

油中における粘度調整剤挙動のシミュレーション解析による解明

Analysis of the Behavior of Viscosity Modifiers in Oil by Means of Simulation

三井化学（株）・高複研（正）*山本 周平 三井化学（株）・生技研（非）神尾 和教 （非）遠藤 聡太
 兵庫県大・情報科学（非）尾嶋 拓 （正）石井 良樹 （非）ハーजूー コーサー （非）富山 栄治
 （正）鷲津 仁志

Shuhei Yamamoto*, Kazunori Kamio*, Sota Endo*,

Hiraku Oshima**, Yoshiki Ishii**, Kosar Khajeh**, Eiji Tomiyama**, Hitoshi Washizu**

*Mitsui Chemicals, Inc., **University of Hyogo

1. はじめに

ルーカント®（液状オレフィンコポリマー（L-OCP））はエチレンと α -オレフィンからなる共重合体で、無色透明液体の粘度調整剤である。エンジン油で汎用されているオレフィンコポリマー（OCP）よりも低分子量体であるためせん断安定性に優れ、ギヤ油を中心とした駆動系の潤滑油に使用されており、近年では作動油への応用も進められている。作動油は油圧システム中を循環しており、その流体中においては高せん断領域と低せん断領域が存在し、それにより発生する副次流によって循環が妨げられることが知られているが、L-OCP が処方された作動油では、副次流の発生が少なく、エネルギー効率の点で優位に作用することが報告されている（Fig. 1, 2）^{1), 2)}。そこで、同現象のメカニズム解明のため、本研究では基油に添加した粘度調整剤が及ぼす流体への影響に着目し、マルチフィジックス・シミュレーションを用いて L-OCP およびポリメタクリレート（PMA）の流体中での挙動を解析した。

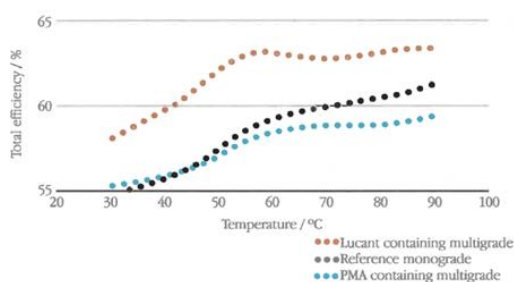


Fig. 1 Total hydraulic system efficiency¹⁾

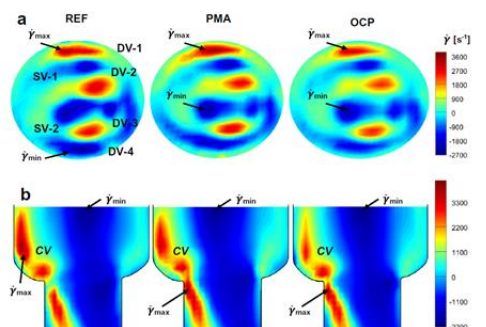


Fig. 2 Contour plots of the temporally-averaged shear rate²⁾
 *OCP: L-OCP

2. 解析手法

本シミュレーションは、基油構成分子それぞれの運動は考慮せず連続する流体場として格子ボルツマン法（LBM: Lattice Boltzmann Method）で、モノマー単位を一つの仮想粒子として粗視化させた粘度調整剤ポリマー分子の動きをブラウン動力学（BD: Brown Dynamics）でそれぞれ計算し、両者を連成させるハイブリッドシミュレーション手法^{3), 4)}により解析を行った。3次元の速度場を考慮して LBM の格子速度モデルは D3Q15 を採用し、せん断場を再現する手法として Succi の 2 次元の理論⁵⁾をもとに z 軸上面に移動壁を適用した。基油にはヘキサデカン（ $C_{16}H_{34}$ ，粘度: $2.34 \times 10^{-3} \text{ Pa} \cdot \text{s}$ ，密度: 761.5 kg/m^3 ）を用い、粘度調整剤ポリマーは 64 粒子 \times 4 ポリマーを解析系内に配置させ、PMA を模したポリマーには 4 粒子毎の 1 粒子に極性基として 3 D の双極子モーメントを与えた（Fig. 3, 4）。格子間隔 1.0 nm の構造格子にて、時間刻み 5 fs で 1×10^6 ステップ計算し、せん断速度は 1, 100 m/s で実施した。

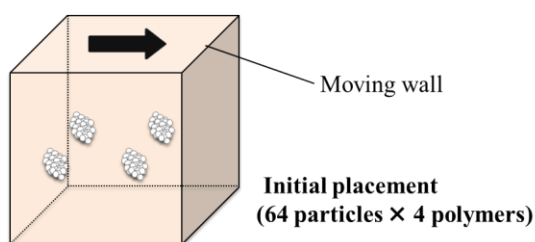


Fig. 3 Schematic picture of the simulation model

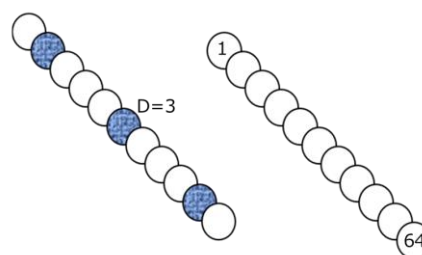


Fig. 4 Polar polymer (PMA) & non-Polar polymer (L-OCP)

