



平成 30 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

令和元年 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（<https://www.qst.go.jp/site/archives/1109.html>）より発信されています。

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

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
新奇スピントロニクス材料評価に向けた電子・陽電子状態の第一原理計算.....	6
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	11
量子メス入射器開発におけるレーザー加速器シミュレーション	14
Relativistic Mirrors in the Ultrahigh Intensity Regime.....	16
水素薄膜ターゲットを用いたレーザーイオン加速シミュレーション	18
レーザーと固体の非線形相互作用シミュレーション.....	20
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	23
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	27
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.....	30
第一原理分子動力学法に基づいた材料解析手法の開発	33
核融合エネルギー研究開発部門	36
ITER 計測装置設計のための核解析	37
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	41
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	44
トカマクプラズマにおける密度分布形成機構の解析.....	46
大域的ジャイロ運動論モデルによる多種粒子系プラズマ輸送解析.....	49
核融合原型炉のダイバータプラズマ特性に関する研究	54
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	58
Predictive first-principle simulation of energetic-particle-driven modes in JT-60SA tokamak plasmas.....	61
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.....	64
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.....	67
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.....	70
一般利用者研究成果一覧.....	73
量子ビーム科学研究部門.....	73
核融合エネルギー研究開発部門	74

大口利用課題 研究成果報告

量子ビーム科学研究部門

新奇スピントロニクス材料評価に向けた電子-陽電子状態の第一原理計算

宮下 敦巳

量子ビーム科学研究部門 高崎量子応用研究所

先端機能材料研究部 プロジェクト陽電子ナノ物性研究

(1) 利用目的:

近年、トランジスタの微細化による高速化と低消費電力化は性能向上の限界に達しつつあり、シリコンベースのエレクトロニクスデバイスからの脱却が模索されている。そこで注目されているのが、電子の電荷自由度とスピン自由度の双方を同時に制御するスピントロニクス技術である。中でもグラフェン単層膜はスピナー軌道相互作用が小さいことからスピン緩和時間が長大であり、高いスピン輸送特性を持つことが期待されている。スピントロニクス材料を正しく評価するためには、単層膜中に注入されたスピン状態を直接観測する評価技術が欠かせない。従来、磁化状態を評価するためには超伝導量子干渉計(SQUID)装置が用いられて来たが、SQUID ではバルク的な材料全体の磁化状態は測定できても局所的な測定は困難である。また、表面の磁化状態を測定する手法に X 線磁気円二色性(XMCD)測定法があるが、たとえ測定に電子収量法を用いたとしても表面数 nm からの情報の平均値になってしまうため、単層膜中のスピン状態のみを選択的に観測することは出来なかった。そこで我々は電子と陽電子との束縛系であるポジトロニウム(Ps)を用いて物質最表面のスピン状態を測定する方法を確立し、スピントロニクス材料評価を行っている。

物質中に入射した陽電子は、物質との相互作用により数 ps 程度で熱平衡に達する(熱化)。金属元素等の中には陽電子の仕事関数が負になる物があり、その場合、熱化後の陽電子は自発的に再び表面から放出される。Ps は電子密度が十分に低い最表面の真空側で生成するが、図 1 に示すように、生成する Ps 内のスピン状態が電子と陽電子で並行の場合と反平行の場合とで Ps の消滅過程に差がある。ここで、3 光子消滅過程に着目すると、スピン状態が平行の場合には多く、反平行の場合には少ない。つまり、スピン偏極した陽電子ビームを用いて 3 光子消滅強度を測定することで、表面での電子スピン状態を直接測定出来る(スピン偏極 Ps 分光測定)。本研究課題では、Ps の表面状態を第一原理バンド計算によって求める事で、スピン偏極 Ps 分光法の理論的裏付けを行っている。

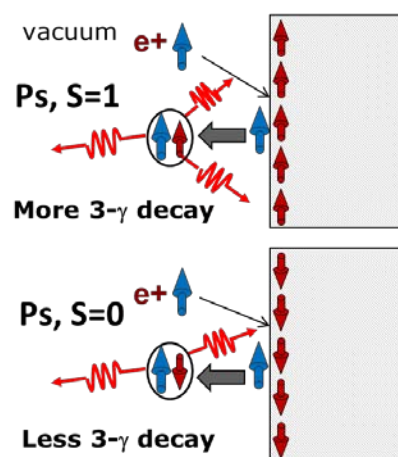


図 1 表面スピンの検出原理。

電子と陽電子のスピンが平行であると、3 光子消滅強度が多く、反平行であると 2 光子消滅強度が多くなるため、表面電子のスピン偏極率が分かる。

(2) 利用内容・結果:

表面ポテンシャルに束縛されぬまま陽電子と電子が Ps を生成して放出される過程では、表面から放出される Ps の仕事関数 Φ_{Ps} は電子と陽電子の仕事関数、それぞれ、 Φ_- と Φ_+ を用い、 $\Phi_{Ps} = \Phi_+ + \Phi_- - 6.8\text{eV}$ と表される(6.8eV は Ps の結合エネルギー)ため、 Φ_{Ps} もまた負になる場合が多く、その場合 Ps も自発的に真空外に放出される。陽電子は表面から放出される時には十分に熱化しているため運動エネルギーは無視できる。よって、 Φ_{Ps} が負であり自発的に Ps が真空外に放出されるような物質であった場合、図 2 に表すように、陽電子がフェルミ準位 E_F のエネルギーを持つ電子と結合して Ps を生成した場合、Ps の持つ運動エネルギーは $|\Phi_{Ps}|$ となる。逆に表面から放出される時のエネルギーをすべて電子の励起エネルギーに使用し、運動エネルギーがほとんど 0 で Ps が放出された場合、 E_F より $|\Phi_{Ps}|$ 分だけ安定したエネルギーを持つ電子でも励起できる。つまり、Ps の生成には E_F から $|\Phi_{Ps}|$ 分のエネルギー幅を持った電子が Ps の生成に寄与する。よって、表面から放出された Ps の分光スペクトルは E_F から $|\Phi_{Ps}|$ 分のエネルギー幅分だけの表面第一層の電子スピン状態に影響されるため、エネルギー分解したスピン状態の導出が必要となる。

今期においてはスピントロニクス材料の代表として金属 Ni と Co 結晶基板上に成長したグラフェン及び六方晶窒化ホウ素(h-BN)のスピン偏極 Ps 分光スペクトルについて評価した。Ni 及び Co の(0001)面とグラフェン及び h-BN の結晶格子間隔は非常に整合することから、図 3 に例示した h-BN/Co(0001)平板モデルの様に比較的小さな計算モデルが適用できる。これらのモデルを用いて金属表面とその上にグラフェン及び h-BN が乗った場合について、実空間位置毎/エネルギー毎の電子スピン分布を導出した。Ni 基板上のグラフェンの場合について図 4 に示すが、金属原子の d 軌道とグラフェンの炭素原子の sp 軌道とが混成軌道を成し、グラフェン本来の K 点での円錐型エネルギーバンド分散(ディラックコーン)が失われていることが確認できる。また、フェルミエネルギー付近ではマイナースピンの方がメジャースピンよりも大きく上回っている(負に傾く)のに対し、Ps 生成に寄与する $|\Phi_{Ps}|$ のエネルギー範囲での合計では若干正に傾いており、グラフェン表面から真空側に向かうにつれてスピン偏極率はより正に傾くことも分かった。

Ps の生成確率を推定するため、それぞれのモデル表面における陽電子密度を導出し、先に導出した電子密度との密度積を求めた。Co 及び Ni 基板表面と上にグラフェン及び h-BN が乗った場合に

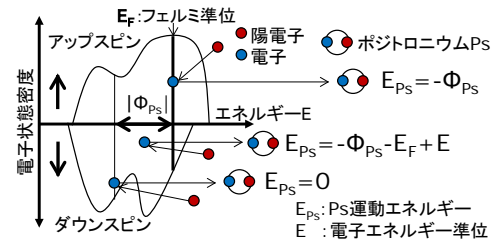


図 2 ポジトロニウム形成に寄与する各エネルギー準位(E)の電子と真空外に放出されるポジトロニウムのエネルギー(E_{Ps})の関係。

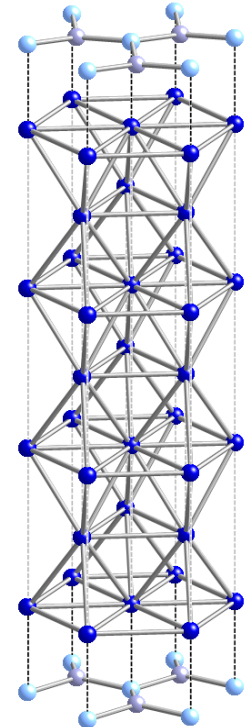


図 3 金属 Co(0001)上に h-BN 単層膜が乗った平板モデル。

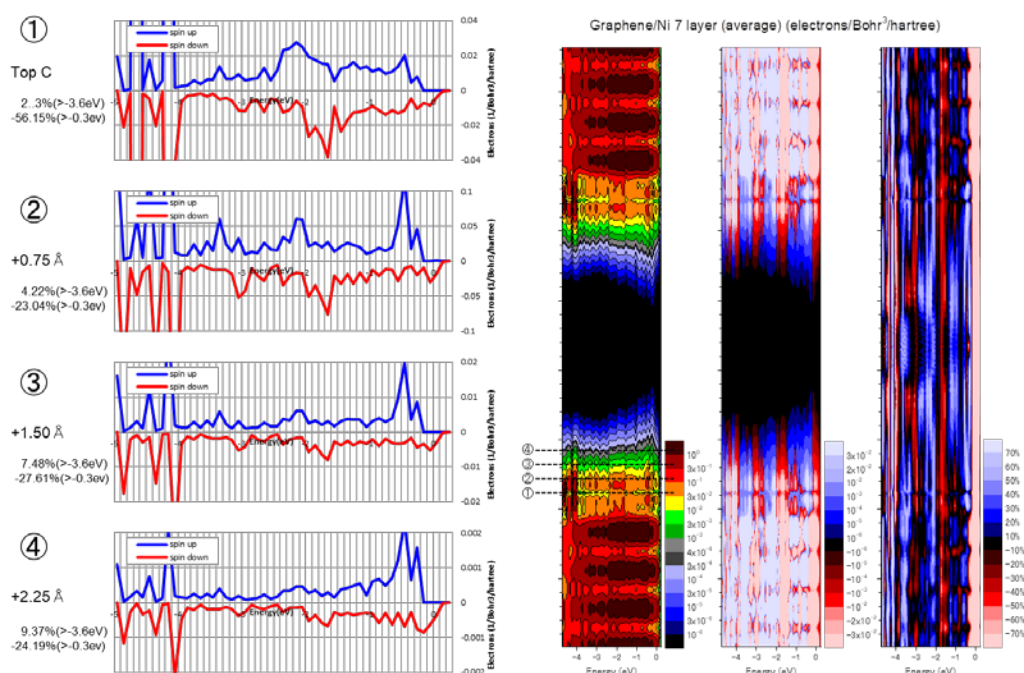


図4 Ni(0001)平板上にグラフェンが乗るモデルでの位置／エネルギー毎の電子スピン分布
右図は左からそれぞれ電子密度分布、スピン密度分布、スピン偏極率分布。
左図は右図でのグラフェン位置①から真空側に向けた電子スピン分布の変化。両図とも青：メジャースピン、赤：マイナースピン。

ついて密度積の空間分布を求めたものを図5に示す。陽電子密度は物質内部では小さく表面近傍の真空領域で大きい。それに対して電子密度は物質表面から真空にかけて急激に減少する。そのため、電子・陽電子密度積は物質の最表面にのみ存在する事になり、Psは物質最表面でしか生成しない事となり、Ps分光法が表面感性を持つ事が確かめられた。この密度積を $|\Phi_{Ps}|$ のエネルギー範囲で積分すると、Co基板上ではグラフェン、h-BN共に

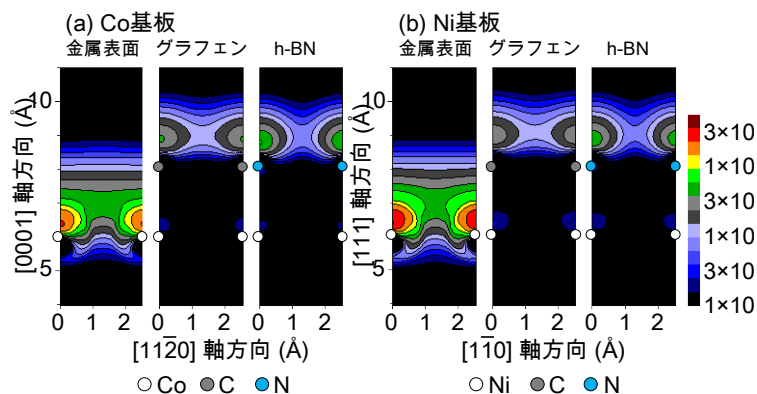


図5 電子・陽電子の密度積
金属原子と炭素ないしは窒素原子を通る断面での空間分布。

6～7%のスピン偏極率を持ち、Ni基板上での4～5%のスピン偏極率と比較すると、NiよりもCoの方がスピン偏極率が高く、グラフェンとh-BNとでは大きな違いが無い。これは、実験から得られたスピン偏極率とよく整合することが分かった。[1]

(3) 今後の利用予定:

今後は CFGG などの鉄系の化合物上のグラフェン等、基板との格子不整合が大きな系についても解析を行うのに加え、SiC 等、半導体基板上のグラフェンについて等、様々な新奇スピントロニクス材料について解析を進めて行く。

[1] A. Miyashita et al., Physical Review B 97, 195405 (2018).

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) スピン偏極陽電子ビームによるグラフェン/強磁性薄膜のスピン偏極の検出, 河裾 厚男, 宮下 敦巳, 前川 雅樹, 和田 健, 萩原 聡, 李 松田, 圓谷 志郎, 境 誠司, 日本物理学会第 74 回年次大会, 福岡, 2019.3 (Oral)
- 2) スピン偏極陽電子ビームを用いた金属酸化物・窒化物の空孔誘起磁性検出, 前川 雅樹, 和田 健, 萩原 聡, 宮下 敦巳, 境 誠司, 河裾 厚男, 日本物理学会第 74 回年次大会, 福岡, 2019.3 (Oral)
- 3) スピン偏極ポジトロニウム飛行時間測定装置の開発, 前川 雅樹, 和田 健, 萩原 聡, 宮下 敦巳, 河裾 厚男, 平成 30 年 京都大学複合原子力科学研究所専門研究会「陽電子科学とその理工学への応用」, 京都, 2018.12 (Oral)
- 4) 単結晶 4H-SiC 表面におけるポジトロニウム生成, 河裾 厚男, 和田 健, 前川 雅樹, 宮下 敦巳, 萩原 聡, 岩森 大直, 海和 俊亮, 長嶋 泰之, 平成 30 年 京都大学複合原子力科学研究所専門研究会「陽電子科学とその理工学への応用」, 京都, 2018.12 (Oral)
- 5) スピン偏極陽電子ビームを用いたガドリニウム添加窒化ガリウム薄膜の空孔誘起磁性検出, 前川 雅樹, 境 誠司, 萩原 聡, 和田 健, 宮下 敦巳, 河裾 厚男, 薮内 敦, 長谷川 繁彦, 日本物理学会 2018 年秋季大会, 京都, 2018.9 (Oral)
- 6) スピン偏極ポジトロニウム飛行時間測定装置の開発, 前川 雅樹, 和田 健, 宮下 敦巳, 萩原 聡, 河裾 厚男, 日本アイソトープ協会第 55 回アイソトープ・放射線研究発表会, 東京, 2018.7 (Oral)
- 7) 六方晶 SiC 単結晶表面におけるポジトロニウム生成, 河裾 厚男, 和田 健, 宮下 敦巳, 前川 雅樹, 萩原 聡, 岩森 大直, 海和 俊亮, 長嶋 泰之, 日本アイソトープ協会第 55 回アイソトープ・放射線研究発表会, 東京, 2018.7 (Oral)
- 8) Electron-Beam-Induced Formation of Pt Nanoparticles on Ceria Films, 山本 春也, 田口 富嗣, 宮下 敦巳, 出崎 亮, 越川 博, 八巻 徹也, 森 利之, 第 28 回日本 MRS 年次大会, 北九州, 2018.12 (Oral)
- 9) Spin Detection with Positron and Positronium, A. Kawasuso, S. Hagiwara, A. Miyashita, M. Maekawa, K. Wada, 18th International Conference on Positron Annihilation, Orlando, USA, 2018.8 (Oral)

- 10) Magnetic Doppler Broadening Measurement on Gadolinium-doped GaN, M. Maekawa, S. Sakai, K. Wada, A. Miyashita, A. Yabuuchi, S. Hasegawa, A. Kawasuso, 18th International Conference on Positron Annihilation, Orlando, USA, 2018.8 (Poster)

学術論文

- 11) Spin polarization of graphene and h-BN on Co(0001) and Ni(111) observed by spin-polarized surface positronium spectroscopy, A. Miyashita, M. Maekawa, K. Wada, A. Kawasuso, T. Watanabe, S. Entani, S. Sakai, Physical Review B, vol.97, no.19, 195405, 2018.5
- 12) Positronium formation at Si surfaces, A. Kawasuso, M. Maekawa, A. Miyashita, K. Wada, T. Kaiwa, Y. Nagashima, Physical Review B, vol.97, no.24, 245303 2018.6
- 13) Spin-Polarized Positron Annihilation Measurement on Ga Vacancies in p-type GaN, M. Maekawa, S. Sakai, A. Miyashita, A. Kawasuso, e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, vol.16, no.34, 350, 2018.7
- 14) Spin-polarized positron beams with ^{22}Na and ^{68}Ge and their applications to materials research, K. Wada, A. Miyashita, M. Maekawa, S. Sakai, A. Kawasuso, AIP Conference Proceedings, vol.1970, no.1, 040001, 2018.5

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 プロジェクト「RI イメージング研究」

(1) 利用目的:

粒子線治療において治療を計画する際、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調整する。しかし、臓器や組織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リアルタイムでモニタリングする手法が世界的に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おり、これまでに、ピンホール型コリメータを用いたイメージング装置によって粒子線の軌跡を画像化できることを明らかにしてきた。平成 30 年度は、より高い感度を得られる平行穴型コリメータの利用検討を、モンテカルロシミュレーションを通して行った。

(2) 利用内容・結果:

シミュレーションは、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) を用いて行った。図 1 にシミュレーションのジオメトリを示す。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、底面 20 cm × 10 cm、高さ 20 cm の天井の空いたアクリル製の容器と内部の水から成る水ファントムを、重心が y 軸上に位置し、さらに、水ファントムの底面および 20 cm × 20 cm の側面が、それぞれ、xz および xy 平面に平行となるように配置した。粒子線の中心軸は x 軸と一致させ、さらに、粒子線の進行方向は x 軸の正の向きと一致させた。

平行穴コリメータ型 X 線カメラを水ファントムの側面と接触するよう配置した。X 線カメラは、平行穴コリメータを持つ遮蔽壁とその内部に配置した板状 (12 cm × 6 cm × 0.1 cm) 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。平行穴コリメータには直径 0.45 cm の円柱状の穴を、12 行 24 列に 5mm 間隔で中心軸がお互いに平行になるように配置した。GAGG 結晶は 1 辺が 5 mm の正方形のピクセル (12 行 24 列) に分割し、各ピクセルの中心と平行穴の中心軸とが一致するよ

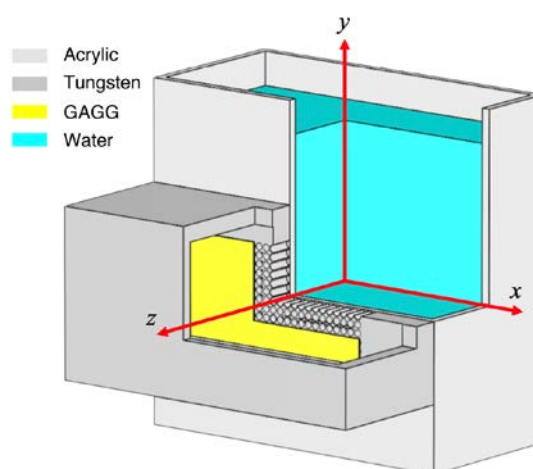


図 1 シミュレーションジオメトリ。内部構造を示すために一部を透明にして表示。

うに配置した。

139 MeV のエネルギーを持つ陽子線を水ファントムに入射し、陽子線の水中軌跡から放出される二次電子制動輻射（制動X線）を平行穴型コリメータにより GAGG 結晶上に結像させ、各ピクセルにおける 30～60 keV のエネルギー付与の事象数を計数することで粒子線画像を作成した。

シミュレーションにより得られた画像を、過去に行ったピンホール型 X 線カメラのシミュレーション画像と比較した結果、ピンホールを平行ホールにすることで、 2×10^4 倍程度検出効率が増加し、その結果、 10^{10} 個程度の入射陽子数で鮮明な画像を取得できることが分かった。また、平行ホールの採用に伴い、高エネルギーガンマ線の散乱によるノイズ成分が増加するが、これについては、GAGG 検出器の周囲にアンチコインシデンス用検出器を追加してイベント選択を行うことでノイズの増加を回避できることも明らかになった（図 2 参照）。これらの結果をまとめ査読付論文誌に投稿し掲載された（成果リスト 3）。

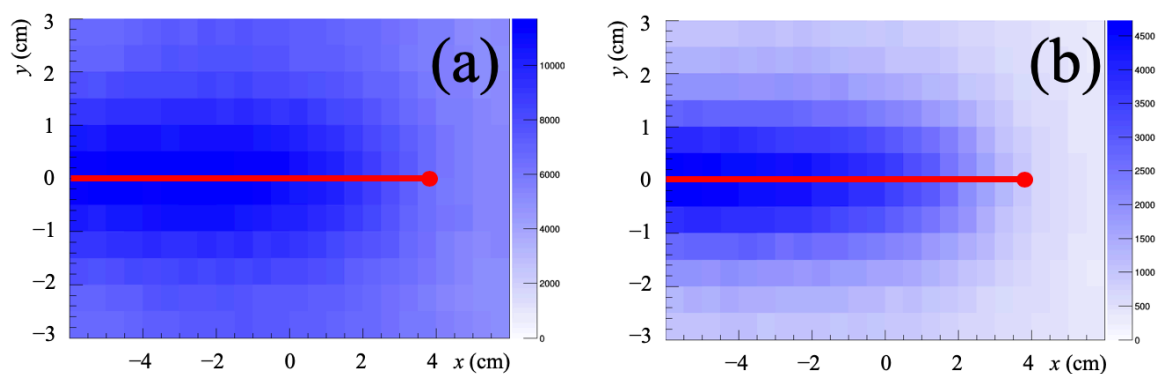


図 1 (a) アンチコインシデンスロジックによるイベント選択を行う前の画像と (b) 選択後の画像。図中の赤線はビームの軌跡、赤丸はビームの飛程を表す。イベント選択によりノイズ成分が削減され、鮮明なビーム軌跡が得られることが分かった。

(3) 今後の利用予定:

