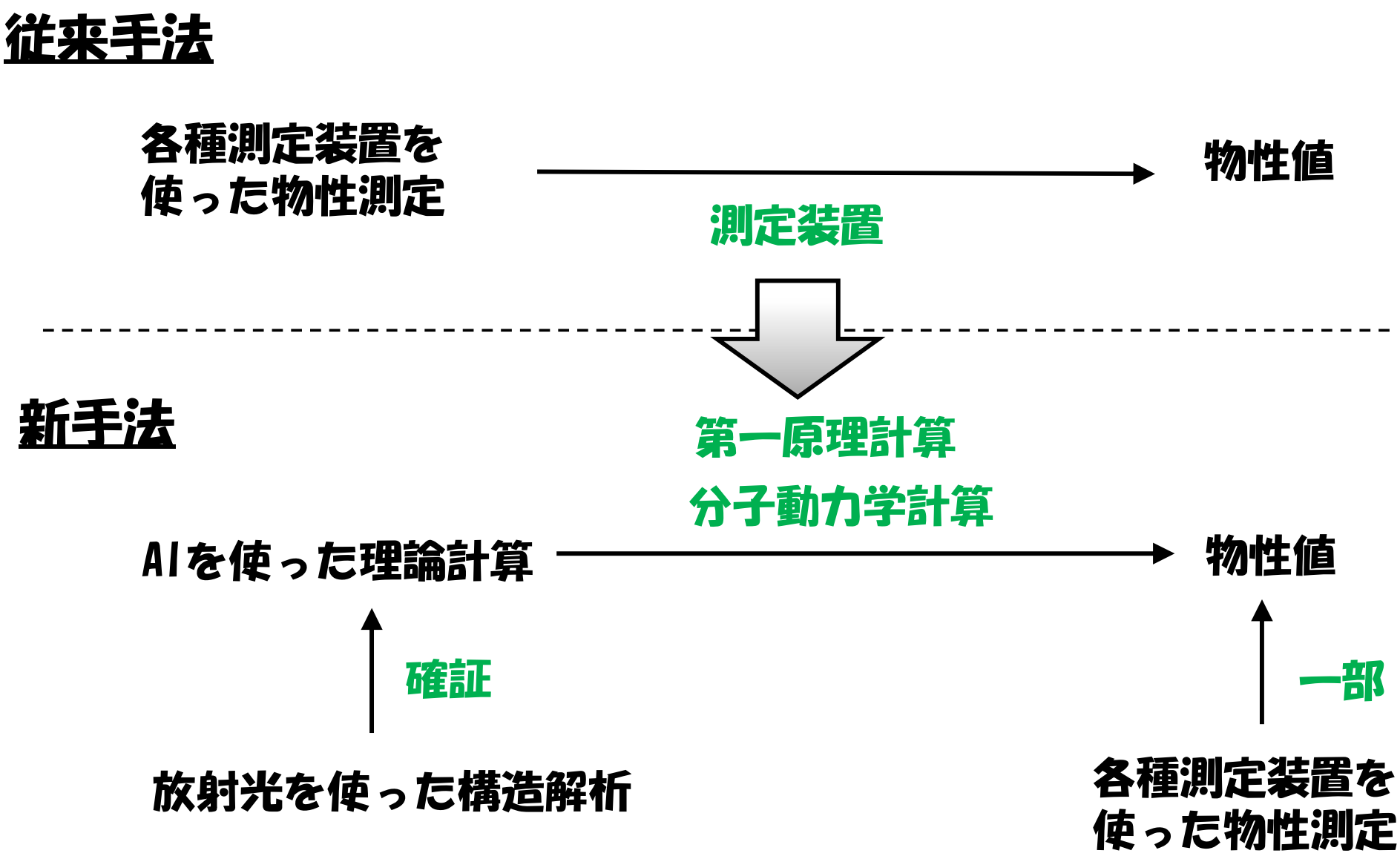
「人工知能（AI）技術を取り入れた核燃料開発研究の加速」

東北大学　小無健司
福井大学　有田裕二
原子力機構　森本恭一、矢板毅
産総研　渡辺博道

実験試料作成はNFD（樋口徹）に協力頂いた

概要


従来手法
各種測定装置を
使った物性測定
物性値
測定装置
新手法
第一原理計算
分子動力学計算
AIを使った理論計算
物性値
確証
一部
放射光を使った構造解析
各種測定装置を
使った物性測定

目的

•東京電力福島発電所での過酷事故以来、核燃料の溶融に関する研究が注目されるようになった。しかしながら、3000Kを越える核燃料の研究は、従来の実験手法では困難であり新しい研究手法が模索されている。

•本研究では、実験データを使わずに固体物性の基礎理論（電子論）とデータ科学（人工知能、機械学習）を用いて物性値を計算し事故時の挙動を解析する方法の確立を目指す。

•理論計算の妥当性を検証するための、3000Kを越える温度でのSPring-8放射光を用いたXAFS試験手法を開発する。

計算科学的アプローチ

•古典分子動力学（ Classical Molecular Dynamics）

経験的パラメータを含んだ原子間ポテンシャルによる物性評価。

•第一原理計算（ First Principles またはab-initio ）

物質は元素が電子を媒介として結びついたものと考え、量子力学の基本方程式を解くことにより物質内での電子状態を計算し、物性を評価する方法。経験的パラメータや実験データによらず、計算のみで物性評価が出来る。

