

モビリティ変革の時代に求められるマイクロナノ・トライボシミュレーション

Micro-nano Tribo-Simulation Required in the Era of Change in Mobility

兵庫県・情報（正）鷲津 仁志

University of Hyogo

1. はじめに

トライボロジーは、技術変革に対してロバストな学問であるといえる。日本の戦後に限っても、繊維、造船、鉄鋼、自動車、電機、半導体、情報と様々な技術の興隆があったが、それぞれに対して必要なトライボ技術が提案され、トライボロジストは貢献してきた。たとえば、近年においては情報蓄積のための技術としてハードディスクドライブを成立させるため、マイクロナノ・トライボロジーが必須であったが、原子レベルの潤滑理論、ナノ界面の摩擦測定、および分子シミュレーションの三位一体によって成功したといえる。

自動車産業の変革が話題となっているが、環境問題への対応は1970年代のマスキー法以来、常に求められてきたものであり本質的な新鮮味はない。境界潤滑における添加剤の工夫やコーティングの改良といった技術は、繊維や造船産業から脈々と引き継がれてきたものであり、電動化によってグリースの重要性が高まった、といった分野の軽重はあれど、トライボロジストは今こそ温故知新の心構えで変革を受け止めるべきと考える。本講演では、自動車に関連するマクロナノ・シミュレーション技術を中心に、その周辺技術を加えて概観したい。

2. 計算科学とデータ科学

トライボロジーの研究開発における最も新しい変化は、データ科学の活用である。データ科学は、実験、解析理論、計算科学に続く第4の科学と呼ばれる（Fig. 1）。近代科学の始まりは、自然現象を測定し座標上にグラフとして表現することであったが、摩擦力と荷重の関係はデカルト座標上の直線関係として求められる。C.A. クーロンの原著論文¹⁾を読むと、表のみを使用しデカルト座標は使っていないものの、膨大なデータから単純な線形関係を導いていることが判る。つまり、摩擦の科学はその初期において、既にデータ科学と同様の帰納的思考を元にしていたといえる。データ科学において、良い線形回帰はランダムフォレストや遺伝的アルゴリズムをはじめとする非線形回帰よりも強力である。それは、データを得た範囲の外側に関数を外挿可能であるためである。

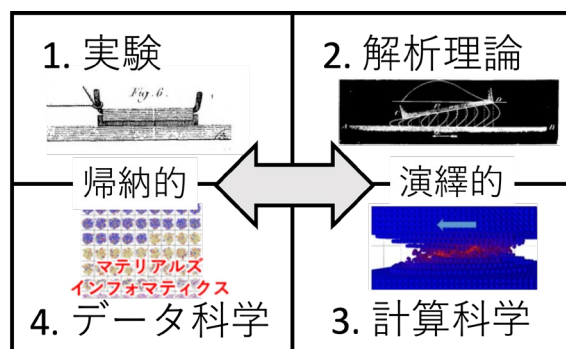


Fig.1 Simulation models of grease molecule

一方で有力であったのは解析理論であり、最も有名なトライボロジーの業績としては、O. レイノルズの流体潤滑理論が挙げられる。原著論文を読むと²⁾、ここでもオリーブ油の粘度を実験的（帰納的）に決定しているが、その後は所謂ナヴィエ=ストークス方程式に由来するレイノルズ方程式を導いて、先行していたタワーの実験結果と比較し機構解明を行っている。流体力学という原理を出発点としており、演繹的な思考であるといえる。近年とくにマイクロナノ・トライボロジーにおいて発達した計算機シミュレーションは、原子や分子についてのシュレーディンガー方程式やニュートン方程式を統計力学的な制約のもとで解くため、演繹的な手法であるといえる。

3. データ科学が加わったことによる嬉しさ

研究手法にデータ科学が加わったことで、複雑なトライボロジーの問題も、一部において解きやすくなっている。そもそも、データ科学のトライボロジーへの活用については、90年代から試みられており、杉村らによるニューラルネットワークを用いた摩耗粉の分類³⁾や、坪内らによるケモインフォマティクスによるトラクション係数予測⁴⁾など、一定の成果が得られていた。最近では、軸受表面のテクスチャ形状設計⁵⁾や、機械学習による摺動面監視手法⁶⁾など、幅広い分野で使われるようになりつつある。我々も、トラクションフルードについて機械学習解析を実施した⁷⁾。

