

原子力分野における複雑現象  
シミュレーションの新展開

町田 昌彦  
日本原子力研究開発機構  
システム計算科学センター

# 原子力分野における複雑現象シミュレーションの新展開

町田 昌彦

日本原子力研究開発機構・システム計算科学センター

〒277-0871 千葉県柏市若柴 178-4-4

[machida.masahiko@jaea.go.jp](mailto:machida.masahiko@jaea.go.jp)

2011年3月11日に起こった東日本大震災とそれに続く東京電力福島第一原子力発電所事故は、科学や技術に携わる人々全員にとって、決して忘れることができない出来事である。中でも、コンピュータ・シミュレーションを業として研究している者にとって、その感じ方は大きいものであったに違いない。なぜなら、最新のスーパーコンピュータとそれを十分に利用可能とする計算科学を用いても、これらの事象を事前に予測し、対策を講じること等、殆どできなかったからである。しかし、これらの不幸な出来事によって、研究者が自身の無力感だけを感じて終わっただけではなく、改めて、自然現象や大規模なシステムの挙動を理解することの難しさを知り、今後の取組みに活かしていこうと真剣に考える契機となった。

自然現象や大規模な人工のシステムの挙動を理解するには、全ての自由度をくみ取り、シミュレーションすることは不可能であるため、重要な要素から成るモデルを構築し、それを数式で表現したところで、計算機上でのシミュレーションが可能になる。その際、まず、重要な要素の選択において、研究者の指向性が入り込む上、モデルの検証に際し、どんなに精緻な実験や観測を行ったとしても、実験や観測には誤差が付いて回る。そして更に、数式が大自由度の非線形方程式であれば、ほんの僅かな初期条件や境界条件の違いが全く異なる時間発展へと導くという内在する解の不安定性があり、シミュレーションの妥当性を確認することは、容易ではないことが分かる。こうして、常にモデルに見落としは無いのか、実験/観測データに誤りは無いのか、経験的パラメータは妥当か、そして、得られた解が十分に正しいものであるかの不安にさいなまれることになる。特に課題が極めて甚大な影響を与えかねない事象であれば、その不安は深刻なものとなろう。近年、地球温暖化の議論が進んでいるが、その対象は唯一無二の地球生態系の未来であり、その研究の成果がどれほどの影響を与えるものかを想像すると、様々なモデル系の研究に真剣に取り組み、知見を積み上げる必要があることが分かる。様々な要素から構成され、それらがお互いに影響を与えながら時々刻々変化するシステムを複雑な系と呼ぶなら、その取扱いについて、シミュレーション研究者は早急に学ぶ必要がある。

話を原子力分野に戻すと、福島原発事故で溶け落ちてしまった核燃料はどこにどのような物理化学形態で存在しているのか？溶け落ちる際に揮発し、その後、環境に重大な影響を与えた放射性ヨウ素やセシウムの物理化学形態は炉内からその形態を変化させ、どのようにして地上や海上に降り注いだのか？それらの正確な理解は殆ど得られていない。その上、環境中に放出された放射性セシウムは、現在どのような形態を取り、土壌表層に存在しているのか？一方、動きを示すその一部はどのような変化を伴って環境中を移動するのか？そして、それらの生態系内での動態や影響等についても、未だに判然としないことがたくさんあることが分かる。このような難問だらけの状況において、シミュレーション研究者はどのような立場で研究を進めていけばよいのだろうか？本講演では、その疑問に対し一つの回答を示し、そして、システム計算科学センター・シミュレーション技術開発室の取組みを紹介したい。



# 原子力分野における 複雑現象シミュレーションの新展開

日本原子力研究開発機構  
システム計算科学センター  
シミュレーション技術開発室

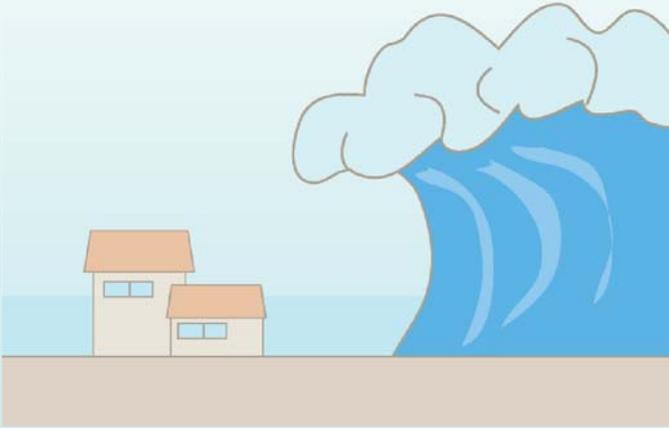
## 講演トピックス

- 1、原子力分野における複雑現象
- 2、微視的シミュレーションの現状と展望
- 3、環境システムシミュレーションの現状と展望
- 4、まとめと結論

# 1、原子力分野における複雑現象

## 東日本大震災

地震/津波



大規模自然現象

原子力発電所事故



大規模人工システム

科学や技術の限界(想定外事象)

# 1、原子力分野における複雑現象

## 東日本大震災

地震/津波

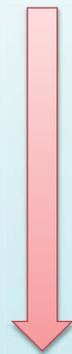
モデル



シミュレーション



再現/予測



想定外事象

原子力発電所事故



# 1、原子力分野における複雑現象

モデルの構築： 主要な各要素の同定と要素間の相互作用

例

偏微分方程式



初期条件/境界条件



時間発展(予測)

①モデルの妥当性

- ・見逃している要素はないか？
- ・要素間の相互関係推定は正確か？

②観測/実験/経験の妥当性

- ・観測値の誤差は？
- ・経験的パラメータは妥当か？

③系に内在するカオスの性質

- ・本質的予測不能性

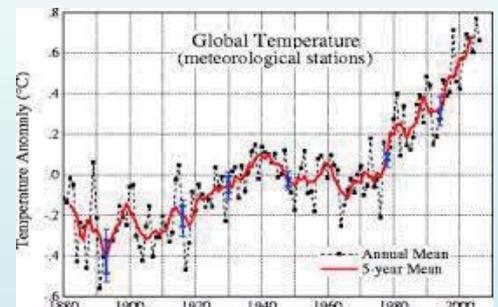
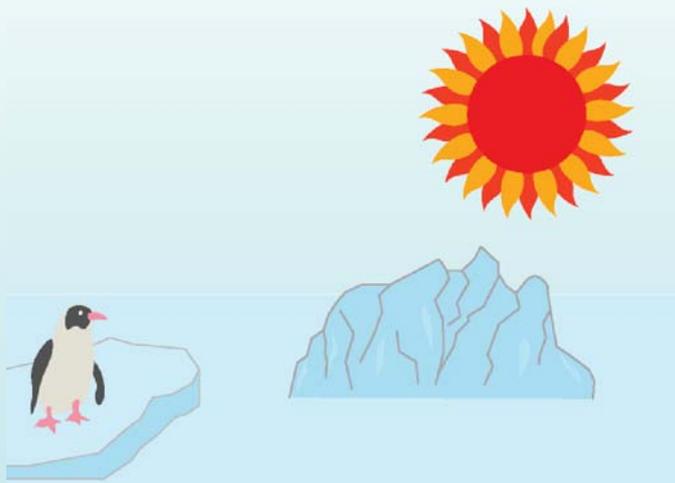
# 1、原子力分野における複雑現象

①モデルの妥当性

②観測/実験/経験の妥当性

③系に内在するカオスの性質

想定外 ⇒ 極めて甚大な影響



地球(自然+人)システム

# 1、原子力分野における複雑現象

巨大なシステムの複雑現象に取り組む必要性



確率的予測が意味を持つ

確率的予測のみが意味を持つ例：量子力学

観測の不確定性



位置・運動量  $\Rightarrow$  不確定性  $\Rightarrow$  波動関数  $\Rightarrow$  確率



実験による検証

# 1、原子力分野における複雑現象

地震/津波

← 原子力発電所事故

← 構造材料/機能材料/生体物質

← 原子・分子/電子

予測不可能性：スケール間の違い

自然・人工システム(古典力学)

量子力学

複雑性

関与する自由度の不定  
力学的不安定性(カオス)

観測の不確定性



確率論的評価  
アンサンブル予測



確実な知見の積み上げ  
(解くこと自体が困難)

