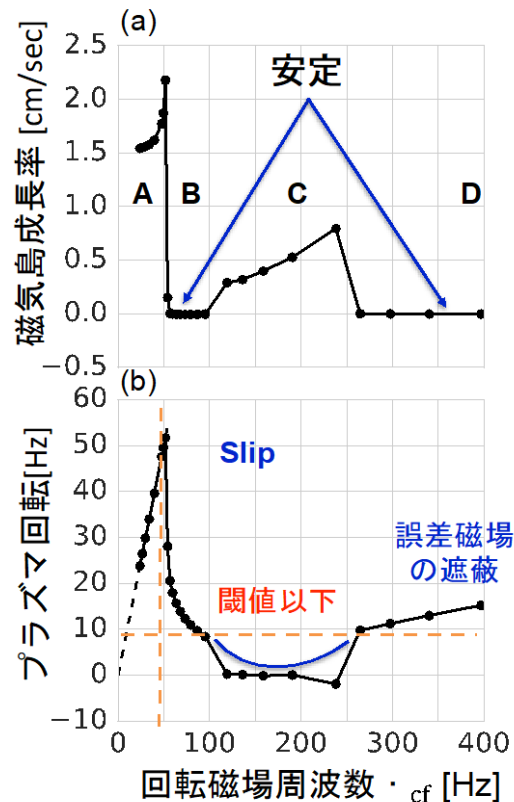


図 (a)磁気島の成長率と(b)磁気島位置のプラズマ回転の回転磁場周波数に対する依存性。B と D の周波数帯で回転磁場を用いればロックモードを回避することができる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) S.Inoue, J.Shiraishi, M.Takechi, G.Matsunaga, A.Isayama, N.Hayashi and S.Ide, Dependence of locked mode behavior on frequency and polarity of a rotating external magnetic perturbation, *Plasma Phys. Control. Fusion*, 60, 025003, 2018
- 2) S. Inoue, J. Shiraishi, M. Takechi, G. Matsunaga, A. Isayama, N. Hayashi and S. Ide, Active stabilization of error field penetration via control field and bifurcation of its stable frequency range, *Nuclear Fusion*, 57, 116020, 2017
- 3) S. Inoue, M. Okabayashi, J. Shiraishi, M. Takechi, G. Matsunaga, A. Isayama, N. Hayashi, S. Ide, Z. Taylor, E. J. Strait, Nonlinear simulation of locked modes with rotating 3D fields in tearing stable/unstable plasmas, Joint Meeting of US-Japan MHD Workshop and 31st ITPA MHD Disruption and Control Topical Group, Naka, Ibaraki, 2018

- 4) 井上静雄, 白石淳也, 武智学, 松永剛, 諫山明彦, 林伸彦, 井手俊介, 岡林典男, Zane Taylor, Edward J. Strait, 三次元回転磁場によるロックモード解放の物理過程, 物理学会第 73 回年次大会, 千葉, 2018
- 5) 井上静雄, 白石淳也, 武智学, 松永剛, 諫山明彦, 林伸彦, 井手俊介, 回転磁場によるロックモードの能動制御・安定化の非線形 MHD シミュレーション, 物理学会第 72 回年次大会, 大阪, 2017
- 6) M. Okabayashi, N. Logan, Z. Wang, Z. Taylor, E. Strait, R. La Haye, J. Hanson, D. Shiraki, and S. Inoue, 3D field response by deeply-locked tearing mode, 22nd Workshop on MHD Stability Control, Madison, WI, USA, 2017
- 7) M. Okabayashi, N. Logan, Z. Wang, Z. Taylor, E. Strait, R. La Haye, J. Hanson, D. Shiraki, and S. Inoue, Unlocking locked tearing-mode by applied rotating 3D field, 59th Annual Meeting of the APS Division of Plasma Physics, Milwaukee, WI, USA, 2017

(4) 今後の利用予定:

今後はより実験条件に近づいたシミュレーションを行うため、複数の磁気島・有理面におけるモードの相互作用や壁などの効果を考慮し、Mode locking/penetration の物理解明やその能動制御手法等の開発を行う予定である。

トカマクプラズマにおける密度分布形成機構の解析

成田 絵美、本多 充、仲田 資季

核融合エネルギー研究開発部門 那珂核融合研究所

先進プラズマ研究部 先進プラズマモデリンググループ

(1) 利用目的:

核融合出力は密度の二乗に比例することに加え、プラズマ周辺部では密度の上限値が存在することが経験的に知られているため(Greenwald 密度)、プラズマの中心部で高密度が得られる尖頭化した密度分布の形成が求められる。密度分布形成に関する研究は様々な装置で行われており、低衝突周波数領域で高い密度のピーキングファクタが得られることは広く知られている[e.g. H. Takenaga et al., Nucl. Fusion, 48, 075004 (2008)]。密度分布の尖頭化は、中心部を向く粒子束を生成可能な粒子ピンチや、中性粒子ビームなどによる外部からの粒子供給が原因であると考えられる。しかしながら、密度分布計算に用いる従来の輸送モデルは、粒子輸送の複数の駆動源を区別しないため、粒子ピンチの密度分布形成に対する効果は未解明である。また、多くの先行研究では、プラズマ中心部における外部からの粒子供給を無視していた。

本研究では、粒子輸送を主に支配している乱流によって駆動される乱流粒子束の新たな評価方法を提案する。ここでは実験で密度分布が計測されている電子に着目し、準線形理論を仮定して、規格化された電子の乱流粒子束 Γ_e を

$$\Gamma_e = D(R/L_{n_e} + C_T R/L_{T_e} + C_P)$$

で表現する。ここで、 D は規格化粒子拡散係数、 R/L_{n_e} と R/L_{T_e} は規格化された密度と温度の勾配である。上式の右辺は粒子拡散を表す対角項(DR/L_{n_e})と粒子ピンチを表す非対角項に分けられ、後者の非対角項は温度勾配が駆動する項($DC_T R/L_{T_e}$)とその他のピンチ項(DC_P)で構成させる。 R/L_{n_e} と R/L_{T_e} は計測から得られるため、3つの係数(C_T , C_P , D)を求めることで、拡散・ピンチ項が粒子束全体に対して占める割合を定量的に評価することが可能になる。これら3つの係数のうち、 C_T と C_P はジャイロ運動論コードを用いた線形計算によって得ることができる。本研究ではジャイロ運動論コード GKW を用いるが、GKW は高並列計算が不可欠であるため、大型計算機 ICE X による計算が必要となった。

(2) 利用内容・結果:

GKW による乱流輸送計算は、3粒子種(電子・重水素・炭素不純物)を対象とし、衝突と電磁揺動、プラズマの実形状の効果を含めて行なった。JT-60U の H モードプラズマに対して C_T と C_P を評価した結果の半径方向分布の例を図 1 に示す。既存の実験データを対象とする場合、先行研究では無視されてきた中性粒子ビームからの粒子供給を考慮することで、(1)で示した乱

流粒子束の評価式の左辺 Γ_e を算出することができる。 C_T と C_P は上述のように GKW から得られるため、右辺の唯一の未知数である D が求まる。その結果の例も図 1 に示している。通常 D はジャイロ運動論コードの非線形計算から評価され、多くの計算資源を要するが、本研究で用いた半経験的手法を採用することにより、必要な計算コストの大部分は C_T と C_P の評価に用いる線形計算となり、大幅に計算資源が削減された。その結果、多くの実験データに対して拡散・ピンチ項を定量的に評価することが可能になった。

半経験的手法で求めた D の決定機構の理解も進めている。 D は粒子束の大きさを決めるものであり、乱流輸送を引き起こす揺動振幅の飽和レベルに比例すると考えられる。この飽和レベルは乱流を促進する不安定性と、乱流を抑制する帯状流の相互作用で決まると言われている。そこで、不安定性と帯状流の影響を表すものとして、混合長理論から求まる拡散係数の大きさ γ/k_θ^2 と残留帯状流レベル L_{ZF} をそれぞれ用い、 $D \propto (\gamma/k_\theta^2)^\alpha L_{ZF}^\beta$ が成立すると仮定する。ここで、指数部 α と β が不安定性と帯状流の影響をそれぞれ示す。JT-60U の H モード放電のデータセットに対して D を半経験的手法で評価し、回帰解析を行なった結果、 $\alpha = 1.5$ と $\beta = -2.71$ の組み合わせが最もよく D を再現することがわかり、比例則 $D \propto (\gamma/k_\theta^2)^{1.5} L_{ZF}^{-2.71}$ を得た。 $\alpha > 0$ は不安定性による乱流の促進、 $\beta < 0$ は帯状流による乱流の抑制を示しており、この比例束はこれらのバランスで D が決まることを表している。

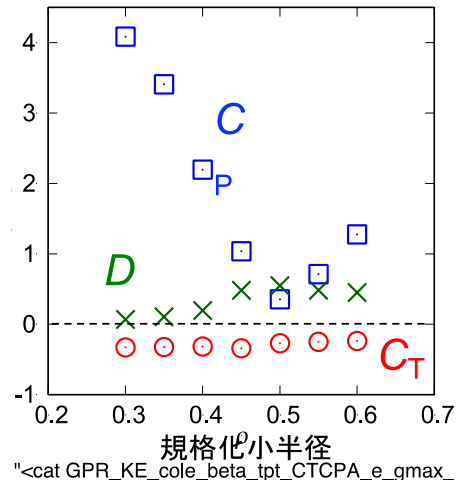


図 1 乱流粒子束を予測するために必要な係数 C_T , C_P , D の半径方向分布の例。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

国際・国内会議発表

- 1) E.Narita, M.Honda, M.Nakata, M.Yoshida, H.Takenaga and N.Hayashi, Gyrokinetic modeling of the quasilinear particle flux, 7th Asia Pacific Transport Working Group (APTWG2017) International Conference, Aichi, 2017
- 2) E.Narita, M.Honda, M.Nakata, M.Yoshida, H.Takenaga and N.Hayashi, Gyrokinetic modeling of the quasilinear particle flux for core plasmas, 16th International Workshop on H-mode Physics and Transport Barriers, St. Petersburg, Russian Federation, 2017
- 3) E.Narita, M.Honda, M.Nakata, M.Yoshida, H.Takenaga and N.Hayashi, Gyrokinetic modeling of the quasilinear particle flux with JT-60U experimental data, 19th ITPA Transport and Confinement Topical Group Meeting, Espoo, Finland, 2017
- 4) 成田 絵美, 本多 充, 仲田 資季, 吉田 麻衣子, 竹永 秀信, 林 伸彦, ジャイロ運動論に基づく準線形粒子輸送モデルを用いた密度分布制御, 日本物理学会 第 73 回年次大会, 千葉, 2018

学術誌掲載論文

- 5) E.Narita, M.Honda, M.Nakata, M.Yoshida, H.Takenaga and N.Hayashi, Gyrokinetic modelling of the quasilinear particle flux for plasmas with neutral-beam fueling, *Plasma Phys. Control. Fusion*, vol.60, 025027, 2018

(4) 今後の利用予定:

(2)で導いた比例則の妥当性を検証するために、比例則に用いている γ/k_θ^2 と L_{ZF} が不安定性と帯状流の影響を模擬できているかを GKW の非線形計算を実施することで確認する。

大域的ジャイロ運動論モデルによる多種粒子系新古典計算

井戸村 泰宏、林 伸彦、本多 充

核融合エネルギー研究開発部門 那珂核融合研究所

先進プラズマ研究部 先進プラズマモデリンググループ

(1) 利用目的:

