

令和 2 年 7 月 10 日現在

機関番号：37112

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2019

課題番号：16K18037

研究課題名(和文) 摩擦・衝突を伴う振動系の動特性の高精度推定に向けたマルチスケール振動解析法の開発

研究課題名(英文) Development of a multi-scale vibration analysis method for highly accurate estimation of vibration characteristics of vibration systems with friction and collision phenomenon

研究代表者

梶田 顕章 (Tomoda, Akinori)

福岡工業大学・工学部・助教

研究者番号：20582414

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：接触部や空隙部を有する機械システムの振動応答を高精度に推定するため、FEM(有限要素法)とMD(分子動力学法)を組み合わせた振動解析法を構築することを目的とした。MD解析により、単結晶のCu(銅)製ブロックの表面エネルギーおよび球板の弾性接触における接触半径を求めた。その結果、MDによる接触を伴う振動系の動特性の推定が可能であることが分かった。また、2次元はり要素およびMEAMポテンシャルを用いて、FEM-MDマルチスケール振動解析法を提案した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究では、運動状態の定式化が困難な非線形性の強い系に対して、従来のFEMのような巨視的モデルだけでなく、原子・分子レベルでの微視的モデルを同時に用いた振動解析が実現可能であることを示した。接触問題の統合的アプローチを行うことで、複雑かつ大規模な機械システムに対してより現実的な振動解析手法を提案できると考えられる。また、本研究で提案したFEM-MDマルチスケール振動解析法は、超小型機械や極限環境下での機械システムの開発等、様々な産業分野での応用が可能であると考えられる。

研究成果の概要(英文)：The purpose of this study is development of a vibration analysis method using FEM(Finite Element Method) and MD(Molecular Dynamics method) for highly accurate estimation of the vibration characteristics of mechanical systems with contact portion and gaps. A surface energy of the block made of single crystal Copper and a contact radius under elastic contact was obtained by MD analysis. The results indicate that MD analysis can estimate the dynamic characteristics of the vibration system. In addition, the FEM-MD multi-scale vibration analysis method using two dimensional beam elements and MEAM potential was proposed.

研究分野：機械力学

キーワード：機械力学・制御 振動解析 分子動力学法 有限要素法 マルチスケール振動解析

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

機械システムにおいては、重要部品の損傷や騒音発生を防止する観点から、振動入力時に系の応答が著しく増大しないように設計する必要がある。しかし、自動車や HDD、原子間力顕微鏡等、複数の部品で構成される機械システムでは、仕様上、やむを得ず接触部や空隙部を有する設計をしなければならないことがあり、振動入力時において系の応答増大の原因となる。そのため、このような機械システムの設計時には、接触部や空隙部で発生する摩擦、衝突現象を高精度に再現でき、系の振動応答への寄与度を定量的に評価可能な数値解析手法が求められている。

2. 研究の目的

本研究の目的は、接触部や空隙部を有する複雑な機械システムの振動応答を高精度に推定でき、摩擦および衝突現象の系の応答への寄与度を定量的に評価可能な FEM (有限要素法) - MD (分子動力学法) マルチスケール振動解析法を開発することである。そこで、本研究では以下の研究課題を実施する。

(1) 接触はりの振動特性の実験的解明

接触はりの振動試験を行い、摩擦および衝突現象の接触はりの振動応答への影響について実験的に明らかにする。

(2) FEM - MD マルチスケール振動解析法の開発

接触はりの接触部およびその近傍の微小領域について MD によるモデリングを行い、接触部の詳細な挙動をシミュレーションで再現できるようにする。また、FEM および MD によるモデリングの指針を提案する。

(3) 大規模解析による MD 領域の拡大

MD の領域を拡大し、振動時における摩擦、衝突現象の接触はりの振動応答への寄与度を定量的かつ高精度に明らかにする。数値計算用サーバによる大規模振動解析を実施する。

