

模擬燃料物質 CaF_2 の機械学習分子動力学

Machine-learning molecular dynamics of simulated fuel materials CaF_2

*中村 博樹¹, 町田 昌彦¹, 加藤 正人¹

¹ 日本原子力研究開発機構

核燃料物質である二酸化アクチニドの代替物質としてのフッ化カルシウムに対して、機械学習分子動力学を用いて、高温物性を評価した。計算結果を実験データ等と比較することによって、本手法の信頼性や有効性の確認を行った。

キーワード: フッ化カルシウム, 核燃料物質, 機械学習分子動力学

1. 緒言

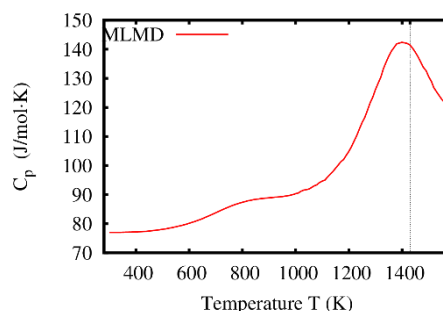
核燃料の開発においては、燃料物質である二酸化アクチニドの詳細な物性値が必要となる。しかし、核燃料物質は取り扱いの制限等により、高温での詳細な物性値を測定することが難しい。このような場合、数値計算を用いて測定値を補間していくことで、精度の高い物性値を得られることが期待できる。通常、マイクロレベルでの物性値の数値計算としては古典分子動力学と第一原理計算がよく用いられる。古典分子動力学は大規模・長時間のシミュレーションが可能だが、経験的なパラメータによってしまうため、信頼性はあまり高くない。一方、経験的なパラメータを必要としない第一原理計算は信頼性が高いが、計算時間がかかるため、大規模なシミュレーションを必要とする高温物性の評価には向いていない。この両者の利点を活かす手法が機械学習分子動力学法である。この手法では、第一原理計算結果を学習したポテンシャルを作成して、古典分子動力学を行う。この方法を用いれば、第一原理計算の信頼度で、古典分子動力学を用いた大規模シミュレーションによる物性評価が可能となる。本発表では、酸化物燃料と同じ結晶構造で、実験データの多い CaF_2 を模擬燃料物質として、機械学習分子動力学による高温物性評価を行う。特に **Bredig** 転移と呼ばれる高温での急激な比熱の変化に注目し、その現象を解析する。これらの計算結果を実験データと比較することによって、本手法の信頼性や有効性を確認し、核燃料物質への応用の可能性を議論する。

2. 計算方法及び結果

CaF_2 に対して、第一原理分子動力学を行うことで学習データを構築した。この学習データから機械学習ポテンシャルを作成して、古典分子動力学を行い、比熱等を評価した。第一原理計算には VASP コード、機械学習には n2p2 コード、古典分子動力学には LAMMPS コードを用いた。第一原理計算に用いる交換相関エネルギーとしてメタ GGA の 1 種である SCAN を用いることで、格子定数や比熱などを良い精度で実験を再現することができた。特に **Bredig** 転移のピーク温度は図に示したように実験値を良く再現した。

3. 結果

機械学習分子動力学を用いることで、通常的第一原理計算では評価が困難な比熱等の高温物性を評価することに成功した。本手法では、第一原理計算と同程度の精度で、より大規模なシミュレーションが可能であることが分かり、燃料物性評価の数値計算手法として有効であると言える。



図：機械学習分子動力学による CaF_2 の比熱。
1430K が **Bredig** 転移の測定値。

*Hiroki Nakamura¹, Masahiko Machida¹ and Masato Kato¹

¹Japan Atomic Energy Agency