

超高流束協奏材料ユニット 質疑応答

『取り組み・成果概要』（田中照也）

『照射効果のモデリングによるタングステン材料内トリチウム蓄積挙動予測／先進シンチレーションファイバーを利用したトリチウム水計測技術開発』（小林真）

『先進炉材料研究開発設備の構築開始について』（田中照也）

Q：（「照射効果のモデリングによるタングステン材料内トリチウム蓄積挙動予測」の発表に対し、）これまで、このようなモデリングは難しいとされてきたようだが、どのように改良しこのような計算が可能となったのか？

A：トリチウムと照射欠陥の相互作用を扱う理論モデル自体は以前から提案されていた。しかし、過去10年程度の間、照射欠陥とトリチウムの相互作用に関する理論研究が進展するとともに、イオン照射実験や先進計算科学による多くの知見が蓄積された。その結果、これらの知見を統合した形でモデル化し、実用的なシミュレーションコードとして実装することが可能となった。

Q：世界的な位置づけはどのようになっているのか？

A：照射欠陥の生成・成長・消滅を扱うダイナミクスモデルは、これまで原子力材料分野を中心に発展してきており、本コードもその研究成果を基盤としている。一方で、本コードでは欠陥サイズを効率的に取り扱うことで、大規模な欠陥まで対象とした解析を可能としている。また、トリチウムの移動・捕獲モデルと統合することで、照射損傷の発達とトリチウム蓄積挙動との関係を一貫して評価できる点が特徴であり、核融合炉材料におけるトリチウム挙動予測を目的とした先進的な取り組みの一つである。

C：（現在進めている高度分析装置群の整備に対し、）最先端の装置を運用して、外部の人にも利用してもらおうとなると、運用する専任職員、人材を配置してほしい。特に大学の共同利用装置群では運用・指導・教育などを行う専属の技術職員が数名いる。

A：加速器施設については稼働率が非常に重要であり、技術部の3名の職員とともに立ち上げ、運用を行っていく。一方の新しい分析装置群は非常に多機能のもので、様々な機能を専門的に活用していく必要があるが、研究者が常時はりついて対応するのには無理がある。専任技術者を雇用するための予算をとってくる等、どのようなやり方があるかを調査し、優先度の高い事項として取り組みたい。

Q：インフォマティクスの取り組みで、新装置で取得したデータは利用者が持ち返るのみではなく、NIFSで蓄えてデータサイエンスに活用するという契約にするのか？

A：取得したデータは他のグループには見せたくない、ということがあると思う。サーバーはNIFSに設置してデータを蓄えるが、他のグループからはアクセスできなくする、AI学習には使うがデータ自体は見れないようにする等、いくつか技術はあるようなので、このあたりのご専門の客員・原嶋先生とも取り組んでいく。

C : 昔からスパコンの世界でも、機械学習が出てきた20年ほど前に、様々なグループが行ったDFT計算結果をまとめて蓄えておくべきという議論はあったが、いろいろとハードルがあってそれができなかった。是非いいルールを作って花開かせてほしい。

A : データベースの運用・アクセスに関しては、慎重に制限をかける予定。その点は、客員教員の研究室の運用例を参考に慎重に検討していく予定。

Q : (「照射効果のモデリングによるタングステン材料内トリチウム蓄積挙動予測」の発表に対し、) 開発要素として、データ蓄積には有効だと思う。しかし時間的・空間的な違うパラメータが増えるため、違う階層や違う材料へのフィードバックがかからないように思える。これでは学術的な新材料研究には至らないのでは？

A : 現状のコード開発段階では、従来の材料照射マルチスケールシミュレーションと同様に、異なる時間・空間スケール間のギャップを十分に埋められているとは言えない。そのため今後は、データ同化技術を導入し、階層間でデータを受け渡す際に生じる不確かさやギャップを定量的に評価し、補正する手法の開発を進める予定である。特に、電子顕微鏡では直接観察が困難な微小な照射欠陥についても、水素同位体の捕獲サイトとして重要な役割を果たすことが知られていることから、水素同位体の捕獲密度を新たな指標として活用することで、階層間の情報補完やモデル補正の精度向上を図りたいと考えている。このように、水素同位体挙動を利用してマルチスケールモデル間の整合性向上を目指す点は、本研究の特徴の一つである。一方で、実験データや基礎物性値が十分に存在しない未知材料への適用については、現時点では依然として課題が残されている。明確な解決策を確立している段階ではないが、未知材料中のトリチウム挙動を予測可能とすることは、星PMが代表を務めるムーンスロット事業における開発目標の一つとして位置付けられており、今後取り組んでいく予定である。

C : 研究の学術的特徴が明確になっており、大変興味深い。今後の発展に期待している。