

せん断場下におけるトラクションフルードの 分子動力学シミュレーションとパーシステントホモロジー解析

Molecular dynamics simulation and persistent homology analysis of traction fluid in shear field

RIST (正) *富山 栄治 出光興産 (正) 岩崎 猛 兵庫県立大 (正) 清水 陽平 兵庫県立大 (正) 鶴津 仁志

Eiji Tomiyama*,**, Takeshi Iwasaki***, Yohei Shimizu**, Hitoshi Washizu**

*Research Organization for Information Science and Technology, **University of Hyogo, ***Idemitsu Kosan Co., Ltd.

1. 背景

トロイダル式無段変速機 (Continuously Variable Transmission : CVT) は滑らかな 2 つの回転体接触部に形成される弾性流体潤滑 (Elastohydrodynamic Lubrication : EHL) 油膜、トラクションフルードを介して動力が伝達される機構になっている¹⁾。トラクションフルードはしう動面に油膜を形成することにより潤滑油として作用するために低温においても潤滑油として小さな摩擦損失で流動性を保つ必要がある一方で、トラクション力を効率よく伝達するために高圧・高せん断場下において高い摩擦係数・高トラクション係数を併せ持つ必要があり、これら相反する特性を両立することが技術的課題となっている。これらの特性を兼ね備えたトラクションフルードが開発されれば、変速機の小型化・高容量化、それに伴う燃費向上・環境負荷低減などが期待できるため、高トラクション係数を発現するフルードが望まれている。これまでには、主に実験的手法によりそのようなフルード分子の探索が進められてきており、有効な分子構造も提案されている。しかしながら、そのトラクション力発生の機構は充分に解明されていない²⁻⁶⁾。

そこで本研究では、これまでに分子動力学シミュレータ LAMMPS を用い、固体間に挟まれたフルードに対してせん断を印加するシミュレーション手法を構築し、温度、せん断速度差などの条件を様々に変えてトラクション係数を評価してきた。今回さらに、フルード分子の構造や分布がトラクション係数に及ぼす影響を調べるため、高分子を対象に用いた報告⁷⁾がなされているパーシステントホモロジー解析をせん断場中のフルードに対しておこない、複数の分子におけるトラクション係数との関係について評価・考察した。

2. 手法

トラクション基油である DM2H、および Bicyclohexyl, Cyclohexane, t-Butylcyclohexane, Cyclooctane, t-Butylbenzene, Dodecane に対しシミュレーションをおこなった。DM2H は有橋脂環構造 2 つが中心となる炭素で結びついた構造を持った亜鉛型化合物であり 2,3-dimethyl-2-[(3-methylbicyclo[2.2.1]hept-2-yl)methyl]bicyclo[2.2.1]heptane (DM2H、化学式 C₁₈H₃₀) として表される。

以下にシミュレーションシステムの構築手順を示す。分子データは Winmostar を用いて作成し、作成した分子を約 1 万原子になるよう配置した後に温度一定の条件でシミュレーションを進め熱平衡状態の配置を作成する。膜厚方向となる z 方向は 10 nm とした。次に、フルード分子層に対しモデル金属固体 480 原子から構成される α 鉄を模した原子層を鉛直方向上下に配置する。固体原子層の原子振動は凍結させ、フルード層と接するしう動面は (100) 面とする。

固体原子層とフルード間に働く相互作用については、固体原子層とフルード間の界面滑りが生じない程度に大きな相互作用を設定する。これは、実現可能な計算時間でシミュレーションを実施するためであり、また、EHL 条件下においては個体-フルード間の相互作用ではなくフルード層内の相互作用がトラクション発現の主要因子であるとの考えに基づいている²⁾。

境界条件は水平方向である x, y 方向に周期的とする。さらに、上部の固体層に対して鉛直下方向に圧力に相当する力を加え、上下の固体層に対し水平方向に定すべりを印加する。時間刻み 0.5 フェムト秒にて時間発展計算をすることにより定圧・定せん断状態のアンサンブルを作成し、その後トラクション係数等の評価をおこなう。定圧・定せん断状態におけるスナップショットを Fig. 1 に示す。

得られた原子座標に対し、パーシステントホモロジー解析ソフトウェア Homcloud⁸⁾を使用し 3 次元点集合データ解析をおこなった。

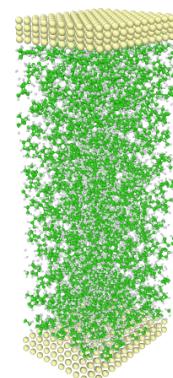


Fig. 1 Snapshot of the molecular dynamics simulation of at external pressures $P_{zz} = 1.24$ GPa

3. 結果と考察

各フルード分子について、相対滑り速度差 50 m/s、最大圧力 1.24 GPa、温度 20°C の条件にて約 3 ナノ秒程度のシミ

ュレーション時間に渡るシミュレーションにより得られたトラクション係数と, SSR 値 7%, 最大圧力 1.24 GPa, 温度 20°C の条件にて実施した実験により得られたトラクション係数を用いてプロットした結果を Fig.2 に示す。トラクション係数のフルード間での大小関係が実験値の結果を定性的に再現出来た。しかし, Cyclooctane については全体の傾向から外れ, 実験値に比較して大きなトラクション係数を示している。これについて、より長時間となる 30 ナノ秒のシミュレーションを実施した結果、トラクション係数は 0.176 から 0.16 へと低下し、全体的な傾向に近づいた。