本研究では核融合プラズマにおける新古典輸送、乱流輸送の高精度評価を目的としてジャイロ運動論的トロイダル 5 次元 full-f オイラーコード GT5D の開発を推進している。昨年度の課題では単一イオン系の新古典計算における新古典トロイダル粘性の評価を目的として摂動磁場を含む 3 次元平衡磁場解析コード VMEC のインターフェースを整備した。今年度はこれに加えて統合輸送コード TOPICS で標準的に利用されている 2 次元平衡磁場解析コード MEUDAS のインターフェースを整備するとともに、計算モデルを電子、不純物を含む多種粒子系に拡張する。GT5D コードの新古典計算は軸対称極限の 4 次元モデルで計算可能であることから、乱流計算に比べて大幅に計算コストを圧縮できる。この特徴を活用して多種粒子系の大域的新古典計算を行い、不純物の新古典輸送の高精度評価を可能とする。

(2) 利用内容・結果:

昨年度に開発した磁束座標版 GT5D において MEUDAS のインターフェースを整備した。MEUDAS は円筒座標 (R, ζ, Z) を採用しており、円筒座標版 GT5D では同じ座標系で既にインターフェースを開発済みであるが、磁束座標版 GT5D ではいくつかの座標系を組み合わせで計算格子を構築した。まず、有限要素法に基づくジャイロ運動論的ポアソン方程式の計算については磁束座標を使用した。一方、無散逸保存型差分スキームに基づくジャイロ運動論方程式の計算では 3 種類の座標系を使用した。磁気軸と最外殻磁気面を除く炉心領域では磁束座標を使用するが、磁気軸付近では磁気軸上での境界条件を満たすために、磁気軸についてトロイダル方向、径方向に対称な計算格子が必要となるため、径方向を幾何的プラズマ半径 r とするトロイダル座標を使用した。一方、最外殻磁気面外部の境界領域では磁束座標を構築できないため、最外殻磁気面における磁束座標を外部領域に外挿して境界領域の計算格子を構築した。図 1 は MEUDAS の磁場データを用いたイオン系の微視的不安定性のベンチマーク計算を従来の円筒座標版 GT5D と磁束座標版 GT5D で行った結果を示すが、定量的に一致する大域的な線形固有関数と線形成長率が得られている。

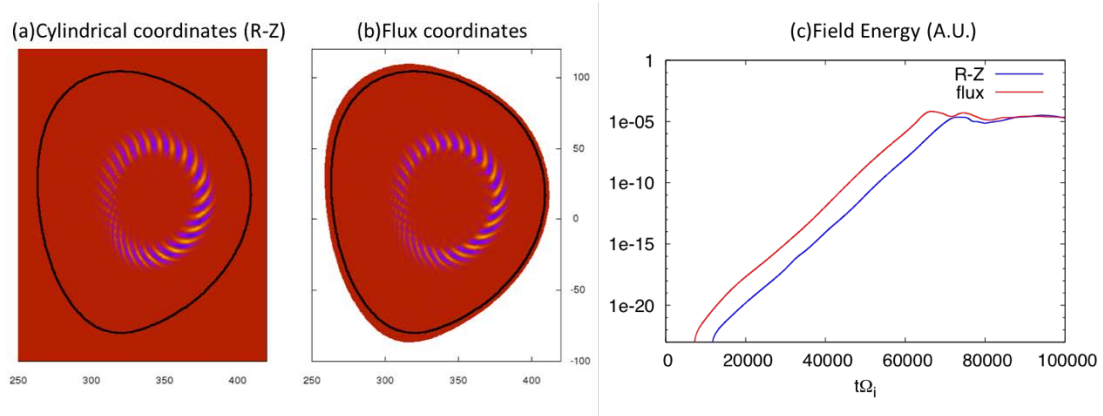


図 1：円筒座標 (R-Z) 版 GT5D と磁束座標版 GT5D のベンチマーク計算。イオン系の微視的不安定性の(a)、(b)線形固有関数と(c)場のエネルギーの時間発展を示す。

昨年度までに開発した電子、イオンを含む 2 種プラズマ系の計算モデルを複数のイオン種を含む多種イオン系モデルに拡張した。多種イオン系モデルへの拡張にあたり、まず、コード全体を任意の電荷、質量の複数粒子種に適用可能なように、パラメータファイル、配列宣言、各サブルーチンのインターフェース等の複数粒子種への対応を図った。次に、高 Z (原子番号) 不純物に対する異種粒子衝突項の改良に取り組んだ。タングステンは $Z=74$ 、原子量が 183.84 となり、電子との質量比は約 34 万倍となる。このように質量比が大きい粒子種間の衝突演算子では、速度空間の拡散項のクーラン条件が極めて厳しくなる。この問題を解決するために、衝突演算子の陰解法を新たに開発した。速度空間の 2 次元移流・拡散項として定式化される粒子衝突演算子は非対称行列となる。4 次元移流項との大きな違いは、 100^2 程度の小規模問題となっていることと、さらに粒子衝突演算子の処理前後でデータ転置を行っているために逐次処理が可能であり、直接法でも計算できることである。この陰解法ソルバとして、**Lapack** による直接法、および、移流項と同様の共役残差法を用いた反復法を実装し、処理特性を比較した。この結果、このような小規模問題では反復法が数 10 反復で収束し、処理速度はどちらも大きな違いがないこと、一方、**Lapack** では行列データを帯行列として保持するため、特に、メモリーコアプロセッサでスレッド並列処理を行う場合にはメモリ使用量が大きくなることがわかった。このため、本研究では反復法ソルバを採用した。開発した多種イオン系モデルの精度検証を目的として、電子、重水素、三重水素、および、8 種類のトレーサ不純物を含む核燃焼プラズマ系における衝突性粒子輸送現象のベンチマークを実施した。図 2 に示すように全ての粒子種で **Hirshman-Sigmar** のモーメント法による理論解との定量的な一致を確認した。

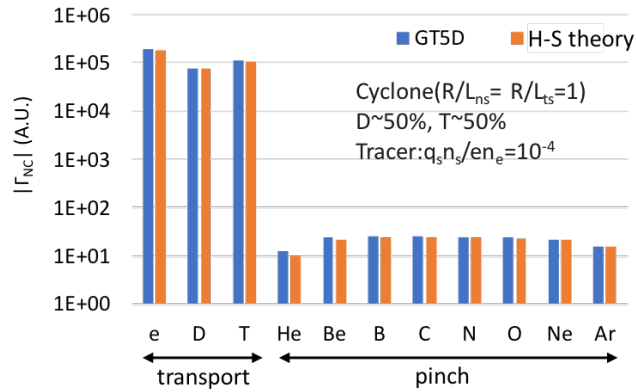


図 2：8 種類のトレーサ不純物を含む核燃焼プラズマ系における衝突性粒子輸送に関する多粒子種版 GT5D と Hirshman-Sigmar のモーメント法による理論解のベンチマーク。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) Y.Idomura, Toroidal angular momentum balance during rotation changes induced by electron heating modulation in tokamak plasmas, *Phys. Plasmas* 24, 080701, 2017
- 2) Y.Idomura, T.Ina, A.Mayumi, S.Yamada, K.Matsumoto, Y.Asahi, and T.Imamura, Application of a communication-avoiding generalized minimal residual method to a gyrokinetic five dimensional Eulerian code on many core platforms, Proceedings of 8th Workshop on Latest Advances in Scalable Algorithms for Large-Scale Systems (ScalA'17), Denver, CO, USA, 2017
- 3) C.Kawai, Y.Idomura, S.Maeyama, Y.Ogawa, Impact of plasma parameter on self-organization of electron temperature gradient driven turbulence, *Phys. Plasmas* 24, 042303, 2017
- 4) Y.Idomura, Enhancement of neoclassical impurity transport by a geodesic compression effect in full-f gyrokinetic simulations, 20th ITPA Transport and Confinement Topical Group Meeting Daejeon, Korea, 2018

(4) 今後の利用予定:

今年度に開発した MEUDAS インターフェース、および、多種粒子系モデルにより、GT5D を用いた新古典輸送、乱流輸送の実験解析が可能になった。今後、他の局所モデルコードとの検証計算を行った後に、順次実験データに対する実証研究に取り組んでいく。

核融合原型炉のダイバータプラズマ特性に関する研究

本間 裕貴、徳永 晋介、星野 一生、朝倉 伸幸、伊藤 和貴
核融合エネルギー研究開発部門 六ヶ所核融合研究所
核融合炉システム研究開発部 核融合炉システム研究グループ

(1) 利用目的:

核融合原型炉設計において、ダイバータ板への熱負荷を工学的な許容値以下に低減させることは、最も重要な課題である。本応募課題では、原型炉におけるダイバータ・プラズマの制御シナリオを開発し、ダイバータ熱負荷を低減させることを目的に、ダイバータコード SONIC を用いた数値シミュレーションを行う。

これまでの原型炉ダイバータ研究では、コア側の条件を固定して、Ar ガス等の入射により放射損失パワーを増加する熱制御シナリオの検討を進めてきた。しかし、ダイバータのみで熱制御シナリオの検討を進めるには限界があり、コアプラズマでの不純物輸送や放射損失シナリオの検討も含めた総合的な解析が必要である。コアを含めた総合的な解析に先立ち、平成 29 年度には、代表的なコア側の複数条件（核融合出力、コア密度、不純物放射による冷却割合等）を想定したダイバータプラズマ性能の予測評価を行う。

本研究により、コアプラズマ条件に対するダイバータプラズマ性能の依存性が明らかになり、今後のコアプラズマとダイバータとの統合設計、ひいてはそれらの工学設計の方針を示すことができる。

(2) 利用内容・結果:

原型炉の核燃焼プラズマから排出される熱パワーを低減すると共にヘリウム灰や粒子を排気するダイバータの設計は核融合炉の実現に向けた重要課題である。1.5 GW レベルの核融合出力で定常運転を目指す日本の現在の原型炉設計は、ITER の物理・工学概念の延長として検討が進められる一方、不純物ガス入射による主プラズマとダイバータの両方において ITER より大きな放射損失 (3-4 倍) を行う必要があり、主プラズマでの燃料希釈とダイバータでの非接触プラズマ制御が大きな設計課題である。現在、ダイバータ設計では熱処理パラメータ (P_{sep}/R_p) を 25-33 MW/m (ITER の 1.6-2 倍) と考えており、ITER より 1.6 倍大きなダイバータを想定してシミュレーション (SONIC コード) による検討を行っている。SONIC コードでは、プラズマ輸送を電磁流体コードにて、プラズマ源であるとともに再結合により発生する中性粒子および大きな放射損失を発生する不純物の輸送はそれぞれモンテカルロコードにて計算している[1,2]。主プラズマの周辺部から排出される熱パワーとプラズマ粒子を設定し、プラズマ・中性粒子・不純物イオンの輸送計算をそれぞれ繰り返し、得られた自己無撞着な定常解を基に放射損失分布やダイバータ板への熱負荷が評価される。不純物による放射損失を大きく増加することにより、プラズマの低温・高密度化 (1eV 以下) が進み、ダイバータ板へ向かうプラズマの再結合 (中性粒子化) が増加し、非接触プラズマがダイバータ板の上流で

