

トラクションフルードのマテリアルズインフォマティクス解析

Materials informatics of traction fluid

兵県大・情報（院）*深谷 剛 兵県大（正）清水 陽平

兵県大 RIST（正）富山 栄治 兵県大（正）鷺津 仁志

Tsuyoshi Fukaya*, Yohei Shimizu*, Eiji Tomiyama*, **, Hitoshi Washizu*

*University of Hyogo, **Research Organization for Information Science and Technology

1. はじめに

コンピューターの発展が目覚ましくなっている現在、材料研究における情報科学からのアプローチはデジタルトランスフォーメーション(DX)の観点から重要になってきている。マテリアルズ・インフォマティクス(MI)と呼ばれる情報科学の手法を応用し、材料開発の効率を高める取り組みは、膨大な物質の組み合わせから所望の機能や特性を持つ最適な材料を探索するために用いられる。具体的には、深層学習・教師なし学習・強化学習を含む機械学習や、数理最適化を活用して、実験データ、シミュレーションデータを解析し、素材の分子構造や組み合わせ、製造方法などを推測する。MIの活用により従来よりも効率的に目標となる材料を発見できることから素材開発を加速することが期待される。我々はパーシステントホモロジーを使用した高分子の高次構造と誘電特性との関係¹⁾では、パーシステントホモロジーを用いることで物理的意味を損なわない比誘電率の回帰学習が可能であることを示した。また、せん断場下におけるトラクションフルードに関する研究²⁾では、全原子分子同力学シミュレーションを用いることでデータ拡張の有用性を示した。

本研究では前回に引き続き、トラクションフルードの物性に注目する。前回は、過去に線形回帰による物性予測が試みられた³⁾特徴的なデータを MI の素材として再検討を試みた。過去の知見⁴⁾に基づいて説明変数を再検討し、回帰モデルを構築することで性能予測を行うことができる可能性を示唆した^{5)(Table 1, Table 2)}。本発表では、シミュレーションを実施し、論文に掲載されていない物性データの入手を試みた。

2. 解析手法

まず初めに論文に掲載されているシクロヘキサン等のフルードをバルク状態で作成した。次に、フルード相の上下に鉄基板を作成し、負荷圧力 1.24GPa を加え、高圧状態にした。最後に上部の鉄基板を x 軸方向に正の向きで、下部の鉄基板を x 軸方向に負の向きでそれぞれ摺動速度 25(m/s)を与える、絶対速度は 50(m/s)とし、せん断状態を模した。最終的な摩擦シミュレーションの条件とスナップショットを Fig. 1 に示す。本来の Fe 原子とトラクションフルード原子間の相互作用パラメータでは、滑りが起こってしまいトラクション係数を計測できないため、本来の 100 倍にすることで、滑りを起こさず定性的に評価できるようにした。シミュレーションボックスは、2.87 nm × 3.44 nm × 11.8 nm である。境界条件に関しては、x, y 方向は周期的境界を用いた。温度は論文データと同じ 20°C を採用し、シミュレーション時間は、2.5ns とした。

分子動力学シミュレーションには Sandia National Laboratories が開発した^{5) LAMMPS⁶(Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) を用いた。オープンソースのプログラムについて MPI 並列化を行い並列計算を実行した。}

Table 2 Accuracy of linear regression before changing explanatory variables

なし		std		norm	
train	test	train	test	train	test
0.380	0.546	0.633	-0.650	0.598	-0.110

Table 1 Accuracy of linear regression after changing explanatory variables

なし		std		norm	
train	test	train	test	train	test
0.620	0.363	0.607	0.251	0.464	0.699

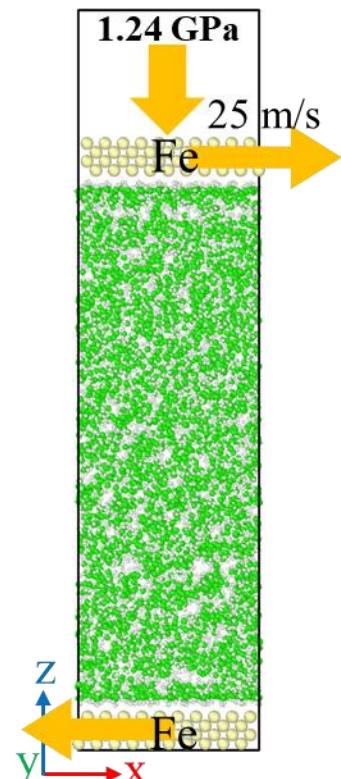


Fig. 1 Simulation model

3. 結果と考察

Cyclohexane のトラクション係数の時間発展の結果を Fig.2 に示す。100 step ごとの結果を用いて平均をとり、1,000 step ずつで結果を出力する。滑りはじめは静止摩擦力によりオーバーシュートが観測されるが、150ps 経過すると定常状態に達していると考えられる。150ps 以降の平均トラクション係数を算出すると 0.2941 である。実験値に比べてシミュレーションで得られるトラクション係数は、0.2 程度高い値となっているが、これは摺動速度が実験に比べて速いことや、Fe 原子とトラクションフルード原子間の相互作用パラメータを 100 倍したことによるものだと考えられる。実験値との相違があり、機械学習に組み込む際にはデータの前処理等は必要だが、性能予測に影響のある因子として採用すべきパラメータであると考えられる。

