

# 機械学習を利用した計算科学による 照射損傷予測・脆化評価技術の整備

熊谷 知久

電力中央研究所 エネルギートランスフォーメーション研究本部 材料科学研究部門

令和6年度 原子力システム研究開発事業 成果報告会

2025年3月3日

# 共同研究者

(一財)電力中央研究所

野本 明義

鈴木 一真

東京理科大学創域理工学部機械航空宇宙工学科

高橋 昭如 教授

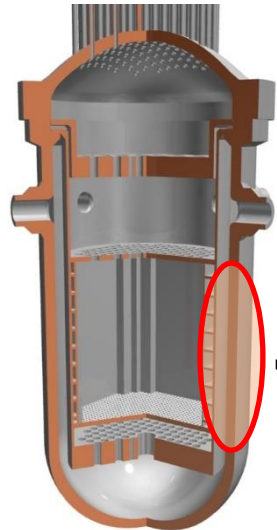
平能 敦雄 助教

プログラムアドバイザー:大阪大学産業科学研究所

原 聡 准教授

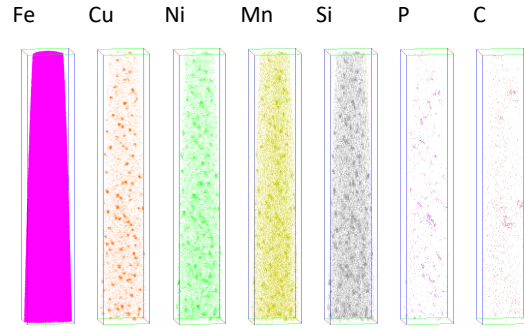
肩書は当時のもの

# 軽水炉における原子炉圧力容器鋼の中性子照射脆化



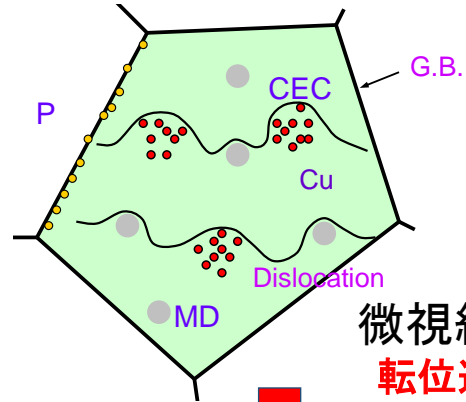
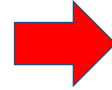
中性子照射

圧力容器鋼

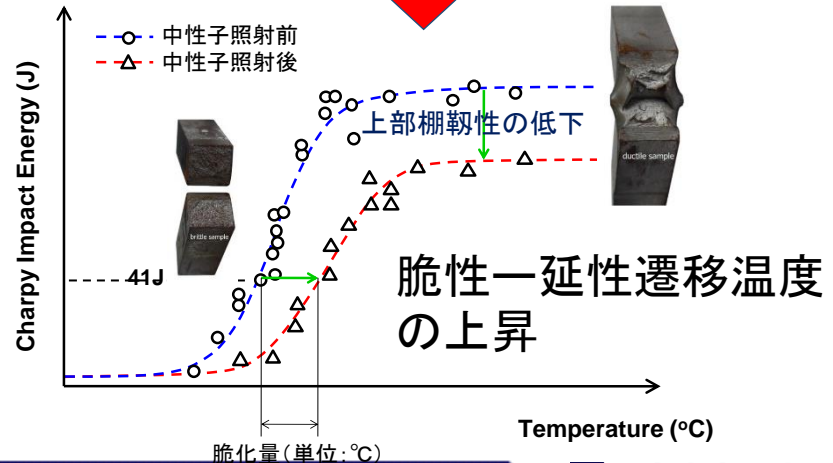


微視組織変化

- ・溶質原子クラスターの形成
- ・マトリックスの損傷



微視組織による  
転位運動の阻害



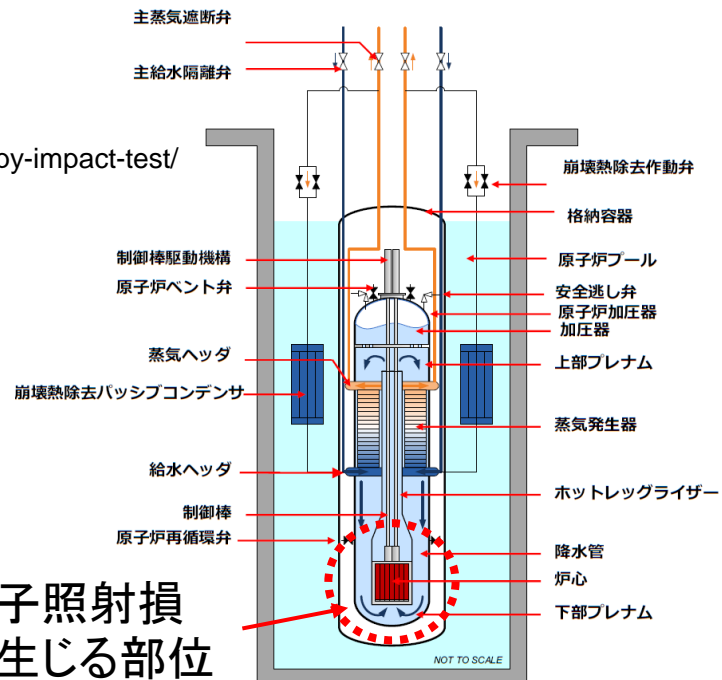
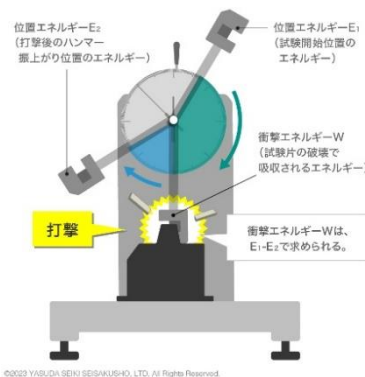
微視組織変化、微視組織-転位運動の相互作用を精度良く見積もることが肝要だが、これまで延性脆性遷移温度の変化を解析できた例はない