# 1、原子力分野における複雑現象

## 原子力発電所事故(炉内)

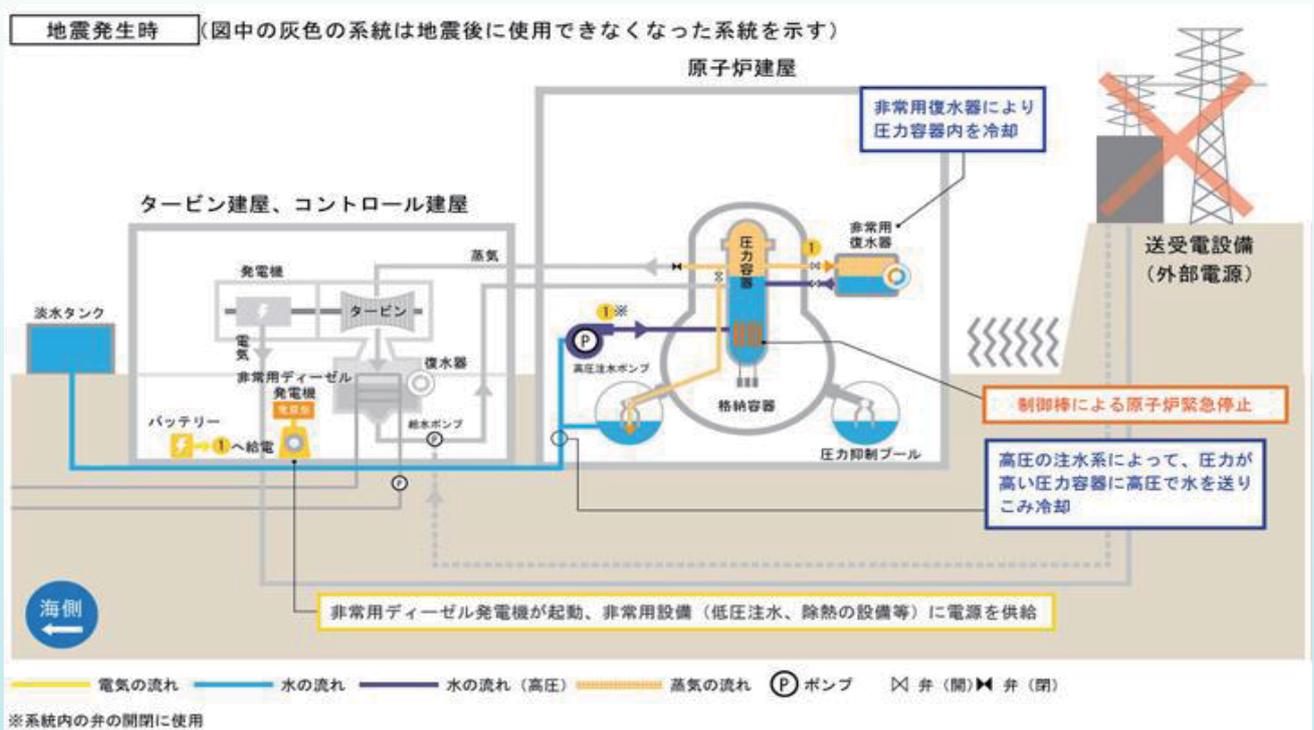
高温高圧時

### 核燃料(被覆管含む)の挙動

- ・被覆管材料の酸化と崩壊
- ・核燃料棒の融解と崩壊
- ・核分裂生成物の揮発/化学形態変化

### 構造材料の挙動

# 1、原子力分野における複雑現象



# 1、原子力分野における複雑現象

原子力発電所事故(炉外/環境)

放出放射性核種  
の挙動

大気(気象変化、エアロゾル、降雨)

土壌(森林、市街地、河川、ダム)

海洋(河口、沿岸、外洋)

# 1、原子力分野における複雑現象

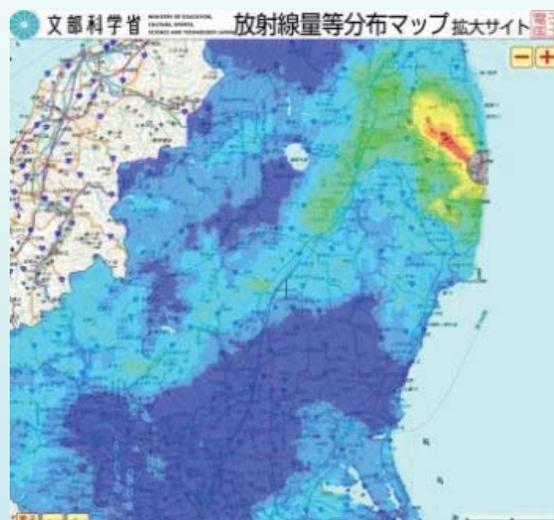
揮発性放射性元素 ⇒ エアロゾル ⇒ 降雨

沈着と動態

水素爆発後の3号機原子炉建屋



東京電力HP



## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### 微視的シミュレーション

確立した理論体系(量子力学)



計算体系の工夫による効率化  
大規模並列計算による効率化



計算科学特有の成果  
(科学的普遍性)



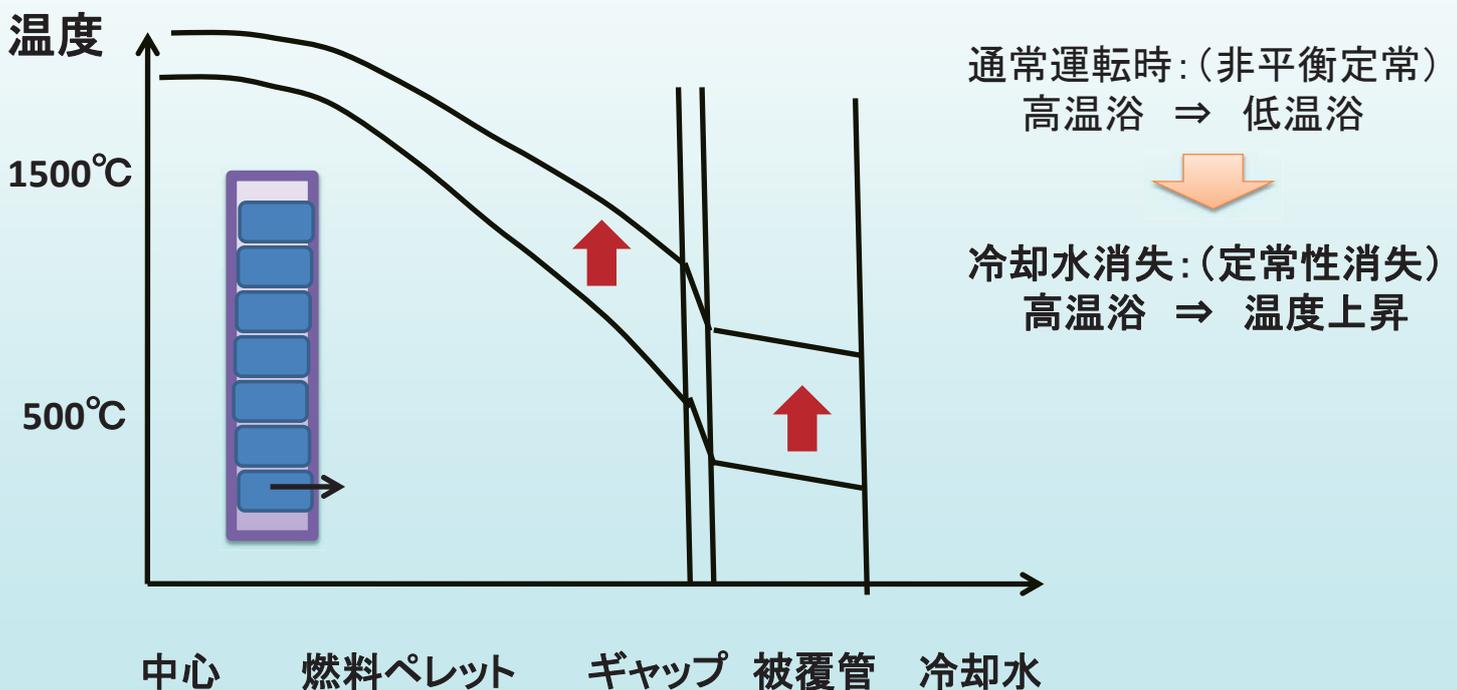
着実な知見の積み上げ



現実の体系への関与が間接的  
問題に即した対応に時間がかかる

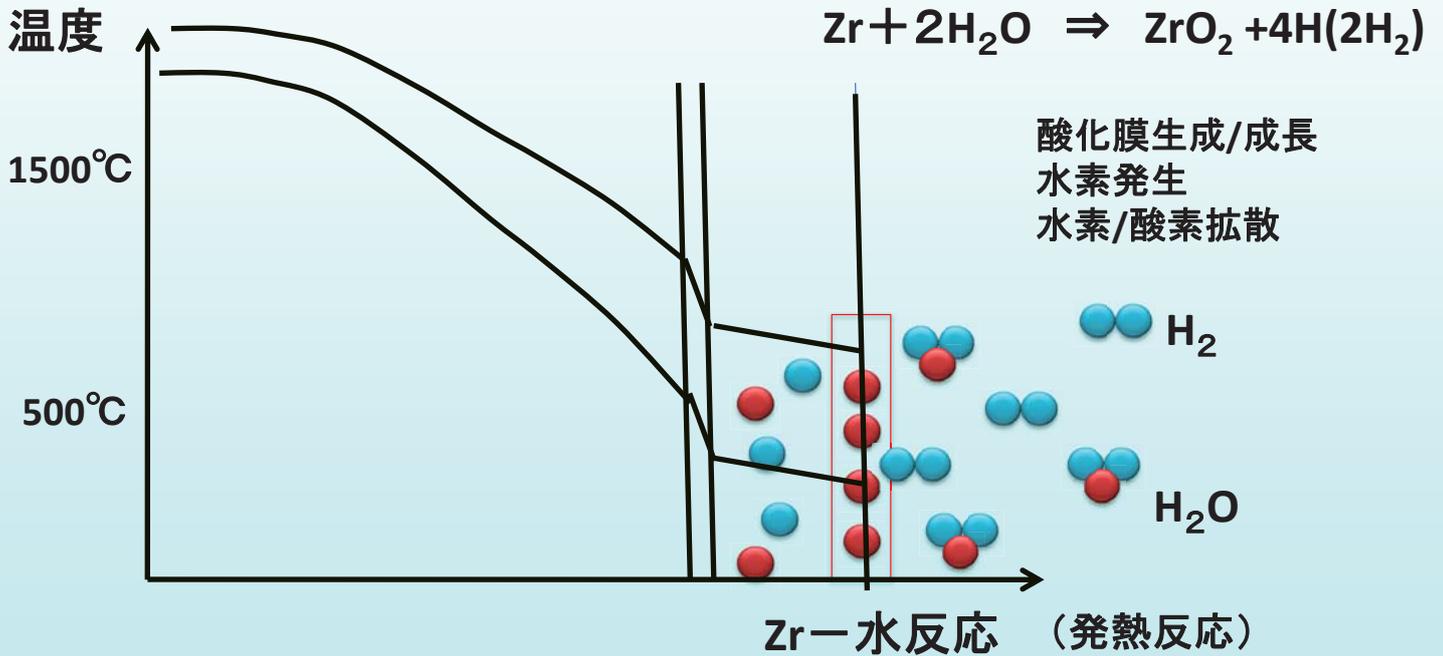
## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### 炉内過酷事故環境：燃料棒ヒートアップ物理挙動



## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### 界面での反応生成物(H)の挙動



## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### 非平衡界面化学反応

複数の時空間スケールが  
相互に関与し進展する

(マルチスケール/マルチフィジックス)



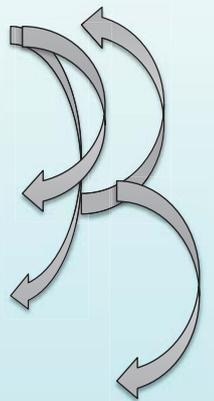
統一的理解が必要

電子レベル fs  
化学反応

原子・分子レベル  
ns ~ ps  
拡散・振動

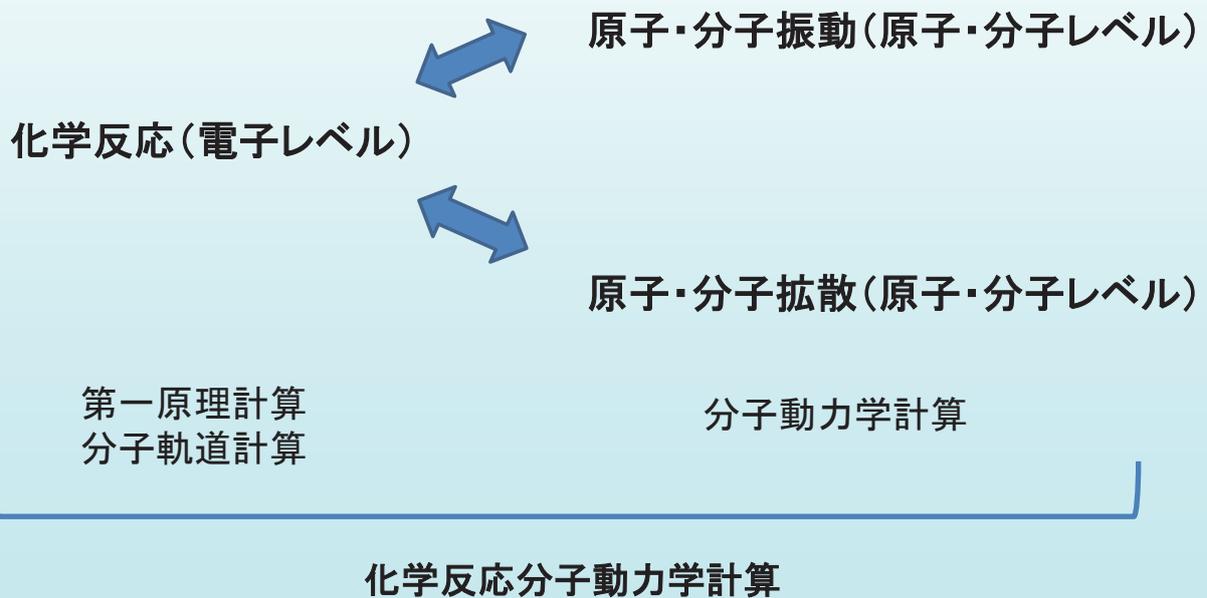
結晶粒レベル  
脆化  
融解・凝固

多結晶組織レベル



## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### 化学反応分子動力学 (ペンシルベニア大、Adri van Duin et al.)

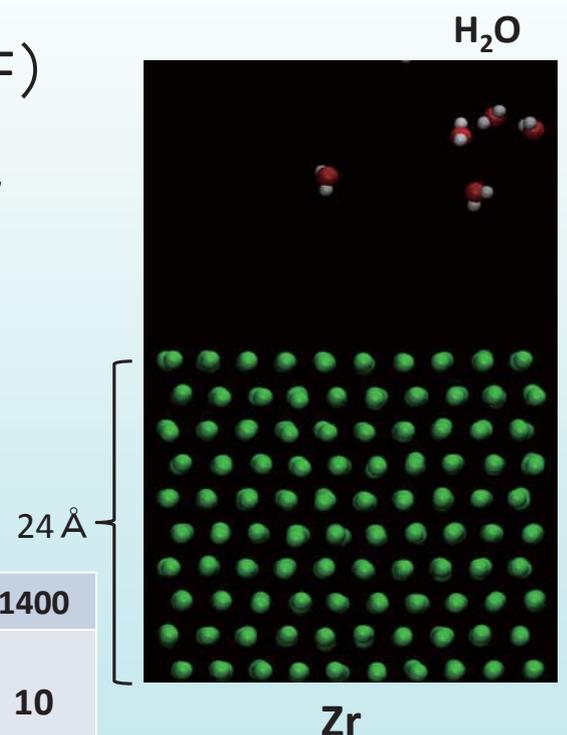


## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

- 化学反応分子動力学 (ReaxFF)
- Zr-0001表面 スラブと水蒸気
  - Zr : 500個 H<sub>2</sub>O: 992個
  - セルサイズ: 27 × 16 × 4350 (Å)
  - 水蒸気密度: 0.015 g/cm<sup>3</sup>

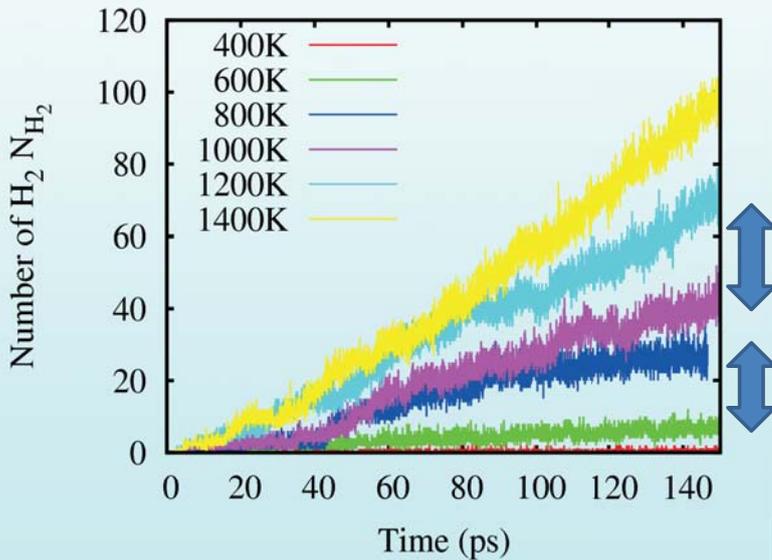
(冷却水消失時の物理条件に依存)

温度 (K)	400	600	800	1000	1200	1400
およその圧力 (MPa)	~0.2 (過冷却)	4	5	7	8	10

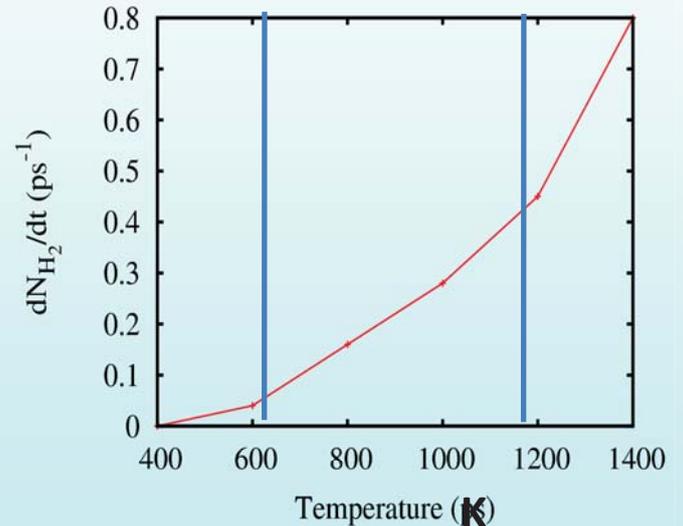


## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### H<sub>2</sub>発生数 vs. 時間



### H<sub>2</sub>発生速度 vs. 温度

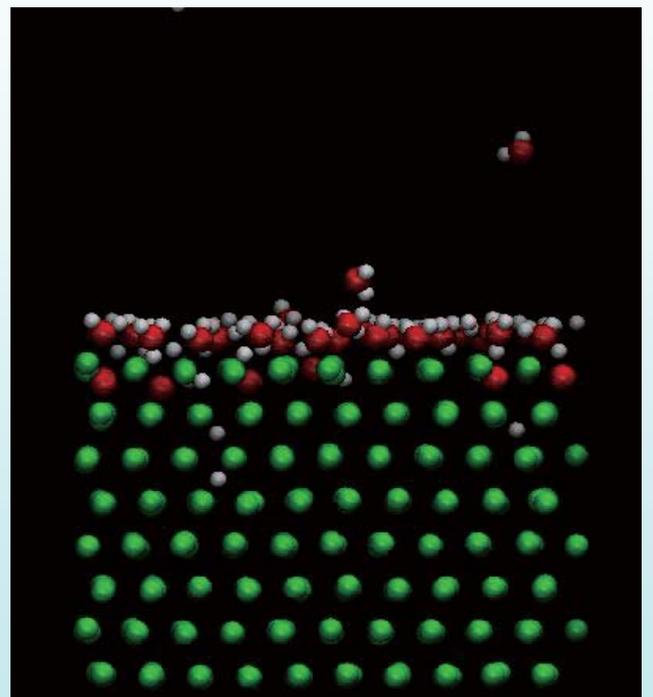


900°C (300°C) 以上で水素生成量は急激に増大する。

## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

400K (127°C)