機械学習の方法論を取り入れ、より少ない入射粒子数（ 10^8 個程度）のビームに対して飛程位置を推定できるモデルの検討を行う。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) A simulation study on background reduction using veto counters for imaging of therapeutic proton beams by measuring secondary electron bremsstrahlung, M. Yamaguchi, Y. Nagao, N. Kawachi, 2018 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference, Sydney, Australia, 2018.11 (Poster)

- 2) A novel estimation method of water-equivalent thicknesses of secondary particle tracks using secondary electron bremsstrahlung emitted from therapeutic ion beams for attenuation correction, M. Yamaguchi, M. Sakai, Y. Nagao, M. Kikuchi, K. Arakawa, N. Kawachi, 2018 Symposium on Radiation Measurements and Applications (SORMA XVII), Michigan, U.S.A., 2018.6 (Poster)

学術論文

- 3) A simulation study on reduction of the background component using veto counters for imaging of therapeutic proton beams by measuring secondary electron bremsstrahlung using a parallel-hole collimator, M. Yamaguchi, Y. Nagao, N. Kawachi, Japanese Journal of Applied Physics, vol.58, no.2, article number 021005, 2019.1
- 4) A novel estimation method of water-equivalent thicknesses of secondary particle tracks using secondary electron bremsstrahlung emitted from therapeutic ion beams for attenuation correction, M. Yamaguchi, M. Sakai, Y. Nagao, M. Kikuchi, K. Arakawa, N. Kawachi, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A, accepted, DOI: 10.1016/j.nima.2018.11.066

量子メス入射器開発におけるレーザー加速器シミュレーション

近藤 公伯、Koga James、Esirkepov Timur、守田 利昌

量子ビーム科学研究部門・光量子科学研究部

(1) 利用目的:

平成 28 年に量研が中心となり「量子メス」の開発が開始された。10 年間で超電導技術とレーザー加速技術を利用して、現在の重粒子線がん治療装置を飛躍的に小型化、低価格化することが目標である。翌平成 29 年度、文科省の未来社会創造事業大規模プロジェクト型として「レーザー駆動による量子ビーム加速器の開発と実証」が採択された。本プロジェクトは、レーザーによる荷電粒子加速器の実用化を目指すものである。従来、レーザーイオン加速の実験的研究は、生成イオンの最大エネルギーを上げることに主眼を置いたものであった。しかし、本研究開発プロジェクトにおいては、規定エネルギーの炭素イオンを多数、より狭い立体角内に、より少ない励起レーザーエネルギーで、安定に生成する現実的な方法を明確にする必要がある。

本プロジェクトでは、決められた目標スペックを、現実的なレーザー装置で実現しなければならない。そこで、ある程度コンピュータシミュレーションで予測し、実験でその可能性を確かめた上で、概念実証のための実験装置を相補的に構築していくことが求められている。ここでは、この目的のために行ったコンピュータシミュレーションの結果を報告する。

(2) 利用内容・結果:

本スーパーコンピュータ利用研究課題は、昨年度下期に開始され、おおよそ 1 年が経過したところである。開始から現時点まで、シミュレーションの目的としたのは、微細な条件検討結果を示すのではなく、大局的な指針、包括的な結果を示し、今後の実験による研究開発へ向けた基礎的資料となる結果を提示することである。

現在までに、炭素薄膜ターゲットを用い、必要となるレーザー性能（エネルギー、強度、パルス幅、集光径）と生成イオンビーム特性の概略的な評価を 2D と 3D コンピュータシミュレーションで実施した。薄膜厚に関しては、 $0.1\mu\text{m}$ 、 $0.5\mu\text{m}$ 、 $1.0\mu\text{m}$ の各厚を、レーザーエネルギーについては、 1.0 J 、 2.5 J 、 25.0 J を実施した。図 1 に、レーザーエネルギー= 2.5 J 、集光径= $5.0\mu\text{m}$ 、パルス幅= 50 fs のレーザーを、 $1.0\mu\text{m}$ 厚の炭素薄膜に照射した時の 3D PIC シミュレーション結果を示す。ここでは、ターゲットの断面における状態を表示するため、計算結果の z 方向半分 ($z>0$ 部) をカットした状態で図示している。炭素イオンはそのエネルギーの値で色分けされており、赤

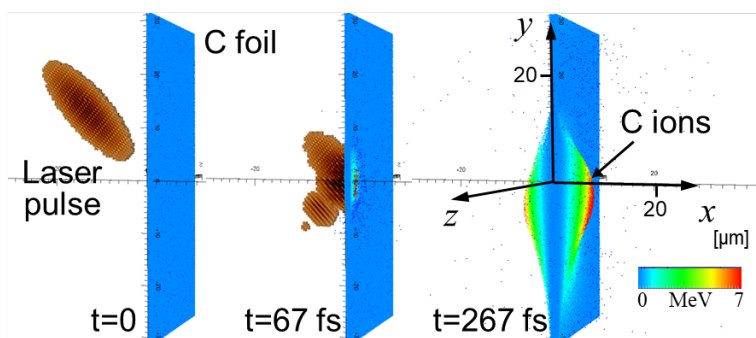


図 1 レーザー、ターゲット、生成炭素イオンの様子
3D 表示 ($z>0$ 部をカット)

色部分が高エネルギーである。 $t=0$ が初期状態であり、レーザーパルスはターゲットの $-x$ 側領域に定義されており、斜め方向 (45° 入射) に進行している。 $t=67$ fs においては、約半分のレーザーパルスが、ターゲットと相互作用し、その一部はターゲットで反射している。 $t=267$ fs にお

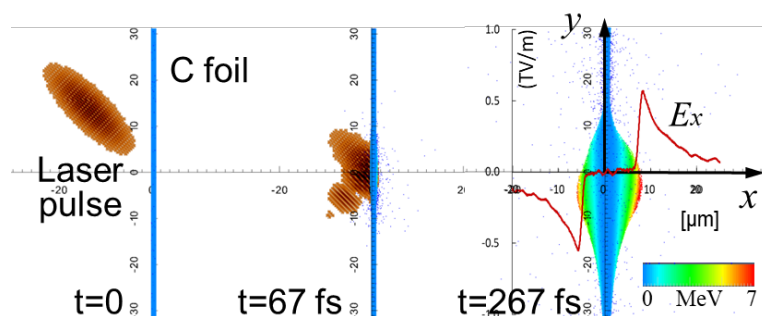


図 2 レーザー、ターゲット、生成炭素イオンの様子
2D 表示 ($z=0$ 面)

いては、レーザーパルスとターゲットの相互作用はほぼ終了し、炭素イオンの加速もほぼ終了している。この時の炭素イオンの最大エネルギーは 9 MeV/u である。我々が利用するのは、 4 MeV/u 近傍の炭素イオンであり、それらは最大エネルギー炭素イオン（赤色部）の $-x$ 側に分布しているのが分かる。

図 2 は図 1 と同じ結果を z 方向から見て、2 次的に表示している。レーザーは斜め 45° 入射であるため、 $+x$ 方向に加速された炭素イオンは、若干 $-y$ 側の領域へ偏った分布をしている。 $t=267$ fs の図には、 x 軸上における x 方向電場 (E_x) の分布が示されている。

図 3 は $t=267$ fs における炭素イオンのエネルギースペクトルである。我々が利用するのは、ターゲット $+x$ 方向前方に設置されたシンクロトロン加速器に入射する炭素イオンである。そこで、 $t=267$ fs において、速度ベクトルが前方に設置された円孔内を通過している炭素イオンのスペクトルを赤色実線で示している。 4 MeV/u 近傍において、 1 MeV/u 幅あたり約 10^8 個の炭素イオンが生成されている。黒色実線は生成炭素イオン全体のスペクトルである。

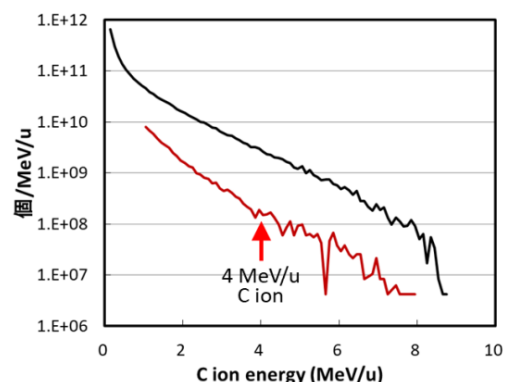


図 3 生成イオンのエネルギースペクトル

(3) 今後の利用予定:

実機の研究開発において、シミュレーションによる予測と実験による実証は、どちらも不可欠である。実験だけでレーザーイオン加速器の研究開発を進めるのは困難であり、実験による研究開発とコンピュータシミュレーションによる研究開発を相補的に進めることが重要である。今後も大型計算機を用い、現象をより詳細に模擬した大規模シミュレーションを実施し、レーザーによる荷電粒子加速器の実用化に向け、シミュレーションによる予測結果の提示を行う。

Relativistic Mirrors in the Ultrahigh Intensity Regime

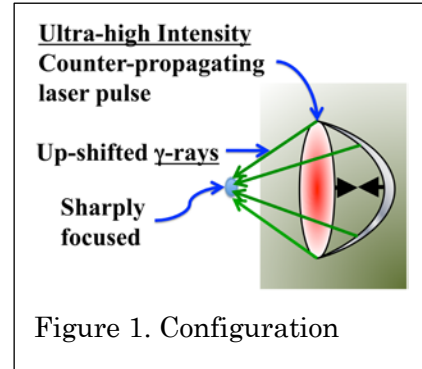
James Koga

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

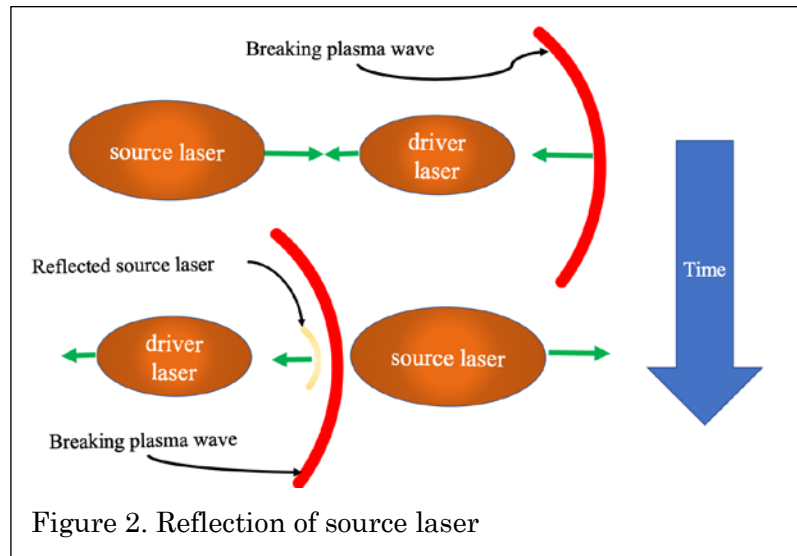
(1) 利用目的:

Previously the reflection of low intensity counter-propagating optical laser pulses from a relativistic flying mirror (RFM) which is a breaking plasma wave generated by an ultra-high intensity laser pulse propagating in plasma was studied. We will clarify the extent to which high intensity laser pulses can be up-shifted, shortened and focused by using a focusing RFM (Figure 1).



(2) 利用内容・結果:

We have used two dimensional particle-in-cell simulations to simulate the collision of two strong laser pulses counterpropagating through an under-dense plasma. One laser pulse is focusing (source laser) and the other laser is defocusing (driver laser). Figure 2 shows a schematic of the temporal evolution of



the system. We have found that even when the source laser has the same focused intensity as the driver laser the source laser can be reflected, up-shifted and focused.

(3) 今後の利用予定:

We will continue to investigate the focusing of the reflected source pulse by varying the initial focusing configuration to determine what focused intensities can be achieved. In addition, we will perform Fourier transforms of the reflected laser pulse to determine the up-shift factor.

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会参加

- 1) Relativistic Flying Mirror in the Ultra-high Intensity Regime, コーガ ジェームズ, ブラノフ セルゲイ, エシロケポフ ティムル, 神門 正城, Stepan S. Bulanov, ピロジコフ アレキサンダー, ビアワーゲ アンドレアス, Peter Valenta, 45th Conference on Plasma Physics, European Physical Society, Prague, Czech Republic, 2018.7 (Oral)
- 2) Focusing and Up-shift of Ultra-high Intensity Lasers Reflected by Relativistic Flying Mirrors, コーガ ジェームズ, ブラノフ セルゲイ, エシロケポフ ティムル, 神門 正城, Stepan S. Bulanov, ピロジコフ アレキサンダー, ビアワーゲ アンドレアス, Petr Valenta, 国際会議 AAPS-DPP2018, 金沢, 2018.11 (Oral)
- 3) Using Relativistic Mirrors for Photon-Photon Scattering, コーガ ジェームズ, ブラノフ セルゲイ, エシロケポフ ティムル, 神門 正城, Stepan S. Bulanov, ピロジコフ アレキサンダー, ビアワーゲ アンドレアス, Petr Valenta, 国際学会 HEDLA2018, 倉敷, 2018.5 (Poster)
- 4) Relativistic Mirrors in Laser-Plasma Physics, コーガ ジェームズ, The 8-th Asian Summer School and Symposium on Laser-Plasma Acceleration and Radiation (ASSS-8, Momiji School), 木津川, 2018.11 (Oral)

学術論文

- 5) Relativistically upshifted higher harmonic generation via relativistic flying mirrors, コーガ ジェームズ, ブラノフ セルゲイ, エシロケポフ ティムル, 神門 正城, Stepan S. Bulanov, ピロジコフ アレキサンダー, Plasma Physics and Controlled Fusion, vol.60 no.7, 074007-1 - 074007-8, 2018.7
- 6) Corrigendum: Relativistically upshifted higher harmonic generation via relativistic flying mirrors (2018 Plasma Phys. Control. Fusion 60 074007), コーガ ジェームズ, ブラノフ セルゲイ, エシロケポフ ティムル, 神門 正城, Stepan S. Bulanov, ピロジコフ アレキサンダー, Plasma Physics and Controlled Fusion, vol.60 no.9, 099501-1, 2018.7

水素薄膜ターゲットを用いたレーザーイオン加速シミュレーション

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:

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。J-KAREN-P を用いた研究の目的の 1 つに、レーザー加速による高エネルギーイオンビーム生成がある。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となる。しかし、単純にレーザー照射することで実応用可能となる高エネルギーイオン (≥ 200 MeV/u) を生成するには、レーザー性能はまだ不十分である。よって、効率的に高エネルギー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、出来るだけ高いエネルギーのイオンを発生させる方法を解明することが重要である。一方、レーザーイオン加速は、その現象の時間と空間が非常に小さいため、実験だけで現象理解及び検討を行なうのは困難である。よって、コンピュータシミュレーションを用いた現象の解明と検討が重要である。ここでは、レーザーイオン加速において、効率的に高エネルギーイオンを生成する条件の解明を目的に実施した、2 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:

新レーザーシステムである J-KAREN-P (出力=783 TW、強度= 1×10^{22} W/cm²、エネルギー=25 J) を 1.0 μm 厚の水素の薄膜に垂直入射した時の 2D PIC シミュレーション結果を図 1 に示す。水平方向に x 軸、垂直方向に y 軸が定義されており、原点は初期ターゲット中心のレーザー照射面に置かれている。表示時刻は、レーザーパルスの中心が初期ターゲット表面に到達する時刻を $t=0$ としており、 $t=-67$ fs が初期状態である。レーザーパルスは、初期においてターゲットの $-x$ 側に定義されており、 $+x$ 方向へ進行している。生成陽子はそのエネルギー値で色分けされており、紫及び赤色部分は高エネルギー陽子であることを示している。 $t=33$ fs において、レーザーパルスとターゲットは激しく相互作用しており、レーザーパルスの一部はターゲット

を通過し、また一部は反射している。 $t=183$ fs において、ターゲットとレーザーパルスの相互作用はほぼ終了し、ターゲットの $+x$ 側領域 (レーザー進行方向側) に高エネルギー陽子が生成されており、それらは $+x$ 方向に進んでいる。 $t=183$ fs

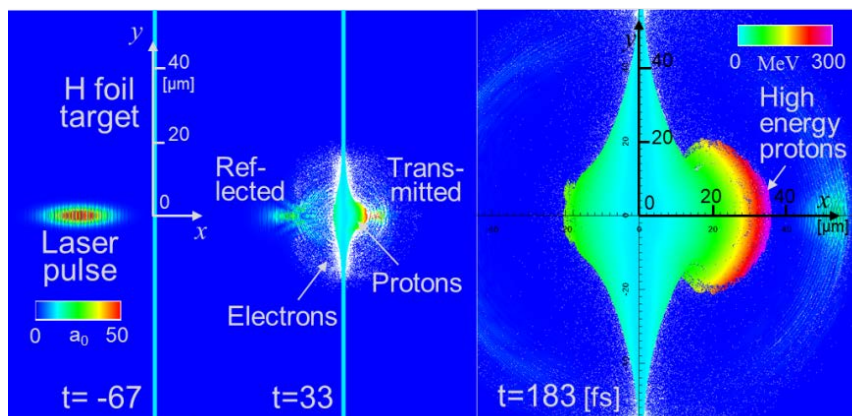


図 1 レーザーパルスと粒子分布図 (陽子はエネルギー値で色分け)

における生成陽子の最大エネルギーは 330 MeV である。ただし、本解析は 2D 計算であり、3D 計算に比べ生成イオンエネルギー値が高く算出されている。

同じ結果を、陽子の初期位置で色分けした結果を図 2 に示す。ここでは、図 2 $t=-67$ fs のターゲット拡大部に示すように、初期ターゲットを厚み方向に 5 つに均等に分割し、各領域の陽子ごとに異なる色を付けている。図 1 と合わせて見ることで、高エネルギー陽子は、レーザー照射面である最も $-x$ 側の領域（赤色の領域）から来ていることが分かる。

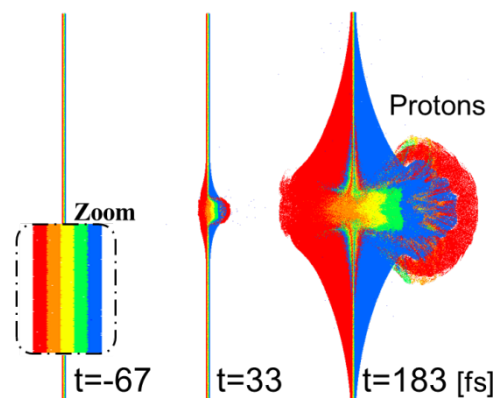


図 2 陽子分布図（陽子はその初期位置で色分け）

本研究により、高エネルギーイオン生成時において、高エネルギーイオンは、その加速方向と反対側のターゲット領域から来ていることが分かった。また、J-KAREN-P を用い高エネルギーイオンが高効率に得られる加速現象を示した。

(3) 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は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、最適な条件を用いることが重要である。PIC シミュレーションを用い、現象をより詳細に解明し、レーザー加速による高エネルギーかつ高品質なイオンビーム生成の条件を提示して行く。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) レーザーイオン加速におけるターゲット密度の影響, 守田 利昌, 光・量子ビーム科学合同シンポジウム 2018, 京都, 2018.5 (Poster)
- 2) Achieved ion energy behavior with target density in laser acceleration, T.Morita, The 2nd QST International Symposium, 奈良, 2018.11 (Poster)

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

光量子科学部門 超高速光物性研究グループ

(1) 利用目的:

1. 単層 MoS_2 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 MoS_2 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。

単層 MoS_2 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。さらに高調波発生の効率および円偏光の偏極と非線形電子応答の関係を明らかにすることで nano material による光スイッチおよび光変換デバイス開発への指針を与える。

2. 時間依存密度汎関数理論、Maxwell 方程式、分子動力学計算を融合した加工シミュレータ開発

本研究では Si のレーザー励起過程初期過程を時間依存密度汎関数理論 (TDDFT) と Maxwell 方程式を融合した多階層計算手法を用いて解析する。得られた電子分布から電子温度のマクロな分布を初期値として電子温度と格子温度の 2 温度モデルによる格子加熱を計算し、それによって分子動力学計算を行う。

これまでのレーザー加工シミュレーションは電子温度記述が単純なモデルでの記述に依存しており正確性に欠ける。さらに加工で重要な物質の機械的変化が記述できない。これら問題点を第一原理計算と正確な分子動力学計算を融合させることで解決する。得られた結果から加工箇所の相変化や飛散物質の解析を行いレーザー加工の高度化および効率化を図る。

(2) 利用内容・結果:

単層 MoS_2 と極短パルスレーザーの非線形相互作用により発生する高次高調波 (HHG) を、スピン軌道相互作用を入れて時間依存密度汎関数法 (TDDFT) を用いて計算した。レーザーの偏光方向はバンド構造の KK' 方向とした。

図 1(a) は入射レーザーと同じ偏光方向 (parallel) で放射される HHG の強度を示したものである。横軸は基本波の光子エネルギーに対する高調波の次数、縦軸は電子流密度スペクトルの原子単位系での値である。Parallel 方向の HHG は系の対称性から奇数次になる。各線はレーザーパルスのピーク強度の時刻に対して電場の振動の位相 (Carrier envelope phase=CEP) の違いによるスペクトルを示す。CEP が 0π は Sin 関数型となり 0.5π では Cos 関数型の波形になる。垂直に引かれた実線は計算で得られているバンドギャップを示している。

図 1(b) はレーザーの偏光方向と垂直方向の偏光を持つ HHG 成分である。 MoS_2 などの KK' 点付近で逆の分極カイラリティを持つ系では生成される分極の非対称性から垂直方向に偏光した偶数次の HHG が発生する事が知られている。本計算でもその特徴が再現されている事が分かる。図 1(a) と (b) から、3 次以上の HHG ピークおよびその中間エネルギー付近で強い CEP 依存性があることが分かる。更に電子流密度を右手系と左手系の円環流に分けてその強度比を図 1(c)

に示した。それぞれの環流は左右の円偏光の放射に相当している。HHG 強度変化以上に円偏光のカイラリティの変化が CEP に強く依存している事が分かる。以上の事から CEP という光のサイクル以下の時間スケールでの変化が光のカイラリティのスイッチにつながる事が分かった。

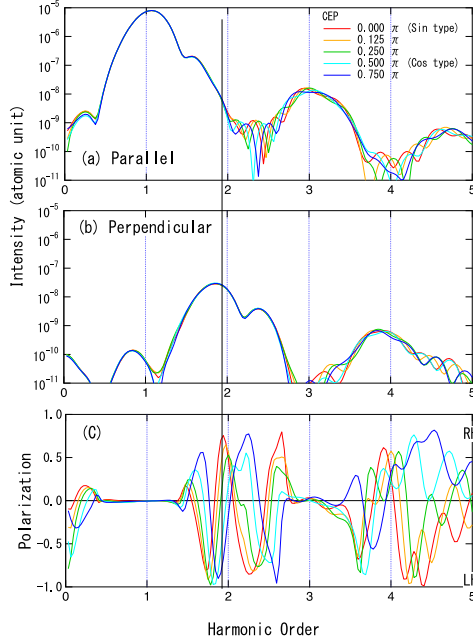


図 1 (a)(b)単層 MoS₂からの HHG スペクトル
及び(c)HHG のカイラリティの分極の CEP 依存性

図 2(a)-(c)にシリコン表面にレーザーを照射した際の励起電子数（網掛け、右軸）、電子と空孔それぞれの擬温度（実線、左軸）と電子の励起エネルギーを温度に変換したもの（破線、左軸）を示した。横軸はシリコン表面からの距離である。レーザーの強度が上がるに従い各値が表面付近で指数関数的変化をすることが分かる。一方、電子・空孔の擬温度は深い場所では一定の値になっている。これは表面付近ではトンネル現象による励起が主であるのに対して深部では 2 光子励起が主となることで電子一個あたりが吸収するエネルギーが固定される事による。