# 小型原子炉における压力容器鋼の中性子照射脆化

小型原子炉(Small modular reactor, SMR)でも従来型の軽水炉と同様に鉄鋼材料が使われるものがある予定<sup>ab</sup>

- 圧力が低いため、压力容器鋼が薄くなることから、照射脆化領域が外側までに亘る<sup>b</sup>
- アメリカでは、従来の軽水炉と同様、監視試験が求められる場合がある(解析により監視試験をしなくてよい場合)<sup>c</sup>

<https://yasuda-seiki.co.jp/charpy-impact-test/>



中性子照射損傷が生じる部位

NuScale Power社製トレイン構造

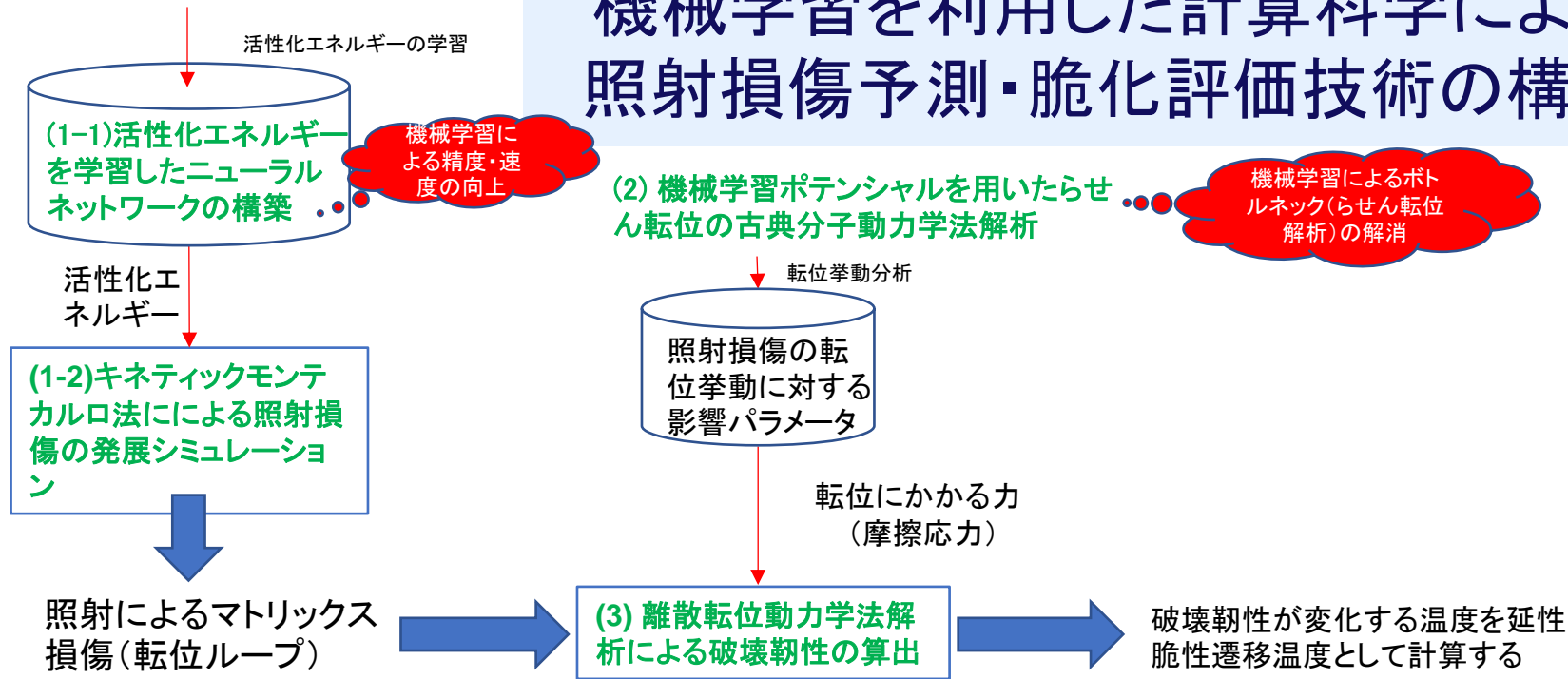
<sup>a</sup> Technical Needs for Prototypic Prognostic Technique Demonstration for Advanced Small Modular Reactor Passive Components, PNNL-22488

<sup>b</sup> Dave Sandusky, Wayne Lunceford, Assessment of Materials Issues for Light-Water Small Modular Reactors, PNNL-22290

<sup>c</sup> NRC, DESIGN-SPECIFIC REVIEW STANDARD for NuScale SMR DESIGN

[https://www.enecho.meti.go.jp/committee/studygroup/ene\\_situation/007/pdf/007\\_005.pdf](https://www.enecho.meti.go.jp/committee/studygroup/ene_situation/007/pdf/007_005.pdf)