3. 研究の方法

(1) 接触はりの振動特性の実験的解明

接触はりの振動特性及び摩擦や衝突現象を伴う複雑な振動応答を取得するために必要な計測装置 (レーザ変位計、FFT アナライザ) を発注し、振動試験装置を構築する (図 1)。疑似不規則波加振および低速掃引正弦波加振による振動試験を行い、接触はりの振動特性を取得する。特に、衝突を伴う場合の系の振動特性の取得については、過去の研究報告の実験手順を参考にし、低速掃引正弦波加振における掃引方向、掃引周波数の変化率 (上昇、下降率) が適切に確認しながら振動試験を進める。

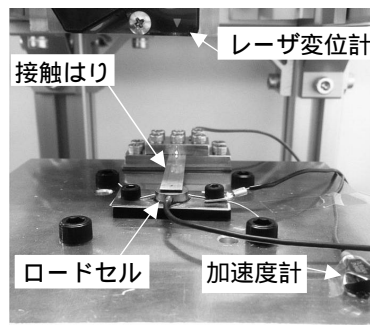


図 1 接触はりの振動試験装置

(2) FEM - MD マルチスケール振動解析法の開発

接触部およびその近傍の微小領域について MD によるモデリングを行い、接触部の詳細な挙動をシミュレーションで再現できるようにする。まず、薄板構造物の有限要素モデルを構築する。次に、接触領域について MD による解析モデルを構築するが、解析対象の結晶構造に適合した原子間ポテンシャルを用意する必要がある。本研究では、銅合金を薄板構造物として用いており、合金用のポテンシャル関数としての実績のある MEAM ポテンシャルを用いて振動解析を行う。

研究代表者の所属する研究室で所有する計算用サーバにて、FEM-MD マルチスケール振動解析を実施する。上面の変位応答について振動試験と数値解析の結果を比較する。本研究で提案する振動解析法の実機適用性を検証するため、先行研究で用いた簡易 FE モデルの結果よりも誤差が低減され、摩擦や衝突現象を再現できているか確認する。特に、接触部の MD 領域を変化させた場合、振動解析における変位応答の誤差の改善がみられるかという点に注目し、モデルの再構築と振動解析を繰り返し実施する。

(3) 大規模解析による MD 領域の拡大

スーパーコンピュータ (Fujitsu PRIMERGY CX2550/CX2560 M4, Intel Xeon Gold 6154 2CPU (36 コア) / ノード, 九州大学) の共同利用申請を行い, MD 領域を拡大して大規模振動解析を実施する. 解析の準備として, 研究室所有の計算用サーバとスーパーコンピュータを併用して解析プログラムの高速化を図る. スーパーコンピュータによる大規模振動解析を実施し, 摩擦衝突現象の接触はりの振動応答への寄与度を定量的かつ高精度に明らかにする.

4. 研究成果

(1) 接触はりの振動特性の実験的解明

前章の図 1 に示した振動試験装置を用いて振動試験を実施した. 本研究では, 接触はり先端部の接触状態により, 接触部の摩擦, 衝突現象が生じる条件を明らかにしようとした. しかし, 振動試験の結果より, 同一の実験条件であっても実験毎に試験結果が大きくばらつくことが分かった. 接触部の清浄度や表面粗さ, 実験環境 (温度, 湿度等) が実験結果に影響を及ぼしている可能性があり, 接触部近傍の表面性状を予め整えた上で振動試験を行う必要があることが判明した. 現時点では, 接触部の 2 物体の表面形状を振動試験前に測定しておくことで振動試験結果の考察が可能であると考えている. ここで, 研究代表者の所属機関のエレクトロニクス研究所には, 三次元光学プロファイラー (AMETEK 社製, Zygo NewViewTM9000) が学内共同利用機器として設置されている. 今後, 上記の計測装置を用いて, 接触梁先端部の表面形状の測定することを予定している. また, MD を用いた 2 物体間の接触解析より, 接触はり先端部の材質, 接触面積が接触力 (付着力) に影響を及ぼすことが判明している. 現在, 単結晶の Cu 単結晶の接触はりや原子間力顕微鏡用マイクロカンチレバー等を用いた振動試験装置の再構築の検討を行っている. 本補助事業の終了後も, 研究代表者の所属する研究室において上述の振動試験を継続して実施する.