また、このシミュレーション系では粘性係数も得られる。粘性係数の時間発展の結果を Fig.3 に示す。粘性係数もトラクション係数と同様に 100 step ごとの結果を用いて平均をとり、1,000 step ずつで結果を出力する。150ps 以降を定常状態とみなし、その後の平均粘性係数を算出すると 0.046852(Pa・s) である。トラクション係数に比べて粘性係数は、振れ幅が大きく不安定である。粘性係数を密度で割ると動粘性係数も求めることができる。これらも現象に影響している物理因子として採用すべきパラメータであり、機械学習の説明変数に加えることができると考えられる。

4. まとめと今後の展望

本研究では論文に掲載されているトラクションフルードを鉄で挟み、摺動させるというシミュレーションを実施した。このシミュレーションによりトラクション係数や、粘性係数、動粘性係数といった説明変数となり得る物性値を得ることができた。今後はこの系を改良させ、物性値のさらなる入手を進める。そして、機械学習やニューラルネットワークを用いた数値解析を行い、寄与度の高い説明変数の抽出や回帰モデルの改良を進めていく。

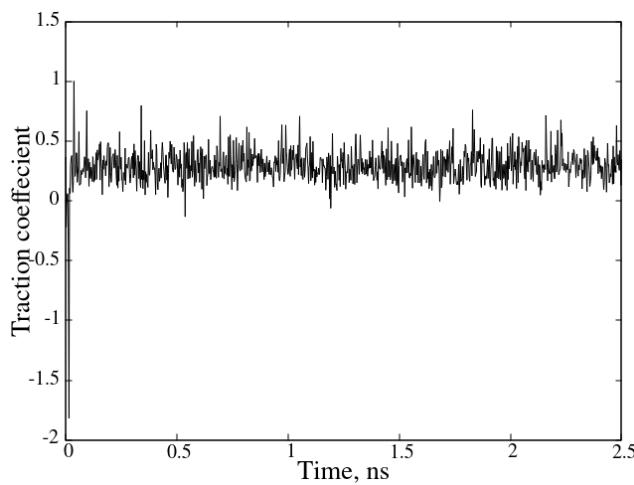


Fig. 2 Time development of traction coefficients

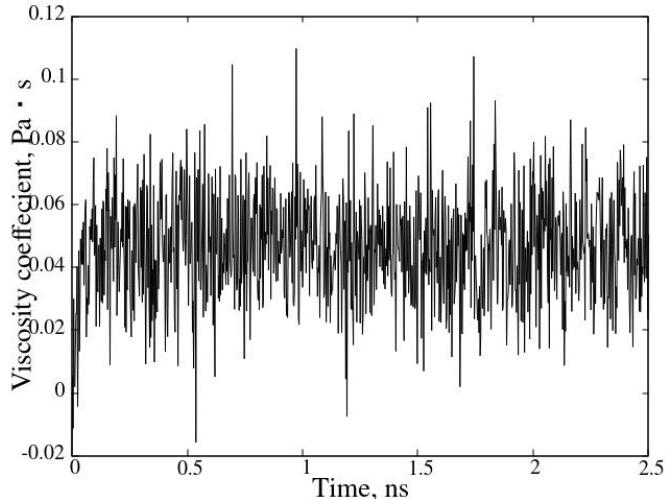


Fig. 3 Time development of viscosity coefficients

文献

- 1) Y. Shimizu, T. Kurokawa, H. Arai, H. Washizu: Higher-Order Structure of Polymer Melt Described by Persistent Homology, *Sci. Rep.* 11, 2274 (2021).
- 2) 富山・岩崎・清水・鷺津:せん断場下におけるトラクションフルードの分子動力学シミュレーションとパーセントホモロジー解析, トライボロジーカンファレンス 2022 春 東京 予稿集.
- 3) 坪内・畠:トラクションフルードの基本分子構造とトラクション特性との定量的相関, トライボロジスト, 41: 5, 395 (1996).
- 4) H. Washizu, T. Ohmori: Molecular Dynamics Simulations of Elastohydrodynamic Lubrication Oil Film, *Lubrication Sciences*, 22, 323 (2010).
- 5) 深谷・清水・富山・鷺津:機械学習を用いたトラクションフルードの性能予測, トライボロジーカンファレンス 2022 秋 福井
- 6) S. Plimpton: Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics, *J. Comput. Phys.*, 117, 1, 1–19, (1995).
- 7) LAMMPS. (<http://lammps.sandia.gov>)