

機械学習に基づく原子力用 SiC 材料ポテンシャル関数の開発

Development of potential function for SiC materials used in nuclear applications based on machine learning

*王 抱朴¹、祝 梁帆¹、陳 昱婷¹、岩切 宏友²、森下 和功¹

¹京都大学, ²琉球大学

本研究は第一原理計算と機械学習方法を結合し、第一原理計算データを用いてニューラルネットワークを構築により、大きな適用規模と高い精度を持つ原子力用 SiC 材料のポテンシャル関数を開発した。

キーワード：SiC 材料, 第一原理計算, 機械学習, ポテンシャル関数, 照射損傷

1. 緒言

SiC 材料は多くの点で優れた特性を持っており、原子力材料として開発と検証が進められている。原子炉内の環境が材料に及ぼす影響を研究するため、分子動力学法を用いて材料の照射損傷挙動を分析できる。分子動力学法の信頼性は使用される原子間ポテンシャル関数の精度に依存している。しかし、現在 SiC 材料の分子動力学シミュレーションに広く用いられている Tersoff と MEAM ポテンシャル関数は、欠陥形成エネルギーの第一原理計算結果と一致しないことが確認されている。GW-ZBL ポテンシャル関数はより正確な欠陥形成エネルギーを提供することができるが、欠陥移動エネルギー障壁の計算に対する信頼性は低い[1]。これらのポテンシャル関数を用いて SiC の照射損傷挙動シミュレーションを行うと、研究の信頼性が低下する可能性がある。そのため、原子間相互作用を正確に記述できる新たなポテンシャル関数の開発が求められている。第一原理計算は量子力学の基本原則に基づく計算方法により、より正確な原子間ポテンシャルを得ることができるが、その系は数百原子に限られ、計算コストが高く、適用規模は小さいである。一方、人工知能技術の発展に伴い、機械学習方法が第一原理計算で得られるデータを学習し、ニューラルネットワークポテンシャル関数を構築することは、計算速度と規模を向上させることができる。そこで、照射損傷挙動に対して信頼性の高い分子動力学シミュレーションを行うために、本研究では、高精度とされる第一原理計算方法を用いて、SiC のポテンシャルエネルギーを計算し、ニューラルネットワークを構築し、大きな適用規模と高い精度を兼ね備える SiC のポテンシャル関数を開発した。

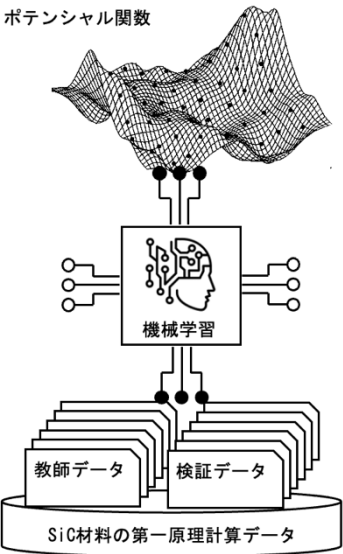


図1 第一原理計算と機械学習の結合

2. 計算

第一原理計算は SIESTA コードを用いて QST のスーパーコンピュータで行った。ニューラルネットワークの構築は dpdata や DeePMD-kit などのコードを使用した。ポテンシャル関数に良好な汎化能力を持たせるために、完全結晶構造、異なる格子定数、および空孔や格子間原子が存在する構造で計算と訓練を行った。

3. 結果

216 原子を含む、合計 149 構造の SiC の第一原理計算スーパーセルを構築した。図 2 に示すディープニューラルネットワークを開発し、隠れ層はポテンシャル関数として抽出された。

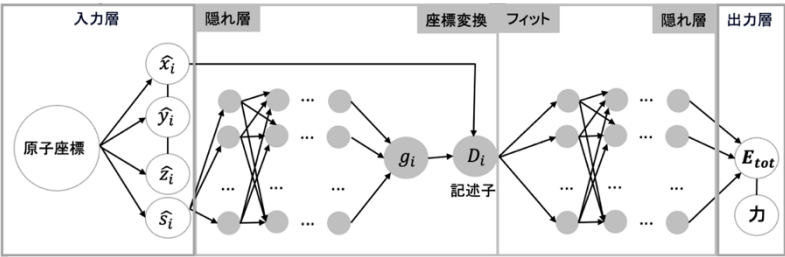


図2 開発されたディープニューラルネットワーク (DNN)

参考文献

[1] G. D. Samolyuk, et al. Journal of Nuclear Materials, 2015, 465 (83-88).

*Baopu Wang¹, Liangfan Zhu¹, Yuting Cheng¹, Hiroto Iwakiri² and Kazunori Morishita¹

¹Kyoto Univ., ²Ryukyus Univ.