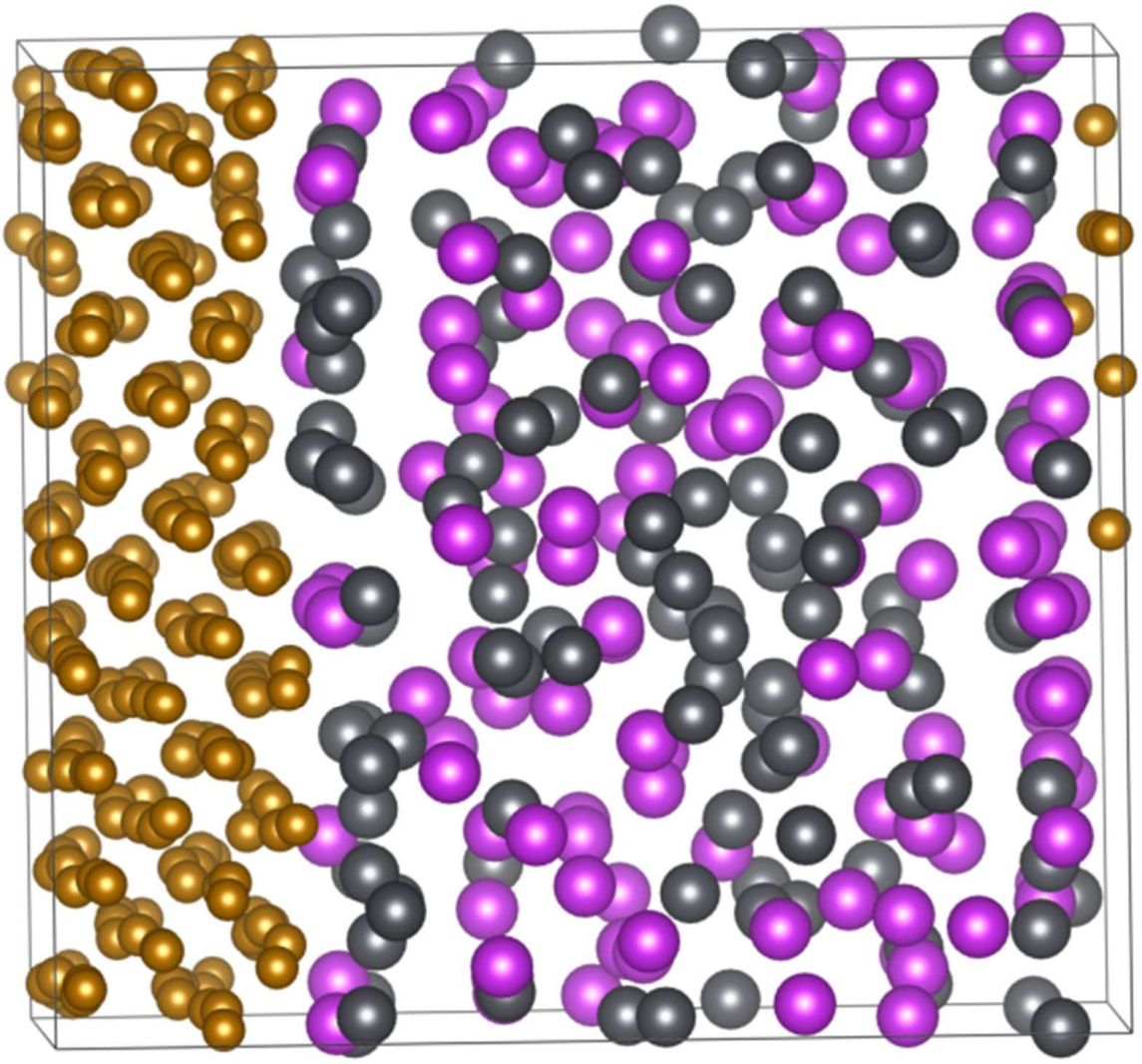
Computational Science & Engineering

計算科学技術部会　ニュースレター　第 37 号
AESJ-CSED　NEWSLETTER (No.37)
March 2022

原子力材料の固液界面の第一原理計算



日本原子力学会 計算科学技術部会
ニュースレター 第 37 号

2022 年 3 月

1. 2021 年秋の大会 計算科学技術部会全体会議 開催報告 1

2. 2021 年秋の大会 計算科学技術部会開 一般セッション報告 5

3. 2022 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 7

4. 2022 年春の年会 計算科学技術部会 一般セッション開催案内 8

5. 2022 年春の年会 計算科学技術部会 企画セッション開催案内 10

6. 講習会・ワークショップ等の開催報告・連絡事項等 11

7. 年間予定 12

編集後記 13

表紙図提供：板倉　充洋　氏（日本原子力研究開発機構）

（2020 年度　計算科学技術部会 CG 賞）

次世代炉の一つである加速器駆動未臨界炉(ADS)は中性子照射により使用済み核燃料に含まれる長寿命核種を核変換し短寿命化することで管理をより容易にすることを目的としている。冷却には鉛とビスマスを混合し融点を下げた液体金属が使われるが、構造材料と液体金属の組み合わせによっては脆化することが知られており、その具体的機構は不明である。要因の一つとしてき裂に液体金属が侵入し界面エネルギーを低下させることでき裂進展を促進する効果が考えられる。図は第一原理計算により鉛ビスマス混合液体と固体鉄の界面エネルギーを評価した計算の原子配置を示している。オレンジ、灰色、紫がそれぞれ鉄、鉛、ビスマス原子を表す。計算の結果、真空の場合と比較して液体金属により表面エネルギーが約 70%に低下することが分かった。

2021年秋の大会　第３０回　計算科学技術部会全体会議
開催報告

１．日時：令和3年9月10日（金） 12:10～12:50

２．場所：オンライン（G会場　Zoomルーム7）

３．議事次第

１）部会長挨拶

鈴木部会長より挨拶が行われた。国際会議準備小委員会が令和3年8月5日付で廃止された旨、報告された。

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。

3)その他

なし。

４）告知等

全体会議終了後に行なわれる、計算科学技術部会セッション「原子力における仮想空間の活用」、および、計算科学技術部会の一般セッションの告知がなされた。

5)質疑応答

部会メーリングリスト配信先更新について質問があり、本年度はまだ更新が行われていなかったため総務にて対応する旨回答があった。

以上

2021 年秋の大会　計算科学技術部会開一般セッション報告

9:55～10:50　　応用シミュレーション

[3G01] スペクトル範囲設定機能付き逆冪乗則乱雑媒質の臨界性評価

植木　太郎（JAEA）

[3G02] VULCANO VF-U1 実験における金属溶融物相凝固挙動の MPS 法解析の改良

福田 貴斉、山路 哲史、Xin Li (早稲田大)

[3G03] Convolutional LSTM による流動挙動の予測 非定常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)

