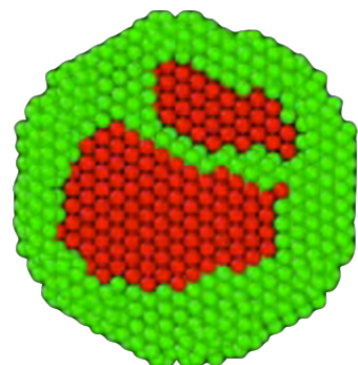
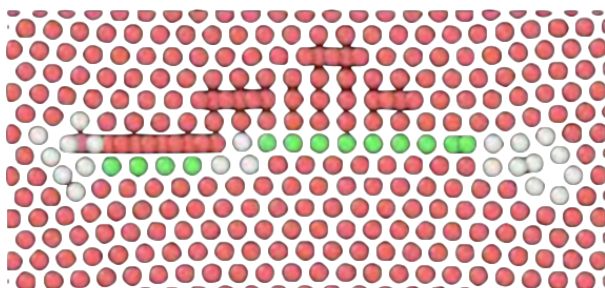
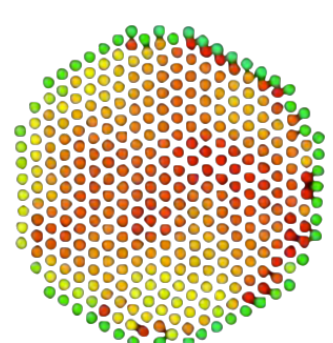
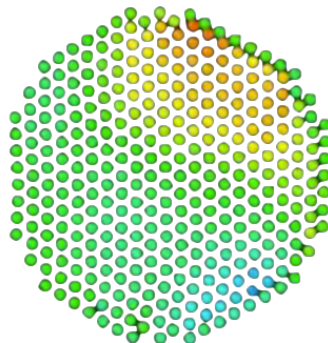
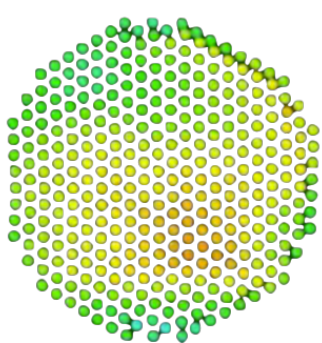


Computational Science & Engineering

計算科学技術部会 ニュースレター 第35号
AESJ-CSED NEWSLETTER (No.35)
March 2021

軽水炉燃料被覆管中の照射誘起欠陥挙動とその形態変化の可視化

Visualization of irradiation-induced defect behavior and its morphological change in LWR fuel cladding



日本原子力学会 計算科学技術部会
ニュースレター 第 35 号

2021 年 3 月

| | |
|--|----|
| 1. 巻頭言 | |
| 2020 年度国際会議準備小委員会委員長 大谷 孝之 氏 | 1 |
| 2. 2020 年秋の大会 計算科学技術部会 全体会議 開催報告 | |
| | 4 |
| 3. 2020 年秋の大会 計算科学技術部会 一般セッション報告 | |
| | 5 |
| 4. 2021 年春の年会 計算科学技術部会 部会賞表彰式 全体会議開催案内 | |
| | 8 |
| 5. 2021 年春の年会 計算科学技術部会 一般セッション開催案内 | |
| | 9 |
| 6. 2021 年春の年会 計算科学技術部会 企画セッション開催案内 | |
| | 12 |
| 7. 講習会・ワークショップ等の開催報告・連絡事項等 | |
| | 13 |
| 8. 年間予定 | |
| | 14 |
| 編集後記 | |
| | 15 |

表紙図提供：安達 悠希也 氏（ヤフー株式会社）

（2019 年度 計算科学技術部会 CG 賞）

燃料被覆管に使用されるジルコニウムを対象とし、分子動力学計算によって、空孔集合体が c -ループに変換する過程における原子挙動を解明することに成功した。

本手法により、空孔集合体は極めて短い時間で c 軸方向への変位を開始し、その後面内 a, b 方向への変位が始まって積層欠陥が形成し、徐々に拡大していくことで c -ループ形成が完了することを解明した。