図 3 に電子・空孔の密度 (1/eV) の空間分布をしめした。赤が電子で青が空孔である。表面付近では広いエネルギー領域に渡る電子・空孔対の生成が起きるが深部では特定のエネルギー状態への電子遷移が強い事が分かる。以上のことからレーザー励起されたシリコンの温度分布は表面と深部で大きく振る舞いが変わり、それは電子励起過程の違いによる事が明らかとなった。

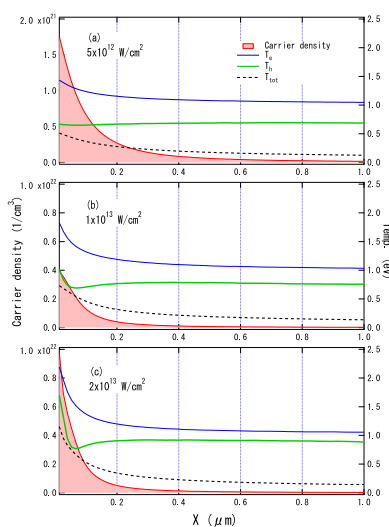


図 2 シリコン表面における励起電子密度、擬温度と電子温度の空間分布。

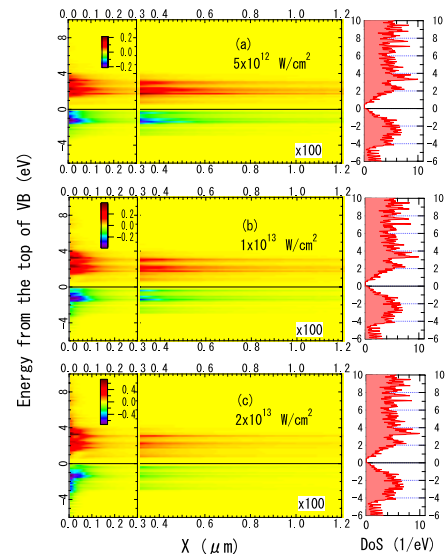


図 3 シリコン表面における励起電子と空孔密度のエネルギー分布。右図はシリコンの DoS。

(3) 今後の利用予定:

1. スピン軌道相互作用を導入したことにより、磁性体やトポロジカル物質の非線形ダイナミクスを扱えるようになった。特に表面に金属的応答をする層が形成されるトポロジカル絶縁体の応答を解析する事で新規物性の予言に繋げたい。
2. レーザー加工のシミュレーションを行う為の量子力学に基づく励起電子分布の計算が可能となった。得られた結果を確率モデルを介することで古典分子動力学と結び、加工現象の全体像に迫る予定である。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) 高強度レーザー場中にある ZnS におけるアト秒電気光学効果, 乙部 智仁, 応用物理学会春季学術講演会, 東京, 2019.3 (Oral)
- 2) 3C-SiC の 2 パルス励起に於ける電子-空孔分布の影響, 乙部 智仁, 日本物理学会秋季大会, 京都, 2018.9 (Oral) "
- 3) Effect of the hole states in time-resolved dynamical Franz-Keldysh effect, 乙部 智仁, Ultrafast Phenomena, Humburg, ドイツ, 2018.6 (Poster)

学術論文

- 4) Anisotropy and polarization dependence of multiphoton charge carrier generation rate in diamond, M. Kozak, T. Otobe, M. Zukerstein, F. Trojanek, P. Maly, Physical Review B, Vol.99, 104305, 2019.3

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、これらの分子イオンが作る合成電場 (\vec{E}) 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。この影響の大きいことを示唆した観測例を見つけ、我々のシミュレーションはその観測値の傾向を再現することに成功し、シミュレーションモデルの妥当性を確認できた。すなわち、このシミュレーションにより、二次電子の運動や DNA 損傷の空間分布に対して現実に近い状況を再現することが期待でき、それによりクラスターDNA 損傷の生成機構の理解も深まることが期待できる。さらに、このモデルを用いて二次電子の運動のシミュレーションを用いて DNA 損傷の空間分布を見積もるのに不可欠で重粒子線がん治療の治療計画に用いられている動径線量分布 (重粒子線の軌道からの垂直方向を関数とした線量) のシミュレーションモデルの構築も行っている。

重粒子線癌治療の治療計画や実験の解析に使用する場合、様々なイオンエネルギー、阻止能 (または LET) に対する動径線量を必要とする。しかしながら、このモデルを用いる一組のイオンエネルギーと阻止能の値から求まる動径線量分布を計算するのに、現在のスーパーコンピューターを用いても数日掛かる。また、モデル、コード共に複雑で、本報告者しか取り扱うことができない。そこで、ここで開発したモデルとシミュレーションから得られた動径線量分布を広く普及することを目指し、(i)以前、導出した近似式を用いてシミュレーション時間を減らすことができるモデルを開発し、従来のモデルとこのモデルから得られた動径関数を比較する。さらに、(ii)シミュレーションから得られた動径線量分布を再現する簡便式の導出を行う。

(2) 利用内容・結果:

イオン照射で生成する分子イオンによる合成電場 \vec{E} は

$$\vec{E} = -\sum_i \frac{eq_i \vec{R}_{il}}{4\pi\epsilon_0 |\vec{R}_{il}|^3} \quad (1)$$

と書ける。ここで、 e 、 ϵ_0 、 q_i 、 \vec{R}_{il} はそれぞれ、素電荷、真空中の誘電率、 l 番目のイオンの電荷数、 i 番目の二次電子と l 番目のイオンとの距離ベクトルを表す。我々の以前の研究 [Moribayashi, Nucl. Inst. Meth.B, **408**, 241 (2017)] からこの式は

$$E' \sim -k \frac{e^2}{N_m \tau_{ion} r} \quad [k \sim 7.36 \times 10^{19} \text{ (V/m}^2\text{)}] \quad (2)$$

と近似できることがわかった。ここで、 N_m 、 τ_{ion} は、それぞれ、分子の数密度、イオン衝突電離過程に対する平均行程である。(1)式では、距離の次元は3次元のベクトルであるのに対して(2)式ではスカラー量となる。図1に入射イオンエネルギーを 500 keV/u の場合の入射イオン衝突で生成する分子イオンが作る電場に対して(1)式を用いた場合と(2)式用いた場合の動径線量分布の結果を示す。ここでは、二例しか示さないが様々な入射イオンエネルギー、 τ_{ion} の値に対して両者は良い一致を示した。(2)式を使うことによりシミュレーションコードがわかりやすくなり、シミュレーション時間を大幅に削減できるので、モデルの普及に役立つことが期待できる。

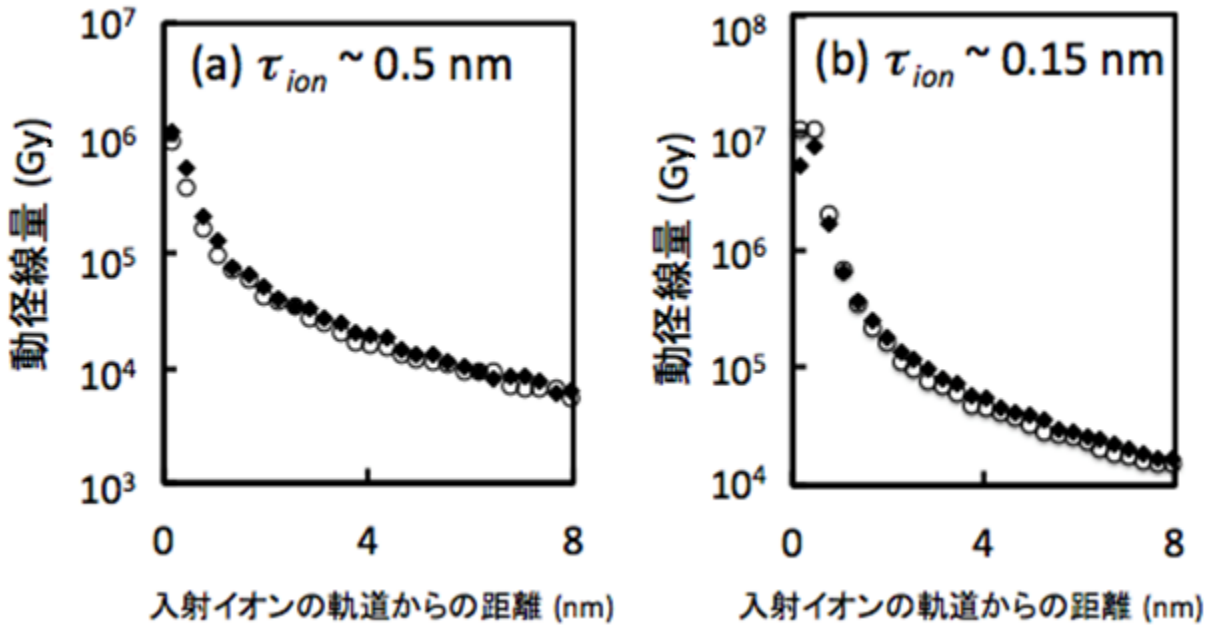


図1 動径線量分布と入射イオンの軌道からの距離との関係:分子イオンの合成電場に対して式(1)を用いた場合(◆で示す)と式(2)を用いた場合 (○)のシミュレーション結果を示した。

前節で述べたように1つの動径線量分布を計算するのに、現在のスーパーコンピュータを用いても数日掛かる。そこで、シミュレーション結果を再現する式を求めた。このモデルでの入

力は、入射イオンのエネルギー(E_{ion})と阻止能(S_p)だけある。 τ_{ion} のかわりに S_p を使用したのは、実験では S_p の方が使用頻度が多いためである。入射イオンエネルギーが固定されると、 τ_{ion} と S_p は反比例の関係となる。図2にシミュレーションと簡便式から得られた動径線量分布を示した。図2では、 r は8 nmまでしか示さなかったが、簡便式は、二次電子のエネルギー付与が起きる全ての領域まで適用できる。ここでは、二例しか示さないが、簡便式は $E_{ion}=100$ MeV/u、 $S_p=600$ keV/ μ mまでシミュレーション結果を再現することができた。この簡便式を用いれば、誰でも数秒で動径線量分布を求めることができ、重粒子線癌治療の治療計画や実験の解析に有用になることが期待できる。

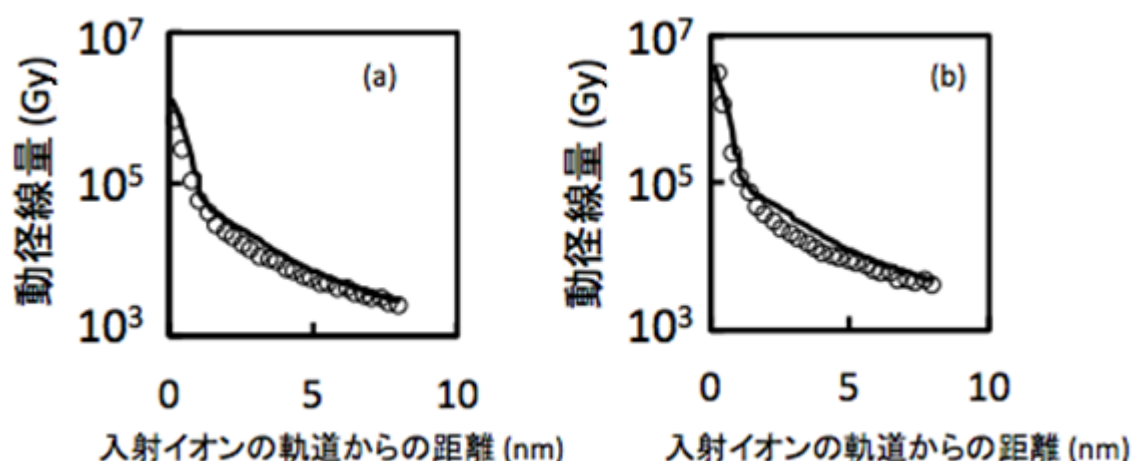


図2. 動径線量分布と入射イオンの軌道からの距離との関係: 新規モデルを使用したシミュレーション結果及び簡便式から求めた動径線量分布をそれぞれ、記号○と実線で示した。入射イオンのエネルギー(単位は MeV/u)と阻止能 (keV/ μ m)は、それぞれ(a) 10, 119.66, , (b) 10, 201.43 である。

(3) 今後の利用予定:

- (i) クラスターイオンや EUV-FEL では、単イオンよりも強い電場が生成する可能性があることが簡単な見積もりからわかった。これらの照射による影響を調べることにより電場とエネルギー付与の空間分布、すなわち、クラスターDNA 損傷の生成量との関係が明らかになると考え、これらの量子ビームで生成する二次電子の運動シミュレーションのモデル開発を行うことを予定する。
- (ii) 図1と図2で示したように入射イオンの軌道付近では、非常に局所線量が大きくなる。この非常に大きな局所線量は局所領域の温度を上昇させるが、この温度上昇は熱膨張を引き起こすことが予測できる。実際に熱膨張により生じる圧力は音波として観測されている。シミュレーションで得られた動径線量分布から温度上昇量を見積もり、熱膨張のシミュレーションモデルを構築することを予定する。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Role of ion impact ionization cross sections in radiation biology using swift highly charged ion beams, K. Moribayashi, 19th International Conference on the Highly Charged Ion, リスボン (ポルトガル) , 2018.9 (Poster)
- 2) 重イオンビーム照射によって生じる熱膨張が引き起こす DNA 損傷の可能性, 森林 健悟, 原子衝突学会 2918, 京都府京都市, 2018.10 (Poster)
- 3) 重イオンプラズマのエネルギー付与と DNA 損傷の関係, 森林 健悟, 「原子分子過程研究と受動・能動分光計測の高度化のシナジー効果によるプラズマ科学の展開」研究会, 岐阜県土岐市, 2018.12 (Oral)
- 4) 重イオンビーム照射におけるブラッグピーク付近での温度上昇, 森林 健悟, 日本物理学会第 74 回年次大会, 福岡県福岡市, 2019.3 (Oral)

学術論文

- 5) Application of simple formulas to track potential in heavy-ion-beam simulation, K. Moribayashi, Transactions of the Materials Research Society of Japan, vol.73, no.5, 267-270, 2018.9

学術書

- 6) N. Shiakazono, K. Moribayashi, and P.R. Bolton, Application of laser-driven particle acceleration, (Chapter 10 Using laser driven ion sourcer to study fast radiobiological process のみ執筆) 388 (15 for chapter 10) , CRC press, 2018.6

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、Luo Di、櫻庭 俊

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、破壊と再構成によりその位置や分子組成を変えているが、その仕組みやそれがもたらす影響についてよくわかっていない。本課題では、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、構造の安定性や運動にどのような違いを生み出しているのか明らかにする。

本年度は、ヒストン H3 の 42 番目のアルギニンの翻訳後修飾が、ヌクレオソームの安定性に与える影響を調べた。

(2) 利用内容・結果:

ヒストン H3 の 42 番目のアミノ酸残基アルギニンは、ジメチル化修飾を受ける。この修飾については、遺伝子発現を活性化するという報告と不活化するという背反する報告があり、議論的になっていた。アルギニンのジメチル化には、図 1 に示したように異性体 (asymmetric と

2 つの symmetric arginine)

が存在する。我々は、ジメチル化であっても、ジメチル化される部位の違い、すなわち、ジメチル化アルギニン異性体によって、ヌクレオソームの安定性に与える影響が異なり、その結果、遺伝子発現に影響を与えていると考えた。そこで、各異性体について分子動力学計算を実施した。結果、asymmetric にジメチル化修飾されると、ヒストンに巻き付いた DNA

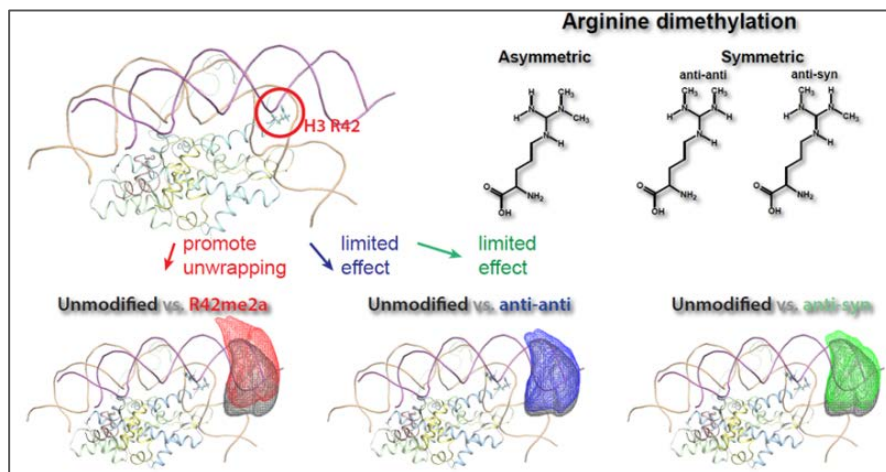


図 1. ジメチル化アルギニンとその影響。右上に、2 つのメチル基が非対称に付加されたアルギニンと対称に付加されたアルギニンを示す。非対称にメチル化された場合(赤のメッシュ)、DNA が最も大きく開く。一方、対称にメチル化された場合 (青と緑のメッシュ)、修飾なしの場合(黒メッシュ)と DNA の揺らぎはほぼ変わらない。

が水素結合を失い不安定化し、ヌクレオソーム全体が不安定になることが分かった (図 1)。さらに、MD データにもとづいて反応速度解析を行い、定量的に DNA の運動 (open と close の 2 状態転移) を評価することに成功した (図 2)。図 2A のように、open と close 状態を定義し、50 ナノ秒間にどちらの状態にあるかを調べる (図 2B) ことにより、open, close の速度係数を計算することができる。結果、asymmetric に 2 つのメチル化が起こった場合、open の速度が速くなるとともに、close の速度が遅くなり、相乗的に平衡が open

状態になることが分かった。一方、symmetric にメチル化が起こった場合、open, close のどちらの速度も大きくなり、結果的にその比で決まる平衡状態は、修飾なしとほぼ変わらなかった。

以上の結果から、2 つの背反する報告は、そもそもアルギニンのジメチル化構造自体が違う可能性を提示することができた。本結果は J. Phys. Chem. B (2018) に発表した。

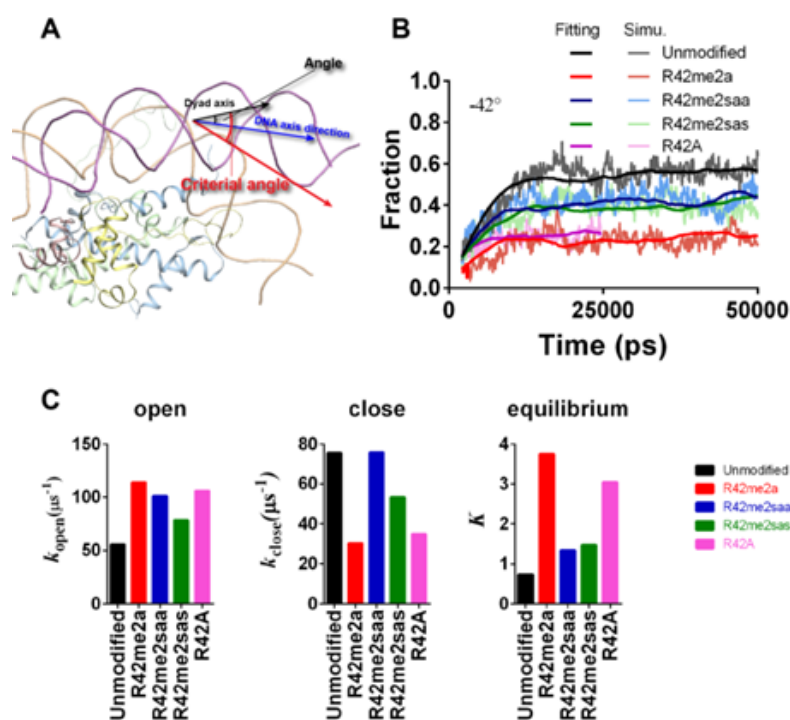


図 2. ヌクレオソームの open と close。A. 角度の定義。B. open と close の境界角度を -42° としたときの open と close の状態の遷移。C. open への遷移速度 (左)、close への遷移速度 (中)、平衡定数 (右)。

(3) 今後の利用予定:

今後は、他の修飾の影響を調べていくとともに、ヌクレオソーム以外のタンパク質分子についても、大規模なシミュレーションを実行することで、アミノ酸残基の変異や修飾の構造やダイナミクスに与える影響を解析することで、タンパク質分子の機能発現のメカニズムを明らかにしていきたい。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Free energy profiles of the intra- and inter-nucleosomal interactions by all-atom molecular dynamics simulations, H. Ishida and H. Kono, 第 56 回日本生物物理学会年会, 岡山, 2018.9 (Oral)

- 2) Investigating the influence of Arginine Dimethylation on Nucleosome Dynamics using All-atom Simulation and Kinetic Analysis, Z. Li and H. Kono, 第 56 回日本生物物理学会年会, 岡山, 2018.9 (Oral)
- 3) クロマチンダイナミクスによる遺伝子発現制御、量子生命科学研究会第 2 回学術集会, 東京, 2018.5 (Poster)
- 4) スーパーコンピュータで知るタンパク質, DNA の形と動き、スパコンを知る集い in 岐阜「京」からポスト「京」へ, 岐阜 2019.3 (Oral)
- 5) Sequence-Dependent Asymmetric Unwrapping of nucleosomes of yeast, The 63rd Annual Meeting of the Biophysical Society, Baltimore USA, 2019.3 (Poster)

学術論文

- 6) MNase, as a probe to study the sequence-dependent site exposures in the +1 nucleosomes of yeast, Luo.D, Kato. D, Nogami.J, Ohkawa. Y, Kurumizaka. H, Kono. H, Nucleic Acids Research, 46, 7124-7137, 2018.6
- 7) Investigating the Influence of Arginine Dimethylation on Nucleosome Dynamics Using All-Atom Simulations and Kinetic Analysis, Li, Z., Kono, H, The Journal of Physical Chemistry B, 122, 9625-9634, 2018.9

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、昨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。

(2) 利用内容・結果:

