

令和 5 年 6 月 25 日現在

機関番号：57701

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2022

課題番号：20K04245

研究課題名（和文）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

研究課題名（英文）Model Development of mesoscale simulation on friction and wear of Boundary lubrication

研究代表者

杉村 奈都子（Sugimura, Natsuko）

鹿児島工業高等専門学校・機械工学科・准教授

研究者番号：00563959

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）：HPCIの利用により、十分な荷重負荷条件におけるせん断試験の繰り返しを実現した。アルミニウムのせん断試験では、凝着が界面凸凹の接触部を起点に界面上に広がり、塑性域が界面近傍から周縁部に広がって、突発的に高温を検出する様子を再現した。このような凝着進展系の特徴的指標を提案した。固液連成モデル、界面相互作用のボトムアップモデルも併せて実装した。可視化システムCedarPlotは、従来のポリゴン描画に代えてWebGLの一機能を用いた新たな描画モジュールを組み入れてメモリ使用量を削減し、HPCI計算による出力データ量増大に対応した。結果の時間相関解析機能、特徴量抽出機能の追加を行っている。

研究成果の学術的意義や社会的意義

接触、摩耗、発熱、塑性流動、凝着を一つのモデルで計算できるメソスケールシミュレーターは本件が初である。原子分子の大胆な粗視化と、連続体のスキームを基本に据えることで初めて実現した。今回、複数の凝着部位が摩擦界面上で接合進展し、塑性・高温域が周縁に急速に広がり、突発的な高温が周縁部で検出されることを明らかにした。経験的・理論的仮定を置かずにこの結論を得たことは、汎用性シミュレーターとしての可能性を広げている。なお、発熱についてはそれが閃光温度の理論解と辻褃の合うことを、学会で発表し、論文に投稿している。物理的な計算結果をwebアプリで無償で確認できるようにした社会的意義も大きい。

研究成果の概要（英文）：HPCI enabled many shear simulation tests under sufficient load and sufficient time conditions. In the shear test of aluminum, the adhesion spreads from the asperities' contact part of the interface to the entire interface, the plastic area spreads from the vicinity of the interface to the peripheral edge, and a sudden high temperature is detected in the peripheral region. A characteristic index was proposed to distinguish between the adhesion progression system and the non-adhesion progression system. We also implemented a solid-liquid interaction model and a bottom-up model for interfacial interactions. Additionally, the visualization system CedarPlot features a new drawing module that uses WebGL functionality instead of traditional polygon drawing to reduce memory usage. As a result, the increase in the amount of output data due to HPCI calculation has been addressed. Time correlation analysis function and feature value extraction function are being added to CedarPlot.

研究分野：トライボロジーシミュレーション

キーワード：焼付きモデル SPH法 境界潤滑摩擦 メソスケール 可視化 トライボロジー

1. 研究開始当初の背景

金属やその化合物などの弾塑性体同士の摩擦では、摩耗、発熱、凝着が起こり、焼付き、破断といったシビアな現象に至ることがある。一般的に摺動部材は潤滑油を介した固体 - 液体 - 固体の系を成すが、潤滑油が分子膜程度に薄く金属面の凸凹直接接触が起こり、摩耗凝着が頻繁に生じる境界潤滑摩擦状態においては、潤滑膜の保持再生と、生ずる摩耗粉の速やかな排出が、界面の凝着進行を防ぎ、焼付きを回避するために重要であると考えられる。実際、油の粘弾性や潤滑膜形成能、摩擦体の表面性状、界面の化学修飾など、多くの項目の適正化による長寿命低摩擦化の実現が、積極的に報告されてきた。しかしそれらの改良が、摺動時に起こる金属表面の摩耗、なじみ、凝着、発熱、焼付きの度合と進行を、どのような機序で制御して、うまく摩擦を低減し焼付きを回避したのかについては、実は体系的に説明できていなかった。この焼付き機構の解明について、界面凸凹の接触により表面潤滑膜の剥離、内部の塑性流動、潤滑膜の再生が繰り返され、やがて急激な温度上昇に至って焼きついていく過程が、漸く mm スケールで観測されたところであった。そして、どういう条件が揃うとどういう順番で“やがて急激な温度上昇”に至るのかはやはり不明であった。