# 機械学習を利用した計算科学による 照射損傷予測・脆化評価技術の構成

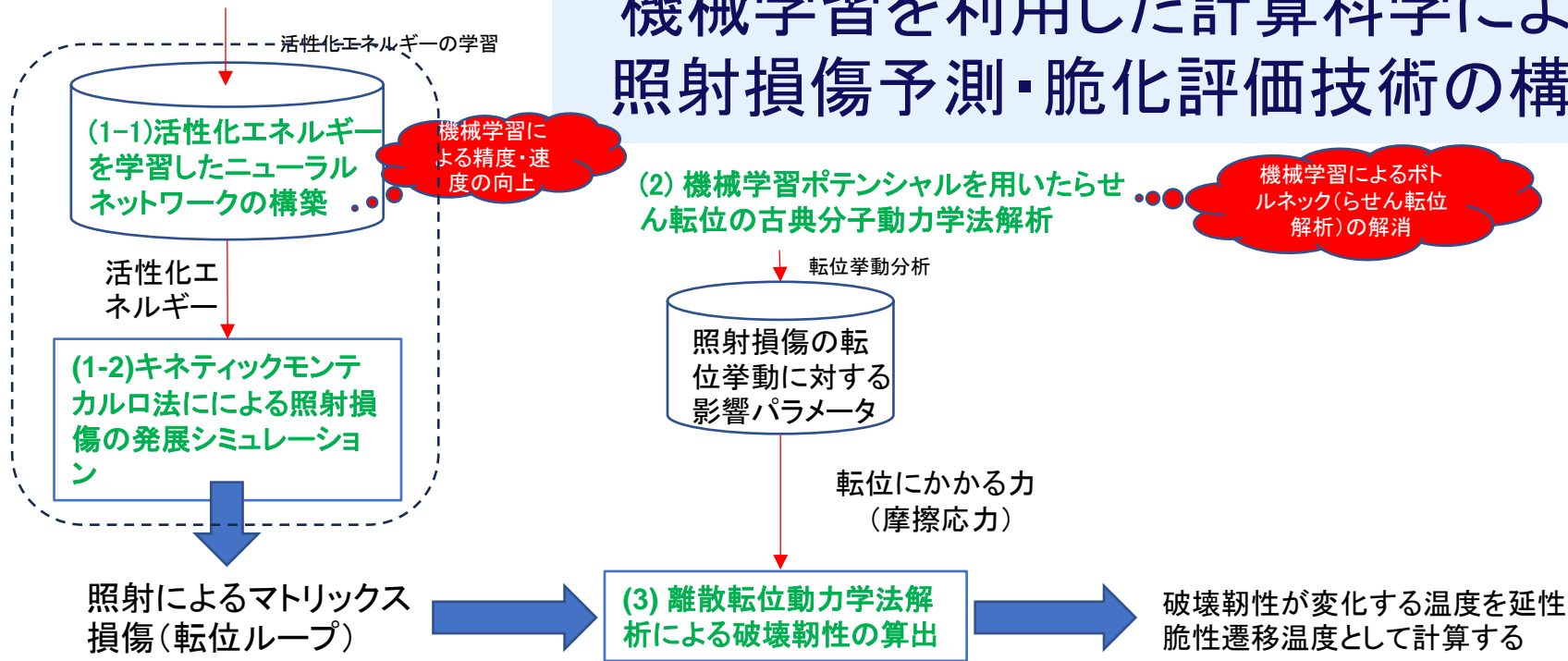


近年発展が著しい機械学習によるボトルネックの解消を目指す

鉄鋼材料でもっとも基礎となる純鉄のマトリックス損傷を対象とする。

\*計算対象となる物質系を構成する元素の原子番号と系の原子配置を入力パラメータとし、実験結果を参照しないで系の電子状態を求める計算手法で、求められた電子状態からエネルギーをはじめとする様々な物性を計算でき、その精度は実験に準ずるとされる。

# 機械学習を利用した計算科学による 照射損傷予測・脆化評価技術の構成



近年発展が著しい機械学習によるボトルネックの解消を目指す

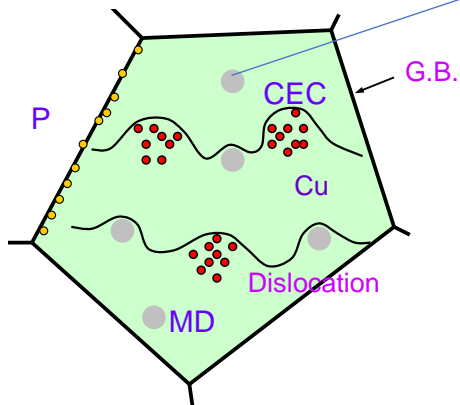
鉄鋼材料でもっとも基礎となる純鉄のマトリックス損傷を対象とする。

\*計算対象となる物質系を構成する元素の原子番号と系の原子配置を入力パラメータとし、実験結果を参照しないで系の電子状態を求める計算手法で、求められた電子状態からエネルギーをはじめとする様々な物性を計算でき、その精度は実験に準ずるとされる。

