

Title	粒子法による大規模摩擦焼付きシミュレーション
Author(s)	杉村, 奈都子
Citation	サイバーメディアHPCジャーナル. 2024, 14, p. 103-108
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/96536
rights	
Note	

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

Osaka University

粒子法による大規模摩擦焼付きシミュレーション

杉村 奈都子

鹿児島工業高等専門学校 機械工学科

1. はじめに

摩擦で生じる深刻な摩耗や焼付きをどうすれば回避できるのか、という工学上の切実な問いに答えるために、摩擦部材の材質、界面性状、外場、摩擦被膜の生成能と安定性に着目して、さまざまなスケールの試験による焼付き機構の探索がなされている。たとえばマイクロ～ミリメートルスケールのピンオンディスク試験によって、塑性流動、移着、発熱の繰り返しが焼付きの前段であることが、明確に指摘された[1]。これにヒントを得て我々は、マイクロメートルスケールというマクロとミクロの中間の系に着目し、連続体（マクロ視点）としての弾塑性変形と、ナノミクロ相互作用（ミクロ視点）から繰り込んだ界面相互作用を構成式の基本に据えた、Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法による大規模並列化メソスケール焼付きシミュレーションモデルを構築した[2]。これは、摩擦の種々仮定理論を置かず、摩擦の根源であるマルチスケールなエネルギー散逸機構を表現し得るモデルという点で、他モデルと一線を画すものである。また、粒子法には界面の大変形表現とマルチスケールなポテンシャル繰り込みが容易であるというメリットや、大規模多粒子間相互作用シミュレーションのためのコード並列化フレームワーク FDPS[3]をコーディングに利用できるという利便性がある。このモデルの基本コードに対しては、定常摩擦を対象としてスティックスリップ現象[4]、分子動力学法に基づいたせん断界面分子間相互作用の同定とその粒子間相互作用への繰り込みによる酸化被膜摩擦低減効果 [5]などを再現した。また、せん断方向と荷重負荷方向の解像度を大幅に変えて広範なせん断面を表現するための非等方モデルも揃えた[6]。その結果、本題の境界潤滑摩擦焼

付きシミュレーションにおいて、発熱と塑性流動と凝着の進展が並行して進む様子を再現できるようになった[7]。これらの改良を経て、高解像度、高荷重負荷（鉛直方向のシステム厚みが必要）、長時間の計算のために、本格的に HPCI の利用を開始した[8]。これにより、低弾性の軟質状態を仮定した場合、凸凹の衝突に端を発してせん断面周辺で塑性流動と摩耗と発熱が繰り返され、凸凹の凝着がせん断面全体に一気に広がる様子が再現された[9, 10]。そこで今回、実際の金属材料を対象として、本焼付きモデルにおいて以下を明らかにする研究を行った。

①摩擦部材の表面性状（凸凹サイズ）と構成元素の違いによるせん断時のフラッシュ（閃光）温度と温度分布の特徴 ②弾性接触問題の計算精度の精査

なお、金属摩擦によって生じる固体間摩擦凝着の要因や機序については議論がなされて久しいが[11]、本件では界面相互作用、塑性流動、発熱のスキームを備えることにより、結果的に界面間溶解あるいは界面間結晶成長などみなせる事象が生じることとなる。

2. 方法および結果

SPH 法は、連続体を粒子の集合体とみなして離散化し、連続体の挙動を粒子の Lagrange 的な運動により表現する、粒子法の代表的な一手法である。本件でも、せん断固体の運動方程式とエネルギーの方程式（熱伝導、発熱）を、SPH 粒子に関する各方程式として離散化して計算する。せん断界面については、界面分子間のミクロ相互作用を界面上の SPH 粒子間相互作用に繰り込む粗視化を行うが、今回は界面分子間ポテンシャルを Lennard-Johns ポテンシャルで近似し、そのサイ

ズスケーリングがほぼ成り立つことを Monte Carlo シミュレーションにより確認ののち、SPH 粒子間相互作用と置いた。なお、②の弾性接触シミュレーションでは界面相互作用を0とした。