本計算の系は、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)。DNA解離については、DNA解離を促進するためにヒストンテール(チューブモデル、黒色)を欠損させた系で実行した。さらにH2A/H2Bヘテロダイマー脱離については、H2A/H2Bヘテロダイマー脱離を促進するために、更にH2AのC末端ドッキング領域の一部(CPKモデル、黒色)を欠損させた系で実行した。

計算手法は、ヌクレオソームDNAの両端の距離、および2組のヒストンH2A-H2Bヘテロダイマーの重心間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ことで、広い範囲のサンプリングを実現する分子動力学シミュレーション法である。

初めに、H2A-H2Bヘテロダイマー脱離を促進するための準備として、ヌクレオソームDNAの両端を広げるためのシミュレーションを実施した。90構造のヌクレオソーム系を陽溶媒条件下

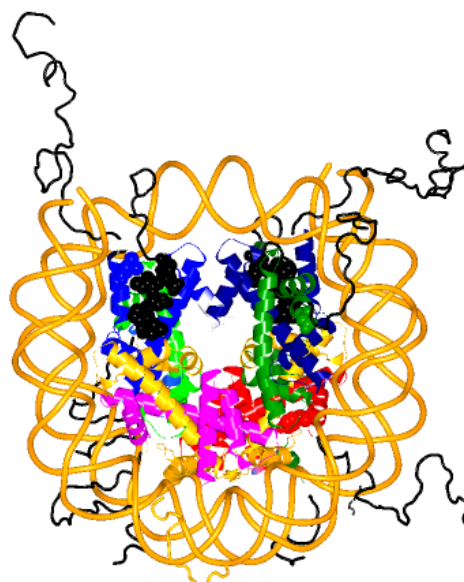


図1：ヌクレオソームの系。

DNA(らせん構造、橙)、ヒストンタンパク質H3(青)、H4(緑)H2A(黄)、H2B(赤)

右側のH3,H4,H2A,H2Bを(H3)₁, (H4)₁, (H2A)₁, (H2B)₁、左側のH3,H4,H2A,H2Bを(H3)₂, (H4)₂, (H2A)₂, (H2B)₂とする。

水、イオンは表示していない。DNA解離を促進するために、ヒストンテール(チューブモデル、黒)を欠損させ、更に、H2A/H2B脱離を促進するためにH2Aの一部を欠損させた(CPKモデル、黒)。

で用意し、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 DNA の解離状態を広く、一様に生成することができた。この解離状態から、特に H2A-H2B ヘテロダイマー解離に最適と考えられる構造を選択し、2組のヒストン H2A-H2B ヘテロダイマーの重心間距離を反応座標に設定した ABMD 自由エネルギー計算法を実施した。これにより、ヌクレオソーム DNA が解離していない X 線構造を初期構造としては実現できなかった H2A-H2B ヘテロダイマー脱離のシミュレーションに成功した。また、このシミュレーションでは、2つの H2A-H2B ヘテロダイマーである (H2A-H2B)₁ および (H2A-H2B)₂ に同じ大きさの力が働いているのにもかかわらず、いずれか1つの H2A-H2B ヘテロダイマーのみが脱離することがわかった。

(H2A-H2B)₁ ヘテロダイマー離脱においては、初めにヌクレオソームを構成する2つの (H2A)₁ と (H2A)₂ の L1 ループ-L1 ループ相互作用がなくなること、スーパーヘリカル DNA 間が広がり始めた。この構造変化は、実験では Gaping と呼ばれる構造変化と対応していると考えられる。次に (H2A)₁ の C 末端ドッキングドメインと (H3)₁ の N 末端 α ヘリックスおよび α 2 ヘリックスとの相互作用がなくなった。H2A の C 末端ドッキングドメインは (H3-H4) テトラマーとの相互作用、ヌクレオソームリモデリング、ヌクレオソーム再構成などに重要な部位と考えられており、その重要性が本計算でも示唆された。最後に (H2A)₁ の C 末端ドッキングドメインと (H4)₁ の C 末端との相互作用がなくなった。実験的には、H4 の C 末端はヌクレオソームの形成、特に (H2A-H2B) ヘテロダイマーと (H3-H4) ヘテロテトラマーの相互作用形成、に重要な部位と考えられている。

更に、(H2A-H2B)₁ ヘテロダイマー離脱がおこる経路 ((H2A-H2B)₁-(H2A-H2B)₂ ヘテロダイマー間相互作用、(H2A)₁-(H3)₁ 相互作用、(H2A)₁-(H4)₁ 相互作用が消失する経路)に沿って、アンブレラサンプリングシミュレーションを用い、ヘテロダイマー H2A/H2B 脱離の自由エネルギーを調べた。その結果、自由エネルギーは約 30kcal/mol と見積もられた。

以上から、H2A の C 末端ドッキングドメインが H2A/H2B ヘテロダイマー離脱に重要な部位であると考えられる。

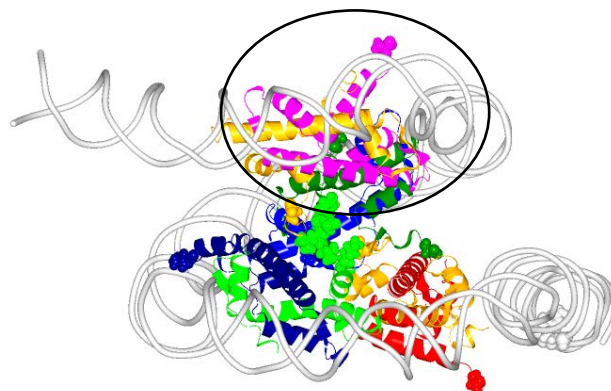


図2：サンプリングにより得られた、(H2A/H2B)₁ヘテロダイマー（黒丸で囲まれた分子）の脱離の様子。図を見やすくするために、DNAは白で示す。
(H2A-H2B)₁ヘテロダイマーは(H2A-H2B)₂ヘテロダイマー、(H3)₁、(H4)₁から順番に解離していく。

(3) 今後の利用予定:

今後は、ヌクレオソームに巻き付いた DNA の外力条件下 (DNA ポリメラーゼなどによる外力などが作用している条件下) におけるヌクレオソーム 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。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Free energy profiles of the intra- and inter-nucleosomal interactions by all-atom molecular dynamics simulations, H. Ishida and H. Kono, 第 56 回日本生物物理年会, 岡山大学, 2018.9 (Poster)
- 2) Model building of overlapping dinucleosome based on SAXS and SANS profiles, Matsumoto.A, Kono. H, Inoue. R, Sugiyama. M, Kato.D, Arimura. Y, Kurumizaka. H, 第 56 回日本生物物理年会, 岡山大学, 2018.9 (Poster)

学術論文

- 3) Free Energy Profile for Unwrapping Outer Superhelical Turn of CENP-A Nucleosome, H. Kono, S. Sakuraba and H. Ishida, Biophysics and Physicobiology, accepted
- 4) Dynamic analysis of ribosome by a movie made from many three-dimensional electron-microscopy density maps, A. Matsumoto, Biophysics and Physicobiology, vol.16, 108-113, 2019.4

学術書

- 5) Matsumoto. A, and Iwasaki. K, Integrative Structural Biology with Hybrid Methods, 16, Springer Singapore, 2018

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、高機能材料等の研究開発に計算科学からアプローチするために不可欠な基盤技術である。当研究課題では、新機能材料・物質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 30 年度は、平成 29 年度に開発に着手した原子核の量子性を考慮可能な第一原理定温定圧経路積分分子動力学コードを整備して、高压氷における振動スペクトルの解析等を行うことにより、高压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。なお本課題は、文部科学省ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦－複合・マルチスケール問題を通した極限の探求」の一環として実施した。

(2) 利用内容・結果:

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、第一原理経路積分セントロイド分子動力学 (FP-CMD) を定温定圧条件に拡張した。高压氷に適用し体積一定条件の FP-CMD シミュレーションの結果と原子核を古典粒子として扱う第一原理分子動力学 (FP-MD) シミュレーションの結果を比較することにより開発したコードの妥当性を検証した。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

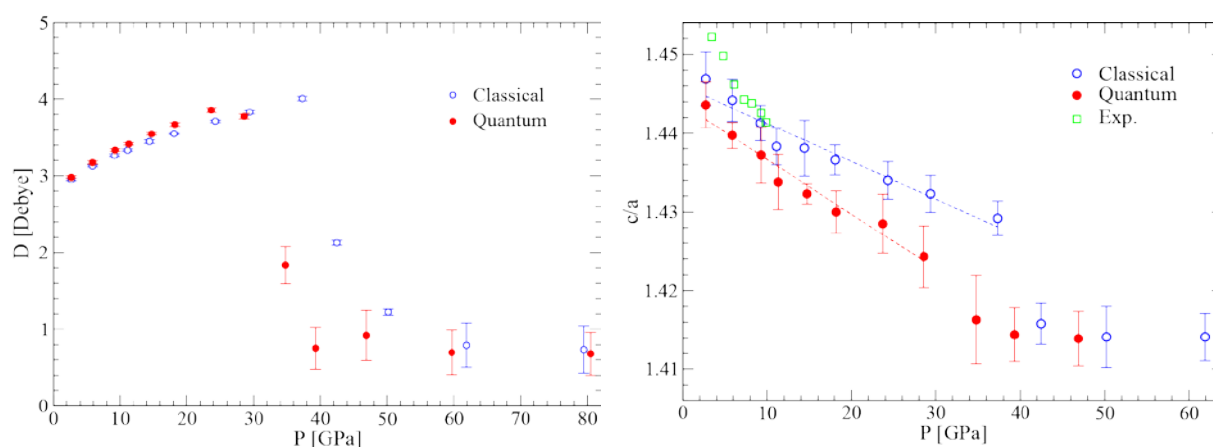


図 1 定温定圧条件下の FP-CMD (赤) と FP-MD (青) により得られた氷 VIII 相の反強誘電性交替秩序変数 D (左) とユニットセルの c/a 比 (右) の圧力依存性。

ている。J. Chem. Phys.誌に発表した体積一定条件での高压氷の FP-CMD シミュレーション (T. Ikeda, J. Chem. Phys. **148**, 102332 (2018)) では、実験から得られている格子定数等の構造に関する知見を基にしてシミュレーションセルを設定したため、VIII 相→VII 相のプロトンの秩序→無秩序転移に伴って起きることが知られている結晶系の正方晶→立方晶転移を再現することができなかった。定温定圧条件で実行した FP-CMD シミュレーションと FP-MD シミュレーションから得られた氷 VIII 相が示す反強誘電性交替秩序を記述する秩序変数 D とユニットセルの c/a 比の圧力依存性を図 1 に示す。プロトンの秩序→無秩序転移に伴う結晶系の正方晶→立方晶転移が FP-CMD では約 30 GPa、FP-MD では約 40 GPa で起きており、氷 VIII 相→VII 相の転移の様子が再現されている。また、原子核の量子性を考慮することにより VIII 相から VII 相への転移圧力がおよそ 10 GPa 低下することを示している。図 2 に FP-CMD シミュレーションと FP-MD シミュレーションから得られたトラジェクトリを用いて求めた赤外吸収スペクトルおよびラマン散乱スペクトルにおける OH 伸縮振動数 $\bar{\nu}_S$ の圧力依存性を示す。計算から求めた $\bar{\nu}_S$ は、FP-MD では破線で示した実験結果とは定性的に異なる圧力依存性を示すが、原子核の量子性を考慮することにより実験結果と一致した圧力依存性を示すようになることがわかった。これらの結果は、比較的高温の 270 K でも高压氷の物性に対して核量子効果が無視できない一定の役割を担っていることを示している (T. Ikeda, Chem. Phys. Lett. **717**, 141-146 (2019))。

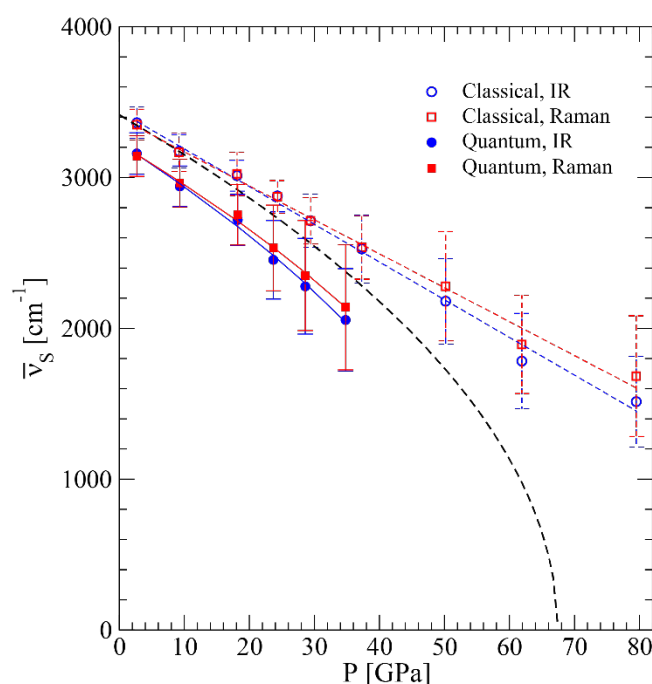


図 2 第一原理計算から求めた高压氷の赤外吸収スペクトル（青）およびラマン散乱スペクトル（赤）における OH 伸縮振動数 $\bar{\nu}_S$ の圧力依存性。FP-CMD、FP-MD、および実験から得られた圧力依存性をそれぞれ実線、点線、および破線で示している。

(3) 今後の利用予定:

第一原理経路積分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。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) 高圧氷の第一原理経路積分セントロイド分子動力学シミュレーション, 池田 隆司, 第2回ポスト「京」萌芽的課題「基礎科学の挑戦」・「極限マテリアル」合同公開シンポジウム, 宮城県仙台市, 2018.7 (Oral)
- 2) 高圧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 II, 池田 隆司, 日本物理学会 2018 年秋季大会, 京都府京田辺市, 2018.9 (Oral)
- 3) 水素クラスレートハイドレートの第一原理分子動力学シミュレーション, 池田 隆司, 日本物理学会第 74 回年次大会 (2019 年), 福岡県福岡市, 2019.3 (Oral)

学術論文

- 4) Radiocesium interaction with clay minerals: Theory and simulation advances Post-Fukushima, M. Okumura, S. Kerisit, I. C. Bourg, L. N. Lammers, T. Ikeda, M. Sassi, K. M. Rosso, M. Machida, Journal of Environmental Radioactivity, vol. 189, 135-145, 2018.9
- 5) First principles isothermal-isobaric centroid molecular dynamics simulation of high pressure ices, T. Ikeda, Chemical Physics Letters, vol. 717, 141-146, 2019.2

核融合エネルギー研究開発部門

ITER 計測装置設計のための核解析

石川 正男、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、核解析による機器の発熱量及び放射線（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・強磁場・高線量の放射線環境となる炉心プラズマ近傍の計測ポート内の遮蔽体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、遮蔽体に貫通孔を設けて光学ミラーを設置する必要があり、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。また、日本が調達する計測装置の一つであるポロイダル偏光計測装置

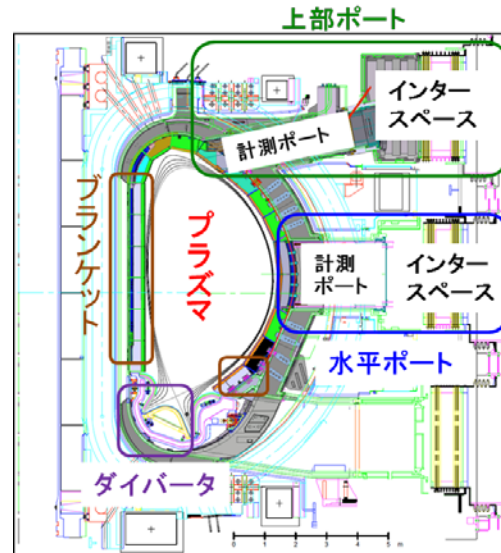


図 1 ITER の断面図とポート位置

では、レトロリフレクターと呼ばれる反射鏡をブランケット表面に設置するため、プラズマからの放射線による核発熱によって反射鏡が発熱・変形し、計測精度が劣化する恐れがある。そのため、本研究では、中性子/光子輸送計算コード MCNP を用いた核解析により、貫通孔を通過する放射線を低減す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とした遮蔽性能の評価と、レトロリフレクターの核発熱量の評価を行った。これにより、計測装置の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:

ITER の計測装置の設計活動は、概念設計、予備設計および最終設計の三段階に分かれており、それぞれの設計段階で行われる審査（設計レビュー会合）において、設計の有用性を示す様々な核解析結果の提出が必要となる。平成 30 年度は、複数の計測装置について、最終設計レビュー及び予備設計レビューに向けた核解析を実施した。ここでは、ポロイダル偏光計測装置と周辺トムソン散乱計測装置について行った核解析の成果の一部について報告する。本研究では、中性子/光子輸送計算コード MCNP5.1.60 を使用した。また、断面積ライブラリーは、核融合計算用断面積ライブラリーとして FENDL3.1 を使用した。

1) レトロリフレクターの核発熱量解析

ポロイダル偏光計測装置 (PoPola) は、プラズマの長時間維持・高性能化を目指す運転のために必要な内部磁場構造を測定する重要な計測装置であり、レーザー光を炉心内部に入射させ、ブランケット表面のレトロリフレクターによって反射された光の偏光状態を測定する。図 2 に PoPola の ITER 本体及びその近傍の機器配置を示す。平成 30 年度は、ブランケット部に複数設置されるレトロリフレクターの内、最も核発熱量が高くなると考えられる物について、構成部品ごとの平均核発熱量と核発熱分布の計算を行った。結果を図 3 と図 4 に示す。レトロリフレクターの核発熱量は、プラズマに近い部分ほど大きくなり、その値は最大で 11.8 W/cm^3 であった。この結果は、機器の冷却設計に利用された。

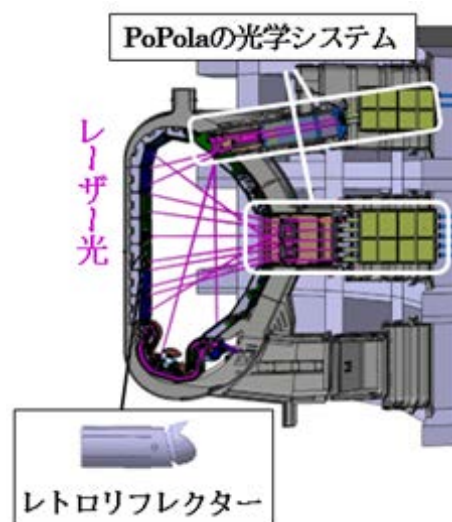


図 2 PoPola の ITER 本体及びその近傍の機器配置

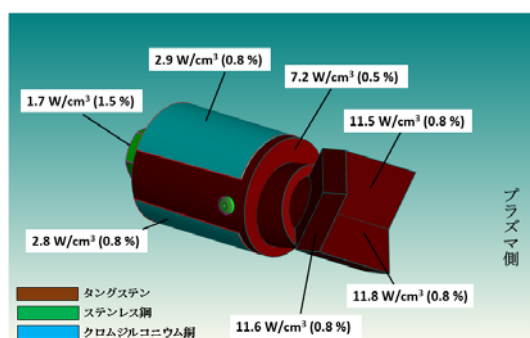


図 3 構成部品ごとの平均核発熱量 (括弧内は相対誤差)

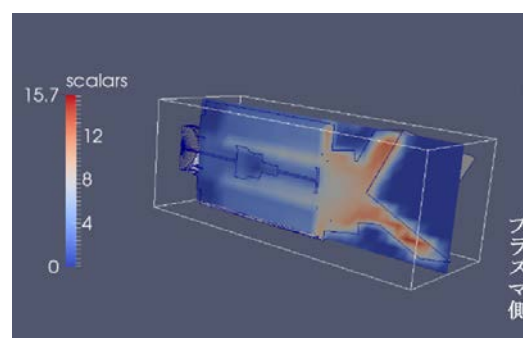


図 4 核発熱分布 (W/cm^3)

2) 周辺トムソン散乱計測装置の核解析

周辺トムソン散乱計測装置 (ETS) は、高いエネルギーのレーザーをプラズマに打ち込み、プラズマ中の電子から散乱された光を集光し、評価する事でプラズマ周辺部の電子の温度と密度を計測する装置で、水平ポートに設置される。図 5 に ETS の ITER 本体及びその近傍の機器配置を示す。ETS は、レーザー入射システムと集光光学システムから成り、前者はレーザーをプラズマへ入射するために、また後者はプラズマ部での散乱光を計測するために遮蔽物に貫通孔を設ける必要がある。この貫通孔を通してインタースペースへやってくる放射線

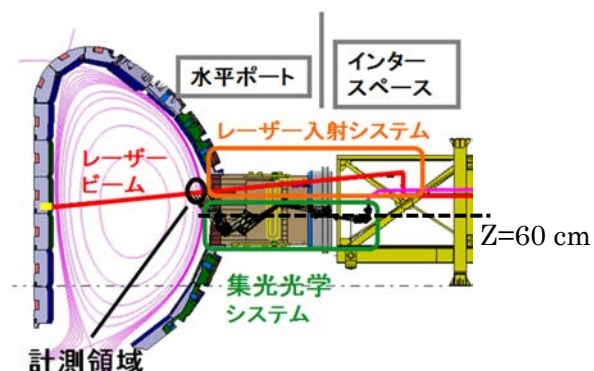


図 5 ETS の ITER 本体及びその近傍の機器配置 (Y=-50 cm の断面図)

の影響を調べるため、水平ポートの運転停止後線量率（ITER の運転停止後約 12 日後、保守期間の開始日の線量率）分布を計算した。結果を図 6 と図 7 に示す。水平ポートのインタースペースにおける運転停止後線量率に対する ETS の寄与量は、保守通路と呼ばれる保守空間の内、もっともプラズマに近く、線量が高いと想定される評価対象領域で $50 \mu\text{Sv/h}$ 以上であり、目標値とされる $15 \mu\text{Sv/h}$ を超えてしまっていることが判明した。現在、この解析結果を受けて ETS の遮蔽設計の改善を進めている。