摩擦の根本的起点は原子分子レベルの界面現象であり、この小さなスケールの考慮は欠かせない。しかし、その本質は格子振動や塑性流動といった系全体のエネルギー散逸である。そのため、焼付きに至る機序の解明には、塑性流動を観測し且つ分子間相互作用も考慮できるスケール、すなわちマイクロメートル(メソ)スケールでの機構解明が欠かせない。より詳しく言えば、油膜厚さが分子膜程度であるのみならず、摩擦発熱とその熱拡散が摩擦体表面の態、構造、化学反応性を劇的に変え、界面付近の運動を大きく変えると予想され、この現象を捉え得る最小の基本単位が結晶粒程度のメソスケールだからである。メソスケールの解析モデルに優れた例はあるが、摩擦発熱について、接触速度と接触面積と温度上昇の関係、junction growth 理論に基づく接触面積増加など、種々の仮定理論を用いるものであった。しかしメソスケールの界面で何が起きているのかは、閃光温度を含め動的観測がそもそも難しく、知見が非常に少ない。そのため、上記の仮定が焼付きに至る極限の状態では正しいかどうかとも根拠に乏しい。そこで、仮定理論によらないメソスケールの計算モデルが必須であると我々は考えた。

また、シミュレーション結果を表示するための3次元データ可視化アプリケーションは、有償であれば多機能なものが多く開発販売されていた。しかし、組織が契約するような高額なソフトウェアが加速度的に高機能性を高める傾向にあり、機能性と利便性に富んだ汎用的なものが見当たらなかった。

2. 研究の目的

境界潤滑摩擦において摩耗、発熱など、焼付きに至る過程はどうなっているのか、これが本件の問いである。そこで、塑性流動のような連続体挙動と、界面分子間相互作用のような原子分子の離散的挙動の双方を組み入れた、仮定理論によらない境界潤滑摩擦計算モデルを構築する。このモデルの動作の検証をしつつ、弾塑性体同士の摺動時摩擦摩耗、発熱、凝着の実過程の解明と、焼付きに至る特徴的な現象を捉えることを目指す。また計算結果を、Web ブラウザを用いて誰でもが手軽に可視化するための、利便性と機能性を備えた可視化アプリケーションを開発する。

3. 研究の方法

(1) 粒子法シミュレーションモデルの開発

粒子法の一つである Smoothed Particle Hydrodynamics 法(以下、SPH 法)を用いて開発を始めていた固体摩擦モデルがある。これは、弾塑性という摩擦体の連続体動力学を基本として、これに界面分子間相互作用というミクロの離散的な動力学を組み入れたモデルである。この SPH モデルを HPCI で計算性能が出るようにチューニングし、大規模計算を実施する。具体的には、十分な系サイズ、解像度、せん断時間を確保して、荷重負荷条件でせん断試験を実現する。その際、実界面の凸凹サイズ(0.1~0.5 μm)を模す。凸凹の繰り返しについては今回は規則的とする。また、潤滑油を含む固液連成モデルへの拡張を行う。また、界面の原子分子間相互作用を SPH 粒子間相互作用に高精度で繰り込む(本格的にマルチスケール化を図る)ために、Monte Carlo 法を用いた方法を試みる。

なお、マクロスケールの焼付きは、メソスケールでの凝着の保持と凝着領域の広がりがその端緒であると理解して、本件では凝着と発熱の過程と特徴に着目して検証を行う。

(2) 可視化アプリケーションの開発

粒子法シミュレーションモデルの計算出力ファイルは、3次元座標値と各種物理量で構成される。これらを可視化するための Web アプリケーション “CedarPlot” の開発改良を進める。CedarPlot では、描画に JavaScript グラフライブラリの plotly.js を改良して使い、ファイルから読み取ったデータと Web 画面の連動にはフレームワークライブラリの vue.js を使用する。シミュレーションに HPCI を用いるため、より大容量の出力ファイルに対応する必要があり、バイナリ対応のほか、描画にポリゴンを用いないことでデータ量を削減する新たな描画法の開発を進める。