•ニューラルネットワーク（NN）ポテンシャル

第一原理計算結果をデータベースに蓄積し、人工知能（AI）的手法（深層学習）を用いて広範囲の温度条件で使用できる分子動力学用ポテンシャルを開発する。

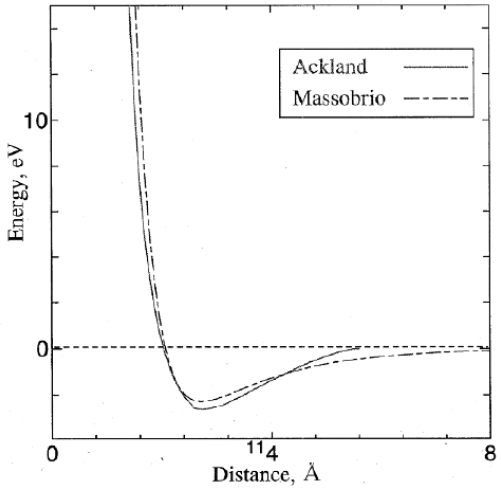
人工知能（AI）を用いたポテンシャルの作成

物質

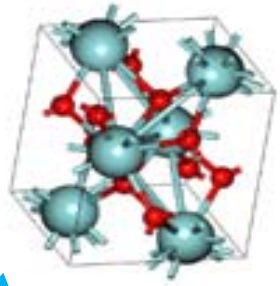
実験データ

パラメータフィッティング

二体ポテンシャル



AIを用いてより高度に行う

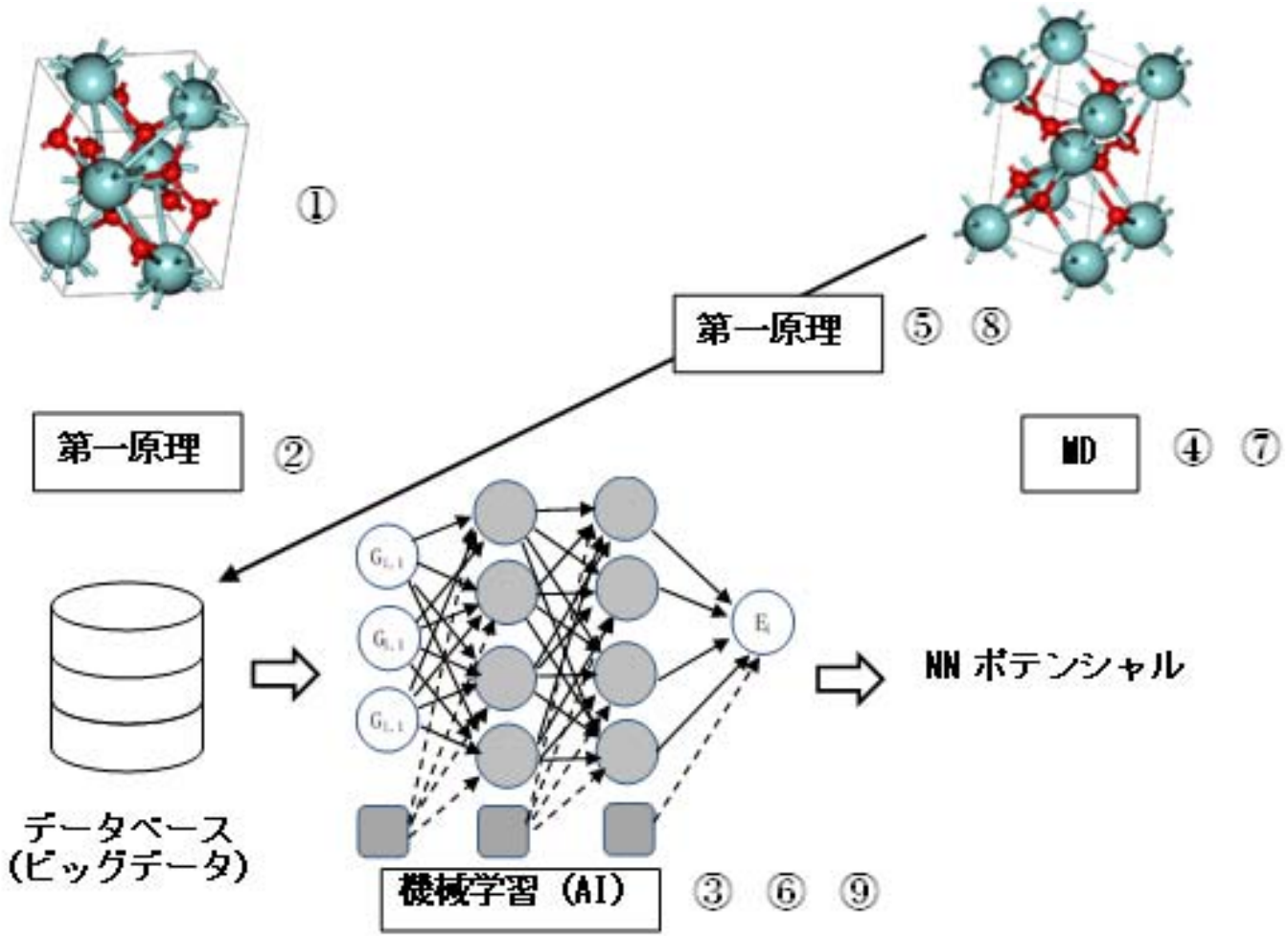


第一原理計算

ニューラルネットワークポテンシャル

機械学習

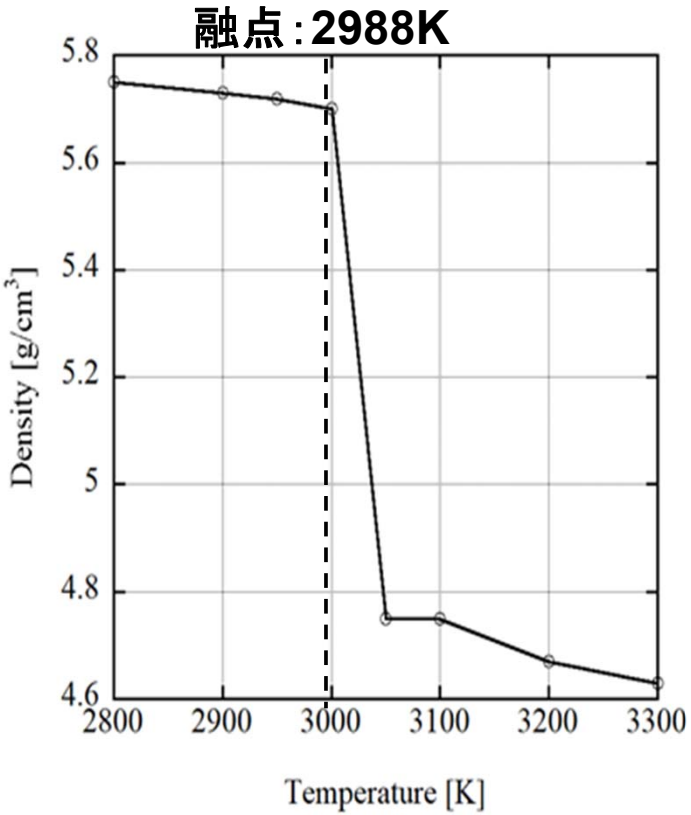
ZrO_2、CeO_2のNNポテンシャル作成



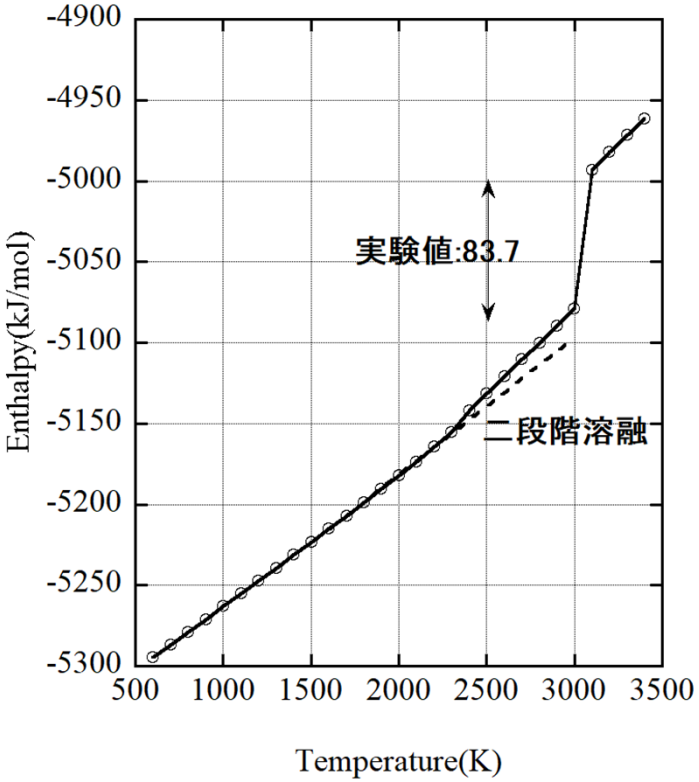
2×2×2スーパーセル(96原子)、結晶及びランダム構造
汎用第一原理コード:VASP
分子動力学コード:LAMMPS
学習データ数:30,000個
深層学習ツール:DeepMD-kit

計算の成果

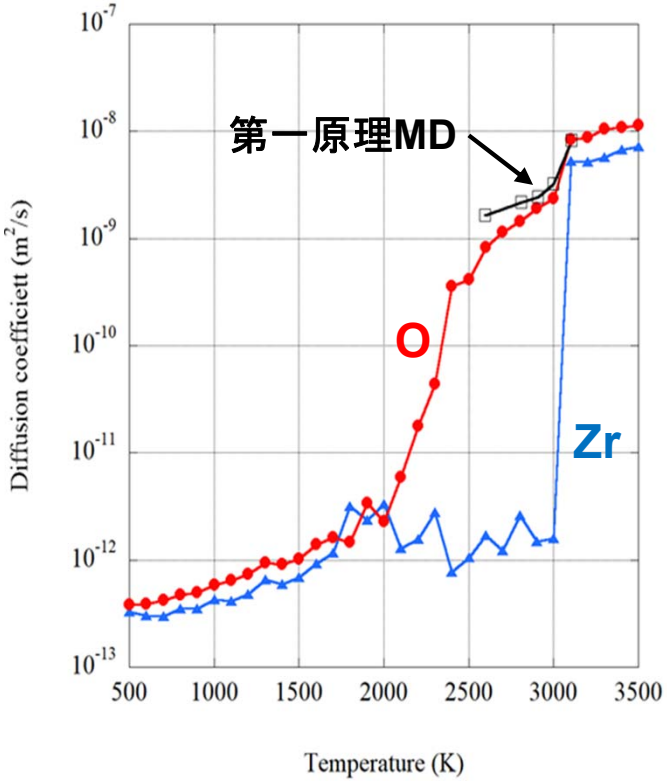
- ZrO_2とCeO_2のNNポテンシャルを作成した。
- NNポテンシャルを用いたZrO_2の物性値の計算結果を以下に示す。



