修士論文

固体間摩擦解析のための 有限要素法-分子動力学連成解析手法の開発

p.1 - p.95 完

2018年1月29日

指導教員 泉 聡志 教授家

37-166224 松下 輝

固体間摩擦解析のための有限要素法-分子動力学連成解析手法の開発

学生氏名:松下 輝,指導教員名:泉 聡志

Keyword : Dry friction, Molecular Dynamics, Finite Element Method

1. 序論

自動車の燃費向上にはピストン-シリンダー間の摩擦損失の低減 が必須である.潤滑剤の粘性を下げると運転時は低摩擦となるが, 摺動速度が小さくなる始動・停止時やピストンの上・下死点で固体 間摩擦が発生し,正味の摩擦損失は増加する.固体間摩擦の低減技 術が期待されているが,固体間摩擦には解明されていない点が多 く,数値解析によるメカニズムの解明が求められている.

固体間摩擦はナノスケールからマクロスケールまでのラフネス が影響するマルチスケールの現象である.固体間摩擦解析に有限要 素法 (FEM) や分子動力学 (MD)の適用が期待されるが,FEM は 凝着のような原子レベルの現象を扱えず,MD はマクロスケールの ラフネスを扱えない.両者の利点を生かし,ごく一部の真実接触領 域近傍を MD で,他を FEM でモデル化する FEM-MD 連成解析手 法が期待されているが,既存手法はモデリングや境界条件の制約の ためにそのまま適用できない.

そこで本研究では、大規模な固体間摩擦解析のためのFEM-MD 連成解析手法の開発を目的とする.本研究では既存手法の問題点 を修正した手法を提案し、Verificationを行う.

2. 摩擦解析のための FEM-MD 連成手法の開発 2.1 FEM-MD 連成解析シミュレータの開発

本研究では、下記で提案する手法を基にした FEM-MD 連成解析 シミュレータを開発した. MD には LAMMPS[1]を用いた.

2.2 既存手法の概要と問題点

本研究では既存手法である FEAt/CADD 法([2])の修正手法を提案する.まず,既存手法の概要を述べる(Fig. la 参照).

既存手法では、MD層(Region1)とFEM層(Region4)の間 に、原子と節点が共存する遷移層を2層設ける(Region2, Region3).まず、Region3の原子を固定してRegion1~Region3で MDを実行する.次に、Region2の原子の変位の低周波成分を、最 小二乗法を用いて節点変位に外挿する.次に、求めた Region2の節 点変位を変位境界条件として Region2~Region4 で FEM を実行す る.最後に、Region3の節点変位を原子変位に内挿し、Region3の 原子座標を更新する.

既存手法では、連成領域に凸型表面が存在する場合、表面上の 不安定な原子の平衡位置が変化することで計算が破綻する. そのた め突起先端の真実接触領域近傍のみを MD でモデル化した場合, 既存手法を適用できない.

また,既存手法は Region3 の固定原子の影響で Region2 の原子の 変形に限界があり,外力の作用に対して大変形の一種である並進運動を再現できない.固体間摩擦解析は通常は垂直方向に荷重制御を 行うため,既存手法をそのまま適用できない.

2.3 Mixed Region 法 (MR 法)の提案と検証

連成領域に表面が存在する場合のFEM-MD連成解析手法として Mixed Region 法(MR法)を提案する. MR法では、内部原子の変 位のみをFEMに伝える. 具体的には、Region2の原子のうち表面



Fig.1 : Conventional method and proposed methods.



Fig. 2 : Load-displacement curve for Chapter 2.3.

付近に存在するものを Region1 と同様に扱う, Mixed Region を設ける (Fig, 1b 参照). これにより, Mixed Region 中の凸型表面上に存在する原子の平衡位置が変化しても計算が破綻しない.

MR 法の Verification を目的に半球-平板間の凝着接触解析を行い, JKR 理論と比較した. 半径 50 [nm]の Al(EAM[3])半球を Al 平板に対して垂直方向に変位制御し,荷重と変位の関係を調べた.

得られた荷重-変位曲線を Fig.2 に示す. Fig.2 より, JKR 理論の 成立範囲で提案手法と理論の一致が確認できる.また,本研究では 凝着接触解析特有の変位場の再現を確認した.

理論では凝着が切断される変位において提案手法で凝着が切断されなかった. MD が真球でなく接触部で面-面接触が発生しているため、また MD は塑性変形が起きているためであると考察した.