発生する。それにより、運動エネルギーがイオンや中性粒子との弾性散乱により散逸（分散）され、ダイバータ板へのプラズマ粒子束と熱負荷は急激に減少する。原型炉は ITER よりも装置サイズの増加以上に排出されるパワーが数倍大きくなるため、SOL からダイバータにかけての温度差も大きく、ダイバータ密度も高い原型炉ダイバータ環境となり、シミュレーションのメッシュ点を増やし高速で同時計算を繰り返すことが要求される。不純物 Ar ガスの入射による放射損失割合が高い運転 ($f_{\text{rad}^{\text{tot}}} = (P_{\text{rad}^{\text{main}}} + P_{\text{rad}^{\text{sol}}} + P_{\text{rad}^{\text{div}}}) / P_{\text{heat}} = 0.84$ 、 α 加熱と追加熱の合計 $P_{\text{heat}} = 430\text{MW}$) ではダイバータ板での熱負荷ピークが工学的に対処可能な 10MWm^{-2} 程度よりも低い、 5MWm^{-2} 程度まで低減可能と思われ、核融合出力の増加や $f_{\text{rad}^{\text{tot}}}$ を低下した運転あるいは若干小型化したダイバータも今後視野に入れ、運転領域の検討と設計を進める計画である [3]。

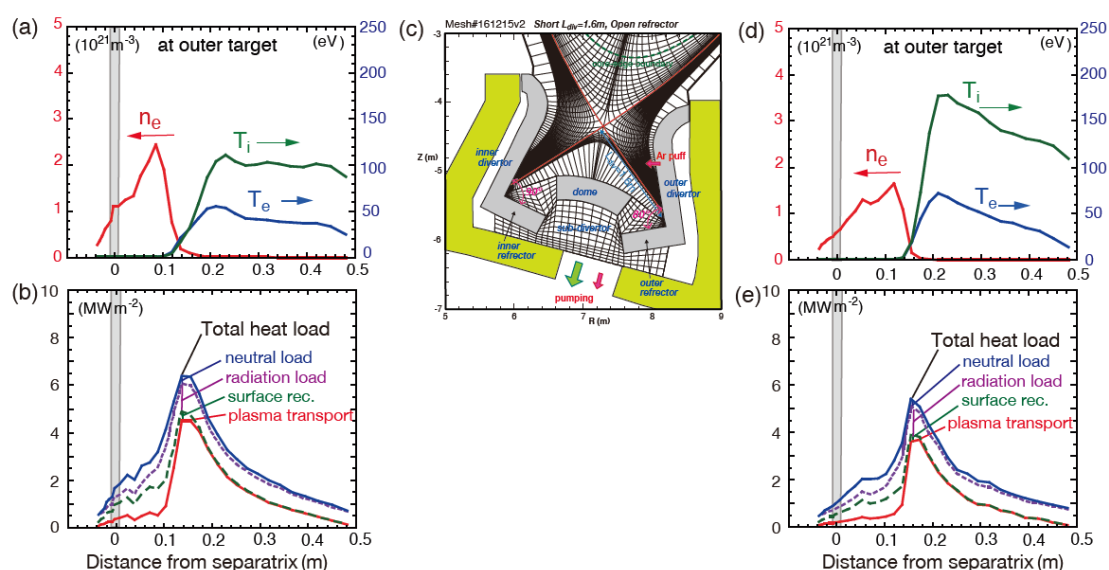


図 1 (a) (b) 放射損失割合を文献[3]基本シナリオ例からさらに 5%減少させた際の外側ダイバータ板におけるイオン(T_i)・電子温度(T_e)、電子密度(n_e)および熱負荷成分の分布。
(c) リフレクタ角度を大きくしたダイバータ形状と計算メッシュ、および
(d) (e) イオン(T_i)・電子温度(T_e)、電子密度(n_e)および熱負荷成分の分布。

また、主プラズマからの排出パワーの増加や放射損失の減少を想定し、ダイバータで除熱可能なプラズマ運転領域の検討を行った。放射損失を文献[3]の基本シナリオ例からさらに 5%減少させた場合、図 1 (a,b) に示す様に外側ダイバータでは接触プラズマ領域($r > 15\text{cm}$)においてイオン・電子温度が増加する。このため、総熱負荷は 7MWm^{-2} 程度と工学設計上限以下であるものの、Ar イオンによるスパッタリングによる損耗の増加が懸念され今後それについて評価が必要となる。一方、高速中性子の遮蔽を考慮した工学設計の観点から、ダイバータカセットを構成するドーム及びリフレクターの形状に工夫が必要となる。図 1 (c) ではリフレクタ角度を大きくし延長することにより、ドーム下やダイバータカセットへの中性子束を低減した場合、図 1 (d, e) に示す様に、やはり外側ダイバータでは接触プラズマ領域のイオン・電子温度が増加し、損耗の増加が懸念される。また真空容器保護のため、排気が容易な(図 2 (c) の

様な) ダイバータカセットの下からではなく、排気ポートに近いカセット外側に排気口を設置した場合について、プラズマ分布や排気効率の計算も行った[4]。

- [1] K. Shimizu, et al., J. Nucl. Mater. 313–6 (2003) 1277
- [2] H. Kawashima, et al., J. Plasma Fusion Res. 1 (2006) 31
- [3] N. Asakura, et al., Nucl. Fusion 57 (2017) 126050.
- [4] IFERC BA-DDA annual report 2017, Chapter 4.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) N.Asakura, *et al.*, Studies of power exhaust and divertor design for a 1.5 GW-level fusion power DEMO, *Nuclear Fusion*, vol. 57, 126050, 2017
- 2) Y.Homma, *et al.*, An extended kinetic model fo the thermal force on impurity particles in weakly collisional plasmas, *Contributions to Plasma Physics*, 58, Issue 6-8, 629-637, 2018
- 3) K.Hoshino, *et al.*, Multi-impurity divertor simulation using a Monte-Carlo kinetic impurity transport model, *Contributions to Plasma Physics*, 58, Issue 6-8, 638-642, 2018
- 4) Japan Home Team, EU Home Team and DDA Unit of the IFERC Project Team, 2nd Intermediate report of BA DEMO Design Activity, 2017

(4) 今後の利用予定:

原型炉開発総合戦略タスクフォースのアクションプラン達成に向けて、引き続き統合 SOL ダイバータコード SONIC を用いて原型炉ダイバータプラズマの予測評価及び設計活動を進める。代表的なコアプラズマ条件とダイバータ機器条件を複数想定し、シミュレーションで予測される SOL ダイバータプラズマパラメータ（密度・温度・不純物放射分布など）やダイバータ熱負荷・粒子負荷への影響と依存性を明らかにして、ダイバータで除熱可能なプラズマ運転条件（運転ウインドウ）を絞り込んでいく。平成 29 年度は Ar 放射損失割合やダイバータ形状要素（リフレクタ角度等）の影響評価を開始したが、SOL 上流プラズマ密度と核融合出力の変動、放射希ガス種の変更に対する影響評価など運転ウインドウ絞り込みに必要な解析計算は多く、今後も ICE X 計算機を利用して計算を進めたい。

加えて、アクションプランに記載されているダイバータシミュレーションコード開発も進める予定である。ダイバータコード SONIC のモデル高度化による予測精度向上や高速化を上記設計作業と並行して行うことが求められている。こうしたコード開発においても大規模並列計算が実行できる ICE X 計算機を利用していきたい。

簡約化 MHD モデルを用いた非局所輸送のシミュレーション研究

矢木 雅敏、藤原 康広、宮本 斉児
核融合エネルギー研究開発部門 六ヶ所核融合研究所
核融合炉システム研究開発部

(1) 利用目的:

磁場閉じ込めプラズマにおいてプラズマ周辺の摂動が非常に速い速度で中心部へ伝搬し、中心部の電子温度分布が急に増加する現象や中心部の MHD が周辺部の輸送障壁形成のトリガーになる現象等、非局所的なプラズマ応答が観測されている。一方、このような現象をシミュレーションにおいて再現し、その物理機構を明らかにした研究はこれまでのところ報告されていない。本研究の目的はこのような非局所プラズマ応答の一例として周辺部の冷却に伴うプラズマ中心部での電子温度上昇の機構をシミュレーションにより明らかにすることを目的とする。この機構が明らかになれば、それをもとに原型炉における周辺部からのペレットによる燃料供給手法の開発や過渡応答を利用した核燃 Re: 8 月の月報依頼焼プラズマ制御への応用が期待できる。特に内向き粒子輸送の機構を明らかにし、その制御手法を開発することをめざす。

(2) 利用内容・結果:

これまで、R5F コード (5 場簡約化 MHD モデル) を用いてプラズマ周辺部に密度ソースと温度シンクを印加し、それによる非局所輸送を観測し、分布の発展を解析してきた。密度分布は周辺ソースによりハンプを持ち、密度勾配長が反転する。この時、内向きの粒子輸送が発生する。この機構を理解するため、デルタエフジャイロ運動論コード dFEFI を用いてイオン温度勾配駆動ドリフト波のシミュレーション研究を行った。図 1 に熱フラックスと粒子フラックスの時間発展を示す。準線形近似に基づき、粒子束を線形成長率と位相と関連づけそれらのパラメータ依存性をシミュレーションにより調べた。その結果、1) 不安定性を駆動するパラメータであるイオン温度勾配が大きくなると成長率と位相がともに増大し内向きの粒子束に寄与していること、2) 電子温度勾配、衝突周波数は成長率にはさほど影響を与えないが、位相には影響を与えること、すなわち位相の変化を通じて内向きの粒子束に寄与していることが明らかとなった。図 2 にイオンの温度勾配を変化させた時の粒子フラックスの時間発展を示す。イオンの温度勾配と内向きの粒子フラックスには正の相関がある。これを成長率と平均的な位相シフトで整理したところ、成長率はイオン温度勾配とともに増加。位相シフトも同様に増加していることが明らかとなった。この結果、粒子フラックスの増加は振幅のみならず位相によっても影響を受けることが判明した。

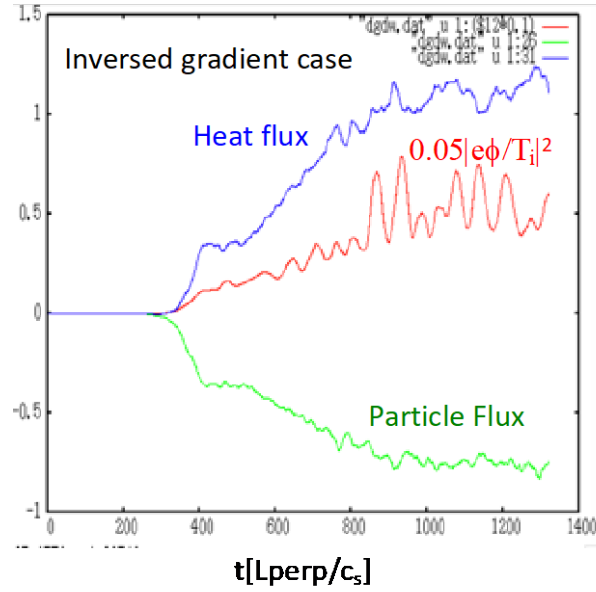


図 1 熱フラックス(青)および粒子フラックス(緑)の時間発展。参考のため準線形フラックス(赤)を示す。粒子フラックスは負の値を取っていることがわかる。

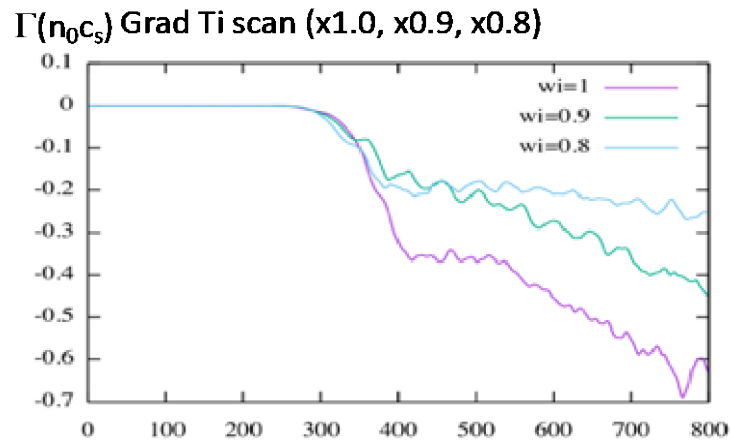


図 2 粒子フラックスの時間発展。イオン温度勾配をその参考値で割った値を 0.8 から 1 まで変化させた。1 はイオン温度勾配が参考値に対応する。値が減少するに伴い、内向きの粒子フラックスが減少している。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) M.Yagi, Y.W.Cho, H.Seto, T.S.Hahm, Parallelization of Spectral Landau Fluid Code Using MPI, Proceedings of International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering(ANS M&C2017), Jeju Korea, 2017
- 2) K.Miki, N.Miyato, B.Scott, M.Yagi, Benchmark of an electromagnetic gyrokinetic simulation code, Proceedings of International Conference on Mathematics &

Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering(ANS M&C2017),
Jeju Korea, 2017

- 3) K.Miki, N.Miyato, B.Scott and M.Yagi, Simulation study on Partcile Transport in the inversed-density-gradient of tokamak edge, 閉じ込め輸送研究会, 核融合科学研究所, 岐阜, 2017

(4) 今後の利用予定:

このシミュレーションで観測された粒子ピンチ機構を明らかにするとともに、粒子輸送モデルの構築を進めていく予定である。また、開発中の流体モデルに基づく R6F コード (6 場簡約化 MHD モデル) と今回用いたジャイロ運動論モデルに基づく dFEFI コード間でベンチマークを行い、モデルの高度化を進める予定である。R6F コードの応用例として内部輸送障壁形成のシミュレーション研究があげられる。今後、このシミュレーションを検討していく予定である。

トカマク周辺 MHD 安定性の抑制・小振幅化に向けた理論・シミュレーション研究

相羽 信行、本多 充

核融合エネルギー研究開発部門 六ヶ所核融合研究所

核融合炉システム研究開発部 プラズマ理論シミュレーショングループ

(1) 利用目的:

ITER や核融合発電炉では、効率よくエネルギーを核融合反応から得るためのプラズマとして、プラズマ表面近傍に断熱層が形成されてプラズマ圧力分布に台座構造（ペDESTAL）が現れる“高閉じ込め運転モード（H モード）”が有力であるとされており、ITER においても標準運転モードとして想定されている。この H モード運転では、エッジローカライズモード（ELM）と呼ばれる表面付近が間欠的に崩壊する現象がしばしば観測される。ITER 等の大型反応炉ではこの ELM による熱・粒子放出量の絶対量が多くなるため、除熱装置（ダイバータ）やプラズマ対向壁への熱負荷の増大が懸念されている。そのため、ELM 現象によってスクレイプオフ層（SOL）に放出される熱・粒子量を減少させる（ELM を抑制・小振幅化する）方法を確立することは、現在の炉心プラズマ研究開発における最大の課題の1つとなっている。

申請者の解析目的は、熱・粒子放出量の多い”大振幅”ELM の発生条件を正確に予測し、同 ELM が安定で ELM の抑制・小振幅化の検討が可能な運転領域を探すことである。特に、近年欧州の大型トカマク装置である JET において、従来の炭素ダイバータから ITER と同種の金属ダイバータに置き換えられた後に、従来の解析手法では ELM の発生条件を正確に評価できないことが分かり、その原因を知ることが ITER および核融合炉実現のための緊急の課題となったが、申請者はこの原因がプラズマ回転の影響に起因することを解明した。この成果は、2017 年度の欧州物理学会招待講演として発表することが決まっており、年度前半はこのための数値解析、特に JET 装置の解析を継続するとともに、量研機構で建設が進められている大型トカマク装置 JT-60SA の ELM 安定性予測を行い、上記講演での発表に備える。

(2) 利用内容・結果:

申請者が開発した数値コード MINERVA-DI を用いて、JET 装置における ELM 安定性に対するプラズマ回転およびイオン反磁性ドリフト効果の影響に関する定量評価を行った。この評価は、実験的に観測されたプラズマ圧力分布およびこの圧力分布が駆動する自発電流分布（図 1 参照）を基準（運転点）として、これらの分布を変化させたプラズマでの ELM 安定性を解析し、運転点近傍でどの程度圧力・電流を大きくすると ELM が発生するかを調べることで行った。その結果、プラズマ回転を無視してイオン反磁性ドリフト効果のみを考慮した安定性解析で予測される圧力（勾配）の安定限界閾値は、実験的に観測された ELM が発生する直前のプラズマ周辺圧力（勾配）よりも約 50% 高くなった。一方、プラズマ回転の影響も加味して同様の安定性解析を行うと、安定限界閾値は大きく下がり、実験観測値よりも 20% 程度高い値になることを明らかにした（図 2 参照）。この

20%という差は、計測誤差などを考慮した場合に許容される誤差の範囲内に収まっており、JET-ILW 装置における ELM 安定性の定量解析においてプラズマ回転が重要な役割を果たしていることを示している。

JET-ILW 装置における ELM 発生条件を説明しうる結果が得られたことから、より定量的に回転およびイオン反磁性ドリフト効果の重要性を示すために、同装置の 15 放電における ELM 安定性解析を行った。解析では、イオン反磁性ドリフト効果は常に考慮してプラズマ回転の有無による ELM 発生条件の変化に着目し、実験観測で求まる ELM 発生時の運転点近傍で、どの程度圧力・電流が変化すると ELM が発生するか、またこの ELM 発生条件が回転の有無で変化するかを調べた（図 2 参照）。この解析で求まる運転点と計算結果のずれを、電流は変化せずに圧力がどれだけ変化すると ELM が発生するかとして調べた結果、すべての放電でプラズマ回転を考慮することでこのずれが大きく縮まることを明らかにした（図 3）。この結果は、JET-ILW 装置における ELM 発生条件に対するプラズマ回転の重要性を定量的に示している。

このように、既存の装置における ELM 発生条件が MINERVA-DI を用いた安定性解析によって評価できることを確認できたことから、次に現在建設中の JT-60SA 装置における ELM 安定性に対するイオン反磁性ドリフト効果の影響に関する定量評価を行った。解析対象としたプラズマは、シナリオ 4 と呼ばれる ITER の形状などを模擬したものである。その結果、今回の検討前に想定していたシナリオ 4 のプラズマは ELM に対して不安定であることが確認された。これは、以前の検討ではイオン反磁性ドリフト効果による ELM 安定化を過大評価していたことが原因である。そこで、このプラズマを ELM に対して安定にするためにはどの程度圧力分布を変化させる必要があるかを検討した。本シナリオでは、プラズマ密度がグリーンワルド密度比で 80%以上という条件を満たすことを想定しているため、プラズマ温度のみを変化させて圧力分布を調整した結果、温度を 30%下げることによって ELM が安定化されることが分かった。

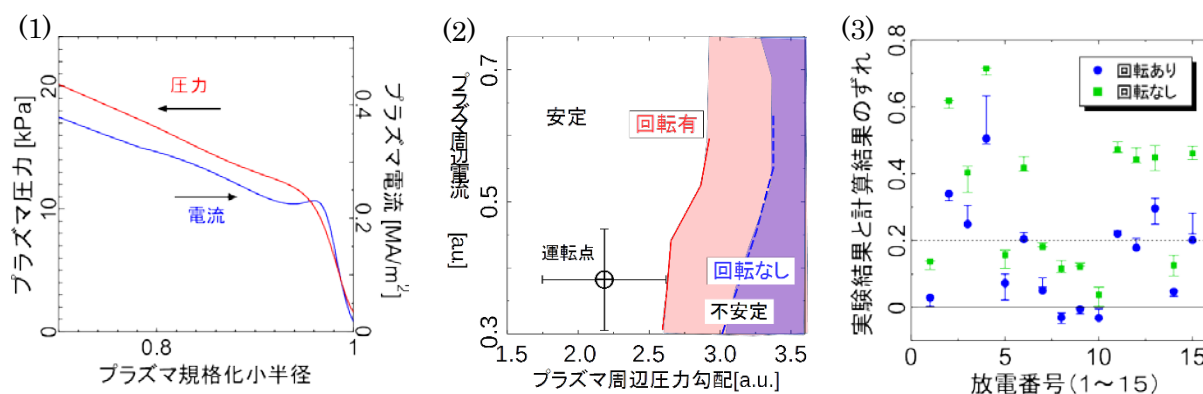


図 1：JET 装置で ELM が発生したプラズマの圧力分布（赤）および電流分布（青）。図 2：JET での ELM 安定性図。赤い（青い）領域は回転有（なし）の場合に ELM が不安定な領域。回転を考慮することで、ELM が不安定な領域が実験的に観測された運転点に大きく近づくことがわかる。図 3：JET-ILW 15 放電における、実験結果（運転点）と計算による ELM 発生条件とのずれ。回転を考慮することで実験と計算のずれが大きく縮まる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

原著論文

- 1) N. Aiba, C. Giroud, M. Honda, *et al.*, Numerical analysis of ELM stability with rotation and ion diamagnetic drift effects in JET, *Nuclear Fusion*, vol.57, 12, 126001, 2017
- 2) N. Aiba, S. Pamela, M. Honda, *et al.*, Analysis of ELM stability with extended MHD models in JET, JT-60U and future JT-60SA tokamak plasmas, *Plasma Physics and Controlled Fusion*, vol.60, 014032, 2018

プロシーディング

- 3) N. Aiba, C. Giroud, M. Honda, *et al.*, Diamagnetic MHD equations for plasmas with fast flow and its application to ELM analysis in JT-60U and JET-ILW, Proceedings of 26th IAEA Fusion Energy Conference, TH/8-1, Kyoto, 2016

(4) 今後の利用予定:

今後も引き続き、ELM 発生条件の正確な評価や ELM 抑制・小振幅化に重要な物理機構の解明を目的とした物理モデル考案・コード開発を進める。特に、ELM 発生条件についてはかなり正確に評価・予測することが可能になっていることから、今後は特に原型炉で実現可能な ELM の抑制・小振幅化方法の検討、特に小振幅 ELM および ELM のない運転方式として有望と考えられる Grassy ELM および QH-mode の検討を行う。

First-principle simulation of energetic-particle-driven modes in tokamak plasmas

ビアワーゲ アンドレアス

核融合エネルギー研究開発部門 六ヶ所核融合研究所

核融合炉システム研究開発部 プラズマ理論シミュレーショングループ

(1) 利用目的:

We have recently performed successful first-principle long-time simulations of energetic-particle-driven modes in JT-60U tokamak plasmas using an extended version of the MHD-PIC hybrid code MEGA [A. Bierwage et al., *Nucl. Fusion* **57** (2017) 016036]. The simulation results were successfully validated against experimental observations on multiple time scales ranging from short pulsations and abrupt relaxation events (0.1-1 ms) to slow collisional processes (1-100 ms) [A. Bierwage, *Proc. 26th IAEA Fusion Energy Conference*, 2016, Kyoto, Japan, Oral TH/4-3].

The first purpose of the present project is to perform sensitivity studies with the goal of checking the robustness of the simulations and the reproducibility of the results within the experimental error bars. For this purpose, several convergence tests and case studies will be performed.

The second purpose is to identify and understand the physical mechanisms that give rise to so-called Abrupt Large-amplitude Events (ALE) that were seen in JT-60U experiments and reproduced in our recent simulations. It is expected that ALEs may be triggered in several different ways, so a case study will be performed with the goal to find and analyze some possible ALE trigger scenarios.

