

人工知能（AI）技術を取り入れた核燃料開発研究の加速 (5) 全体概要

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

(5) 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, 森 一樹⁵, 加藤 信彦⁵

¹東北大学, ²福井大学, ³JAEA, ⁴産総研, ⁵CTC

東京電力福島第一原子力発電所の事故以来、核燃料の高温での振る舞いに関心が集まっている。データ科学と呼ばれる研究方法を用いて高温での核燃料の物性を評価する。この方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：酸化物, ZrO_2 , 熔融, 人工知能, ニューラルネットワークポテンシャル, 分子動力学

1. 緒言

核燃料の融点は、例えば UO_2 を例にとると 2865°C (3140K) と非常に高いため、その実験手法が確立されていない。新しい取り組みとして、人工知能（AI）の手法を用いたデータ科学による理論的な数値計算と放射光からの高輝度X線による構造解析実験を組み合わせた方法が進められている[1,2]。放射光を用いた熔融 UO_2 のX線回折実験は米国 ANL のグループによって実施されている[1]。しかし、XAFS 試験の報告例はまだ無い。これはガス浮遊した UO_2 をレーザー照射により熔融させる手法が用いられているため試料の半径は $2\sim 3\text{mm}$ の大きさが必要のため XAFS 法で用いる X 線のエネルギーでは試料を透過させることが出来ないためである。 UO_2 の XAFS 実験は、試料の抵抗加熱手法を用いて成功しているが、最高温度は 2000K に留まっている[2]。この研究では抵抗加熱法を用いて微小試料を融点以上まで加熱し XAFS 実験試験を実施した。実験結果は、ニューラルネットワークポテンシャルを用いて実施した理論計算結果と比較された。

2. NN ポテンシャルによる分子動力学計算

実験は、 UO_2 の模擬物質として ZrO_2 を用いて行われた。図 1 に NN ポテンシャルによる拡散係数の分子動力学計算結果を示す。蛍石構造の高融点酸化物に見られる融点以下の温度での酸素の活発な移動（2段階熔融）が起きていることが分かる。これを XAFS 実験結果と比較する。

3. まとめ

ZrO_2 でこの手法の有効性が確認出来れば UO_2 に適用できる可能性は高い。

謝辞

本研究発表は、文部科学省 令和2年度および令和3年度の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。

参考文献

- [1] Skinner, L. B. et al., 'Molten Uranium Dioxide Structure and Dynamics'. Science 2014, 346 (6212), 984–987.
[2] D. Prieur et. al. 'Peculiar Thermal Behavior of UO_2 Local Structure', Inorg. Chem. 2018, 57, 14890–14894

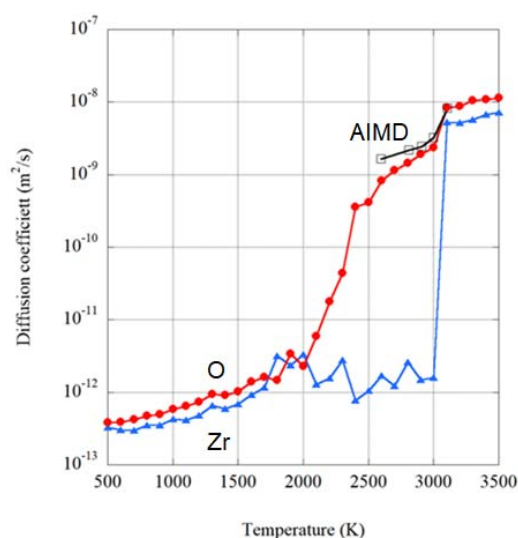


図 1 ZrO_2 の拡散定数の計算結果

*Kenji Konashi¹, Yuji Arita², Tsuyoshi Yaita³, Hiromichi Watanabe⁴, Kyoichi Morimoto³, Kazuki Mori⁵, Nobuhiko Kato⁵

¹Tohoku Univ., ²Fukui Univ., ³JAEA, ⁴AIST, ⁵CTC