

# セメント水和物に対する機械学習分子動力学法による解析

Analysis of cement hydration by machine learning molecular dynamics

\*小林 恵太<sup>1</sup>, 中村 博樹<sup>1</sup>, 山口 瑛子<sup>1,2</sup>, 板倉 充洋<sup>1</sup>, 町田 昌彦<sup>1</sup>, 奥村 雅彦<sup>1</sup>

<sup>1</sup>日本原子力研究開発機構, <sup>2</sup>東京大学

セメント水和物に対する機械学習力場を構築した。機械学習力場を用い、格子定数、弾性係数、振動状態密度等の物性値を計算した。得られた物性値は実験値とよく一致する結果となった。また、機械学習分子動力学を実行し、セメント水和物表面に近くにおける水やイオンの分布や拡散に関する解析を行った。

**キーワード:** 機械学習、分子動力学法、セメント水和物

## 1. 緒言

セメント水和物はセメントと水を混ぜることにより生成され、コンクリート中では骨材間を繋ぎ合わせる糊(セメントペースト)としての役割を果たしている。セメント水和物は、建築材としての利用はもとより、セシウム等を強く吸着することから、放射性核種の閉じ込め材料としての役割を果たしている。セメント水和物の結晶構造等には未知な部分が多いが、近年では分子動力学法等により原子レベルでの理解が進んできている。本発表では、第一原理計算と同等の精度で分子動力学の実行が可能となる、機械学習分子動力学法を用いセメント水和物の解析を行った。

## 2. 手法

セメント水和物のモデル物質としてトバモライトを対象とした。9Å, 11Å, 14Å トバモライトに対し、第一原理分子動力学計算を実行し、各ステップでの結晶構造とポテンシャルエネルギーから成るデータセットを生成した。また、セメント水和物の表面状態等への解析にも対応できるように、トバモライト表面-水界面を含んだデータセットを作成した。機械学習手法としてはBehler-Parrinelloのニューラルネットワーク(BPNN)を使用した。生成したデータセットを用いBPNNを訓練することにより、与えられた構造からポテンシャルエネルギーを出力する機械学習力場を作成した。機械学習力場を用い、格子定数、弾性係数、振動状態密度等を評価した。更に、機械学習分子動力学計算を実行することにより、トバモライト表面における水の拡散や、カルシウムイオンの分布などを評価した。

## 3. 結論

格子定数、弾性係数、振動状態密度の計算結果を第一原理計算と比較した結果、作成した力場は第一原理計算と精度を持つことを確認した。トバモライト表面が水に接したモデル(3080原子)に対し、機械学習分子動力学を実行し、表面近傍での水の拡散定数やイオンの分布などを計算した。得られた計算結果は実験の結果をよく再現するものであった。

---

\*Keita Kobayashi<sup>1</sup>, Hiroki Nakamura<sup>1</sup>, Akiko Yamaguchi<sup>1,2</sup>, Mitsuhiro Itakura<sup>1</sup>, Masahiko Machida<sup>1</sup>, Masahiko Okumura<sup>1</sup>

<sup>1</sup>JAEA, <sup>2</sup>Tokyo-Uni