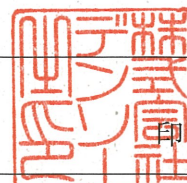


九州大学情報基盤研究開発センター

民間利用成果報告書

提出日： 2020年 4月 7日

利用課題名	MDシミュレーションを教師データとした高分子の力学物性の予測モデル構築				
課題責任者	企業名	株式会社デンソー			
	フリガナ氏名	モリ ホダカ 森 穂高	部署名	マテリアル研究部	職位 担当係長
	連絡先	住所：〒470-0111 愛知県日進市米野木町南山500-1 E-mail: hodaka.mori.j&t@jp.denso.com		TEL 0561-75-1024 FAX 0561-75-1185	
利用期間	2020年4月1日～2021年3月31日				
利用成果公開延期希望の有無	<input type="checkbox"/> 即時公開 ・ <input checked="" type="checkbox"/> 公開延期 (成果公開予定： 2022年3月)				



※利用成果報告書は原則公開ですが、課題終了後最大2年間公開を延期することが可能です。

- 本様式の変更はできません。
- 補足資料を付加することは可能です。

受付番号	9	受付日	2021年5月20日	受付印	
------	---	-----	------------	-----	--

■利用計画全体の概略（申込書と同じ内容を記述してください）

1) 利用目的

本利用では車載高分子材料で求められる力学物性であるガラス転移温度、線膨張係数、ヤング率の予測手法の開発を目的とする。'19年度までの民間利用では分子動力学 (MD) シミュレーションとマテリアルズインフォマティクス (MI) の組み合わせによる高分子に対する低分子の溶解度・拡散係数の予測を検討し、化学構造に関する記述子に MD シミュレーションで取得した高次構造に関する記述子を追加することで、溶解度・拡散係数のいずれも半定量的に物性値を再現できることが分かった。'20年度の利用ではさらにこれを力学的な性質の予測に拡張し、開発・設計プラットフォームの拡充を目指す。

2) 利用意義

現在の自動車は内燃機関、電気自動車、ハイブリッド車のように多種のパートレインが存在し、その大部分はセンサや IC などの電子デバイスで制御されている。これらの部品は排気ガスや高電圧などの個々の使用環境に即した材料選定や寿命設計がなされているが、開発・設計のための試作や実験に多大なコストが発生することが問題となっており、より低コストな手法が望まれている。低コストな開発・設計手法の構築は、日本の強みである自動車部品の設計力を高めるものであり、日本の根幹ともいえる自動車産業の競争力を維持・向上させるという点で意義が高いと考えられる。

3) 必要性

MI により物性を予測する場合、学習データとして広範な高分子に対する物性データベースが必要となるが、データの集約や専門家によるサンプル作成条件や測定条件の吟味といった専門家による膨大な前処理作業が課題となることが'19年までの取り組みで判明している。MD シミュレーションによって得られるデータは物性の取得条件が統一されており、前処理はほぼ不要であるため、この課題が解消される。また、既存のデータを用いて機械学習を行う場合、説明変数として有効になりうる高次構造のデータは別途分析によって取得する必要があるが、MD シミュレーションを用いた場合は、物性評価で取得したトラジェクトリからそのまま高次構造の情報を取得することも可能である。

MD シミュレーションによりガラス転移温度や線膨張率を予測する場合、高温で MD を行い徐々に温度を下げながら体積変化を評価するシミュレーションが行われる。これはおおよそ高分子 1 種類当たり 30 ns 程度の MD シミュレーションが必要となる。また、弾性率は一軸引張試験を模擬した MD シミュレーションによって評価されるが、初期構造依存が大きいため、数 ns 程度のシミュレーションが少なくとも 5 回程度は必要である。これらのシミュレーションを汎用 PC クラスタで実行した場合、高分子 1 種類当たり 2~3 日必要であることが分かっている。機械学習を行うには最低でも 500~1,000 種類のデータは必要であるため、汎用 PC クラスタで本課題を遂行した場合、学習に耐えうるデータセットを獲得するだけでも数年は必要となってしまう。一方、スーパーコンピュータを使用した場合、長いプロダクションランはいくつかの短いプロダクションランに分割し、同時に計算を実行することができる。これにより最低限学習に必要なデータは数カ月と計算時間を大幅に短縮することができ、現実的な時間で学習データセットを構築することができる。よって、本研究の遂行には、高いコア性能、計算スピードを有するスーパーコンピュータ ITO システムの利用が必要不可欠となる。

