

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

Large-scale parallel SPH simulation targeting seizure processes at wide-area interfaces 2

鹿児島高専・機械（正）*杉村 奈都子 鹿児島高専（学）石原 大嵩 兵庫県立大（学）藤田 晃徳

極地研（非）杉村 剛 都市大（正）三原 雄司 兵庫県立大（正）鷲津 仁志

Natsuko Sugimura*,**,***, Hiroataka Ishihara*, Akinori Fujita**, Takeshi Sugimura***, Yuji Mihara****, Hitoshi Washizu**

*National Institute of Technology, Kagoshima College, **University of Hyogo, ***National Institute of Polar Research,

****Tokyo City University

1. はじめに

マイクロメートルスケールの摩耗、発熱、塑性流動を再現し、焼付き現象につながる機構を明らかにしようとする Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) シミュレーションモデルの改良を進めてきた。前回、鉛直方向に対して剪断方向に 8 倍の粗さを持つディスク状の粒子を基本単位とした非等方モデルを導入して、剪断方向に広域な擬似的実界面性状での剪断試験を実施し、界面間の反応と界面近傍の塑性流動がそれぞれどのように温度上昇に寄与しているかを議論した。今回さらにシステムを大きく、剪断時間を長くして、剪断下での各時間、各領域でのそれぞれのエネルギーの分布と、凝着の維持との相関について、明らかにする。

2. 方法

鉛直方向と剪断方向の解像度が異なる非等方的な空間を考える。SPH 法では、スカラーで表される重み関数を重みテンソルに変えることで粒子形状を適宜変える方法があるが[1]、今回は着目すべき方向が固定されているため、座標変換を用いる。この座標変換により、等方的実空間においては鉛直方向 5nm、剪断方向 40nm のディスク状粒子が基本単位となる計算系を設定する (Fig.1 下)。なお、界面の形状は模擬的な実界面性状を上下点対象に配置し、それを、周期境界条件を満足するように 4 象限にそれぞれ鏡面対象展開する。界面間の相互作用は、等方性粒子の界面間に作用するものを、こちらも座標変換により定義する。等方弾性体を想定した弾-塑性変形スキームを用い、加工硬化は n 乗硬化則に従うと仮定する。

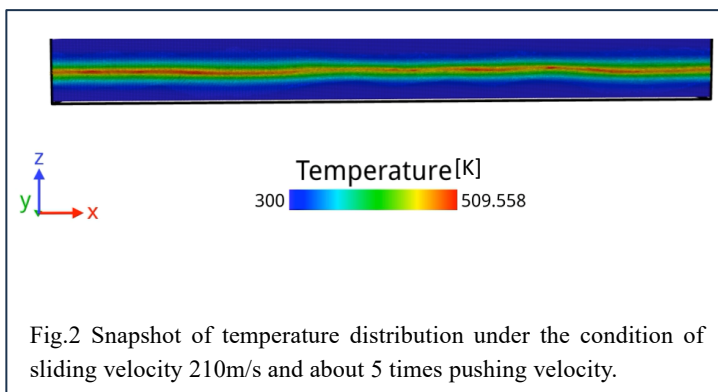
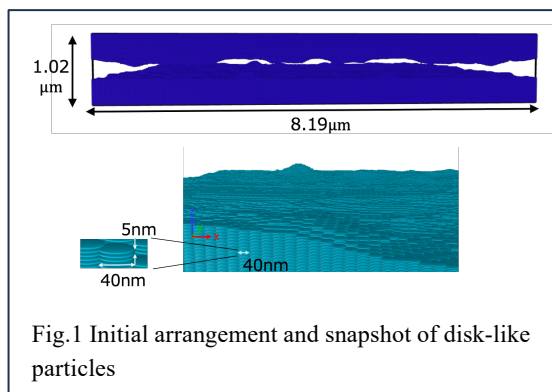
運動量、エネルギーの保存式を解いて計算を進めるが、そのうち温度は式 (1) で表される。ただし、 $T, t, \rho, \sigma, x, v, f, c_v, \zeta, \kappa$ はそれぞれ温度、時間、密度、応力、位置、速度、界面相互作用力、比熱、熱変換効率、熱伝導度であり、式中のプライムは座標変換後の座標軸に基づいた値、 A は座標変換マトリクスである。

$$c_v \frac{dT_{\square}}{dt} = \zeta \frac{1}{\rho_i} \frac{\partial(\sigma_i^{\alpha\beta} v_i^{\alpha})}{\partial x_i^{\beta}} - \frac{1}{\rho_{\square}} \frac{\partial}{\partial x_{\square}^{\alpha}} \left(-\kappa \frac{\partial}{\partial x_{\square}^{\alpha}} T_{\square} \right) + f_{\square}^{\alpha} A^{-1} v_{\square}^{\alpha} A^{-1} \quad (1)$$

