

Oral presentation | III. Fission Energy Engineering : 305-1 Computational Science and Engineering

📅 Fri. Sep 13, 2024 2:45 PM - 3:35 PM JST | Fri. Sep 13, 2024 5:45 AM - 6:35 AM UTC 🏢 Room H(Recture RoomsB 1F B102)

[3H08-10] Machine Learning 2

Chair:Kazuyuki Demachi(UTokyo)

2:45 PM - 3:00 PM JST | 5:45 AM - 6:00 AM UTC

[3H08]

Characterization of Specific Heat Anomalies in Fluorite Structures Using Local Order Parameters: Analysis by Machine Learning Molecular Dynamics

*Keita Kobayashi¹, Hiroki Nakamura¹, Masahiko Okumura¹, Mitsuhiro Itakura¹, Masahiko Machida¹ (1. JAEA)

3:00 PM - 3:15 PM JST | 6:00 AM - 6:15 AM UTC

[3H09]

Analysis of Clay Minerals-Water Molecules Interactions Using Machine Learning Molecular Dynamics

*Masahiko Okumura¹, Akiko Yamaguchi¹, Keita Kobayashi¹ (1. JAEA)

3:15 PM - 3:30 PM JST | 6:15 AM - 6:30 AM UTC

[3H10]

Development of the model for prediction of fission gas release from MOX fuel

*Kenta Inagaki¹ (1. CRIEPI)

3:30 PM - 3:35 PM JST | 6:30 AM - 6:35 AM UTC

Time reserved for Chair

蛍石構造における比熱異常の局所秩序変数を用いた特徴づけ ～機械学習分子動力学法による解析

Characterization of Specific Heat Anomalies in Fluorite Structures Using Local Order Parameters:

Analysis by Machine Learning Molecular Dynamics

*小林恵太¹、中村博樹¹、奥村雅彦¹、板倉充洋¹、町田昌彦¹

¹ 日本原子力研究開発機構

二酸化トリウム(ThO_2)や二酸化リチウム(Li_2O)などは、高温において比熱異常を示すことが知られている。今回、 ThO_2 と Li_2O に対して機械学習ポテンシャル(MLP)を作成し、機械学習分子動力学法(MLMD)により ThO_2 と Li_2O の比熱異常の解析を行った。

キーワード： 蛍石構造、逆蛍石構造、分子動力学、第一原理計算、機械学習

1. 緒言

核燃料物質である ThO_2 は蛍石構造を取り、高温においてブレディック転移に起因する比熱異常が引き起こされる。ブレディック転移とは、高温におけるアニオンの拡散により引き起こされる秩序無秩序転移の一種である。また、トリチウム増殖材である Li_2O は逆蛍石構造を取るが、逆蛍石構造では高温においてカチオンの拡散により比熱異常が引き起こされる。本発表では、第一原理計算の精度を保ったまま大規模分子動力学計算が可能となる MLMD を用い、 ThO_2 と Li_2O のブレディック転移の解析を行った結果を報告する。

2. 手法

ThO_2 および Li_2O の第一原理計算結果を学習し、MLMD の原子間ポテンシャルである MLP を作成した。Farthest point sampling 法と Bootstrap 法を用い、効率的に第一原理教師データの作成を行い、 ThO_2 および Li_2O とともに 1000 構造程度の第一原理教師データにより、融点等の実験値を再現可能な MLP を作成できることを確認した。 ThO_2 および Li_2O は高温においてアニオン(カチオン)の拡散がブレディック転移を引き起こすが、複数のアニオン(カチオン)が短時間で複雑に移動するため、その特徴付けは簡単ではない。本発表では液相・液相転移の解析に用いられる局所秩序変数[1]の方法論を援用し、(逆)蛍石構造における比熱異常の特徴づけを行った。

3. 結論

図1は(逆)蛍石構造におけるアニオン(カチオン)の局所八面体秩序変数の分布を示している。 $Q \approx 1$ は八面体秩序が保たれている状態を示し、 $Q < 0.75$ では八面体秩序が壊れた状況に対応する。ブレディック転移温度(T_c)前後で、局所秩序変数分布が、八面体秩序状態に対応するピーク($Q \approx 1$)から無秩序な状態に対応するピーク($Q < 0.75$)へ遷移していく様子が確認でき、局所秩序変数によりブレディック転移(秩序無秩序転移)の特徴付けがうまく行われていることが確認できる。また、図1では、八面体秩序が壊れた領域($Q < 0.75$)に特徴的な二つのピーク構造の存在が確認できる。発表ではこれらのピークの詳細や物理的な意味についても紹介する。

参考文献

[1] Tanaka, H., Tong, H., Shi, R. et al. Nat Rev Phys 1, 333–348 (2019).

