

粗視化分子動力学シミュレーションによる粗さをもつ固体摺動面間の 潤滑油添加剤の挙動解明

研究課題代表者：張 賀東（名古屋大学 情報学研究科）

本研究では、分子動力学シミュレーションを用い、固体摺動面のすきまにおける添加剤分子の挙動を解析することを目的としている。とくに、実摺動面のような表面粗さをもつ系を対象にした大規模なシミュレーションを可能とするために、原子個々の運動を計算する全原子モデルではなく、複数の原子を 1 つのビーズに置換し、ビーズ同士をばねで結合した計算効率の高い粗視化モデルを独自に構築し、利用することとした。

平成 30 年度では、前年度に固体摺動面に酸化鉄 (Fe_2O_3)、潤滑油にドデカン ($\text{C}_{12}\text{H}_{26}$)、添加剤に飽和脂肪酸のステアリン酸 ($\text{C}_{18}\text{H}_{36}\text{O}_2$) を対象として構築した粗視化モデルをリファインするとともに、不飽和脂肪酸のオレイン酸 ($\text{C}_{18}\text{H}_{34}\text{O}_2$) の粗視化モデルを新たに構築した。また、前年度に開発した LAMMPS (Large-scale Atomic Molecular Massively Parallel Simulator) 組込用の transverse DPD (Dissipative Particle Dynamics) プログラムを用いて、潤滑現象のような固液界面を含む系の動的特性に及ぼす transverse DPD 法の効果を調査した。その際、DPD 法に用いる摩擦係数が大きい場合は、系の圧力の再現精度が低下する問題を発見し、ランダム力と散逸力が大きいため、非物理的な運動が発生することは原因と突き止めた。時間刻みを短く設定すれば、非物理的な運動が抑制され、圧力の再現精度は確保されるが、計算効率が低下してしまう。そこで、精度と効率を両立させるために、rRESPA (reversible Reference System Propagator Algorithms) を用いたマルチタイムスケール積分を行い、非結合力の時間刻みを長く、ランダム力、散逸力、結合力の時間刻みを短く設定することとし、最適な設定値を見出した。また、ランダム力と散逸力の計算について、LAMMPS プログラムを改良し、正規分布に従う乱数の生成およびプロセス間通信のための時間を短縮し、7 割程度の計算速度向上を実現した。そして、固液界面系において、transverse DPD が分子の緩和時間、界面に平行な方向の拡散係数、および界面に垂直・平行な方向の運動エネルギー散逸に支配的な影響を及ぼすことを明らかにした。

成果発表

1. H. Zhang, Sho Washio, K. Fukuzawa, S. Itoh, Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation of Fatty Acid Additives in Lubricating Oil Sheared by Corrugated Solid Surfaces, Proceedings of ASME/JSME 2018 Joint Conference on Information Storage and Processing Systems and Micromechanics for Information and Precision Equipment, ISPS-MIPE2018-8543 (3 pages), August 2018.
2. W.W.F. Chong, H. Zhang, Simulating Surface Forces Between Iron Oxide Surfaces Immersed in Methyl Oleate Using Molecular Dynamics, Proceedings of ASME/JSME 2018 Joint Conference on Information Storage and Processing Systems and Micromechanics for Information and Precision Equipment, ISPS-MIPE2018-8524 (3 pages), August 2018.
3. W.W.F. Chong, H. Zhang, Molecular Dynamics Simulation of Load Carrying Properties for Confined Nano-meter Thick Lubrication film, Proceedings of Asia International Conference on Tribology 2018, Vol. 2018, pp. 54–55, September 2018.