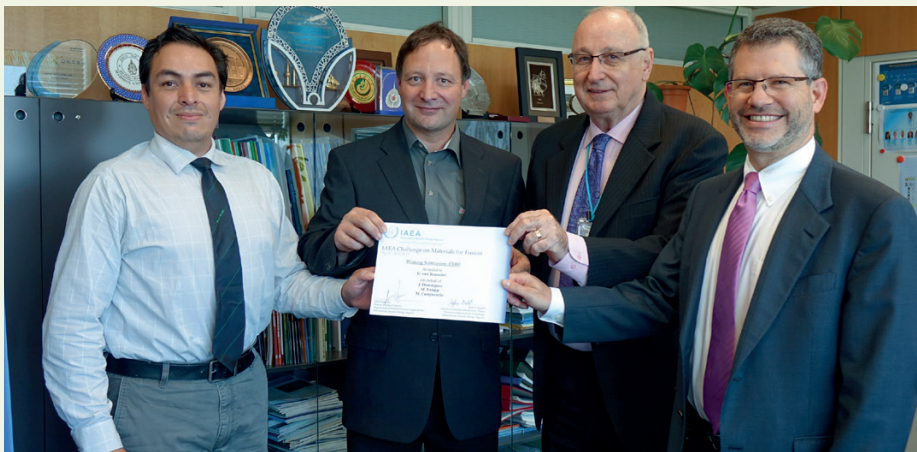


Объявлены победители краудсорсингового конкурса МАГАТЭ по материалам для термоядерного синтеза



В октябре 2018 года группа из четырех ученых из Института физики плазмы Макса Планка и Вычислительного центра Макса Планка в Гархинге (Германия) выиграла краудсорсинговый конкурс МАГАТЭ по визуализации, анализу и моделированию материалов для строительства термоядерных реакторов.

Термоядерный синтез — ядерная реакция, которая питает энергией солнце, — может в конечном итоге стать практически неиссякаемым источником дешевой и экологически чистой, безуглеродной энергии, где в качестве топлива будут использоваться получаемые из воды и лития изотопы водорода. Однако, чтобы сделать получение энергии с помощью термоядерного синтеза возможным в коммерческих масштабах, нужно решить ряд сложных технологических проблем, таких как защита стенок и других компонентов корпуса реактора от воздействия экстремально высоких температур и высокоэнергетических частиц.

Четырнадцать групп исследователей из десяти стран провели моделирование повреждения стенок реактора высокоэнергетическими нейтронами, высвобождающимися в результате термоядерной реакции, и представили новаторский анализ полученных результатов. Критериями оценки представленных результатов была их научная ценность, новизна самого алгоритма или его использования в области материаловедения, а также полезность визуализации и ее предполагаемое воздействие.

«Некоторые из представленных материалов были исключительными: как будто на футбольный матч районного первенства приехала

команда — чемпион мира», — отмечает Сергей Дударев, руководитель Программы по материаловедению Управления по атомной энергии Соединенного Королевства и один из инициаторов конкурса.

Члены победившей команды — Удо фон Туссен, Хавьер Домингес, Маркус Рампп и Микеле Компостелла — впервые использовали существующий метод из сферы машинного обучения и науки о данных для идентификации и классификации структур дефектов в моделируемых поврежденных кристаллах.

«Это решение представляет собой новый и эффективный способ автоматической классификации дефектных структур, что позволяет определить в количественных показателях общие факторы и различия между материалами, — отмечает Арьян Конинг, руководитель Секции ядерных данных МАГАТЭ. — В контексте изучения материалов для изготовления вакуумной камеры термоядерного реактора, подобного ИТЭР, этот способ позволяет эффективно измерить, классифицировать и визуализировать ущерб, нанесенный конкретному материалу высокоэнергетическими нейтронами, которые высвобождаются в термоядерном реакторе. Поиск подходящего материала для первой стенки корпуса реактора — это очень важный шаг на пути к сооружению жизнеспособного термоядерного реактора».

По сравнению с существующими методами этот подход обладает рядом преимуществ, включая следующие:

- возможно автоматическое выявление и классификация новых или неожиданных видов дефектов;
- в его основе лежит комбинация надежных и ясных алгоритмов, используемых в науке о данных;
- можно различать настоящие дефекты и небольшие, временные деформации, вызванные перемещением атомов под воздействием температуры;
- этот метод можно применять достаточно быстро в ходе нарастания моделируемого повреждения с течением времени, что позволяет лучше понять, как дефекты формируются, сочетаются между собой и в некоторых случаях в итоге исчезают, когда атомы возвращаются на свое первоначальное место в кристаллической решетке.

Вплоть до недавнего времени выявление и классификация дефектов требовали очень много усилий и времени и поэтому в основном проводились только в конце молекулярного моделирования. Но новый алгоритм может применяться на каждом этапе моделирования кристаллических дефектов, что может стать источником новых данных о том, когда определенные виды дефектов возникают и когда они исчезают. Это дает гораздо больше информации о системе, которая до настоящего момента была фактически недоступна, а также позволяет отличать те виды дефектов, которые, скорее всего, станут постоянными, от временных дефектов.

