

核燃料物質内の原子の動きを「機械学習」で予測

- 核燃料物質の性質を精度よく高速に推定 -

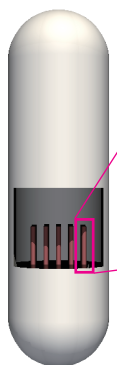
課題

核燃料の高温での性質を調べるための原子レベルのシミュレーションには数千個以上の原子が必要。しかし、従来の高精度な計算は 100 原子程度しか扱えず、高精度な評価ができなかった。

成果

「機械学習」を応用し、高温での核燃料の性質について信頼性の高い予測が可能になった。

次世代型原子炉



次世代炉

従来とは異なる新燃料を使用



新燃料

新燃料の安全性評価が必要
熱物性の基礎データ

放射性物質の高温での実験は困難

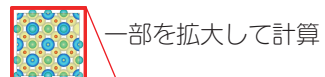
信頼性が高い
原子レベルシミュレーションが必須

高精度・大規模シミュレーション

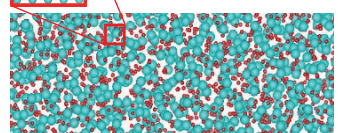
高 従来の高精度な計算

第一原理計算

- × 小規模 (100 原子程度)
- 高精度 (量子力学計算)



一部を拡大して計算



全体を計算

新たな
高精度・大規模な
シミュレーション手法
が必要

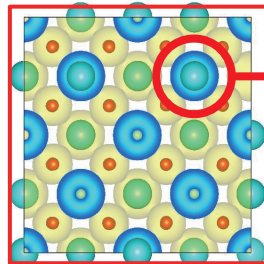
従来の大規模計算
分子動力学計算

- 大規模 (5000 原子以上)
- × 低精度 (モデル依存)

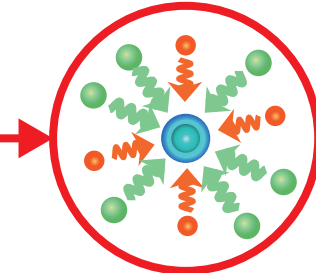
低 小 大 規模

従来の高精度な計算

第一原理計算

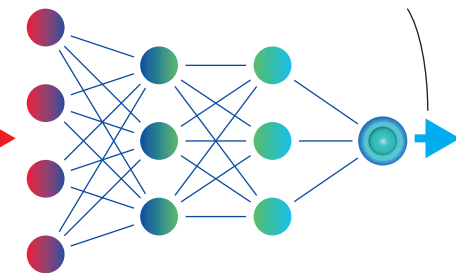


原子の周囲の情報を入力



原子間力を「学習」

原子にはたらく力を入力



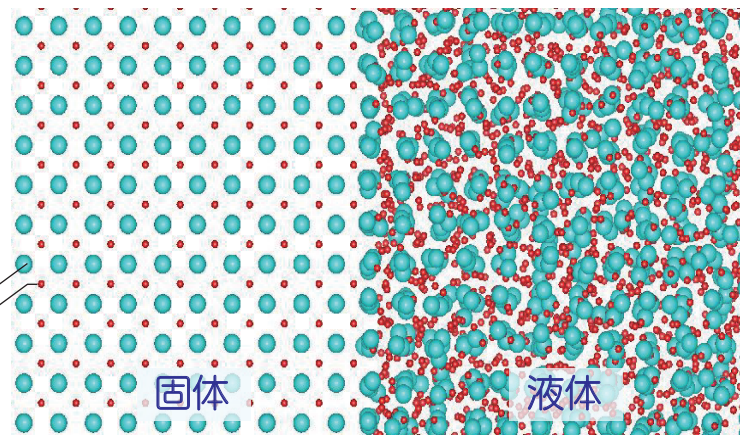
ニューラルネットワーク

新しい高精度な計算

機械学習分子動力学計算

5,000 原子以上の計算が可能

例：右図
酸化トリウムの融解シミュレーション
トリウム原子
酸素原子



燃料が溶ける界面の観察が可能に！

想定される活用例

新しい高精度な計算 → 安全性評価や燃料開発の効率化に期待