巻頭言

寄稿

SNA+MC2020 逡巡奇譚

～ それでも裏方のすすめ ～

2020 年度国際会議準備小委員会 委員長

大谷 孝之

計算科学技術部会主催の国際会議 SNA+MC2020 の決算がほぼ終了し、現在、剰余金の処理を進めています。COVID-19 の感染拡大の影響を受け幕張メッセで予定していた会議は中止となり、プロシーディングでの発表に変更となりましたが、紆余曲折を経て、懸念された赤字を回避して、全ての事務を完了する見込みです。

3 月 18 日の部会全体会議でも報告する予定ですが、時間の関係から詳細はお話しできませんので、ニュースレターの誌面をお借りして、今回、事務局が戸惑い、逡巡した様子を紹介するとともに、国際会議の裏方は面白い経験ができるという話をさせていただければと思います。

2019 年 12 月、Call for Paper の締切日を 2 度延期したが、我が国を含め 22 か国から 250 件ほどの発表が集まり、順風満帆に国際会議の準備は進んでいた。しかし、年が明けると、雲行きが怪しくなった。COVID-19 の世界的な感染拡大である。

2020 年 2 月 21 日、本来は会議開催前の最終確認の会議となるはずであった第 2 回 SNA+MC2020 組織委員会は、予定通り会議を開催できるのか、揺れていた。この時点で、開催まで 1 か月を切っていた日本原子力学会春の年会もどうなるか決まっていなかった。我々だけでなく世界中が逡巡していた。結局、開催の可否については、計算科学技術部会で検討を継続することになった。

計算科学技術部会の茶木部会長（当時）のもと、検討が続いた。事務局は、「開催」、「延期」、「中止（参加予定者には返金する想定）」のそれぞれ場合の計画変更案の検討とその場合の費用の概算を急いだ。

そうしているうちにも日に日に状況が悪化し、予定通りの「開催」は絶望的となった。オンラインで

の開催も検討したが、多国間の会議となるためどの時間帯で開催するのか、そのための体制を整えるための追加費用などで難しい状況だった。

「延期」に関しては、幕張メッセで延期する場合は 2021 年 2 月への延期となることが判り、ウィルスの活動期は避けたいという意見が大勢を占めた。それ以降の時期については、幕張メッセで五輪関連行事が予定されていた（当時それがどうなるか不明瞭）ため、幕張メッセも予定が立たない状況だった。幕張メッセ以外で（大学を借りるなども含め）開催することも検討したが、千葉の国際会議開催補助金※がもらえなくなるため赤字額が増大してしまう。

※千葉県と千葉市あわせて最大 600 万円（会期 3 日以上、参加者 100 人以上、外国人 40%以上等の諸条件あり）。サポート体制も充実しており、ちば国際コンベンションビューローという財団がサポートしてくれる。

赤字額を最小限にできるのは「中止」という選択肢だった。どうにかして赤字額をゼロに（近づけることが）できないか。

最初に調整したのは協賛企業。協賛金をいただいていた株式会社日立製作所、日本ヒューレット・パカード株式会社、東芝エネルギーシステムズ株式会社、一般財団法人高度情報科学技術研究機構の 4 社に「仮に開催中止になった場合、協賛金は返還しないといけませんか」と涙目で聞いた。「寄付金として出したので返金不要」、「協賛の特典は web ページや配付資料での宣伝だったので、それが（形が変わっても）履行されれば社内を説得できる」など、いずれも有難いお返事をいただいた【本当にありがとうございます】。

次に事務局支援業務を請け負っていた株式会社 JTB。参加申込みやアブストラクトの受付など既に実施済みの業務については、さすがに踏み倒せない。幕張メッセで使用するはずだった機材や人員など今後の業務は全てキャンセルすることで調整した。しかし、会期中に受付業務等を行う予定で確保していた人員については一定のキャンセル料が発生するというので、今後の業務に係る費用をゼロにはできなかった（機材についてはキャンセル料なしで調整がついた）。

