

# ミクロンスケールにおける金属の粗視化 SPH 摺動シミュレーション

## Sliding Simulation of Coarse-grained SPH method of Metals in Micron-scale

兵庫県・情報（院）\*新田 啓人 VNUHCM-UIT（非）Le Vang Snag 鹿児島高専・機械（正）杉村 奈都子

兵庫県（正）鷲津 仁志

Keito Nitta\*, Le Vang Sang\*\*, Natsuko Sugimura\*\*\*, Washizu Hitoshi

\*University of Hyogo, \*\*Ho Chi Minh City University of Information Technology,

\*\*\*NIT, Kagoshima College

### 1. はじめに

機械効率や機械寿命の向上および故障防止のため、摺動部で発生する摩擦の制御は重要な課題となっている。しかし、固体摩擦の詳細な発生プロセスは解明されておらず、摺動界面の実験による解析は計測方法の制約から困難である。一方で、近年のスーパーコンピュータの性能向上に伴い、シミュレーションによる解析が行われるようになり、分子動力学(MD)法や有限要素法による固体摩擦のシミュレーションが行われるようになったが、MD 法ではスケールの制約があり、有限要素法では大変系が扱いにくいなどの問題があり、それら手法の利用は限定的である。

そこで我々は粗視化粒子を用いた SPH(Smoothed Particle Hydrodynamics) 法によるミクロンスケール固体摩擦のシミュレーションを行う。SPH 法は連続体を粒子の集合とみなし、粒子の運動をラングランジュ的に計算することで連続体の運動を表す粒子法の 1 つである。SPH 法は流体の大変形問題の解析などに適用されてきたが、現在では固体問題、熱伝導問題などへの応用が広がり様々な分野で利用されている<sup>1)</sup>。また、粗視化粒子を用いることでナノスケールの効果を残しつつ、ミクロンスケールへ適用でき、自由度が大きく下がるため計算量も大きく下げることができる。本研究では Le Van Sang らの研究<sup>2,3)</sup>を参考に粗視化モデルを作成し、ミクロンスケールの弾性領域の固体摩擦を解析する。前回の研究では摺動界面を滑らかな平面でシミュレーションを行い、Stick-Slip 現象に着目した<sup>4)</sup>。今回の研究では摺動界面を粗くしたモデルでシミュレーションを行うため、粒子の粗視化度を小さくすることで、表面粗さの解像度を上げ、アスペリティが摩擦に及ぼす影響を調べる。

### 2. 計算手法

本研究では、Fig. 1 に示す、基板上をスライダがx方向正に摺動するモデルを使用する。スライダの摺動界面は滑らかなとサインカーブを描く粗い面の 2 つ場合を用意する。SPH 法における支配方程式は連続の式、運動方程式、エネルギー保存式が式(1)～(3)のように離散化された微分方程式で表される。スライダと基板の粒子はそれぞれ(1)～(3)式で計算され、摺動部では PT(Prandtl-Tomlinson)モデルより原子間力に由来するバネ力(式(4))と、スライダと基板間の相互作用を表面粒子の相互作用としたバネ力(式(5))を導入する。摩擦力はそれらの総和として計算される(式(6))。

$$\frac{d\rho_i}{dt} = \sum_{j=1}^N m_j (\vec{v}_j - \vec{v}_i) \vec{\nabla}_i W(\vec{r}_i - \vec{r}_j, h) \quad (1)$$

$$\vec{F}_{PT,i} = K(\vec{r}_{0,i} + \vec{V}t - \vec{r}_i) \quad (4)$$

$$\frac{dv_i^\alpha}{dt} = \sum_{j=1}^N m_j \left( \frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) \nabla_i^\beta W(\vec{r}_i - \vec{r}_j, h) \quad (2)$$

$$\vec{F}_{int,ij} = \begin{cases} -k_\alpha(r-h) \frac{\vec{r}_{ij}}{r} & 0 < r < h \\ 0 & r > h \end{cases} \quad (5)$$

