

機械摩擦の摩耗焼付き機構解明に資する マルチスケールモデルの開発

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

脱炭素・ゼロエミッション社会に向けて、機械工学の分野においてはエネルギーロスの低減、すなわち機械を効率的に動かす（高効率化の）ための摩擦損失の低減が強く求められる。たとえばその一策である潤滑油の低粘度化は粘性由来の摩擦を下げると同時に、摩擦固体表面の耐焼付き性能の向上が欠かせない。しかしながら、焼付きあるいは焼付きを回避する条件を求めるために必要な「焼付きが生じる過程」については、不明確な点が多い。そこで我々はこの焼付き機構を解明する目的で、Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) 法による大規模並列化トライボシミュレータを構築し、開発を進めている[1,2]。

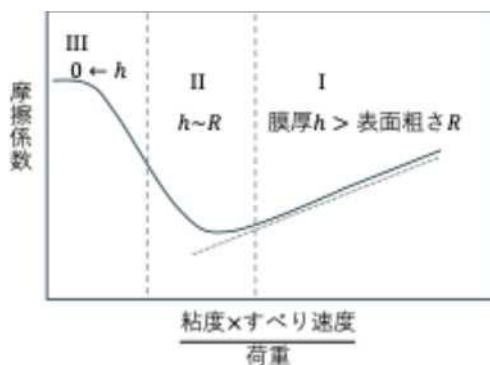


図1 ストライベック曲線。

摩擦固体界面の表面粗さ R よりも大きい油膜厚さ h （摩擦固体間隙）が維持される間は、粘性が下がると摩擦係数も下がる（I 流体潤滑領域）。しかしさらに粘性が下がると維持される油膜厚さが表面粗さ程度となり、固体接触が始まるために摩擦係数が急激に上昇する（II 混合領域）。本報告ではさらに進んで固体間摩擦が主となる III の境界潤滑領域を対象とする。

本計算モデルは、連続体としての弾塑性変形（"マクロ視点"）と、ナノクロ相互作用を繰り返した界面相互作用（"ミクロ視点"）を併存させており、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効率的に計算できることが特徴である。大規模多粒子間相互作用計算のための並列化には FDPS[3]を利用している。

本シミュレータはその開発過程において、定常摩擦におけるスティックスリップ現象[4]、酸化被膜摩擦低減効果 [5]、境界潤滑摩擦における塑性流動と発熱の進展過程 [2]の議論に用いられた。また、HPCI の利用開始により、凸凹の衝突を皮切りに界面で摩耗、塑性流動、発熱が繰り返され、やがて凸凹の高温発熱がせん断面全体に一気に広がるシミュレーションが可能となった [2]。これは焼付き直前を想定して極度に柔らかい（3 桁ほどヤング率の低い）物質での仮想的なシミュレーションであったが、並行して実金属材料によるフラッシュ（閃光）温度の起源と温度分布の解析を開始した。たとえば昨年度は剪断部材 Al, Fe, Ni に対して表面性状

（接触界面に均等に 4 つ配した凸凹の R_a サイズ）と剪断速度を変えてシミュレーションした結果、①摺動速度の増加とフラッシュ温度の上昇の正の相関② R_a （小）に比べて R_a （大）ではさらに温度が上昇傾向③Al<Fe<Ni とフラッシュ温度が大きく増大し、Al と Fe, Ni では時間変化に差異のあること を報告した。①②は理論的に説明ができ、③については熱伝導度 κ の大小

（Al>>Fe, Ni）、界面相互作用力の大小

（Al<<Fe<Ni）である程度説明ができる。加えて別途、微小荷重による弾性接触シミュレーシ

ョンを実施し接触圧力と接近量を求めた結果、接近量は過大評価であったものの、接触圧力は Hertz の接触理論に基づく解析値にほぼ一致し、その応力の振動数は接触振動数にオーダーレベルで一致した[1]。

