

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：2022年4月21日

利用課題名	界面熱抵抗を最小化する高分子-フィラー界面構造の探索					
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.j8t@jp.denso.com		TEL 0561-75-1024 FAX 0561-75-1185		
利用期間	2021年4月1日～2022年3月31日					
利用成果 公開延期 希望の有無	<input checked="" type="checkbox"/> 即時公開 ・ <input type="checkbox"/> 公開延期（成果公開予定：      年      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	8	受付日 2022年5月14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

株式会社デンソーでは過去に非平衡 MD を用いて数種類の高分子—フィラー界面構造に対し、その界面熱抵抗を評価・実験との対応をとってきた。本課題ではこれまでに検討をさらに拡張し、分子動力学 (MD) シミュレーションと機械学習の組み合わせにより、界面熱抵抗を最小化する高分子—フィラー界面構造の探索を行う。

### 2) 利用意義

カーボンニュートラルの代表ともいえる電気自動車 (EV) は、モーターとインバータによって駆動されている。EV の制御にはパワー半導体がいられるが、自動車を動かすほどの大電流を扱い、駆動時に多量の熱が発生するため、その冷却が課題となる。また、高度運転支援 (ADAS) の分野においても画像認識などが可能な演算性能の高いハードウェアが検討されているが、これも演算性能の向上に伴ってその発熱量が増大しており、こちらもその冷却が課題となる。部品の冷却は材料の熱伝導率に大きく依存し、材料の熱伝導率が高くなることで出力密度の向上や小型化、さらなる演算性能向上が実現可能となる。このように高放熱な材料の探索は、日本の根幹ともいえる自動車産業の競争力を維持・向上させるものであると考えられる。

### 3) 必要性

自動車分野で用いられる放熱材の多くは高分子とフィラーの複合材料である。こういった複合材料の放熱性は、構成成分自身の熱伝導率やフィラーの分散状態に加え、高分子—フィラー界面における熱抵抗に影響を受けることが知られている。この中で界面熱抵抗は、直接的な計測の困難さから、その検討はあまり進んでいない。

高分子—フィラー界面の構造は、表面修飾材の種類、その密度、幾何形状など多岐にわたるため、より熱抵抗の小さい界面構造を効率的に探索するためには機械学習の活用がキーとなる。機械学習を用いた探索を行う場合、種々の界面構造に対する界面熱抵抗のデータが必要となるが、本分野で利用可能なデータベースは現時点で存在しない。

本利用では非平衡 MD によって種々の高分子—フィラー界面の界面熱抵抗のデータセットを構築し、そのデータセットから最適な界面構造を探索する。非平衡 MD によって界面熱抵抗を評価する場合、おおよそ 1 水準あたり 3 ns の MD シミュレーションが必要となる。このシミュレーションは汎用 PC クラスタで実行した場合、40 時間に相当する。また機械学習を行うには最低でも 500~1000 種類のユニークデータを必要とするため、汎用 PC クラスタで本課題を遂行した場合、最低限学習可能なデータを取得するだけで 2 年は必要となる。一方で IT0 のようなスーパーコンピュータでは、多数の水準を同時に実行できるため、学習に必要なデータを取得するための時間は大幅に短縮することができ、現実的な時間でデータセットを構築することができる。よって、本課題の遂行には、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 IT0 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

#### (高効率な界面熱抵抗データの生成)

ウレタン樹脂/AIN フィラー界面を対象に、表面修飾材種、修飾分子数をパラメータとして界面熱抵抗データを生成した。計算ソフトウェアには LAMMPS 24Aug20 を用いた。界面熱抵抗の評価には、樹脂と AIN 表面修飾基板を接合したモデル内に高温部と低温部を設け、界面の垂直方向に温度勾配を与えた非平衡 MD を用いた。本課題では、機械学習用に多量のデータ生成が必要であり、データ生成アルゴリズムを最適化することで計算効率向上を図った。計算負荷の高い力場 (COMB3 :charge-optimized many-body) の利用に際しては、並列計算時のシミュレーションセルの分割方向を最適化した。また、表面修飾基板・界面モデルの作成、計算実行ファイルの作成および計算実行の自動化スクリプトを作成することで、計算の前準備にかかる時間を短縮した。最終的に表面修飾材 80 種、300 水準程度の界面熱抵抗データの生成に成功した。

#### (界面熱抵抗の予測モデル構築・探索)

得られたシミュレーションデータを用いて界面熱抵抗の機械学習モデルを構築し、界面熱抵抗低減に有用な界面構造の探索を試みた。学習用の説明変数には、表面修飾材の SMILES から生成した単分子の特徴に加え、修飾分子数や MD 計算のログから抽出した表面修飾材の原子密度分布などの凝集構造の特徴を使用した。目的変数には、界面熱抵抗値を常用対数変換した値を使用し、学習アルゴリズムに Lasso を用いてモデルを構築した。ここで、Fig1 に予測結果を示す。決定係数 0.9 以上の高精度な予測精度を達成できた。Fig2 には、偏回帰係数の絶対値の大きな特徴量を抜粋して示した。上位 4 つはいずれも修飾量に関する特徴であり、係数が負であることから修飾量が多いほど界面熱抵抗が低いことが示唆され、これは樹脂との相互作用点が増えることで熱伝達しやすくなったためと推定される。本結果より、界面熱抵抗の低減には表面処理剤の部分構造の効果よりも表面修飾密度を高くする界面構造が有用であることを示した。

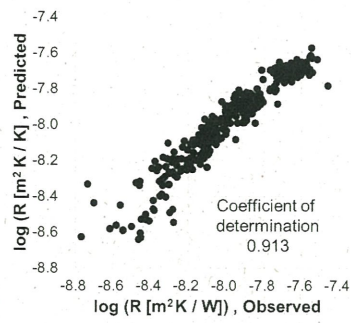


Fig 1. Prediction result of interface thermal resistance

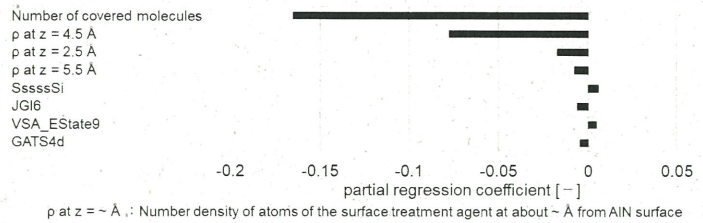


Fig 2. Some descriptors for the representative trained model (sorted by absolute value of the partial regression coefficient in descending order)

2) 社会・経済への波及効果の見通し

電子機器では出力の高密度化に伴い、熱設計が重要な課題となる。  
 界面の熱伝導に関する知見を活用することで、電子機器の放熱特性向上への貢献が期待され、製品の性能や耐久信頼性の向上に繋がると考えられる。

3) その他

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

スパコンに不具合があった際の周知連絡が毎回早く、状況を素早く理解できた。

2) 利用に関して生じた問題点など

conda, pip のpython ライブラリのバージョン依存の問題が一部生じ、解決に時間を要した。

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

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

ソフトウェアのバージョンを随時最新版にアップデート頂きたい。

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

第35回分子シミュレーション討論会にて報告済。