

人工知能(AI)技術を取り入れた核燃料開発研究の加速 (2) CeO₂ のニューラルネットワークポテンシャルの作成

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

(2) Development of neural network potential of CeO₂

小無 健司¹, *加藤 信彦², 森 一樹²

¹東北大学, ²伊藤忠テクノソリューションズ(株)

人工知能(AI)技術を用いて CeO₂ のニューラルネットワークポテンシャルを作成した。このポテンシャルを用いて分子動力学(MD)計算により、エンタルピー、比熱、融点、融解熱、線膨張係数を計算した。

キーワード: ニューラルネットワーク、機械学習、分子動力学

1. 緒言

CeO₂ は UO₂ や PuO₂ などの核燃料体の模擬試験材料として利用されているが、高温時の熱物性の理解が不十分となっている。一方で、高温時の材料物性の詳細を調べる方法として、第一原理計算や分子動力学(以下 MD)計算などの原子レベルのシミュレーションが有効である。しかし、第一原理計算では計算コストがかかり、MD 計算では原子間ポテンシャルの精度が不十分であるため、CeO₂ の高温時の材料物性を計算した研究は少ない。そこで本研究では第一原理計算よりも高速で既存の MD 計算よりも高精度なニューラルネットワーク MD を用いて CeO₂ の熱物性の評価を行った。

2. 研究手法

2-1. 学習データおよびニューラルネットワークポテンシャルの作成

蛍石型 CeO₂ の結晶構造に対して、温度 100K~5000K、圧力-50kbar~50kbar の条件下で第一原理 MD 計算を実施し、約 70,000 個の学習モデルを作成してニューラルネットワークポテンシャルの学習を行った。第一原理計算コードには VASP を使用した。

2-2. ニューラルネットワーク MD による熱物性計算

作成したニューラルネットワークポテンシャルを用いて、分子動力学計算を実施し、CeO₂ の熱物性を評価した。分子動力学計算コードには LAMMPS を用いた。図 1 に CeO₂ の融点(2673K)近傍の密度変化を示す。温度 2650K~2700K の間で結晶が溶融して密度が減少する結果を得た。これによりニューラルネットワーク MD を用いることで融点を高精度に予測できることが分かった。また他の物性値(融解熱、比熱、熱膨張係数など)も同様に実験値を再現することができた。

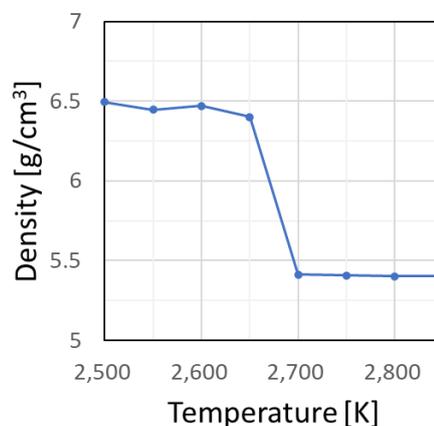


図 1 CeO₂ の密度変化

3. 結論

ニューラルネットワーク MD を用いることで従来の力場パラメータを用いた MD 計算では再現が困難であった熱物性値に対しても高精度に予測することが可能であることが確認できた。本手法は CeO₂ の溶融現象も含めた熱物性の評価に非常に有用であると考えられる。

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, *Nobuhiko Kato² and Kazuki Mori²

¹Tohoku Univ., ²ITOCHU Techno-Solutions Corp.