4. 研究成果

(1) 主な成果

初年度、HPCI としてスーパーコンピュータ富岳の利用を開始し、固体摩擦モデルの大規模計算を始めた。この際、高並列化に対応するために従来コードを微修正し、さらにコードのコスト分布調査を RIST に依頼してその結果をコードに反映させた。また固体-液体連成モデルを作成し、固体側せん断による基本的な流体挙動を確認し、さらにランダム界面における固液連成試験を実施した。

また、摩擦発熱スキームの妥当性を物理的に明確にした。さらに、界面間相互作用のマルチスケール化モデルの開発にも着手した。すなわち、Monte Carlo 法のタイムステップを実時間に対応させ得る MCBF 法を用いて、粒子間相互作用のマルチスケール化を図るスキームを整え、検証した。MCBF 法は、原理的に外場について利用できるものであるため、動的・非平衡条件下における界面間相互作用のマルチスケール化に有用であると考えられる。これらの成果はトライボロジー会議、物理学会、機械学会で発表した。

汎用 Web ブラウザ上で動作する可視化システム CedarPlot については、操作のしやすさ、機能の種類 の改良を行った。また、HPCI での計算開始に伴いデータ点数などファイルのデータ量が各段に増したことから、データ読み込みの高速化も必要となった。そのためまず、読込の高速化に対して、テキストデータのバイナリデータへの変換と読込の機能を追加し、また、描画に使用するメモリの最適化を行った。ただし、最適化を行っても、従来のポリゴンでの描画ではメモリ使用量が大きいため、WebGL の一機能を用いた描画モジュールを新たに作成して、簡易的な Web アプリケーションに組み込むテストを実施した。従来のポリゴン描画に比べて 100 倍程度の粒子数を描画できることを確認した。

2 年目、SPH 法を用いたメソスケールの境界潤滑摩擦モデルの開発を継続して進めた。初年度秋に開始した富岳での計算を、2 年目には年間を通して本格的に実施した。富岳の利用により、それまでの 10 倍以上の粒子数を用いた高解像度、鉛直方向サイズ増での計算が可能となり、荷重負荷条件での長時間の摩擦過程を再現できるようになった。具体的には、荷重下のせん断において、凸凹の接触部が発熱を伴って塑性を示しはじめ、その塑性域が隣接凸凹間で界面上に進展し、やがて接合する様子を明らかにした。このとき、塑性と高温を示す領域が、せん断界面からせん断固体全体へと広がっていく様子も確認した。このような塑性・温度域の進展は、マクロスケールの実験から示唆されていたことではあるが、メソスケールでの再現は他例がない。

また、凝着・焼付きの特徴量として、時間成分を含む指標の検討を開始した。一例として、せん断固体をせん断方向に領域区分し、その領域ごとに係る力(各成分)の時間積算値ないしその時間平均値に着目した。焼付かない場合には、この係る力のせん断方向成分(摩擦力)はゼロないし定数に漸近すると予測される。せん断を繰り返し塑性が進展する場合と、一度の接触による摩擦でしばらく凸凹接触が回避される場合とで、特徴的な差異のみられることが示唆された。成果は、国内学会で報告し、関連する論文を発表した。

可視化システム CedarPlot については、100 万粒子以上の描画を小さな計算機リソースで行えるように大幅に作り変えた。具体的には、初年度に簡易的 Web アプリケーションに組み込んでテストしたものを、2 年目には CedarPlot 本体に組み入れた。これを、旧来のバージョンともバージョン 3 として公開した。

