

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						

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

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

The University of Osaka

## 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耗凝着 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 溶融あるいは界面間結晶成長などとみなせる事 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 3µm×3µm×高さ約1µm 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 (Rz:0.170µm, Ra:0.0125µm(小),0.0567µm (大)/円錐傾斜角逆数に比例)接触開始から数 ナノセカンド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 0.033µm、総粒子数はそれぞれ Ra(小) 424240, Ra(大)463792 である。

固体を純アルミニウム(A1)とし摺動速度を 50~210m/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(Ra(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(Ra(大))でより大きくなっ た(Fig.1)。

A1 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、A1 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(Ra(大))の 場合に A1<Fe<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 Ra(小)、Ra(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 Ra(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 225µm の純鉄(Fe)半球を 585µm× 585µm×高さ287µm 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-8~3.0e-4N)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5.62µm, 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(24μm×24μm×高さ33μm)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.4 荷重負荷試験(4.2e-7N)における垂直応力σzz 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**0**に関しては、次の式(1)が提唱 されている[15]。

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

ここでQ発熱量, r真実接触面積半径,  $\kappa$ 熱伝導 度,  $I_n$ 第一種変形ベッセル関数,  $P_e$ ペクレ数,  $\alpha$ 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 $\pi r^2$ 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。

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

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)とも表現される。

$$\theta \propto \frac{fvr}{\kappa}$$
 (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A1に比べて Fe,Ni で上 昇することも、熱伝導度 $\kappa$ がA1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 A1<<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。

#### 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 Table1 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、段階的荷重負荷試験(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** 荷重負荷試験(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*<sub>zz</sub>(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	Dz	$\sigma_{zz}$	vM Stress	Contact Theory of Hertz	Natural frequency
Frequency	<u>0.99</u> MHz	<u>0.99</u> MHz	0.95 MHz		<mark>1.95</mark> MHz
Max. Amp. of Stress		<u>197.8</u> M Pa	119.3 MPa	245.7 MPa(max.) 163.8 MPa(ave.)	
Max. Amp. of Dz	<u>123.9</u> 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、0S 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
 (A1, 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

- 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
   耗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)
- 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(ITCSendai2019),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. Kovalchenkoa, P.J. Blaub, J. Qub, S. Danyluka, 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)