(2) 利用内容・結果:

This project received a total of $2,530,363 + 2,439,373 = 4,969,736$ core hours, which is about 16% of the requested resources. Nevertheless, the main goals of this work were achieved by securing similar amounts of additional resources on RIKEN's K computer and Tokyo University's FX10.

By performing reproducibility tests and convergence studies using ICE X in combination with K and FX10, we were able to confirm many of the previous results obtained on Helios supercomputer at IFERC-CSC. Figure 1 summarizes some of the long-time simulation results, where we have reproduced a series of three ALEs as seen in JT-60U experiments.

Several case studies were also performed on these HPC systems and some of the findings led to a better understanding of ALEs by shedding light on the importance of multi-mode interactions and collisional slow-down of energetic beam ions.

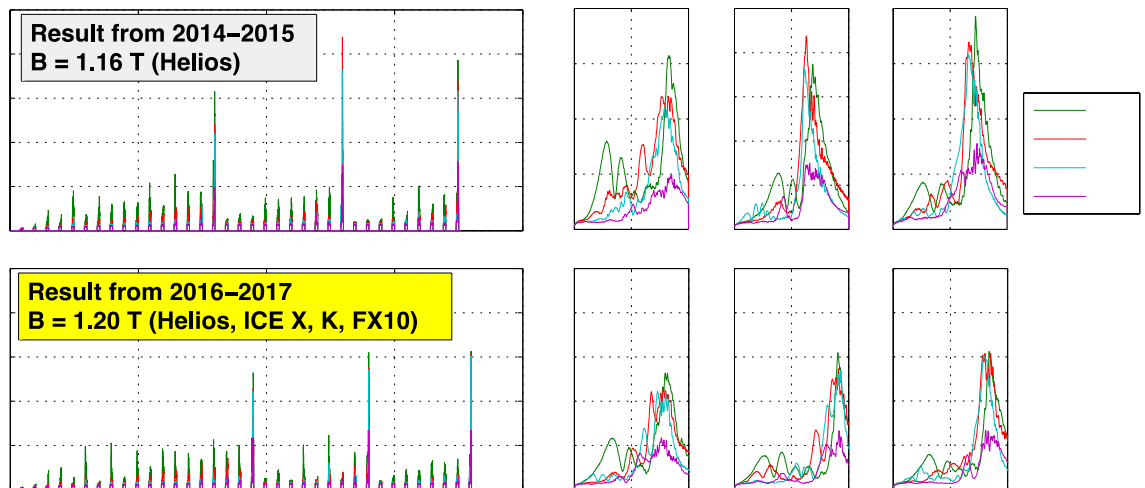


Figure 1: Reproducibility and sensitivity test for a long-time simulation of three ALEs.

Top: Time trace of fluctuation amplitudes obtained with the Helios supercomputer. The signals are decomposed into toroidal mode numbers $n=1,2,3,4$. The panels on the right show enlarged the 1 ms time intervals during which ALEs occurred.

Bottom: Similar results were obtained for a slightly modified case with stronger magnetic field (1.20 T), which was simulated using Helios, ICE X, K and FX10.

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) A.Bierwage, K.Shinohara, Y.Todo, N.Aiba, M.Ishikawa, G.Matsunaga, M.Takechi and M.Yagi, Simulations tackle abrupt massive migrations of energetic beam ions in a tokamak plasma, *Nature Communications*, 9, 3282, 2018

(4) 今後の利用予定:

Some results obtained here led to new spin-off projects, which are currently being pursued. These include investigations into the role of the energetic particle magnetization current and nonlinearly-driven magnetic reconnection during ALEs as well as other phenomena involving interactions between Alfvén waves and energetic particles. This is expected to facilitate further progress towards a complete explanation of the ALE trigger mechanism.

高エネルギー粒子・MHD 連結モデルによる電磁流体现象とディスラプションの研究

Simulation study on magnetohydrodynamic phenomena and disruptions using MHD and energetic particle hybrid models

松山 顕之

核融合エネルギー研究開発部門 六ヶ所核融合研究所
核融合炉システム研究開発部 プラズマ理論シミュレーショングループ

(1) 利用目的:

トカマクプラズマを対象とした電磁流体不安定性の数値解析は、核融合炉心プラズマの高性能放電を実現するための運転領域の拡大や制御手法の開発において重要な役割を果たしている。プラズマ理論シミュレーショングループにおいては、拡張 MHD モデルに基づく線形安定性解析コード MINERVA が開発されており、トカマク放電を模擬した実形状の平衡解を入力として、長波長の電流駆動型モードから短波長の圧力駆動型モードまで幅広いレンジの線形不安定性の同定に応用されてきた実績がある。MINERVA はプラズマ中のトロイダル回転やポロイダル回転を含めた系に適用できるという点が世界的にもユニークなコードである。これまで MINERVA を用いた研究では、炉心の燃料水素プラズマに関する安定性のみが対象とされてきたが、核融合炉心プラズマでは、高エネルギー粒子（イオンや電子）と波の相互作用により不安定モードの特性が変化したり、電磁流体不安定性の励起により高エネルギー粒子の閉じ込めが劣化したりすることが実験研究及び理論研究の両面で示されており、この効果は MINERVA には未実装であった。そこで本研究では MINERVA と連携可能な高エネルギー粒子分布関数解析モジュール DKPRES を開発することで、MINERVA の特徴を生かした新しい高エネルギー粒子駆動モードの線形安定性解析モデルを開発するとともに、同研究から得られるハイブリッドモデルの知見をもとにした非線形安定性解析モデルの開発をも視野に入れることで、トカマク炉心プラズマ研究の難題であるディスラプションにおける高エネルギー粒子の影響の解明に向けた研究に展開する。本課題は平成 28 年度利用課題「高エネルギー粒子・MHD 連結モデルに基づく電磁流体不安定性の線形安定性解析モデルの開発」及び平成 29 年度利用課題「高エネルギー粒子・MHD 連結モデルによる電磁流体现象とディスラプションの研究」において継続して実施された。

(2) 利用内容・結果:

① 高エネルギー粒子分布関数解析コード DKPRES の開発概要

本研究では MINERVA コードと連携可能な高エネルギー粒子分布関数解析コードとして DKPRES を開発している。連携計算のフローチャートを図 1 に示す。DKPRES コードは MINERVA コードが与える摂動電磁場を考慮してトカマク装置中の高エネルギー粒子軌道を多数個解析し、電磁場が粒子の分布関数に与える影響を評価する。結果は圧力や電流に対する擾乱の形で評価され、その情報を MINERVA コードに戻して再度、流体計算を行うことで高エネルギー粒子によって駆動される不安定性を取り扱うことができる。従来の計算との差異は

MINERVA と DKPRES を図 1 のように固有関数が収束に至るまで繰り返し計算することで高エネルギー粒子と電磁場の相互作用を自己無動着に取り込んだ線形固有関数と成長率ができる点にある。特に DKPRES コードは MINERVA コードと同一の実形状のトカマク平衡データを利用することが可能でありこの種の解析でしばしば用いられる粒子軌道に関する簡約化を行わず、有限軌道幅効果や波による粒子捕捉などの高次の運動論的效果を考慮することも可能である。他方、有理面付近の微細な電磁場構造をとらえるため、多数の粒子を追跡する必要があるこのために大型並列計算機の利用が必須である。コードの計算結果は国際トカマク物理活動(ITPA)におけるトロイダルアルフヴェン固有モード(TAE)のベンチマーク結果やプリンストンプラズマ物理研究所が公開している標準ベンチマークデータとの定量的な比較によって検証されている。

本研究は JT-60U で観測されている低周波 MHD 不安定性である高エネルギー粒子壁モード(EWM)を主たる解析の対象と位置付けているが、この解析を実現するためには課題が残されている。EWM は低周波のモードであるため、十分な周波数解像度を得るためには長時間の計算が必要である。予備計算の段階では DKPRES コードを用いて EWM を解像するためには粒子数 10^7 - 10^8 程度の高い空間解像度が必要であることが分かったが、そのような多数のテスト粒子を使用すると線形解析と実験の比較を行う際に多数のパラメータランを実行することが現実的ではない。そこで平成 28 年度-平成 29 年度はシミュレーションを効率的に実行するための計算モデルの拡張とコードのチューニングを行った。

② DKPRES コードの拡張に関する成果

(1) 特異値分解(SVD)に基づく粒子フィルタの開発

MINERVA のような線形安定性解析コードは実験データを参照しながらパラメータ依存性を多くのケースについて調査するため、できる限り実行時の経過時間を抑える必要がある。一方、DKPRES コードは多数のテスト粒子を使って速度空間をサンプルすることで解の精度を向上するが粒子数とともに計算時間が線形に増加する。また、DKPRES コードでは摂動圧力の評価を有限要素法によって定式化しているが MINERVA コード側で摂動圧力勾配を評価できるよう高次要素によって解の滑らかさを保証しようとする粒子法の離散化ノイズに由来する短波長の空間振動が見られており、これを除去するために多数の粒子が必要となることが課題である。この条件を緩和するため、特異値分解(SVD)に基づく粒子フィルタを新たに開発した。図 2 は粒子フィルタによるポテンシャルの短波長成分の除去を行った一例であり、フィルタの適用によって従来に比べ 1/10 程度の粒子数で同等の空間改造度が得られることが示された。

(2) MPI+OpenMP ハイブリッド並列及びチューニング

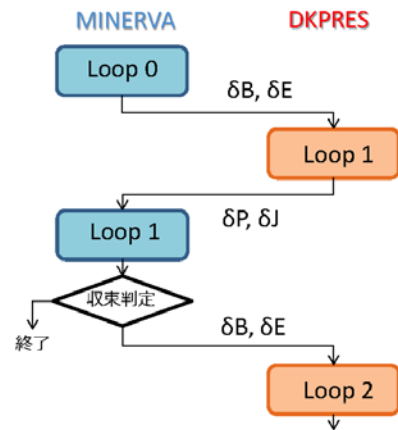


図 1. MINERVA + DKPRES の連成計算のフローチャート

DKPRES コードの大型並列計算機上の実効性能向上を図るため、ノード内の粒子並列をスレッド並列化するハイブリッド並列を実装するとともにプロファイリングによりコードのホットスポットを調査した。その結果、最も負荷の高かった『粒子位置での電磁場データのスプライン補間』について粒子位置探索の最適化や補間データの再利用を実装し、1.3 倍程度の高速化を実現した。（※別システムにおける調査であるが同最適化はスレッド並列のスケーリングの改善にとっても有効であった。）

(3) 有限ラーマ半径効果を扱うための高次精度保存型の粒子軌道計算スキームの開発

DKPRES コードの物理モデル拡張に関する成果の一つとして高次精度保存型の粒子軌道計算アルゴリズムを開発した（成果リスト 1）。同アルゴリズムは、相対論的なエネルギーを持つ荷電粒子軌道追跡において相体積の保存を保証するもので、トカマク装置の特徴である強いトロイダル磁場に巻きついた高速のラーマ旋回を多数回追跡しても誤差の蓄積が起らない点に特徴がある。同アルゴリズムを適用することで DKPRES コードにおいて高エネルギー粒子の有限ラーマ半径効果についての信頼性の高い解析が可能となった。