3. 結果と考察

L-OCP, PMA それぞれ 4 分子を解析系内に配置して、低せん断速度および高せん断速度域でシミュレーション解析を行った結果を Fig. 5, 6 に示した。低せん断速度域では、ポリマーが流体の流れに大きく影響を及ぼすことが認められた一方で、高せん断速度域では L-OCP, PMA 間で明確な差異は認められなかった。低せん断速度域では、PMA は分子内の双極子-双極子相互作用により分子が縮み、分子サイズが L-OCP よりも小さくなるのが観察され、L-OCP は極性基を有さないため X 軸方向の流れに沿って拡がり、同時に Y 軸方向の流れの伝播の抑制する効果があらわれたことに由来すると考えられる。

この結果から分かるように、L-OCP 処方が作動油で副次流の発生が少ないのは、主流の流れ方向に沿って拡がった L-OCP が副次流の伝播を抑制したためであり、これにより高エネルギー効率に寄与した可能性がある。

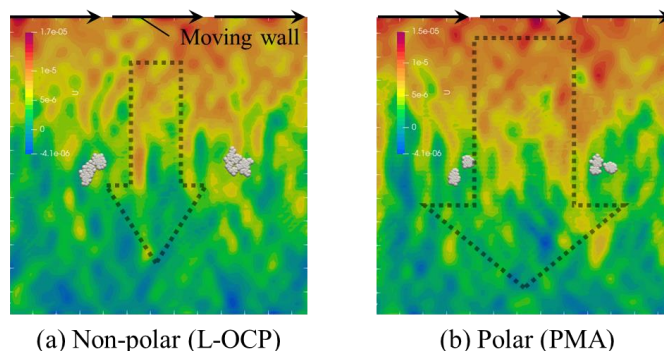


Fig. 5 Snapshots of polymer behavior, fluid flow at low shear velocity (1 m/s)

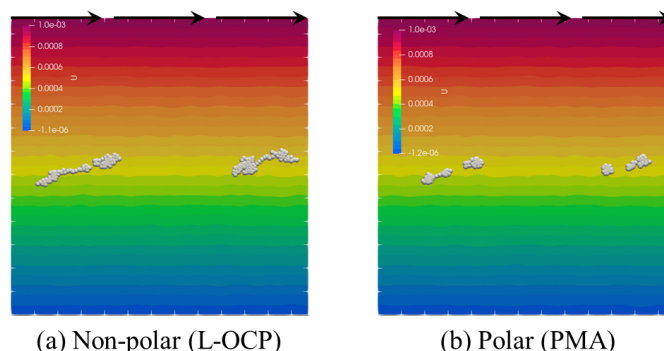


Fig. 6 Snapshots of polymer behavior, fluid flow at high shear velocity (100 m/s)

4. おわりに

本マルチフィジックス・シミュレーション解析により、L-OCP, PMA 間で流体中での分子の伸縮挙動が異なることが明らかとなり、これにより L-OCP 処方作動油がエネルギー効率の点で優位に作用している可能性について言及した。以前に報告⁶⁾した金属壁面への吸着挙動と併せて、L-OCP は副次流の発生および伝播抑制の両面で効果があることが示唆された。今後は、本解析における L-OCP, PMA 構造の最適化を行うとともに、作動油配管を模したバルブ型レイアウトでの流体中の L-OCP, PMA 挙動のメカニズム解析を進める計画である。

文献

- 1) M. Moon: Lubes 'n' Greases, 25 (No. 10), 20 (2019) 34.
- 2) I.K. Karathanassis, et al.: J. Nonnewton. Fluid Mech. 275, (2020) 104221.
- 3) H. Yoshida, T. Kinjo & H. Washizu: Chem Phys. Lett. 737 (2019) 136809.
- 4) 澤井・Deboprasad・鷲津：潤滑油中の粘度指数向上剤の動的挙動解析，日本機械学会 2021 年度年次大会予稿集，S071-01.
- 5) S. Succi: The Lattice Boltzmann Equation for Fluid Dynamics and Beyond, Oxford Univ. Press, New York, (2001) 87.
- 6) 山本・神尾・石井・鷲津：油中の粘度調整剤ポリマーに関する分子動力学シミュレーション，トライボロジー会議 2021 秋松江予稿集，B-19.

ルーカント®は三井化学株式会社の登録商標です。