

令和 6 年 6 月 24 日現在

機関番号：56401

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2018～2023

課題番号：18K03960

研究課題名（和文）Machine Learningによる気体分子散乱特性予測と機能性ナノ界面の探索

研究課題名（英文）Prediction of scattering properties of gas molecule based on machine learning
and search for functional nano-interfaces

研究代表者

武内 秀樹（Takeuchi, Hideki）

高知工業高等専門学校・ソーシャルデザイン工学科・教授

研究者番号：30435474

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,400,000 円

研究成果の概要（和文）：高Knudsen数流れにおける気体の熱流動特性の正確な把握には、物体界面での気体分子反射境界条件を適切に取り扱うことが必要になる。流れ場の熱流動条件や界面の状態など、種々の影響因子を考慮した気体分子散乱特性の予測に有効な反射モデルの構築を機械学習に基づき行った。適応係数等の巨視的な物理量の予測に対して、本モデルが効果的であることが確認でき、機能性ナノ界面を検討する際の構築モデルの有用性についても示された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高Knudsen数流れの系での気体の熱的・流体力学的特性の理解には、物体界面での気体分子散乱特性の解明が重要となる。流れ場の様々な因子を考慮した分子シミュレーション解析に基づく気体分子散乱データから気体分子散乱挙動の予測に有効な反射モデルを機械学習により構築する方法を実現した。構築モデルより求められる分子速度分布関数から、界面構造の違いによる流れ場への影響を予測することで、機能性ナノ界面の把握に有効となる。

研究成果の概要（英文）：Accurate understanding of the thermal flow characteristics of gases in high Knudsen number flows requires an appropriate treatment of the gas molecular reflection boundary condition at the object interface. A reflection model based on machine learning was constructed to predict the scattering characteristics of gas molecules, considering various factors, including the thermal flow conditions of the flow field and the state of the interface. It was confirmed that the model is effective in predicting macroscopic physical quantities such as the accommodation coefficient. Furthermore, the usefulness of the constructed model in considering functional nano-interfaces was also indicated.

研究分野：分子熱流体工学

キーワード：高Knudsen数流れ Gas-Surface Interaction 反射境界条件 分子速度分布関数 適応係数 機械学習

1. 研究開始当初の背景

ターボ分子ポンプ内の流れや半導体製造装置内の流れなど、低密度領域における気体の流れは、一般に希薄気体流れと呼ばれ、通常の連続体仮定のもとで取り扱うことは困難となる。希薄気体の流れでは、流れ場の代表長さ L に比べて、気体分子の平均自由行程 λ が大きく、Knudsen 数 ($Kn = \lambda/L$) が大きい流れ場となる。また、MEMS/NEMS などのマイクロ・ナノデバイス、バイオセンサー、分離膜、燃料電池内のナノ細孔等の気体輸送に対しては、大気圧下においても系の代表長さが数十 nm 程度になるため、気体分子同士の衝突が十分に起きる前に境界域へと達し、場の関数による連続体近似を用いた Navier-Stokes 方程式による記述が困難となり、Boltzmann 方程式を基礎とする原子・分子の流れとして取り扱う必要性がでてくる。このような Knudsen 数が小さくない熱流動場では、気体分子は他の気体分子よりも界面と数多く衝突が起こるため、流れ場が界面での気体分子散乱特性に強く依存し、その把握が巨視的な熱流動場の理解に極めて重要となる。例えば、固体表面での気体分子の挙動については、希薄気体力学の分野で様々な固体-気体の組合せについて実験的・解析的に評価が行われているものの、気体分子散乱特性への影響因子（気体と固体の原子種、気体の圧力、気体および固体の温度、固体表面の粗さや吸着物質の有無、系の非平衡度合いなど）は多岐にわたり、それらのすべてを網羅的に調査し究明することは極めて困難となる。