■成果の概要

1) 本課題で得られた具体的な成果

直鎖状高分子のヤング率 (E)、ガラス転移温度 (T_g) 以下の線膨張率 (α_1)、 T_g 、溶解度パラメータ (SP 値) について MD シミュレーションによって取得したデータと実験値と比較した結果を示した。ヤング率については一軸引張試験、ガラス転移温度は比容積の温度依存性、溶解度パラメータについては孤立分子と凝集体のエネルギー差から評価した。今回の課題において、合計で 620 水準のポリマーに対して物性を取得することができた。ヤング率と線膨張率については、今回のデータセットの比較の場合外れ値はあるものの傾向は大まかに捉えられている。この外れについては MD シミュレーションだけでなく比較対象となる実験値の吟味も必要である。ガラス転移温度については、計算の方が 80~90K 近く高く出る傾向にあるが、実験の傾向はほぼ捉えられている。MD シミュレーションによる T_g の評価の場合、昇降温レートが実験よりも大幅に高いためである。SP 値については、計算の方が 3 (cal/cm³)^{0.5} 程度低く出る傾向があるが、実験の傾向はほぼ捉えられている。さらに架橋高分子についても合計で 80 件程度の E 、 T_g 、 α_1 を取得することができた。

また、本課題で取得した教師データを用いて構築した機械学習モデルについて、テストデータに対する予測結果を示した。SP 値を除いて良好な予測ができています。SP 値については今回生成したデータセットにやや偏りがあったため、バリエーションを増やすことで精度向上が期待できる。

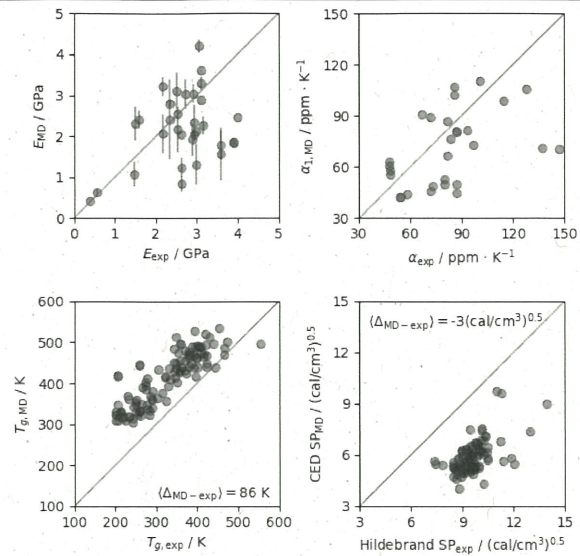


図 本課題で取得した直鎖状高分子の物性

表 本課題で取得した教師データを用いて構築した機械学習モデル

	ヤング率 (GPa)	Tg (K)	CTE (ppm/K)	SP値 (cal/cm ³) ^{0.5}
R ² (test)	0.70	0.79	0.87	0.45
MAE (test)	0.37	19.7	5.8	0.53
RMSE (test)	0.48	26.7	8.8	0.82

2) 社会・経済への波及効果の見通し

寿命設計技術等に発展することで、自動車関連製品の大幅な評価コストの削減、開発効率の向上を図ることができる。

3) その他

特になし

■利用アンケートにご協力ください

1) 利用に関して有益であった事項

- ・ノード時間制ではない利用形態が利用者側としては使いやすかった。
- ・汎用 PC クラスタとほぼ同じシステムであるため、インストール等も特に手間取ることはなかった。

2) 利用に関して生じた問題点など

特になし

3) ユーザーサポートとして必要と考えられることについて

特になし

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

特になし

5) 本事業で得られた成果や公表する予定の成果があれば以降に記述をお願いします

特になし