平成 29 年度

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：平成30年4月30日

利用課題名		高分子中の腐食性低分子の溶解・拡散挙動の予測				
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	センサ&セミコンダクタ 実装開発部	職位	担当係長
	連絡先	住　所：〒448-8661 愛知県刈谷市昭和町1-1 E-mail：hodaka_mori@denso.co.jp		TEL　0566-56-0279 FAX　0566-56-0279		
利用期間		平成　30年　1月　15日　～　平成　30年　3月31日				
利用成果公開延期希望の有無		□　即時公開　・　■　公開延期（成果公開予定：　平成　31　年　4　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	7	受付日 平成30年　5月　2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

腐食物質による樹脂材料の劣化は①溶解・拡散、②反応の順に起こる。本利用では、最初のプロセスである溶解・拡散を分子動力学シミュレーション(MD)によって予測する手法開発を目的とする。本利用は株式会社デンソー(以降、デンソー)による提案であり、利用は国内に限定される。また、デンソーはCSRを推進しており平和利用、人権・利益保護への配慮が行われる。

2） 利用意義

電気自動車やハイブリッド車のような電動化に向けた取組みは活発になっているものの、当面は内燃機関が主流となる見込みである。現在の内燃機関は、厳しい排ガス規制に対応するため、多数のセンサによって燃焼が制御されている。これらのセンサは排気ガスなどの腐食性物質に晒される環境に搭載されているため、腐食物質に対する寿命設計が重要となる。内燃機関周辺ではかなりの種類の腐食物質が発生するため、腐食物質に対する寿命設計を実験のみで行うと、評価に多大なコストが必要となってしまう。そのためシミュレーションを活用した低コストな設計手法の構築が望まれている。この取組みは、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

溶解・拡散現象をMDによって解析する場合、1万～数万原子程度の高分子と低分子が混合された系に対して溶媒和自由エネルギーや拡散係数を評価することになる。溶媒和自由エネルギーはエネルギー表示法などの低コストな解析手法を用いても数ns程度、拡散係数では、数十ns程度のプロダクションランが必要になる。このような計算を数ノード程度の汎用のPCクラスタで実行した場合、1回の計算辺りの所要時間は半日～数日程度になる。本利用では、まず車載電子部品で使用されるものを中心に10種類の高分子材料、劣化媒体として排気ガス環境を想定した低分子を5種類を対象に合計20～50水準の解析を実施、実験結果と比較し、部品の寿命設計へ活用しうるレベルにあるかの検証を行う。この検証を数ノードのPCクラスタで実施した場合、計算の実行だけで500日程度を要してしまう([1] 一計算辺り2日間、n=5、合計50水準実施した場合)。そのため2）に記したような複数の劣化媒体を対象とする場合は多ノードが扱えるスーパーコンピュータが必要となる。

■成果の概要

1） 本課題で得られた具体的な成果

(計算条件のベンチマーク)

効率よく計算資源を利用するためのベンチマークを実施した。ソフトウェアとしてLAMMPS ver31Mar17を用い、高分子として重合度50程度のポリジメチルシロキサン、低分子としてエタノールを用いた。系内の原子数は約1万原子とした。ベンチマークの結果を図1に示した。ノード数が大きくなるにつれて、ハイブリッド並列の効果が顕著に現れることがわかった。しかし、最も効率が高くなる並列条件でも、並列化効率は50%程度であり、計算資源の効率利用という観点では、ノード数を大きくするよりは、小さいノード数で多数のプロダクションランを実施した方が効率的に計算を実施できることも明らかになった。例えば合計50 nsのプロダクションを行う場合、1ジョブ辺り2.5 nsのジョブを20個投入するのが効率的であり、この場合の必要計算時間は4時間程度となる。なお、上記のように初期構造を複数サンプリングし、サンプリングした初期構造に対しそれぞれプロダクションランを行うための、自動化スクリプトを作成した。

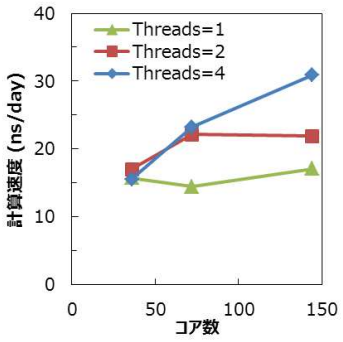

図1 並列化効率

(拡散係数の濃度依存性)

網羅的な計算を行うための事前準備として、系内の低分子の濃度が拡散係数にどのような影響を与えるのかを確認した。本課題で用いた系では、低分子濃度の増加に伴い拡散係数は増加し、低分子バルクに近づく傾向にあった。このような結果は、溶媒である高分子が、溶質である低分子によって可塑化されていることを示している。そのため、実在系においても、拡散の進行（系内の低分子濃度の増加）に伴う拡散係数の変化を取り込む必要があると推定される。

2） 社会・経済への波及効果の見通し

寿命設計技術に発展することで、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

・申請から利用開始までの期間が1ヶ月程度であり早かったこと。
・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クラスター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。
・年度末であったにもかかわらず利用期間中のジョブ実行待ち時間は長くても1日以内であり、スムーズだった。

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

現時点では特になし。2018年度の利用では、新しいソフトを利用する予定なので、インストールや利用においてサポートが必要になる可能性がある。

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

現時点で決定している発表はないが、2018年度中に本利用成果の一部を学会発表予定である