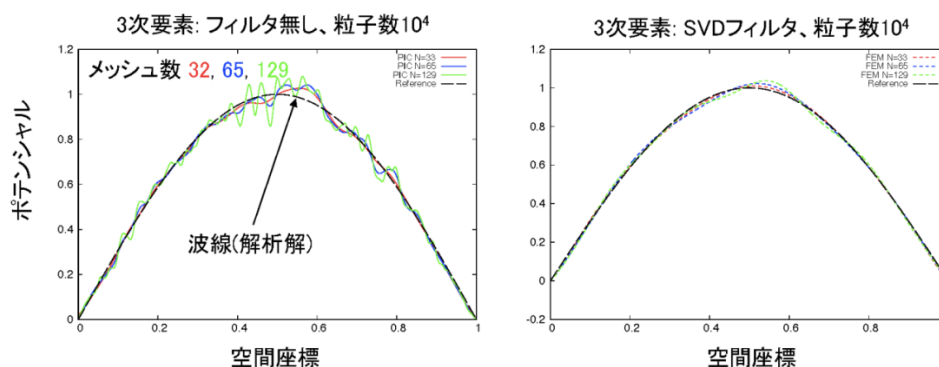


図 2. 粒子法によるポアソンソルバに対する特異値分解(SVD)フィルタの適用: (左) フィルタ無し 3 次 B-spline 要素、(右) SVD フィルタあり、3 次 B-spline 要素。フィルタの適用により同一の粒子数で短波長の人為的なノイズが除去されていることがわかる。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) A.Matsuyama and M.Furukawa, High-order integration scheme for relativistic charged particle motion in magnetized plasmas with volume preserving properties, *Computer Physics Communications*, vol. 220, 285-296, 2017

(4) 今後の利用予定:

平成 28 年度-29 年度において MINERVA+DKPRES の開発、特に EWM を効率的に解析するため、計算モデルおよびコードの実行性能が改良された。平成 30 年度は MINERVA+DKPRES の連成計算を自動化する手法を開発する EWM の解析環境整備と実際のプロダクションランに着手するとともに非線形安定性解析モデルの検討をすすめ、ITER や原型炉、JT-60SA における重要研究課題であるトカマク炉心プラズマのディスラプションにおける高エネルギー粒子の影響の解明に向けた研究に展開する。

周辺輸送障壁形成/ペデスタル崩壊モデルの確度向上のためのシミュレーション研究

瀬戸 春樹

核融合エネルギー研究開発部門 六ヶ所核融合研究所
核融合炉システム研究開発部 プラズマ理論シミュレーショングループ

(1) 利用目的:

プラズマ境界近傍に周辺輸送障壁(ETB)が形成され、炉心の閉じ込め性能が改善する高閉じ込めモード(Hモード)放電は ITER や原型炉の標準運転モードである。しかしながら、ETB 形成の理論研究は径電場やプラズマ回転のシアがプラズマ乱流を抑制して ETB が形成されるモデル等が提案されているが、実験を定量的に説明出来るモデルの確立には至っていない。

また、Hモード放電時の閉じ込め性能を決定する圧力ペデスタルの幅と高さを与えるモデルとしては EPED モデル[P.B. Snyder et al., Phys. Plasmas 16, 056118 (2009)] が広く用いられ実験を精度良く再現しているが、第一原理計算によるモデルの検証は行われていない。

本課題では、トカマクプラズマ中の乱流を記述する簡約化磁気流体力学方程式に径電場シアを駆動する流れのある径方向の釣り合いを導入した ETB 形成モデルを用いた大規模シミュレーションにより、ETB 形成を精度よく再現可能な乱流輸送モデルを開発するための物理的指針を得ること、ならびに、理想 MHD 限界近傍の平衡に対して熱源を印可した周辺局在化モード(ELMs)モデルによる大規模シミュレーションにより、圧力ペデスタルの幅と高さの上限を決定する物理要素を解明することを目的としている。ここで、ETB 形成/ペデスタル崩壊の大規模シミュレーションには周辺 MHD/乱流コード BOUT++を用いる。

本課題にて得られる研究成果としては、乱流シミュレーションと統合輸送シミュレーション、実験解析との比較による ETB 形成時ならびに H モード放電時における乱流輸送モデルの予測確度の向上と EPED モデルの第一原理計算による検証が挙げられる。特に、原型炉に求められる ELMs を回避する運転シナリオの構築と原型炉制御システムとしての炉心統合シミュレータに要求される実時間炉心プラズマ輸送解析には統合輸送モデルの高度化が不可欠であり、大型計算機により初めて可能になる原型炉の早期実現に向けた理論シミュレーション研究という観点からも、本課題の問題設定には意義が有る。

(2) 利用内容・結果:

無衝突・抵抗性バルーニングモード不安定性における電子質量依存性と形状効果依存性

円形断面トラス平衡に対する無衝突バルーニングモード(CBM)不安定性と抵抗性バルーニングモード不安定性(RBM)に対する電子質量依存性を電子慣性と電気抵抗を取り入れた 3 場の簡約化 MHD モデルを用いて数値的に検証した。従来の数値計算研究では計算コストの低減のために現実よりも大きい電気抵抗と重い電子質量を用いた計算が一般的に行われてきた。本

研究では、電子質量なし(RBM)、実電子質量と 10 倍質量、100 倍質量 (RBM/CBM) の 4 ケースにおいてバルーニング型不安定性の線形成長率の抵抗率依存性を調査した。トーラス配位の平衡においては、高抵抗率あるいは重い電子質量 (大きい電子慣性) 側に線形成長率が抵抗率と電子慣性に依存しない分枝[L. Garcia et al., Phys. Plasmas 6, 107 (1999)]が得られた(成果リスト 1-1, 3-2)。一方で平衡を円筒近似したモデルにおいてはこの分枝は現れずに電子質量に関わらず無衝突極限で電子慣性の分枝が得られ、抵抗率の増加に伴い線形成長率が低効率の $1/3$ 乗に比例する局所解析理論と一致する傾向が得られた(成果リスト 3-1)。これらの成果を元に、電子ドリフト波と流れの圧縮性を導入した 4 場の簡約化 MHD モデルを用いてバルーニングモード不安定性の形状効果依存性を数値的に検証した。電子ドリフト波が存在しない場合は無衝突極限 (CBM 分枝) と成長率が抵抗率の冪乗に比例する分枝(RBM 分枝)で楕円度と三角度による安定化の傾向は変化しないが、電子ドリフト波が導入された場合は CBM 分枝と RBM 分枝で三角度の安定化効果が反転することを数値的に示した。これらの成果は ITC26/APFA11 国際会議におけるポスター発表 (成果リスト 3-4) と、同会議の会議論文 (成果リスト 2-2) として報告した。

風上差分スキームのコアプラズマ領域における妥当性の検証

完全に線形化された簡約化 MHD モデルによるマルチヘリシティの安定性シミュレーションではトロイダルモード間の結合が存在しないため、各モードの成長率と固有関数の空間構造は保存される。一方で、BOUT++コードでは SOL/ダイバータ領域における衝撃波を伴う乱流を取り扱うために、3 次精度の WENO 法が対流微分処理に用いられている。各モードをスペクトル分解してモードの固有関数を解析するツールを開発して、対流微分項を 3 次精度 WENO 法と 4 次精度線形風上差分法、4 次精度中心差分法で離散化した 3 種類の線形マルチヘリシティシミュレーションを行い、各トロイダルモードの線形成長率と固有関数の比較検討を行った。その結果、3 次精度 WENO 法と 4 次精度線形風上差分法では風上方向の時間変化に起因する数値的非線形性がトロイダルモード間の非物理的な結合を誘起することにより低成長率のモードの線形成長率が高成長率のモード群のいずれかと同一成長率へと変化して、固有関数の構造もバルーニング構造からテアリング構造へと遷移することを明らかにした。対流微分項は最外殻磁気面内側のコア領域における波の三波結合を記述する本質であるため、周辺乱流をより正確に取り扱うためにはコア領域では対流微分を中心差分法に代表される線形差分手法で計算し、SOL/ダイバータ領域では WENO 法で計算する等のコードの改良を検討する必要があることが明らかになった。これらの成果を M&C2017 国際会議において口頭発表 (成果リスト 5-3) と同会議の会議論文 (成果リスト 4-1) として報告した。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学術誌掲載論文

- 1) H.Seto, M.Yagi, N.Aiba, A.Matsuyama, B.D.Dudson and X.Xu, Non-Ideal Ballooning Mode Instability with Real Electron Inertia, *Plasma and Fusion Research*, 11, 1203122, 2016

会議録

- 2) H.Seto and M.Yagi, Validation Study On Upwinding Schemes For Core MHD/Turbulent Simulation, Proceedings of International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering(ANS M&C2017), Jeju Korea, 2017
- 3) H.Seto, M.Yagi, N.Aiba, A.Matsuyama, B.D.Dudson and X.Xu, Shaping Effects on Non-Ideal Ballooning Mode, *Plasma and Fusion Research*, 13, 3403086, 2018

学会発表

- 4) 矢木 雅敏, 瀬戸 春樹, 簡約化 MHD モデルに基づく無衝突バルーニングモード不安定性の線形解析 (1), 第 33 回プラズマ・核融合学会年会, 宮城、2016
- 5) 瀬戸 春樹, 矢木 雅敏, 簡約化 MHD モデルに基づく無衝突バルーニングモード不安定性の線形解析 (2), 第 33 回プラズマ・核融合学会年会, 宮城、2016
- 6) H.Seto and M.Yagi, Validation Study On Upwinding Schemes For Core MHD/Turbulent Simulation, International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering(ANS M&C2017), Jeju Korea, 2017
- 7) H.Seto, M.Yagi, N.Aiba, A.Matsuyama, B.D.Dudson and X.Xu, Linear Analysis of Shaping Effects on Non-ideal Ballooning Mode Instability, Joint meeting of 26th International Toki Conference(ITC-26) and 11th Asia Plasma and Fusion Association Conference(APFA-11), Toki, Gifu, 2017

(4) 今後の利用予定:

本課題で開発・運用を行っている BOUT++コードの現行バージョンでは C++11 機能拡張が必須要件となっているが、ICE X 計算機では導入されている GNU コンパイラのバージョンが古い
ため、GNU コンパイラの C++11 機能拡張を利用する Intel コンパイラにおいて C++11 機能
拡張が利用できない。そのため、最新のコード開発に関しては C++11 機能拡張が利用可能
な量子科学技術研究開発機構が運用を行っている JFRS-1 計算機を用いて行い、ICE X 計算機
の利用に関しては旧版の BOUT++コードとのベンチマーク等の限定的な運用に止める。

イオン伝導体による革新的リチウム同位体分離技術に関する研究開発

星野 毅、小林 恵太、町田 昌彦、中山 将伸、小林 亮
核融合エネルギー研究開発部門 六ヶ所核融合研究所
ブランケット研究開発部 増殖機能材料開発グループ

(1) 利用目的:

核融合炉の燃料として必要なトリチウムは、核融合炉ブランケット内に装荷されるトリチウム増殖材料中のリチウム 6(${}^6\text{Li}$)と中性子との核反応により生産する。また、核融合発電に使用する熱は、主に ${}^6\text{Li}$ と中性子の核反応により生じる反応熱を利用することから、 ${}^6\text{Li}$ は核融合発電に重要な元素である。しかしながら、天然のリチウムには ${}^6\text{Li}$ が最大で約 7.8%(残りはリチウム 7(${}^7\text{Li}$))しか存在せず、核融合炉の定常運転には、 ${}^6\text{Li}$ の存在比を天然より高い約 90%に濃縮する技術開発が必要である。

我が国ではこれまで様々な ${}^6\text{Li}$ 同位体分離法が検討されたが、安定した高い同位体分離係数は得られず、実用化へ向けた多くの課題を有している。希少で高価な ${}^6\text{Li}$ の海外からの大量輸入も困難であることから、日本独自の ${}^6\text{Li}$ 同位体分離技術の確立は、核融合炉早期実現に向けた最重要課題の一つである。また、文部科学省の原子力科学技術委員会・核融合研究作業部会においても、 ${}^6\text{Li}$ 確保の重要性が報告書に記載されており、本課題は核融合コミュニティの共通認識である。

