



2023 年 3 月 30 日

報道関係者各位

慶應義塾大学
仙台高等専門学校

多様な潤滑剤の摩擦特性を評価する計算機手法 —分子動力学計算と機械学習を組み合わせたアプローチで 分子運動から摩擦特性が推定可能に—

慶應義塾大学大学院理工学研究科の安田一希（修士課程 2 年）、遠藤克浩（研究当時博士課程 2 年）、同大学の小林祐生助教、荒井規允准教授、泰岡顕治教授および仙台高等専門学校の藤原和彦准教授、矢島邦昭教授、故・早川吉弘教授の研究グループは、機械学習と分子動力学計算を組み合わせた新規提案手法により、複数の種類の潤滑剤の摩擦特性を評価することに成功しました。

潤滑剤は、機械部品の界面に付着し、界面に生じる摩擦を軽減させるために用いられます。これまで、機械部品の作動速度に依存した摩擦特性の変化が知られてきました。しかし、分子構造が大きく異なる潤滑剤に関して、このような摩擦の特性を分子動力学の観点から網羅的に評価することは困難でした。本研究では、分子動力学計算によって得られる潤滑剤の分子運動を、機械学習を用いた手法により解析することで、異なる分子において共通する摩擦特性に関連した分子運動を明らかにしました。本提案手法は、多様な潤滑剤の特性を簡便かつ網羅的に評価できる新規手法であるため、潤滑剤を使用する幅広い産業界への貢献が期待されます。

本研究成果は、2023 年 1 月 30 日に国際誌『*ACS Applied Materials & Interfaces*』に掲載されました。

1. 本研究のポイント

- ・多様な閉じ込め潤滑剤（注 1）における分子運動を自動解析する機械学習手法を提案した。これにより、分子運動の中から、潤滑剤の摩擦特性に関係する運動の要素を明らかにした。
- ・この成果により、短時間の分子動力学計算から効率よく摩擦特性を予測できる可能性を示した。

2. 研究背景

近年、環境への配慮から省エネルギー化が求められています。全世界のエネルギー消費のうち、約 2 割が機械部品の接触面における摩擦に起因するとされており、摩擦特性を向上させる潤滑剤の開発が重要課題です。しかし、摩擦特性は分子構造、機械部品の動作速度、機械部品との相互作用など多くの要因に影響され、摩擦特性の違いに影響する分子運動を解明することは困難でした。

3. 研究内容・成果

本研究では、機械部品の接触面を再現した条件で潤滑剤の分子動力学計算を行い、シミュレーションによって得られる分子運動を、学習データに正解を与えない状態で学習させる教師なし機械学習手法（注 2）により解析しました（図 1(a)、(b)を参照）。この機械学習手法では、多様な形状をもつ分子において、せん断速度に応じて変化する代表点の運動の違いを教師なし学習により分類を行いました。その結果、潤滑剤の運動は摩擦特性に関連した運動の要素と分子種類に関連した運動

の要素に分類できることが分かりました。さらに、形状が異なる分子においても、分子運動から摩擦特性を推定できることを示しました。

4. 今後の展開

本提案手法は、多様な潤滑剤の特性を簡便かつ網羅的に評価できる新規手法であるため、潤滑剤を使用する幅広い産業界への貢献が期待されます。特に、添加剤の付加による摩擦特性の変化を含めて実用化に向けた研究を進める予定です。

<原論文情報>

論文タイトル: Combining Molecular Dynamics and Machine Learning to Analyze Shear Thinning for Alkane and Globular Lubricants in the Low Shear Regime

著者: Ikki Yasuda, Yusei Kobayashi, Katsuhiro Endo, Yoshihiro Hayakawa, Kazuhiko Fujiwara, Kuniaki Yajima, Noriyoshi Arai, and Kenji Yasuoka

雑誌名: *ACS Applied Materials & Interfaces*, **15**, 8567-8578 (2023)

