

産官学連携によるトライボ分子解析技術の進展

Progress of Tribo-Molecular Analysis by Cooperation Between Industry, Government and Academia

兵庫県大・情報、計算科学研究所（正）*鷲津 仁志

Hitoshi Washizu*, **

*University of Hyogo, **Computational Science Lab., Inc.

1. はじめに

人工知能のブームは過去何度か訪れたが、技術的な限界に対する社会の要求が高かったために失敗とされ、停滞期を挟みながら、現在は第3のブームであるといわれている¹⁾。分子動力学法をトライボロジーの各現象に適用する研究開発手法をトライボ分子動力学と筆者は呼んでいるが²⁾、1950年代終わりの分子動力学（Molecular Dynamics, MD）法の提案当初から、何度か社会の希望を集め、失望に終わることを繰り返してきたように思われる。

MD法は原子群のニュートン運動方程式を連立させて解く材料計算手法であるが、量子レベルのシュレーディンガー方程式を支配方程式とする量子化学に比べて、産業の役に立つのが遅れた。これは、分子科学的には赤外吸収スペクトルなどの分光学、固体科学的には結晶構造や弾性率といった物性を適切に再現したためである。これは、分析科学と軌を一にする。一方で、MD法は分子集団の状態を予測するものであるが、高分子科学や生体分子系といった一部の対象を除いて、企業の材料解析部署の役に立つものではなかった。そのため、溶液論などの物理化学分野では精緻化されていたが、理学の枠から出ることが困難であった。

トライボ分子動力学は、その点において、MDの適用対象として最適である。分子集団の「状態（固体・液体・気体など）」を再現できる材料計算手法は大変少ない。機械工学で用いる、有限要素法をはじめとするシミュレーションでは、物質の状態を計算前に仮定する。一方、MDでは計算の結果として分子集団の状態が計算できるため、たとえば、エンジン油中に分散している添加剤（この状態では溶液）が、金属表面に吸着することにより固体的な吸着膜を形成した、といった物質の状態をまたぐシミュレーションが可能となる³⁾。本報告では、筆者の経験を元にトライボ分子計算の産官学連携の状況について報告する。

2. トライボ分子動力学の産業化

筆者が企業から大学に異動した2015年は、MDの産業化において大変有利となる時期であった。トライボ分子動力学が誕生したのは1992年にThompsonらにより報告された相対する固体に挟まれた多原子分子からなる溶液のせん断シミュレーション⁴⁾であるが、筆者が2001年にこの分野に移った頃は、まだMDシミュレータは自作する必要があった。当時、生体系および材料系のシミュレータは市販されていたが、2つの固体間に挟まれた潤滑油の摺動を行う、すなわち垂直方向の応力印加およびせん断シミュレーションを適切に実現できるシミュレータはほとんど存在しなかった。任意の有機分子のせん断計算を実現するMDシミュレータの制作には、約1年かかる。また、固体を鉄ではなく酸化鉄に置き換えるために、さらに数か月かかる、という具合である。実現として鉄は大気中で放置すると錆びるが、古典分子動力学的には鉄と酸化鉄では原子間のポテンシャル関数そのものが変わるためである。一方、2015年になると、オープンソースのソフトウェアがインターネット上にあり、また分子集団の初期構造をマウス操作によって入力できる市販ソフトウェアの登場により、研究開始が非常に容易となった⁵⁾。

3. 筆者の研究室の産学連携

筆者の所属する兵庫県立大学は、昭和19年に阪神工業地帯の産業人育成のために設立された姫路工業大学（旧制兵庫工専）を前身としており、1990年SPRING-8の運用開始とともに隣接して理学部を設立し放射光物理学の教育・研究を担うなど、わが国の科学政策と地元産業とをつなぐ役割を果たしてきた。筆者の着任した大学院シミュレーション学研究科は、京コンピュータの運用開始時に同様の役割を期待された⁶⁾。

