

革新的要素技術(4チーム連携)



東北大学

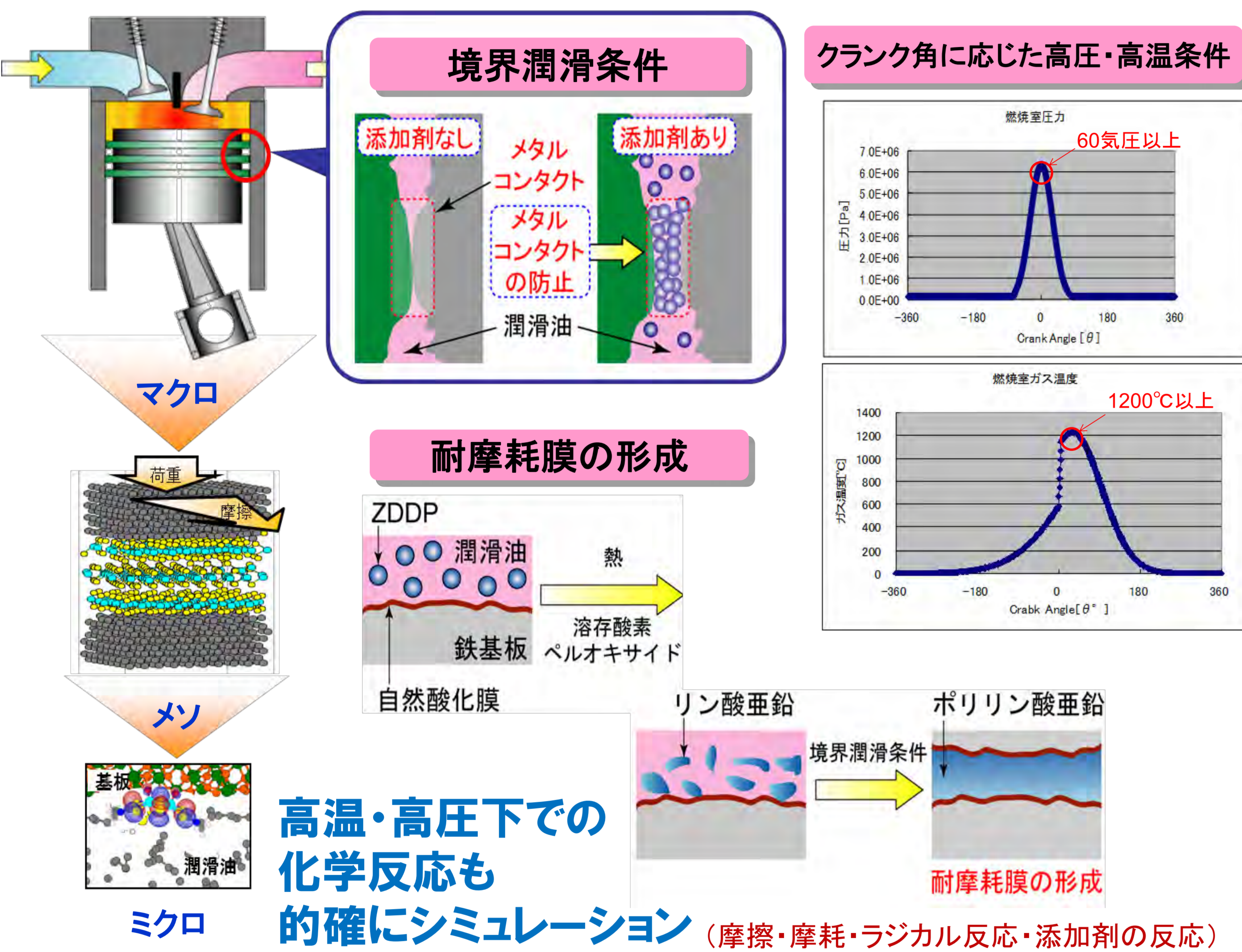
宮本研究室

量子論からの積み上げによる実エンジン壁面の熱損失・反応影響評価シミュレータの開発と革新的燃焼技術開発への応用

熱効率50%への貢献

目標達成に必要な様々な技術課題(PM生成、プレイグ、ノッキング、熱損失、摩擦損失、焼付き等)を世界最強のシミュレータで解決

量子論からの積み上げによる実エンジン壁面シミュレータ



国際的ベンチマークと高い優位性・独自性

実エンジン壁面熱損失・反応シミュレータに関する国際的ベンチマーク

	研究責任者グループ	欧米	中国・韓国
壁面熱損失シミュレータ			
マイクロ(量子・ナノレベル)	○	△	△
メソ(組織レベル)	○	△	△
マクロ(CAE)	○	○	○
壁面反応シミュレータ			
マイクロ(量子・ナノレベル)	○	△	△
メソ(組織レベル)	○	△	△
マクロ(CAE)	○	○	○
劣化・耐久性シミュレータ			
マイクロ(量子・ナノレベル)	△	×	×
メソ(組織レベル)	△	×	×
マクロ(CAE)	△	△	△