分子シミュレーションは、膨大な量の分子集団の非線形な運動を記述するため、得られた結果がまるで実験結果のように複雑である。この結果に対して、パーシステントホモロジーという応用数学手法によって機械学習の説明変数を用いる試みを筆者らも行っている⁸⁾。あるいは、様々な分子構造を効率よく発生するために、モンテカルロ木探索を用いる研究が、高粘度指数基油に対して行われている⁹⁾。

分子シミュレーションの困難の一つとして、一つの計算で扱う元素の数だけパラメータの数が膨大となることである。この問題に対して、未知の原子の組み合わせに対してAIによりパラメータを決定する手法が開発された¹⁰⁾。この手法により、極圧添加剤ZDDPの金属表面吸着過程を高速かつ量子論で扱うより大規模系において実現した¹¹⁾。ZDDPの吸着シミュレーションには、Fe, Zn, S, P, C, O, Hと7種類もの元素が関係するため、パラメータを事前に決定する古典分子動力学では取り扱いが困難であった。これらの新技術は、計算科学とデータ科学の融合による成果といえる。

4. マイクロナノ・シミュレーションの進展

計算科学においても様々なシミュレーション手法が新たに提案され、スパコン富岳の時代に対応すべく進展してきている。解説記事¹²⁾にその多くを紹介したが、そこから先の進展について本発表では触れる。

機能性の柔らかい構造を有する潤滑油膜は、ソフトマテリアルの一種である。分子動力学法においてこれを扱う際、原子ごとに配置する部分電荷をどのように設定するかが、系の性質を左右する。たとえば、真空中の水分子上の各原子上の部分電荷と、液体状態の水のそれとは異なる。液体のような凝縮系においては電荷が周囲に広がるためであるが、このような系の部分電荷を正確に求める手法として、分子動力学による構造緩和計算と、密度汎関数法による量子計算とを交互に実行することにより定常値を求める手法を提案し、複雑な自己組織化構造を示すイオン液晶膜に適用し、実験により観測された構造を再現することに成功した¹³⁾。

分子動力学によって得られた構造をどのように理解するかということも、大きな課題である。単純液体においては、動径分布関数によって溶液構造は規定され、様々な熱力学量などと関連づけられることが知られている。一方、高分子溶融体のようなソフトマテリアルの場合、系の不均一性が少なくとも数ナノメートルに及ぶメソスケール領域となるため、この構造を記述する適切な手法が必要となる。前項で触れたように、我々はパーシステントホモロジーという構造解析手法により、高分子溶融体の特徴を捉えられることを示した⁷⁾。また、このパーシステント図に関連する量を説明変数とすることにより、誘電率の高い材料を機械学習により予測可能であることを示した¹⁴⁾。この研究の対象としたのはバルクの高分子系ではあるが、多くのトライボ材料に適用可能であると考えられ、たとえばトラクションフルードの解析に有効であることを示している¹⁵⁾。このように、分子計算の手法および解析方法の両者において、新しい手法が必要とされている。

以下、各分野における進展を概観する。境界潤滑においては、前項で触れた AI 力場による ZDDP 解析において、より複雑な境界潤滑現象を扱える可能性を示した¹¹⁾。より一般的な手法として反応力場動力学があるが、この手法により硫黄系極圧剤の作用機構について過去の実験結果を説明できた¹⁶⁾。これは分野の多くの先輩方から期待されてきたことである。反応力場は、親水表面の水分子境界膜の解析や¹⁷⁾、新規潤滑材である酸化グラフェンの解析¹⁸⁾にも適用可能である。また、有機系添加剤の金属表面における有名な現象としてチェーンマッチングがあるが、遂に、チェーンマッチングを古典分子動力学で説明することに成功した¹⁹⁾。