そこで、産学連携のための4つのスキームを開発した。共同研究費で最も高価なものは、①対象企業のニーズに対応して研究を実施する若手研究者の雇用である。これにより、研究室立ち上げから1年で2名の若手研究者を雇用し、特任・客員といった称号の教員として活躍していただいた。多いときは、自身を含め6名の常勤研究者が在籍した。

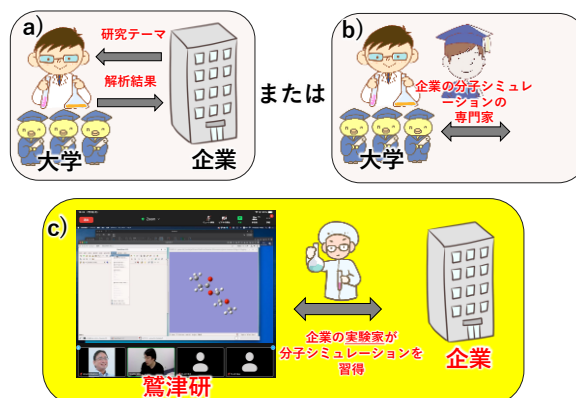


Fig. 1 Collaboration between the university and industry at the presenter's laboratory.

② もっとも研究費として安価であるのが、企業の若手研究員に社会人博士として入学していただくことである。これは年間 50 万円ほどであり、条件を満たした兵庫県民であれば無料である。この場合は、大半の場合、学費は若手研究員本人ではなく企業が負担されている。③ 一番少ないケースは、通常の産学連携のように研究テーマを研究室が請け負って修士学生のテーマとすることである。この方法をあまり取っていないのは、当初、民間企業から大学に移ってきた者に対して科研費の申請が全く通らず、「学問の自由」を修士学生とともに確保する必要があったためである。②の若手研究員は有望な人材ではあるが、企業のニーズを背負っている。そして、既に学位を取得している企業の研究者が MD を勉強したい、といった場合もある。その場合は ④ 共同研究契約を結び、当研究室に通っていただく、という方法を作った。② と ④ は、運用的にはほぼ同じであり、企業の研究員の方（大半が実験系研究者）に、当研究室の修士学生が先生役としてアドバイスするのである（Fig.1）。昨今の MD 研究は、コンピュータゲームにおけるコマンド探しに似ている。そのため、社会人よりも大学院生の方が早く回答を見つけられる。その回答を、グループウェア上で答えることにより、社会人側はノウハウを、大学院生の側はアルバイト代と社会との接点を得られる。以上のスキームは、筆者が研究室設立時から考えていたものではなく、産業側のニーズ、および科研費の不採択が連続したことにより生み出されたものである。

4. 産学連携の成功例

研究室設立以来、30 社以上の企業と共同研究を実施しているが、その中の例を挙げる。石油メーカーはニーズを大変多く持っているため、銅防錆剤の作用機構の研究⁷⁾、風力発電機用の潤滑油添加剤およびグリースの研究⁸⁾、機械学習力場を用いた自動車エンジン油添加剤の研究⁹⁾など数多くのテーマを実施している。グリースメーカーからは社会人博士 2 名が在籍している¹⁰⁾。転がり軸受メーカーからは大手 5 社中 4 社と連携しており¹¹⁾、一時は社会人博士が 3 名同時に在籍していた。研究テーマが重ならないよう、機械学習を用いたアクチュエーター材料の研究¹²⁾、グリースの研究¹³⁾、粉末冶金の研究¹⁴⁾というように離れたテーマを実施した。自動車メーカーとは、自動車用内燃機関技術研究組合（AICE）を通して NEDO プロジェクトを長らく実施させていただいており、主軸受の焼き付き過程のシミュレータを開発した¹⁵⁾。重工業メーカーとも、高温摺動材料のためのシミュレータ開発や¹⁶⁾、機械学習を用いた摩擦摩耗予測などの研究¹⁷⁾を実施している。最近では、化学メーカーとの共同研究が増えており、粘度調整剤のマルチスケール解析¹⁸⁾、ポリマー材料の MD 解析など¹⁹⁾、トライボロジーの重要テーマの解析を実施している。