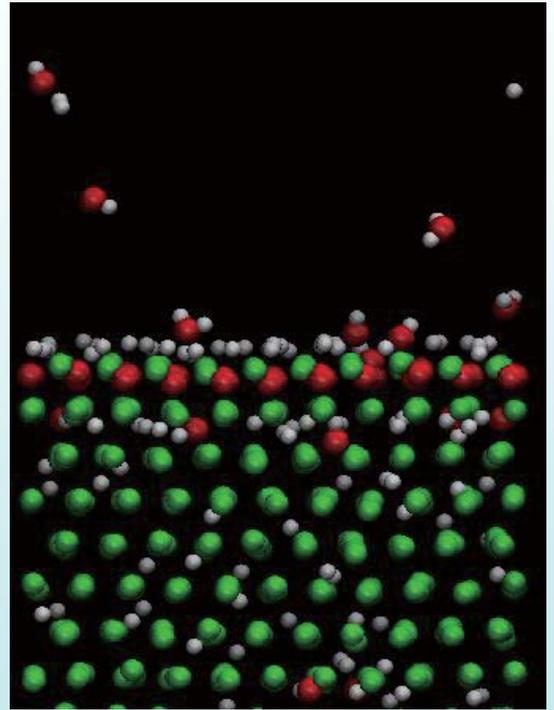
- 表面に酸化膜ができる (酸化抑制)
- 水素は膜を超え拡散



## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

600K(327°C)

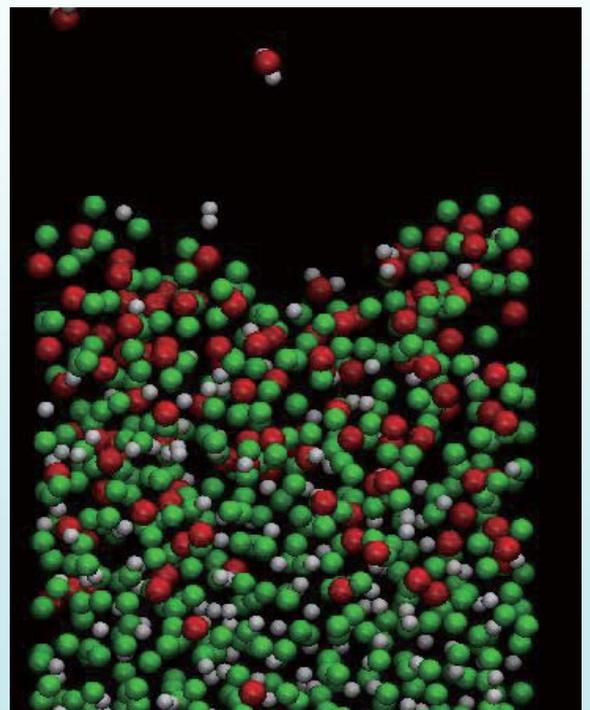
- 400K同様、表面の酸化膜が抑制する
- 水素の拡散及び発生量が増大
- 酸素の拡散も観察される



## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

800K(527°C)

- 酸化が内部まで進み、表面の結晶構造が崩壊
- 崩壊が更なる酸化と水素生成を誘起



## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### ・ジルカロイ vs. SiC

核燃料部会SWG2活動報告(東大・鈴木)資料より

燃料被覆材		ジルカロイ						SiC
材料特性		↓	ステンレス鋼	Ni基合金	Ti合金	Nb合金	V合金	↓
核特性	中性子経済性	◎	△	×	×	△	×	◎
	放射化	○	△	△	◎	△	◎	○
力学特性	強度	○	○	○	○	×	△	◎
	靱性	○	○	○	◎	○	○	×
照射特性		○	○	△	△	△	△	△
腐食特性 (運転時)		◎	○	○	○	△	△	△
水反応による 水素発生と発熱 (1200℃以上)		×	×	×	△	△	△	◎
実炉実績		◎	○	-	-	-	-	-

◎:非常に優れている、○:優れている、△:改良の必要あり、×:劣っている

高温での水蒸気酸化による発生水素量に大きな違い

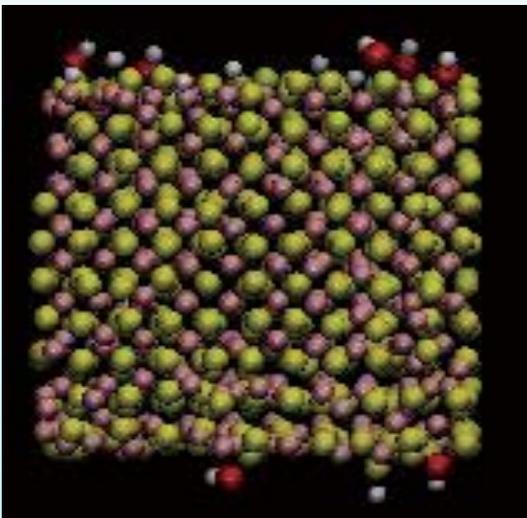


同等の条件下での比較

## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

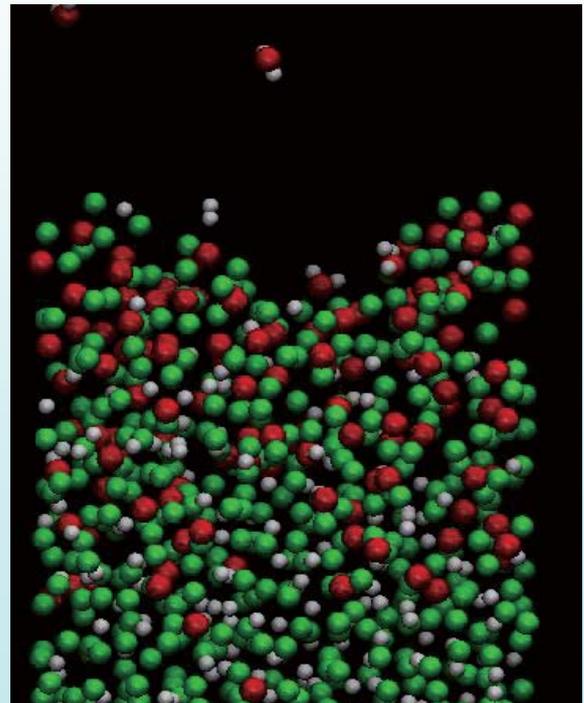
800K(527℃)

SiC



表面のみでの酸化に留まる

Zr



酸化が表面から内部へ

## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

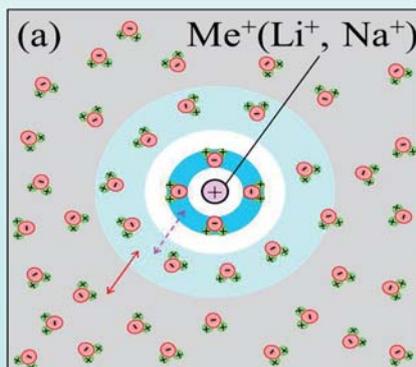
現在進行中の研究(炉内事象関連)

- 核燃料高温熱物性 (第一原理計算)
- 核燃料高温融解特性 (第一原理MD/古典MD)
- アクチナイド水和化合物 (第一原理MD)

## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### 環境中のセシウムの化学形態

- 水中溶解陽イオン       情報の不足
- 粘土鉱物、有機物、生体物質への吸着形態

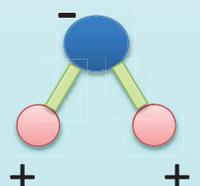


水和構造

セシウム: 陽イオン ( $\sim +1$ )

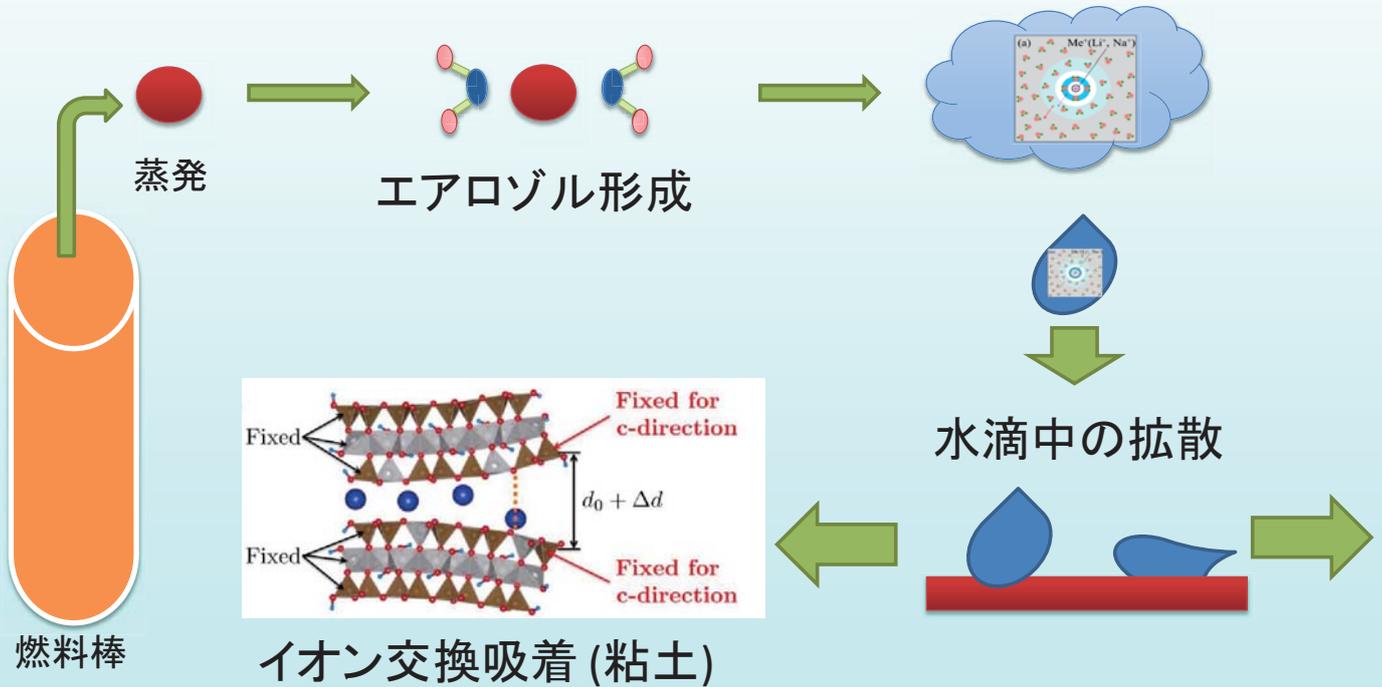


水分子: 極性分子



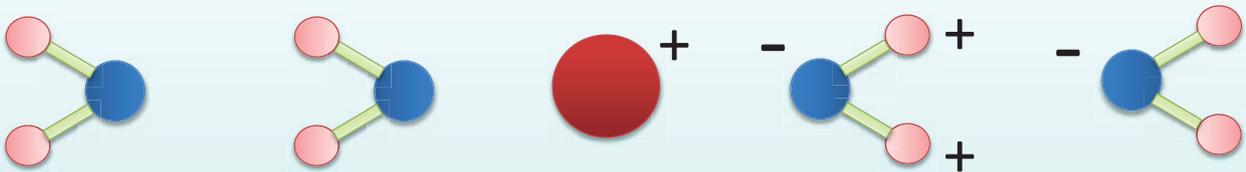
## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### 原子炉から放出された揮発性元素(セシウム)の変遷