計算には大阪大学情報サイバーメディアセンタの大規模計算機システム SQUID を用いる[2]。

3. 結果

SQUID では、その汎用 CPU 計算ノード群のジョブクラス SQUID (利用可能経過時間 120 時間、利用可能最大 Core 数 = 76Core × 512 ノード) を用いて、主に 76 ノード 304 プロセス (1 ノード 4 プロセス × 19 スレッド並列) の、MPI と OpenMP のハイブリッド並列計算を実施した。粒子数 8,526,768、システムサイズ $x \times y \times z = 8.19 \times 8.19 \times 1.02 \mu\text{m}$ (Fig.1 上) による計算で得られた温度分布 (単位[K]) を Fig.2 に示す。荷重剪断によって界面の凹凸が接触したところから発熱が始まり、界面近傍で温度上昇の様子が見て取れた。塑性領域は Fig.2 の界面の赤い領域で主に観測され、その外側は熱伝導による温度上昇が主であった。



4. 考察

式1の右辺第1, 2, 3項はそれぞれひずみエネルギー, 熱伝導エネルギー, 界面反応エネルギーに相当する。剪断面近傍(凸凹のある部分)の温度に着目すると、平均温度は接触、凝着とともに連続的に上昇した(Fig.3 青)。また、とりわけ接触の初期などで、至極、局所的に高温が検出され、その値は不規則に上下しながら上昇した(Fig.3 赤)。この時の各エネルギー値を調べることで、どのエネルギーが凝着の進展において支配的かについて情報を得られる。一例をFig.4に示すと、ここではひずみエネルギーが界面近傍の平均温度上昇に対してある時点まで支配的であることが見て取れる。今回、剪断速度、荷重を変えて複数の試験を行ったところ、同じ接触面形状であっても、このエネルギーの分率—どのエネルギーがある時点でエネルギーの何割を占め、温度上昇の何割を担っているか—には違いのあることがわかった。たとえば、荷重が大きければある時点まではひずみエネルギーが温度上昇に対して支配的であり、剪断速度が大きければ界面反応エネルギーが支配的となる傾向が見られた。こうした差異が凝着の持続とどのように関わるかについて、さらに検証を進めている。

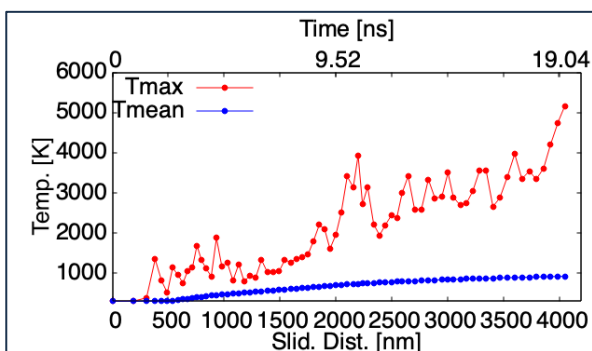


Fig.3. Temperature distribution.

Tmax(red): Maximum temperature near the interface.

Tmean(blue): Average temperature near the interface.

Simulation conditions are the same as those of Fig.2.

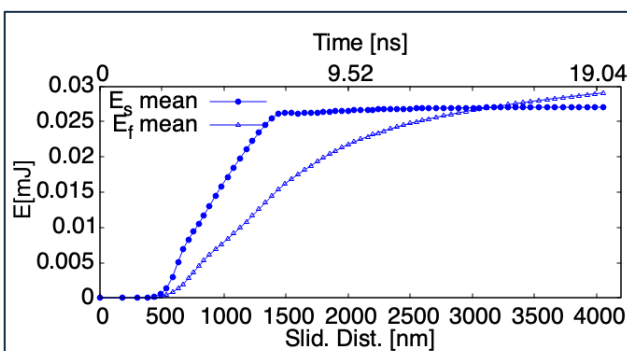


Fig.4. Energy distribution.

E_s mean: Average strain energy near the interface.

E_f mean: Average interfacial interaction energy near the interface.

Simulation conditions are the same as those of Fig.2.

文献

- 1) L.V. Sang, A.Yano, A.Osaka, N. Sugimura, H. Washizu, "Adaptive smoothed particle hydrodynamics for study of friction of silica at micronscale", Tribol. online, 15(4) (2020) 259-264
- 2) 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)103-108, <https://doi.org/10.18910/96536>
- 3) 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)10325, <https://doi.org/10.1016/j.jocs.2024.102325>