あとは会場である幕張メッセ。COVID-19 という特殊事情であることを訴え、キャンセル料の免除をお願いしたが、回答は「今回のキャンセル料は規定どおりにいただきます。COVID-19 の事情を踏まえて、延期された場合の会場借料を（現時点では具体的にいくらとは約束できないが）値引きすることを検討させていただきます。」というものだった【目前のキャッシュフローは確保しないといけないものねえ・・・（いまにして思うと 2021 年 2 月に延期しなくて正解だった）】。その後、2020 年 4 月 7 日に緊急事態宣言が発出されても（SNA+MC2020 は 5 月 18 日開幕予定だったため）キャンセル料免除にはならなかった。

結局、中止にしても 300 万円ほどの赤字が想定された。この赤字を埋める方策が検討された。既に投稿されたアブストラクトを書籍化し販売することで 300 万円集めようとか、会議は中止するがセレクト

ッドペーパーに掲載される人は参加費を取る（返金しない）ようにしようとか、現在口座にある協賛金と日本原子力学会からの借入金を元手にギャンブルか投資で増やすのはどうか・・・【もちろん最後は冗談ですけど】・・・いずれにせよ、参加予定者の意向を踏まえて考えようということになり、電子メールによる意向調査が行われた。

意向調査の結果、プロシーディングが配付されるなら参加費を払ってもよいという方が相当数いて、300万円の赤字が解消される見込みが立った。こうして、幾多の逡巡の末、SNA+MC2020は再び動き出した。

その後、2020年5月4日になると緊急事態宣言の延長が発出され、千葉県については5月31日まで緊急事態措置が継続することになった。そして5月12日、幕張メッセより「緊急事態宣言延長を受けてキャンセル料を免除します。」との連絡が届いた。【ん、逆に余る？】

私の文章力が拙いため、事務局の奮闘を書いたように思われるかもしれませんが、全くそうではありません。協賛企業が協賛金をそのままにしてくれたのも、参加予定者への意向調査で参加費を払うと回答してくれた方が相当数いたのも、すべて計算科学技術部会がSNA+MC2020国際会議などの取組を通して、社会に貢献しようとしていることが認知されているからです。今回に限らず、会議やイベントの開催には、大なり小なり計算ミスや想定外の出来事は発生しますが、多少右往左往しながらも、結局は、計算科学技術部会の活動に賛同し、温かく見守ってくれている方が多数いるということに救われてきました。逆にいえば、これから先、今回のような苦難が再びあったとしても、必ず何とかなることでしょう。だから、臆せず楽しんで、多くの方に（特に若い方には）国際会議等のイベントの裏方をやってみていただきたいと思います。

ここから裏方ならではの面白さをお伝えしたいと思っておりましたが、誌面が足りなくなりました・・・。もっと詳しく聞きたいという場合には、日本原子力学会春の年会でオンライン展示に参加します（日本原子力研究開発機構で開発したソフトウェアの検索方法、利用申込方法を紹介します）ので、その時にでもzoomでお声がけください。

オンライン展示については下記参照（会期中は質問用zoomのリンクも表示されます）。

<https://confit.atlas.jp/guide/event/aesj2021s/exhibitor/300/list/ja>

以上

2020 年秋の大会 第 28 回計算科学技術部会全体会議

開催報告

1. 日時：令和2年9月17日（木） 12:10～12:50

2. 場所：オンライン

3. 議事次第

全体会議

1) 部会長挨拶

光安部会長より挨拶が行われた。

2) 小委員会活動報告

各小委員会の委員長より上期の活動について報告された。

a. 総務小委員会

b. 企画小委員会

c. 広報小委員会

d. 出版・編集小委員会

e. 経理小委員会

f. 国際会議準備小委員会

g. 表彰小委員会

3) 受賞者挨拶

新型コロナウイルス感染防止のために昨年度の春の年會が開催されなかったため、昨年度の部會賞受賞者を代表して、部會業績賞受賞者の巽雅洋様（原子力エンジニアリング）と部會功勞賞受賞者の堀田亮年様（原子力規制庁）からご挨拶を頂いた。

4) 告知等

全体會議終了後に行なわれる、計算科学技術部會セッション「国際的な計算コード・データベースの活用に関する枠組みと今後の展開」、および、計算科学技術部會の一般セッションの告知がなされた。