*Keita Kobayashi¹, Hiroki Nakamura¹, Masahiko Okumura¹, Mitsuhiro Itakura¹, Masahiko Machida¹

¹JAEA

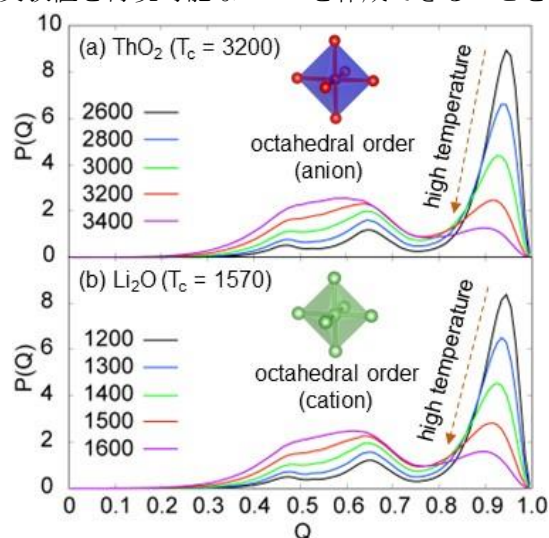


図1. 八面体秩序変数の分布。(a): ThO_2 , (b): Li_2O

機械学習分子動力学法による粘土鉱物-水分子相互作用の解析

Analysis of Clay Mineral-Water Molecule Interactions Using Machine Learning Molecular Dynamics

*奥村 雅彦¹, 山口 瑛子¹, 小林 恵太¹

¹JAEA

粘土鉱物は高レベル放射性廃棄物地層処分における放射性核種の人工バリアとして重要な物質であり、粘土鉱物と放射性核種の相互作用は周囲の水分子に強く影響されることがわかっている。本研究では、これまで調べられていなかった機械学習分子動力学法による粘土鉱物-水分子相互作用について調べ、高圧状態まで実験と整合的な結果が得られた。

キーワード：機械学習、分子動力学法、粘土鉱物、水分子

1. 緒言

これまで、粘土鉱物と水分子の相互作用は主に(1)低計算コスト低精度な古典分子動力学法と(2)高計算コスト高精度な第一原理分子動力学法が用いられてきた。近年、(2)の結果を人工ニューラルネットワーク等で学習し、高精度かつ低計算コストを実現する「機械学習分子動力学法」が提案され、講演者らはこの手法が最も単純な構造を持つ粘土鉱物の一種であるカオリナイトの物性を正確に再現することを示した[1]。しかし、この手法を粘土鉱物-水分子系に適用した例はない。一方、実験により、カオリナイトは高圧下で層間に水分子が入り込んだ「超水和カオリナイト」になることがわかっている[2]。超水和カオリナイトが発現するよりもさらに高圧にすると、水分子が動かなくなり、擬似的な氷状態になることが観測された[3]。このような高圧状態において、シミュレーションによって実験結果を再現するためには、シミュレーション手法に高い精度が要求される。

2. 機械学習分子動力学法による粘土鉱物-水分子相互作用評価

上記の背景を鑑み、講演者らは、このような高圧状態において、機械学習分子動力学法シミュレーションを実施し、7.5 GPa において擬似的な氷状態が実現することを示した（図1）。

これは実験結果[3]と整合する結果であり、7.5 GPa という高圧においても機械学習分子動力学法が高い精度を示すことがわかった。

2. 結論

本研究により、機械学習分子動力学法が様々な状況下において粘土鉱物-水分子相互作用を正確に記述することがわかった。今後は、多くの水分子との相互作用や、粘土鉱物表面における水の膜や氷の生成などの高精度シミュレーションへの応用が期待される。

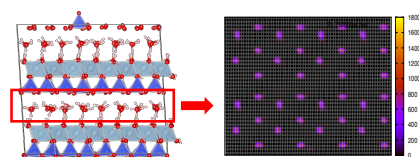


図1. 7.5GPa において擬似的な氷配置を形成するカオリナイトの層間水の配置

参考文献

- [1] K. Kobayashi *et al.*, Appl. Clay Sci. **228**, 106596 (2022).
- [2] H. Hwang *et al.*, Nat. Geosci. **10**, 947 (2017).
- [3] H. Hwang *et al.*, ACS Earth Space Chem. **4**, 183 (2020).