2.4 Velocity Constraint Region 法 (VCR 法)の提案と検証

外力の作用による並進運動を再現する FEM-MD 連成解析手法と して Velocity Constraint Region 法 (VCR 法) を提案する. VCR 法では Region2 の原子の並進運動が Region3 の固定原子に影響さ れないよう, Region2 と Region3 の間に新たな遷移層 (Velocity Constraint Region: VCR) を設ける (Fig. 1c 参照). VCR 内の節点 と原子が独立していると,両者の運動のわずかなずれから非物理的 な振動が発生してしまう. そこで VCR 内では,原子速度と節点速 度の差に比例する減衰力を原子に与えることで,原子の運動と節点 運動を同期させる.

本研究では VCR の長さと減衰の制御パラメータが並進運動に与 える影響を調査し、適切な値について考察し決定した.

VCR 法の Verification を目的に、ラフネスを有する Al 間の摩擦について FEM-MD 連成解析と full MD 解析を行い、比較した. 固体内の相互作用は EAM[3]、固体間の相互作用は凝集エネルギーが 1/10 の LJ で定義した. Fig.3 に示すモデル寸法と計算条件を用いて、6 周分(摺動距離 240L)だけ摺動させた. 上記の条件で初期

速度の付与や減衰に用いる疑似乱数の seed を変えて3回計算した

(Proposed : seed1 ~ seed3, full MD : seed4 ~ seed6).

摺動距離に対する摩擦係数の変化をFig.4に示す. Fig.4と, そ の結果を統計的に整理した結果より、提案手法を用いて摩擦係数の 変化を定性的・定量的によく再現できた。また本研究では、表面の 摩耗状態もよく再現できていることを確認した.以上より、VCR 法を用いた FEM-MD 連成解析は固体間摩擦解析に適用可能である



Fig.3 : Calculational model for Chapter 2.4.



Fig. 4 : Friction coefficient for Chapter 2.4.

2.5 Shifting Region Model (SRM)の提案と検証

摩擦解析では時間発展とともに接触領域が移動するため、接触領 域近傍のみを MD でモデル化する場合, MD 領域も移動する必要 がある.また、一度接触してから非接触になった領域は、再度接触 することも考えられる. そこで本研究では、接触領域の移動と共に MD 領域も移動させる, Shifting Region Model (SRM)を提案する.

まず予想される接触領域のみを MD でモデリングする. 摺動に 伴い接触領域は移動するため、MD 領域も移動させる (Fig.5参 照). その際,移動前の節点・原子の最終変位・速度の情報を移動 後の節点・原子の初期変位・速度条件として計算を再開すること で、連続した計算を行う. この再開方法を SRM リスタートと定義 する.新たにMDからFEMに置き換わった場合は原子変位・速度 を外挿して節点変位・速度とする.新たに FEM から MD に置き換 わった場合は節点変位・速度を内挿して原子変位・速度とする.

原子レベルのラフネスと塑性変形を考慮したモデル化手法を記述 する. 原子レベルのラフネスはFEM と滑らかに結合出来ないた め、接触領域遠方のラフネスは摩擦現象に影響を与えないと仮定 し、連成領域付近の MD 表面の形状を flat にして FEM と結合す る. この領域を Flatten Region と定義する. ラフネスを持った接触 領域では、一周目の摺動時に表面が塑性変形して滑らかになること で、二周目の摺動に影響を与える. その挙動を再現するため、1周



Fig. 7: Friction coefficient for Chapter 2.5

目に塑性変形した MD 領域が移動して flat な MD 領域に置き換わ る時、置き換わる前の塑性変形の情報を保存し、二周目はその情報 を元に形状を復元する.この領域を Plastic Region と定義する.ま た, Plastic Region で生じた転位をそのまま連成領域に移動させる と、転位が FEM に到達して計算が破綻する. そのため、Plastic Region が移動してその一部が Flatten Region に置き換わる時,その 領域での SRM リスタートは変位を 0,速度を温度に従う乱数とし て計算を行う.このような領域を Reset Region と定義する.また, Plastic Region と Reset Region の境界は不連続になるため、不連続な 形状由来の塑性変形が Plastic Region で生じる可能性がある. MD 領域の移動後にこの変形を残さないために、Plastic Region のうち Reset Region と近接している領域を Elastic Region と定義し、Elastic Region で SRM リスタートをする時は、微小でない変位はその変位 を0として計算を行う.

Fig.6に示す計算モデルを用いて固体間摩擦解析を行った. Fig.6 では Flatten Region を水色, Plastic Region を橙, Reset Region を灰 色, Elastic Region を青で示してある. 同様の解析を, 表面全てを MD としたモデルでも行った.