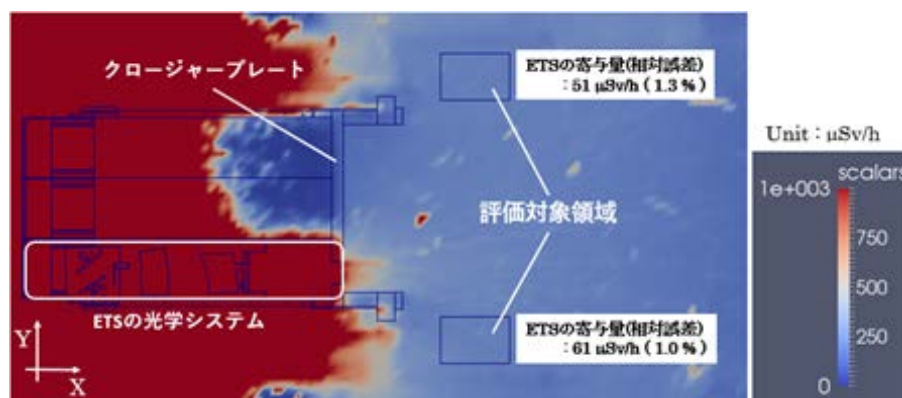


図 6 水平ポートの運転停止後線量率分布（Z=60 cm の水平方向断面図）

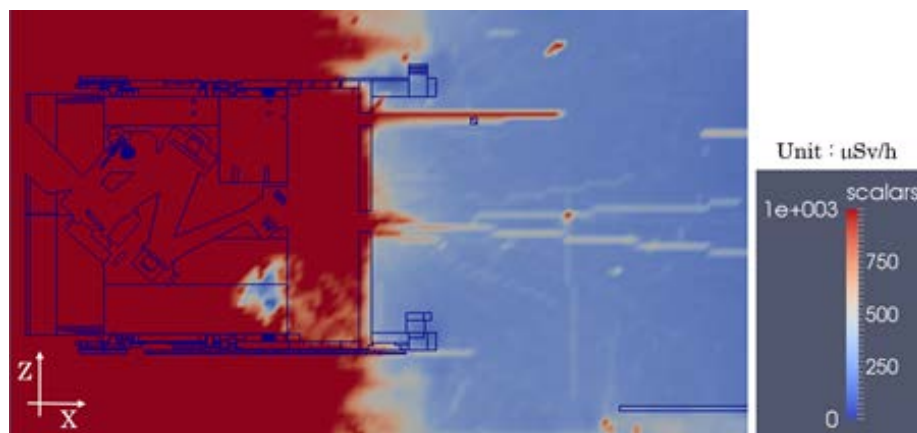


図 7 ETS の光学システム周辺の運転停止後線量率分布（Y=-50 cm の垂直方向断面図）

(3) 今後の利用予定:

平成 30 年度は、ポロイダル偏光計測装置と周辺トムソン散乱計測装置について、ICE X の h432 ジョブクラスによる解析計算を行ったが、解析に使用するモデルの詳細化・複雑化により、計算に必要なメモリ数が増加してしまい、1 ノード当たりの利用コア数を 8/24 にせざるを得ず、その結果、計算速度が低下して予定していたケース数の計算を終了することが出来なかった。そのため、平成 31 年度も引き続きこれらの計測装置について解析計算を実施する。また、併せて計算効率の向上に努めていく予定である。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Thermal and structural analyses of retro-reflectors of ITER poloidal polarimeter that are mounted on first wall panels, R.Imazawa, T.Ono, C.Watts, M.Ishikawa, T.Shimada, K.Itami and T.Hatae, 14th International Symposium on Fusion Nuclear Technology, Budapest, Hungary, 2019.9(Poster)

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)モードや補足電子モード(TEM)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 実験解析や JT-60SA 予測計算に適用する。

(2) 利用内容・結果:

抵抗性壁モードはトロイダル回転やその速度シアによって安定化されることが知られている。JT-60SA において抵抗性壁モードの安定性解析を行うためには、物理モデルによるトロイダル回転分布の予測が必要となる。そこで、JT-60SA のシナリオ 5-1 のトロイダル回転を予測するため、PC クラスタ上で運用している統合コード TOPICS と ICE X 上で走らせた FORTEC-3D を組み合わせて、新古典トロイダル粘性 (NTV) を考慮したシミュレーションを行った。プラズ

マの密度と温度の分布は固定し、トロイダル回転の時間発展のみ計算した。NTV は径電場に敏感に依存する一方、トロイダル回転速度は径電場の大きさや正負に強く影響するので、繰り返し計算による収束が必要となる。JT-60SA ではトロイダル回転の駆動源として中性粒子ビーム入射(NBI)装置を備えているので、それらが相互に矛盾の無い状態での定常トロイダル回転分布予測を行った。全トロイダル角運動量密度(TTORM)の時間発展を図1に示す。全トロイダル角運動量密度は剛体回転するプラズマの角運動量を表しており、何度かの NTV 計算ののちに収束に向かっていることが見て取れる。なお、NBI によるトルク計算は 0.5 秒おき、径電場は逐次計算されており、NTV 評価は収束までに計 6 回必要となった。それぞれの NTV 分布は図2に示されており、分布は振動しながらも概ね定常に落ち着いている。最後の NTV 計算となった 6.8 秒で NTV が与えられた時の TTORM の変化を図1で見ると、ほとんど変化していないことが分かる。すなわち、6.8 秒での NTV 分布はプラズマの回転分布に影響を及ぼさなかったということであり、この時の NTV 分布は径電場やトロイダル回転の分布と矛盾が無い状態であるということが分かる。予測されたトロイダル回転分布はプラズマ安定性解析に供された[1]。

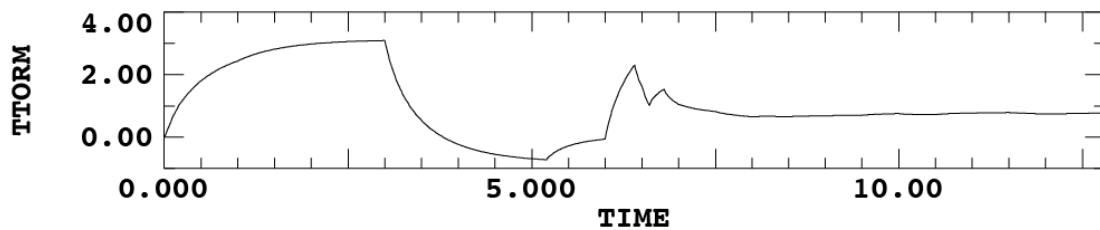


図1 全トロイダル角運動量密度(TTORM)の時間発展

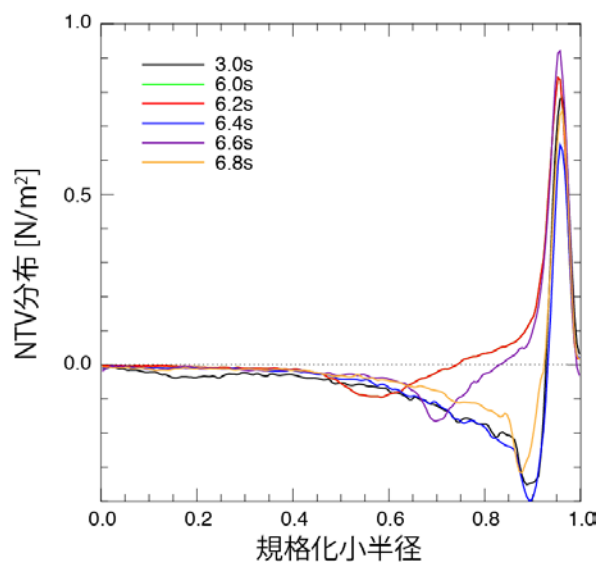


図2 評価した時間ごとの NTV 分布

(3) 今後の利用予定:

今後も統合コードと組み合わせた NTV 計算を続けていくと共に、平成 30 年度は実施しなかった乱流の計算に関しても実施していく予定である。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Resistive Wall Mode physics and control challenges in JT-60SA high beta_N scenarios,
L. Pigattoz, N. Aiba, T. Bolzonella, N. Hayashi, M. Honda, Y.Q. Liu, G. Marchiori, S. Mastrostefano, G. Matsunaga, M. Takechi, F. Villone, 27th IAEA Fusion Energy Conference (FEC 2018), Gandhinagar, India, 2019.10 (Poster)

学術論文

- 2) Resistive Wall Mode physics and control challenges in JT-60SA high beta_N scenarios,
L. Pigattoz, N. Aiba, T. Bolzonella, N. Hayashi, M. Honda, Y.Q. Liu, G. Marchiori, S. Mastrostefano, G. Matsunaga, M. Takechi, F. Villone, Nuclear Fusion , Volume 59, No.10, 2019.8

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/Mode penetration がある。誤差磁場は外部から与える磁場摂動と考えることができるため、磁場摂動に対するプラズマの応答を調べることで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ことを目的とする。

(2) 利用内容・結果:

コイルの製作・据付の過程で生じる誤差磁場によって磁気島が捕捉されるロックトモード (LM) はディスラプションの主要因であり、回転する外部摂動磁場“回転磁場”を用いてプラズマ回転を駆動し、誤差磁場に捕捉された磁気島を解放する能動制御が回避する手段の1つである。これまでの研究では磁気島と外部磁場間に働く電磁力によって決まる固有振動数程度の周波数の回転磁場を与える事で、磁気島の共鳴振動を励起し、磁気島を誤差磁場から解放しながらその成長を抑制できる事が明らかになった。一方で、その安定化の物理機構の詳細は未解明であったため、非線形 MHD シミュレーションコード AEOLUS-IT を用いて物理機構を明らかにした。結果を下図に示す。回転磁場の周波数を非共鳴 (20,000 アルヴェン時間) から共鳴 (1,222 アルヴェン時間) へ変化させると、図(a)に示すように共鳴する回転磁場を与えた場合にのみ磁気島幅が一様に減少する。外部磁場は磁気島に対する安定化効果は外部磁場⇄磁気島間の位相差で理論的には説明される為[Fitzpatrick93]、磁気島と外部磁場との位相差を回転磁場の二周期に渡りプロットし比較した (図(b))。図より非共鳴な回転磁場を用いた場合は磁気島と回転磁場とが同位相であり、共鳴する回転磁場を用いた場合、周期的に位相が反転し、磁気島成長抑制に寄与している事が明らかになった。これは、カピッツァの倒立振子のように共鳴する回転磁場によって微小な振動が励起され、力学的な不安定な位相反転の状態を維持している事を意味している。今後は、今回考えなかった壁やプラズマ形状などが安定化効果に対して及ぼす影響を評価し実験への適用を目指し研究を進める予定である。

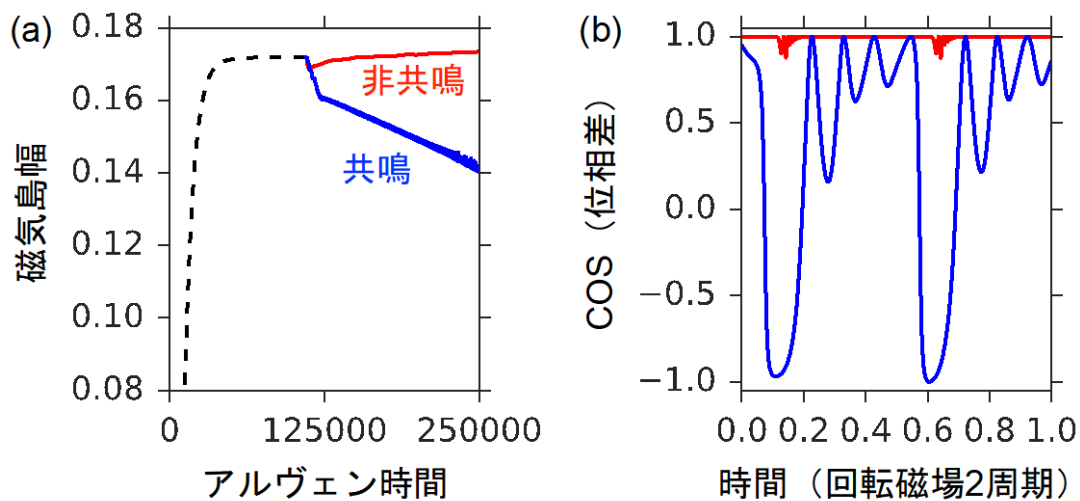


図 (a)磁気島幅と(b)外部磁場⇄磁気島間の位相差の時間発展。磁気島に共鳴するような回転磁場を与える事で、外部磁場⇄磁気島間の位相差が繰り返し反転する事で (図(b))、磁気島幅が連続的に減少・安定化すること (図(a)) が明らかになった。

(3) 今後の利用予定:

過去データの解析のみ、必要があれば追計算を行う。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

- 1) 振動する共鳴磁場摂動による磁気島成長の抑制, 井上 静雄, MHD 研究会, 岐阜, 2018.12 (Poster)
- 2) 外部共鳴磁場摂動による磁気島振動の能動制御とその磁気島成長に対する安定化効果, 井上 静雄, 第 35 回プラズマ核融合学会年会, 大阪, 2018.12 (Poster)

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:

核融合炉心プラズマの性能はプラズマの密度に大きく左右されるため、密度分布の正確な予測が不可欠である。密度分布は粒子輸送を駆動する複数の誘起機構から決まるが、各誘起機構に由来する粒子束を定量的に評価し、核融合炉の性能予測等に用いられる統合型輸送コードに組み込むことができるモデルは存在しない。本研究ではジャイロ運動論コードを用いて JT-60U 実験を対象とした粒子輸送解析を行い、各誘起機構の粒子輸送に対する寄与を明らかにする。さらに、その結果をデータベース化し、ニューラルネットワークによる機械学習を行うことで、少ない計算資源で、粒子輸送の物理機構を捉えた粒子束を予測するモデルを開発する。

(2) 利用内容・結果:

乱流粒子輸送解析を行うにあたり、乱流粒子束を準線形理論で表現できることを仮定し、電子の規格化乱流粒子束 $\bar{\Gamma}_e$ を次のように表す: $\bar{\Gamma}_e = \bar{D}(R/L_{n_e} + C_T R/L_{T_e} + C_P)$ 。ここで、 \bar{D} は規格化された粒子拡散係数である。 R/L_{n_e} と R/L_{T_e} は電子の規格化密度・温度勾配であり、実験計測値から与えられる。右辺の括弧内の第一項は拡散、第二・第三項はピンチにそれぞれ対応しており、 C_T と C_P は拡散を基準としたピンチの大きさと向きを示す係数となっている。本研究では、 C_T と C_P をジャイロ運動論コード GKW の線形計算から求め、乱流粒子輸送過程と分布形成の関係を調べた。GKW の計算では、三粒子種(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考慮している。 C_T と C_P は、 R/L_{n_e} と R/L_{T_e} の変化に対する $\bar{\Gamma}_e$ の依存性から算出され、 R/L_{n_e} と R/L_{T_e} の値を変えた三ケースの計算が必要になる。一ケースに 64 コアで 20 分程度要するため、一つの半径方向位置に対して概ね 64 コア時間を利用する。実験データを対象とする場合は、粒子供給量から見積もられる $\bar{\Gamma}_e$ を用いて、残る係数である \bar{D} を無視できる程度の計算資源で求められる。

上記の手法を JT-60U の二つの H モード放電 A と B に適用した。A と B は中性粒子ビームによる粒子供給量が近いため、 $\bar{\Gamma}_e$ も同等の値であるが、A の方が急な電子密度勾配を持ち、尖頭化した密度分布を有する。これら A と B に対して、拡散およびピンチ項の半径方向分布を

求めた結果を図 1 に示す。密度勾配で駆動される拡散は A の方で外向きに大きい粒子束を生成

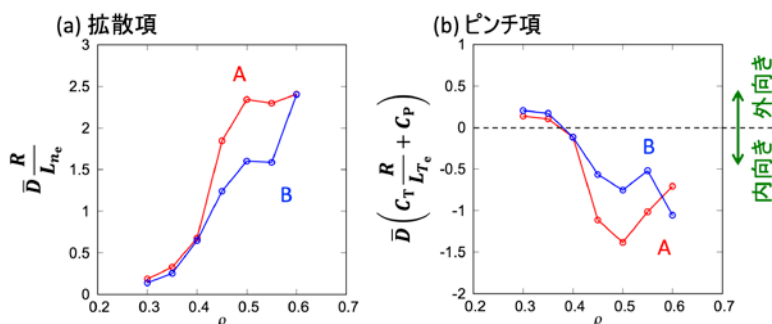


図 1 JT-60U の H モード放電 A と B の(a)拡散と(b)ピンチに起因する規格化乱流粒子束の半径方向分布。

するが(図 1(a))、ピンチに起因する内向きに大きな粒子束が拡散を相殺していることがわかった(図 1(b))。この A の内向きのピンチが、B と同程度の粒子供給量での急な密度勾配の要因であると考えられる。

次に、上記の粒子輸送解析の結果を密度分布の予測計算に反映させるため、解析結果をデータベース化し、ニューラルネットワークによる機械学習を行うことで、粒子輸送モデルを構築した。JT-60U の H モード放電を A と B 以外にも用意し、これらの実験値を基に、2000 点程度の半径方向位置に対して GKW の線形計算を実施し、拡散・ピンチ項を求めた。学習に用いるデータベースは、各半径方向位置の物理量と、拡散・ピンチ項を求めるための係数である C_T 、 C_P 、 \bar{D} の関係を示すものとなっており、この関係を再現するニューラルネットワークを構築した。図 2 に示すように、三つの係数を再現するニューラルネットワークが構築できている。また、得られたニューラルネットワークを用いると、半径方向位置あたり 0.001 秒程度で拡散・ピンチ項に分けながら $\bar{\Gamma}_e$ を予測することができる。これは従来の輸送モデルと比べると $10^3 \sim 4$ 倍程度の速度である。このニューラルネットワークを用いた輸送モデルを統合型輸送コード TOPICS に組み込み、密度分布の予測計算に用いたところ、上述の A と B の放電で観測されていた密度勾配の違いを、拡散とピンチ項の差を示しながら再現できた。

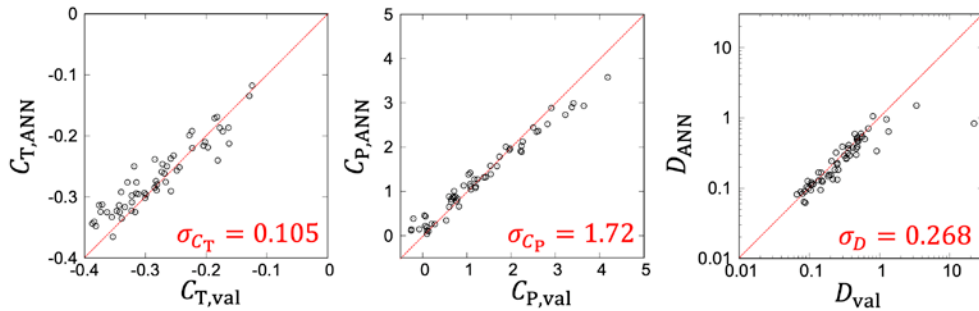


図2 学習に用いていない検証用データ(横軸)とニューラルネットワークが予測する値(縦軸)の比較。図中の σ は最小二乗法誤差を示す。

(3) 今後の利用予定:

ニューラルネットワークを用いた輸送モデルの精度の向上や、モデルの適用範囲の拡張のため、より多くのデータセットに対して GKW の線形計算を実施する。また、粒子輸送の更なる理解のため、非線形計算による実験解析を行う。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Density profile prediction using the neural-network-based particle transport model, 成田 絵美, 本多 充, 仲田 資季, 吉田 麻衣子, 竹永 秀信, 林 伸彦, 20th ITPA Transport and Confinement Topical Group Meeting, Daejeon, South Korea, 2018.4 (Oral)

- 2) Dependence of density peaking on particle pinch in JT-60U H-mode plasmas, 成田 絵美, 本多 充, 仲田 資季, 吉田 麻衣子, 林 伸彦, 竹永 秀信, 21th ITPA Transport and Confinement Topical Group Meeting, St. Paul-lez-Durance, France, 2018.9 (Oral)
- 3) Gyrokinetic Modeling of Turbulent Particle Fluxes towards Efficient Predictions of Density Profiles, 成田 絵美, 本多 充, 仲田 資季, 吉田 麻衣子, 竹永 秀信, 林 伸彦, IAEA FEC 2018, Gandhinagar, Gujarat, India, 2018.1, (Poster)
- 4) 粒子供給を伴うコアプラズマにおける粒子拡散とピンチの密度分布形成に対する影響, 成田 絵美, 本多 充, 仲田 資季, 吉田 麻衣子, 林 伸彦, 竹永 秀信, 第 35 回プラズマ・核融合学会年会, 大阪, 2018.12 (Poster)
- 5) 核融合プラズマにおける高速な分布予測のための機械学習を用いた輸送モデリング, 成田 絵美, 本多 充, 仲田 資季, 吉田 麻衣子, 林 伸彦, 竹永 秀信, 第 35 回プラズマ・核融合学会年会, 大阪, 2018.12 (Oral)
- 6) 拡散とピンチ過程がコアプラズマの密度・温度分布形成に与える影響のジャイロ運動論解析, 成田 絵美, 本多 充, 仲田 資季, 吉田 麻衣子, 林 伸彦, 竹永 秀信, 日本物理学会第 74 回年次大会, 福岡, 2019.3 (Oral)

学術論文

- 7) Neural-network-based semi-empirical turbulent particle transport modelling founded on gyrokinetic analyses of JT-60U plasmas, E. Narita , M. Honda, M. Nakata, M. Yoshida, N. Hayashi, H. Takenaga, Nuclear Fusion, vol. 59, no. 10, 106018, 2019.8

大域的ジャイロ運動論モデルによる多種粒子系プラズマ輸送解析

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。昨年度の課題では磁束座標版 GT5D を開発するとともに多種イオン系モデルへの拡張を完了し、イオン温度勾配駆動 (ITG) 乱流の線形・非線形ベンチマークや多種イオン系新古典輸送ベンチマークにおける基本的な精度検証を完了した。今年度は磁束座標版 GT5D において運動論的電子モデルの拡張を行い、対流セルの解析を可能とするとともに、多種イオン系モデルを応用したタングステンの新古典輸送解析に取り組んだ。

(2) 利用内容・結果:

GT5D のような大域的 full-f モデルでは電磁的モデルが確立しておらず、通常、静電的モデルが用いられる。静電的モデルで運動論的電子を計算すると磁力線方向の通過電子応答 ($k_{\parallel} \neq 0$, k_{\parallel} : 磁力線方向波数) による高周波ノイズが運動論的アルフベン波の静電的極限として現れることが、計算コスト、計算精度の観点から問題となる。これを解決するために、GT5D ではハイブリッド電子モデル[Idomura,JCP2016]を開発した。このモデルでは、電場を決定するポアソン方程式を軸対称成分と $k_{\parallel} \neq 0$ となる非軸対称な乱流場に分離し、後者に断熱的通過電子応答を仮定する。前者には $k_{\parallel} = 0$ となる径電場 ($m=n=0$, m : ポロイダルモード数, n : トロイダルモード数) と $k_{\parallel} \neq 0$ となる対流セル ($m \neq 0$, $n=0$) が混在するが、従来のモデルでは対流セルを無視して径電場のみを完全運動論的電子モデルで計算することで、高周波ノイズの回避と両極性条件を両立していた。しかしながら、対流セルを無視すると測地線音響モード (GAM) と呼ばれる径電場振動に対する電子応答が無視されるため、GAM の周波数と減衰率が修正される。断熱的電子モデルの ITG 乱流計算結果からこの修正の影響は乱流輸送には影響しないことが上記論文で示されているが、GAM はしばしば実験的に観測されることから、GAM 周波数の実験との比較を行う際には周波数が修正される点が問題となる。また、最近の不純物輸送解析[Donnel,NF2018]では対流セルが高 Z 不純物の輸送に影響するという報告もあり、モデルの改良が必要となっていた。これに対して、改良型ハイブリッド電子モデル[Lanti,CPC2019]が提案された。このモデルでは対流セルに対しても乱流場と同様の断熱的電子モデルを仮定することで、GAM の正しい周波数、減衰率を再現するとともに、対流セルの取り扱いも可能とした。このモデルでは電子分布関数を磁気面平均して磁気面平均成分とそれ以外で電子モデルを切り替える計算を行うが、従来の円筒座標版 GT5D では R-Z 平面上での磁気面平均処理の計算コストと計算精度が問題となっていた。これに対して、磁束座標版 GT5D ではこれらの問題が解決し、拡張型ハイブリッド電子モデルを従来のハイブリッド電子モデルと同程度のコストで計算する