① 表面性状 (凸凹サイズ)、構成元素とフラッシュ温度 [12]

焼付きは多くの場合、急激な温度上昇を伴う。そのため今回、フラッシュ温度 (摩擦時に瞬間的に計測される高温)、すなわち、摩擦面で計測される時々刻々の最高温度に着目をした。

界面に、円錐形凸凹を規則的に同数だけ配した $3\mu\text{m} \times 3\mu\text{m} \times$ 高さ約 $1\mu\text{m}$ 立方の弾塑性固体を用意し、向かい合わせて荷重下における摺動試験を行った。円錐高さを固定し円錐傾斜角を変えて ($R_z : 0.170\mu\text{m}$, $R_a : 0.0125\mu\text{m}$ (小), $0.0567\mu\text{m}$ (大) / 円錐傾斜角逆数に比例) 接触開始から数ナノ秒の間の温度上昇を比較した。ただし、界面反応エネルギーに加え、塑性変形時にひずみエネルギーの9割が熱として解放されると仮定している [13]。また、解像度については粒子直径 $0.033\mu\text{m}$ 、総粒子数はそれぞれ R_a (小) 424240, R_a (大) 463792 である。

固体を純アルミニウム (Al) とし摺動速度を $50 \sim 210\text{m/s}$ と増加させると、円錐傾斜角が緩く接触断面積の大きいもの (R_a (大)) でより温度が上昇する傾向があり、また、摺動速度の増加とフラッシュ温度の上昇には正の相関が見られた。温度や応力の増大域も、円錐傾斜角が緩く接触断面積の大きいもの (R_a (大)) でより大きくなった (Fig. 1)。

Alに加え、純ニッケル(Ni)、純鉄 (Fe) についても同様にシミュレーションを実施した。その結果、Ni、Feにおいても摺動速度の増加とフラッシュ温度の上昇の間に傾向として正の相関が確認されたが、Alとは異なり、フラッシュ温度の激しい上下動が観測された。また、とりわけ円錐傾斜角が緩く接触断面積の大きいもの (R_a (大)) の場合に $\text{Al} < \text{Fe} < \text{Ni}$ とフラッシュ温度が大きく増大した (Fig. 2)。

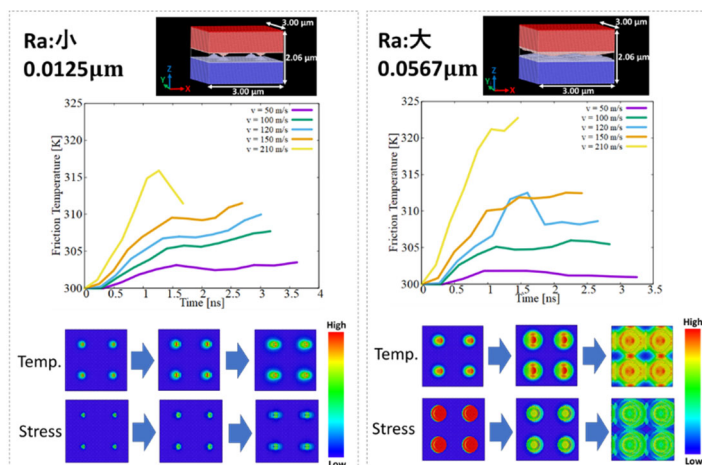


Fig.1 グラフは R_a (小)、 R_a (大)における各摺動速度での Al フラッシュ温度の時間変化。下は摺動速度 150m/s における摺動面の温度分布ならびに相当応力分布の時間変化。

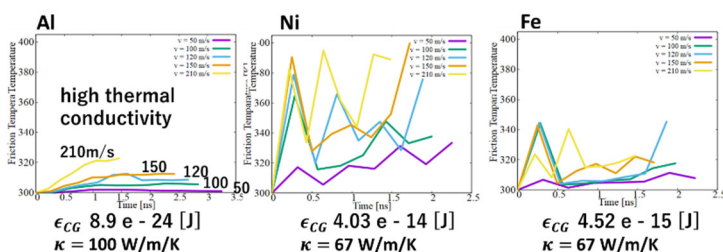


Fig.2 R_a (大)における各摺動速度での Al, Ni, Feのフラッシュ温度の時間変化。Alについては Fig. 1の左図と重複。

② 弾性接触問題の計算精度 [14]