10:50~11:05　　先端シミュレーション

[3G04] 先進的核熱連成シミュレーションシステムの開発　(2)サブチャンネル内詳細気泡分布が核計算に与える影響

秋江 拓志、多田 健一、小野 綾子、長家 康展、吉田 啓之、川西 智弘 (JAEA)

[3G05] 先進的核熱連成シミュレーションシステムの開発 (3)プロトタイプシミュレーションシステムの開発

多田 健一、秋江 拓志、小野 綾子、長家 康展、吉田 啓之、川西 智弘 (JAEA)

[3G06] 溶融・再凝固を伴う溶融プールの MPS シミュレーション

張 子良、段 广涛、酒井 幹夫 (東大)

[3G07] A MPS method with consistent high-order schemes for droplet simulations

Guangtao Duan, Mikio Sakai (Univ. of Tokyo)

14:45~15:55　　微視的計算

[3G08] 第一原理計算による水素酸素再結合反応の解析

山田 昂、辻井 秀二、柳生 基茂、岡部 寛史 (東芝 ESS)

[3G09] 非線形量子波制御による量子コンピューティング

岩田 順敬 1、武井 康浩 2 (1. 関西大学、2. みずほリサーチ＆テクノロジーズ)

[3G10] 4 次元 Cassini パラメータを用いたアクチノイド領域における核分裂動力学の研究
岡田 和記、和田 隆宏 (関西大)

15:40~16:50　　分子動力学計算

[3G11] 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(3)
森 承宇 1、松田 那由多 1、沖田 泰良 1、板倉 充洋 2 (1. 東大、2. JAEA)

[3G12] 機械学習分子動力学法による Zr 中の空孔集合体挙動解明に関する研究
津川 聖人 1、寺山 怜志、沖田 泰良 1、奥村 雅彦 2、板倉 充洋 2 (1. 東京大学、2. JAEA)

[3G13] 多成分系における機械学習分子動力学法
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. 日本原子力研究開発機構、2. 東京大学)

[3G14] 過酷事故における溶融物の多孔質浸透のモデル化
板倉 充洋、中村 博樹、奥村 雅彦 (原子力機構)

以上

2022 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4年3月16日（水）　12:10～12:50

２．場所：　オンライン開催 Zoomルーム B会場

３．部会表彰式

４．全体会議

（１）部会長挨拶

（２）小委員会上期活動報告

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

（３）次期役員選出

（４）次期部会長挨拶

（５）告知等

以上

2022 年春の年会　計算科学技術部会

一般セッション開催案内

先端シミュレーション

日時：2022 年 3 月 16 日(水) 09:30～10:55　B 会場（Zoom ルーム 3）

座長　岩田 順敬（関西大）

[1B01] LSTM による流動挙動の予測 非定常バックステップ流れへの適用

鬼頭 理 1、前島 啓 2、滝脇 賢也 2、堀江 英樹 2 (1. 東芝、2. 東芝 ESS)