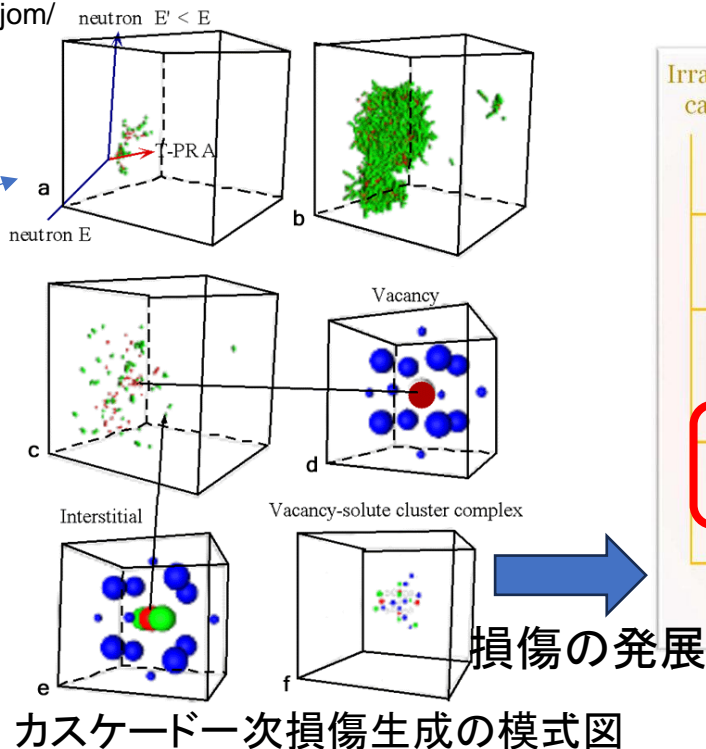
# 照射損傷形成の模式図

<https://www.tms.org/pubs/journals/jom/0107/odette-0107.html>

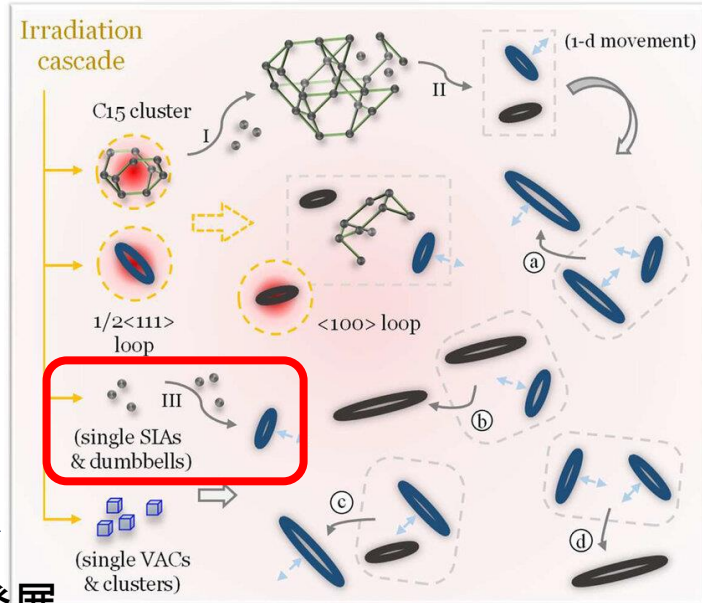
初期形成過程



原子力圧力容器鋼中のマトリックス損傷 (MD)



カスケード一次損傷生成の模式図

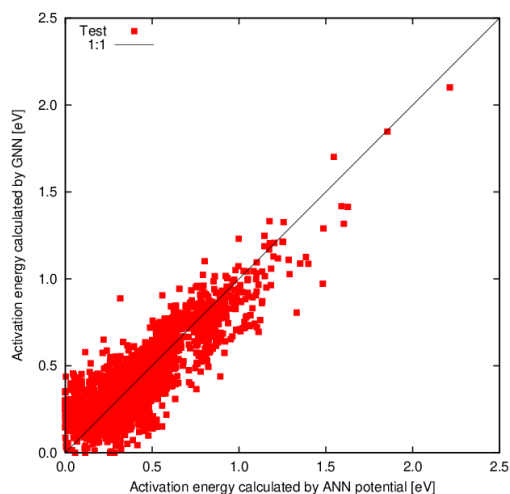


照射中の転位ループの発達に關与する可能性のある機構の模式図

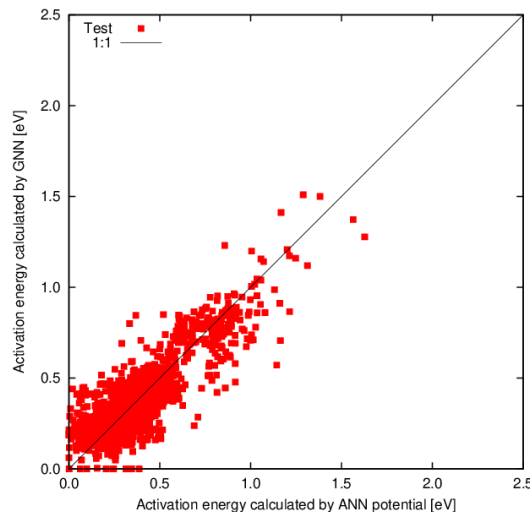
SIA (ダンベル) の蓄積による  $1/2\langle 111 \rangle$  ループの核生成に着目

Gao, Jie, Ermile Gaganidze, and Jarir Aktaa. *Acta Materialia* 233 (2022): 117983.

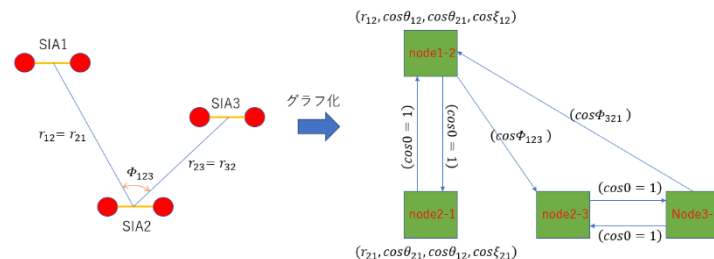
# 機械学習(グラフニューラルネットワーク)による活性化エネルギーの予測性能



教師データの再現性



テストデータの予測性



グラフによるSIAのモデル化

Prediction of the binding energy of self interstitial atoms in alpha iron by a graph neural network Tomohisa Kumagai, Kazuma Suzuki, Akiyoshi Nomoto, Satoshi Hara, Akiyuki Takahashi Materialia 33 101977 2024年3月