ことが可能となった。GAM のベンチマーク結果から開発モデルの有効性が確認できた。(図 1)

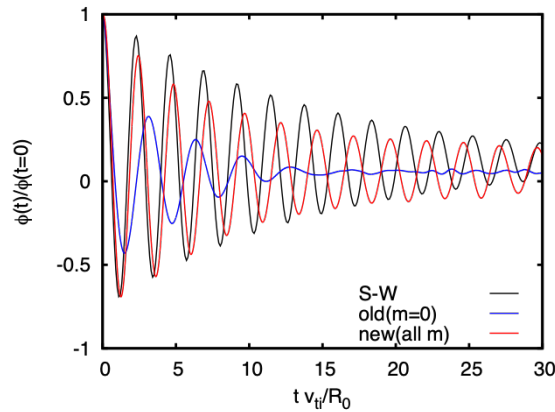


図 1：帯状流減衰テストにおける測地線音響モードと残留帯状流の比較。理論解（S-W）に比べて従来のハイブリッド電子モデル（old）は低い周波数、高い減衰率を示すが、改良型ハイブリッド電子モデル（new）は良い一致を示す。ただし、残留帯状流レベルはどちらも理論解に漸近する。

昨年度に開発した多種イオン系モデルを用いてタングステンの新古典輸送を解析した。タングステン（ $Z=74$ 、 $A=184$ ）の炉心への蓄積は、燃料の希釈による燃料純度の低下、あるいは、エネルギーの放射損失による炉心温度低下につながり、炉心出力への影響が大きいことから、タングステン不純物の挙動を理解することは ITER の最重要課題となっている。しかしながら、タングステンのような高 Z 不純物は燃料粒子の重水素や三重水素に比べて質量が大きく熱速度が一桁程度異なることから、高 Z 不純物を含む多種イオン系のシミュレーションは速度空間のマルチスケール問題となる。このようなマルチスケール問題では、速度空間の解像度、および、クーロン衝突による速度空間の拡散過程の時間ステップ幅が厳しくなることから、昨年度に異種粒子衝突演算子の陰解法ソルバを開発した。この異種粒子衝突演算子のタングステンに対する計算精度を検証するために、タングステンの新古典輸送解析を実施し、衝突性輸送理論[Hirshman-Sigmar,NF1981]との比較を実施した。

今回の解析では DIII-D 装置の実験データを基準として設定された小型装置パラメータ（Cyclone Base Case）を採用し、3 種類のトレーサー不純物、ヘリウム（ $Z=2$ 、 $A=4$ ）、炭素（ $Z=6$ 、 $A=12$ ）、タングステン（典型的なプラズマ温度に対するコロナモデルによる電離状態の評価から $Z=40$ 、 $A=184$ としている）を含む重水素プラズマの解析を実施した。ここで、不純物イオンの電荷密度は電子密度の 10^{-4} 倍のいわゆるトレーサーレベルに設定し、影響が小さいトレーサー不純物間の異種粒子衝突演算子は無視した。

衝突性輸送理論において、原子番号 Z_s の不純物の粒子束 Γ_{Cs} の近似解は拡散係数 D_s と熱遮蔽係数 H_s を用いて以下のように表される。

$$\Gamma_{Cs} \sim n_s D_s \left[\frac{1}{L_{ns}} - Z_s \frac{1}{L_{nD}} - Z_s H_s \frac{1}{L_{tD}} \right]$$

ここで、 $L_{ns} = -n_s / \nabla n_s$ 、 $L_{ts} = -T_s / \nabla T_s$ は粒子種 s の密度勾配パラメータ、温度勾配パラメータを示す。また、熱遮蔽係数は粒子衝突周波数が十分に大きい極限で $H_s = -1/2$ という解析解を持

つ。上式から、トレーサ不純物の輸送は自身の密度勾配による拡散項（第 1 項）と主プラズマの密度勾配による内向き輸送（第 2 項）、および、主プラズマの温度勾配による外向き輸送（第 3 項）の競合で決まり、特に、タングステンのような高 Z 不純物の場合には第 2 項と第 3 項が与える非拡散的輸送が支配的となることがわかる。図 2 左図に示す不純物密度勾配に対する輸送特性を検証した結果では、低 Z 不純物のヘリウムでは、第 1 項の依存性が強く出るのに対し、高 Z 不純物のタングステンでは不純物密度勾配に対する依存性が弱いことがわかる。一方、図 2 右図に示す主プラズマ温度勾配に対する輸送特性を検証した結果では、熱遮蔽効果によって $R/L_{tD}=0$ （一様温度）の場合と比べて $R/L_{tD}=1$ の場合には内向き輸送が大きく低減することがわかる。この解析では、どのケースにおいても GT5D と衝突性輸送理論の解析結果が定量的に一致することを確認でき、多種イオン系の複雑な相互作用に起因する非拡散的な衝突性輸送特性を定量的に捉えることに成功した。

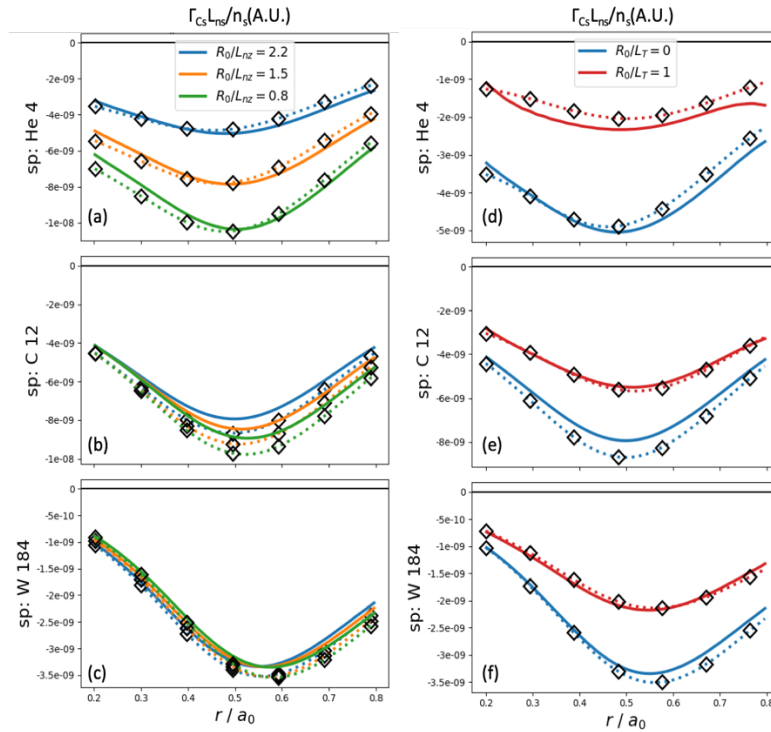


図 2 : Cyclone Base Case パラメータの重水素プラズマにおける 3 種類のトレーサ不純物 ((a),(d) Helium, (b),(e) Carbon, (c),(f) Tungsten, $q_s n_s / e n_e = 10^{-4}$) の衝突性粒子輸送フラックスのプラズマ半径方向分布。(a)-(c)は不純物密度勾配パラメータ R/L_{ns} 依存性 ($R/L_{nD}=2.2$, $R/L_{tD}=R/L_{ts}=0$)、(d)-(f)は重水素温度勾配パラメータ R/L_{tD} 依存性 ($R/L_{nD}=R/L_{ns}=2.2$, $R/L_{ts}=0$) を示す。実線は GT5D の計算結果、破線は衝突性輸送理論の予測を示す。

(3) 今後の利用予定:

今後、開発コードを用いた JT-60U/SA 配位における解析精度の検証をさらに進め、多種イオン系プラズマ輸送解析における乱流輸送と新古典輸送の相互作用、対流セルの影響、あるいは、水素同位体効果等のシミュレーション研究に取り組む。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Enhancement of neoclassical impurity transport by a geodesic compression effect in full-f gyrokinetic simulations, Y. Idomura (JAEA), ITPA 20th Transport and Confinement Topical Group Meeting , Daejeon, Korea, 2018.4 (Oral)
- 2) Computational Challenges Towards Exascale Fusion Plasma Turbulence Simulations, Y. Idomura (JAEA), 13th World Congress in Computational Mechanics, New York, USA, 2018.7 (Oral)
- 3) Status of GT5D, Y. Idomura (JAEA), 4th US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing, Princeton, USA, 2018.7 (Oral)
- 4) Development of GT5D for stellarator configurations, S. Matsuoka (NIFS), Y. Idomura (JAEA), S. Satake (NIFS), M. Honda (QST), Y. Suzuki (NIFS), 4th US-Japan Joint Institute for Fusion Theory Workshop on innovations and co-designs of fusion simulations towards extreme scale computing, Princeton, USA, 2018.7 (Oral)
- 5) Numerical study of impurity transport using the code GT5D, K. Obrejan, Y. Idomura (JAEA), M. Honda (QST), プラズマシミュレーションシンポジウム 2018, 岐阜, 日本, 2018.9 (Oral)
- 6) Development of GT5D for 2D/3D experimental configurations, S. Matsuoka (NIFS), Y. Idomura (JAEA), S. Satake (NIFS), M. Honda (QST), Y. Suzuki (NIFS), Kinetic Theory Working Group Meeting 2018, Madrid, Spain, 2018.9 (Oral)
- 7) Introduction of multi-species collision operator in GT5D and its application to heavy impurity transport, K. Obrejan, Y. Idomura (JAEA), M. Honda (QST), Numerical Methods for the Kinetic Equations of Plasma Physics (Numkin2018) workshop, Garching, Germany, 2018.10 (Oral)
- 8) Global full-f kinetic simulation of neoclassical transport in stellarator/heliotron plasmas, S. Matsuoka (NIFS), Y. Idomura (JAEA), S. Satake (NIFS), 2nd Asia Pacific Conference on Plasma Physics, Kanazawa, Japan, 2018.11 (Oral)
- 9) Numerical study of the role of higher order flows in neoclassical transport of high-Z impurities, K. Obrejan, Y. Idomura (JAEA), M. Honda (QST) , 閉じ込め・輸送研究会, 岐阜, 日本, 2018.12 (Oral)
- 10) Development of the global full-f gyrokinetic simulation for stellarator/heliotron, S. Matsuoka (NIFS), Y. Idomura (JAEA), S. Satake (NIFS), Workshop on Configuration Optimization of Stellarator/Heliotron, Kyoto, Japan, 2018.12 (Oral)
- 11) Communication avoiding multigrid preconditioned conjugate gradient method for extreme scale multiphase CFD simulations, S. Yamada, N. Onodera, T. Ina, S. Yamashita, Y. Idomura (JAEA), T. Imamura (Riken), 1st R-CCS International Symposium, Kobe, Japan, 2019.2 (Oral)

- 12) Numerical study of the influence of higher order flows in neoclassical transport of high-Z impurities, K. Obrejan, Y. Idomura (JAEA), M. Honda (QST), 24th US-EU Transport Task Force Meeting, Austin, USA, 2019.3 (Poster)
- 13) Numerical study of neoclassical impurity transport using the code GT5D, K. Obrejan, Y. Idomura (JAEA), M. Honda (QST), 22nd ITPA Transport and Confinement Topical Group Meeting, Austin, USA, 2019.3 (Oral)
- 14) ポスト京に向けた核融合プラズマ乱流コードのエクサスケール計算技術開発, 井戸村 泰宏(JAEA), 第 24 回 NEXT 研究会, 青森, 日本, 2018.8 (Oral)
- 15) Accelerating and modernizing the delta-f gyrokinetic code on GPUs, 朝比 祐一, 前山 伸也, 渡邊 智彦, 井戸村 泰宏, 第 24 回 NEXT 研究会, 青森, 日本, 2018.8 (Oral)
- 16) イオン温度勾配駆動乱流における不純物輸送解析, 井戸村 泰宏, K. Obrejan (JAEA), 第 35 回プラズマ・核融合学会年会, 大阪, 日本, 2018.12 (Poster)
- 17) ポロイダル対称性破れの輸送への影響, 朝比 祐一, V. Grandgirard, 井戸村 泰宏, X. Garbet, G. Latu, Y. Sarazin, G. Dif-Pradalier, P. Donnel, 矢木 雅敏, 第 35 回プラズマ核融合学会, 大阪, 日本, 2018.12 (Oral)
- 18) ジャイロ運動論的シミュレーションによるポロイダル対称性破れの輸送への影響評価, 朝比 祐一, V. Grandgirard, 井戸村 泰宏, X. Garbet, G. Latu, Y. Sarazin, G. Dif-Pradalier, P. Donnel, 矢木 雅敏, H30 年度閉じ込め・輸送研究会, 岐阜, 日本, 2018.12 (Oral)
- 19) 実験解析に向けた準局所的 full-f ジャイロ運動論シミュレーションの開発, 井戸村 泰宏, K. Obrejan (JAEA), 朝比 祐一(QST), 松岡 清吉(NIFS), 日本物理学会第 74 回年次大会, 福岡, 日本, 2019.3 (Oral)
- 20) 運動論的電子応答に伴うポロイダル対称性破れの輸送への影響評価, 朝比 祐一, 矢木 雅敏(QST), 井戸村 泰宏(JAEA), 日本物理学会第 74 回年次大会, 福岡, 日本, 2019.3 (Oral)

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、朝倉 伸幸

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:

核融合原型炉の設計において、ダイバータにおける非接触プラズマの挙動を予測し、ダイバータターゲット（ダイバータ板）への熱負荷を正確に評価することは最も重要な課題である。そのため、SOL ダイバータ領域のプラズマ・シミュレーションの開発と研究を進めているが、本応募課題では、現在設計している原型炉のダイバータ形状において、ダイバータ熱負荷を工学的に対応可能な目標値以下に低減させることを目的に、統合 SOL 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。

(2) 利用内容・結果:

成果概要

本研究は、原型炉における SOL ダイバータプラズマからの放射損失特性と熱負荷の評価を通して、工学的に対応可能なプラズマ運転条件領域を明らかにすることを目的とする。原型炉設計合同特別チームの現在の基本設計案 JA DEMO2014 を対象に、統合 SOL 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った。核融合出力や SOL 放射割合等のパラメータスキャン計算の結果、基本設計出力(1.5GW)より高い核融合出力 1.75GW のプラズマ運転や放射割合を 80%から 70%程度に低減した運転の可能性が示された。

成果詳細

日本が提案する原型炉 JA DEMO2014（主半径 8.5m 級）[1] では ITER に 3 倍する核融合出力 1.5GW の主プラズマから周辺の SOL 領域に大きな熱エネルギー（約 200-300MW）が排出される。本シミュレーションでは主プラズマ排出エネルギーを境界条件として定め、非接触プラズマの生成によってダイバータターゲットでの熱負荷が低下する収束解（プラズマ、中性粒子および不純物の 2 次元分布）を計算する。シミュレーションでは、プラズマの粒子・熱輸送過程、希ガス不純物入射による SOL 及びダイバータ領域におけるプラズマ放射冷却、低温高密度のダイバータ領域での原子分子過程が、熱負荷ピークの低減のために重要な役割を果たす。

これまでの検討では、ダイバータターゲットへの熱流を、工学的に除熱可能な最大 10MW/m^2 以下に低減することを重点目標として、ダイバータ基本形状や放射損失割合値等の基本設計案を提案した。計算には QST で開発を進めてきた SOL ダイバータプラズマ統合コード SONIC を用いた。

次のステップとして、比較的低密度の SOL プラズマにおける運転、核融合出力の増加した運

転、あるいは十分に大きな放射損失が許容されない要請などにどの程度対応可能かを評価するため、運転条件の裕度を評価する必要がある。

本研究では主プラズマから排出される熱流、粒子量やプラズマ輸送係数及び放射損失量などを系統的に変動させ、それぞれのケースで SOL ダイバータプラズマの収束解を求める。今回想定した 3 シナリオを表 1 に示す。基本設計案であるシナリオ 1 に加えて、同水準の放射割合を保持しつつさらに高出力の運転可能性を探るシナリオ 2、不純物放射効率が低下した場合を探るシナリオ 3 である。

それぞれのシナリオにおいて SOL 上流電子密度 $n_{e^{sep}}$ をスキャンパラメータとし、排出パワーに対する放射損失パワーの割合が一定となるように不純物入射量を調整している。ITER よりも $n_{e^{sep}}$ が比較的低い原型炉 ($2\text{--}3 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$ を想定) は、ダイバータプラズマのデタッチメント形成に不利であるため、特に低密度の限界付近でのダイバータ特性を評価した。計算の結果得られた、SOL 上流電子密度とダイバータターゲットにおける熱負荷ピーク値を図 2 に示す。基本シナリオと比較してシナリオ 2 (f_{rad} は 80% のまま) の結果は、排出パワーが増加しても、原型炉の想定 SOL 密度 ($n_{e^{sep}} > 2.0 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$) においてダイバータ熱負荷を 10 MW/m^2 以下に抑えうることを示す。この運転領域は核燃焼維持を見通せる不純物混入量 $n_{Ar}/n_e < 1\%$ というコアプラズマの要請とも整合可能と思われる。一方、放射割合が低下したシナリオ 3 の結果は、SOL 密度を増加した運転が必要 ($n_{e^{sep}} > 2.3 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$) であることを示唆する。

今年度の計算によって、ダイバータ熱負荷やコアプラズマ整合性の観点から、Ar 不純物による放射割合 80% の運転シナリオ (#1, #2) では、熱制御に重要なパラメータが若干厳しくなっても (#2)、SOL 上流電子密度 $n_{e^{sep}} > 2.0 \times 10^{19} \text{ m}^{-3}$ という条件において、ダイバータ定常運転が行える可能性が示された。

表 1：各シナリオの内訳

シナリオ	Psep コアから SOL へ排出される プラズマエネルギー (Pfus 核融合出力相当値)	Prad SOL ダイバータ領域の 不純物放射エネルギー	Frad 放射割合 Prad/Psep	
#1	250MW (Pfus 1.5GW)	200MW	80%	基本設計シナリオ
#2	300MW (Pfus 1.75GW)	240MW	80%	高出力、 放射割合は基本設計 と同水準
#3	250MW (Pfus 1.5GW)	175MW	70%	基本設計出力、 低放射水準

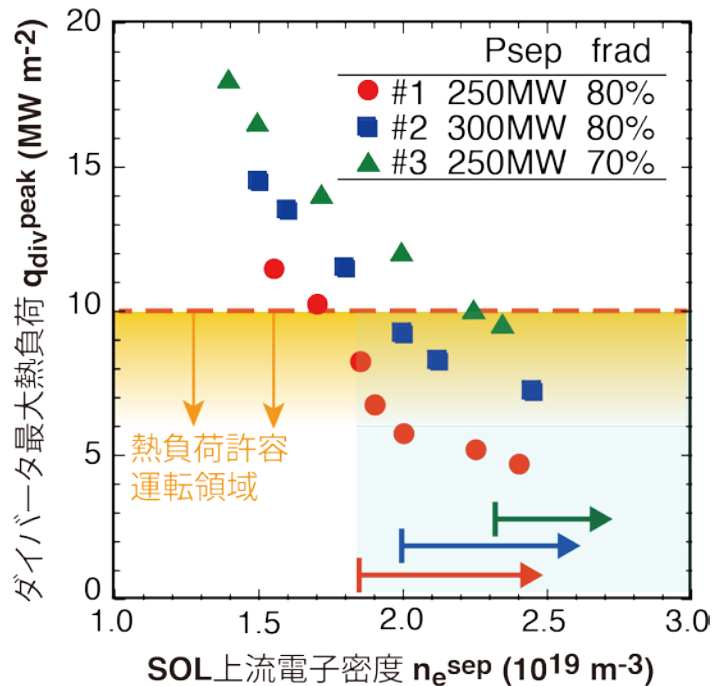


図2 シナリオ#1-#3における SOL 上流電子密度とダイバータ最大熱負荷の関係

[1] N. Asakura, K. Hoshino, S. Suzuki et al., Nucl. Fusion **57** (2017) 126050 (12pp).