次に 7 種全てのフルード分子について、せん断状態における炭素原子の座標データに対してパーシステントホモロジー解析をおこない、0 次・1 次・2 次のパーシステント図を得た。そのうち空隙のトポロジーに対応する 2 次のパーシステント図を比較した結果、トラクション係数が大きな分子においてパーシステント図における分布がより大きな Birth-time 側になっている様子が確認できた。7 種の中でトラクション係数が最大である DM2H と最小である t-Butylbenzene に対する 2 次パーシステント図を Fig.3 に示す。トラクション係数の大きなフルード分子ほど、より広い空間に渡る構造が形成されていることを示していると推察される。

4. 結語

固体原子層に挟まれたフルードに対して定圧・定せん断状態とする全原子分子動力学シミュレーション手法を用いて複数分子のトラクション係数を評価した。得られた炭素原子の座標データに対してパーシステントホモロジー解析をおこない、トラクション係数が大きい分子ほど 2 次パーシステント図の分布がより大きな Birth-time 側になる傾向があることを見出した。

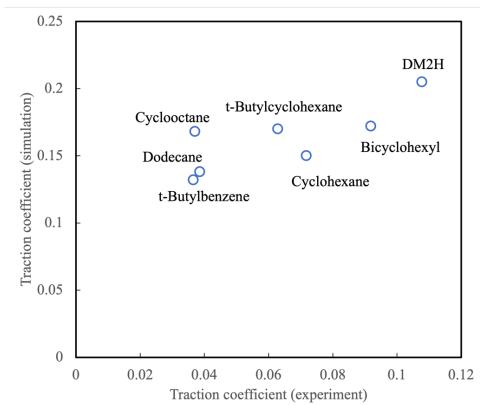


Fig. 2 Traction coefficients from simulation and experiment.

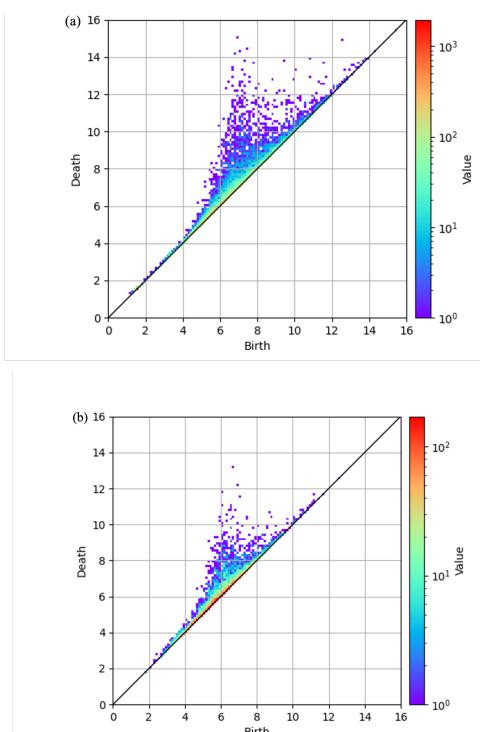


Fig. 3 Persistent diagram of (a) DM2H and (b) t-Butylbenzene in shear field.

文献

- 1) トロイダル CVT, 田中裕久, コロナ社 (2000).
- 2) H. Washizu, T. Ohmori: Molecular Dynamics Simulations of Elastohydrodynamic Lubrication Oil Film, Lubrication Sciences, 22, 323 (2010).
- 3) H. Washizu, S. Sanda, S. Hyodo and T. Ohmori, N. Nishino and A. Suzuki: A Molecular Dynamics Analysis of the Traction Fluids, SAE 2007 Transactions, Journal of Materials and Manufacturing, V116-5, 2007-01-1016, (2007).
- 4) H. Washizu, S. Sanda, S. Hyodo and T. Ohmori, N. Nishino and A. Suzuki: Molecular Dynamics Simulations of Elasto-hydrodynamic Lubrication and Boundary Lubrication for Automotive Tribology, J. Phys.: Conf. Series, 89, 012009, (2007).
- 5) H. Washizu, S. Hyodo, S. Ohmori, N. Nishino, A. Suzuki: Macroscopic no-slip boundary condition confirmed in full atomistic simulation of oil film, Tribology Online 9, (2) 45-50. (2014).
- 6) H. Washizu, T. Ohmori, A. Suzuki: Molecular Origin of Limiting Shear Stress of Elastohydrodynamic Lubrication Oil Film Studied by Molecular Dynamics, Chem. Phys. Lett., 678, 1-4 (2017).
- 7) Y. Shimizu, T. Kurokawa, H. Arai, H. Washizu: Higher-order structure of polymer melt described by persistent homology, Sci Rep 11, 2274 (2021).
- 8) <https://homcloud.dev>