最終年度、SPH 法を用いた本モデルを、焼付き現象解明のための汎用摩擦シミュレーターへと格上げできるよう、凝着過程の精査な解明と、摩擦スキームの検証に努めた。

HPCI にはスーパーコンピュータ SQUID (大阪大学) を用いた。SQUID でのメソスケール荷重下せん断シミュレーションにおいても、複数の凝着部位が摩擦界面上で接合進展し、塑性凝着域が系全体に急速に広がる様子が改めて確認された。このように、凝着が進展する場合と回避される場合について、特徴量の数値化をさらに進めた。系の各領域で検出される力の時間相関関数に着目すれば、領域間に規則的な相関が見いだされる場合とそうでない場合とが、凝着進展のなし、ありによって明確に異なることを見出した(図 1 は凝着進展の系で、凝着初段階では相関が見て取れる)。これは、温度の領域別時間相関関数に関しても類似の傾向を示した。また、発熱は界面付近に限定されるものではなく、系全体に目を向ければ、その最高温度は周縁部でより高温で、突発的な上昇を示す様子が見て取れた(図 2)。成果は、国内、国際学会でそれぞれ発

表した。

さらに、凝着の前段階である摩耗発熱に改めて着目をした。摩耗形状には、ミクロ要因である界面間ポテンシャルの設定が顕著に効いてくるが、それに伴う塑性流動・発熱には接触面やその周辺の形状、変形、変形速度といったマクロ的要因がより大きく影響することが分かった。そこで、ミクロとマクロの視点を併せ持つ本件モデルにおいて、マクロ側スキームの高精度化を図るために、高解像度による小荷重負荷シミュレーションを実施し、接触部弾性域応力分布の進展を具に調べた。半球のディスクへの押し込み試験において、接触部位の応力分布が解析値を一定程度再現することが分かった。ただし、荷重負荷面近傍において応力振動が生じており、その制御を試みているところである。

一方、可視化アプリケーション CedarPlot について、描画点数をさらに大幅に上げることは難しかったが、代わりに解析機能を追加する準備を進めた。具体的には、読み込みデータに基づいて物理量の一定時間経過後の解析分布を描画する機能の付与を想定しており、熱伝導に関して試験を行った。今後は、解析計算に加え、時間相関を含むデータ特徴量を抽出する評価計算機能の付与を図る予定である。

(2) 得られた成果の国内外における位置づけとインパクト

接触、摩耗、発熱、塑性流動、凝着を一つのモデルで計算できるメソスケールシミュレーターは本件が初である。すなわちこれは、原子分子の大胆な粗視化と、連続体のスキームを基本に据えることで初めて可能になったものである。

今回、複数の凝着部位が摩擦界面上で接合進展し、塑性・高温域が周縁に急速に広がり、突発的な高温発熱が周縁部で検出されることを明らかにした(図2)。経験的・理論的仮定を置かずにこの結論を得たことは、汎用性シミュレーターとしての可能性を広げている。

また、本件において、それぞれの結果の物理的妥当性を検証し、発熱についてはそれがフラッシュ温度の理論解と辻褃の合うことを学会で発表し、論文に投稿している。

図1に示した特徴量については他例のないもので、まだ世に問うことを始めた段階であるが、さらなる検証と改良を加えて信頼性を高めることを目指している。

Web可視化アプリケーション CedarPlotは、一般にWeb上で公開し、学会発表の場で紹介を進めている。論文の作図は CedarPlot によっている。

(3) 今後の展望

今後は、ミクロ(マルチスケール化)、マクロの両面のスキームの高精度化を図り、焼付きシミュレーターとしての汎用化を目指す予定である。今般、潤滑油モデルの開発進度が若干遅れたが、これについては早急に進め、境界潤滑領域内のシームレスな計算が可能になるように開発を進める。最終的には流体潤滑領域から境界潤滑領域までのシームレスな汎用摩擦摩耗焼付きシミュレーターに進展させられることが望ましい。