$$\frac{du_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N m_j \left( \frac{\sigma_i^{\alpha\beta}}{\rho_i^2} + \frac{\sigma_j^{\alpha\beta}}{\rho_j^2} + \Pi_{ij} \right) (v_j^\alpha - v_i^\alpha) \nabla_i^\beta W(\vec{r}_i - \vec{r}_j, h) \quad (3)$$

$$F_{fri} = \sum_{i=1}^{N_f} (F_{PT,i}^x + F_{int,ij}^x) \quad (6)$$

ここで $m$ は質量、 $v$ は速度、 $\rho$ は密度、 $\alpha, \beta$ は $x, y, z$ 、 $\vec{r}_{i,j}$ は粒子 $i, j$ の位置ベクトル、 $W$ はカーネル関数、 $h$ は平滑化距離、 $\sigma^{\alpha\beta}$ は応力、 $\Pi_{ij}$ は人工粘性、 $\epsilon$ は歪み、 $K$ は PT モデルのばね定数、 $\vec{r}_{0,i}$ は初期位置からの距離、 $\vec{V}$ は摺動速度、 $k_\alpha$ は相互作用ばね定数、 $N_f$ は界面粒子の総数である。

粒子への粗視化は 2 つの過程で行われる。まず単位格子中の原子を、格子の中心に配置された、質量  $nm$  ( $n$ : 単位格子中の原子数、 $m$ : 原子量) の粒子に粗視化する。このように粗視化された粒子は単純立方格子上に並ぶ。次に、 $x, y, z$  方向に  $N$  個ずつ取った立方領域中の  $N^3$  個の粒子をさらに大きな粒子として粗視化する。本研究では、体心立方格子構造の鉄を直径  $0.285 \mu\text{m}$ 、質量  $0.834 \times 10^{-6} \mu\text{m}$  ( $n=2, m=55.845 \text{g/mol}, N=1000$ ) の粒子へと粗視化する。

基板:  $71.535 \times 10.26 \times 4.56 \mu\text{m}$ 、スライダ:  $33.06 \times 10.26 \times 5.70 \mu\text{m}$  のミクロンスケールの鉄を粗視化粒子でモデリングし、スライダを速度  $100 \text{ m/s}$  で  $x$  方向へ摺動させる。

本シミュレーションは並列計算を自動化するオープンフレームワーク、FDPS<sup>5)</sup>を用いて C++言語で実装する。

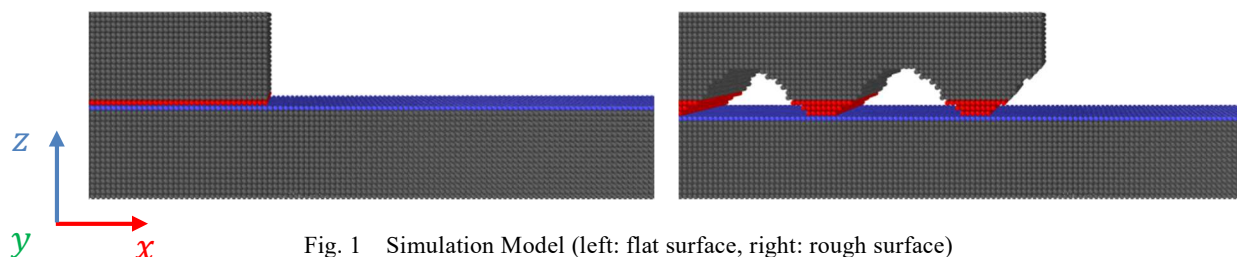


Fig. 1 Simulation Model (left: flat surface, right: rough surface)

### 3. 計算結果

スライダーの摺動部が滑らかな場合と粗い場合の摺動時間(ns)に対する摩擦係数を Fig. 2 に示す。摩擦係数は Fig. 1 の赤色と青色の粒子間相互作用から計算される力の総和より求められる。タイムステップごとの摩擦係数の平均をとるとそれぞれ 0.50, 0.67 となり、粗い場合のほうが摩擦係数は大きくなった。これは fig.3 のように、粗い摺動面の凸が基板表面粒子上のポテンシャルに引きずられてせん断方向への変形が生じたことによるもので、式(4)より、PT モデルによる摩擦力は初期位置からのずれを変位としており、摺動界面粒子の変形によってこの変位が大きくなったためであると考えられる。