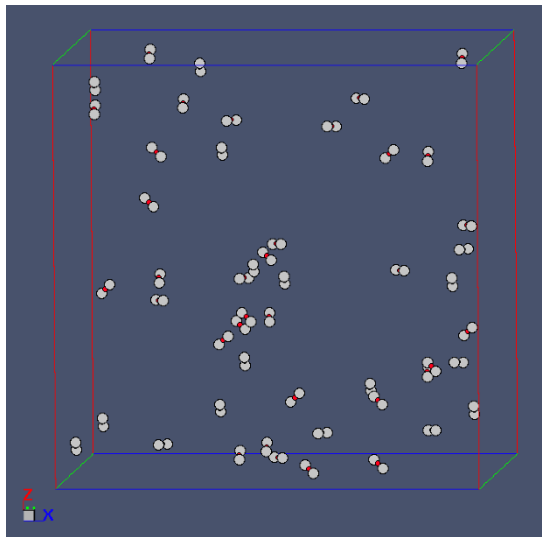


# モンテカルロ法解析の結果

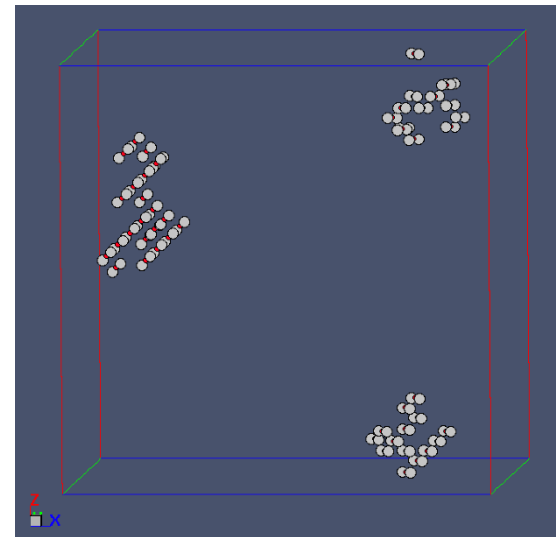
## ■ 解析条件

温度	600K
格子定数	2.8353 Å
解析領域	5.67 × 5.67 × 5.67 nm
境界条件	全方向 周期境界条件
SIA数	50

## ■ 解析結果



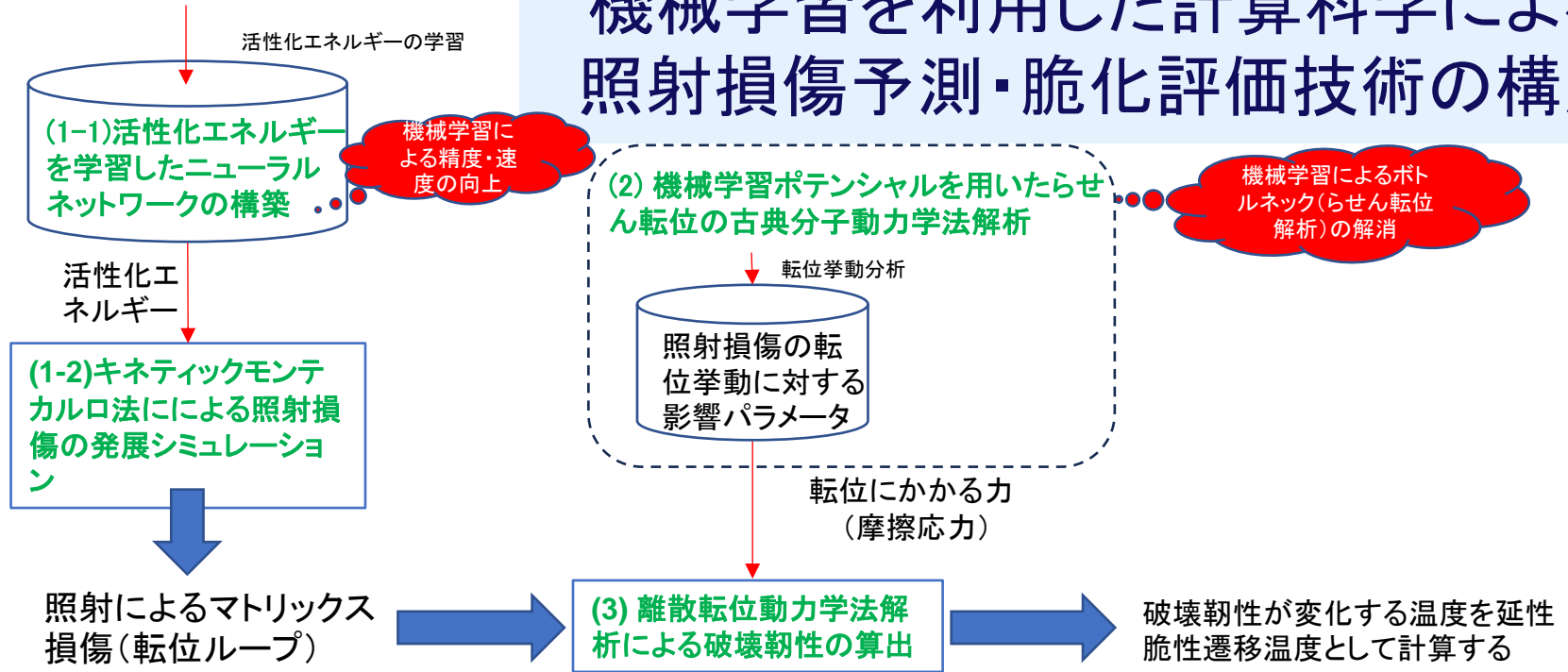
初期状態



解析後

- ・SIAの拡散によって、**クラスター形成が確認できた**
- ・より正確な照射損傷の形状を得るためには、MD解析によるKMC入力データを充実させる必要がある