二周分摺動したときの摩擦係数の時刻歴変化をFig.7に示す.提 案モデルを用いて摩擦係数が再現されたことが分かる. また本研究 では摺動後の表面の変位分布を比較し、提案モデルを用いて表面の 摩耗状態もよく再現できていることを確認した.

3. 結論

本研究では大規模な固体間摩擦解析のための FEM-MD 連成解析 手法の開発を目的とする. 既存手法を固体間摩擦解析に適用できる ように修正手法を提案し、その妥当性を検証した.

参考文献

[1] http://lammps.sandia.gov.

[2] S. B. Ramisetti et al., Int. J. Numer. Methods Eng., 97, 707-738 (2014). [3] J. M. Winey et al, Model. Simul. Mater. Sci. Eng., 17, 55004 (2009).

日次	

1

~
′)
1.
_

1	序詞	습 ਜ਼		9
	1.1	研究	その背景	10
	1.2	従求	その研究	12
	1.2.	1	マクロスケールにおける固体間摩擦理論	12
	1.2.	2	ミクロスケールにおける固体間摩擦理論	14
	1.2.	3	近年の研究	15
	1.3	研究	その目的	18
	1.4	本諸	論文の構成	18
2	表面	「粗さ	<u>ら</u> パワースペクトル	19
	2.1	表面	面粗さパワースペクトルの定義および計算手法	20
	2.1.	1	表面粗さパワースペクトルの定義	20
	2.1.	2	計算手法	21
	2.2	セル	レフアフィンフラクタル表面	24
	2.3	セル	レフアフィンフラクタル表面の作成手法	25
3	固体	本間脣	* 「「「「「「」」 「「」」 「「」 「」 「」 「」 「」 「」 「」 「」	28
	3.1	FEA	At/CADD 法	29
	3.1.	1	FEAt/CADD 法のアルゴリズム	29
	3.1.	2	FEAt/CADD 法の問題点	32
	3.1.	3	FEAt/CADD 法に基づく FEM-MD 連成シミュレータの作成	33
	3.2	Mix	ed Region 法(MR 法)の提案	34
	3.3	MR	法を用いた半球-平板間の凝着接触解析	35
	3.3.	1	計算条件	35
	3.3.	2	計算結果	38
	3.3.	3	考察	40
	3.4	Velo	ocity Constrained Region 法(VCR 法)の提案	43
	3.5	VC	R 法を用いた平板の並進運動解析	45
	3.5.	1	計算条件	45
	3.5.	1	計算結果と考察	47
	3.5.	2	提案手法の問題点	53
4	表面	「粗さ	5形状を考慮した固体間摩擦解析	55
	4.1	VC	R 法による固体間摩擦解析の Verification	56
	4.1.	1	計算条件	56
	4.1.	2	計算結果・考察	59
	4.2	空間	『スケールが固体間摩擦現象に与える影響	62
	4.2.	1	計算条件	62

4.2.2	計算結果・考察	66
4.3 表	面粗さ形状のなじみが与える影響	69
4.3.1	計算条件	69
4.3.2	計算結果・考察	69
5 Shiftin	g Region Model の提案と検証	72
5.1 Sł	nifting Region Model の概要	73
5.1.1	Shifting Region Model の概要	73
5.1.2	MD 領域と FEM 領域が置き換わる領域での SRM リスタート方法	75
5.1.3	表面粗さ形状と非弾性変形を考慮した Shifting Region Model	77
5.2 Sł	ifting Region Model \mathcal{O} Verification	78
5.2.4	計算条件	78
5.2.5	計算結果・考察	80
6 結論と	今後の課題	82
6.1 結	論	83
6.2 今	後の課題	84
付録 A	表面粗さパワースペクトルの計算	85
付録 B	セルフアフィンフラクタル表面の作成	
付録 C	要素内局所座標の計算法	90
謝辞		91
参考文献		92