(3) 今後の利用予定:

今年度の成果をベースに、原型炉プラズマの主要な制御パラメータの変化に対する SOL およびダイバータプラズマの特性を評価することにより、ダイバータの運転領域を明らかにする予定である。来年度は上記の他に、磁場横断方向の粒子拡散係数と熱拡散係数や不純物種の検討を行う。これら係数値は SOL プラズマ分布形成に大きな影響を持つが、ITER や原型炉条件における値として異なる予測が出されており、理論上も不確定な点が残っている。また、燃料（水素分子）やヘリウム灰（ヘリウム分子）の排気特性を評価するためダイバータ形状の修正も開始したい。これらのシミュレーション検討を進める必要があるため、来年度も ICE X スパコン計算資源を希望したい。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) 原型炉不純物輸送シミュレーションの精度改善を実現する拡張熱力モデル開発, 本間 裕貴, 星野 一生, 徳永 晋介, 朝倉 伸幸, 坂本 宜照, 飛田 健次, 原型炉設計合同特別チーム, 第 35 回プラズマ・核融合学会年会, 大阪, 2018.12 (Poster)
- 2) 原型炉のための SONIC シミュレーションによるダイバータ運転条件の検討, 朝倉伸幸, 星野 一生, 本間 裕貴, 伊藤 和貴, 徳永 晋介, 坂本 宜照, 飛田 健次, 原型炉設計合同特別チーム, 第 35 回プラズマ・核融合学会年会, 大阪, 2018.12 (Oral)

- 3) Japan's efforts to develop DEMO concept during the past decade, K. Tobita, R. Hiwatari, Y. Sakamoto, Y. Someya, N. Asakura, H. Utoh, Y. Miyoshi, Y. Homma, , 23rd Topical Meeting on the Technology of Fusion Energy (TOFE2018), Orlando, Florida, USA, 2018.11 (Oral)
- 4) Simulation study of the divertor operation for a DEMO fusion reactor, N. Asakura, K. Hoshino, Y. Homma, S. Tokunaga, 23rd International Conference on Plasma Surface Interactions in Controlled Fusion Devices (PSI-23) , Princeton, USA, 2018.7 (Poster)
- 5) 衝突度依存性を含む拡張熱力モデル開発と原型炉 SOL プラズマにおける不純物輸送研究 , 本間 裕貴, 星野 一生, 徳永 晋介, 朝倉 伸幸, 坂本 宜照, 飛田 健次, 原型炉設計合同特別チーム, 第 12 回核融合エネルギー連合講演会, 滋賀, 2018.6, (Poster)

学術論文

- 6) Plasma exhaust and divertor studies in Japan and Europe Broader Approach, DEMO Design Activity, N. Asakura, K. Hoshino, H. Utoh, Y. Someya, S. Suzuki, C. Bachmann, H. Reimerdes, R. Wenninger, H. Kudo, S. Tokunaga, Y. Homma, Y. Sakamoto, R. Hiwatari, K. Tobita, J. You, G. Federici, K. Ezato, Y. Seki, Y. Ueda, N. Ohno. , Fusion Engineering and Design, vol. 136, 1214-1220, 2018.11
- 7) Overview of DEMO conceptual design activity in Japan, K. Tobita, R. Hiwatari, H. Utoh, Y. Miyoshi, N. Asakura, Y. Sakamoto, Y. Someya, Y. Homma, M. Nakamura, K. Hoshino, H. Tanigawa, M. Nakamichi, S. Tokunaga, H. Kudo, A. Nishimura and the Joint Special Design Team for Fusion DEMO, Fusion Engineering and Design, vol.136, 1024-1031, 2018.11

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 プラズマ理論シミュレーショングループ

(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、それを基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。

(2) 利用内容・結果:

これまでのシミュレーション研究において、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を印加し、内向きの粒子輸送が発生することを観測している。さらに、局所的デルタエフジャイロ運動論コード dFEFI を用いて、負の密度勾配長を与え、内向きのフラックスが生成されることを追試している。平成 30 年度はこれらのシミュレーション結果を解釈するための解析を進めた。密度の断熱応答からのずれを δ とすると、準線形粒子フラックスは $\Gamma = -nc_s \sum_k \delta(k_y \rho_s) |e\phi/T_e|^2$ と与えられる。ここで c_s は音波、 ρ_s は電子温度で測ったラーマ半径である。仮に $\delta > 0$ なら、 $\Gamma < 0$ となるので、内向きのフラックスが生成されることになる。解析の結果、イオン温度勾配駆動型ドリフト波(ITG)と反転密度勾配により駆動されるドリフト波(DW)の二つが内向きのフラックスを作り出す候補であることが明らかになった。いずれの不安定性が卓越するかはパラメータに依存するが、反転密度勾配の場合は DW が卓越する。 $\omega \sim \omega_*$ が成り立つリミットでは DW の成長率は $\gamma \approx -\omega_* \omega_{*T} / \omega_\chi$ と評価される。

こ こ で $\omega_\chi \equiv \frac{k_\parallel^2 v_e^2}{\nu_e} > 0, \omega_{*T} \equiv \eta_e \omega_* > 0, \delta \approx$

$\frac{2.64 \omega_{*T}}{\omega_\chi} > 0$ である。図 1 に dFEFI を用いた

シミュレーションにおいて観測された不安定性の周波数解析の結果を示す。長波長領域において、周波数は負の値を示しているが、これは電子反磁性ドリフトの方向に一致する

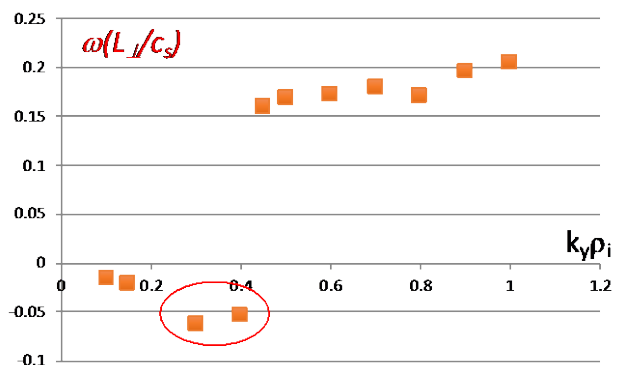


図 1：モード周波数の波数依存性（dFEFI コードによるシミュレーションデータの解析結果）。

(密度勾配長が負のため符号が反転)。今回の解析で導出した分散式から評価した周波数の径量子数依存性(n)を図2に示す。ここで□印はDWの周波数に対応する。最大成長率に対応する周波数を赤丸で囲んである($n=1$)。周波数の絶対値はシミュレーション結果と解析モデルとは、20~30%程度異なるが、これは解析で用いたモデルが単純化されていること、さらに、解析評価のためにオーダーリングによりいくつかの項を無視していることに起因すると考えられる。図1と図2からの考察により、シミュレーションにおいて内向きの粒子フラックスを担っているのは反転密度勾配により駆動されたドリフト波の可能性が高い。これを確認するためには、解析モデルに捕捉粒子の応答を取り入れ、その効果をあわせて解析する必要がある。さらに、シミュレーションにおいては衝突周波数依存性を調べ、粒子フラックスに対する衝突周波数依存性を明らかにする必要がある。

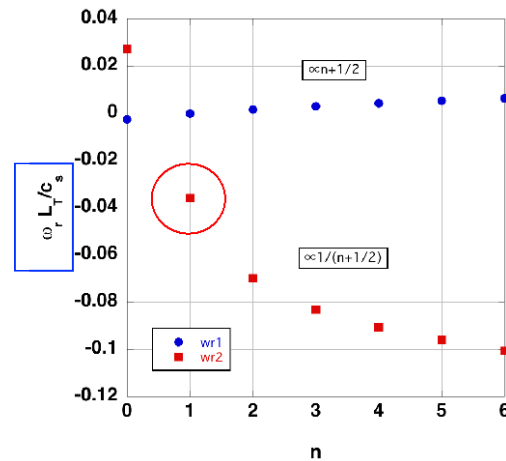


図2：モード周波数の径量子数(n)依存性（解析モデルによる評価）。最大成長率は $n=1$ で与えられる。

(3) 今後の利用予定:

解析モデルの高度化を進め、内向きの粒子フラックスを生成する機構を明らかにするとともに、シミュレーション結果を基に輸送モデルを構築し、統合輸送コードに組み込んで、原型炉における燃料供給のシナリオ構築へ展開する。特に、シミュレーションに関しては衝突周波数依存性について着目し、内向きのフラックスの絶対値に対する依存性を明らかにしていく。さらに、プラズマのトロイダル回転が存在する場合に、内向きのフラックスがどのように影響を受けるかもあわせて検討したい。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Revisit ion-mixing mode, 矢木 雅敏, 三木 一弘, 宮戸 直亮, Bruce Scott, 16th Burning Plasma Simulation Initiative (BPSI) meeting, 福岡, 2018.11 (Oral)
- 2) Revisit ion-mixing mode, 矢木 雅敏, 三木 一弘, 宮戸 直亮, Bruce Scott, 第35回プラズマ・核融合学会年会, 大阪, 2018.12 (Poster)
- 3) トカマク周辺部における反転密度勾配駆動型ドリフト波による粒子輸送のシミュレーション研究, 矢木 雅敏, 三木 一弘, 宮戸 直亮, Bruce SCOTT, 第12回核融合エネルギー連合講演会, 滋賀, 2018.6 (Poster)
- 4) Effect of safety factor on the nonlocal transport in tokamak plasmas, 矢木 雅敏, N. Miyato, A. Matsuyama, T. Takizuka, N. Kasuya, 19th International Congress on Plasma Physics (ICPP2018), Vancouver, Canada, 2018.6 (Poster)

- 5) NEXT (Numerical EXperiment Tokamak) project and future prospect of burning plasma simulation, 矢木 雅敏, 2nd Asia-Pacific Conference on Plasma Physics(AAPPS-DPP2018), 石川, 2018.11 (Oral)
- 6) 核融合原型炉に向けたシミュレーション研究の進展, 矢木 雅敏, 第 24 回 NEXT 研究会, 青森, 2018.8 (Oral)

Predictive first-principle simulation of energetic-particle-driven modes in JT-60SA 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:

The final goal of this project is to determine whether so-called Abrupt Large-amplitude Events (ALE), which have previously been seen in JT-60U, may also be expected in future JT-60SA experiments. This is a unique opportunity to test the predictive capability of the simulations in advance of the actual experiments.

While exploring the ALE trigger mechanism, we have made a new discovery: our simulations indicate that the magnetic topology of the JT-60U plasma is locally broken by some unknown mechanism during the strong wave-particle interactions that occur during an ALE [A. Bierwage et al., *Nature Communications* **9** (2018) 3282]. This surprising result indicates that energetic-particle-driven Alfvén waves may cause magnetic reconnection, which has (to our knowledge) not been observed nor considered in fusion plasma research, and only speculated about in magnetospheric space plasma research. If confirmed, our finding may have far-reaching implications for applied and basic plasma physics research. Therefore, we have changed the research strategy of this project. Our new near-term goal is to **verify the newly discovered Alfvénic reconnection phenomenon and clarify the mechanisms**, taking into account both numerical and physical possibilities. The results obtained will also be useful also for understanding ALE physics, so the final goal of the project remains the same.

(2) 利用内容・結果:

We have commenced a sensitivity study with respect to numerical and physical simulation parameters. In particular, we vary:

- Spatial resolution (higher resolution is needed to explore regimes with smaller dissipation coefficients),
- Number of simulation particles (controls noise level of particle-in-cell (PIC) method),
- Ratio of MHD time step to particle pushing time step (so-called “subcycling”, affecting temporal averaging of noise and wave-particle interactions at very short time scales),
- Dissipation coefficients (electrical resistivity, viscosity, thermal diffusivity).

Note that, due to limited computational resources, this work was performed in part on ICE-X and in part on the JFRS-1 supercomputer (QST, Rokkasho).

So far, ALEs along with the Alfvénic reconnection phenomenon were robustly reproduced with higher spatial resolution and without subcycling, which raises our confidence in the prior simulation result. It was found that ALEs tend to be triggered slightly earlier when PIC noise is larger, which is reasonable since the total fluctuation amplitude (consisting of signal and noise) is a key factor for the ALE (for instance, the wave amplitude determines the onset of phase space island overlap, which leads to avalanche-like transport).

Interesting results were also obtained from the resistivity scan. It was found that the ALE amplitude increased when the resistivity was decreased, so that the initial size of the magnetic islands tends to increase with decreasing resistivity – at least in the range of values considered (normalized resistivity η = inverse Lundquist number = 10^{-6} , 0.5×10^{-6} , 0.3×10^{-6}). Moreover, the threshold in the fast ion pressure at which an ALE can be triggered tends to decrease with decreasing resistivity as shown in Fig.1 below. This, however, does not affect the ALE interval (40-60ms) because the larger ALE amplitude also causes more transport at lower resistivity, so that it would still take about the same amount of time for the fast ion pressure to recover and trigger the next ALE. This means that our results remain consistent with experimental measurements, although the simulations may still be overestimating the confined fast ion pressure by 10% or so (which cannot be determined experimentally).

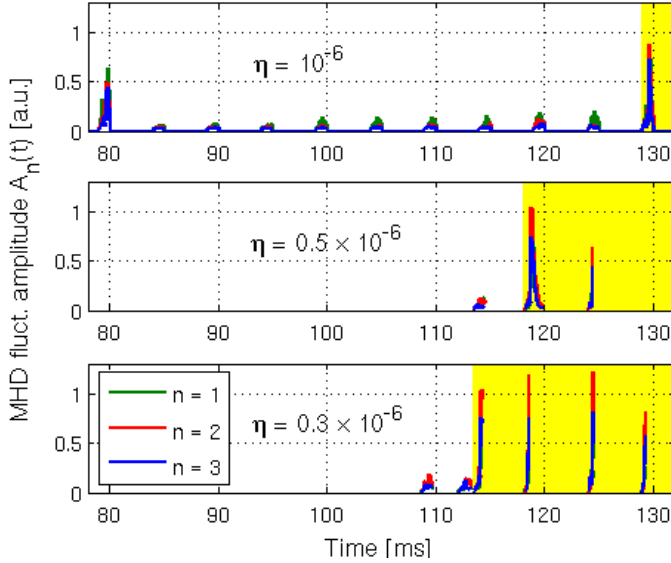


Fig.1: Temporal evolution of the magnetohydrodynamic (MHD) fluctuation energy contained in the toroidal Fourier harmonics $n = 1, 2, 3$ (green, red, blue) for three values of the normalized resistivity, $\eta = 10^{-6}$, 0.5×10^{-6} , 0.3×10^{-6} (top to bottom). The initial conditions for the simulations with reduced resistivity $\eta = 0.5 \times 10^{-6}$ (middle), 0.3×10^{-6} (bottom) were taken from the original long-time simulation performed with $\eta = 10^{-6}$ (top) [cf., A. Bierwage et al., *Nature Comm.* **9** (2018) 3282]. The yellow shaded region shows the times where fast-ion-driven instabilities develop into Abrupt Large-amplitude Events (ALE), which appear as large spikes.

We have begun to report the results at domestic and international conferences. Listed in a separate file are: 1 poster and 4 oral presentations given during fiscal year 2018.

(3) 今後の利用予定:

During fiscal year 2019, further sensitivity tests will be performed and we will try to resolve numerical problems encountered at the simulation boundary when low resistivity values ($\eta = 0.3 \times 10^{-6}$) are used.

We plan to publish the results in a peer-reviewed journal and report them at several domestic and international meetings, including an oral contribution to be given at the 16th IAEA Technical Meeting on Energetic Particles in Magnetic Confinement Systems - Theory of Plasma Instabilities, Shizuoka, Japan, Sep 3-6, 2019.

The positive outcome of the present sensitivity study justifies more in-depth physics studies with the goal of (1) clarifying the mechanisms how the large-amplitude waves break the magnetic topology, and (2) exploring the implications for magnetically confined fusion plasmas as well as space plasmas.

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) Magnetic topology change during large-amplitude Alfvénic oscillations driven by energetic beam ions in a tokamak, A. Bierwage, 12th HEDLA Conference, Kurashiki, Japan, 2018.5 (Poster)
- 2) Magnetic topology change during large-amplitude Alfvénic oscillations driven by energetic beam ions in a tokamak, A. Bierwage, 4th Kyoto U.-UNIST Workshop, Uji, Japan, 2018.5 (Oral)
- 3) Energetic-ion-driven instabilities and transport: Multi-time-scale simulations, validation, predictions and insights, A. Bierwage, 2018 Korean Physical Society (KPS) Fall Meeting, Pioneer Symposium 8: Data-based Plasma Science and Simulation for the Computer Aided Design, Chang-Won, South Korea, 2018.10 (Invited)
- 4) Simulation of abrupt massive migrations of energetic beam ions in a tokamak plasma, A. Bierwage, Kyoto Workshop on Nonlinear Wave Particle Interactions in Plasmas, Uji, Japan, 2018.11 (Oral)
- 5) Energetic-ion-driven instabilities and transport in fusion plasmas: Multi-time-scale simulations, validation, predictions and insights, A. Bierwage, Max Planck Princeton Center (MPPC) Workshop 2019, Tokyo, Japan, 2019.2 (Invited)

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

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:

磁場閉じ込め核融合炉が発電炉として経済的に成立するためには高いベータ値（炉心プラズマの圧力とコイルが作る磁気圧の比）のプラズマを安定に維持する制御技術の開発が不可欠である。ベータ値の限界は主に炉心プラズマの圧力およびその中を流れる電流に起因する不安定性（MHD 不安定性）に制限されているため、その特性を把握する上で、MHD 安定性理論及びそれに基づく数値計算コードが核融合炉心プラズマの性能向上や安定な運転領域の同定に重要な役割を果たしてきた。プラズマ理論シミュレーショングループにおいては MHD モデルに基づく線形安定性解析コード MINERVA が開発され、実験データから再構成したトカマクプラズマの 2 次元平衡解に対し、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にわたる幅広いレンジの線形不安定性に対して解析の実績が積み重ねられてきた。

しかしながら、MINERVA を用いたこれまでの研究では背景プラズマは熱的であることが仮定され、ITER をはじめとする将来の核燃焼プラズマで重要となる高エネルギー粒子（イオンや電子）の効果が考慮されていなかった。高エネルギー粒子は、ランダウ減衰と呼ばれる波との相互作用を介し不安定モードの特性に影響することはよく知られている。また、高エネルギー粒子からのエネルギー入力によって新たな不安定性が励起される可能性があることも実験研究及び理論研究の両方から明らかにされている。そこで本研究では核融合炉心プラズマ中の高エネルギー粒子の分布関数を解析するための新しい計算コード DKPRES を開発し、MINERVA と連携させることで高エネルギー粒子の効果を考慮した線形安定性解析モデルを構築する。

(2) 利用内容・結果:

① MINERVA+DKPRES 連携計算コードの開発に関する成果

本研究において開発を進めている高エネルギー粒子効果を含めた線形安定性解析モデルの計算のフローチャートを図 1 に示す。まず、初期条件として解析対象となるトカマク平衡データを決め、MINERVA による線形 MHD 安定性モードの固有値解析を行う。DKPRES コードは MINERVA が評価した摂動電磁場の固有モードを考慮してトカマク装置中の高エネルギー粒子軌道をモンテカルロ法により多数個計算し、電磁場による高エネルギー粒子の圧力擾乱を評価する。この情報を MINERVA コードに戻し、再度、MHD 計算を行うことで高エネルギー粒子の効果を考慮した MHD 不安定性の解析を行うことが可能となる。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。また、DKPRES コードは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できること

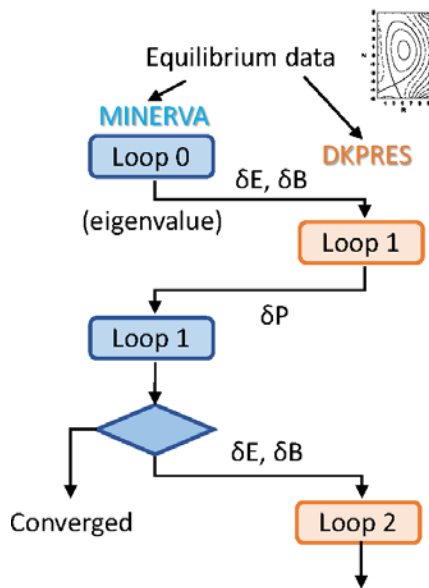


図 1. MINERVA + DKPRES の連成計算のフローチャート

も特徴である。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。線形安定性解析コードは 1 回の計算で意味のある解が得られるわけではなく、多数のパラメータランを行い、安定-不安定領域の境界を同定する必要があるため、大型並列計算機の利用による計算の効率化が不可欠である。DKPRES は過去 3 年間の開発の成果により ICE X において 10000 コア程度までの良好なスケーラビリティ (MPI/OpenMP 併用) と 5% 程度の高い実行効率が確認できている。

平成 30 年度は、MINERVA と DKPRES 間のインタフェース整備を完了させるとともに、図 1 のフローチャートに基づく MINERVA と DKPRES の連携を自動化するスクリプトを開発し、効率的なプロダクションランを実施できるレベルまでコードを整備することが出来た。

結果の検証として、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) のベンチマークデータとの比較を実施し、本研究で開発したフレームワークが従来の研究に照らして物理的にも妥当な解析結果を与えることを確認することに成功した。

② 低周波数モードを対象とした 3 次元摂動電磁場データ解析の効率化に関する成果

本研究では、開発したフレームワークを用いた研究対象として 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) を考える。高エネルギー粒子に由来する不安定性としては、上述の TAE に代表される比較的周波数の高いモードに関し、理論・シミュレーション研究と実験の比較が成熟しているが、低周波数のモードについては実験解釈に使えるレベルの解析コードの開発が進んでおらず、MINERVA+DKPRES の応用研究の対象として有望である。しかしながら、低周波数モードに関して周波数空間の十分な解像度を得るためには、MHD 計算の特徴的時間スケールであるアルフヴェン時間 (10^{-7} - 10^{-6} 秒) に比べて十分長い 10 ミリ秒のオーダーで 3 次元の摂動電磁場構造のデータを時間方向に蓄積して処理せねばならずメモリ容量の制限で解析が困難となり、開発済みのバージョンの DKPRES コードでは EWM のような低周波数モードの解析が難しいことが分かった。そこで平成 30 年は外部ファイルへの I/O を併用した DKPRES コードによる摂動電磁場解析の効率化を図った。開発の初期段階では、ある時刻に対する 3 次元の摂動電磁場データを一つの塊として外部ファイルに書き込むようにしたが、この場合、ある

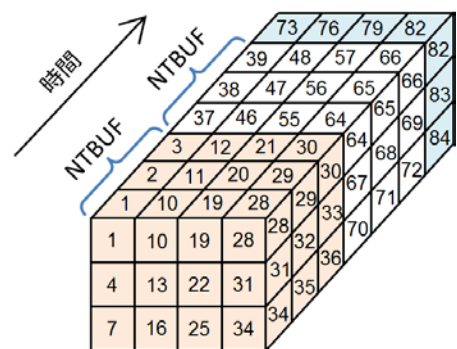


図 2. DKPRES における摂動電磁場データ構造の仕様

3次元空間中の1点に対し、時間方向のフーリエ展開を行おうとするとデータアクセスが不連続になるため、極端に性能が劣化し、悪い場合には計算コストすら卓越することが分かった。そこでバッファ配列を用意し、図2に示すように時間方向のバッファサイズ(NTBUF)を定め、この長さの時間データを作業配列に蓄積して出力するように工夫する仕様を実装した。ここでは同仕様を Fortran 標準のバイナリ出力を利用したバージョンおよび HDF5(Hierarchical Data Format 5)形式を採用したバージョンとして実装し、いずれのバージョンにおいても、計算コストに比べ、外部ファイルの I/O 処理が十分無視できるレベルまで効率化した。この結果、任意の時間長に対する摂動電磁場データの解析が可能となり、EWM のような低周波数モードの解析の見通しを得た。

(3) 今後の利用予定:

平成 30 年度において MINERVA+DKPRES の連成計算による高エネルギー粒子駆動モードの解析に向けたフレームワークが完成した。今後、開発したフレームワークを用いたプロダクションランとして、TAE および EWM の解析を進め、MHD モードに対する高エネルギー粒子駆動効果の理解を深める。令和元年度からは上記の MINERVA+DKPRES を用いた線形安定性研究に加え、高エネルギー粒子の効果を考慮した簡約化 MHD モデルに基づく非線形シミュレーションの研究にも ICE X を利用する。具体的には、プラズマ理論シミュレーショングループで開発が進められている高エネルギー電子の効果を考慮した簡約化 MHD シミュレーションコード EXTREMe を用い、ディスラプションの発生および発生後の炉心プラズマのダイナミクスを解析する。平成 30 年度に先行して行ったコードの移植・性能測定作業ではプロダクションランに用いる 1000 コア程度の並列度に対し、並列化効率 77%、実行効率 4.3%程度の性能が得られており、スムーズな研究の実施が期待できる。

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 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 形成の理論研究として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輸送障壁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できるモデルの確立には至っていない。

また、ETB 形成後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)] が広く用いられており実験を精度良く再現しているが、第一原理計算による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、及び理想 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(ELM)モデルによる大規模シミュレーションから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/ペデスタル崩壊過程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、ETB 形成の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 形成時及び 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ある。

(2) 利用内容・結果:

BOUT++コードを用いた周辺局在化モードによるペデスタル崩壊過程のシミュレーション

周辺局在化モード (ELM) によるペデスタル (プラズマ境界近傍の周縁領域に形成される急峻な圧力勾配) の崩壊過程の理解はプラズマ対向材の許容熱負荷の観点から ITER・原型炉に向けた炉心プラズマ研究の重要な課題の一つである。本研究課題では ELM による粒子・熱放出に乱流輸送が与える影響を明らかにするため、周辺 MHD コード BOUT++を用いたシミュレーション研究を行なっている。