# 機械学習を利用した計算科学による 照射損傷予測・脆化評価技術の構成



近年発展が著しい機械学習によるボトルネックの解消を目指す

鉄鋼材料でもっとも基礎となる純鉄のマトリクス損傷を対象とする。

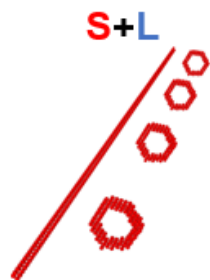
\*計算対象となる物質系を構成する元素の原子番号と系の原子配置を入力パラメータとし、実験結果を参照しないで系の電子状態を求める計算手法で、求められた電子状態からエネルギーをはじめとする様々な物性を計算でき、その精度は実験に準ずるとされる。

# らせん転位と照射損傷（転位ループ）の反応機構

Screw dislocation  
+ Dislocation **L**oops

Helical dislocation

Dislocation **L**oops  
+ Screw dislocation



Reaction  
→



Split  
→



BCC構造ではらせん転位が支配的

External work  $\Delta\text{CRSS}$   
↑  
 $W$

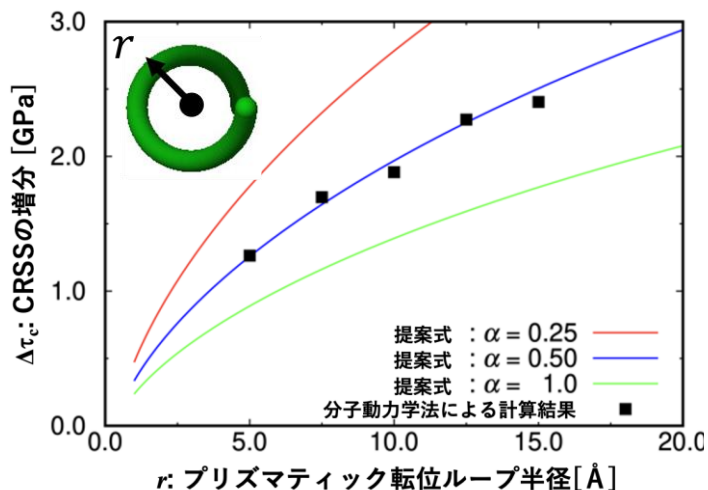
$$\Delta\text{CRSS} = \sqrt{\frac{2G}{V} \{ (E_L + E_S) - E_H \}}$$

$E_S$  : らせん転位の自己エネルギー  
 $E_L$  : 転位ループの自己エネルギー  
 $E_H$  : ヘリカル転位の自己エネルギー

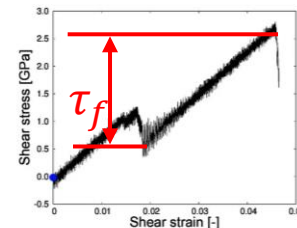
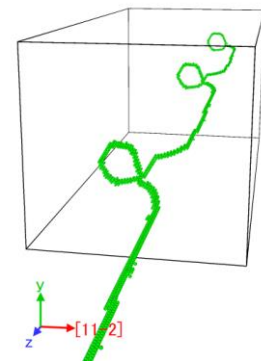
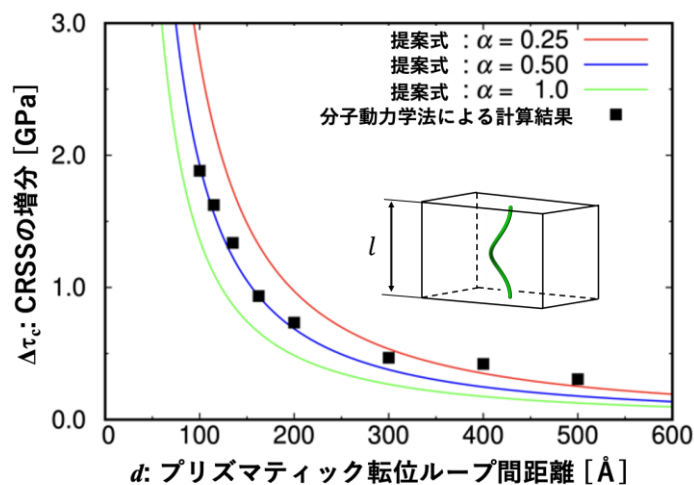
# モデルと分子動力学法による 臨界分解せん断応力増分の比較