(http://www.mext.go.jp/b_menu/shingi/gijyutu/gijyutu2/056/shiryo/1350763.htm より)

そこで、本課題では、天然のリチウムから ${}^6\text{Li}$ をより選択的に分離する機能を有する、革新的な ${}^6\text{Li}$ 分離用イオン伝導体を第一原理計算等の計算科学により探索し、日本独自の実用化を見通せる従来法より優れた ${}^6\text{Li}$ 同位体分離に関する基盤技術を確立する。

(2) 利用内容・結果:

1. イオン伝導体におけるリチウム同位体拡散のシミュレーション

第一原理計算(VASP)及びキネティクス・モンテカルロ法を用い、イオン伝導体中における ${}^6\text{Li}$ 及び ${}^7\text{Li}$ 拡散定数の計算を行った。

まず、 Li イオンが狭い領域から広い領域を通過する構造を持つイオン伝導体の場合に、量子効果により同位体移動度の違いが大きくなることを明らかにした。また、 ${}^6\text{Li}$ 、 ${}^7\text{Li}$ 及び空孔間での相関効果により同位体拡散比が小さくなることを示した。同位体効果を最大にするには Li イオンが狭い領域から広い領域を通過し、かつ空孔機構が弱い物質が好ましいという物質設計の指針を得た(図 1)。

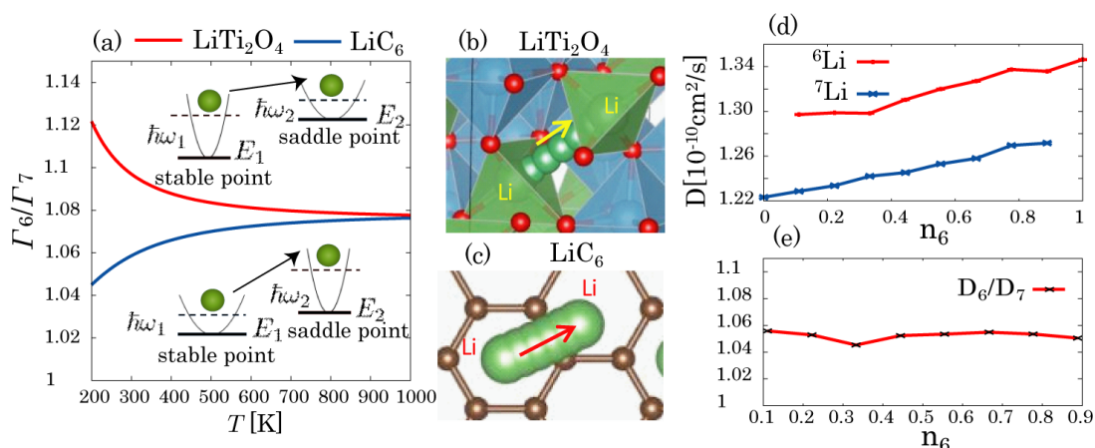


図 1 (a) LiTi_2O_4 (b), LiC_6 (c)における ^6Li 及び ^7Li のジャンプ頻度比 Γ_6/Γ_7 の計算結果。結晶構造により量子効果の寄与が異なる。(d)-(e)キネティックス・モンテカルロ法により計算した ^6Li 及び ^7Li の拡散定数(d)及び拡散定数比(e)。横軸は結晶中の ^6Li 濃度である。

2. リチウム選択透過性を持つイオン伝導体の探索

イオン伝導体を分離膜として使用する場合、リチウム回収効率は Li 含有溶液中に含まれるプロトン(H)やナトリウム(Na)等の他元素の影響を受ける。そのため、イオン伝導体には Li 選択透過性を持つことが望まれる。申請者は第一原理計算結果をデータとしたマテリアルインフォマティクスを行い、 Li を選択的に吸着するイオン伝導体の探索を行った。

第一原理計算データベース Material Project から Li 、 O を含有する 3、4 元系化合物、約 9000 の結晶構造を対象とし、古典力場により約 9000 件の中からリチウムイオン伝導体として機能し得る物質のスクリーニングを行い、2386 構造を評価の対象とした。2386 構造から 469 構造をランダムに選び出し、第一原理計算により、 H 、 Na に関するイオン交換エネルギーの計算を行い、電気陰性度、原子半径、動径分布関数等を記述子としたカーネル回帰分析を行い、イオン交換性能の予測モデルを機械学習により作成した。交差検証の結果 Li-H 、 Li-Na 交換予測モデルの R^2 決定係数は約 0.75、0.80 となり予測能のあるモデル構築が可能であることを確かめた。また、予測モデルから未計算 1917 構造に対するイオン交換エネルギーを算出したところ、第一原理計算データの分布を再現していることを確認した(図 2)。

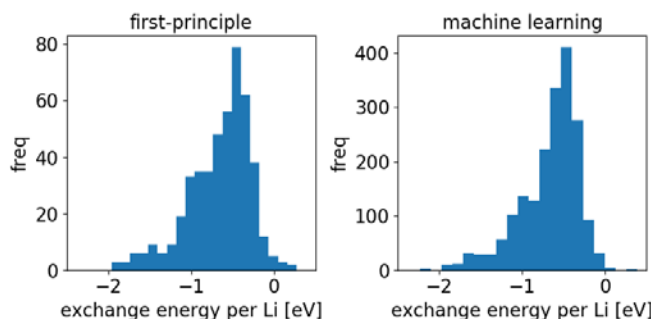


図 2 左図:第一原理計算により計算した 469 構造に対する Li-H イオン交換エネルギーとその頻度。右図: 未計算 1917 構造に対し予測モデルから算出された Li-H イオン交換エネルギーとその頻度。

(3) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学術書

- 1) 星野 毅, 次世代リチウム資源循環型社会の実現へ -核融合研究の新たなイノベーション-, ATOMO Σ 日本原子力学会誌, 59, 9, 16 - 20, 2017

学会発表

- 2) 星野 毅, イオン伝導体によるリチウム同位体分離技術の長時間評価試験, 日本原子力学会 2018 年春の年会, 大阪, 2018
- 3) 星野 毅, イオン伝導体による革新的リチウム同位体分離技術の開発, 日本原子力学会 2017 年秋の大会, 北海道, 2017
- 4) 小林 恵太, 星野 毅, 第一原理計算によるイオン伝導体におけるリチウム同位体効果の解析, 日本原子力学会 2017 年秋の大会, 北海道, 2017
- 5) T.Hoshino, Innovative Technology for 6Li Enrichment using Electrodialysis with Lithium Ionic Superconductor, 第 42 回先進セラミックス複合材料国際会議 (ICACC2018), Daytona Beach, FL, USA, 2018
- 6) T.Hoshino, Innovative Separation Technology for Lithium-6 Enrichment using Electrodialysis with Lithium Ionic Superconductor, 第 232 回アメリカ電気化学会, National Harbor, MD, USA, 2017
- 7) T.Hoshino, Lithium-6 Enrichment using Innovative Electrodialysis Method with Lithium Ionic Superconductor, 第 68 回国際電気化学会, Providence, RI, USA, 2017
- 8) T.Hoshino, Innovative Technology for Lithium-6 Enrichment Using a Lithium Ionic Superconductor, 13th International Symposium on Fusion Nuclear Technology (ISFNT-13), Kyoto, 2017
- 9) K.Kobayashi, T.Hoshino, Numerical Investigation for Lithium Isotope Effect in Ionic Superconductor, 13th International Symposium on Fusion Nuclear Technology (ISFNT-13), Kyoto, 2017
- 10) T.Hoshino, Development of Lithium-6 Separation Technology for Fusion Reactor Fuel using Mesoporous Adsorbent, EMN Meeting on Mesoporous Materials, Prague, Czech Republic, 2016

(4) 今後の利用予定:

当該年度はイオン伝導体として Li-O 含有化合物だけでなく、 Na-O 含有化合物を調査の対象に広げ、 Na を Li に置換した結晶構造の相安定性評価、イオン伝導性の評価を行った。また、 Li-Zn-O-X 、 Li-Cu-O-X 化合物 570 組成(ここで X は任意の置換元素)を基に、ベイズ最適化による ^6Li 選択性の高い伝導体の探索手法の基盤技術を確立した。

平成 30 年度は、前年度までの計算データを基に、機械学習を活用した計算手法の最適化を試み、計算資源の有効活用を図るとともに、無限に広がる非化学量論組成まで対象を拡大した計算を行い、イオン伝導体の結晶構造の相図でこれまで考慮されていない、新たな ^6Li 分離イオン伝導体を創成することを目標とし、計算機利用を継続する。

一般利用者研究成果一覧

1. 量子ビーム科学研究部門

(1) 学術誌掲載論文

- 1) Y. Kurosaki, T.-S. Ho, and H. Rabitz, The role of dissociation channels of excited electronic states in quantum optimal control of ozone isomerization: A three-state dynamical model, *Chemical Physics*, 469-470, 115-122, 2016
- 2) Y. Kurosaki and K. Yokoyama, Quantum optimal control of the isotope-selective rovibrational excitation of diatomic molecules, *Chemical Physics*, 93, 183-193, 2017
- 3) N. P. Dover, M. Nishiuchi, M. A. Alkhimova, A. Ya. Faenov, Y. Fukuda, H. Kiriya, A. Kon, K. Kondo, K. Nishitani, K. Ogura, T. A. Pikuz, A. S. Pirozhkov, A. Sagisaka, M. Kando, K. Kondo, Scintillator-based transverse proton beam profiler for laser-plasma ion sources, *Review of Scientific Instruments*, 88, 073304, 2017
- 4) J. R. Harries, C. Ohae, S. Kuma, K. Nakajima, T. Togashi, Y. Miyamoto, N. Sasao, H. Iwayama, M. Nagasono, M. Yabashi, E. Shigemasa, Single-atom response of helium atoms to pulses from an EUV free-electron laser - implications for the subsequent development of superfluorescence, *Physical Review A*, 94, 063416, 2016

(2) 学会発表

- 1) 黒崎 譲, T.-S. Ho, H. Rabitz, 異性化反応の量子制御における分子回転の効果, 第10回分子科学討論会(神戸), 2016, (Poster)
- 2) 黒崎 譲, 横山 啓一, 二原子分子の同位体選択的振動回転励起の量子最適制御, 第11回分子科学討論会(仙台), 2017, (Poster)
- 3) 黒崎 譲, 横山 啓一, 二原子分子の同位体選択的振動回転励起の量子最適制御, レーザー学会学術講演会第38回年次大会(京都), 2018, (Oral)
- 4) N. P. Dover, Experimental investigation of sheath-driven proton acceleration scaling to the ultra-short pulse, ultra-high intensity regime, 73rd JPS Butsuri

Gakkai, 2018, (Oral)