また、摩擦係数は PT モデルを導入したことにより振動しており、その周期は粗視化粒子の直径である  $0.285\mu\text{m}$  と一致する。振動振幅は粗い面に比べると滑らかな面のほうが大きい。これは、系全体の摩擦力は式(6)より摺動界面の 1 粒子当たりの摩擦力の和で計算するため、滑らかな界面では接触する粒子数が増えることによるものであると考えられる。

これらのことより、粗視化粒子を用いた SPH 法でのミクロンスケール摺動シミュレーションでは、摺動界面の粗いスライダーは凸部が基板の摺動界面に引きずられて弾性変形を起こし、摩擦が増加することが分かった。またスライダーの摺動界面が滑らかな場合、基板の摺動界面粒子と接触する粒子数が多いため、摩擦力の振動振幅は大きくなる。

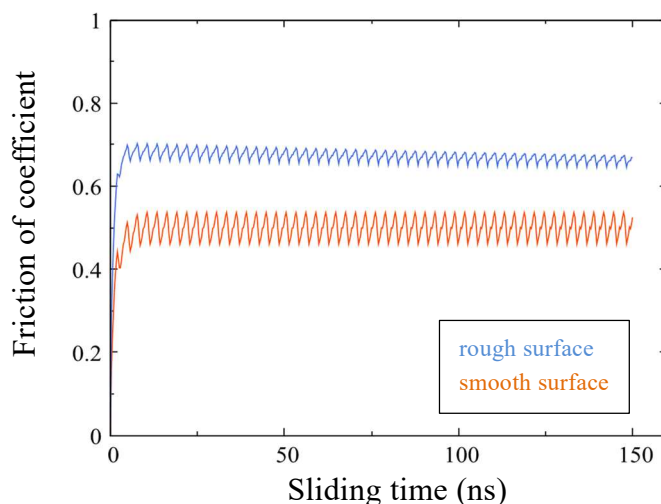


Fig. 2 Friction of coefficient

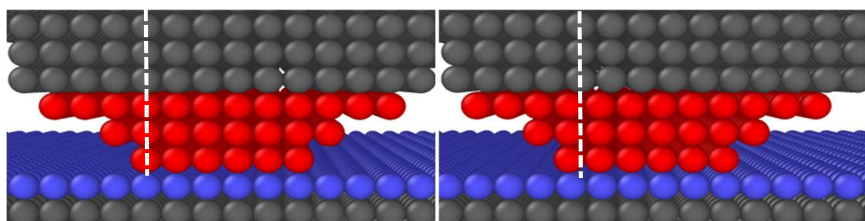


Fig. 3 Elastic deformation of convexity of sliding interface

### 4. 今後の展望

今回の研究では二次元 (zx 面) 的な条痕性状の表面粗さが摩擦力に与える影響を調べた。今後は三次元的なディンプル性状面でのシミュレーションを行い、実現象との対応について検討を行う。

### 文献

- 1) 矢川・酒井：粒子法 第一版，岩波書店 (2016)。
- 2) L.V.Sang, A.Yano, S.Fujii, N.Sugimura, H.Washizu: Coarse-Grained Model for Spring Friction Study of Micron-Scale Iron by Smoothed Particle Hydrodynamics, EPL, 122, 2 (2018) 26004–26008.
- 3) L.V.Sang, A.Yano, A.Isohashi, N.Sugimura, H.Washizu: Friction and Friction Heat of Micronscale Iron, J. Tribol. , 142, 9 (2020) 091702.
- 4) 新田・Le・杉村・鷲津：SPH 法による金属の摺動および摩擦熱の解析，トライボロジー会議 2022 秋 福井
- 5) M. Iwasawa, A. Tanikawa, N. Hosono, K. Nitadori, T. Muranushi, J. Makino: Implementation and performance of FDPS: a framework for developing parallel particle simulation codes, Publications of the Astronomical Society of Japan, 68, (2016) 54-1 - 54-22