义	目そ	欠

図目次

Fig. 1-1 : Stribeck curve	10
Fig. 1-2 : Micro-textured surface (provided by Mazda Motor Corporation)	11
Fig. 1-3 : Frenkel-Kontrova model.	14
Fig. 2-1 : The surface roughness power spectrum of a surface with a self-affine fractal for $q_0 < c_0$	$q < q_1$
	24
Fig. 3-1 : FEAt/CADD based method	29
Fig. 3-2 : A model which has a convex surface in the FEM-MD transition Region.	32
Fig. 3-3 : Cause of the problem of conventional FEAt/CADD method	33
Fig. 3-4 : Mixed Region method	34
Fig. 3-5 : Calculational model for the adhesive contact analysis	35
Fig. 3-6 : Mesh sizes of FEM elements for the adhesive contact analysis	36
Fig. 3-7 : Proposed 1-2 mixed Region of the hemisphere model	36
Fig. 3-8 : Result of the adhesive contact analysis between the hemisphere and the flat plate	38
Fig. 3-9 : Cross-section map of the z-direction displacement at $\delta = -0.75$	39
Fig. 3-10 : Cross-section map of the z-direction displacement at $\delta = 0.5$	39
Fig. 3-11 : Map of the z-direction displacement at $\delta = 0.5$	41
Fig. 3-12 : Map of the z-direction displacement at $\delta = 0.75$	42
Fig. 3-13 : Map of the z-direction displacement at $\delta = 1.0$	42
Fig. 3-14 : Velocity Constrained Region	43
Fig. 3-15 : Calculational model for the translational motion analysis.	45
Fig. 3-16 : Effect of the VCR's length on the translational motion.	47
Fig. 3-17 : Difference of moving distances at time = 100 [pico sec.]	48
Fig. 3-18 : Oscillation in the Z direction	49
Fig. 3-19 : Effect of the damping parameter on the translational motion	50
Fig. 3-20 : Effect of the controlled temperature on the translational motion	51
Fig. 3-21 : Symmetry between FEM and MD	52
Fig. 3-22 : X-displacement.	53
Fig. 3-23 : Y-displacement.	53
Fig. 3-24 : Result of the improved proposed method (X-displacement)	54
Fig. 3-25 : Result of the improved proposed method (Y-displacement).	54
Fig. 4-1 : Calculational model for the friction analysis	56
Fig. 4-2 : Calculated normal force.	59
Fig. 4-3 : Calculated friction coefficient.	59
Fig. 4-4 : Averaged friction coefficient.	60
Fig. 4-5 : Displacement distribution maps at the final state	61

Fig. 4-6 : Calculational models of for the friction analysis	62
Fig. 4-7 : Power spectrum density of the height of each surface roughness model	63
Fig. 4-8 : M0.5-1 lower	63
Fig. 4-9 : M1-1 lower	64
Fig. 4-10 : M2-1 lower	64
Fig. 4-11 : Calculated friction coefficient of M0.5 models	66
Fig. 4-12 : Calculated friction coefficient of M1 models	66
Fig. 4-13 : Calculated friction coefficient of M2 models	67
Fig. 4-14 : Scale effect of the ratio of the real contact area.	68
Fig. 4-15 : Scale effect of the averaged friction coefficient	68
Fig. 4-16 : Averaged friction coefficient of changed models.	69
Fig. 4-17 : Displacement distribution map of the changed-model analysis.	70
Fig. 5-1 : Shifting Region Model.	74
Fig. 5-2 : Replacement of MD with FEM (A) and of FEM with MD (B)	75
Fig. 5-3 : Four subregions of SRM.	77
Fig. 5-4 : Calculational model for the verification SRM.	78
Fig. 5-5 : Friction coefficient of the proposed method.	80
Fig. 5-6 : Averaged friction coefficient of the proposed method.	80
Fig. 5-7 : Displacement distribution map of the proposed method	81
Fig. B-1 : Example of self affine fractal surface.	89
Fig. B-2 : Example of power spectrum density of surface roughness	89

表目次	

Table 3-1 : Calculational condition of FEM.	37
Table 3-2 : Calculational condition of MD.	37
Table 3-3 : Calculational condition of MD.	46
Table 3-4 : Calculational condition of FEM.	46
Table 4-1 : Calculational condition of MD.	58
Table 4-2 : Calculational condition of FEM.	58
Table 4-3 : Calculational condition of MD.	65
Table 4-4 : Calculational condition of FEM.	65
Table 5-1 : Calculational condition of MD.	79
Table 5-2 : Calculational condition of FEM.	79

1	序論		

1.1 研究の背景

自動車用内燃機関は熱エネルギーを機械エネルギーに変換する熱機関の一種である.ガ ソリンや軽油を燃焼させて得られる熱エネルギーにより、高圧となったガスを作動流体と し、自動車の動力に利用する.しかし、燃焼によって得られる熱エネルギーは放熱や排気ガ スによって失われ、熱エネルギーから機械エネルギーへの転換されるエネルギーは 38%程 度とされている. さらに、この機械エネルギー33%は摩擦で失われており、その内の 50%以 上はエンジンやトランスミッションで発生する摩擦損失が占めていると言われている[1]. そのため、燃費の向上のためにはそれらの部位における摩擦係数の制御が必須である.