DOI: [10.1021/acsami.2c16366](https://doi.org/10.1021/acsami.2c16366)

<研究費>

本研究の一部は文部科学省「閉じ込め液体の特性・機能のシミュレーション新規基盤構築」において実施しました。

<用語説明>

(注 1) 潤滑剤が分子 1 個のサイズと同等の非常に狭い空間 (厚さ数十 nm 程度) に存在する状態です。今回は、雲母壁に挟まれた空間における潤滑剤の振る舞いをシミュレーションしました。

(注 2) 一般的には入力値と正解データの対応を学習することで新たな入力値を予測する教師あり機械学習がよく使われます。対して、教師なし機械学習は入力値のみから目的とするタスクを行います。例として、複雑なデータからの単純化する特徴抽出が挙げられます。本研究では、潤滑剤の複雑な運動データを単純化する特徴を抽出しました。

※ご取材の際には、事前に下記までご一報くださいますようお願い申し上げます。

※本リリースは文部科学記者会、科学記者会、各社科学部等に送信させていただいております。

・研究内容についてのお問い合わせ先

慶應義塾大学 理工学部 機械工学科 教授 泰岡 顕治 (やすおか けんじ)

TEL: 045-566-1523 FAX: 045-566-1495 E-mail: yasuoka@mech.keio.ac.jp

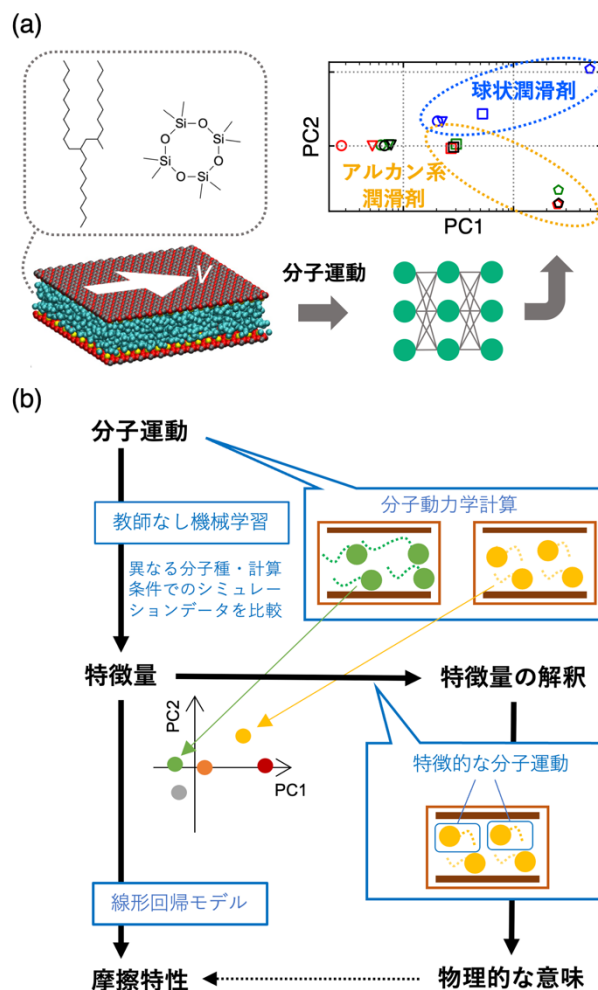


図 1. (a)本研究の概略図。多様な種類の潤滑剤における分子動力学計算のデータを機械学習モデルにより解析する。(b)機械学習によるデータ解析の概略図。

仙台高等専門学校 広瀬キャンパス 総合工学科 教授 矢島 邦昭（やじま くにあき）

TEL：022-391-6130 FAX：022-391-6130 E-mail：yajima@sendai-nct.ac.jp

- 本リリースの配信元

慶應義塾広報室（望月）

TEL：03-5427-1541 FAX：03-5441-7640

E-mail：m-pr@adst.keio.ac.jp <https://www.keio.ac.jp/>