

人工知能（AI）技術を取り入れた核燃料開発研究の加速

（1）全体概要

Acceleration of nuclear fuel development research incorporating artificial intelligence (AI) technology

（1）Overview

*小無健司¹、有田裕二²、矢板毅³、渡辺博道⁴、森本恭一³、渡部雅³

¹東北大学, ²福井大学, ³JAEA, ⁴産総研

データサイエンスと呼ばれる研究手法を用いて高温での核燃料の物性を評価する。この手法の妥当性を確認するために、放射光を用いた高温実験を実施する。

キーワード：核燃料, 人工知能

1. 緒言

現代において急激に進展していた分野の一つは AI である。様々な分野で AI を利用したビッグデータの解析技術が成功を収めている。本課題では、この AI 技術を用いて核燃料を原子単位のナノ構造から理解し、その特性を評価することを目指す。また、このデータ科学を用いた研究手法の妥当性を評価するため、ナノ構造を評価出来る高輝度放射光 (SPring-8) 実験を実施しその結果を、理論から推定した結果と比較する。

この研究では、これまで実験の困難性のためデータ入手が難しかった熔融状態での核燃料の物性値取得にこの方法を利用する。これにより核燃料開発研究の加速を目指す。

2. 研究手法

2-1. ニューラルネットワークポテンシャルの作製

材料中の原子は室温では定まった結晶構造を取るが、高温では熱振動のため格子点からずれた位置に移動する。本研究では、高温で想定される原子配置を含めて、予め多くの配置を作製しそれぞれについて、第一原理計算を実施する。この第一原理計算結果の集団をビッグデータとして扱う。このビッグデータに対して AI 技報を利用してニューラルネットワークポテンシャルを作製する(図1)。この手法では、実験データを必要とせず、理論(量子力学)のみに基づいて物性を評価している。

本シリーズ発表では、CeO₂ および ZrO₂ について、このポテンシャルを用いた分子動力学計算結果を紹介する。

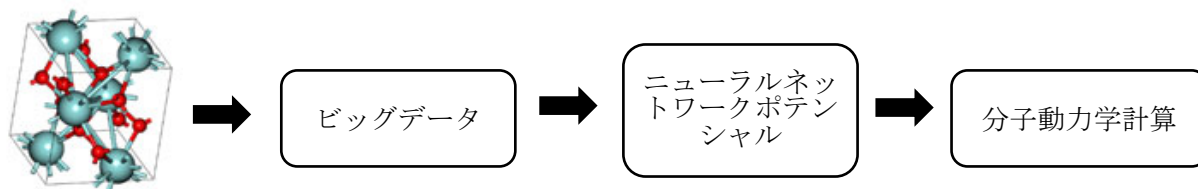


図1 ニューラルネットワークポテンシャル作製の流れ

2-2. 高輝度放射光実験

理論計算では、必ずしも物性を推定出来るとは限らない。そこで、二体相関価数や配位数が測定できる XAFS (X線吸収微細構造解析) 試験を SPring-8 の放射光を用いて実施する。この試験結果と理論計算結果を比較する。

3. 結論

核燃料開発では、網羅的に実験データを取得してきたため、期間と費用が掛かっていた。この手法を用いれば大幅に削減できることが期待できる。

謝辞

本研究発表は、文部科学省 原子力システム研究開発事業「人工知能(AI)技術を取り入れた核燃料開発研究の加速」の成果の一部を含む。

*Kenji Konashi¹, Yuji Arita², Tsuyoshi Yaita³, Hiromichi Watanabe⁴, Kyoichi Morimoto³, Masashi Watanabe³

¹Tohoku Univ., ²Fukui Univ., ³JAEA, ⁴AIST)