本件は HPCI の利用で可能になった計算による成果が大半で、本件期間内はその計算に追わ

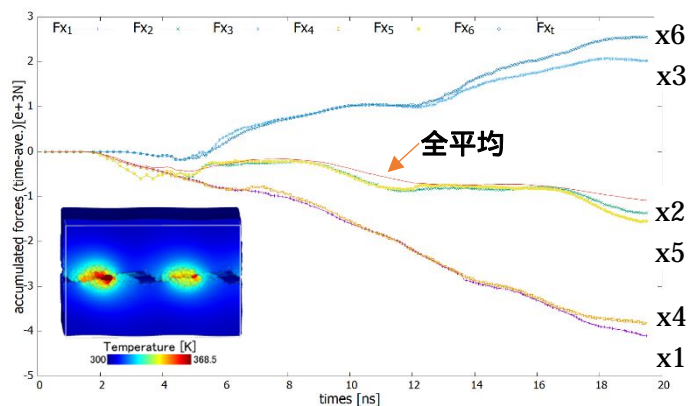


図1 せん断開始後の、摩擦力に関する時間相関関数の推移(凝着進展の系)。系を水平方向に左から順に6当分し(x1~x6)上部せん断固体についてその挙動をプロットした。領域の凸凹からの距離に依拠した挙動変化が見て取れる。全体としてはせん断に抵抗する方向に力は累積する。

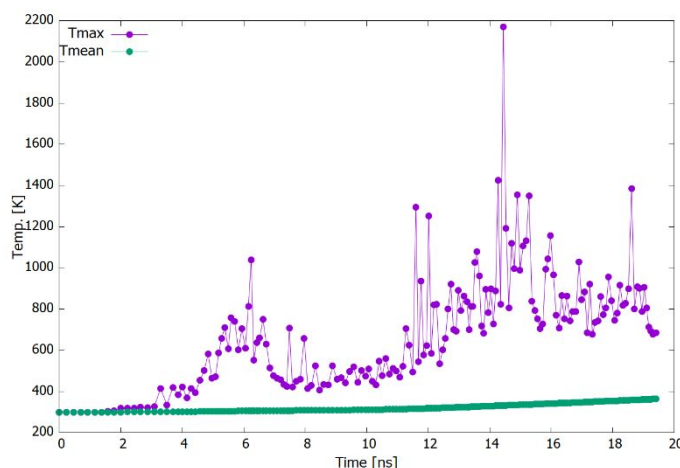


図2 せん断開始後の、系全体の平均温度(緑)と最高温度(紫)の推移。系は図1と同じ。系の界面近傍でも類似の温度変化を示すが、系の周縁部を含む場合には更に特発的な高温を検出する。

れた面もあった。成果を世に問う作業を加速することも肝要である。たとえば焼付き指標について、その信頼性を高めることは、前項に記した通りである。このとき、焼付きの本質に迫るシミュレーションをより高効率のおこなうために、2023年度より新たに機械学習を含む研究を開始した（基盤C「SPH法と機械学習を用いたメソスケール焼付きシミュレーションモデルの構築」23K03652）。これにより、凝着進展、焼付きに関する機序の解明をさらに進めることがこの課題の最大の目標である。

Web可視化アプリケーション CedarPlot については、機械学習モデルの特徴量抽出機能を付与する。これと並行して、可視化と解析計算の高性能化をさらに進める。その際、軽量化に注意を払い、誰でもが軽微な計算資源とネットワーク環境で物理的計算結果を適切容易に確認できるようにしたい。トライボロジーシミュレーションの裾野を広げる役割の一助を担うことも期待している。

<引用文献>

Naoki Yashiro, Kouya Oohira, Natsuko Sugimura, Hitoshi Washizu, "Improvement of discrete element simulation accuracy of steel powder filling behavior by optimization of contact and friction parameters", Tribology Online, 16(1),pp16-23 (2021)

