

放射性廃棄物の減容化に向けたガラス固化技術の基盤研究

(65) マトリックスデータベースの構築

Basic research programs of vitrification technology for waste volume reduction

(65) Construction of MATRIX Database

*天本 一平¹, 大山 孝一¹, 長野 祐一², 長尾 佐市², 北嶋 秀樹²

種田 直樹³, 丸山 勉³, 坂井 光美³, 西川 宜孝⁴

¹原子力機構,²計算力学研究センター,³ニューガラスフォーラム,⁴みずほ情報総研

既存のガラスデータを目的に応じて容易に活用できるように新たなデータベース (DB) の構築を図った。同 DB には文献検索や実験状態図の取得機能があり、FactSage と連携することで、計算状態図の作成も可能である。

キーワード: マトリックスデータベース, 実験状態図, 計算状態図, CALPHAD 法, ニューラルネットワーク

1.緒言 ガラス固化体の研究において、解析に用いられる測定値を数多く取得するには多大な人手と時間を要する。よって、事前に既存データを活用し、また、理論計算等によってガラス固化体の状態を予想できる環境を整備する必要がある。このような観点から図1に示すDB(マトリックスDB)を新たに構築する。

2.マトリックスDBの構築

(1) マトリックスDBの概要:

マトリックスDBには、JAEAが取得した各種ガラス固化体の物性値に係るDB(WAGLAD)のほか、文献調査や基盤研究において取得したデータも収納した。併せて学習方法に誤差逆伝播法を用いて認識率を高めたニューラルネットワークを構築し固化体の粘性、密度、電気抵抗の推算を可能とした。また、マトリックスDBを通して、ガラスにかかる文献検索や実験状態図を取得することを目的としてWAGLADとニューガラスフォーラム(NGF)が保有する国際ガラスDB(INTERGLAD)との連携を図った。さらにガラス固化体の計算状態図の作成が可能となるようにFactSageとマトリックスDBとの連携もできるようにした。

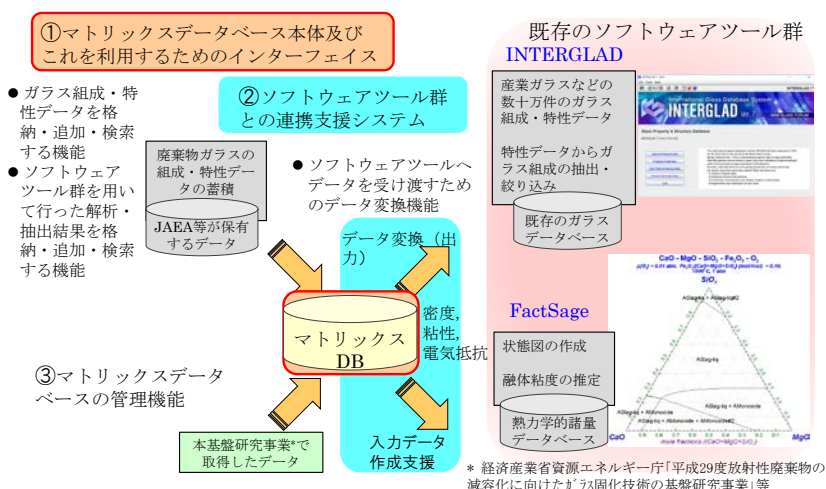


図1 マトリックスDB概念図

さらにガラス固化体の計算状態図の作成が可能となるようにFactSageとマトリックスDBとの連携もできるようにした。

(2) INTERGLAD との連携: INTERGLAD は 世界初のガラス組成・特性のファクト DB である。1991年にNGFからリリースされ、以後、データの補充、システムの改良が継続的に進められ、30万余件を超えるガラスの特性データを収納する巨大なDBとなっている。さらにガラス構造データベースも組み込んでおり、収納データをもとに組成からの特性予測、また新種ガラスの組成設計を試みることも可能である。ここでは、既存のガラス固化体の情報探索や新たなガラス固化体の開発への適用性を期待してマトリックスDBとINTERGLADとの連携を行った。

(3) FactSage との連携: FactSage は多成分系の熱力学的平衡状態を予測するソフトウェアである。密閉系に置かれた物質をある温度・圧力にすると化学反応や相変化が起きる。FactSageは、系内が平衡状態に達したときの物質の状態、化学式、及び存在量を予測できることから、マトリックスDBとFactSageを連携することでガラス状態図の推算、熔融スラグ・ガラスの粘度の予測が可能となる。なお、文献調査においてGibbs関数が見当たらなかった物質については、CALPHAD法を用いて推算を行い、データの充実を図っている。算出にあたっては、融体中のGibbs関数を表現した修正会合溶体モデルである $G = \sum_i G_i^0 x_i + RT \sum_i x_i \ln x_i + \epsilon x G$ を使用しており、作成した状態図が実際の現象を表現していることを確認している[1]

3.結論: 基盤研究の成果として、ガラス固化体に関する情報を取りまとめたマトリックスDBを構築した。マトリックスDBには、ガラスの粘性、密度、電気抵抗の推算機能があり、さらにINTERGLADやFactSageとも連携しているため、今後、幅広い用途が期待できる。

本研究は、経済産業省資源エネルギー庁「平成30年度放射性廃棄物の減容化に向けたガラス固化技術の基盤研究事業」の成果の一部である。

参考文献 [1] 天本, 大山, 深山, 長野, T. Jantzen, K. Hack, 日本原子力学会2018年秋の大会2017

*Ippei Amamoto¹, Koichi Ohyama¹, Yuichi Nagano², Saichi Nagao², Hideki Kitajima², Naoki Taneda³, Tsutomu Maruyama³, Mitsuyoshi Sakai³, Nobutaka Nishikawa⁴,

¹JAEA, ²RCCM, ³NGF, ⁴MIZUHO Research Institute