本メソスケール焼付きシミュレーションモデルはマルチスケール化を見据えている。そのため、マクロスケールの運動を表す弾塑性スキームの計算精度評価は重要である。小荷重における数百 μm スケールのヘルツ弾性接触試験は、解析シミュレーションでは解を得やすいが、時々刻々のシミュレーションでは接触点の嵌入や計算収束までの膨大な計算時間など、難しさが指摘されている。今回、本モデルにおいて解析解の再現性について、その精度評価に着手した。

半径 $225\mu\text{m}$ の純鉄 (Fe) 半球を $585\mu\text{m} \times 585\mu\text{m} \times$ 高さ $287\mu\text{m}$ の純鉄 (Fe) 直方体直上に配置し、半球上面1層の粒子に定荷重 ($6.1e - 8 \sim 3.0e - 4\text{N}$) を負荷する弾性接触試験を行った (Fig. 3)。解像度については粒子直径 $5.62\mu\text{m}$ 、総粒子数 702631 (半球 129331, 直方体 573300) である。垂直応力、相当応力の時間経過を観察すると、負荷荷重が増すほど接触圧力は増し、どの

負荷荷重においても、接触部では圧縮が進んで相当応力が増大し、しばらくするとそれが緩むという応力の振動が観測され (Fig. 4)、その振動数は荷重の大きさに関わらず約1MHzであった。接触点直下領域 (24 μm \times 24 μm \times 高さ 33 μm) の平均垂直応力、平均接近量に着目すれば、負荷荷重 3.0e-4N の場合、その垂直応力の大きさは 197.8MPa であり、接近量は 123.9nm となった。

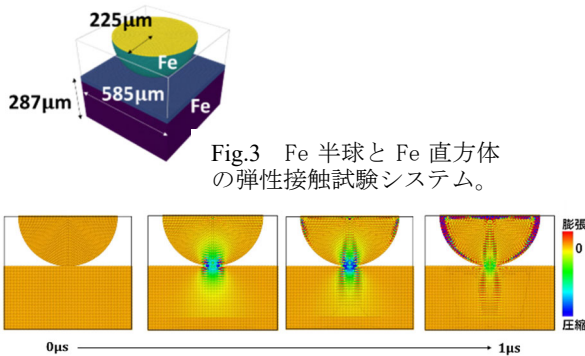


Fig.3 Fe 半球と Fe 直方体の弾性接触試験システム。

Fig.4 荷重負荷試験 (4.2e-7N) における垂直応力 σ_{zz} の、接触点を含む断面における時間変化。荷重を変えてもその値以外、様子は変わらない。

3. 考察

① 表面性状 (凸凹サイズ)、構成元素とフラッシュ温度 に関して

フラッシュ温度 θ に関しては、次の式 (1) が提唱されている [15]。

$$\theta = \alpha \frac{Q}{\pi r \kappa} e^{-P_e} [I_0(P_e) + I_1(P_e)] \quad (1)$$

ここで Q 発熱量, r 真実接触面積半径, κ 熱伝導度, I_n 第一種変形ベッセル関数, P_e ペクレ数, α 熱分配率である。これは、マクロの摩擦試験でフラッシュ温度が想像以上に高温になる現象を、真実接触面積がせん断面積よりもはるかに小さいことで説明する根拠となっている。このとき、発熱量 Q は摩擦係数と pv (p 圧力 v 摺動速度) の積とされた。一方で、ミクロの観点からこの発熱量 Q に着目すれば、これは界面のエネルギー流速 q に真実接触面積 πr^2 を掛けたものと定義でき、結果的に式 (1) は式 (2) と表現できる。