系の温度: 300K

- 転位ループの半径  $r$

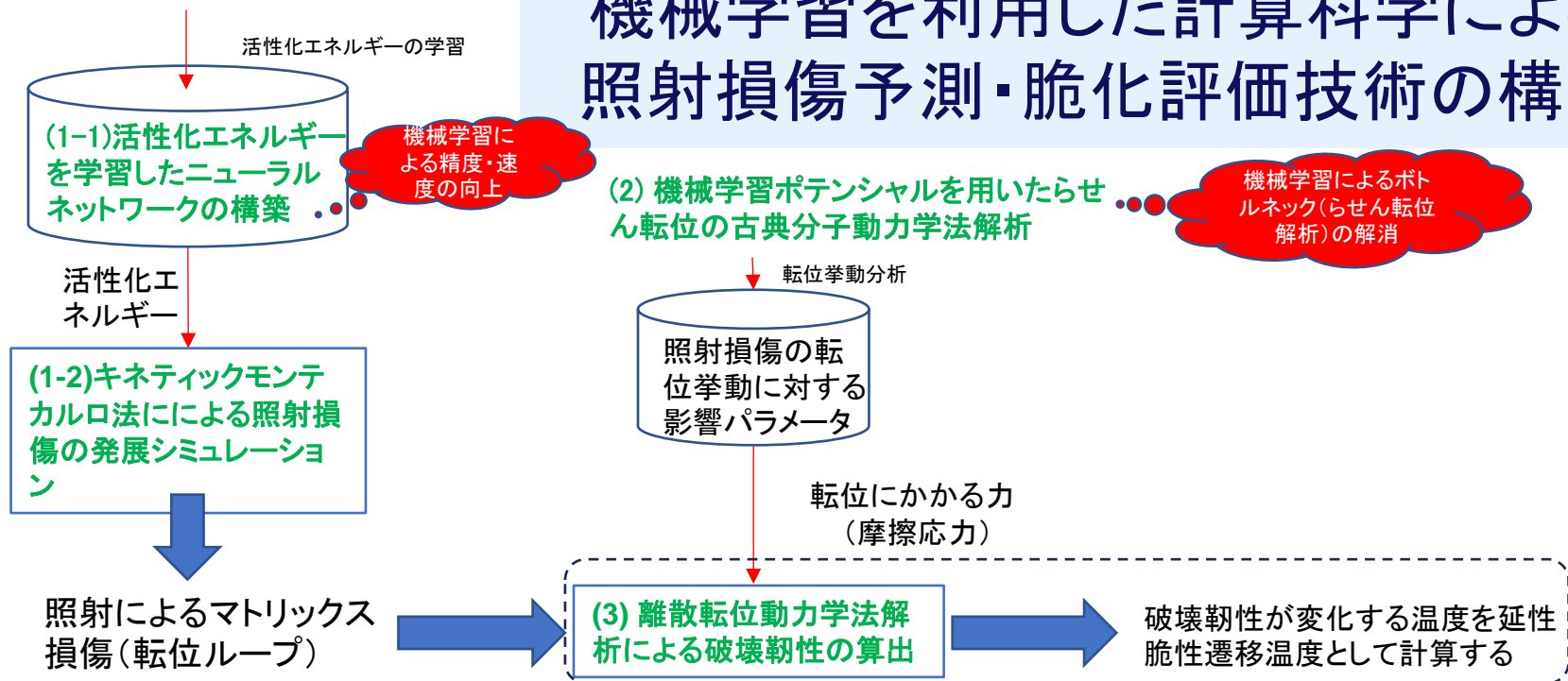


- らせん転位の長さ  $l$



開発した式を用いて計算した $\Delta$ CRSSは, MDの結果から  
計算した $\Delta$ CRSSと定性的に一致する⇒**転位の摩擦応力に相当**

# 機械学習を利用した計算科学による 照射損傷予測・脆化評価技術の構成



近年発展が著しい機械学習によるボトルネックの解消を目指す

鉄鋼材料でもっとも基礎となる純鉄のマトリクス損傷を対象とする。

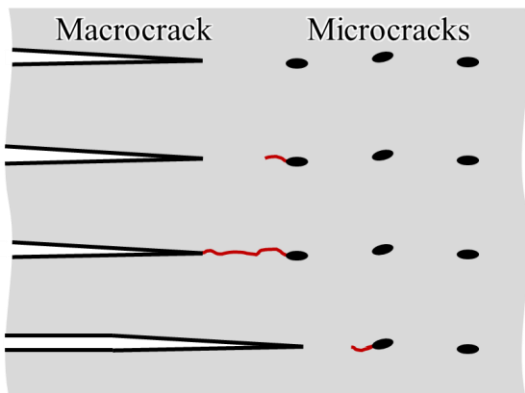
\*計算対象となる物質系を構成する元素の原子番号と系の原子配置を入力パラメータとし、実験結果を参照しないで系の電子状態を求める計算手法で、求められた電子状態からエネルギーをはじめとする様々な物性を計算でき、その精度は実験に準ずるとされる。

# 亀裂伝搬のモデリング

## 巨視亀裂—微視亀裂モデル

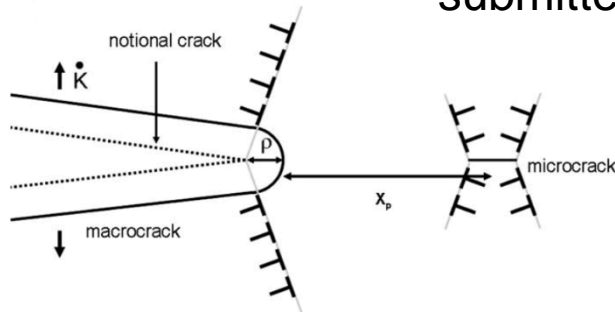
(Noronha, Ghoniem (2006))

- 巨視亀裂からの転位の放出→  
巨視亀裂先端の鈍化
- 巨視(鈍化)亀裂+転位の応力  
→微視亀裂破壊開始の駆動力



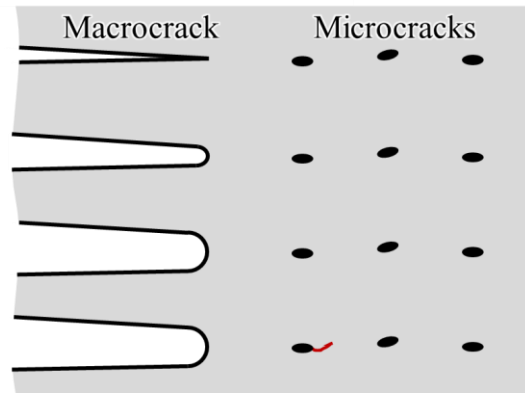
脆性破壊のモデル(亀裂が次々つながる)

submitted to nature materials



## 照射欠陥の影響評価

- 転位の運動モデル
- 破壊靱性値の変化



延性破壊のモデル(巨視亀裂と微視亀裂はつながらない)