以上

2020 年秋の大会 計算科学技術部会 一般セッション報告

○計算科学技術（分子動力学・機械学習 1）

2020 年 9 月 17 日（木）10:00～11:05 J 会場（Zoom ルーム 10）（座長：関西大 岩田順敬）

2J01 : Atomistic study to evaluate interactions between helium bubbles and an edge dislocation in iron

*Jie Zhan^{1,2}, Taira Okita¹, Minyou Ye², Yoshiyuki Watanabe³

(1. Univ. of Tokyo, 2. University of Science and Technology of China, 3. QST)

2J02 : A Multiphase MPS Method with Fluid-Solid and Solid-Solid interaction models for Simulating Melt Pool Formation inside RPV

*Guangtao Duan¹, Akifumi Yamaji², Seiichi Koshizuka¹, Mikio Sakai¹

(1. Univ. of Tokyo, 2. Waseda Univ.)

2J03 : 原子力材料の固液界面の第一原理計算

*板倉 充洋¹、海老原 健一¹、中村 博樹¹、奥村 雅彦¹ (1. JAEA)

2J04 : 機械学習分子動力学法による Zr 中の照射劣化挙動の解明

*寺山 怜志¹、沖田 泰良¹、板倉 充洋²、奥村 雅彦² (1. 東大工学系研究科、2. JAEA)

○計算科学技術（分子動力学・機械学習 2）

2020 年 9 月 17 日（木）11:05～12:10 J 会場（Zoom ルーム 10）（座長：JAEA 板倉充洋）

2J05 : 分子動力学法を用いた面心立方金属における析出硬化ナノメカニズム解明に関する研究

*津川 聖人¹、岩瀬 祐樹¹、沖田 泰良¹、早川 頌²、板倉 充洋³

(1. 東大、2. テネシー大学、3. JAEA)

2J06 : 分子動力学法を用いた非線形超音波成分のナノ構造依存性に関する定量化

*森 承宇¹、沖田 泰良¹、板倉 充洋² (1. 東大、2. JAEA)

2J07 : セメント水和物に対する機械学習分子動力学法による解析

*小林 恵太¹、中村 博樹¹、山口 瑛子^{1,2}、板倉 充洋¹、町田 昌彦¹、奥村 雅彦¹
(1. JAEA、2. 東大)

2J08 : AMD による対称核分裂成分の全運動エネルギーの研究

*陳 敬徳¹、張 旋¹、小野 章²、石塚 知香子¹、千葉 敏¹ (1. 東工大、2. 東北大)

○計算科学技術 (微視計算)

2020 年 9 月 17 日 (木) 14:45~15:55 J 会場 (Zoom ルーム 10) (座長 : 東大 酒井幹夫)

2J09 : 微視的平均場模型を用いた U-236 の核分裂経路を構成するエネルギーの分解

*藤尾 和樹¹、江幡 修一郎²、稲倉 恒法¹、千葉 敏¹ (1. 東工大、2. 埼玉大)

2J10 : 相対論的平均場理論における核分裂障壁の対相関依存性

*河野 大樹¹、藤尾 和樹¹、湊 太志²、稲倉 恒法¹、石塚 知香子¹、千葉 敏¹
(1. 東京工業大学、2. JAEA)

2J11 : TDDFT による原子核反応における散逸の研究

*西川 崇¹、岩田 順敬² (1. 原子力エネジ、2. 関西大)

2J12 : 核分裂片変形度と即発中性子多重度の相関

*張 旋¹、藤尾 和樹¹、江幡 修一郎²、Fedir Ivanyuk³、石塚 知香子¹、稲倉 恒法¹、
千葉 敏¹ (1. 東工大、2. 埼玉大、3. キエフ原子核研究所)

○計算科学技術 (シミュレーション・解析)

2020 年 9 月 17 日 (木) 15:55~17:05 J 会場 (Zoom ルーム 10) (座長 : 東大 沖田泰良)

2J13 : 粉体混合機の最適化のための離散要素法シミュレーション

*横山 莉奈子¹、酒井 幹夫¹ (1. 東大)

2J14 : 特異値分解と深層学習を用いた炉心燃焼度分布の予測

*高野 渉¹、木間 暁¹ (1. GNF-J)