$$\theta = \alpha \frac{qr}{\kappa} e^{-P_e} [I_0(P_e) + I_1(P_e)] \quad (2)$$

ここで、界面のエネルギー流速 q は単位面積あたりの界面相互作用力 q' と摺動速度 v の積であり、本シミュレーションではこの q' が界面の SPH 粒子間相互作用力 f に比例する。そのため式 (2) は式 (3) と表現される。

$$\theta \propto \frac{fvr}{\kappa} \quad (3)$$

以上から、Ra (小) に比べて Ra (大) でより温度が上昇すること (r に着目)、摺動速度 (v) の増加とフラッシュ温度の上昇の間に正の相関が見られることは、この理論式で説明できる現象といえる。また、発熱温度が Al に比べて Fe, Ni で上昇することも、熱伝導度 κ が Al に比べて Fe, Ni で低いことにより、上式を用いて説明できる。また、界面の SPH 粒子間に設定した Lennard-Jones 型ポテンシャルの深さ (f の係数) が Al << Fe < Ni (Al: 8.90e-24J, Fe: 4.52e-15J, Ni: 4.03e-14J) であることから、フラッシュ温度の上昇のグラフ形状が Al と Fe, Ni で異なること、温度が Fe < Ni であることは、上式より類推ないし説明ができる。

ただし、Fe, Ni で見られる温度の上下動には、用いた界面相互作用力の斥力項が大きく寄与していると見られ、界面の形状変化を含めて更なる検証が必要であると考えている。また、定量的な比較についても、現在検討を進めているところである。

② 弾性接触問題の計算精度に関して

結果を解析解と並べて Fig. 5 ならびに Table 1 にまとめる。負荷荷重 3.0e-4N で観測された垂直応力の大きさ 197.8MHz は、Hertz の接触理論による最大接触圧力と平均接触圧力の中間値 (204.7MHz) に近い値であるとみなすことができる。また、応力や接近量の振動数は負荷荷重に依存せず 1MHz 程度であり、このことから、この振動は計算手法により人為的に生じたものではなく固有振動であるとみなすことができる。そこ

で解析的に直方体の固有振動数(支持一支持弾性梁り曲げと仮定)を求めると、その値は1.95 MHzとなる。これはシミュレーションの結果の2倍弱であるが、オーダーレベルでは一致している。

一方で、接近量についてはHertzの接触理論解2.59nmより2オーダー大きく、これについては現在検討を進めている。ちなみに、接触部における粒子嵌入を回避する目的でXSPH法を採用したが、段階的荷重荷試験(ステップロード試験)においてXSPH法では通常のSPH法よりも大きな接近量を示す傾向が確認された。

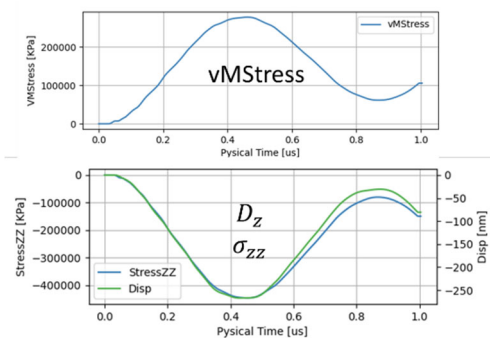


Fig.5 荷重荷試験(3.0e-4N)における接触点直下の von Mises 相当応力(上)、接近量 Dz(下,黄緑)、垂直応力 σ_{zz} (下,青)の時間変化。

Table 1 Fig.5 をフーリエ変換して求めた振動数、応力、接近量。

定負荷荷重 3.0e-4N	D_z	σ_{zz}	vM Stress	Contact Theory of Hertz	Natural frequency
Frequency	0.99 MHz	0.99 MHz	0.95 MHz		1.95 MHz
Max. Amp. of Stress		197.8M Pa	119.3 MPa	245.7 MPa(max.) 163.8 MPa(ave.)	
Max. Amp. of Dz	123.9 nm			2.59 nm	

