

人工知能（AI）技術を取り入れた核燃料開発研究の加速 （3）ZrO₂ のニューラルネットワークポテンシャルの作製

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

(3) Development of neural network potential of ZrO₂

小無 健司¹, *森 一樹², 加藤 信彦²

¹東北大学, ²伊藤忠テクノソリューションズ(株)

第一原理計算データからニューラルネットワークを構成し MD 計算と連携したニューラルネットワーク MD の手法を用いて、原子力材料分野の物性を評価する。

キーワード：ニューラルネットワーク, 機械学習

1. 緒言

従来の古典力場を用いた分子動力学 (MD) 計算では、ポテンシャル関数に含まれる係数を実験データに合うようにフィッティングしている。そのため計算結果の物理学的意味が曖昧になり実験データ無い領域へ計算結果の適用が難しくなる。一方、第一原理計算を用いた高精度な計算では、計算結果の物理学的意味は明確であるが小規模なモデルしか取り扱いができないため取り扱える物理現象が限られていた。そこで、第一原理計算データからニューラルネットワーク (NN) を構成し MD 計算と連携したニューラルネットワーク MD の手法を用いて、蛍石型酸化物の融点付近のシミュレーションを中心に実施した。本発表では対象材料を ZrO₂ とした計算結果を示す。

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製

ZrO₂ の結晶構造に対して温度 0K から 4,000K、圧力-50kbar~+50kbar の条件下の第一原理 MD 計算で実施し、約 40,000 個の学習モデルを作製した。第一原理計算には汎用コードである VASP を利用し、この学習モデルを用いてニューラルネットワークポテンシャルを作製した。

2-2. ニューラルネットワーク MD による計算

MD 計算には汎用コードである LAMMPS を利用した。ZrO₂ の温度を 300K から 4,000K まで上昇させ、密度及び拡散係数の変化から融点を評価した。図 1 に密度の計算値を温度に対してプロットしたものを示す。その結果、融点は 3000K から 3050K の範囲にあると考えられる。融点の実験値は、2715°C(2988K)で有るので十分な予測精度があると結論出来る。

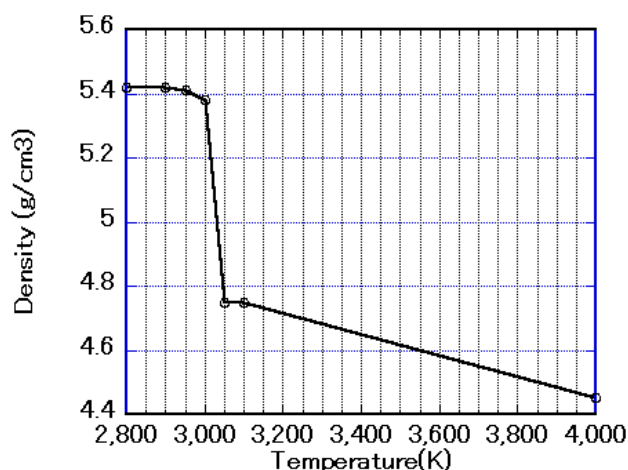


図 1 ZrO₂ の密度の温度変化

3. 結論

今回の計算には実験データを利用しておらず理論のみの評価で融点正確に予測出来ている。ニューラルネットワークポテンシャルを用いた MD 計算は、ZrO₂ の溶融現象解析に優れた手法であると結論出来る。

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, *Kazuki Mori², Nobuhiko Kato²

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