BOUT++コードは流体方程式を解く座標系を工夫することで他の MHD コードに比べてより波長の短いモードまでを取り扱える点に特徴がある。さらに、近年、課題担当者が行ってきた改

良により短波長モードの取り扱いと電磁力とプラズマの静圧および動圧の釣り合いからなる非線形相互作用が生成する巨視的流れの取り扱いが初めて両立できるようになった。

今回、改良版の BOUT++コードを用いて ELM によるペDESTAL崩壊過程を模擬した数値実験を行い、巨視的流れが ELM のエネルギー放出過程に与える影響を調べた。その結果、ペDESTAL崩壊の直接の原因である 1 次不安定性 (ELM) に引き続き、乱流と巨視的流れの相互作用が二次的な不安定性を引き起こし、放出エネルギー量を高いレベルで維持するという熱・粒子放出過程における巨視的流れの新しい役割を解明した (図 1)。このような 2 次的不安定性は改良版の BOUT++コードで初めて発見されたものである。

先行研究ではシミュレーションによって得られる ELM 放出エネルギーは実験結果より 1 桁程度小さく見積もられているが、今回解明されたエネルギー放出機構は計算と実験結果の乖離を埋める可能性のあるメカニズムの有力な候補である。今後、実験との比較を通じ、発見された物理機構の重要性を検証し、BOUT++コードによる ELM シミュレーションの精度を向上させ、JT-60SA や ITER 及び原型炉の予測につなげる計画である。

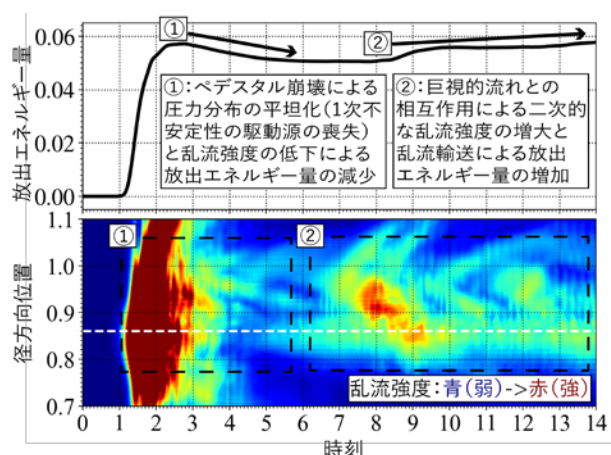


図 1 : 計算開始時における圧力勾配のピーク位置 (下図白破線) から放出された内部エネルギーの時間発展 (上図) と周縁領域における乱流強度の時空間構造 (下図)。ここで、カラーバーは時刻 $t=7$ 以降の構造を強調するように設定した。ペDESTAL崩壊に伴う圧力分布の平坦化による乱流輸送レベルの低下から放出エネルギー量が減少した後 (①)、巨視的流れとの相互作用から二次的な不安定性が励起されて乱流輸送レベルが増大した結果、放出エネルギー量が再び増加する。

(3) 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。また、GNU コンパイラの更新に関しては ICE X の運用チームのサポートが得られなかった。そのため、最新のコード開発とプロダクションランの実行に関しては 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 計算機を用いている。今後の 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。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) ELM crash with nonlinear toroidally axisymmetric flow and field ,瀬戸 春樹,
X.Q.Xu,B.D. Dudson, 矢木 雅敏, 2018 BOUT++ workshop,Livermore, USA,2018.8
(Oral)
- 2) ELM crash with nonlinear toroidally axisymmetric flow and field, 瀬戸 春樹,
X.Q.Xu,B.D. Dudson, 矢木 雅敏, AAPPs-DPP 2018,Kanazawa, Japan,2018.11 (Oral)
- 3) イオン反磁性モデルがペデスタル崩壊過程に与える影響に関するシミュレーション,瀬戸
春樹, X.Q.Xu,B.D. Dudson, 矢木 雅敏, 第 35 回プラズマ・核融合学会年会,大阪,2018.12
(Poster)
- 4) 軸対称モードの流れと磁場の時間発展を取り入れた抵抗性バルーニングモード駆動型 ELM
のシミュレーション研究, 瀬戸 春樹, X.Q.Xu,B.D. Dudson, 矢木 雅敏, 日本物理学会第
74 回年次大会,福岡,2019.3 (Oral)
- 5) Numerical improvement in BOUT++ framework for multiple mode ELM crash
simulation including off-resonant modes and its application, 瀬戸 春樹, X.Q.Xu,B.D.
Dudson, 矢木 雅敏, 5th UNIST-Kyoto U. workshop,Busan, Korea,2019.4 (Oral)
- 6) Simulation study on ELMs by BOUT++ framework including toroidal axisymmetric
flow and magnetic field driven by short wave-length instabilities, 瀬戸 春樹,
X.Q.Xu,B.D. Dudson, 矢木 雅敏, 17th International Workshop on Plasma Edge Theory
in Fusion Devices,San Diego, USA,2019.8 (Oral)

学術論文

- 7) Interplay between fluctuation driven toroidal axisymmetric flows and resistive
ballooning mode turbulence, H. Seto, X.Q. Xu, B.D. Dudson, M. Yagi, Physics of
Plasmas,vol.26, no.5, 052507,2019.4

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、森田 健司

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 ${}^6\text{Li}$ 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 ${}^7\text{Li}$)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。本課題申請代表者は、リチウムイオン伝導体を分離膜とした新たな ${}^6\text{Li}$ 同位体分離技術を開発し、それが従来の技術と少なくとも同程度の分離性能を持つことを示した。本課題では、より効率的な同位体分離技術の確立に向け、第一原理電子状態計算を用いてリチウムイオン伝導体における ${}^6\text{Li}$ と ${}^7\text{Li}$ の分離メカニズムを解明する試みを行うとともに、最適なリチウムイオン伝導体の組成と結晶構造の探索を行う。

(2) 利用内容・結果:

リチウムイオン伝導体を用いたリチウム同位体分離において、 ${}^6\text{Li}$ 分離の効率性は、伝導体中における ${}^6\text{Li}$ と ${}^7\text{Li}$ の拡散係数の比 D_6/D_7 で表されるため、より効率的な同位体分離技術の確立は ${}^6\text{Li}$ が ${}^7\text{Li}$ より動きやすいリチウムイオン伝導体の発見に帰着される。しかしながら、実用上はリチウムイオン伝導そのものが十分に高速でなければ分離に著しく長時間を要するため、高速リチウムイオン伝導性を有し、かつ分離性能が高いものを見つけなければならない。このような条件を実現する物質に対する一般的な条件は知られていないため、物質探索の範囲をできるだけ広く取る必要がある。さらに、効率よく探索を進めるためには、物質データの選定から計算結果の解析までを円滑に進められる枠組みが必要不可欠である。一方で、第一原理計算は現在もっとも信頼できる計算であるが、何千、何万といった物質に適用するのは計算コストの面からは非現実的である。そこで、本課題では物質探索の枠組みとして、数百程度の第一原理計算データを基にした機械学習の適用を目指す。本年度は、データベースの構築のための解析の枠組みを整備し、無機結晶データベース(ICSD)から無作為抽出したいくつかの物質についての第一原理計算を行った。

本課題において構築した解析フローチャートを図 1 に示す。それぞれのステップにおいて、経験的に判断せざるを得ない箇所やパラメータ設定があるため、完全に自動化するには至っていないが、それらの操作を簡略化することで、効率よくリチウムイオン伝導体の計算を行うことが可能となっている。まず、データベースから無作為抽出した物質の構造をモデル化する際、非化学量論的組成を持つ場合は、適切なスーパーセル変換と組成比の調整によって、計算可能な構造モデルを構築した。この際、結果として原子数が 250 を超えるような物質は計算コストの面

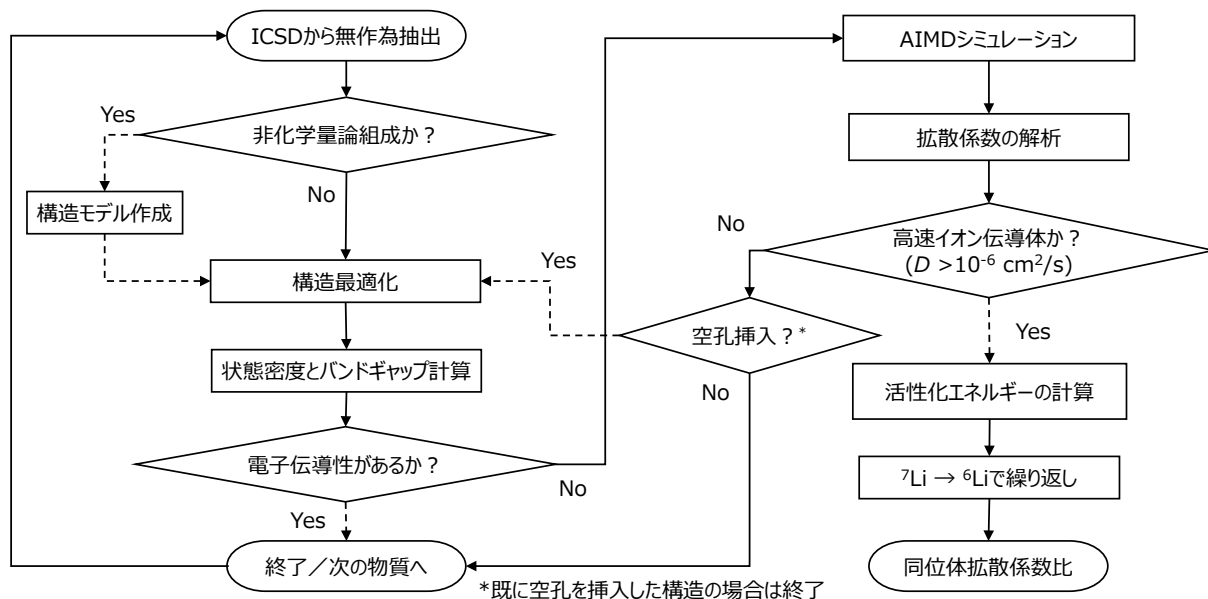


図 4：解析フローチャート

から棄却した。次段階として、第一原理計算による構造最適化を行い、電子構造を調べた。計算コードには VASP を使い、汎関数には GGA-PBE を採用、K 点サンプリングは $6 \times 6 \times 6$ を基準に、格子形状に応じて調整を行っている。ここでバンドギャップが 0 の物質は電子伝導が起きると考えられるため棄却した。本年度において計算した 45 物質のうち、ほぼ半数の 22 物質がこの時点で棄却された。

絶縁体、または半導体と判定された物質に対して、リチウムイオンの拡散係数の計算を行い、高速イオン伝導体かどうかの判定を行う。室温では拡散が起きづらいため、 $T=900\text{K}$ まで加熱し、40ps 程度の AIMD シミュレーションを行い、

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6t} \langle |r_i(t + t_0) - r_i(t_0)|^2 \rangle_{t, t_0} \quad (1)$$

によって平均二乗変位から拡散係数を求めた。式(1)の i と t_0 はそれぞれリチウムイオンの番号と変位を取る初期時刻を示す。高速かどうかのしきい値は、これまでに発見されている酸化物リチウムイオン伝導体(チタン酸リチウムランタン(LLTO)など)と同程度にあたる、 $10^{-6}\text{cm}^2/\text{s}$ に設定し、これより大きな拡散係数を示したものについては、他の温度でも計算を行い、拡散係数の温度依存性から活性化エネルギーを求める。一方、高速拡散が見られなかった物質には伝導経路が形成されていないと考えられるが、空孔が形成されることによって伝導経路が形成される可能性があるため、リチウム原子を 1 つ引き抜くことによって、人工的に空孔を挿入した構造でのリチウムイオン拡散を調べた。ここで、空孔挿入位置はリチウム原子の数だけの自由度があるため、もっともエネルギーが低いものを選んでいく。

結果の一例として、 $\text{Li}_4\text{Al}_4(\text{PO}_4)_4\text{F}_4$ の解析について以下に示す。この物質のバンドギャップの計算結果は 5.93eV あり、絶縁体であるため、まず 900K での AIMD シミュレーションを行ったが、80ps までシミュレーションを延長しても、原子は初期位置周りを振動するだけであった。そこで、リチウムイオンを一つ取り除いて構造最適化した後、再びシミュレーションを行った。

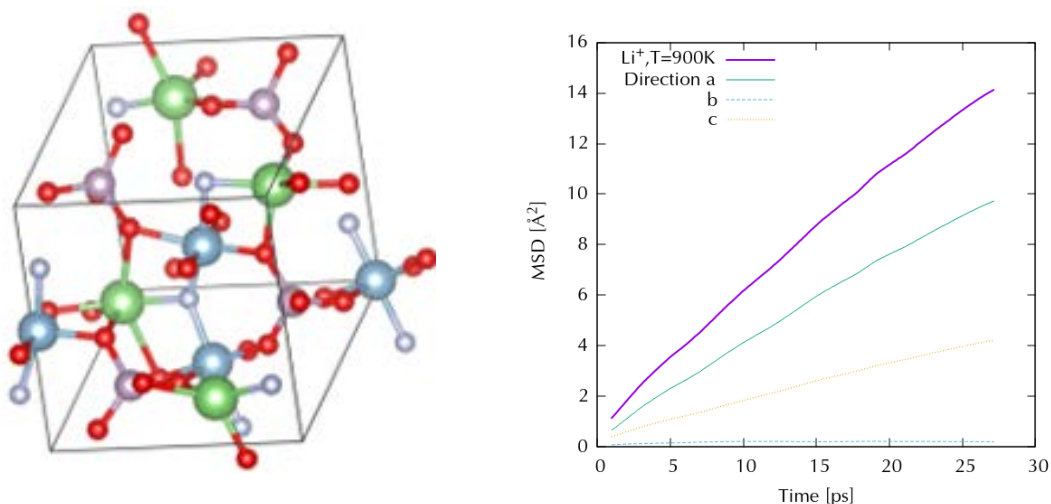


図 5 : (左) $\text{Li}_4\text{Al}_4(\text{PO}_4)_4\text{F}_4$ の構造 (右) 空孔挿入後の平均二乗変位

図 2 (左)は $\text{Li}_4\text{Al}_4(\text{PO}_4)_4\text{F}_4$ の結晶構造を示しており、4 つのリチウムイオンが緑で示されている。結晶の持つ対称性と周期性境界条件により、4 つのうちどのリチウムイオンを取り除いて空孔を挿入しても結果は等しいと考えられる。図 2 の右図が空孔挿入後のシミュレーションから得られたリチウムイオンの平均二乗変位であり、式(1)の右辺にあたる。空孔挿入によってリチウムイオンの拡散経路が形成されたことによって、時間に比例した振る舞いを見せるようになり、直線の傾きから、拡散係数 $D(T = 900\text{K}) = 8.5 \times 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$ が得られた。本年度は 11 種類の物質について $T=900\text{K}$ でのシミュレーションを行い、そこから 1 種類($\text{Li}_3\text{Er}(\text{NO}_3)_6$)の高速イオン伝導体、1 種類(上記)の空孔挿入での高速イオン伝導体を得られ、残り 9 種類は早い拡散を示さないという結果が得られた。早い拡散が室温でも起きるかは他の温度での計算が必要となるため、現時点で結論は下せないが、今後のシミュレーションの蓄積によって明らかになると考えられる。

(3) 今後の利用予定:

同様の計算を進めることによって、高速リチウムイオン伝導体における ^6Li と ^7Li の拡散係数データを蓄積し、機械学習データとしての活用を図る。同位体拡散比の異なる高速リチウムイオン伝導体について、シミュレーションにおける拡散機構を調べ、メカニズム解明につなげたい。また、空孔挿入によって高速イオン伝導体を示した物質については、元素置換によって安定性を調べ、同位体分離技術に適用可能かを調査する計画である。

(4) 成果リスト(学会、プレス発表、論文等):

学会発表

- 1) リチウム 6 分離に向けた第一原理計算に基づく超イオン伝導体の探索, 森田 健司, 第 8 回 IFERC-CSC 研究会, 東京, 2019.2 (Oral)

一般利用者研究成果一覧

量子ビーム科学研究部門

(1) 学術論文

- 1) Quantum Optimal Control of Rovibrational Excitations of a Diatomic Alkali Halide: One-Photon vs. Two-Photon Processes, 黒崎 譲, 横山 啓一, Universe, vol.5, 109-1 - 109-15, 2019.5
- 2) Superfluorescence, Free-Induction Decay, and Four-Wave Mixing: Propagation of Free-Electron Laser Pulses through a Dense Sample of Helium Ions, Harries. J. R, H. Iwayama, S. Kuma, M. Izawa, N. Suzuki, Y. Azuma, I. Inoue, S. Owada, T. Togashi, K. Tono, M. Yabashi and E. Shigemasa, Physical Review Letters, vol. 121, Issue 26, 263201, 2018.12

(2) 学会発表

- 1) 二光子過程を含む同位体選択的振動回転励起の量子制御, 黒崎 譲, 横山 啓一, 分子科学討論会 2018, 福岡, 2018.9, (Poster)
- 2) "Detailed study of superfluorescence at a wavelength of 469 nm from helium ionised and excited using free-electron laser pulses", Harries. J. R, 原子衝突学会第 43 回年会, 宇治, 2018.10, (Oral)
- 3) "Superfluorescence, free-induction decay, and four-wave mixing: the interaction of FEL pulses with a dense sample of helium ions", Harries. J. R, 第 32 回日本放射光学会年会・放射光科学合同シンポジウム, 福岡, 2019.01, (Poster)
- 4) ヘリウムイオンの FEL 励起に伴う超蛍光、ヨーク超蛍光、自由誘導減衰、四光波混合, Harries. J. R, 日本物理学会第 74 回年次大会, 福岡, 2019.03, (Oral)

(3) プレス発表

- 1) 世界最短波長「超蛍光」の観測—新たなコヒーレント光源の開発に向けて—, J R Harries, <https://www.qst.go.jp/site/press/20780.html>, 2019.01

核融合エネルギー研究開発部門

(1) 学術論文

- 1) Characteristics of fast ^3He ion velocity distribution exciting ion cyclotron emission on JT-60U, S. Sumida, K. Shinohara, R. Ikezoe, M. Ichimura, M. Sakamoto, M. Hirata, S. Ide, Plasma Physics and Controlled Fusion, vol.61, 025014, 2019.2
- 2) Analysis of radionuclidic purity of medical isotope production with d-Li neutron in A-FNS, 太田 雅之, 権 セロム, 佐藤 聡, 落合 謙太郎, 鈴木 寛光, Fusion Engineering and Design, 2018.12 (online)
- 3) Investigation of Mo-99 Radioisotope Production by d-Li Neutron Source, 太田 雅之, 権 セロム, 佐藤 聡, 落合 謙太郎, 鈴木 寛光, Nuclear Materials and Energy, vol. 15, 261-266, 2018.5
- 4) Investigation on A-FNS Neutron Spectrum Monitor System, Saerom Kwon, Masayuki Ohta, Satoshi Sato, Kentaro Ochiai, Hiromitsu Suzuki, Nuclear Materials and Energy, vol.16, 207-211, 2018.7

(2) 学会発表

- 1) Design optimization of optical components in ITER Equatorial Launcher (EL) by using ECCD Code, 高橋 幸司, 2018 US-JA-EU RF workshop, 静岡, 2018.9, (Oral)
- 2) Improvement of ITER equatorial EC launcher design for poloidal steering compatibility, 梶原 健, 高橋 幸司, 他, 27th IAEA Fusion Energy Conference, Gandhinagar, India, 2018.1, (Oral)
- 3) 核融合炉用大電力ジャイトロンの開発と今後の展開, 高橋 幸司, 第35回プラズマ核融合学会年会, 大阪, 2018.12, (Oral)
- 4) Comparison of Neon and Carbon spatial distribution in detached divertor plasma of H-mode discharge in JT-60U, 佐野 竜一, 2nd Asia-Pacific Conference on Plasma Physics, 石川, 2018.11, (Poster)
- 5) Study on ion cyclotron emission excited by DD fusion produced ions on JT-60U, S. Sumida, K. Shinohara, R. Ikezoe, M. Ichimura, M. Sakamoto, M. Hirata, S. Ide, he 45th European Physical Society Conference on Plasma Physics, Prague, Czech, 2018.7, (Poster)

- 6) 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 3He イオンの速度分布, 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, 第 35 回プラズマ・核融合学会年会, 大阪, 2018.12, (Poster)

- 7) Extension of SONIC code toward mixed-impurity seeding capability, S. Yamoto, K. Hoshino, T. Nakano, N. Hayashi, 2nd Asia-Pacific Conference on Plasma Physics, Kanazawa, JAPAN, 2018.11, (Oral)

- 8) 原型炉第一壁の熱負荷低減に向けた形状設計研究, 三善 悠矢, 第 35 回 プラズマ・核融合学会 年会, 大阪, 2018.12, (Poster)

- 9) Radiation shielding requirements for the full power operation of the Linear IFMIF Prototype Accelerator (LIPAc) at Rokkasho, K. Kondo, 30th Symposium on Fusion Technology, Sicily, Italy, 2018.9, (Poster)

- 10) 核融合中性子源(A-FNS) 試験モジュールの概念検討 (5) BNPTM/DCTM 設計、応用利用, 太田 雅之, 佐藤 聡, 中村 誠, 権 セロム, 朴 昶虎, 落合 謙太郎, 染谷 洋二, 坂本 宜照, 春日井 敦, 2019 年日本原子力学会春の年会, 茨城, 2019.3, (Oral)

- 11) Analysis of radionuclidic purity of medical isotope production with d-Li neutron in A-FNS, 太田 雅之, 権 セロム, 佐藤 聡, 落合 謙太郎, 鈴木 寛光, 30th edition of the Symposium on Fusion Technology (SOFT 2018), Giardini Naxos, Sicily, Italy, 2018.9, (Poster)

- 12) 核融合中性子源(A-FNS) 試験モジュールの概念検討 (4)NFMM/ACPM/TRTM/BFMTM 設計, 権 セロム, 太田 雅之, 佐藤 聡, 中村 誠, 小柳津 誠, 朴 昶虎, 落合 謙太郎, 中島 基樹, 野澤 貴史, 谷川 博康, 金 宰煥, 星野 毅, 中道 勝, 春日井 敦, 2019 年日本原子力学会春の年会, 茨城, 2019.3, (Oral)

- 13) Experimental verification of dosimetry reaction rates of Co, Nb, Au, Bi with d-Li neutrons, 権 セロム, 太田 雅之, 小柳津 誠, 落合 謙太郎, Atsuki Terakawa, Masatoshi Itoh, Yoko Ishibashi, Yukihide Yuki, 佐藤 聡, 春日井 敦, 30th edition of the Symposium on Fusion Technology (SOFT 2018), Messina, Sicily, 2018.8, (Poster)

平成 30 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 2019 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/>

©2019 国立研究開発法人 量子科学技術研究開発機構

QST-R-14