一方、物体表面での気体分子散乱については、気体分子は固体表面の温度、速度に基づく Maxwell 分布で反射を行うという拡散反射境界条件がしばしば用いられているが、固体表面が清浄、高温である場合には拡散反射モデルが成立しないことが実験的に確認されており、拡散反射からどの程度かけ離れるかについては不明な点が多く、マクロな流体力学的量や熱力学的量の予測が困難である。そこで、これまで多くの反射条件が考えられてきた。代表的なものに Maxwell 型モデル、CLL モデルなどが存在しているが、気体分子の固体表面での適応係数等に基づくパラメータを設定する必要がある、困難さを伴う。したがって、このような問題に対して、機械学習の手法を、物体界面上と相互作用する気体分子のダイナミクスに対して適用し、機械学習を利用することによって界面の状態と気体分子散乱特性との関連性をモデル化することで、運動量・エネルギー輸送特性を予測することが可能になると考えられる。

2. 研究の目的

本研究の目的は、高 Knudsen 数流れ領域の気体の熱流動特性の正確な把握に必要な界面での気体分子散乱特性の解明に向けて、機械学習の手法を取り入れ、原子レベルの界面状態の相違による気体分子散乱挙動の予測に有効な機械学習モデルを確立し、任意の界面状態に対する運動量・エネルギー輸送特性を把握することである。また、これらの機械学習モデルを基にして、気体が流れやすく（難く）なったり、熱が伝わりやすく（難く）なるなどの機能性を有する原子レベルの界面構造情報についての知見を得ることを目指す。また本研究の進展により、機械学習モデルを用いて、マイクロ・ナノデバイスの設計指針に有益な適応係数などの基礎データを予測することができ、どのような界面構造を付与することで目的とする機能性を付加できるかの優位性が明確になり、デバイス被膜のさらなる高性能化・高機能化につながることを期待される。したがって、機械学習を利用することによって界面の状態と気体分子散乱特性との関連性をモデル化することで、現在までに研究されてきた固体表面と機械学習モデル界面との運動量・エネルギー輸送過程の相違が、ナノ構造レベルの視点から体系的に再構築され、固-気界面における気体分子散乱の核となる重要な素過程が解明されることが期待される。

3. 研究の方法

本研究では、高 Knudsen 数流れの気体の熱流動特性の正確な把握に必要な界面での気体分子散乱特性の解明に向けて、さまざまな影響因子を考慮した、気体分子散乱挙動の予測に有効なモデルの確立を目指す。具体的には、分子動力学法に基づく気体-水分子吸着固体表面や固体表面の原子的表面性状の違いによる干渉解析結果をもとに、機械学習を用いて、固体表面性状、壁面速度や壁面温度の相違による単原子分子気体に対する分子速度分布関数や適応係数の予測について検証する。

図 1 に研究方法の概要を示す。間隔 L の二平板間に温度差のあるアルゴン (Ar) 気体の Couette 流の流れ場を考える。解析条件として、平板の下壁面は静止しており、上壁面が速度 U で移動し、下壁面の温度を $T_L = 300\text{K}$ 、上壁面温度を T_U 、温度比 $T_R = T_U / T_L$ とし、上壁面速度 U と気体分子の最確速度 C_m との比を速度比 $S = U / C_m$ と定義する。また、Knudsen 数は、 $Kn = 0.2$ と設定する。平板間の気体分子の解析 (DSMC 計算) において、気体分子が下壁面に衝突した際、分子動力学 (MD) 解析を行う。ここで、白金固体表面分子数と物理吸着した水分子数の比である被覆率 θ や金固体表面の原子的な溝の大きさの度合い γ を定義し、速度比 S 、温度比 T_R 、被覆率 θ 、溝の大きさの度合い γ の相違による気体分子速度分布関数 f への影響を調べる。次に、MD 解析により得られた気体分子散乱データを基に、気体分子の速度分布関数 f を再現する関数形とし