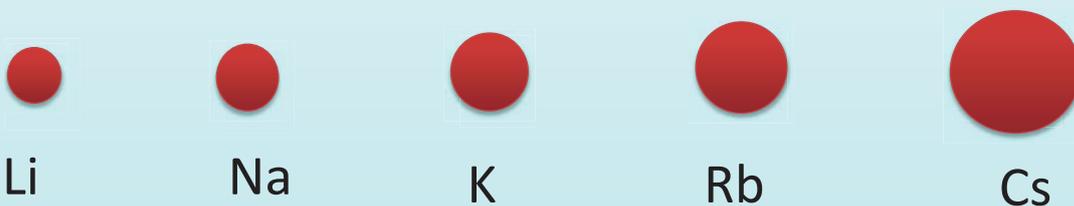


## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

・水分子はどれほど強くイオンと結合するか？



・セシウムは原子半径が大きい



表面電荷は右に行くにつれ小さくなる

## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

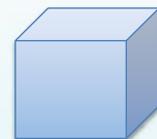
### シミュレーション手法

- 1, 古典分子動力学
- 2, QM/MM
- 3, Car-Parrinello 第一原理分子動力学
- 4, Born-Oppenheimer 第一原理分子動力学 (BOMD)

## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### BOMD(VASP)

周期境界条件



- 63 水分子と 1セシウム イオン
- 複数の交換相関汎関数を用いた比較計算

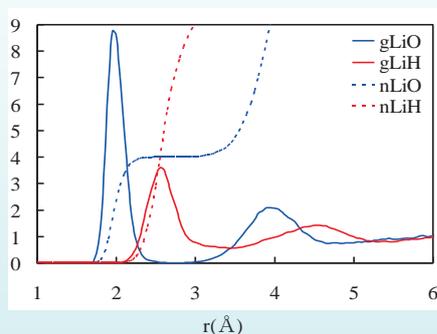
LDA, PBE, optPBE, and BLYP + van der Waals Correction

- 40psの観測計算 (128コアで数週間)
- 動径分布関数 (水分子の配位)

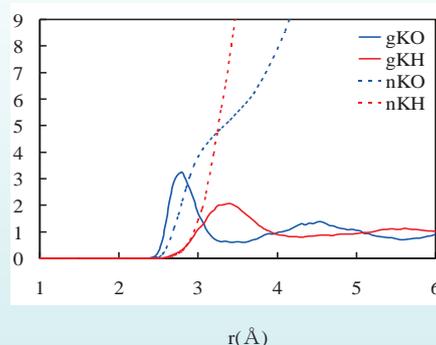
## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### • 動径分布関数(Li~Rb)

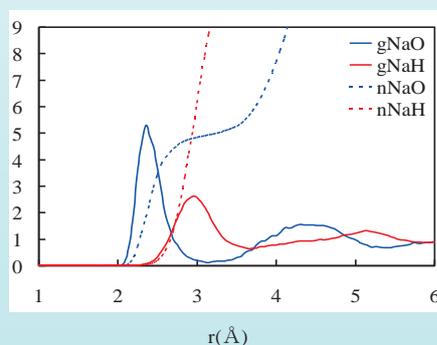
Li



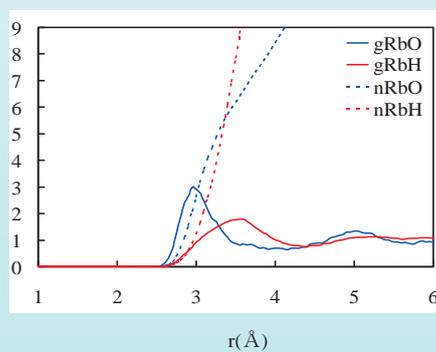
K



Na



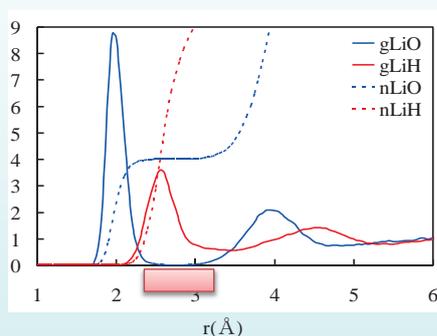
Rb



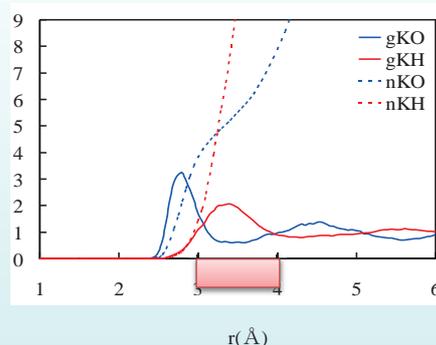
## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### • 動径分布関数(Li~Rb)

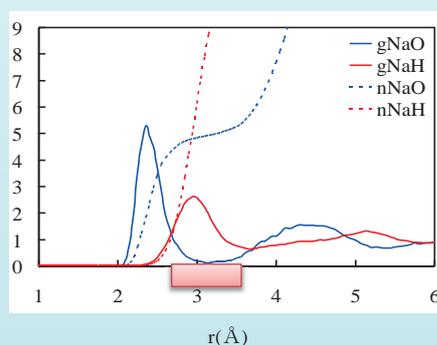
Li



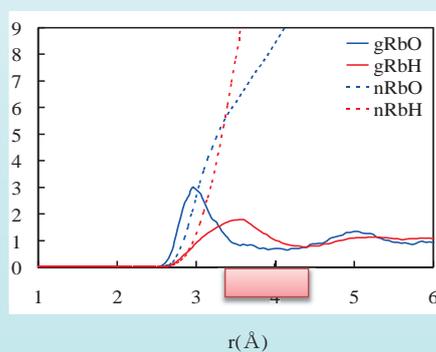
K



Na

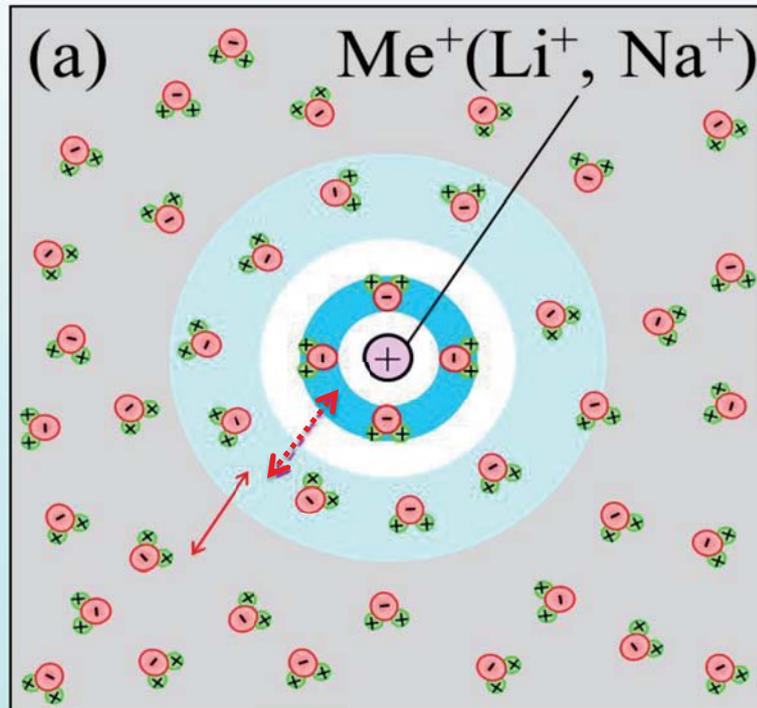


Rb



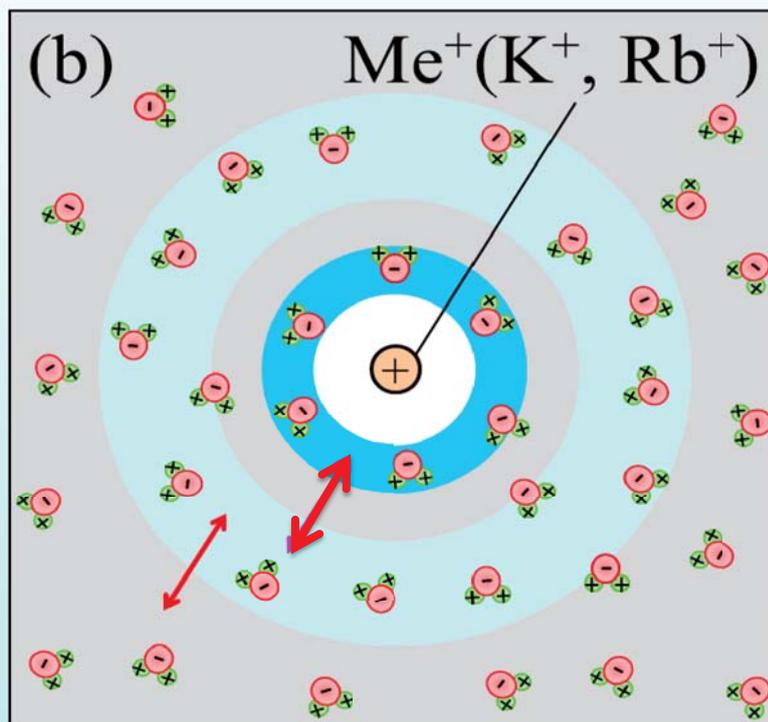
## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### • 動径分布関数 ( $\text{Li}^+$ , $\text{Na}^+$ )