2J15 : MCCI における金属コリウム凝固偏析挙動の MPS 法による予備解析

*福田 貴齊¹、山路 哲史¹、Xin Li¹ (1. 早稲田大)

2J16 : 統計的安全評価における代替統計モデルの適用

*木下 郁男¹ (1. 原子力安全システム研究所)

以上

2021年春の年会 計算科学技術部会

部会賞表彰式 全体会議 開催案内

1. 日時： 令和3年3月18日（木） 12:10～12:50

2. 場所： C会場（Zoomルーム3）

3. 部会賞表彰式

4. 全体会議

（1）部会長挨拶

（2）小委員会下期活動報告

a. 総務小委員会

b. 企画小委員会

c. 広報小委員会

d. 出版・編集小委員会

e. 経理小委員会

f. 国際会議準備小委員会

g. 表彰小委員会

（3）次期役員選出

（4）次期部会長挨拶

（5）告知等

以上

2021 年春の年会 計算科学技術部会

一般セッション開催案内

シミュレーションコード開発

日時：2021年3月18日(木) 09:30~10:45 C会場 (Zoom ルーム 3)

座長 岩田 順敬 (関西大)

[2C01] 畳み込みニューラルネットワークによる流動挙動の予測(1)キャビティ流れへの適用
滝脇 賢也、鬼頭 理、前島 啓、堀江 英樹 (東芝 ESS)

[2C02] 畳み込みニューラルネットワークによる流動挙動の予測(2)バックステップ流れへの適用
鬼頭 理、前島 啓、滝脇 賢也、堀江 英樹 (東芝 ESS)

[2C03] 放射性崩壊計算用 Python パッケージ「radioactivedecay」の開発
Alex Malins (JAEA)

[2C04] 局所細分化格子ボルツマン法による都市風況解析におけるアンサンブル計算の MPI 実装
長谷川 雄太、小野寺 直幸、井戸村 泰宏 (JAEA)

混相シミュレーション

日時：2021年3月18日(木) 10:45~12:00 C会場 (Zoom ルーム 3)

座長 沖田 泰良 (東大)

[2C05] A boiling phase change model for particle methods based on the incompressible-compressible algorithm

Guangtao Duan (UTokyo), Akifumi Yamaji (Waseda Univ.), Mikio Sakai (UTokyo)

[2C06] Refined grid model と DEM 粗視化モデルを用いた固液混相流シミュレーション
横山 莉奈子、酒井 幹夫 (東大)

[2C07] 多層ポッツモデルによる原子核反応における気相・液相転移
岩田 順敬 (関西大学)、王 浩然 (芝浦工業大学)

[2C08] ブロック型適合細分化格子を用いた気液二相流体解析手法の開発

小野寺 直幸、井戸村 泰宏、長谷川 雄太、山下 晋 (JAEA)、下川辺 隆史 (東大)、
青木 尊之(東工大)

先端シミュレーション

日時：2021年3月18日(木) 14:45～15:45 C会場 (Zoom ルーム 3)

座長 酒井 幹夫 (東大)

[2C09] 先進的核熱連成シミュレーションシステムの開発 (1)核熱連成シミュレーションシステム
の概要

川西 智弘、長家 康展、吉田 啓之、秋江 拓志、多田 健一、小野 綾子 (日本原子力研究開発機
構 原子力基礎工学研究センター 軽水炉工学・核工学ディビジョン)

[2C10] 分子動力学法を用いた非線形超音波成分のナノ構造依存性の定量化(2)

森 承宇、松田 那由多、沖田 泰良 (東大)、板倉 充洋 (JAEA)

[2C11] 分子動力学法を用いた面心立方金属における析出硬化ナノメカニズム解明に関する研
究(2)

津川 聖人、岩瀬 祐樹、沖田 泰良 (東京大学)、早川 頌 (テネシー大学)、板倉 充洋 (JAEA)

応用シミュレーション

日時：2021年3月18日(木) 15:45～17:15 C会場 (Zoom ルーム 3)

座長 板倉 充洋 (JAEA)

[2C12] 汚染物質拡散解析の In-Situ アンサンブル可視化

矢野 緑里、河村 拓馬、長谷川 雄太、井戸村 泰宏 (JAEA)

