

国际原子能机构聚变技术材料众包挑战获胜者名单宣布



来自德国加兴的马克斯·普朗克等离子体物理研究所和马克斯·普朗克计算和数据设施的四名科学家团队2018年10月赢得了原子能机构建造聚变反应堆所用材料的可视化、分析和模拟众包挑战奖。

核聚变是一种为太阳提供能量的原子反应，终有一天，核聚变有可能利用从水和锂中获得的氢同位素，提供取之不尽用之不竭而又负担得起的清洁无碳能源。然而，利用商业上可行的聚变能有着严苛的技术挑战，例如保护反应堆容器壁和其他部件不受极高温和高能粒子的影响。

来自10个国家的14个研究团队提交了对反应堆壁损伤模拟的创新性分析，这种损伤可能是由聚变反应释放的高能中子引起的。根据其科学效益、算法本身的新颖性或其材料科学领域的应用，以及可视化的实用性和预期的影响等对模拟结果进行了评价。

英国原子能管理局材料项

目经理、挑战发起人之一Sergei Dudarev说：“所提交的一些材料非常特别；几乎就像在组织的一场当地足球赛中，却有一支赢得世界杯的球队来参赛。”

获奖团队成员——Udo von Toussaint、Javier Dominguez、Markus Rampp和Michele Compostella——首次应用了机器学习和数据科学的现有技术来判别和类分被模拟的受损晶体中的缺陷结构。

“这种解决方案为自动类分缺陷结构开辟了一种新的创造性途径，从而能定量地推断出材料之间的共同因素和差异。”

原子能机构核数据科科长Arjan Koning解释说。“对于如ITER等核聚变反应堆真空容器材料的研究来说，它提供了测量、类分和可视化聚变反应堆释放的高能中子对特定材料造成损害的有效手段。寻找适合制造反应堆容器第一壁的材料是建设一座有望实现的核聚变电站至关重要的一步。”

与现有各种方法相比，该方法有如下几个优点：

- 可自动判别和类分新的或意外的缺陷类型；
- 它是基于数据科学中强大而清晰算法的组合；
- 它可以区分真正的缺陷和由原子热运动引起的微小的临时性形变；
- 在晶体的模拟损伤随时间演变过程中，它的速度足够快，以便更好地理解缺陷是如何形成、组合的，以及在某些情况下，是如何随着原子返回其在晶格上的初始位置而最终消失的。

迄今为止，缺陷判别和分类都是非常费时费力的工作，因此通常只在分子模拟结束时进行。这种新算法可以应用于各个阶段的晶体缺陷模拟，从而对某些类型的缺陷何时发生和消失提供新的见解。这就提供了该系统的更多相关信息，但到目前为止，这些信息几乎无从获得，以便将可能长期存在的缺陷类型与那些短期存在的缺陷进行区分。

“我们希望我们的方法将极大地加速分子动力学模拟的模拟分析。” von Toussaint说。“计算能力不断增强，而人工能力有限。任何能用计算机而不必人做的事情都能加速科学发展。”

他补充说，获奖者将向任何利益相关方提供他们的程序，而且是免费的，源代码是开放的。它可

以被其他研究机构和专家（主要是材料科学家）用来分析他们的模拟结果，特别是那些与固体辐射损伤有关的模拟结果。

Koning说，原子能机构将再

接再励，计划在这一挑战成功的基础上开发一个分布式计算应用程序，用户可以自愿下载该应用程序，用于聚变材料的损伤模拟。这有可能大大加快探索核聚变反应堆

新候选材料的速度，并将进一步提高科学家对这些材料在这种极端条件下的性能的理解。

文/Christian Hill 和Aleksandra Peeva

国际原子能机构中子活化电子学习课程帮助了40个国家的科学家



从帮助解决历史犯罪案件到确定牙买加海滩消失的原因或健身房的空气质量：中子活化是一种确定材料成分和来源的方法。原子能机构开发的一种电子学习工具正在帮助40个国家的研究人员应用这种方法。

中子活化是一种常见类型的分析，在全世界238座在运研究堆中有大约一半都在进行这种分析，还有一些加速器中子源也在做此类分析。这种高灵敏度的技术可以在不干扰或破坏被分析材料的情况下显示百万原子中一个原子的浓度。它的精度比其他分析方法都精确，对于批量分析和研究独特且需要保持完整的材料特别有用。

这项工作的工作原理是用中子照射稳定原子，然后测量样品中元素的衰变或辐射。科学家利用这种技术区分塑料、金属、玻璃、土壤和空气颗粒等的化学特征。

“目前，这种方法的主要应用领域是环境科学、考古学、文化遗产以及法医学。”原子能机构研究堆专家Nuno Pessoa Barradas说。“然而，这些领域的研究人员不一定有核物理学的背景，因此他们可能无法充分发挥这种技术的潜力。”

传播知识

为了弥合这一知识鸿沟并满足日益增长的需求，原子能机构通过其核科学技术领域核教育、培训和宣传计划的技术合作项目网络，设置了一个关于中子活化分析的电子学习课程。该工具于2017年底推出，既能满足新学员，又能满足高级专业人士的需求。

2018年10月，在线培训课程达到了一个里程碑式的目标，在有运行中研究堆的52个国家里，其中40个国家在不到一年时间内报名参加学习。有几家研究院所使用这个工具给员工及包括大学

生在内的学生上课。

“我们面临着频繁的员工流动，新员工的培训非常耗时，尤其是在这样一个专业领域。”匈牙利能源研究中心的Katalin Gmélíng说。“电子学习材料提供了大量信息，可以培训新员工并更新高级员工的知识。”

中子活化于1935年由匈牙利出生的化学家George de Hevesy和德国-丹麦物理学家Hilde Levi发现，最初被用来作为测量稀土元素质量的有用工具。

在过去几十年里，这种方法还有其他几种用途，包括为历史刑事案件提供额外的证据。2013年，中子活化技术应用在胡须上，用来反驳丹麦贵族Tycho Brahe是由于汞中毒致死的说法。他的珍贵笔记被他的助手、主要嫌疑犯、数学家和天文学家Johannes Kepler继承，此人发现了行星运动规律。

最近，在牙买加珊瑚泉海滩大约有500卡车的沙子被盗之后，地方当局与国际环境和核科学中心合作，应用中子活化技术检测来自疑似被盗海滩的沙子的来源，为这个案件提供了额外的证据。

今天，中子活化还被用来研究和测试室内空气质量（例如在学校和健身中心），帮助确定空气中污染物的数量和来源。