4. SQUID 資源の利用状況

今回、計算にはSQUIDの汎用CPUノード群を用いた。並列計算は、OpenMPによるスレッド並列とMPI並列のハイブリッド並列とした。具体的には、1ノード76コアを4プロセス(19スレッド並列)として、19ノードあるいは76ノードを用いて、ジョブ時間24時間~72時間の計算実施を基本とした。長時間の計算が必要な場合には、リスタートを繰り返して対応した。100ノードを超える並列計算は通常、ジョブ実行までの待ち時間が長くなることから、比較的空いている時期に実施した。なお、4プロセスで実行する場合、76コアをフル

に用いた19スレッド並列とするか、OS処理分の余裕を勘案して72コアを用いた18スレッドとするかについてテスト計算を行ったが、19スレッド並列の方が計算にかかる時間が少なくて済むことを確認し、これより76コアをフルに用いてスレッド並列することとした(Fig.6)。

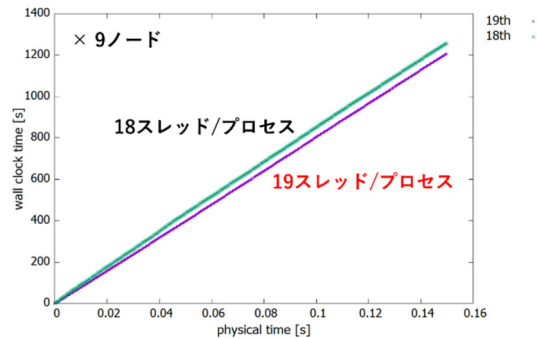


Fig.6 プロセスあたりのスレッド数比較。19スレッドの場合の方がグラフの傾きが小さく、処理が速いことがわかる。

5. まとめ

Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法による大規模並列化メソスケール焼付きシミュレーションモデルを構築し、これまでに焼付きの進展に関わる塑性流動、発熱、凝着の同時並行的な進展を、極軟質な材料を仮定してシミュレーションで再現することに成功していた。本年度はこのモデルを実金属材料に対して適用し、以下を明らかにする研究を行った。

①表面性状(凸凹サイズ)と構成元素の違い(Al, Fe, Ni)によるせん断時のフラッシュ(閃光)温度と温度分布の特徴

②弾性接触問題の計算精度の精査

①では接触面積が小さい Ra(小)と大きい Ra(大)について結果を比較した。摺動速度の増加とフラッシュ温度の上昇には正の相関が見られ、Ra(小)に比べて Ra(大)ではより温度が上昇する傾向があった。これらの現象は、フラッシュ温度について提唱される理論式から説明することができる。また、Ra(大)の場合に Al<Fe<Ni とフラッシュ温度が大きく増大した。一方、Alとは異なり、Fe, Ni ではフラッシュ温度の激しい上下動が観測された。発熱温度が Al に比べて Fe, Ni

で上昇することは、熱伝導度 κ の大小により理論式で説明ができる。界面相互作用力の大きさが $Al < Fe < Ni$ であることから、Al と Fe, Ni で温度上昇の時間変化の傾向が異なること、温度が $Fe < Ni$ であることも説明できる。ただし、定量的な議論については更なる検証が必要である。

②について、Fe 半球を Fe 直方体に微小荷重で押し付ける弾性接触試験を実施した。時々刻々のシミュレーションでは接触点の嵌入や計算収束までの膨大な計算時間など、難しさが指摘される試験である。さらに、①に対して解像度、スケールともに 100 倍程度大きく、マクロスケールスキームの精度評価を目的としている。垂直応力、相当応力の時間経過を観察すると、負荷荷重が増すほど接触圧力は増し、また、どの負荷荷重であっても接触部での応力の振動数はほぼ一定であった。この振動数を弾性曲げの固有振動数と比較すると、オーダーレベルでの一致が確認された。また、接触点直下の垂直応力は Hertz の接触理論に基づく解析値にほぼ一致した。ただし、接近量は過大評価であり、これについては XSPH 法の利用によるとも考えられるが、検証を進めている。