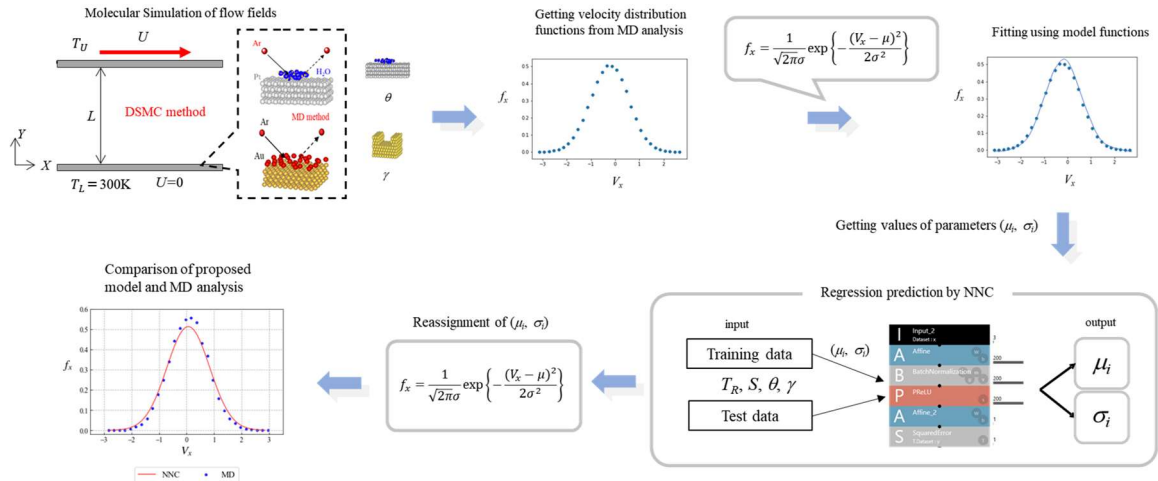


図1 研究方法の概要

て、次のようなモデル関数を考える．いま，流れ方向（ X 方向）のアルゴン気体分子に対する無次元速度 V_x の分子速度分布関数 f_x をガウス関数式で表現する．垂直方向（ Y 方向），および奥行方向（ Z 方向）の分布関数 f_y, f_z も同様に考える．MD 解析から得られた 10^5 個の入射・反射分子の分子速度データによる速度分布関数に対して，モデル関数内に含まれる各調整パラメータ (μ_i, σ_i) のフィッティングを実行し，各条件における MD 解析による分子速度分布関数を再現する最適なパラメータ (μ_i, σ_i) の値を取得する．次に，Neural Network Console (NNC) という機械学習ソフトに基づいて，複数の影響因子を考慮した，モデル関数の各パラメータ (μ_i, σ_i) の予測を行う．速度比 S ，温度比 T_R ，被覆率 θ ，溝の大きさの度合い γ の各条件に対する分子速度分布関数を再現する各パラメータ (μ_i, σ_i) の値を，訓練データ，テストデータ，評価データにそれぞれ分割し，NNC による機械学習の手法に基づいた回帰予測を実行することで，入射・反射分子の速度分布関数を予測する．なお，評価データは，あらかじめ計算過程から除外し，構築した予測モデルとの比較のために使用する．