(2) FEM - MD マルチスケール振動解析法の開発

本研究では, まず, 小規模な系の MD モデルを構築し, MD による接触解析の可能性について検討を行った. まず, 原子個数 256 個の銅製ブロック (Cu 単結晶) の MD モデルを作成し, 金属の表面エネルギーを算出することで, 構築した MD モデルが実際の材料表面を表現できているか確認した. MD 解析用プログラムについては数値解析用ソフトウェア (MATLAB) を用いて構築した. 解析結果および過去の研究報告 (実験値) を表 1 に示す. 表面エネルギーの実験値に対する解析結果の誤差が 5% 程度であったことから, 本研究で構築した金属の分子動力学モデルは, 実際の材料表面を表現できる可能性が高いことが確認できた.

表 1 表面エネルギーの計算結果 (原子個数 256 個)

	MD 解析結果	実験値 (Tyson and Miller)
表面積 [m ²]	2.10×10 ⁻¹⁸	1.77
表面エネルギー [J/m ²]	1.67	
誤差 [%]	5.65	

銅製の球および板 (いずれも Cu 単結晶) の MD による接触解析の可能性について考察を行うため, FCC (面心立方格子構造) をコンピュータ内で再現した. 銅原子における平衡原子間距離 2.56 Å および格子定数 3.62 Å を考慮し, 弾性球および弾性板内に存在する各原子の初期位置を決定した (図 2). 数値解析については, LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) と呼ばれる大規模古典分子動力学シミュレータを用いた. 球の原子個数は 450 個, 56451 個の 2 種類とした. また, 板の原子個数は 8405 個であり, 72.4 Å×16.3 Å×72.4 Å の直方体である. 数値積分法は速度ベルレー法を用いた. 数値積分の時間刻みは原子の振動周期を考慮し 1fs, 100000 ステップ分 (100ps) の計算を実行した. 球 - 板間の接触力を 1 pN とし, 2 物体が接触した後の接触半径 a_0 [m] を求めた (図 3).

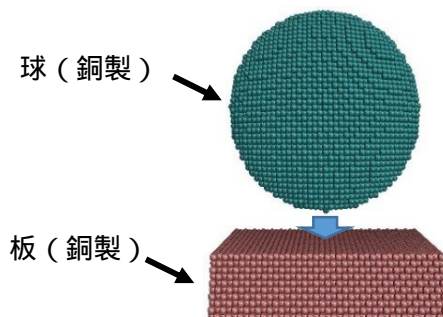
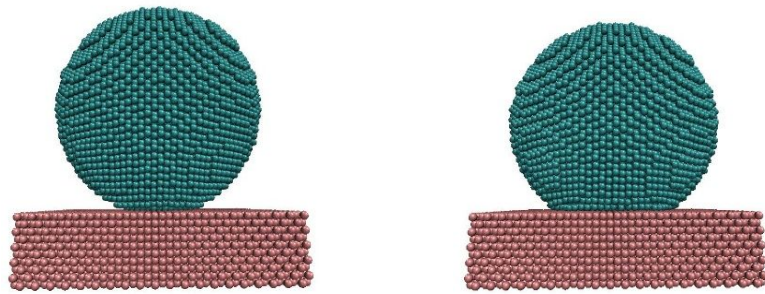


図 2 銅製球および板の MD モデル (初期配置)