今回の実金属材料による試験は、本大規模並列化メソスケール焼付きシミュレーションモデルの開発において、マルチスケール化を目指す上で重要な位置を占めている (Fig. 7)。この実現は、SQUID の利用なくしては叶わなかった。

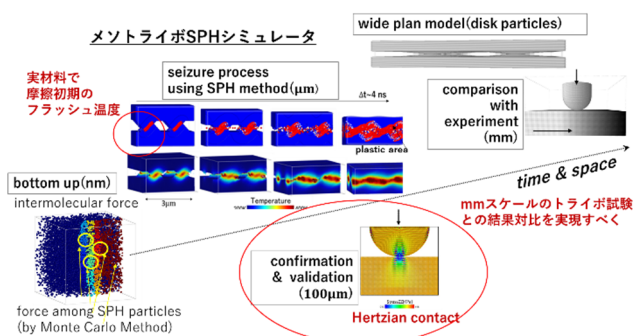


Fig.7 本メソスケール焼付きモデルの完成イメージ

謝辞

本研究の実施に際し、SQUID を利用させていただきましたことに深謝いたします。

参考文献

- (1) Y. Matsuzaki, K. Yagi, J. Sugimura, *Wear*, 386-387, 165 (2017)
- (2) 科研費 基盤研究 (C) 「境界潤滑摩擦の摩擦発熱焼き付き機構解明を目指したメソスケール計算モデルの開発」 杉村奈都子, 杉村剛 (20K04245)
<https://kaken.nii.ac.jp/ja/file/KAKENHI-PROJECT-20K04245/20K04245seika.pdf> (2020~2022)
- (3) M. Iwasawa, A. Tanikawa, N. Hosono, K. Nitadori, T. Muranushi, J. Makino, *PASJ*, 68, 54-1 (2016)
- (4) L.V. Sang, A. Yano, S. Fujii, N. Sugimura, H. Washizu, *EPL*, 122, 26004 (2018)
- (5) L.V. Sang, A. Yano, A. Isohashi, N. Sugimura, H. Washizu, *Tribol. Int.*, 135, 296 (2019)
- (6) Natsuko N Sugimura, Le Van Sang, Yuji Mihara, Hitoshi Washizu; Development of the simulation model about dry asperity friction and wear by SPH method with disk-like particles, *International Tribology Conference Sendai 2019 (ITC Sendai 2019)*, 19-H-6 (2019)
- (7) N. Sugimura, L.V. Sang, Y. Mihara, H. Washizu, *J Comput Sci*, submitted
- (8) 富岳・一般課題「メソスケールの境界潤滑摩擦における実界面性状焼付きシミュレーションモデルの開発とその高速化」hp210071 (hp200214 継続) 杉村奈都子, 鷲津仁志, 三原雄司 (2021)
- (9) 杉村奈都子, Le Van Sang, 三原雄司, 鷲津仁志, *トライボロジー会議 2021 秋 松江 予稿集 162_L0101.pdf* (2021)
- (10) N. Sugimura, Y. Mihara, H. Washizu; 2022 JSME-IIP/ASME-ISPS Joint International Conference on Micromechatronics for Information and Precision Equipment (MIPE2022), C1-4-02 (2022)
- (11) A.M. Kovalchenko, P.J. Blaub, J. Qub, S. Danylyuk, *Wear* 271, 2998-3006 (2011)

- (12) M.Era, N.Sugimura, Hitoshi Washizu, 9th International Tribology Conference (ITC), Fukuoka 2023, 28-PO-29 (2023)
- (13) P. Ulysse, International Journal of Machine Tools & Manufacture 42, 1549-1557 (2002)
- (14) N.Sugimura,M.Era,R.Tsuda,K.Nitta,Y.Mihara,H .Washizu, 9th International Tribology Conference (ITC), Fukuoka 2023,28-J-05 (2023)
- (15) 山本雄二, Journal of Japan Society of Lubrication Engineers, 27, pp789-793 (1982)