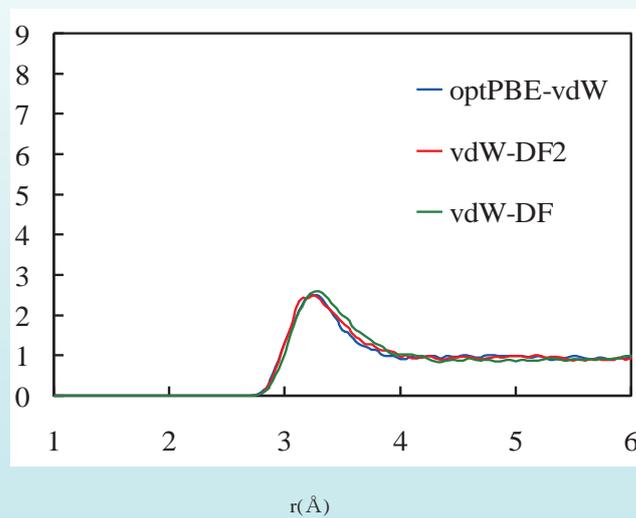
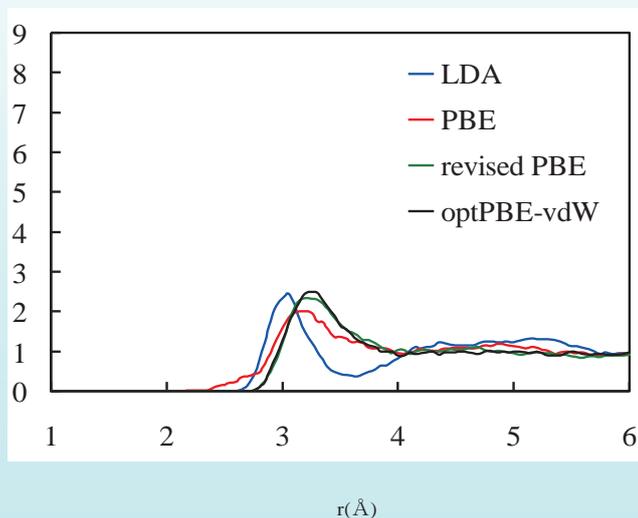
## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### • 動径分布関数 ( $\text{K}^+$ , $\text{Rb}^+$ )



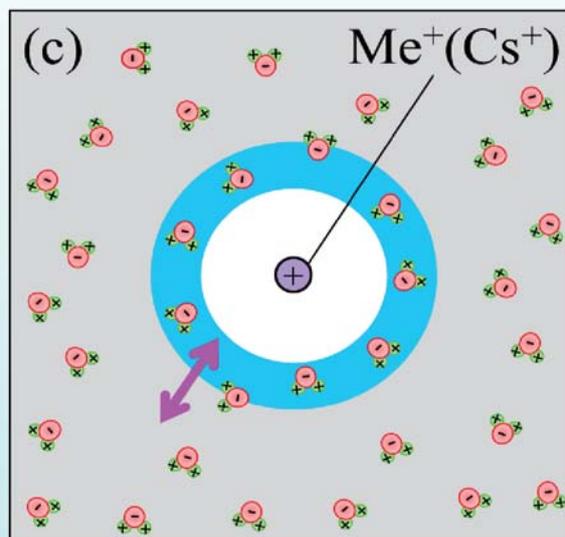
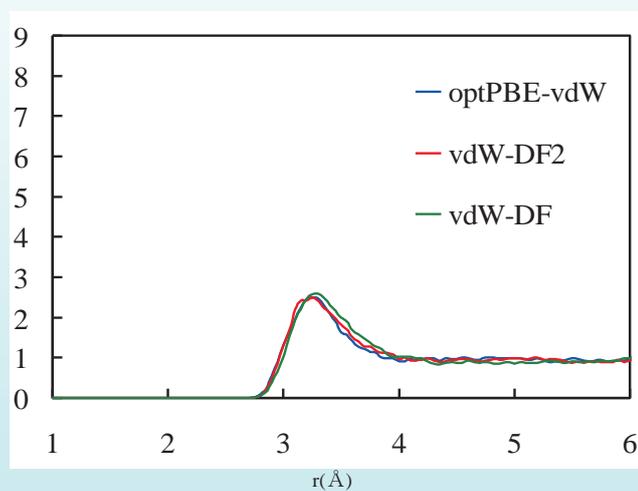
## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### • 動径分布関数 ( $\text{Cs}^+$ )



## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### • 動径分布関数 ( $\text{Cs}^+$ )

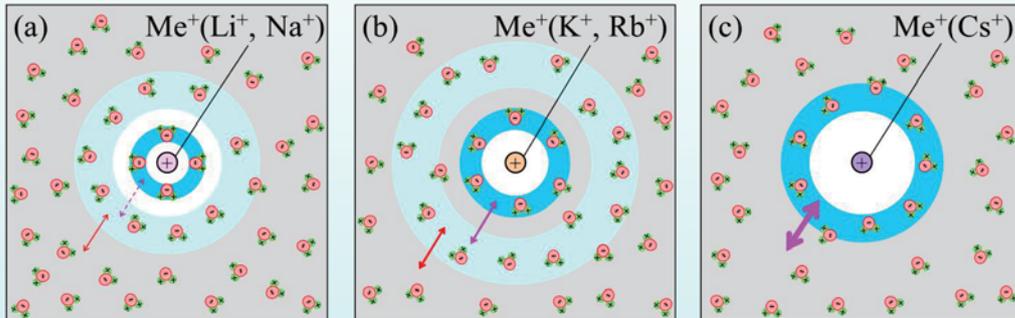


新知見:

第2水和殻が完全に消失

## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

### • 動径分布関数(アルカリ陽イオン)



Csのみ第2水和殻を持たない。

Csは最も水和半径の短いイオン(原子半径は最大)

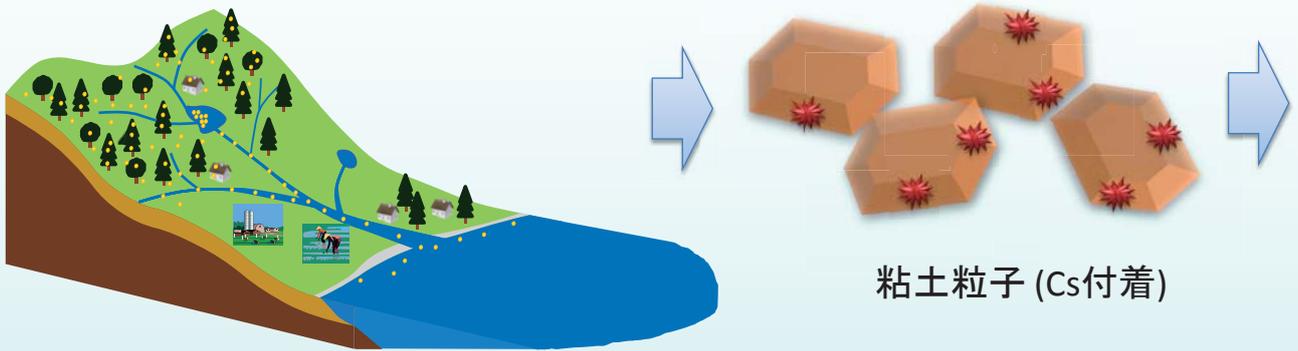
様々な環境中での特異的振る舞いの起源となっている

## 2、微視的シミュレーションの現状と展望

現在進行中の研究(環境中化学形態)

- $\text{Sr}^{2+}$ の水和構造 (BOMD)
- トリチウム水分子と通常水分子の比較 (PI-BOMD)
- Csの粘土鉱物吸着形態 (FP)
- Csの有機物(生体物質)吸着形態 (MD)