密度

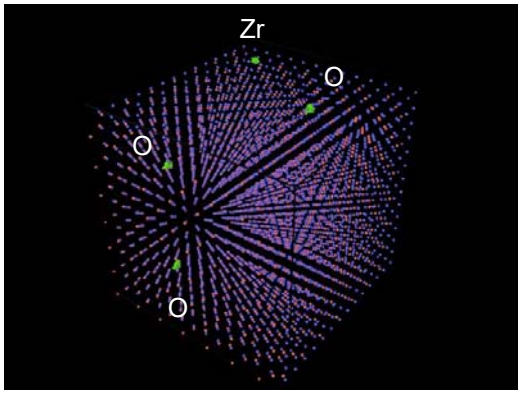


エンタルピー

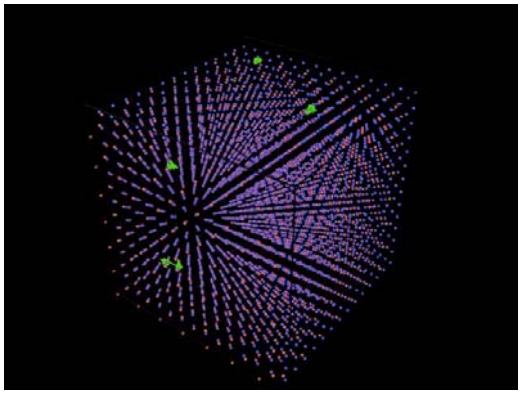


拡散係数

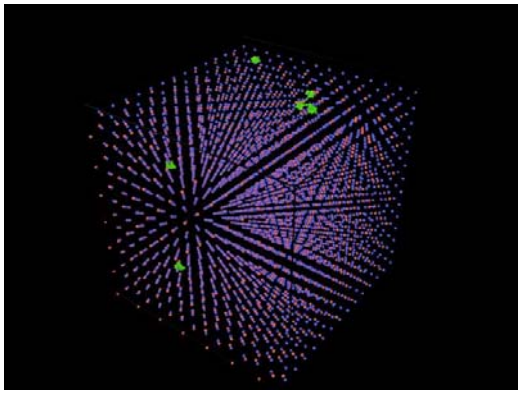
原子軌跡の温度依存性（ZrO_2）



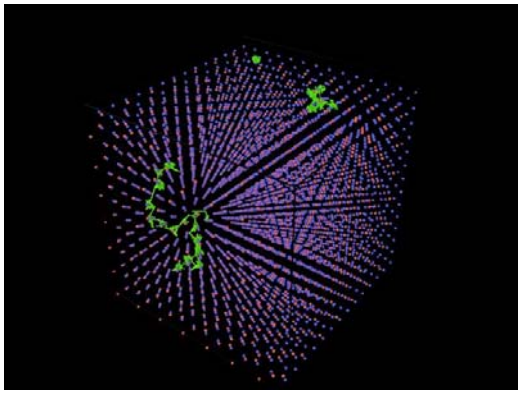
1800K



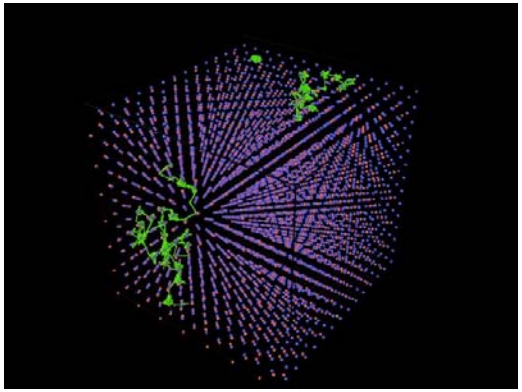
2000K



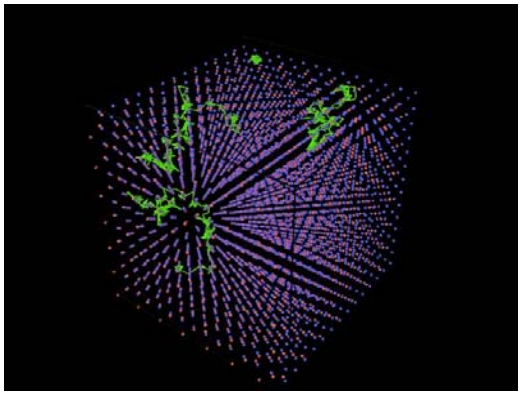
2200K



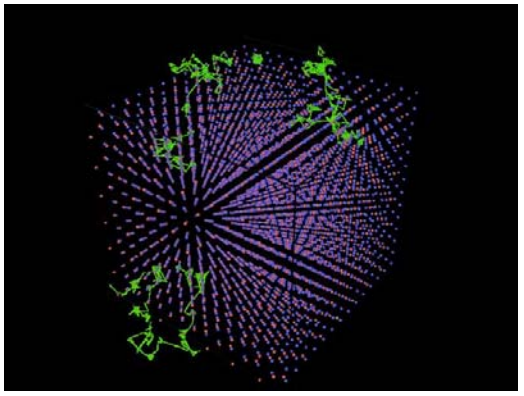
2400K



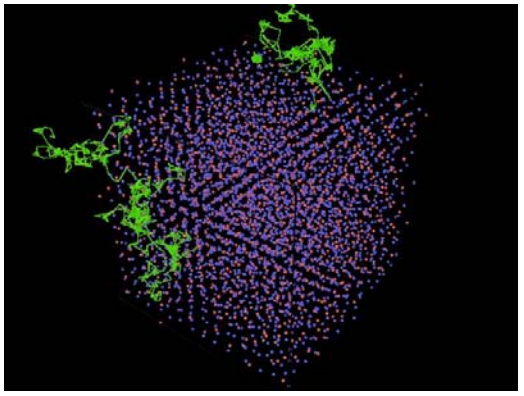
2600K



2800K



3000K



3200K

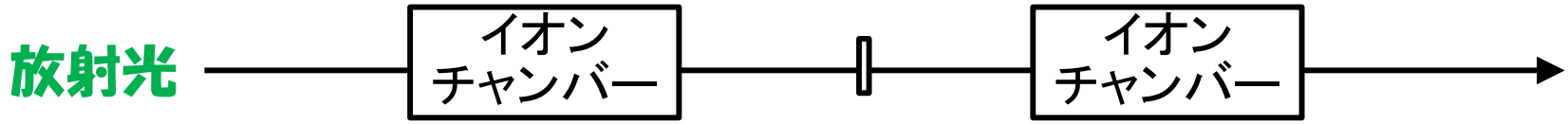
実験的アプローチ

- シンクロトロン放射光施設 (SPring-8)を利用する

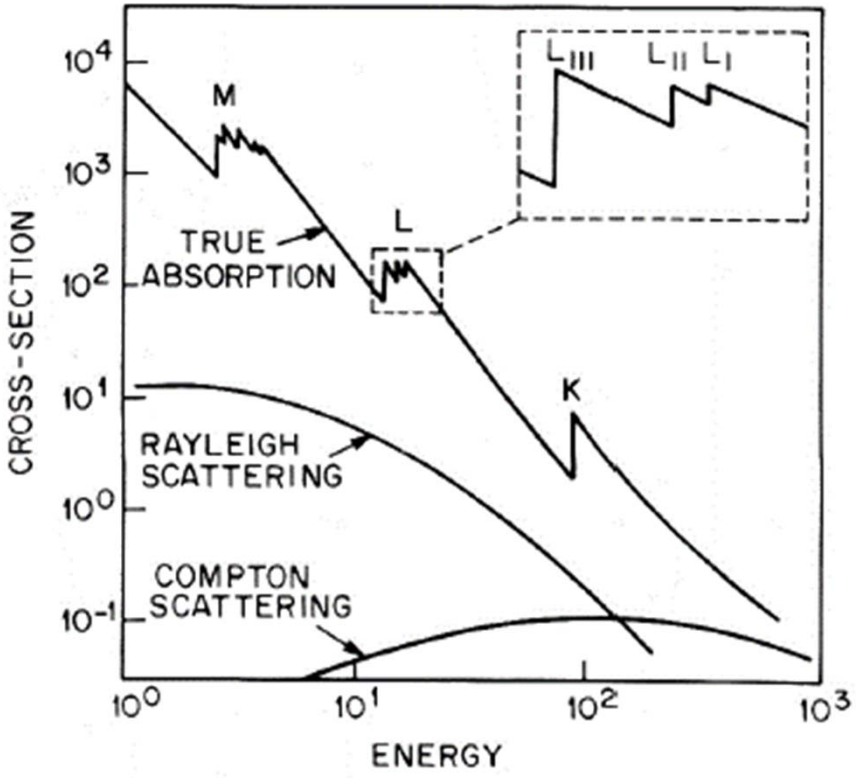
- XAFS (X-ray Absorption Fine Structure).
  XANES (X-ray Absorption Near Edge Structures)
  (電子状態(価数)、対称性)
  EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure)
  (局所構造(配位数、結合距離)

