

機械学習分子動力学による CaF_2 の高温物性の評価

Evaluation of high-temperature properties of CaF_2 with machine-learning molecular dynamics

*中村 博樹¹, 町田 昌彦¹

¹原子力機構

第一原理計算を学習した機械学習分子動力学を用いて、酸化燃料の代替物質であるフッ化カルシウムの高温物性を評価した。特に、比熱等の高温物性を詳細に調べ、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。

キーワード：機械学習分子動力学，第一原理計算， CaF_2

1. 緒言

核燃料の開発においては、二酸化アクチノドの詳細な物性値が必要となる。しかし、アクチノドを含む核燃料物質は取り扱いの制限や高温での実験の困難さのため、測定によって詳細な物性を得ることが簡単ではない。それゆえに、数値計算によって測定された物性値の精度を補間していくことは燃料開発やシビアアクシデントの解析において重要な役割を担ってくる。物性評価のための代表的な数値計算手法としては、古典分子動力学と第一原理計算が上げられる。古典分子動力学は大規模かつ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精度の高い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として、近年注目されているのが機械学習分子動力学法である。この手法では、第一原理計算によるエネルギーの計算を学習した原子間ポテンシャルを作成して、それを用いて古典分子動力学を行うという手法である。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、酸化燃料と同じ結晶構造をもつフッ化カルシウムに対して、機械学習分子動力学を用いた高温物性評価を行い、その有効性を確認する。

2. 計算方法

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構築して、古典分子動力学を行い、 CaF_2 の比熱や熱膨張率を評価した。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。

3. 結果及び考察

機械学習分子動力学で得られたエンタルピーの温度依存性(図参照)や熱膨張は第一原理分子動力学の結果と一致した。また、第一原理分子動力学では、計算負荷のため評価が困難であった融点の評価も成功した。本手法を用いれば、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。

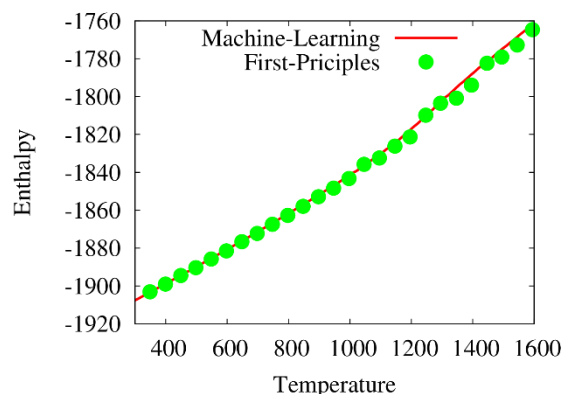


図 機械学習分子動力学と第一原理分子動力学による CaF_2 のエンタルピーの温度依存性

*Hiroki Nakamura¹, and Masahiko Machida¹

¹Japan Atomic Energy Agency