[1B02] 格子ボルツマン法に基づく乱流計算に対するアンサンブルデータ同化の実装

長谷川 雄太 1、小野寺 直幸 1、朝比 祐一 1、井戸村 泰宏 1 (1. JAEA)

[1B03] 先進的核熱連成シミュレーションシステムの開発（4)MVP/NASCA による核熱連成

秋江 拓志 1、多田 健一 1、神谷 朋宏 1、小野 綾子 1、長家 康展 1、吉田 啓之 1、川西 智弘 (1. JAEA)

[1B04] 気液二相流計算における適切な Phase-Field 変数の検討

杉原 健太 1、小野寺 直幸 1、井戸村 泰宏 1、山下 晋 1 (1. JAEA)

[1B05] A stable free-surface-detection method for consistent high-order MPS method

Guangtao Duan1, Mikio Sakai1 (1. Univ. of Tokyo)

シミュレーションモデルと方法

日時：2022 年 3 月 16 日(水) 10:55～12:00　B 会場（Zoom ルーム 3）

座長　酒井 幹夫（東大）

[1B06] TDDFT+Langevin モデルによる核分裂反応における慣性散逸効果

岩田 順敬 1、王 浩然 2 (1. 関西大学、2. 芝浦工業大学)

[1B07] 界面追跡法に基づく高精度凝縮解析手法の開発

伊藤 啓 1、大平 直也 1、伊藤 大介 1、齊藤 泰司 1 (1. 京都大学)

[1B08] 統計的安全評価における代替統計モデルの適用 (6)Stan による不確かさ解析のベイズ推定

木下 郁男 1 (1. 原子力安全システム研究所)

[1B09] Lasso 回帰を用いた放射線源分布の推定

山田 進 1、町田 昌彦 1 (1. JAEA)

以上

2022 年春の年会　計算科学技術部会
企画セッション開催案内

◆　核燃料開発におけるシミュレーション技術の活用

日時：2022 年 3 月 16 日（水）13:00 ～ 14:30　Ⅰ会場

座長：佐藤 勇（東京都市大）

(1) 公開燃料コード FEMAXI-8 における軽水炉燃料挙動モデル整備の現状と課題

（JAEA）宇田川豊

(2) 高速炉 MOX 燃料挙動のシミュレーション解析技術開発

（JAEA）小澤隆之

(3) 分子シミュレーションの新たな展開 - 構造金属材料を対象として

（東京大学）沖田泰良

(4) 計算科学を用いた核燃料物性研究

（JAEA）中村博樹

【要旨】

今後の核燃料開発において照射試験は不可欠であるが、利用可能な照射場は限られており、その実施が困難であることが課題となっている。それを解決する方法の一つがシミュレーションの活用であることから、2022 年春の年会における企画セッションでは、「核燃料開発におけるシミュレーション技術の活用」をテーマとする。これは、核燃料部会および計算科学技術部会の合同セッションとして開催される。

核燃料部会からは、軽水炉燃料および高速炉用 MOX 燃料における燃料挙動解析コードの改良・開発状況および今後の課題について紹介する。また、計算科学技術部会からは、分子動力学法や第一原理計算を用いた核燃料物性研究および材料における照射欠陥挙動シミュレーションの概要について紹介する。講演後、それら基に、講演者および出席者による総合討論を行う。おおよその時間の割り振りは以下の通りである

以上

講習会・ワークショップ等の開催報告・連絡事項等

● 第 19 回流動ダイナミクスに関する国際会議

会期：　2022 年 11 月 9 日（水）～11 月 11 日（金）

会場：　仙台国際センター

年　間　予　定

2022 年

５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（茨城大学）

会期：　2022 年 9 月 7 日（水）～9 日（金）

会場：　茨城大学日立キャンパス

10 月　　「第 19 回流動ダイナミクスに関する国際会議」

会期：　2022 年 11 月 9 日（水）～11 月 11 日（金）

会場：　仙台国際センター

2023 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：　2023 年 3 月 15 日（水）～17 日（金）

会場：

＜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 37 号
2022 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
（北海道大学、jang@eng.hokudai.ac.jp）
堂田　哲弘
（原子力機構、doda.norihiro@jaea.go.jp）

ニュースレター37 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います。また、昨年度　部会長を務めて頂きました光安岳氏に変わり、今期より鈴木喜雄氏が部会長に御就任されました。我々も新部会長の下、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いますので、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