以上を踏まえて今年度は、(1)Al ならびに Ti についてさらに複雑な表面パターンを用いて接触剪断発熱と応力分布の解析を行なった。加えて(2)一辺 10 マイクロメートルスケールの広域剪断面における実界面性状での摩擦計算を開始した。さらに(3)凸凹の弾性衝突を経てなお複数回の摩擦と凝着を実現するシミュレーションを実現した。この(1)-(3)により、さらに焼付きモデルとして本シミュレータによって議論できる摩擦事象の充実を図った。

2. SPH 法と SQUID での計算資源

SPH 法は、粒子の集合体として連続体を離散化し、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。粒子法では重み関数を用いて周囲の粒子との連続性を担保するのが一般的な方法であり、今回は B スプライン関数を用いた。また、重み関数の及ぶ距離を半径にして 2.5 粒子直径分とした[6]。摩擦シミュレータに SPH 法を採用した理由として粗視化粒子としての機能を持たせやすいという内容が挙げられる。冒頭に"ミクロ視点"と表現したものであり、この原子分子からのボトムアップについては参考文献[7]を参照されたい。

計算は SQUID の汎用 CPU ノード群を用い、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。1 ノード 76 コアあたり 4 プロセス (19 スレッド) 並列での使用を基本として、混み具合を勘案して 19 ノードあるいは 38,76 ノードの並列計算を実施した。ジョブ時間は 24 時間~48 時間/回で、待ち時間は繁忙期以外、1 日以内であった。

なお、シミュレーションのインプットファイルとして剪断固体の初期配置を設定するが、こ

の初期配置の作成に SQUID を用いる際にはインタラクティブノードを活用した。

(1)-(3)のシステム設定と 24 時間ジョブで計算できる物理時間の目安を表 1 に示す。剪断速度が大きく接触速度が大きいほど、また、固体の弾性率が大きいほど、特性速度は大きくなり、Courant-Friedrichs-Lewy 条件を満たすには小さな積み時間が必要になる。そのため、同一時間内に計算できる物理時間は短くなる。なお、Al の高い熱伝導率による熱拡散速度に配慮して、CFL 数を 1/10000 のオーダーに設定している。

表 1 ヤング率、剪断速度と 24 時間ジョブにおける計算可能物理時間の関係。CFL 数 3×10^{-4} , 使用ノード数 19。

	粒子数	ヤング率	剪断速度 20m/s	剪断速度 50m/s	剪断速度 210m/s
[1]	48万	500GPa	5.5ns	4.5ns	
[2]	853万	6.9MPa			19ns
[3]	43万	69GPa		9ns	8ns

3. 結果

特に(1)-(2)について詳述する。

(1)Al, Ti による接触剪断摩擦発熱の解析

図 2 のように、剪断固体上部界面に対して下部界面を、接触面積が異なるように 4 領域に分けて異なる凸凹を配置して、接触状態からの発熱挙動と応力分布をシミュレーションした。

まず、剪断速度(20~210m/s)とフラッシュ温度の正の相関が Al, Ti について確認された[8]。さらに Al について、発熱は接触面積が大きい箇所から優位に始まり周辺部に広がるが(図 3 上段、波線囲部)、接触面積の小さい領域でも弾性から塑性への移行に伴い発熱が生じていることが見て取れる(図 3 下段)。