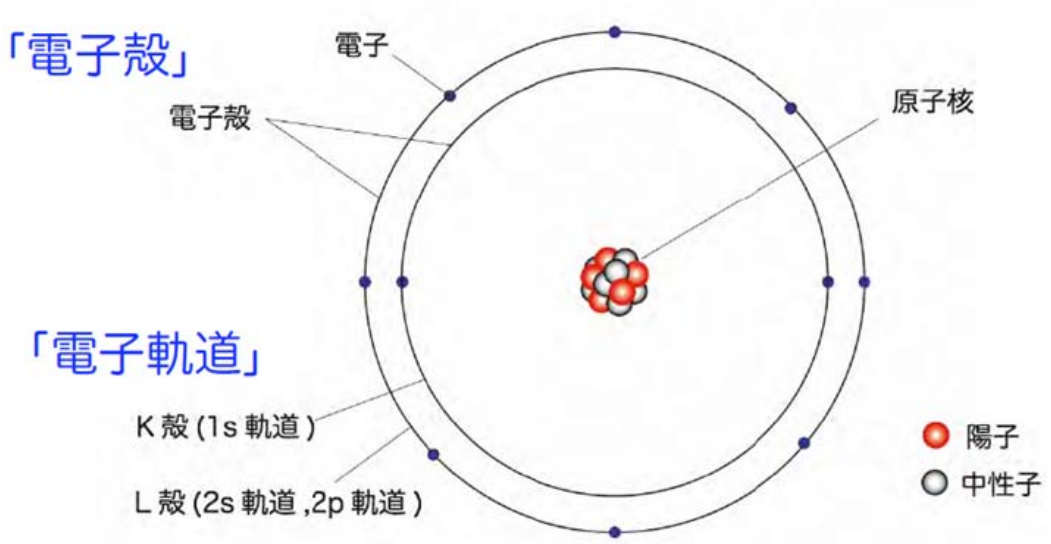
→計算結果と比較

XAFSの原理（1/2）

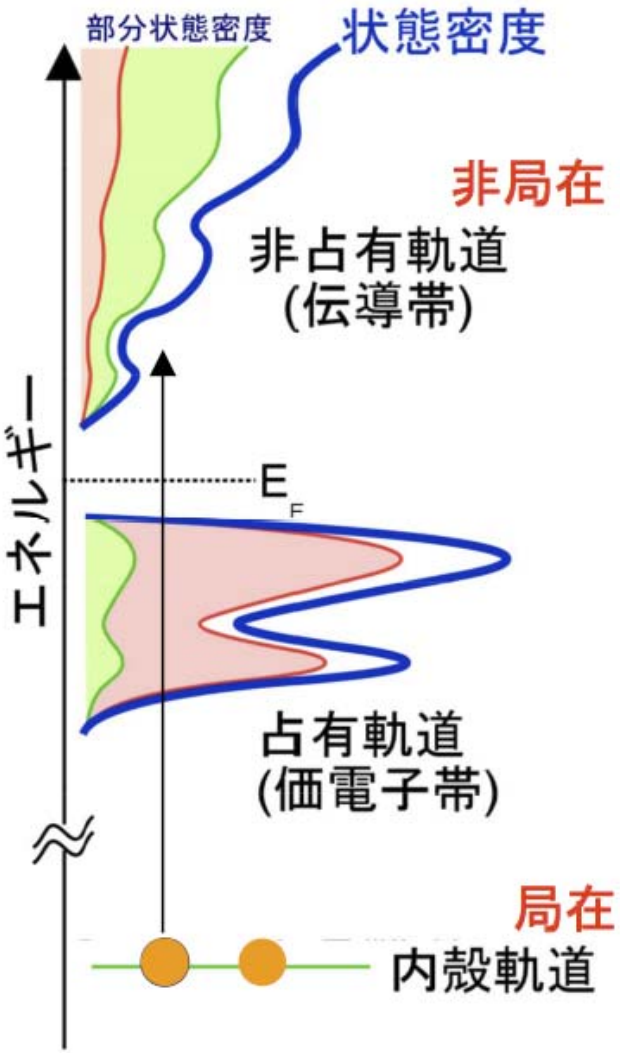


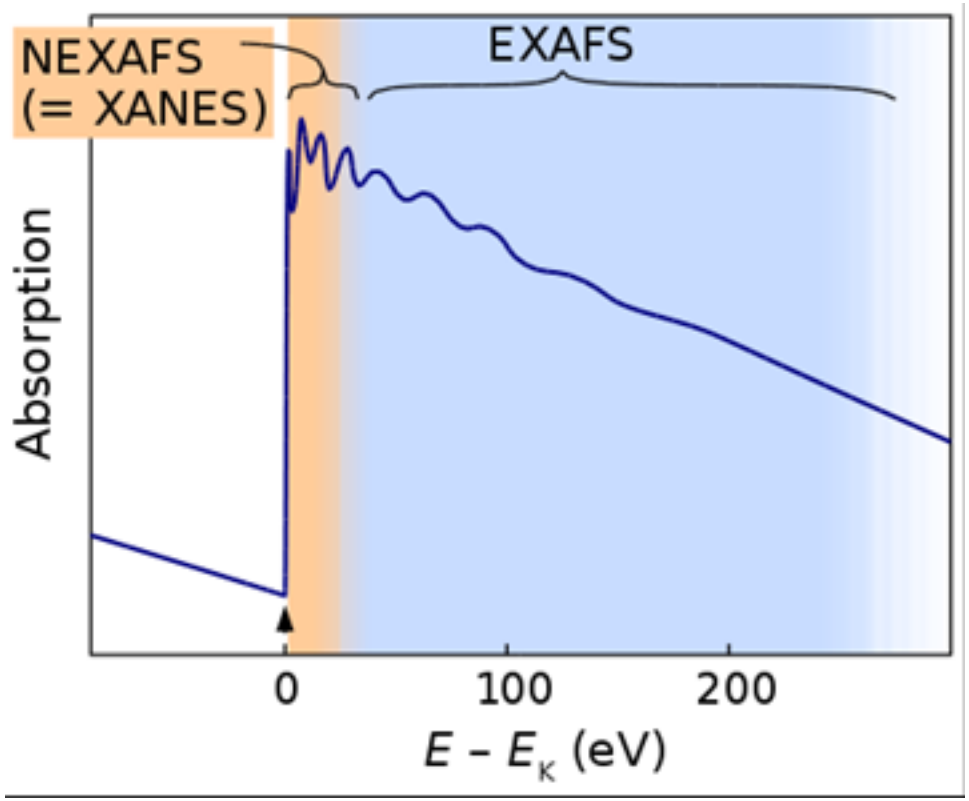
（高エネルギー，高強度）





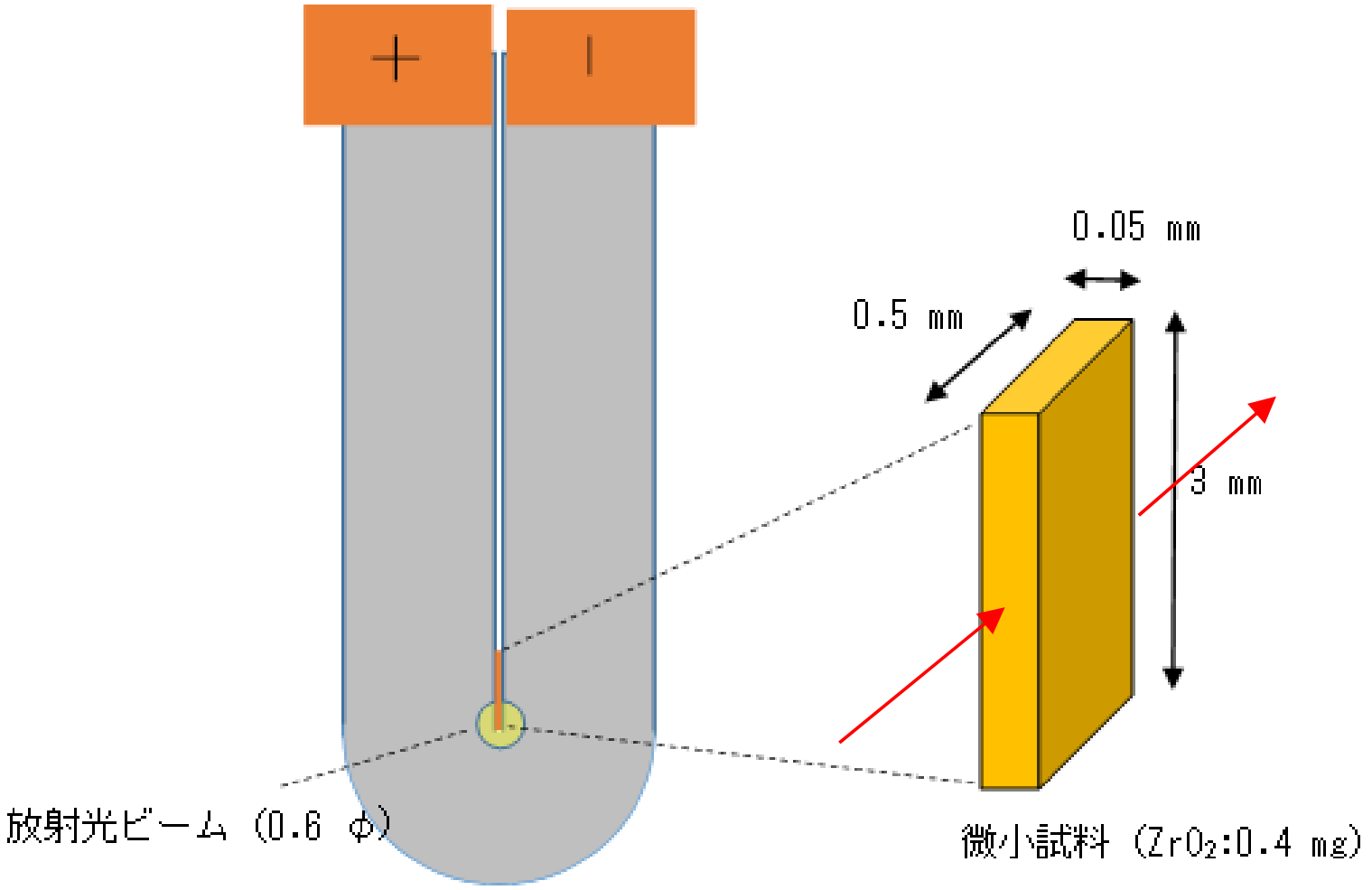
XAFSの原理(2/2)


部分状態密度
状態密度
非局在
非占有軌道
(伝導帯)
エネルギー
E_F
占有軌道
(価電子帯)
局在
内殻軌道

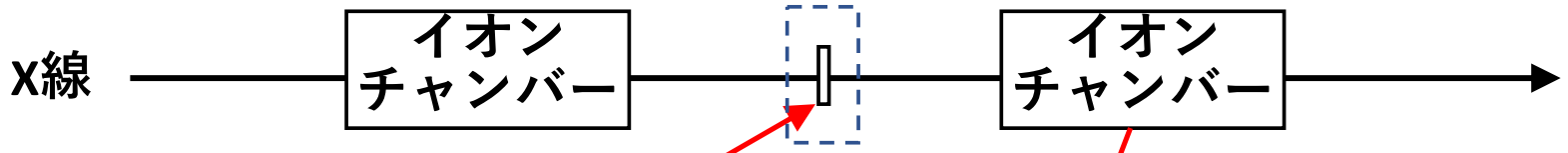

NEXAFS
(= XANES)
EXAFS
Absorption
0
100
200
$E - E_K$ (eV)

