

科学研究費助成事業（基盤研究（S））公表用資料  
〔平成28年度研究進捗評価用〕

平成25年度採択分  
平成28年4月1日現在

現物モデリングによる実験・計測融合マルチレベルトライボロジー  
シミュレータの開発

Development of Experiment - and Measurement -  
Integrated Multilevel Tribology Simulator Based  
on Accurate Modeling

課題番号：25220901

宮本 明 (MIYAMOTO AKIRA)

東北大学・未来科学技術共同研究センター・教授



研究の概要 これまで別々に進められてきた実験的手法と理論的・計算化学的な手法を融合した実験融合マルチレベル計算化学手法を、これも世界に先駆けて、トライボロジー分野において実現し、次世代自動車、医療機器など社会の期待が大きい技術に応用、その有効性を実証する。さらに、実験・計測そのものをマルチレベルでリアルにシミュレーションするシームレスシミュレータの開発と合わせて、トライボロジーに係る研究開発手法を飛躍的に革新する。

研究分野：機械工学

キーワード：マルチレベル、量子分子動力学、トライボケミカル、シミュレータ、摩擦

1. 研究開始当初の背景

量子論のような原子・分子レベルの理論を基礎に自動車用エンジンのような実用部品・機器を解析することは永年の理論研究者の夢であった。この目標実現に向けて、これまで培ってきたマルチレベルトライボロジーシミュレータに加え、最近はトライボロジー分野の機器分析、計測試験方法が飛躍的に進歩しているので、両方法の融合が期待されている。

2. 研究の目的

本研究では、マルチレベルシミュレーションとトライボロジー分析、トライボロジー計測、

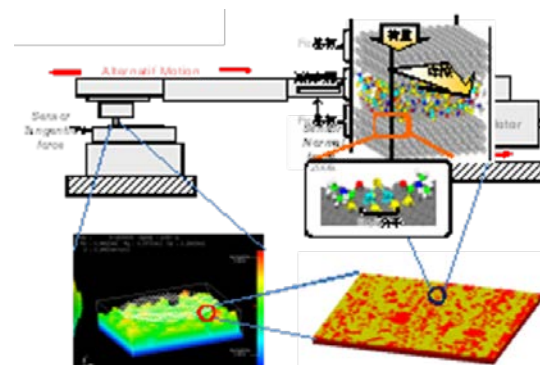
トライボ部品シミュレーションとの融合した実験融合マルチレベルトライボシミュレータ（参考図1）を世界に先駆けて開発する。実験研究者との連携を推進するシームレス可視化・シミュレーション手法とともに、トライボロジーに係る研究開発手法を飛躍的に革新する。

3. 研究の方法

既開発の量子・原子・メソ・マクロレベルのソフトウェアを活用して、参考図2にあるようなトライボロジー試験機そのものをシミュレーションするソフトウェアを含め、様々な新しいソフトウェアを開発する。



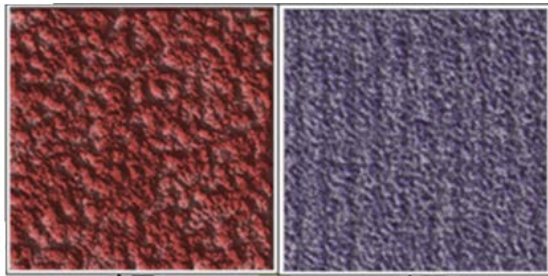
参考図1 シミュレータ概念図



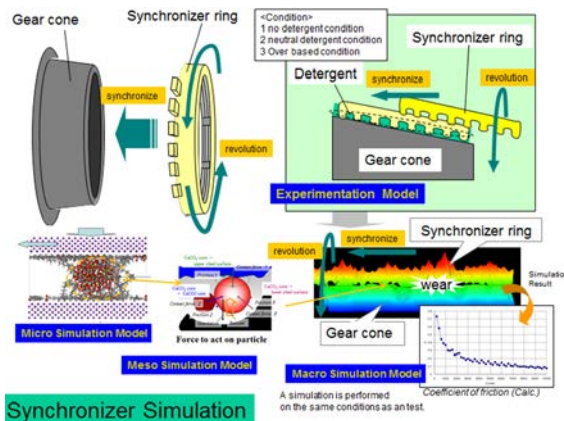
参考図2 往復摺動試験シミュレータ

#### 4. これまでの成果

実験的な構造解析で使用される様々な分析シミュレーションに既存の第一原理分子動力学法に比べて1000万倍の高速化を実現した超高速化量子分子動力学法に基づくマルチスケール・マルチフィジックス手法によるモデリングを併用することにより実構造・本物構造のモデリング手法を実現した。参考図3は、メソ・マクロテクスチャー構造をもつトライボ界面への応用例である。



参考図3 トライボ界面メソ・マクロテクスチャー構造



参考図4 シンクロナイザーシミュレータ

さらに、実構造・本物構造モデルからのトライボロジー物性の理論予測手法の開発、原子レベルからの積上げによるトライボ計測・トライボ試験結果予測手法の開発、原子レベルからの積上げによるトライボ部品・トライボ機器摩擦・摩耗挙動予測手法の開発を進めた。参考図4は自動車用クラッチ部品として重要なシンクロナイザーへの応用例である。原子レベルから部品レベルと大きさの異なる

シミュレーションが実現したことになる。さらに、原子レベルから部品レベルをシームレスに繋ぐ可視化ソフト、シミュレーション手法も開発して、国内外の実験研究者、企業との共同研究を推進している。

#### 5. 今後の計画

国際的にも突出した研究となっているので、人工知能の活用など更にインパクトの大きな研究に発展させる計画である。

#### 6. これまでの発表論文等 (受賞等も含む)

- (1) Mixed lubrication of steel by C18 fatty acids revisited. Part II: Influence of some key parameters, Tribology International, 94(2016) 207-216, S. Loehle, C. Matta, C. Minfray, T. Le Mogne, R. Iovine, Y. Obara, A. Miyamoto, J.M. Martin
  - (2) Development of a method to lower recontamination after chemical decontamination by depositing Pt nano particles: (D) Consideration of the suppression mechanism using a quantum dynamics calculation, Journal of Nuclear Science and Technology, ISSN: 0022-3131, 1-11, (2015), T. Ito, T. Ohashi, H. Hosokawa, T. Kawasaki, M. Aizawa, Y. Ishizawa, K. Inaba, N. Hatakeyama, A. Miyamoto
  - (3) Mixed Lubrication with C18 Fatty Acids: Effect of Unsaturation, Tribology Letter, 53 (2014), 319-328., S. Loehle, C. Matta, C. Minfray, T. Le Mogne, R. Iovine, Y. Obara, R. Miura, A. Miyamoto, J.M. Martin
  - (4) Experiment-Integrated Computational Chemistry Simulation of Ski Wax Penetrated into Running Surface, Science and Skiing VI, 168-176, (2014), N. Hatakeyama, K. Araki, H. Kubota, M. Miura, K. Okushi, R. Miura, A. Suzuki, A. Isomura, A. Miyamoto, Y. Yaegashi, J. Sato, K. Fujita
  - (5) Multiscale Multiphysics Computational Chemistry Simulation Applied to Ski Wax Tribology, Science and Skiing VI, 215-233, (2014), A. Miyamoto, K. Araki, H. Kubota, M. Miura, K. Okushi, R. Miura, A. Suzuki, N. Hatakeyama, A. Isomura, Y. Yaegashi, J. Sato, K. Fujita
- ホームページ等  
<http://www.aki.che.tohoku.ac.jp/>