(a) 15ps 経過後

(b) 100ps 経過後

図3 MDによる接触解析のスナップショット

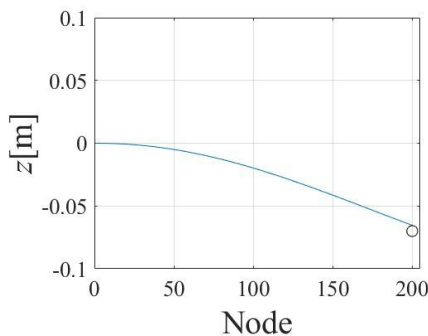
本研究では、MDによる接触解析結果が現実的なものであるか検証するため、付着力を考慮した弾性体の接触理論であるJKR理論を用いて a_0 を計算し、接触解析結果と比較した(表2)。MDによる接触解析結果とJKR理論を用いて求めた接触半径の差異は、Cu単結晶の格子定数(3.62×10^{-10} [m])以下と非常に小さいことから、本研究で構築したMDモデルは接触現象を再現することが可能であると結論づけた。

表2 球-板の弾性接触における接触半径 a_0

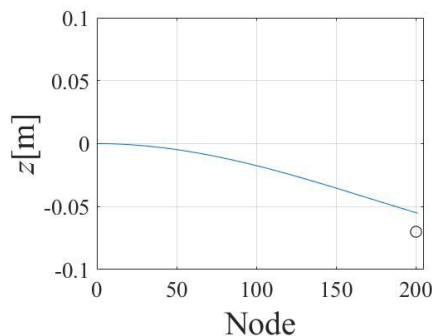
球の原子個数	接触解析結果 (MD)	JKR 理論
450 個	8.73×10^{-10} [m]	8.30×10^{-10} [m]
56451 個	2.56×10^{-9} [m]	2.38×10^{-9} [m]

以上の結果を基に、FEM-MDマルチスケール振動解析法の構築を試みた。本研究では、2次元梁要素を用いて接触はりのFEモデルを構築した。また、接触部近傍については、Cu単結晶のMDモデルを構築した。原子間ポテンシャルについてはMEAMポテンシャルを採用した。FEモデル-MDモデル間については、変位および速度の受け渡しによってモデル間の接続を行った。FEモデルの要素数は201、MDモデルの原子個数は512個である。振動解析用プログラムはIntel Fortran CompilerおよびMicrosoft Visual Studioを用いてFortran言語で記述した。

構築した振動解析用プログラムを用いて、先端部において衝突を伴う接触はりの振動解析を実施した。衝突前後の接触はりの状態を図4に示す。(a)は86ms経過後、(b)は120ms経過後の接触はりの状態を示している。解析結果より、衝突現象を伴う接触はりの振動現象を再現できているように見える。しかし、先端部の衝突が生じる前後の接触はりの速度を用いて反発係数を求めたところ、反発係数が1を超えていた。以上より、本研究で構築したFEM-MDによる解析モデルでは、現実の衝突現象を高精度に再現することができないと判断した。現時点では、接触部のMD領域を変化させた場合に振動解析における変位応答の誤差の改善がみられるか、十分に検討できていない。本補助事業の終了後も、FEM-MDによる解析モデルの誤差改善を目指し、モデルの再構築を繰り返し実施する。



(a) 86 ms 経過後 (衝突前)



(b) 120 ms (衝突後)

図4 FEM-MDマルチスケール振動解析法による衝突を伴う接触はりの振動解析結果

(3) 大規模解析によるMD領域の拡大

スーパーコンピュータを用いた大規模振動解析を実施するための準備として、大規模MD解析用プログラムの構築を行い、計算速度向上のためプログラムの最適化を検討した。大規模MD解析プログラムについては、Fortran言語により記述した。実行ファイル生成のためのコンパイラについては、スーパーコンピュータ(九州大学, Fujitsu PRIMERGY CX2550/CX2560 M4, Intel Xeon Gold 6154)に対応、かつスレッド並列およびプロセス並列用実行ファイルを容易に生成で

