

ナノ粒子分散ナトリウムによる高速炉の安全性向上に関する研究 (15) 理論検討 (その2)

Study on safety enhancement of the fast reactor by using nanoparticle suspension sodium

(15) Theoretical study (No.2)

*佐藤 愛美¹, 石澤 由紀江¹, 張山 昌論¹, 三浦 隆治¹, 鈴木 愛¹, 宮本 直人¹,
畠山 望¹, 宮本 明¹, 齊藤 淳一², 荒 邦章²

¹東北大学, ²日本原子力研究開発機構

ナノ粒子分散ナトリウムの化学反応抑制効果を用いた、高速炉等の安全性を向上するための技術を開発している。その際に使用した独自開発の従来手法比 1000 万倍高速な超高速量子分子動力学法と、その中で用いたパラメータフィッティング自動化プログラムについて、報告を行う。

キーワード: 計算化学, ナノ流体, 反応抑制

1. 緒言

従来の密度汎関数法 (DFT) に基づく第一原理的手法に比べ、約 1000 万倍高速な超高速量子分子動力学法の開発を進めている。

2. 超高速量子分子動力学法

2-1. 第一原理パラメータの構築

本手法では、独自の Tight-Binding 近似により、原子軌道の形状とイオン化ポテンシャルをパラメータ化することで、大規模な高速シミュレーションを可能にしている。さらに、DFT の電子状態を精度よく再現する、第一原理パラメータの構築に成功した。特に、DFT 計算が困難な希土類元素についても計算が可能であり、実測に基づく熱力学データを参考にパラメータを構築している。

2-2. パラメータフィッティング自動化手法

この第一原理パラメータを決定するために、新しく人工知能による二つの手法を融合して、フィッティング作業の自動化を行った。パターンサーチ法では、現在の探索点周辺にてさらに目的関数値を下げる探索点を探す作業を繰り返すことにより、最適解を見つけ出す。乱択アルゴリズムに基づく焼きなまし法では、探索の範囲を広域から徐々に狭め、局所解からの脱出を図りながら最適解を絞り込む。

3. 結論

新しく人工知能による二つの手法を取り入れ、パラメータの高精度最適化を図った超高速量子分子動力学法を用いたことにより、ナトリウム液体中のジルコニウムナノ粒子について手本となる DFT 数値の再現に成功した。本研究は、特別会計に関する法律(エネルギー対策特別会計)に基づく

文部科学省からの受託事業として、日本原子力研究開発機構が実施した平成 26 年度「ナノ粒子分散ナトリウムによる高速炉の安全性向上技術の開発」の成果です。

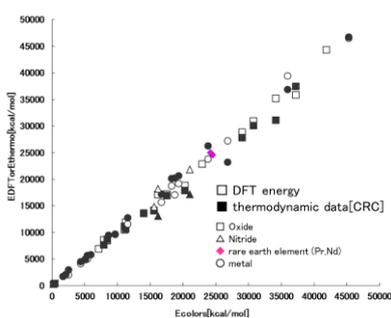


Fig.1 結合エネルギーの比較

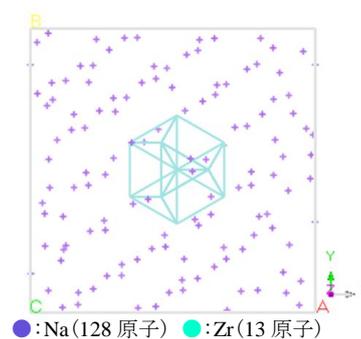


Fig.2 計算モデル

*Manami Sato¹, Yuki Ishizawa¹, Masanori Hariyama¹, Ryuji Miura¹, Ai Suzuki¹, Naoto Miyamoto¹, Nozomu Hatakeyama¹, Akira Miyamoto¹, Junichi Saito² and Kuniaki Ara²

¹Tohoku University, ²JAEA