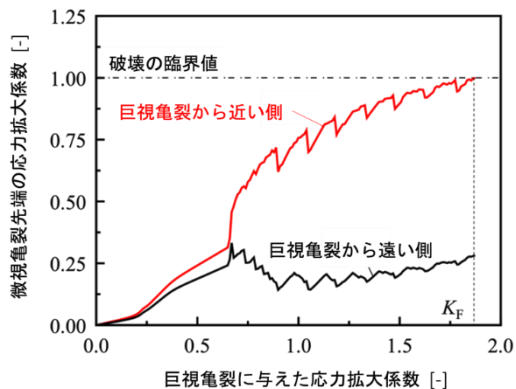
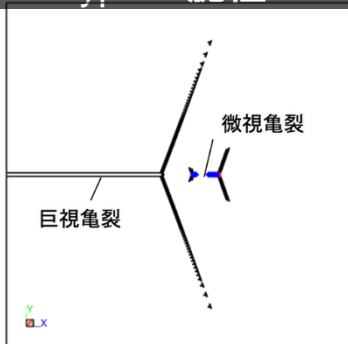
# 微視亀裂の破壊様式

## 脆性破壊メカニズム

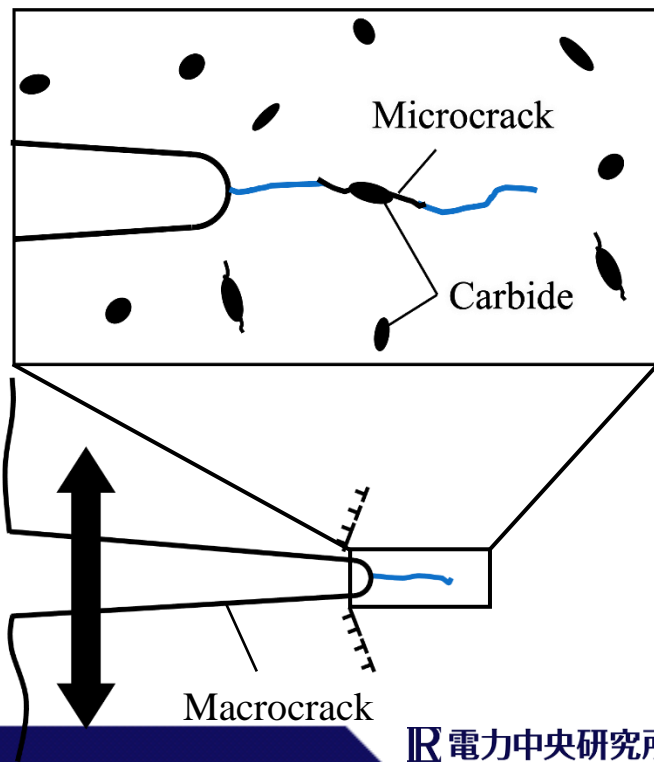
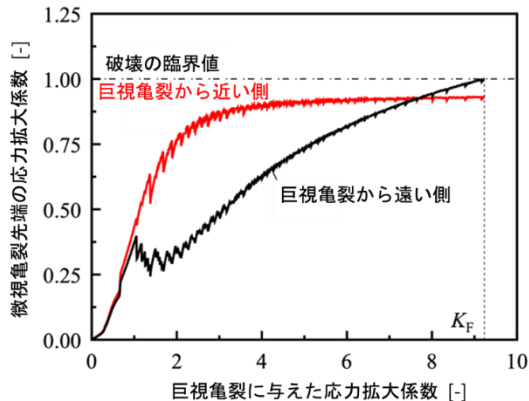
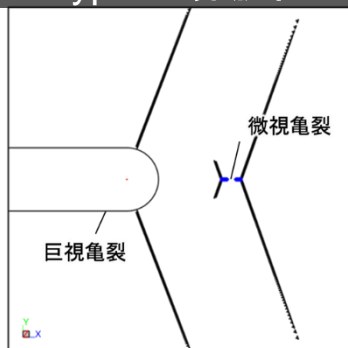
- 巨視亀裂の鈍化
- 微視亀裂の劈開破壊

→ 微視亀裂が巨視亀裂に結合

### Type I: 脆性



### Type II: 非脆性



# まとめ

本委託業務では、SMR実運用条件下における中性子照射脆化データの実験的取得が難しいことを念頭に、これを補う数値シミュレーション手法の開発を目指し、主として近年進展の著しい機械学習技術を応用した計算科学手法を用いた数値シミュレーションによりナノメートルスケールからマクロスケールに至る照射脆化評価を行うため、以下に記述するような数値解析技術の開発・解析の実施を行った。

**キネティックモンテカルロ法:** 純鉄中の $\langle 110 \rangle$ ダンベル型自己格子間原子(SIA)の拡散経路を明らかにし、グラフニューラルネットワークとニューラルネットワークの組み合わせで活性化エネルギーを予測する機械学習を構築。

**古典分子動力学法:** らせん転位とプリズマティック転位ループの相互作用によりヘリカル転位が形成されることを明らかにし、CRSSの増分を定式化。

**離散転位動力学法:** 微視的亀裂の破壊挙動を2種類の脆性的な破壊、非脆性的な破壊と分類し、温度の上昇に伴う遷移温度の摩擦応力依存性が従来知見と一致することを確認。

今後は、純鉄系からSMRで用いられる合金系への拡張、実験・観察によるモデルの検証、データ同化の進展などが必要となる。