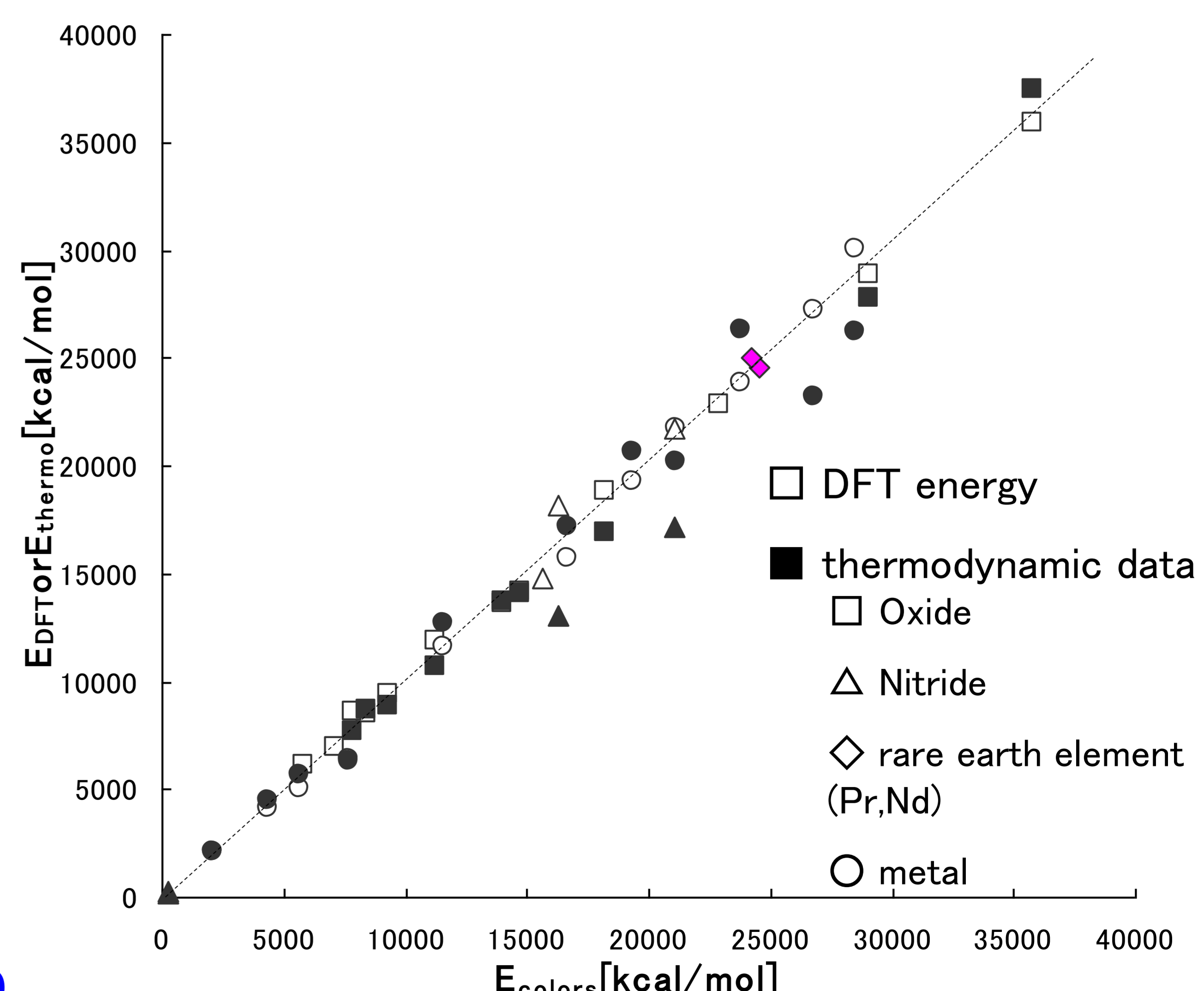
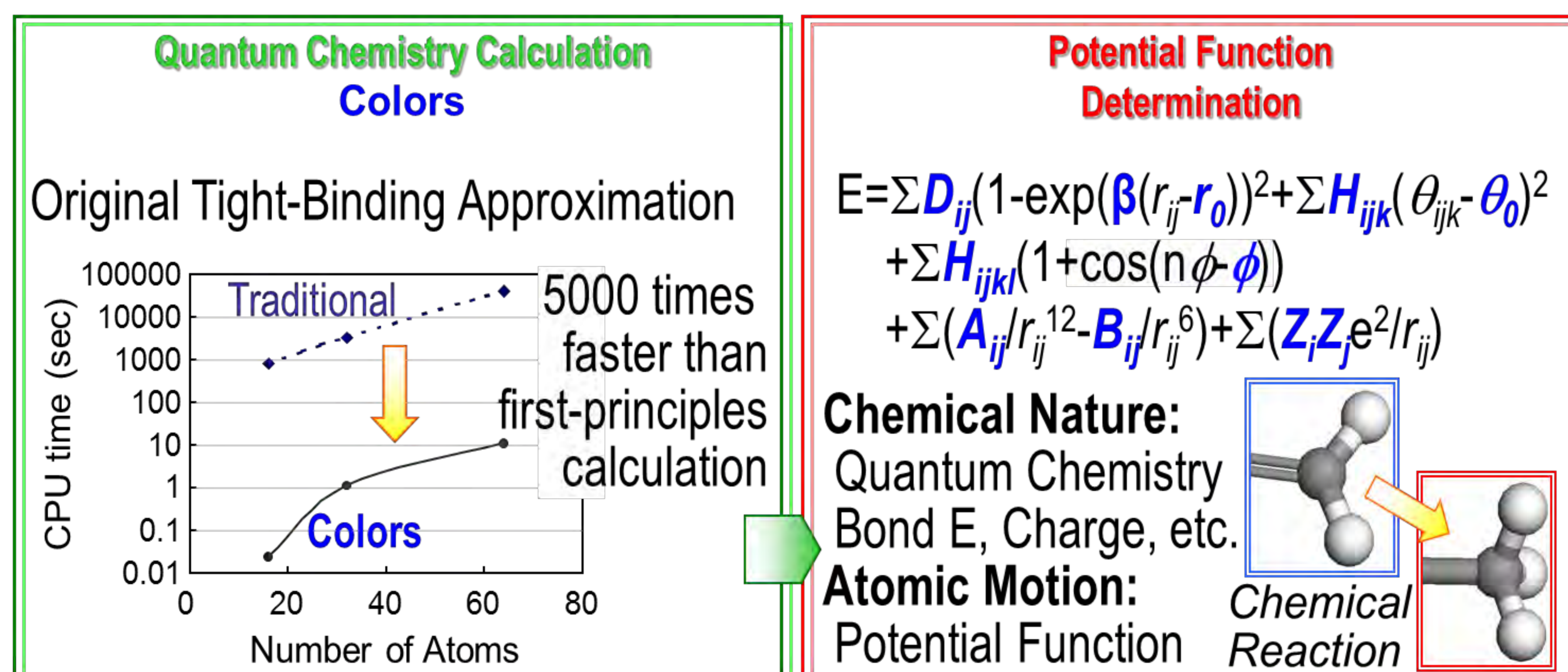
○:有効なシミュレータとなっている △:出来てはいるが課題多い ×:出来ていない
CAE(Computer Aided Engineering): 有限要素法、数値流体力学など