高温用試料ホルダー

•新たに考案した試料ホルダーでZrO_2の溶融に成功した。（特許申請中）

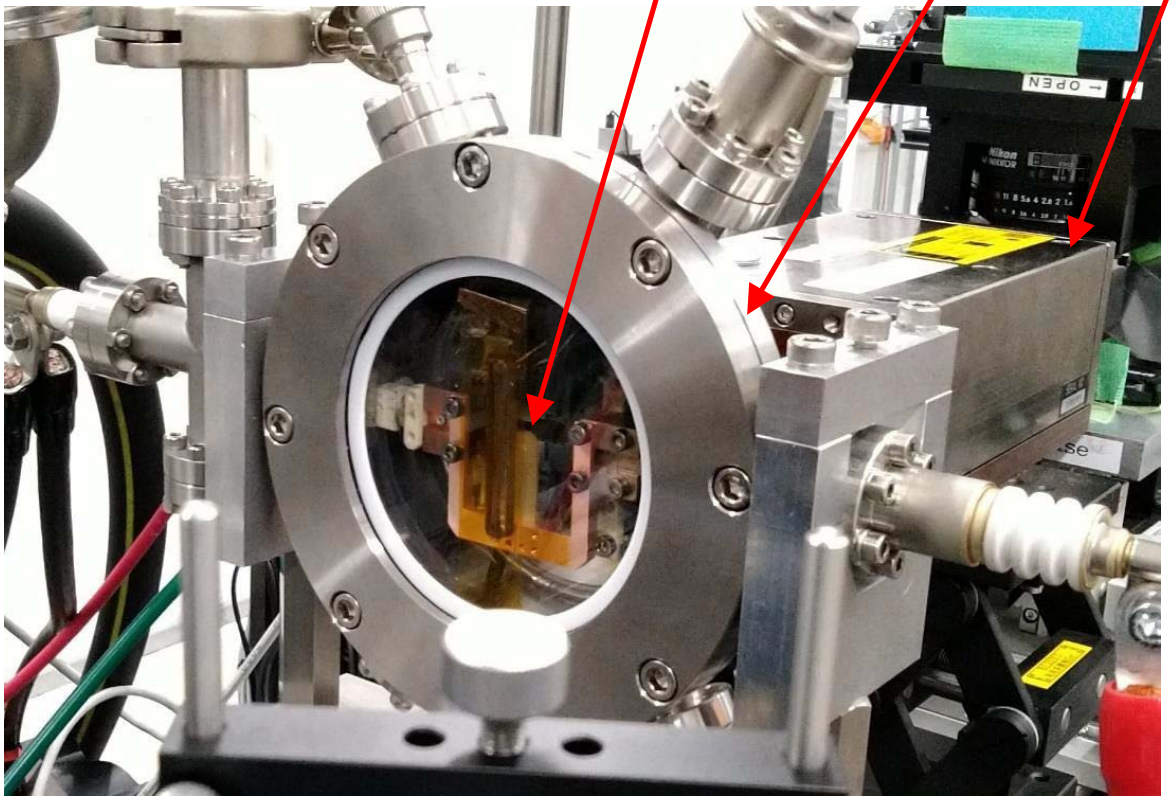


XAFS実験装置

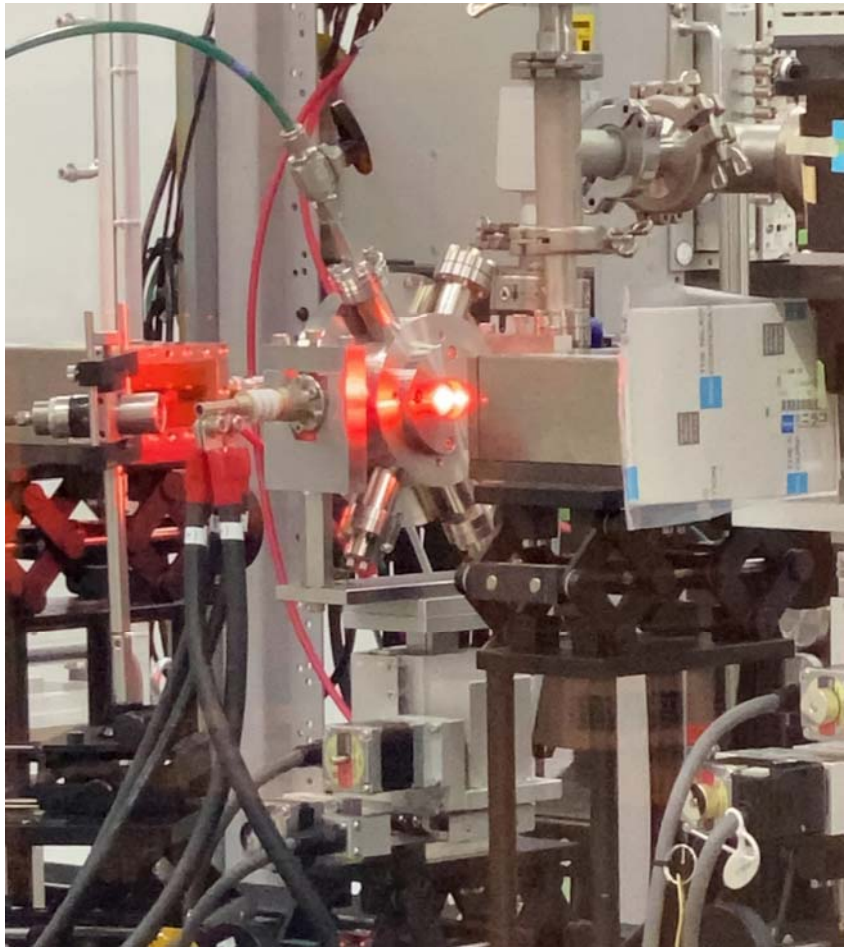


W試料ホルダー

加熱チャンバー



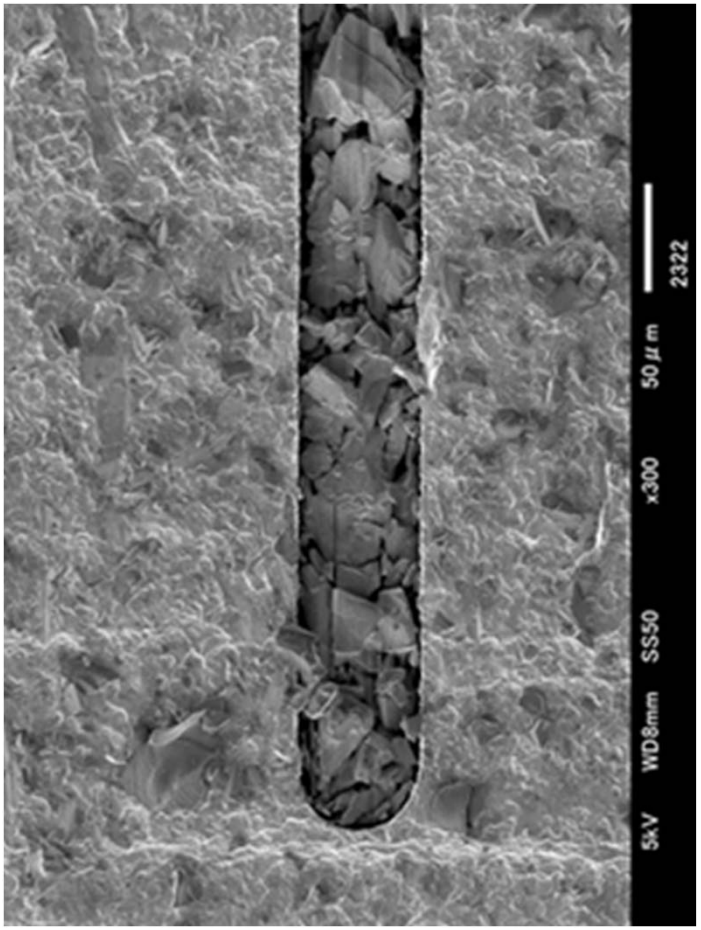
試験チャンバー



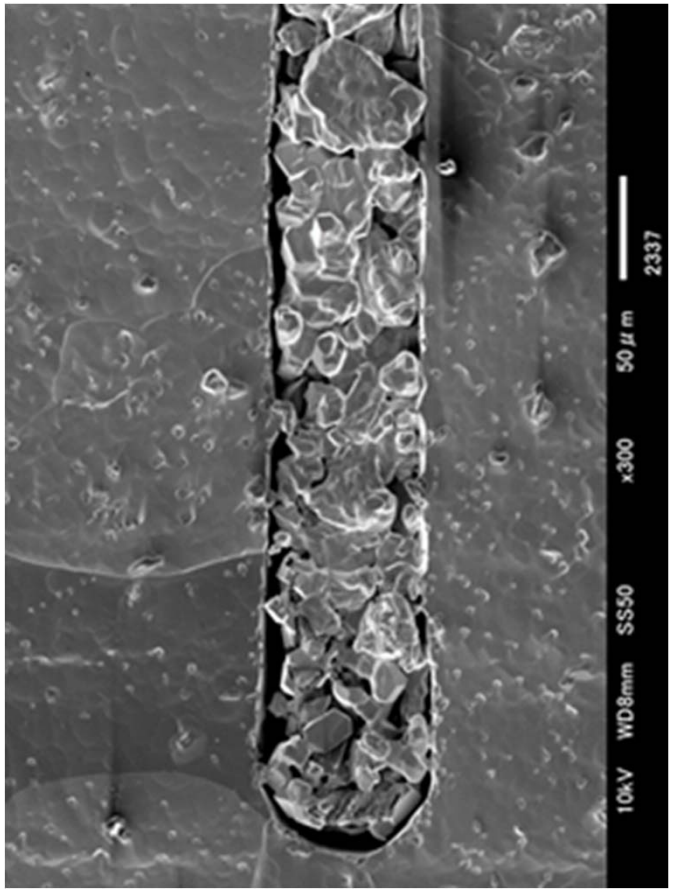
実験装置外観

ZrO_2の溶融

- ZrO_2の融点：2715 ℃を越えて加熱することに成功

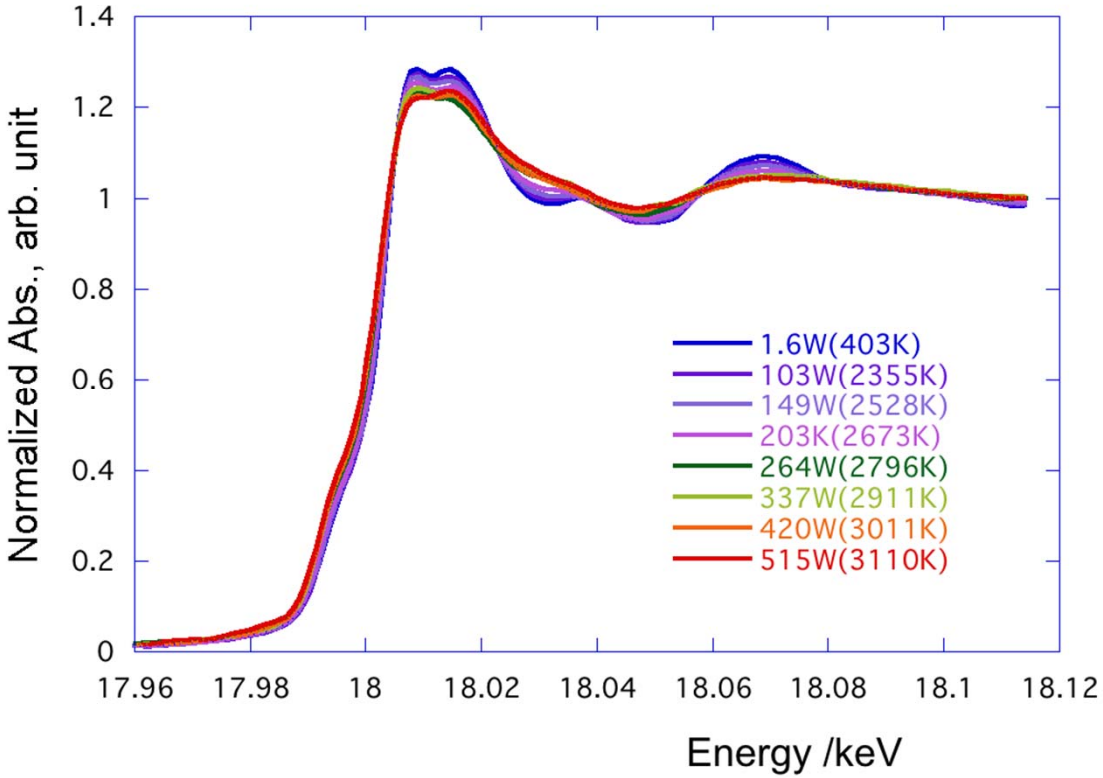