自動車の電動化に伴い、グリースの重要性が高まっている。我々は放射光を用いた小角 X 線散乱とシミュレーションを組み合わせることにより、流動下の増ちょう剤の構造変化を捉えることに成功した²⁰⁾。これは、散逸粒子動力学によるレオロジー解析と類似の傾向を示した²¹⁾。

コーティングや固体摩擦についても、反応力場による分子動力学は有効であり、DLC の雰囲気分子の吸着解析²²⁾、摩擦フェードアウトに関連するトライボ化学反応など²³⁾、DLC の種類による特徴的な現象を捉えつつある。高分子摩擦の分子動力学については、これまでアモルファスが対象となってきたが、粗視化モデルにより、結晶とアモルファス両者を有する表面の摩擦を特徴づけることに成功し²⁴⁾、硬質材料を含む複合系の摩擦も議論をはじめている²⁵⁾。全原子モデルでは、高分子の構造の違いによる摩擦特性を予測できることを示した²⁶⁾。

分子シミュレーションのマクロとの連携も必要である。基油中の高分子添加剤のマルチスケールシミュレータを、極性の有無といった化学特性を扱えるように拡張した。これで高 VI 剤のような機能性添加剤の開発につながる²⁷⁾。固体系においては、SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics) によりミクロンスケールの摩擦摩耗現象を扱えるようになりつつある。表面の状態変化を伴わない弾性摩擦については、金属の種類による摩擦挙動の違いの議論が可能となりつつあり²⁸⁾、状態変化を伴うモデルについては、表面粗さの違いによる摩擦摩耗現象の違いを扱えるようになった²⁹⁾。分子動力学で摩耗を扱おうとすると、シミュレーション中の全ての原子が一気に発熱・状態変化してしまい、徐々に摩耗に至るプロセスを議論することは困難である。そのため、SPH シミュレータの援用は有効であるといえる。

文献 1) C. A. クーロン, 吉武訳: "簡単な諸機械の理論", 工業調査会(1996)., 2) O. Reynolds, Phil. Trans., 177, 157 (1886)., 3) A. Umeda, J. Sugimura, Y. Yamamoto, Wear, 216, 220 (1998)., 4) 坪内・畑, トライボロジスト, 41, 5, 395 (1996)., 5) 王, トライボロジー会議 2021 秋松江 (2021)., 6) 橋本ほか, 日本機械学会誌, 84, 868 (2018)., 7) 深谷・清水・富山・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022)., 8) Y. Shimizu, T. Kurokawa, H. Arai, H. Washizu, Sci. Rep. 11, 2274 (2021)., 9) S. Kajita, T. Kinjo, T. Nishi, Comm. Phys. 3(1), 77 (2020)., 10) S. Takamoto et al., Nat. Commun., 13, 2991 (2022)., 11) 堀尾・名児耶・小野寺・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022)., 12) 鷺津, トライボロジスト, 66 (4), 258 (2021)., 13) Y. Ishii, N. Matubayasi, G. Watanabe, T. Kato, H. Washizu, Sci. Adv., 7 (31) eabf0669 (2021)., 14) Y. Shimizu, T. Kurokawa, H. Arai, H. Washizu, 第 69 回高分子学会年次大会, 福岡, 2K22 (2020)., 15) 富山・岩崎・清水・鷺津, トライボロジー会議 2022 春 東京 (2022)., 16) 荒木・甲嶋・石井・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022)., 17) 片山・石井・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022)., 18) 岡部・石井・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022)., 19) 小林・石井・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022)., 20) 野田・高山・桑本・園田・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022)., 21) 長谷川・杉村・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022)., 22) 鳥本・秋山・岡本・村島・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022)., 23) 田中・秋山・岡本・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022)., 24) 端山・樋口・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022)., 25) 伊藤・端山・樋口・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022)., 26) 金城・山本・三枝・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022)., 27) 山本・神尾・遠藤・尾嶋・石井・ハーजू・富山・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022)., 28) 新田・Le・杉村・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022)., 29) 江良・杉村・鷺津, トライボロジー会議 2022 秋福井 (2022).