- 5) N. P. Dover, Experimental investigation of laser-driven proton sheath acceleration in the ultra-short pulse, ultra-high intensity regime, European Advanced Accelerator Concepts, 2017, (Oral)
- 6) N. P. Dover, Investigation of sheath asymmetry effects on proton beam spatial profile in high intensity laser solid interactions, International Conference on High Energy Density Science, 2017, (Oral)
- 7) J. Harries, Multiple-wavelength superfluorescence/ superradiance in helium following free-electron-laser excitation, 第 15 回 X 線レーザー国際学会に参加及び発表, 2016, (Oral)
- 8) J. Harries, EUV-FEL による EUV 超蛍光：数値計算, 日本物理学会 2016 年秋季大会, 2016, (Oral)
- 9) J. Harries, Propagation of short wavelength FEL pulses through dense atomic media, 原子衝突学会第 41 回年会, 2016, (Poster)
- 10) J. Harries, EUV-FEL による EUV 超蛍光：数値計算, 第 30 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 2017, (Poster)
- 11) J. Harries, 励起ヘリウム原子集団からの極紫外光領域における超蛍光の観測, 日本物理学会 第 72 回年次大会, 2017, (Oral)
- 12) J. Harries, Superfluorescence (collective spontaneous emission) observed from helium atoms following excitation using an extreme-ultraviolet free-electron laser, The 30th International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC XXX), 2017, (Poster)
- 13) J. Harries, Ultrafast superradiance processes in helium following excitation by ultrashort FEL pulses, 第 2 回アト秒科学に関する国際シンポジウム, 2017, (Poster)
- 14) J. Harries, Superfluorescence, superradiance, and free-induction decay observed following the excitation of helium atoms and ions with FEL pulses from SACLA BL1, 日本放射光学会第 9 回若手研究会 最先端のパルス光で観る超高速科学,

2017, (Poster)

- 15) J. R. Harries, Observation of superfluorescence at a wavelength of 164 nm from ‘highly’ - charged helium ions, 原子衝突学会第 42 回年会, 2017, (Poster)
- 16) J. R. Harries, EUV-FEL による VUV 超蛍光 : 実験と数値計算, 第 31 回日本放射光学学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 2018, (Poster)
- 17) J. R. Harries, EUV-FEL 励起由来のヘリウムイオンからの 164 nm 超蛍光の観測, 日本物理学会第 73 回年次大会, 2018, (Oral)
- 18) J. R. Harries, "Superfluorescence from helium atoms and ions excited with free-electron laser pulses", The Marc Simon workshop on atomic and molecular photoionization dynamics, 2018, (Oral)

2. 核融合エネルギー研究開発部門

(1) 学術誌掲載論文

- 1) J. Shiraishi, N. Miyato, and G. Matsunaga, Flow-Induced New Channels of Enerft Exchange in Multi-Scale Plasma Dynamics - Revisiting Perturbative Hybrid Kinetic-MHD Theory, Scientific Reports, Vol. 6, pp. 25644, 2016
- 2) J. Shiraishi, N. Miyato, and G. Matsunaga, M. Tom, a, M. Honda, T. Suzuki, M. Yoshida, N. Hayashi, and S. Ide, Impact of hot particles on resistive wall mode stability in rotating high-beta plasmas, Nuclear Fusion, Vol. 57, pp. 126051, 2017
- 3) S. Sumida, K. Shinohara, R. Ikezoe, M. Ichimura, M. Sakamoto, M. Hirata, and S. Ide, Comparison of Dispersion Model of Magneto-Acoustic Cyclotron Instability with Experimental Observation of 3He Ion Cyclotron Emission on JT-60U, Journal of the Physical Society of Japan, 86 巻、12 号、124501 頁, 2017
- 4) K. Kondo, et al., Radiation safety study for the beam commissioning of IFMIF/EVEDA LIPAc RFQ in Rokkasho, Fusion Engineering and Design, In Press, 2018
- 5) 太田 雅之, 権 セロム, 落合 謙太郎, 鈴木 寛光, 先進核融合中性子源 (A-FNS) 計画における $^{99}\text{Mo}/^{99\text{m}}\text{Tc}$ 製造の概念検討, 日本原子力学会和文論文誌, 17, 1, 18-

23, 2018

- 6) S. Sato, C. Konno, H. Nakashima, R. Shionaga, H. Nose, Y. Ito & H. Hashimoto, Shielding performance of newly developed boron-loaded concrete for DT neutrons, Journal of Nuclear Science and Technology, VOL. 55, NO. 4, 410–417, 2018
 - 7) S. Kwon, S. Sato, M. Ohta, K. Ochiai, C. Konno, A new integral experiment on copper with DT neutron source at JAEA/FNS, Fusion Engineering and Design, 109/111, 1658-1662, 2016
 - 8) S. Kwon, M. Ohta, S. Sato, C. Konno, K. Ochiai, Lead Benchmark Experiment with DT Neutrons at JAEA/FNS, Fusion Science and Technology, 72, 3, 362-367, 2017
 - 9) S. Kwon, M. Ohta, S. Sato, C. Konno, K. Ochiai, Benchmark experiment on copper with graphite by using DT neutrons at JAEA/FNS, Fusion Engineering and Design, 124, 1161-1164, 2017
 - 10) S. Kwon, M. Ohta, S. Sato, K. Ochiai, H. Suzuki, Investigation on A-FNS Neutron Spectrum Monitor System, Nuclear Materials and Energy, Volume 16, 207-211, 2018
- (2) 学会発表
- 1) G. Matsunaga, Y. Suzuki*, K. Shinohara and S. Ide QST, *NIFS, New concept of edge stochastization by toroidal field modulation, 43rd EPS Conference on Plasma Physics, 2016, (Poster)
 - 2) 松永 剛, 鈴木 康浩, 篠原 孝司, 井手 俊介, 宇藤 裕康, 坂本 宜照, トロイダル磁場変調による周辺のストキャスティク化, 第 33 回 プラズマ・核融合学会 年会, 2016, (Poster)
 - 3) 松永 剛, 鈴木 康浩, 篠原 孝司, 宇藤 裕康, 坂本 宜照, 核融合原型炉における外部磁場を用いた MHD 制御, Plasma Conference 2017, 2017, (Poster)
 - 4) J. Shiraishi, N. Miyato, G. Matsunaga, M. Toma, M. Honda, T. Suzuki, M. Yoshida, N. Hayashi, and S. Ide, Impact of Kinetic Effects of Energetic Particles on Resistive Wall Mode Stability in Rotating High- β Plasmas, 26th IAEA Fusion

Energy Conference, 2016, (Poster)

- 5) J. Shiraishi, N. Miyato, G. Matsunaga, M. Toma, M. Honda, T. Suzuki, M. Yoshida, N. Hayashi, and S. Ide, Impact of Kinetic Effects of Energetic Particles on Resistive Wall Mode Stability, 平成 28 年度 NIFS 共同研究 研究会「アルヴェン固有モードに関連した MHD 現象の研究」, 2016, (Oral)
- 6) J. Shiraishi, N. Miyato, G. Matsunaga, M. Toma, M. Honda, T. Suzuki, M. Yoshida, N. Hayashi, and S. Ide, Impact of hot particles on RWM stability in rotating high-beta plasmas, 6th Research Coordination Meeting, 2017, (Oral)
- 7) 白石 淳也, 回転プラズマにおける抵抗性壁モードの理論・シミュレーション研究, プラズマシミュレータシンポジウム, 2017, (Oral)
- 8) J. Shiraishi, T. Suzuki, N. Miyato, and G. Matsunaga, Effect of bulk-to-hot particle mass ratio on interaction between MHD ode and particles' motion, Plasma Conference 2017, 2017, (Poster)
- 9) J. Shiraishi, T. Suzuki, N. Miyato, and G. Matsunaga, Effect of bulk-to-hot particle mass ratio on MHD stability, 18 Joint Meeting of US-Japan MHD Workshop and 31st ITPA MHD Disruption and Control Topical Group, 2018, (Oral)
- 10) 白石 淳也, 鈴木 隆博, 宮戸 直亮, 松永 剛, MHD 安定性に対するバルク粒子と高エネルギー粒子の質量比効果, 日本物理学会第 73 回年次大会, 2018, (Oral)
- 11) 隅田 脩平, 篠原 孝司, 池添 竜也, 市村 真, 坂本 瑞樹, 平田 真史, 井手 俊介, JT-60U におけるイオンサイクロトロン放射を励起する DD 核融合生成物の速度分布, 第 7 回 ICRF 加熱研究会, 2017, (Oral)
- 12) 隅田 脩平, 篠原 孝司, 池添 竜也, 市村 真, 坂本 瑞樹, 平田 真史, 井手 俊介, JT-60U における D-D 反応生成物に起因するイオンサイクロトロン放射の励起機構, Plasma Conference 2017, 2017, (Poster)
- 13) 隅田 脩平, 篠原 孝司, 池添 竜也, 市村 真, 坂本 瑞樹, 平田 真史, 井手 俊介, JT-60U におけるイオンサイクロトロン放射を駆動する高速イオンの速度分布解析, 第 20 回若手科学者によるプラズマ研究会, 2017, (Oral)

- 14) K. Kondo, 他, Radiation safety study for the beam commissioning of IFMIF/EVEDA LIPAc RFQ in Rokkasho, 13th International Symposium on Fusion Nuclear Technology (ISFNT-13), 2017, (Poster)
- 15) 三善 悠矢, 朝倉 伸幸, 星野 一生, 日渡 良爾, 染谷 洋二, 坂本 宜照, 飛田 健次, APPLE モデルを用いた熱負荷の観点からの第一壁形状に対する性能評価, プラズマ・核融合学会第 33 回年会, 2017, (Poster)
- 16) 佐藤 聡, 小迫 和明, Nuclear Data Library for Shutdown Dose Rate Calculation on Advanced Fusion Neutron Source Facility, Plasma Conference 2017 , 2017, (Poster)
- 17) 権 セロム, 太田 雅之, 佐藤 聡, 今野 力, 落合 謙太郎, 鈴木 寛光, 核融合 DT 中性子源 FNS を用いた銅ベンチマーク実験, 第 11 回核融合エネルギー連合講演会, 2016, (Poster)
- 18) S. Kwon, M. Ohta, S. Sato, C. Konno, K. Ochiai, Lead Benchmark Experiment with DT Neutrons at JAEA/FNS, Technology of Fusion Energy (TOFE2016), 2016, (Poster)
- 19) S. Kwon, M. Ohta, S. Sato, C. Konno, K. Ochiai, Benchmark experiment on copper with graphite by using DT neutrons at JAEA/FNS, Symposium on Fusion Technology (SOFT2016), 2016, (Poster)
- 20) S. Kwon, M. Ohta, K. Ochiai, H.Suzuki, Activation foil candidates for intense d-Li neutron measurement up to 60 MeV, IAEA Technical Meeting on Modern Neutron Detection, 2017, (Oral)
- 21) S. Kwon, M.Ohta, S.Sato, K. Ochiai, H. Suzuki, Investigation on A-FNS Neutron Spectrum Monitor System, 18th International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM2017), 2017, (Poster)
- 22) 権 セロム, 今野 力, 太田 雅之, 落合 謙太郎, 鈴木 寛光, 核融合中性子源 A-FNS の核計算のための FENDL-3.1c の DPA 断面積検討, 日本原子力学会 2018 年春の年会, 2018, (Oral)
- 23) 権 暁星, 飯田 活正, 若佐 厚至, 谷川 尚, 廣瀬 貴規, 河村 繕範, 固体増殖水冷却方式のテストブランケットモジュールを設置するポートの遮蔽性能, 日本原子力学

会, 2017, (Oral)

- 24) 権 暁星, 飯田 活正, 谷川 尚, 廣瀬 貴規, 河村 繕範, テストブランケットモジュールシステムの保守領域における停止後線量の評価, 日本原子力学会, 2017, (Oral)

平成 28～29 年度
スーパーコンピュータシステム ICE X
利用による研究成果報告集

発行年月 2018 年 11 月

編集発行 国立研究開発法人 量子科学技術研究開発機構

連絡先 〒263-8555

千葉県千葉市稲毛区穴川 4-9-1

情報基盤部 システム計画・科学情報課

(スパコン利用検討委員会事務局)

TEL : 043-206-3485 Fax : 043-290-1112

Email : super_comp_jimu@qst.go.jp

URL : <http://www.qst.go.jp/>

©2018 国立研究開発法人 量子科学技術研究開発機構

QST-R-10