### 3、環境システムミュレーションの現状と展望



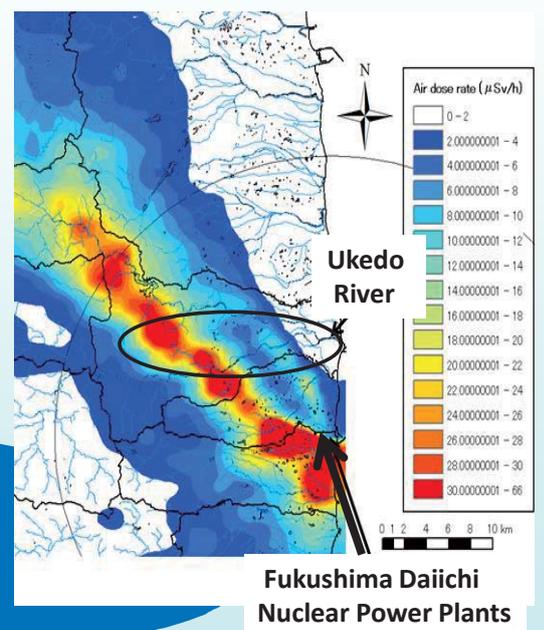
#### Cs附着粘土粒子の動態

科学的ゴール：Cs動態を把握し予測すること

最終ゴール：Cs 被ばくリスクを最小化すること

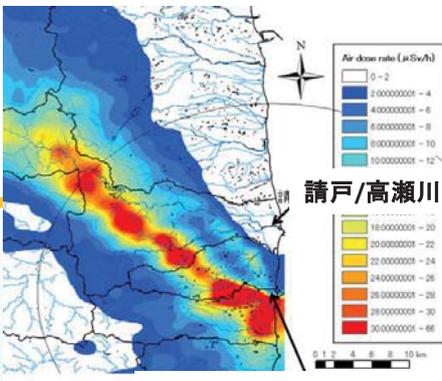
### 3、環境システムミュレーションの現状と展望

#### 福島太平洋沿岸地域(河川)の特徴



河川によりCsが運ばれ低汚染地域の再汚染が危惧される

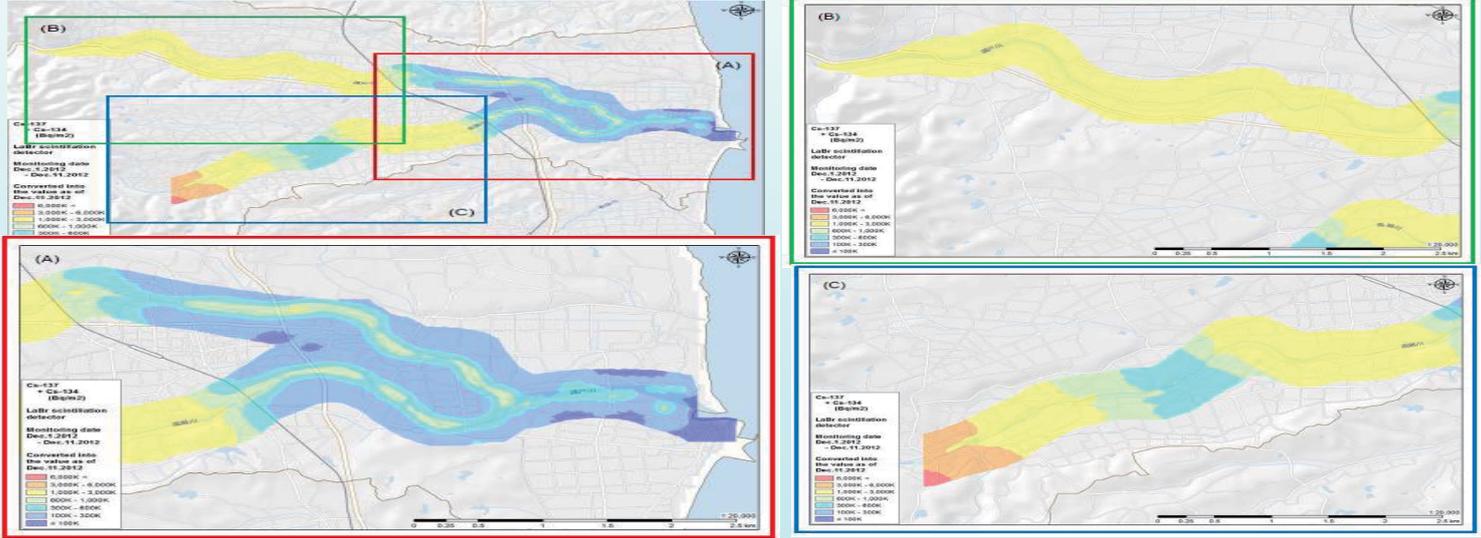
# 請戸/高瀬川



JAEA HPより

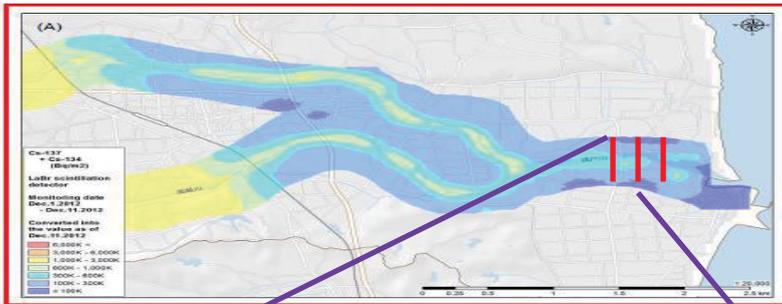
Fukushima Daiichi Nuclear Power Plant

## リモート制御の無人ヘリによる空間線量地図



観測データが示す河川敷の再汚染

## 請戸/高瀬川の地上での詳細線量測定



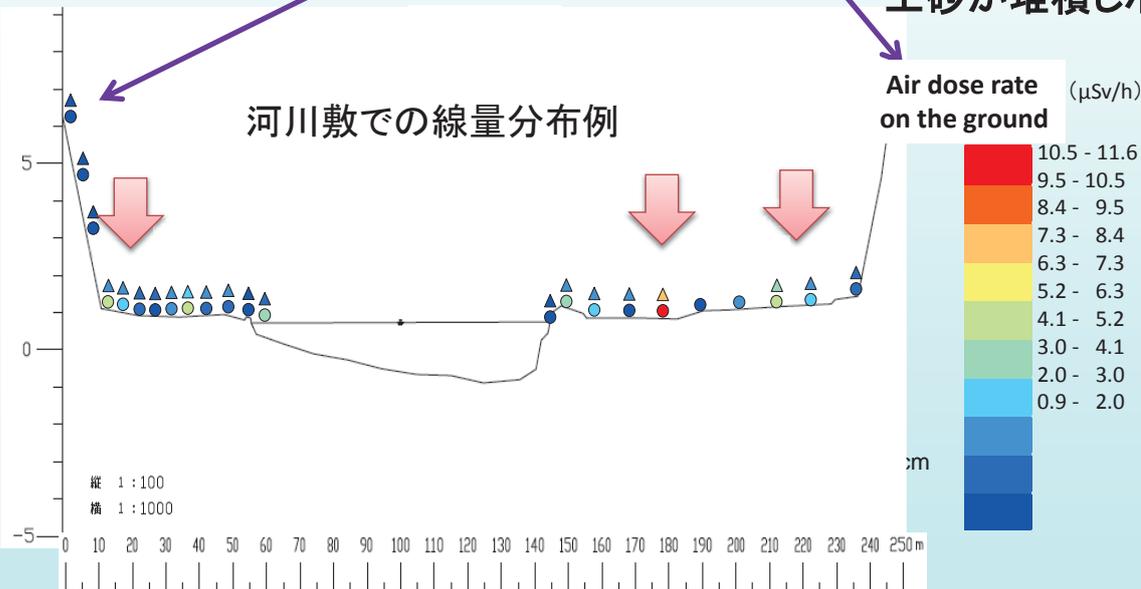
台風等による洪水によって  
河川敷まで水位が上昇



植生等の影響により河川敷に  
土砂が堆積しホットスポットを形成



周囲より10倍もの  
高いスポット形成



JAEA HPより

# シミュレーション手法

コード: IRIC (International River Interface Cooperative)



Nays2D



2次元河川シミュレーションコード  
河川横断面情報



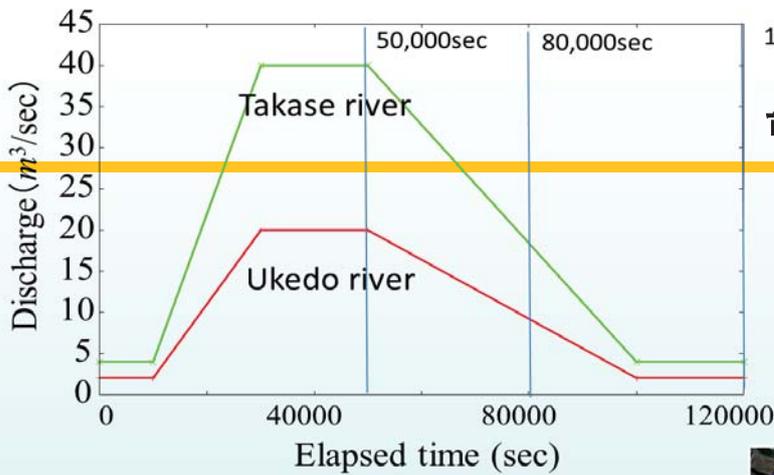
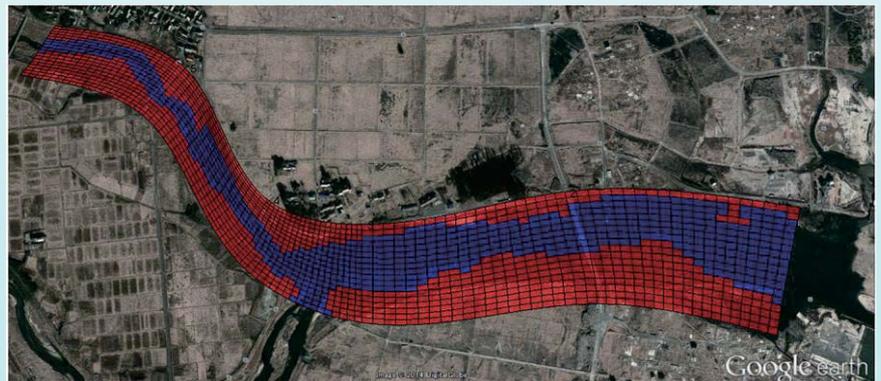
## 計算格子

- ・2D 自由曲線格子
- ・流入境界条件

- 水量
- 土砂量

## 植生分布

- 青: 川底 (植生なし)
- 赤: 河川敷 (植生あり)