4. 研究成果

白金固体表面での水分子の被覆率 θ の違いによるアルゴン気体の入射・反射分子の分子速度分布関数に対して，機械学習による予測モデルの構築を行った．図2のように予測された反射速度分布関数に対して，拡散反射や Maxwell 型反射境界条件との比較を行い，構築した予測モデルの優位性を確認した．また，予測モデルに基づく分子速度分布関数から求めた運動量適応係数の予測についても，分子動力学解析に基づく値を良好に再現していることが確認され，さまざまな影響因子を取り入れた際でも構築した予測モデルの有用性が確かめられた．次に，流れ場の速度比 S や温度比 T_R を変化させた際の金固体表面上の原子的表面性状の違いを考慮に入れたアルゴン気体分子散乱の分子動力学解析データを基に，固体表面への入射・反射分子に対する各方向の分子速度分布関数の予測モデルの構築を行った．入射・反射分子に対する予測モデルによる接線方向の分子速度分布関数を基に求めた接線方向運動量適応係数の値は，分子動力学解析から得られた接線方向運動量適応係数 α_t の値を概ねよく再現していることが確かめられた．二平板間の巨視的な速度勾配や温度勾配を有する高 Knudsen 数流れに対して，固体表面性状の違いを影響因子に取り入れた際でも構築した分子速度分布関数の予測モデルの有用性が確認された．今後の展望として，構築した機械学習のモデルのさらなる拡張や改善により適応係数等のマクロな物理量の予測のみならず，固体表面のナノ構造の違いによる流れ場への影響が予測でき，機能的ナノ界面の探索に反映できる可能性が示めされた．

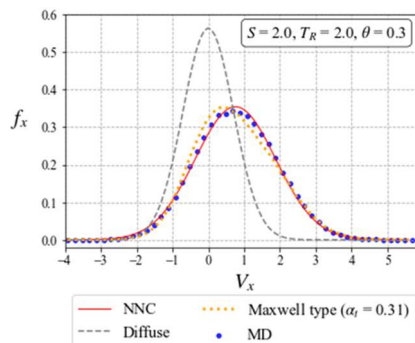


図2 構築した予測モデルと既存モデルとの比較

5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計10件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 2件）

1 . 発表者名 武内 秀樹 , 小野 龍生
2 . 発表標題 金表面での気体分子の散乱挙動予測
3 . 学会等名 日本機械学会2023年度年次大会, No.23-1, J051-02
4 . 発表年 2023年

1 . 発表者名 小野 龍生 , 小崎 祐助 , 武内 秀樹
2 . 発表標題 金表面における気体分子散乱特性の予測
3 . 学会等名 日本機械学会2022年度年次大会, No.22-1, J051p-03
4 . 発表年 2022年

1 . 発表者名 Ryusei Ono, Hideki Takeuchi
2 . 発表標題 Prediction of Reflection Characteristics for Gas Molecules on Au Surfaces
3 . 学会等名 The 1st KOSEN International Research Symposium (KRIS2023), No. 164 (国際学会)
4 . 発表年 2023年

1 . 発表者名 小崎 祐助 , 武内 秀樹
2 . 発表標題 金表面での気体分子散乱挙動の分子論的解析
3 . 学会等名 日本機械学会 中国四国支部 第60期総会・講演会, 06c2
4 . 発表年 2022年

1．発表者名 武内秀樹，楠瀬 宏規
2．発表標題 固体表面における気体分子反射特性の予測
3．学会等名 日本機械学会2021年度年次大会，No.21-1，J052-07
4．発表年 2021年

1．発表者名 楠瀬 宏規，武内秀樹
2．発表標題 固体表面での気体分子散乱挙動の予測
3．学会等名 日本機械学会2020年度年次大会，No.20-1，J05217
4．発表年 2020年

1．発表者名 小崎 祐助，武内秀樹
2．発表標題 固体表面における気体分子散乱特性の分子動力的解析
3．学会等名 第34回数値流体力学シンポジウム，B09-4
4．発表年 2020年

1．発表者名 楠瀬 宏規，武内秀樹
2．発表標題 水分子吸着表面での気体分子の散乱挙動予測
3．学会等名 第34回数値流体力学シンポジウム，B11-4
4．発表年 2020年

1. 発表者名 Hiroki Kusunose, Hideki Takeuchi
2. 発表標題 Prediction of scattering properties for gas molecules on solid surfaces
3. 学会等名 72nd Annual Meeting of the APS Division of Fluid Dynamics (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 楠瀬 宏規, 武内秀樹
2. 発表標題 機械学習による固体表面での気体分子散乱特性の予測
3. 学会等名 日本機械学会2019年度年次大会
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織			
	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------