

機械学習を用いた高熱伝導率ウラン化合物の網羅的探索

Exploring Uranium Compounds with High Thermal Conductivity using Machine Learning

*金明玉¹, 熊谷将也^{1, 2}, 大石佑治³, 黒崎健^{1, 4}

¹京都大学, ²さくらインターネット株式会社, ³大阪大学, ⁴福井大学

本研究では、材料科学と情報科学が融合した Materials Informatics (MI) を核燃料開発に適用し、新しい高熱伝導率ウラン化合物を提案することを目的とする。

キーワード : マテリアルズ・インフォマティクス, 機械学習, ウラン化合物, 核燃料, 熱伝導率

1. 序言

近年、材料科学と情報科学が融合した Materials Informatics (以下 MI と略す) が注目されており、磁性材料や熱電材料などを対象とした材料研究分野で主流となりつつある。ところが、原子力分野の材料研究において、MI 研究は未だ発展途上である。そこで本研究では、原子力分野における核燃料開発に MI を適用する。具体的には、機械学習を利用して高い熱伝導率を有するウラン化合物を網羅的に探索する手法を使用して、高い熱伝導率を有する新しいウラン化合物を提案する。

2. 研究手法

本研究では、材料の化学組成に基づいた特徴量を設計し、熱伝導率を対象とした機械学習モデルを設計した (図 1)。学習・検証データには、本研究グループが独自に開発した実験的物性値データベース Starraydata¹⁾、機械学習手法にはランダムフォレスト、検証手法には五分割交差検証法を利用した。学習された機械学習モデルを用いて、高熱伝導率ウラン化合物を探索した。

3. 結果

熱伝導率を 93% の精度で予測できる機械学習モデルを構築した (図 2)。学習済み機械学習モデルを用いて、実際に存在し得るウラン化合物 951 個について熱伝導率を予測し、最も熱伝導率の高いものから最も低いものまでの化合物を明らかにした。

4. 結論

本研究により、高熱伝導率ウラン化合物の提案に成功した。今後、本研究で明らかになった高熱伝導率ウラン化合物を実験的に合成し、機械学習モデルの妥当性を評価する。

参考文献

[1] Y. Katsura, M. Kumagai et al., STAM 20 (2019) 511-520.



図 1. 本研究で設計した機械学習モデル

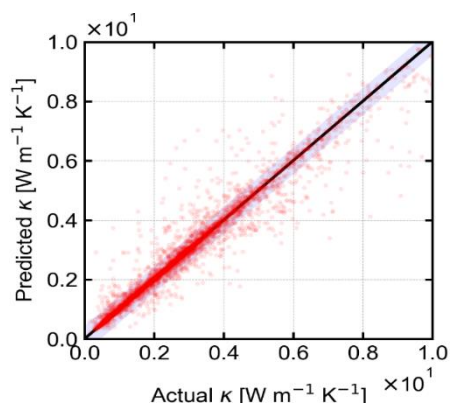


図 2. 予測データと正解データの関係

*Kin Meigyoku¹, Masaya Kumagai^{1, 2}, Yuji Ohishi³, Ken Kurosaki^{1, 4}

¹Kyoto Univ., ²Sakura Internet, ³Osaka Univ., ⁴Univ. of Fukui