

核種移行解析の計算負荷低減に対する機械学習の適用

(1) 主要経路の特定による計算負荷低減

The application of Machine learning for reducing the computational load in the particle tracking simulation

(1) Reduction of computational load by identifying the path line

*角木啓太¹、斉藤拓巳¹

¹東大院工

Discrete fracture network (DFN) を用いた詳細な核種移行解析において、主要経路を特定することによる計算負荷低減を試みた結果を報告する。

キーワード: 地層処分、天然バリア、核種移行解析、割れ目ネットワークモデル、機械学習

1. 緒言 高レベル放射性廃棄物の地層処分では、天然バリア（母岩）による遅延機能の評価にあたり、核種移行解析が行われる。我が国における母岩の代表的な候補である結晶質岩における核種移行は、割れ目ネットワーク（DFN）中の輸送としてモデル化できる。しかし、DFN を用いた詳細な核種移行解析は多大な時間を要し、大域での適用のためには、計算負荷の低減が求められる。一方、DFN 中には、多くの輸送が生じる主要経路が存在することが知られている。事前に主要経路を予測し、核種の輸送への影響が小さい亀裂を除くことで、計算負荷の低減が期待できる。本研究ではグラフ理論による解析と機械学習を組み合わせて、計算負荷の低減を試みた。

2. 手法 作成する分類器は、ある亀裂が主要経路かそうでないかを予測するニクラス分類器である。教師データ作成にあたり、まず 100 個の DFN に、非吸着性トレーサーによる核種移行解析を施し主要経路を定義した。続いて、それらの DFN に対し、亀裂の交線の中心をノードに、同一亀裂上のノードをエッジで結ぶ、グラフ化を行った。このグラフを用いて 6 種の中心性と 3 種の距離、2 種の物理量を特徴量として教師データを作成した。これを元にランダムフォレストとニューラルネットワークを訓練し新たに作成した未知 DFN に対し、主要経路の予測を行った。

3. 結論 作成した分類器の例を表 1 に示す。計算負荷低減に際し輸送に寄与の小さい亀裂を抜くアプローチは一定の低減を実現できた。一方で、

BTC 全体の形状の予測への限界も示唆された。

発表では、予測性能に対する主要経路の定義方

法や粒子の初期配置の効果を議論する。

参考文献

[1] Valera, M., et al., *Computat. Geosci.* 22, 695 (2018).

表 1. 分類器の性能

分類器 (閾値)	Recall [%]	Precision [%]	Reduction [%]
RF (0.4)	95.4	91.0	8.4
RF (0.7)	43.9	98.5	61.1
NN (0.6)	72.1	95.9	34.3
NN (0.8)	47.8	96.9	56.9

*Keita Sumiki¹, Takumi Saito¹, ¹Graduate School of Engineering, The University of Tokyo