

機械学習分子動力学法によるコンクリート中セシウム拡散シミュレーション

Machine Learning Molecular Dynamics Simulations of Cesium Diffusion in Concrete

*奥村 雅彦¹, 小林 恵太², 中村 博樹¹, 板倉 充洋¹, 町田 昌彦¹

¹原子力機構, ²RIST

福島第一原子力発電所の廃炉作業等において、大量の放射生成セシウムで汚染されたコンクリート廃材の処分が問題となると考えられる。本講演では、放射性セシウムのコンクリート汚染の原子レベルメカニズムについて、古典分子動力学法程度の低計算コストで第一原理計算並みの高精度評価が可能な機械学習分子動力学法によって評価した結果を報告する。

キーワード：機械学習、分子動力学法、セシウム、コンクリート

1. 背景と目的

福島第一原子力発電所の廃炉作業において、多量の放射性セシウム汚染コンクリート廃材の処分が必要となると予想される。放射性セシウムによるコンクリート汚染現象は、実験研究が主であり、シミュレーション研究が活発になってきたのはごく最近である。コンクリートにおけるセシウム拡散現象のシミュレーションは、固液界面を扱う必要があり、必然的に扱う原子数が多くなる。そのため、計算コストが低い古典分子動力学法が用いられるが、古典分子動力学法で用いられる原子間力ポテンシャルのほとんどは経験に基づいた方法で作られており、その精度は対象系に強く依存する。一方で、経験によらない高精度な「第一原理計算」手法が存在するが、計算コストが高いため、モデリングに多くの原子を必要とする固液界面の評価は難しい。そこで、我々は古典分子動力学法程度の低計算コストで第一原理計算並みの高精度評価が可能な機械学習分子動力学法を用いてコンクリート内のセシウム拡散を評価した。

2. シミュレーション

2-1. 対象系

本研究ではコンクリートのモデルとしてトベモライト 9 Å、11 Å、14 Åを採用した。さらに、トベモライト 14 Åの層間を広げて層間に水分子を増やして表面モデルを作成し、表面における

2-2. 方法

本研究では、第一原理計算コード Vienna Ab initio Simulation Package を用いて、上記の各モデルについて数万オーダーの学習セットを作成した。作成した学習セットについて、機械学習分子動力学法の公開パッケージ[2]を用いて学習し、分子動力学法コード LAMMPS[3]を用いて物理量を評価した。

2-3. 結果

作成した原子力間ポテンシャルはトベモライトの構造をよく再現することがわかった。他の物理量について、講演で詳細に報告する予定である。

参考文献

[1] G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993). [2] A. Singraber *et al.*, J. Chem. Theo. Comp. **15**, 1827 (2019). [3] S. Plimpton, J. Comp. Phys. **117**, 1 (1995).

*Masahiko Okumura¹, Keita Kobayashi², Hiroki Nakamura¹, Mitsuhiro Itakura¹, and Masahiko Machida¹

¹Japan Atomic Energy Agency, ²Risearch Organization for Information Science and Technology