«Мы надеемся, что наш подход позволит существенно ускорить имитационный анализ моделирования молекулярной динамики, — говорит Туссен. — Вычислительные мощности растут, а возможности для выполнения операций вручную ограничены. Передача тех или иных задач от человека компьютеру способствует ускорению научного прогресса».

Он добавил, что код будет предоставлен победителями любой заинтересованной стороне на безвозмездной основе и на условиях открытого исходного кода. Код может использоваться другими учреждениями и экспертами — в основном в области материаловедения — для анализа результатов проводимого ими моделирования, в частности связанного с радиационным повреждением твердых веществ.

Конинг отметил, что МАГАТЭ планирует развивать успех этого конкурса и разработать приложение распределенной обработки, которое смогут загружать добровольцы для проведения моделирования

ущерба, наносимого материалам для термоядерного синтеза. Теоретически это может существенно ускорить анализ новых материалов, которые потенциально могут использоваться для строительства термоядерных

реакторов, а также способствовать дальнейшему расширению понимания поведения таких материалов в экстремальных условиях.

— *Кристиан Хилл и Александра Пеева*

Курсы электронного обучения МАГАТЭ по нейтронной активации помогают ученым из 40 стран



Нейтронная активация — это признанный метод определения состава и происхождения материала. Он может использоваться для решения самых разных задач: от раскрытия архивных уголовных дел до установления причины исчезновения пляжа на Ямайке или оценки качества воздуха в спортзале. Разработанный МАГАТЭ инструмент электронного обучения сегодня помогает исследователям из более чем 40 стран применять этот метод.

Нейтронно-активационный анализ — это один из типичных видов анализа, который проводится примерно на половине из 238 действующих исследовательских реакторов по всему миру, а также на некоторых источниках нейтронов, получаемых на ускорителях. Этот высокочувствительный метод позволяет определить концентрацию, составляющую один атом на миллион, без изменения или разрушения материала. Благодаря своей точности он превосходит другие аналитические методы и особенно полезен для массового анализа и изучения материалов, которые являются уникальными и которые нельзя повреждать.

Этот метод предполагает облучение стабильных атомов нейтронами и последующее измерение распада, или радиации, элементов в образце. Ученые используют его для определения химической сигнатуры, среди прочего, пластиков, металлов, стекла, частиц почвы и воздуха.

«К числу основных сфер применения этого метода сегодня относятся науки об окружающей среде, археология, охрана культурного наследия и даже криминалистика, — говорит Нуну Песоа Баррадаш, специалист МАГАТЭ по исследовательским реакторам. — Однако исследователи из этих областей не всегда хорошо знакомы с ядерной физикой и поэтому не всегда в состоянии использовать весь потенциал таких методов».

Информационная работа

В целях устранения этого пробела в знаниях и удовлетворения растущего спроса МАГАТЭ через проект технического сотрудничества «Сетевое взаимодействие программ ядерного образования, подготовки кадров и информационно-просветительской работы в области ядерной науки и технологий» разработало курс электронного обучения, посвященный нейтронно-активационному анализу. Этот онлайн-учебный курс был запущен в 2017 году. Он рассчитан как на новичков, так и на специалистов высокого уровня.

В октябре 2018 года показатели участия в нем достигли знаковой отметки: менее чем за год для его прохождения зарегистрировались представители 40 из 52 стран, где эксплуатируются исследовательские реакторы. Несколько учреждений используют этот инструмент для обучения своих сотрудников и студентов, в том числе на университетском уровне.

«У нас часто меняется кадровый состав, и обучение новых сотрудников требует довольно много времени, особенно в такой высокоспециализированной отрасли, — отмечает Каталин Гмелинг, сотрудник венгерского Центра энергетических исследований. — Материалы электронного курса — это отличная подборка информации, позволяющая обучать новичков и освежать знания старших сотрудников».

Нейтронно-активационный анализ был открыт в 1935 году химиком венгерского происхождения Георгом де Хевеши и немецко-датским физиком Хильдой Леви. Изначально он использовался для измерения массы редкоземельных элементов.

В последние несколько десятилетий этот метод начал использоваться и для других целей, включая сбор дополнительных доказательств по архивным уголовным делам. В 2013 году была опровергнута теория о том, что датский астроном Тихо Браге умер от отравления ртутью. Для этого был проведен нейтронно-активационный анализ образца его бороды. Основным подозреваемым в убийстве был его помощник, математик и астроном, открывший законы движения планет, Иоганн Кеплер, к которому перешли ценные записи Тихо Браге.

Что касается более недавнего прошлого, то после того, как с пляжа «Корал Спрингс» на Ямайке были украдены примерно пятьсот грузовиков песка, местные власти обратились в Международный центр экологических и ядерных наук, в котором был проведен нейтронно-активационный анализ образцов песка с тех пляжей, куда предположительно был вывезен украденный песок. Это позволило получить дополнительные доказательства по делу.

Сегодня нейтронно-активационный анализ также используется для исследования и тестирования качества воздуха в помещениях (например, в школах и фитнес-центрах), что помогает определить количество и происхождение загрязнителей в воздухе.