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Le Van Sang, A. Yano, A. Osaka, N. Sugimura, H. Washizu	4. 巻 144
2. 論文標題 Smoothed Particle Hydrodynamics and Descrete Element Method coupling for influence of hexagonal boron nitride lubricant particle on friction of elastic coarse-grained micronscale iron	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 ASME. J. Tribol.	6. 最初と最後の頁 011901 1-10
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1115/1.4050711	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Le Van Sang, Natsuko Sugimura, Hitoshi Washizu	4. 巻 165
2. 論文標題 Graphene as solid lubricant vertically buried into iron contact surface by annealing for superlubricity	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Trib. Intl.	6. 最初と最後の頁 107288 1-9
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.triboint.2021.107288	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計11件（うち招待講演 0件 / うち国際学会 1件）

1. 発表者名 杉村奈都子, 三原雄司, 鷲津仁志
2. 発表標題 SPH法によるメソスケール焼付きシミュレーションモデルの改良
3. 学会等名 トライボロジー会議2022春東京
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Natsuko Sugimura, Yuji Mihara, Hitoshi Washizu
2. 発表標題 Mesoscale SPH Simulation of Seizure Process
3. 学会等名 2022 JSME-IIP/ASME-ISPS Joint International Conference on Micromechatronics for Information and Precision Equipment (MIPE2022 (国際学会))
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 江良瑞樹, 杉村奈都子, 鷲津仁志
2. 発表標題 SPH法を用いた金属の固体摩擦および焼き付きのシミュレーション
3. 学会等名 トライボロジー会議2022秋福井
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 江良瑞樹, 杉村奈都子, 鷲津仁志
2. 発表標題 Analysis of the effect of friction heat on different surface properties using Smoothed Particle Hydrodynamics method
3. 学会等名 ソフトマテリアル工学シミュレーション研究会
4. 発表年 2023年

1. 発表者名 杉村奈都子
2. 発表標題 メソスケールの境界潤滑摩擦における 実界面性状焼き付きシミュレーションモデル の開発とその高速化
3. 学会等名 第9回「富岳」を中核とするHPCIシステム利用研究課題 成果報告会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 杉村奈都子, Le Van Sang, 三原雄司, 鷲津仁志
2. 発表標題 粒子法を用いた大規模計算によるメソスケール境界潤滑摩擦へのアプローチについて
3. 学会等名 トライボロジー会議2021秋松江
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 杉村奈都子, Le Van Sang, 三原雄司, 鷲津仁志
2. 発表標題 メソスケールの境界潤滑摩擦に及ぼす相互作用の影響について
3. 学会等名 日本物理学会2021年秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 杉村奈都子
2. 発表標題 メソスケールの境界潤滑摩擦における実界面焼き付きシミュレーションモデルの開発
3. 学会等名 第8回HPCIシステム利用研究課題成果報告会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 杉村奈都子, Le Van Sang, 三原雄司, 鷲津仁志
2. 発表標題 SPH法に基づく境界潤滑摩擦の反応モデルについて
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 杉村奈都子, Le Van Sang, 三原雄司, 鷲津仁志
2. 発表標題 弾塑性体アスペリティ摺動摩擦のメソスケールSPHシミュレーション
3. 学会等名 トライボロジー会議2020秋別府
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 杉村奈都子, Le Van Sang, 三原雄司, 鷲津仁志
2. 発表標題 境界潤滑摩擦に関するSPH法に基づく粗視化シミュレーションモデル開発
3. 学会等名 日本機械学会2020年度年次大会
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

N.N.Sugimuraの研究紹介 Particle model simulation
<https://sites.google.com/view/natsuko-sugimura/>
 (所属機関のHPを作成後、統合予定)
 CedarPlot(コード)
<https://github.com/castling/cedarPlot>
 CedarPlot(アプリ)
<https://gifted-wind.sakura.ne.jp/>

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
研究分担者	杉村 剛 (Sugimura Takeshi) (80455493)	国立極地研究所・国際北極環境研究センター・特任研究員 (62611)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------