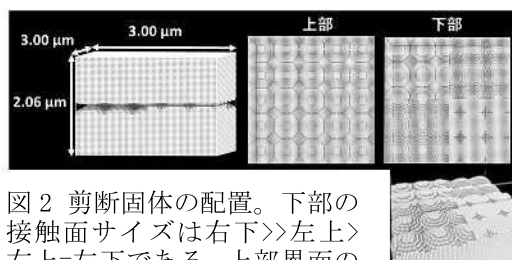


図2 剪断固体の配置。下部の接触面サイズは右下>>左上>右上=左下である。上部界面の接触面サイズは、下部右上ないし左下よりも小さい。

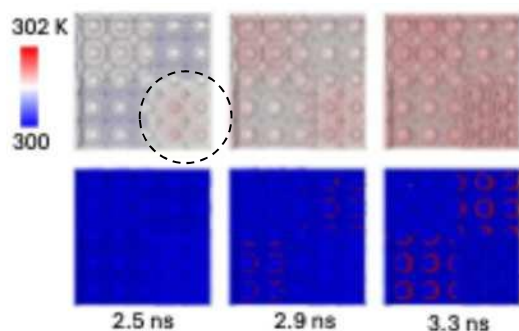


図3 界面温度分布(上段)と弾塑性分布(下段:青・弾性, 赤・塑性)の時間推移。

(2)広域実界面性状における摩擦摩耗シミュレーション

これまで、規則的なモデル凸凹界面を用いたシミュレーションによって、メソスケールでの凝着あるいは繰り返し摩耗の特性検出を模索してきた。その結果、剪断に対する摩擦応答力の時間履歴を変数とする所定の関数値が、初期接触部からの距離に応じて協同的に変動し続けることと、凝着が保持されずに接触と摩耗が繰り返されることには相関を見出せることが明らかとなった。しかし、界面性状が複雑な場合には、この関数値を凝着保持あるいは繰り返し摩耗の指標とすることは適さない。今年度、摩擦面方向に対して至極、凸凹高さの小さい実界面性状の特徴をそのまま単位 SPH 粒子形状に反映させた、高解像度な非等方性(長さ比 水平8:鉛直1)モデルを実用化した(図4)。このモデルにより、特性値として界面全体のエネルギー値に着目をして解析を進めた。

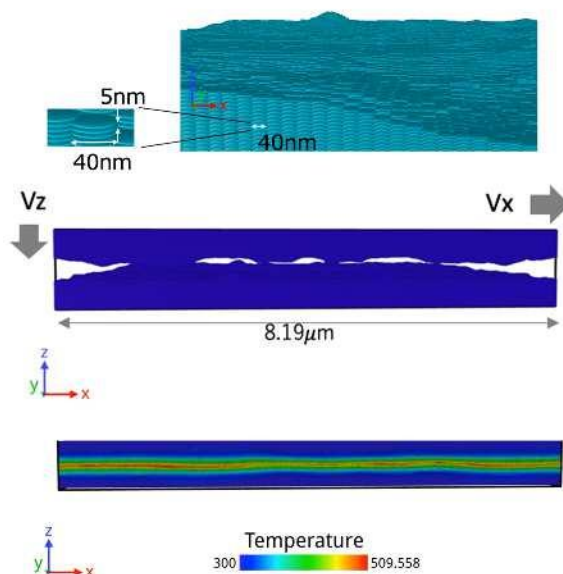


図4 非等粒子による実界面凸凹モデル。剪断方向 40nm, 荷重方向 5nm ディスク型粒子で実界面性状を表現。実界面データを1象限におき、システムの残り3象限に対象展開して周期境界条件を用いて計算。剪断が進むと界面全体が高温域となる(最下段)。

剪断と摩耗凝着の進行に伴い界面温度が上昇するが、この温度上昇に寄与するひずみエネルギーと界面反応エネルギーの時間変化に着目すると、剪断初期にはひずみエネルギーがまず優位に上昇し、摩耗の進行に従い界面反応エネルギーが優位に上昇することが確認された(図5)。これは等方性モデルによる凝着摩耗シミュレーションでも見られた傾向である。また、荷重が大きい場合には降伏するまでひずみエネルギー優位の状態が持続することも確認された(図6) [9]。