*Masahiko Okumura¹, Akiko Yamaguchi¹, Keita Kobayashi¹

¹JAEA

機械学習を用いた MOX 燃料 FP ガス放出挙動予測モデルの構築
Development of the model for prediction of fission gas release from MOX fuel

*稲垣健太¹
1 電中研

MOX 燃料からの FP ガス放出挙動（FGR）については、UO₂ 燃料と異なる挙動を示し、十分な精度のモデル構築に至っていない。本研究では、機械学習を用いて現象論的に FGR 挙動を予測することを試みた。まず、既往の MOX 燃料の照射データを集約し、FP ガス放出率と関連パラメータからなるデータベースを構築した。次に適切なパラメータを説明変数として抽出し、回帰分析により FGR の予測モデルを構築し、妥当性を確認するとともに課題を抽出した。

キーワード：FP ガス放出、機械学習、MOX 燃料、モデリング

1. 緒言

軽水炉燃料としての運用拡大が期待される混合酸化物燃料(Mixed Oxide Fuel : MOX (U, Pu)O₂)について、今後の効率的運用を目指すには UO₂ と同様程度の燃焼度までの燃焼度延伸が必要である。そのためには MOX 燃料の FP ガス放出挙動（FGR： Fission Gas Release）の解明が必須である。燃料挙動解析コードの FEMAXI や FRAPTRAN においては、ペレットの結晶内部における FP ガスの生成、拡散による粒界への移動、粒界からペレット外部への放出を考慮した機構論モデルが実装されている。これらのモデルは UO₂ 燃料からの FGR を精度良く予測できるものの、MOX 燃料からの FGR 予測精度については課題が残る。

2. 手法

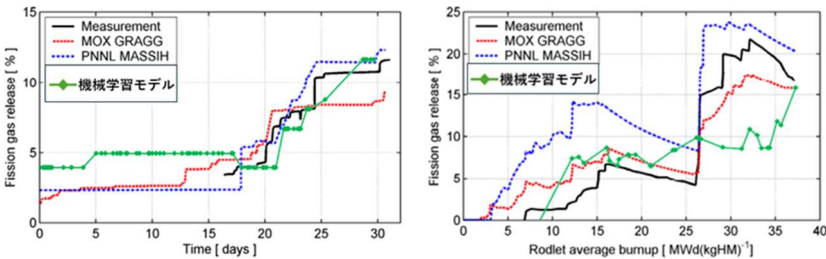
本研究では、既往の MOX 燃料の照射データを収集し、FGR（目的変数）と他のいくつかのパラメータ（説明変数）の関係を機械学習による回帰分析を用いて定式化し、現象論的なアプローチで FGR の予測を可能とすることを目指す。まず、文献調査等により既往の MOX 燃料の照射データをまとめ、MOX-FGR データベースを構築した(図 1)。収集できたデータ数はおよそ 100 点であった。FGR と相関性が強いと考えられるパラメータとして燃焼度と最大線出力を説明変数として抽出した。さらに、MOX-FGR データベースの各サンプルについて、線出力履歴を参照し、燃料中心部に位置する Pu スポットで生成された FP ガスのうち、結晶粒界に移行して蓄積した FP ガス量の割合を簡易的に評価し、これも説明変数に加えた。これらのデータを対象に勾配ブースティング法を用いた回帰分析を実施し、説明変数の値から FGR 値を予測する回帰モデルを構築した。

3. 結果

回帰モデルを用いて IFA629.3 の rod 6 および IFA597 の rod 10[1]の FGR を予測し、既往の機構論モデルによる予測結果と比較した(図 2)。予測結果の一部は既往の機構論モデル[2]に比べて精度の点で劣る。しかし機構論モデルが 2-3 点のサンプルに対してフィッティングされているが、本モデルは約 100 点のサンプルに対して現実的な挙動予測を可能にした。なお、本研究で実施したデータ分析において、MOX 燃料の Pu 含有量および Pu スポット割合と FGR の相関性がほとんどない結果となっており、MOX-FGR データの拡充などによる詳細な検討が必要である。

試料名	目的変数	説明変数		
	FGR[%]	燃焼度 [GWd/t]	最大線出力 [kW/m]	粒界 FP量 [%]
IFA597 rod10	6.5	16.9	31.6	13.2
IFA629.3 rod6	11.6	59.6	25.48	11.6
M501-4483(H)	0.5	32.74	21.21	17.1
PRIMOBD rod2	8.34	30.1	23.02	5.0
ATRPII C6P9	7.1	50	23	8.9
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

図 1 MOX-FGR データベース



(i) IFA629.3, rod 6

(ii) IFA597, rod 10

図 2 機械学習による FGR 予測

参考文献

[1] L.O.Jernkvist, “A model for fission gas release from mixed oxide nuclear fuel”, SKI report, 2008:30 (2007)

^{*}Kenta Inagaki¹ ¹CRIEPI