きる Intel Fortran Compiler を採用した。

MD 解析においては、系内に存在する原子の個数が多い場合、1 ステップ分の速度および位置の更新に必要な計算回数が膨大となるため、解析結果を得るまでに相当な時間を要することになる。ここで、金属における結晶中の原子は、第二近接原子間距離よりも離れた原子同士は互いにほとんど影響を及ぼさないことが分かっている。この距離はカットオフ距離と呼ばれている。MD 解析においては、解析開始前に予めカットオフ距離を設定し、カットオフ距離よりも離れた原子同士については相互作用の計算を一切行わないようにすることで、計算の高速化を図る。本研究では、複数の CPU および CPU 内の複数のコアを同時に用いる並列計算を行うことを予定しているため、一辺がカットオフ距離の 2 倍程度の長さの立方体のブロックを設定し、解析対象系を複数のブロックに分割した。各ブロックには予め番号を設定しておき、番号の小さいブロックから順番にブロック内の原子における相互作用を計算した。上述の方法は領域分割法と呼ばれており、大規模 FEM、MD 等による数値解析モデルを構築する際に用いられる。ただし、計算対象のブロック内に存在する原子の一部は、隣接するブロックの原子の一部との距離がカットオフ距離以内であることが想定される。そこで、解析時においては、計算対象ブロックとその周囲 26 ブロック内にある原子の間の距離を全て計算し、カットオフ距離以下の原子ペアについては相互作用の計算を行うことにした。上述の方法の導入により、解析時に必要なメインメモリの容量を削減し、多数の CPU を有するスーパーコンピュータにおいて大規模並列計算を可能にした。

現時点では、256000 個の銅原子の MD モデルを構築し、MD 解析を実施することができている。今後は、MD 領域の拡大に対応するため、Intel MPI によるプロセス並列計算用プログラムを構築し、原子個数 1000 万～1 億個レベルの大規模 MD 解析および FEM - MD マルチスケール振動解析を実現させる。また、現在遂行中の研究課題：機械システムの振動減衰能の高精度推定が可能な次世代型統合振動シミュレータの構築（基盤研究（C）, 課題番号：19K04284, 2019～2022 年度, 研究代表者）において、本研究で構築した手法を適用し、振動解析法の高度化・高精度化を図る。

< 引用文献 >

丸山真一, 加藤考行, 永井健一, 山口誉夫, 衝突を伴う片持ちはりにおけるカオス振動の実験, 日本機械学会論文集 (C 編), Vol.72, No.719, pp.2073-2079, 2006

Baskes, M. I., Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities, Physical Review B, Vol.46, No.5, pp.2727-2742, 1992.

Tyson, W. R. and Miller, W. A., Surface free energies of solid metals: Estimation from liquid surface tension measurements, Surface Science, Vol.62, No.1, pp.267-276, 1977.

Johnson, K. L., Contact Mechanics, Cambridge University Press, pp.125-129, 1987.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計1件（うち査読付論文 0件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 鞆田 顕章	4. 巻 1
2. 論文標題 Mn合金の内部摩擦を考慮した振動シミュレータの検討	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 福岡工業大学総合研究機構研究所報	6. 最初と最後の頁 13-17
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） なし	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

〔学会発表〕 計3件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 0件）

1. 発表者名 鞆田 顕章
2. 発表標題 接触を伴う振動系の分子動力学解析
3. 学会等名 日本機械学会機械力学・計測制御部門 Dynamics & Design Conference 2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 数仲 馬恋典, 鞆田 顕章
2. 発表標題 新幹線車軸の蛇行動の正確な定式化により減衰特性および安定性の評価
3. 学会等名 日本機械学会機械力学・計測制御部門 Dynamics & Design Conference 2018
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山中将広, 鞆田 顕章, 三原琢馬, 上山恭史
2. 発表標題 接触部近傍の原子状態を考慮した高精度振動解析法の構築（分子動力学モデルの検討）
3. 学会等名 日本機械学会九州支部第73期総会・講演会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----