

## 原子力研究開発を支えるシミュレーション技術と計算機技術

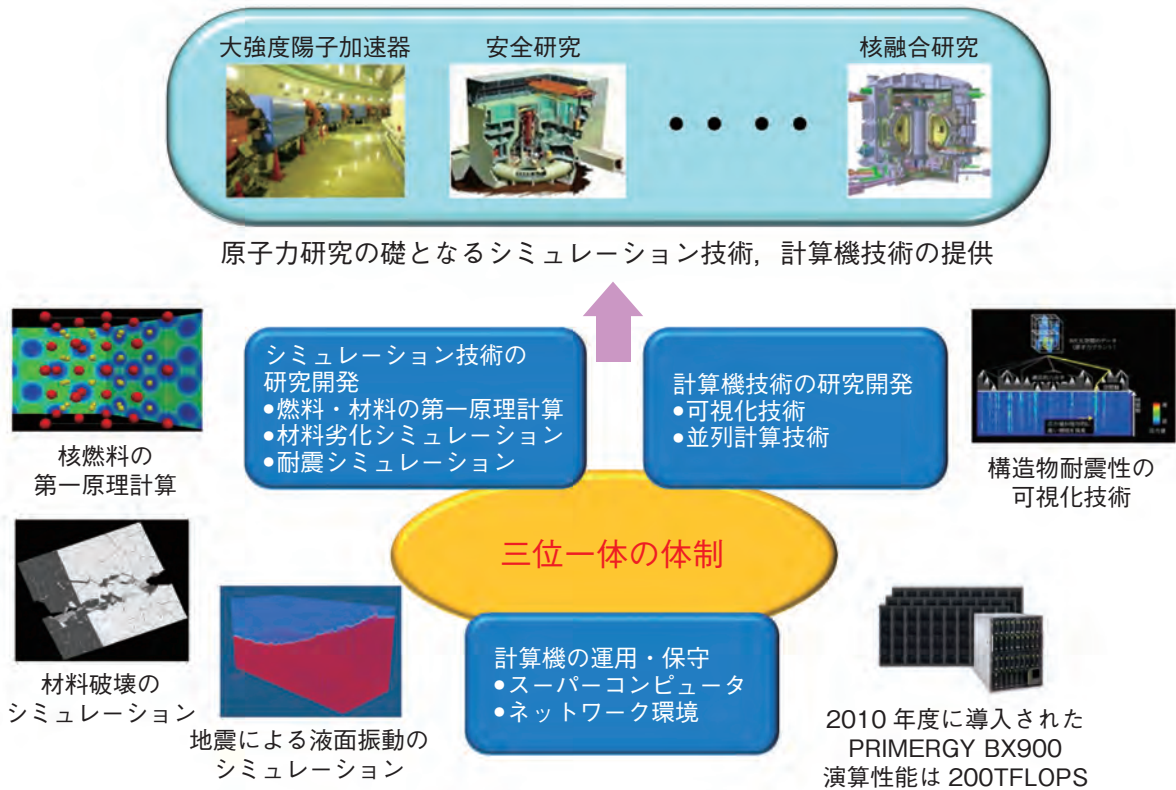


図10-1 原子力研究と私たちが進めるシミュレーション技術・計算機技術研究開発との相関  
 シミュレーション技術, 計算機技術及び計算機の運用・保守を通して原子力研究の様々な分野で先導的な役割を果たしています。

計算科学は理論・実験に次ぐ第三の科学として、大いに期待されており、国家プロジェクトとして演算速度で世界一の次世代スーパーコンピュータ「京」が開発されるなど、従来とは比較にならない計算機環境が実現しています。システム計算科学センターでは、2010年度に新規導入したスパコンの運用・保守を担うとともに、計算科学を原子力研究開発に役立てるための「シミュレーション技術の研究開発」及び「計算機技術の研究開発」を推進しています（図10-1）。

現在、原子力研究開発では、軽水炉の高経年化対策、燃料サイクル技術の確立、そして耐震評価等が極めて重要な分野となっており、「シミュレーション技術の研究開発」では、これらの分野で計算科学技術が解決の鍵になりうる課題を選定して取り組んでいます。

高経年化対策では、原子炉構造材料の劣化メカニズムの解明と脆化予測が鍵です。これには、電子レベルの量子力学的計算が可能な第一原理計算、原子間相互作用モデルによる分子動力学計算等を駆使し、メゾ・マクロなスケールで起こる破壊シミュレーションのための基礎データを取得します。トピックス10-1では上記原子間モデルを作成するための第一原理計算の研究例を紹介し

燃料サイクル技術の確立では、マイナーアクチノイドを含む核燃料化合物の物性予測が鍵を握ります。しかし、核物質を取り扱う実験は制限が厳しく、その大きなコストも無視できません。トピックス10-2では、第一原理計算により二酸化プルトニウムの物性を正しく再現した例を紹介します。これは計算科学による物性予測の第一歩となるものです。

耐震評価では、巨大地震による使用済燃料プールからの放射性を帯びた水の溢流や、流体圧力によるプール及び付随構造物の損傷が危惧されるため、水面や壁面近くの乱流をより精緻に評価可能な解析モデルを開発する必要があります。トピックス10-4では、実験結果を従来モデルと比べ格段に良く再現することに成功した成果を紹介し

「計算機技術の研究開発」では、原子力機構内外の様々な原子力研究開発において、最先端の計算機技術の有効活用を支援しています。例えば、最新の可視化技術を使えば、大量データの高速な解析が可能となります。トピックス10-3では、その可視化技術を用い、地震により、構造物のどこに比較的大きな力がかかるかを調べたり、地震波動と応力値変動の関係を視覚的に捉えたりする研究を紹介し