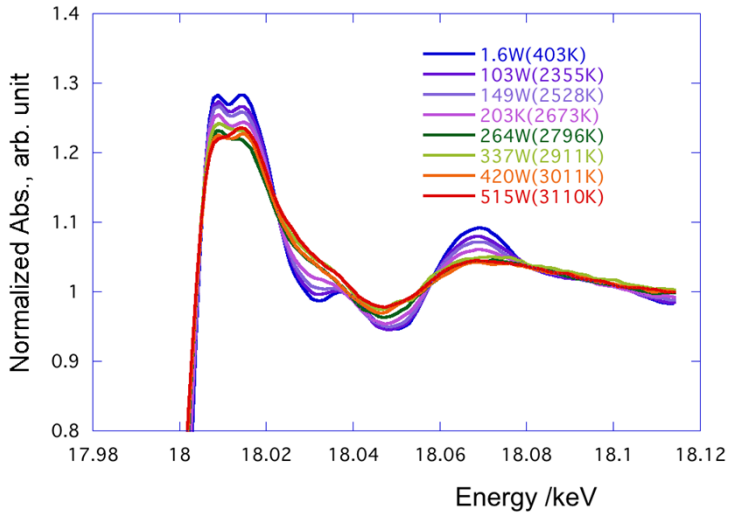
加熱前

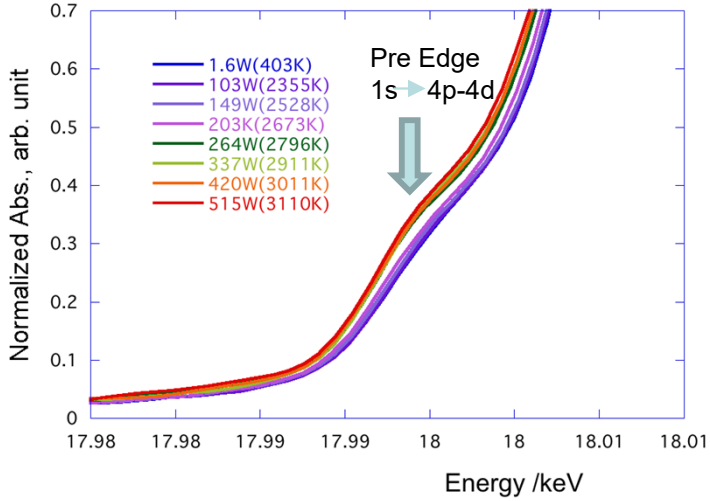


加熱後

ZrO_2 のXAFS 試験結果



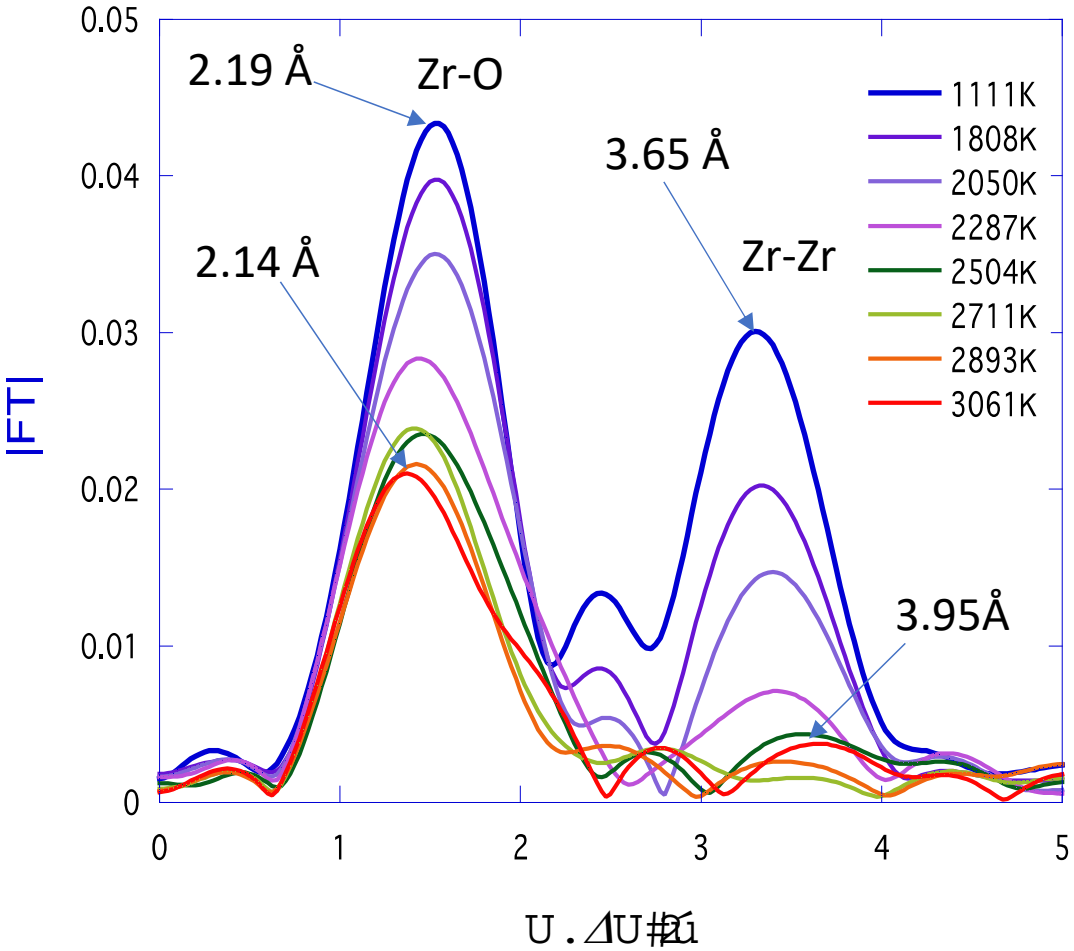




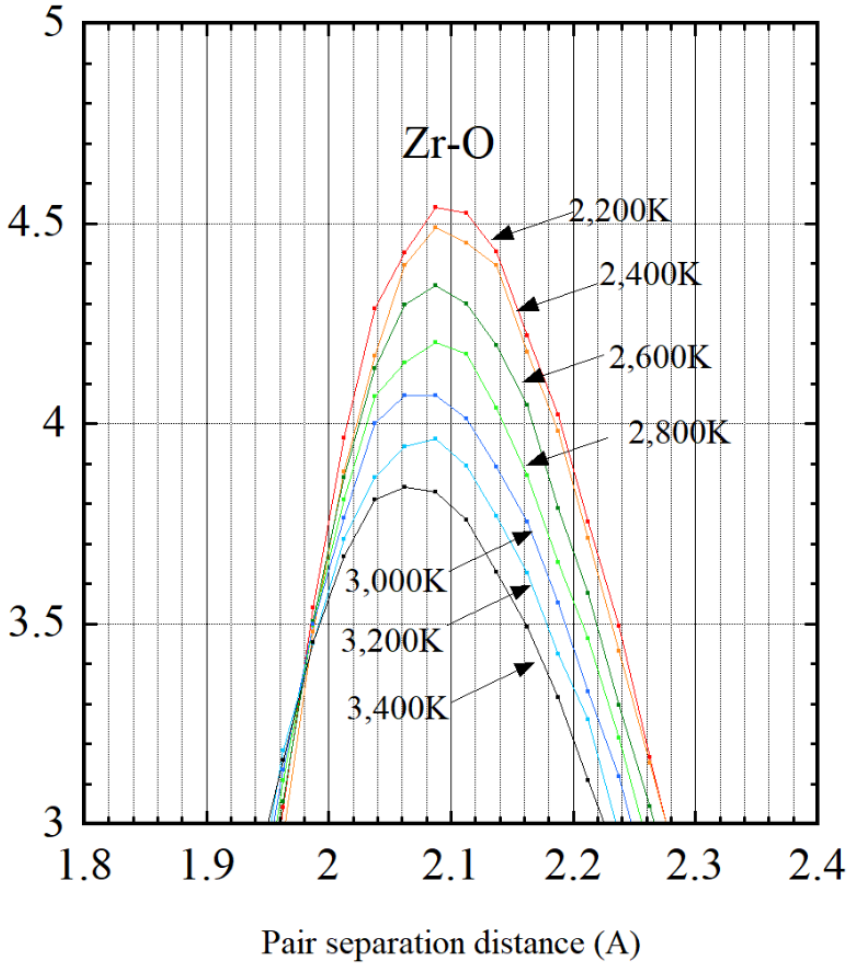
ノーマライズしたXAFSスペクトル

高温での動径構造関数

•温度の上昇とともにZr-Zr間の距離が大きくなりZr-O間の距離が短くなる。



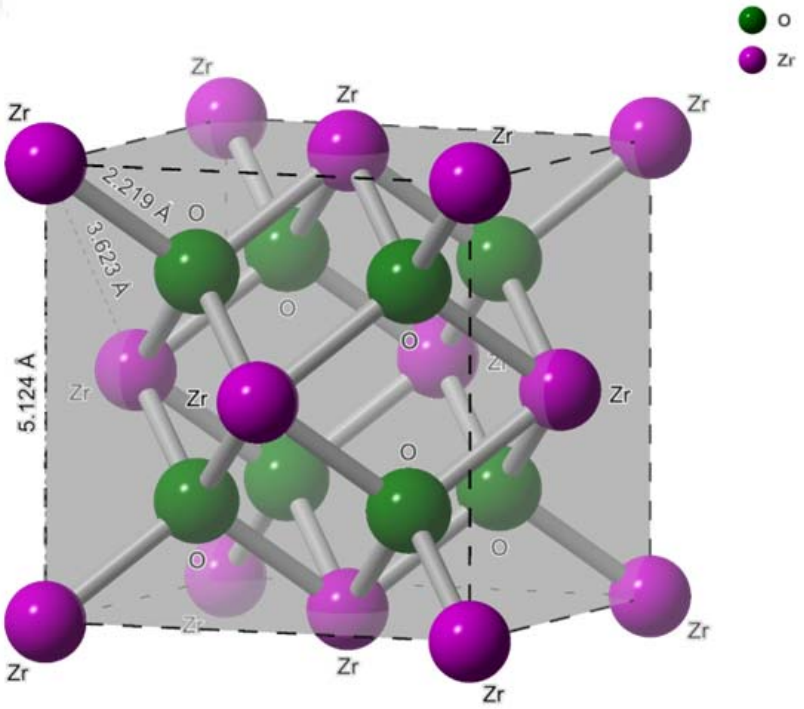
Zr-K XAFS実験



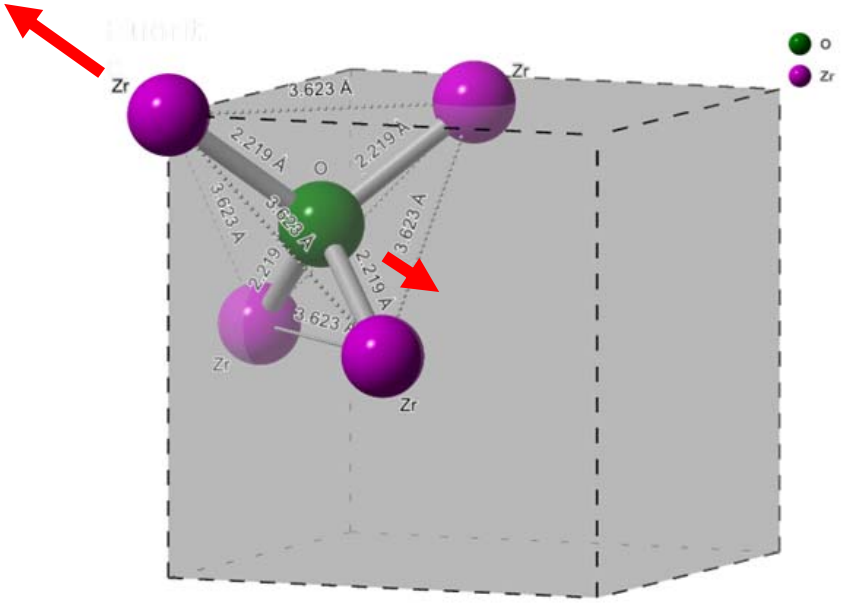
計算結果

酸素の格子位置からの変位

•酸素は格子位置（Zr-正四面体中心）からZr-正三角形の中心方向にずれる



蛍石構造の酸素の格子位置



熱膨張と酸素の変位

まとめ

- 実験データを使わずに理論計算のみで、ZrO_2の融点近傍の温度での物性値を計算することが出来た。

- SPring-8放射光実験用に新たに超高温用試料ホルダーを考案した。これを用いて、 ZrO_2を融点以上の温度に加熱しデータを得ることが出来た。

- 今後はZrO_2の成果を基にUO_2の理論計算と実験確証研究に進む。
- UO_2に対する研究課題は、理論計算では強相関電子系物質への対応が課題である。また、実験確証では、核燃料取扱への対応が課題である。

ご静聴有り難うございました。