120,000sec

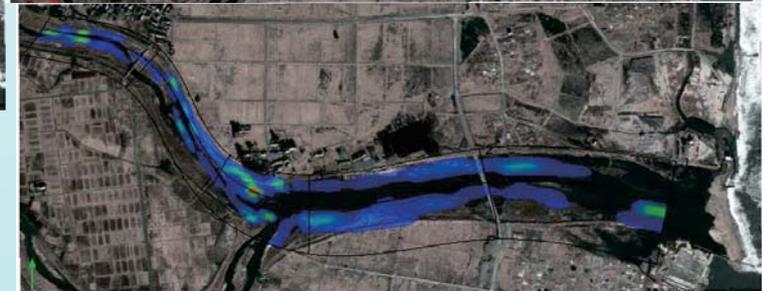
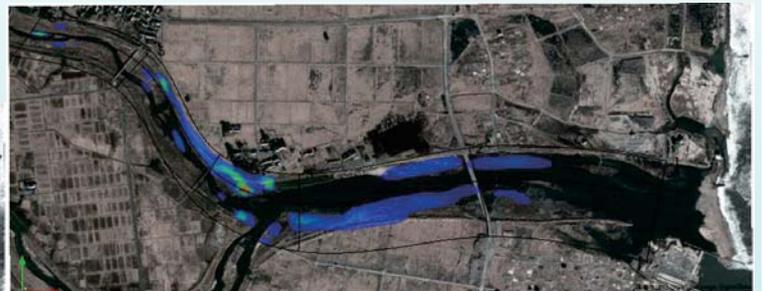
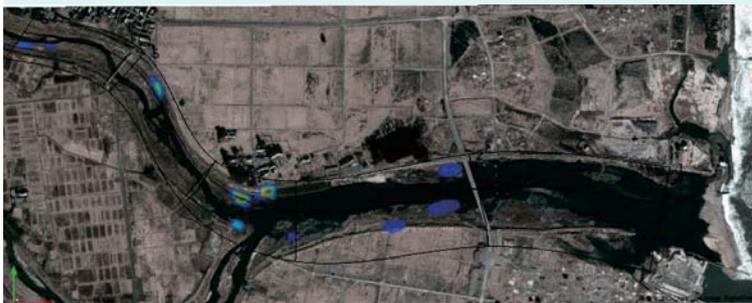
## シミュレーション条件

台風通過後の洪水量(土砂量)をインプットに

台風通過後 5~20×通常の流量



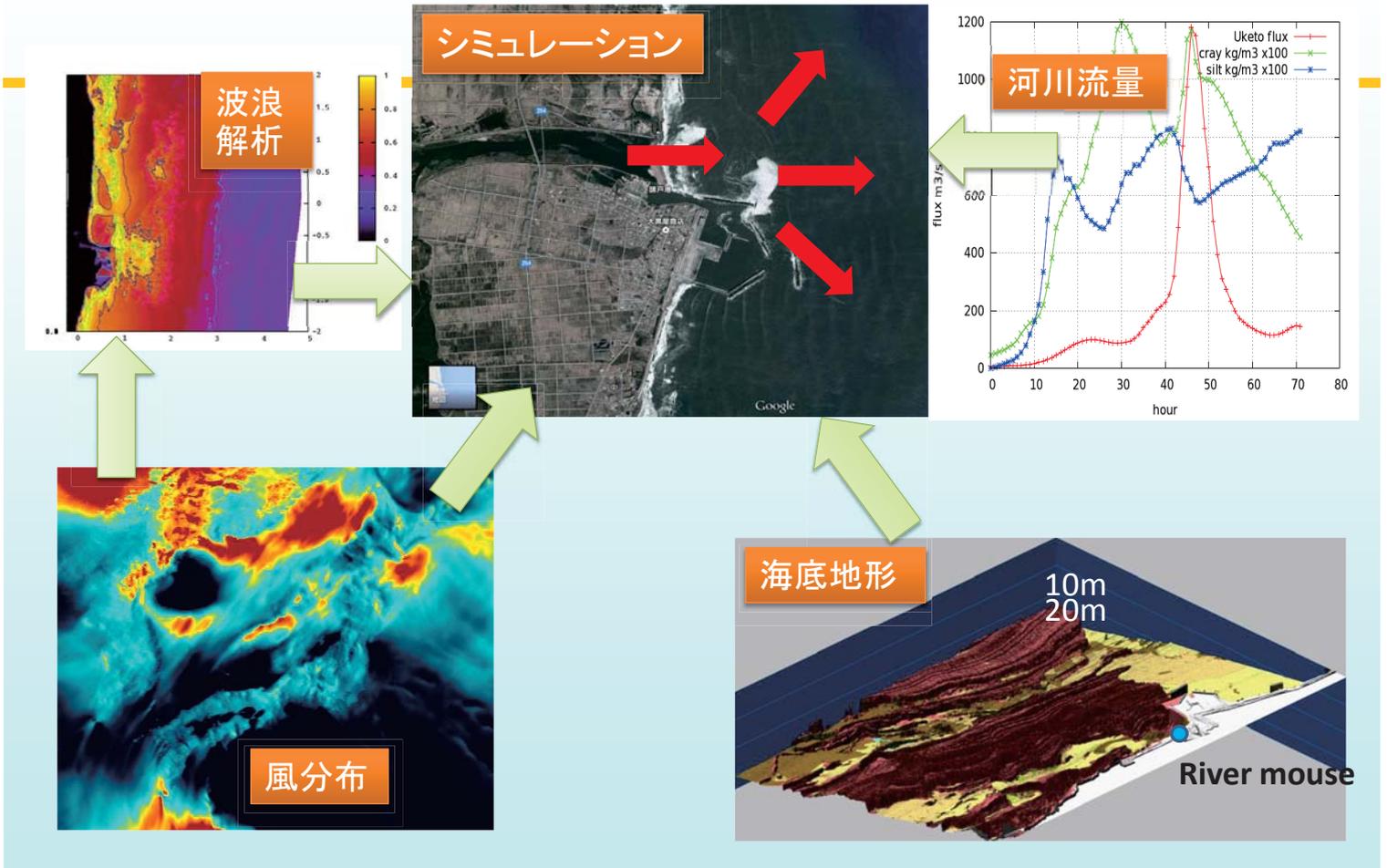
水位レベルは河川敷を覆う程に



洪水終了時期に多くが堆積する

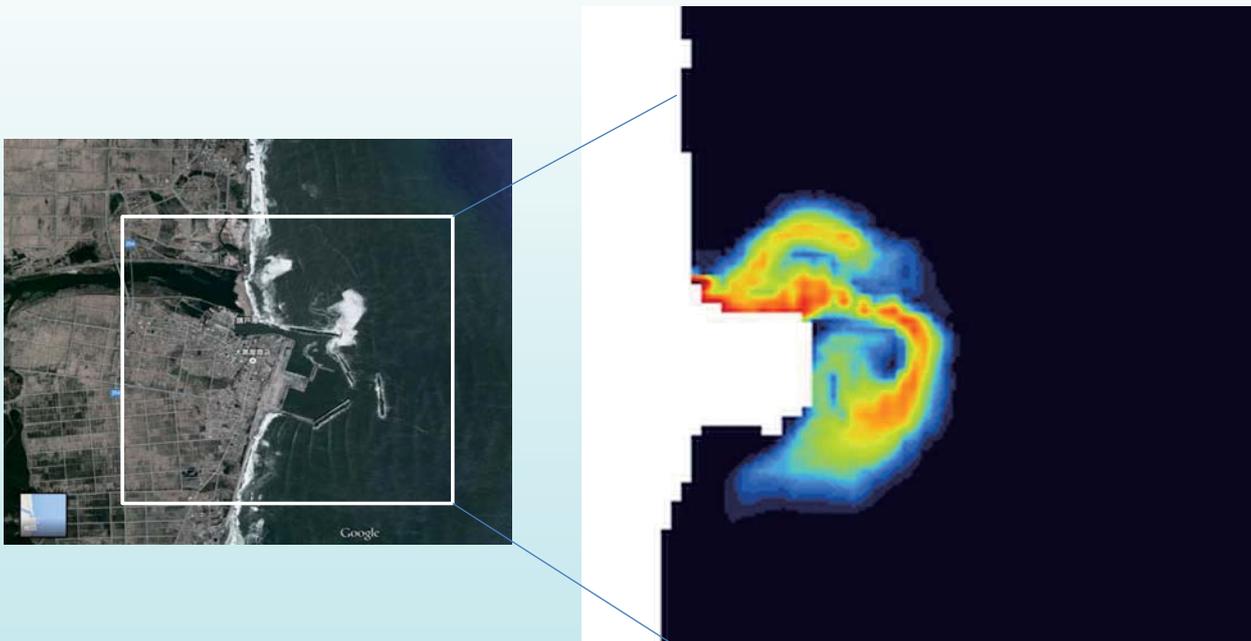
# 計算手法

フリーソフト: Regional Ocean Model Systems (ROMS)



## 3次元沿岸解析

河川由来の土砂の堆積分布状況(台風通過後)



堆積分布は風、潮流、温度、河川流量(土砂量)に依存して決まる。

### 3、環境システムミュレーションの現状と展望

河川： 2次元シミュレーション(水流と土砂輸送)

洪水後の土砂堆積によるホットスポット生成メカニズムや分布予測



再汚染による被ばく低減と河川生態系への影響評価

河口/沿岸： 3次元シミュレーション(河川淡水流と土砂輸送)

沿岸でのセシウム動態予測に基づき沿岸域への影響評価が可能



沿岸での被ばく低減と沿岸生態系への影響評価

### 4、まとめと結論

原子力分野の複雑現象：

#### マイクロレベルのシミュレーション研究

- ・計算科学特有の着実な成果(知見)が期待できる
- ・基礎的知見を必要とする重要課題の選択

- ① 化学反応分子動力学+マルチスケール解析(燃料棒構造健全性評価)
- ② 構造材料の過酷事故解析

- ① セシウムと生体有機物との相互作用(化学形態)
- ② トリチウム水の物性高精度評価(物性の違い)
- ③ アクチナイド元素の水和構造評価(化学形態)

## 4、まとめと結論

原子力分野の複雑現象：

### マクロなシステムレベルのシミュレーション研究

- ・モデル、観測/実験データの誤差、内在的予測不可能性
- ・環境シミュレーション⇒生態系への影響評価
- ・炉内シミュレーション⇒放射性物質のトレースと放出量評価

- ① 森林生態系、河川・湖沼・沿岸生態系への影響(モデル)
- ② 様々な過酷事故に対する主要揮発性(不揮発性)元素の放出量評価