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り
国際的な独自性、優位性、競争力をもつ
それを本SIPプロジェクトへの貢献に繋げる

超高速化量子分子動力学法: 1,000万倍の高速性と高精度計算手法

New Scheme based on Tight-Binding Quantum Chemistry Method

Binding energy calculated by Colors(E_{color}) vs that by DFT(E_{DFT}) or thermodynamic data(E_{thermo})



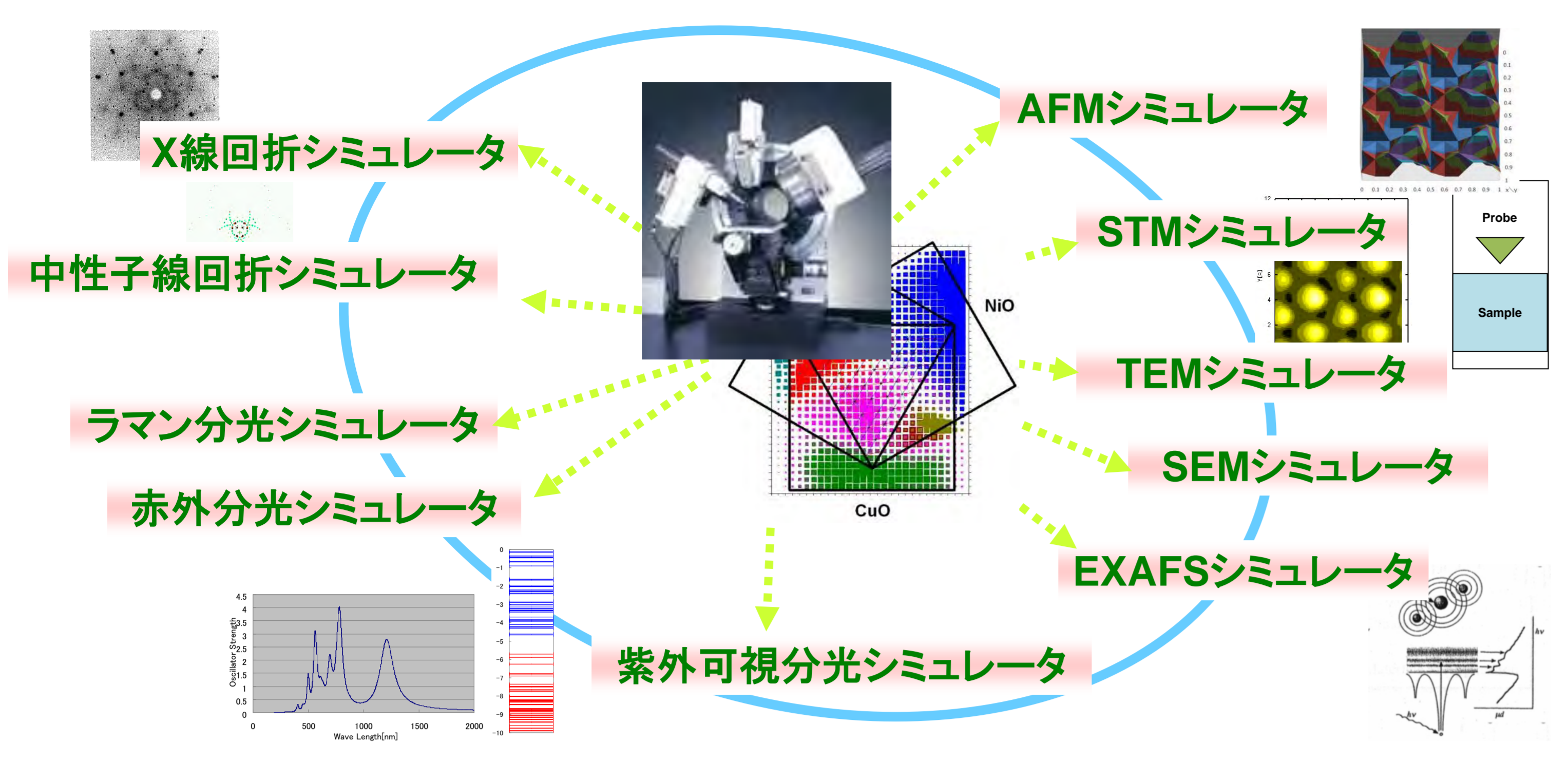
Colors results agree with DFT results and thermodynamic data quantitatively for various compounds

Time Evolution (Quantum Chemistry-based Molecular Dynamics)
10,000,000 Times Acceleration Compared with First-Principles MD

M.K. Alam et al, J. Phys. Chem. C113 7723 (2009); F. Ahmed et al., J. Phys. Chem. C113 15672 (2009)

平成27年度目標（方法論）：既開発マイクロ・メソ・マクロシミュレータをガソリン燃焼チーム、制御チーム、ディーゼル燃焼チーム、低減損失チームとの連携のためにシームレスにチューニング

各種計測シミュレータにより実験と計算化学を融合



- メソ固体構造モデリングソフト
- メソ固体表面構造モデリングソフト
- メソ粒子成長シミュレータ
- メソ熱伝導シミュレータ
- メソ電気伝導度シミュレータ
- メソ粒子凝集シミュレータ
- メソ可視化ソフトウェア