[2C13] VULCANO VF-U1 実験における金属コリウム局所凝固挙動の MPS 法による解析

福田 貴斉、山路 哲史、Li Xin (早稲田大)

[2C14] 中性子輸送計算手法の多次元光輸送解析への適用性に関する検討

天野 虎之介、遠藤 知弘、山本 章夫 (名大)、藤井 宏之 (北大)

[2C15] 統計的安全評価における代替統計モデルの適用 (5)交差検証法による統計的安全評価値
の予測精度の検討

木下 郁男 (原子力安全システム研究所)

以上

2021年春の年会 計算科学技術部会

企画セッション開催案内

- ◆ 計算科学技術に基づいた福島第一原子力発電所事故に関する最新知見

日時：2021年3月18日（木）13:00～14:30 C会場（Zoomルーム3）

座長 光安 岳（日立）

- (1) 福島環境回復及び廃炉に向けた放射性セシウムの原子スケール動態計算

奥村 雅彦（JAEA）

- (2) デブリの特性に関する計算材料科学的研究

板倉 充洋（JAEA）

【要旨】

福島第一原子力発電所事故からの復興を支援するための多様な計算科学技術の開発がなされ、大気や土壌、海洋中での放射性物質の動態予測シミュレーション、オフサイトでの空間線量率の変化計算、原子炉内の事故進展予測シミュレーション、また、廃炉作業において必要となる構造物の強度評価や燃料デブリの特性評価などが進められている。

本企画セッションでは、放射性セシウムの原子スケール動態計算、ならびに材料科学的観点における燃料デブリ特性の計算に関する最新知見を紹介いただく。福島復興および廃炉作業に資する情報提供の観点から、計算科学技術が果たすべき役割や今後の展望などについて議論する。

以上

講習会・ワークショップ等の開催報告・連絡事項等

● 協賛会議

Seventeenth International Conference on Flow Dynamics

第 17 回流動ダイナミクスに関する国際会議

<http://www.ifs.tohoku.ac.jp/icfd2020/>

本会議は熱流動に関する国内外の研究者が集まり、研究者や学生が研究発表を通じて学术交流を行うもので、今年で 17 回目を迎えます。

日時： 2020 年 10 月 28 日（水）～30 日（金）

会場： オンライン開催

年 間 予 定

2021 年

4 月 第 1 回運営小委員会

8 月 第 2 回運営小委員会

9 月 秋の大会（北海道大学）

会期： 2021 年 9 月 8 日（水）～10 日（金）

会場： 北海道大学

2022 年

1 月 第 3 回運営小委員会

3 月 第 4 回運営小委員会

3 月 春の年会（全体会議）

会期： 2022 年 3 月 16 日（水）～18 日（金）

会場： 神戸大学深江キャンパス

<編集後記>

日本原子力学会 計算科学技術部会 ニュースレター 第35号

2021年3月

編集・発行責任： 計算科学技術部会 出版・編集小委員会

山下 晋 (委員長)

(原子力機構、yamashita.susumu@jaea.go.jp)

田村 明紀

(日立製作所、akinori.tamura.mt@hitachi.com)

張 承賢

(東京大学、jang@n.t.u-tokyo.ac.jp)

堂田 哲弘

(原子力機構、doda.norihiro@jaea.go.jp)

ニュースレター35号をお届け致します。既に皆様御存じかもしれませんが、今年度の計算科学技術部会の役員・委員を本レターでも御紹介させて頂いております。多くの方が留任もしくは少しお立場を変えての御就任となっておりますが、新たに部会運営に御参加される方々、これまで役員・委員として御尽力頂いた方々の本部会への多大な御貢献に対して、一部会員として感謝と敬意を表させて頂きたいと思っております。皆様の役立てる情報を発信できるよう頑張っていきたいと思っておりますので、部会員の皆様におきましても引き続き御支援・御協力の程お願い致します。

(山下 晋)

※出版・編集小委員会からのお知らせ

過去のニュースレターは以下の計算科学技術部会ホームページからダウンロードできます。

http://csed.sakura.ne.jp/archives/category/2_newsletter