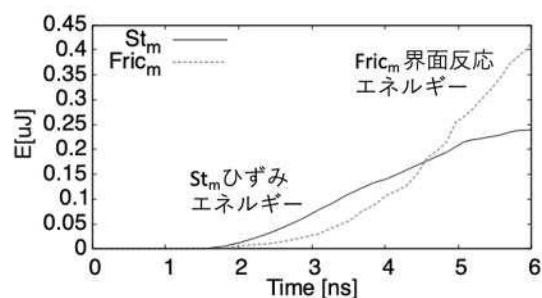


図5 ひずみエネルギー St_m と界面反応エネルギー $Fric_m$ の時間推移の典型例。

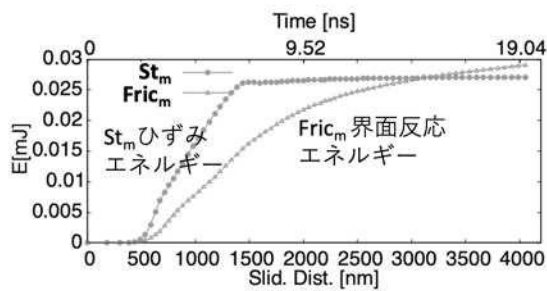


図 6 $v_z = 5v_x$ におけるひずみエネルギー St_m と界面反応エネルギー $Fric_m$ の時間推移。

4. 考察とまとめ

(1)のAl,Tiによる接触剪断試験では発熱の初期過程を詳しく議論した。また(2)の非等方モデルを用いた実界面性状による摩耗試験では凝着や摩耗の指標としてひずみエネルギーと界面反応エネルギーの時間推移に着目をして解析を進めた。こうした解析は、摩耗凝着ひいては焼付き低減を目指す界面改質において、界面の反応性と硬さ（界面修飾）をどのように制御すればよいか、という問題に対してヒントを与えるものと期待される。(3)については、スタガードに配した界面凸凹の剪断衝突シミュレーションにおいては、仮想的な柔素材で難なく接触凝着と摩耗の繰り返しの再現が計算される一方で、金属の実材料レベルのヤング率においては弾性衝突による剪断固体の反跳が、計算資源内での接触凝着と摩耗の繰り返しの再現を阻むという課題があった。今年度、2m/sでのモデル凸凹界面での剪断試験によってこの問題は解決されたが、剪断距離を稼ぐためにはCFL数を1/10オーダまで大きくする必要があり、熱拡散を正確に考慮して発熱温度を議論するには至らなかった。今後、物理時間を $\mu s, ms, s$ レベルへと伸ばして発熱凝着の過程を解析するには、複数のシミュレーションを組み合わせるなどの時間延長に関する特別な工夫が必要であると考えている。

参考文献

- (1) 杉村奈都子:粒子法による大規模摩擦焼付きシミュレーション,サイバーメディア

HPC ジャーナル,14 (2024)103

- (2) N.Sugimura,L.V.Sang,Y.Mihara,H.Washizu: Mesoscale smoothed particle hydrodynamics simulation of seizure and flash temperature for dry friction of elastoplastic solids in a newly developed model, J.Compt.Sci.,82(2024)102325
- (3) M. Iwasawa, A. Tanikawa, N. Hosono, K. Nitadori, T. Muranushi, J. Makino, PASJ, 68 (2016) 54-1
- (4) L.V. Sang, A.Yano, S.Fujii, N.Sugimura, H.Washizu, EPL,122 (2018) 26004
- (5) L.V.Sang, A.Yano, A. Isohashi, N.Sugimura, H.Washizu, Tribol. Int., 135(2019) 296
- (6) 酒井譲,山下彰彦:SPH 理論に基づく粒子法による構造解析の基礎的検討,日本機械学会論文集(A 編)67,659(2001)1093
- (7) 杉村奈都子: 粒子法による摩擦面の解析技術,月刊トライボロジー,6月号 (2025) 46
- (8) A.Fujita, N.Sugimura, H.Washizu: Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) Simulation to analyze the Frictional Heat Generation and Plastic Flow of Al and Ti (2025) submitted
- (9) 杉村奈都子,石原大嵩,藤田晃徳,杉村剛,三原雄司,鷺津仁志 :広域界面の凝着過程を対象とした大規模並列 SPH シミュレーション・2, トライボロジー会議 2024 秋名護 D54 (2024)