- マイクロモデリングソフト
- 第一原理計算ソフト
- 第一原理分子動力学法
- 超高速化量子分子動力学法
- 古典分子動力学法
- 反応表現分子動力学法
- グランドカノニカルモンテカルロ法
- マイクロ熱伝導度シミュレータ
- マイクロ電気伝導度シミュレータ
- マイクロ可視化ソフトウェア

- axisuite (Exothermia)
- FORTE (Reaction Design)
- AVL FIRE、AVL EXCITE、CRUISE (AVL)
- CATIA、SolidWorks+Flow Simulation、ABAQUS (Dassult Systems)

「本物」の原子・分子構造を描き出す本物シミュレーションの実現

制御チーム、ディーゼル燃焼チームとの連携例：秋濱一弘先生 橋本 淳先生

サブモデル群と連携案の位置づけ

連携の成果：スス成長のモデリング

超高速化量子分子動力学計算結果

2次粒子の生成をメソ粒子挙動シミュレーションソフトにて解析

凝集確率 10%

凝集確率 100%

初期 → 最終

1次粒子径分布、濃度、凝集確率の変化による多様な2次粒子が形成

物理吸着炭化水素は種々の反応プロセスを経て、PM粒子間の化学結合を形成

Grand Canonical Monte Carlo法 (MONTA) によるPMへの種々のガス成分の吸着挙動計算

C₆H₁₄吸着 600K/101.3kPa H₂O吸着 600K/101.3kPa C₁₄H₃₀吸着 600K/101.3kPa

分子量の比較的大きな炭化水素類がPM粒子の表面、間隙に高温でも物理吸着してPM粒子の凝集を進める

ガソリン燃焼チームとの連携例：(1) 森吉先生 窪山先生 (2) 芳松先生、石原先生

(1) 森吉泰生先生、窪山達也先生

Study of Low-Speed Pre-Ignition in Boosted Spark Ignition Engine
Y. Okada et al. (Toyota, Nippon Soken and DENSO) SAE 2014-01-1218

Deposits formed by cylinder liner wall wetting: These deposits accumulate at the bore top and around the piston crevice in a relatively short time.

Deposits formed at low engine operation loads: These deposits accumulate at many locations in the combustion chamber over relatively long periods of time.

燃焼室壁面から剥がれたデポジットがブレイクニッションの一因となると結論

	分解温度: 886°C	CaCO ₃	CaO	Ca(OH) ₂
1分子				
粒径1nm	CaCO ₃ 13分子	CaO 14分子	Ca(OH) ₂ 15分子	
粒径2nm	CaCO ₃ 69分子	CaO 146分子	Ca(OH) ₂ 85分子	

CaO + CO₂ → CaCO₃ CaO + H₂O → Ca(OH)₂
発熱(179 kJ/mol) 発熱(65 kJ/mol)

(2) 芳松克則先生、石原 卓先生

分子動力学を応用し、燃焼室壁面における化学種の吸着モデル計算 革新的な燃焼研究として、燃焼室壁面近傍における乱流予混合火炎の構造、壁面とのインターラクション(反応、熱、流動)の影響を明確化

最終目標：火炎から燃焼室壁面への熱伝達量推計手法の開発

低減損失チームとの連携例：マイクロ・メソ・マクロトライボロジーシミュレータ：三原先生、久保先生、八木先生他

Basic Equation Currently Used in the Simulation

The basic equation of elastic deformation

$$\sigma = E \cdot \epsilon$$

The formula of frictional force

The basic equation of boundary friction (The boundary film model of Bowden and others)

$$F = A \{ \alpha s_m + (1 - \alpha) s_t \}$$

A: Load burden area
 α : The rate which touches directly
 s_m : Shearing strength of metal and metal
 s_t : Shearing strength of a boundary film

The basic equation of fluid friction

$$F = \eta \cdot U \cdot A / h_0$$

η : Coefficient of viscosity
 U: Sliding velocity
 h_0 : Average film thickness
 A: Area of a friction surface

The difference in boundary lubrication is expressed.

About Stearic Acid Film and Boundary Friction

Coefficient of friction = (Fluid friction + Boundary friction) / Load

Only PAO: μ (PAO) > μ (PAO+1%Stearic acid)

Fluid friction (PAO) \approx Fluid friction (PAO+1%Stearic acid)

Boundary friction (PAO) > Boundary friction (PAO+1%Stearic acid)

MODEL2