産学連携においては、研究成果の外部発表をしたくない、という場合がある。もっとも大学は研究・教育の場であり、前節の①は研究、②は研究と教育、③は研究と教育、④は研究である。たとえば、ある分析専門企業において、これまでは実験主体の分析であったところに、MD を新たなサービスを加えた。若手研究員を雇用した。しかし、その指導者が社内にいない。扱っている材料は客先の材料であり、学会発表や論文文化は不可能である。このような場合、筆者がアドバイザーとして参画することは、直接の研究・教育ではないが、本学の技術の社会実装であることには変わらない。そこで、兵庫県立大学ベンチャーとして（株）計算科学研究所を 2022 年春に設立した。これまで 9 社と連携し、3 期黒字を継続し、昨年度からは NEDO 新エネルギー等のシーズ発掘・事業化に向けた技術研究開発事業において「風力発電機の潤滑界面のトライボ解析・診断システム開発」を担当している。

5. 産官学連携へ

トライボロジーは、数ある応用科学分野の中でも、対象が人工物であるにも関わらず最も複雑な現象を扱っているといえる。そこで、データ科学を活かした研究事例の交換の場として、本年度から本学会の会員提案型研究会として「トライボロジーの AI とシミュレーション研究会」を開始した。その主要メンバーとして産業技術総合研究所に入っていたいただいたので、産官学の取り組みをはじめたいと考えている。

計算科学は理論科学の派生分野であり、材料のような自然界の多様性と向き合う場合、一人では研究目的を達成できない。この状況は、19 世紀の D. メンデレーエフにおいても同様であり、学士、修士、博士のそれぞれの研究において外部委託研究を実施し、学位取得の数年後に周期律表を発見した²⁰⁾。周期律表のような根源的な発見が出来るかどうかはわからないが、産官学連携を推進する基調には、この考え方を置いている。

文献

- 1) 平成 28 年版 情報通信白書（総務省）2) 鷲津：表面科学, 36 (5) (2015) 242. 3) 鷲津：月刊トライボロジー, 29 (5) (2015) 26. 4) P.A. Thompson, G.S. Grest, M.O. Robbins: Phys. Rev. Lett. 68 (1992) 3448. 5) 鷲津：ベアリング新聞, 新樹社, 3 月 20 日号 (2016). 6) 鷲津：アンサンブル, 22 (1) (2020) 100. 7) K. Nishikawa et al., Jurnal Tribologi 21 (2019) 63. 8) H. Koshima et al., Tribology Online, 19 (1), (2024) 11. 9) T. Horio et al., 9th International Tribology Conference (ITC), Fukuoka 2023, 29-F-14, Fukuoka, Japan (2023). 10) H. Akiyama et al., The 10th International Conference on Manufacturing, Machine Design and Tribology (ICMDT2025), Himeji, Japan (2025). 11) S. Takata et al., International Tribology Conference Sendai 2019, Sendai, Japan, 21-G-10 (2019). 12) Y. Shimizu et al., Sci. Rep. 11 (2021) 2274. 13) T. Noda et al., 7th World Tribology Congress, WTC2022, Lyon, France (2022). 14) N. Yashiro et al., Tribology Online, 16, 1 (2021) 16. 15) N. Sugimura et al., J. Comput. Sci., 82 (2024) 102325. 16) Le Van Sang et al., EPL (Europhys. Lett.) 122, 2 (2018) 26004. 17) 柴田ほか：トライボロジー会議 2024 秋 名護, 万国津梁館, 名護 (2024). 18) K. Kajeh et al., J. Mol. Liq. 393 (2024) 123590. 19) T. Kinjo et al., 9th International Tribology Conference (ITC), Fukuoka 2023, 28-F-07, Fukuoka, Japan (2023). 20) 梶：メンデレーエフの周期律発見, 北海道大学出版会 (1997).