摩擦が発生する摺動部においては通常, 潤滑油を用いて摩擦損失を低減している. 摺動条 件,潤滑油の粘性と摩擦係数の関係は,Stribeck線図として知られている[2] (Fig. 1-1). 自動車の運転時は Fig. 1-1 (3)に示す流体潤滑が成立しているため、運転時の摩擦係数を下げ るためには潤滑油の粘度を下げる必要がある.しかし粘度を下げすぎると流体潤滑が成立 する運転速度領域が右にシフトするため、速度が低下するエンジンの始動・停止時やピスト ンの上・下死点において Fig. 1-1 (1)(2)に示す境界潤滑,混合潤滑が成立しやすくなり,正味 の摩擦損失は増加してしまう. そのため, 潤滑油の粘性の低下には限界がある.

近年,この問題を解決する方法の一つとして,表面形状をマイクロ・ナノスケールで加工



(1) Boundary Lubrication

Fig. 1-1 : Stribeck curve.

しトライボロジー特性を制御する,表面テクスチャリング技術が期待されている[3].表面 テクスチャリングは流体潤滑だけでなく,混合潤滑や境界潤滑,そして潤滑油のない乾燥摩 擦においても機能する.そのため,潤滑油の粘度を下げて流体潤滑下の摩擦損失を低下させ つつ,境界潤滑時の摩擦損失を表面テクスチャリングの効果で抑えることで,更なる摩擦損 失の低下が期待できる.表面テクスチャの例を Fig. 1-2 に示す.

この技術を実現するためには、適切な表面テクスチャ形状の設計指針が必要であり、境界 潤滑下で表面テクスチャリングによってトライボロジー特性が改善されるメカニズムの解 明、および表面テクスチャ形状から摩擦係数を予測する技術が求められている.また、現象 の根底を理解するために、一般的な固体間摩擦において発生する現象の観察とそのメカニ ズムの解明が求められている.



Fig. 1-2 : Micro-textured surface (provided by Mazda Motor Corporation).

1.2 従来の研究

1.2.1 マクロスケールにおける固体間摩擦理論

マクロスケールにおける固体間摩擦に関しては、クーロン・アモントンの法則と呼ばれる 以下の経験則が広い範囲で成立する.

(1) 摩擦力は見かけの接触面積に依存しない

(2) 摩擦力は荷重に比例する

(3) 動摩擦力は最大静止摩擦力より小さく、滑り速度に依存しない

この法則が成立するメカニズムについて、かつては「凹凸説」という説が支持されていた. 凹凸説における摩擦の原因は、固体表面の凹凸が重力に逆らって互いの凹凸を乗り越える ときに発生するエネルギー損失である.この説を用いると、クーロン・アモントンの法則が 全て説明される.凹凸説が正しければ、表面が粗くなると共に摩擦係数は増加する.しかし 実際は、ある程度以上滑らかな表面では表面が粗くなると共に摩擦係数は減少することが 報告されている[4].これは凹凸説と相容れない.

この凹凸説に替わって、現在、マクロな摩擦の発生メカニズムとして広く信じられている のが「凝着説」である.固体表面には凹凸が存在しているため、2つの固体表面を接触させ たとき、2つの固体の凸部分だけが真に接する.本節では、このように真に接している部分 を真実接触点、真実接触点の面積の総和を真実接触面積と呼ぶことにする.真実接触点では 原子間相互作用による凝着が生まれる.この凝着をせん断破壊するのに必要な力が摩擦力 である、と考えるのが凝着説である.

凝着説を用いると、クーロン・アモントンの法則の(1)、(2)は以下のように説明される. まず、摩擦力 F_{fric} 、単位面積当たりの凝着を切る力であるせん断強さを σ_s 、真実接触面積を A_r とすると

$$F_{fric} = A_r \sigma_s \tag{1-1}$$

で表される.また,垂直荷重をW,真実接触点の降伏応力をσ_yとし,真実接触面積が見かけの接触面積に対して十分に小さいために真実接触点での圧力が全て降伏応力に達しているとすると

$$W = A_r \sigma_y \tag{1-2}$$

という式が成立する.式(1-1), (1-2)により, 摩擦係数µは

$$\mu = \frac{F_{fric}}{W} = \frac{\sigma_s}{\sigma_y} \tag{1-3}$$

となり、クーロン・アモントンの法則の(1)、(2)が示される.ただし、実際の摩擦現象は単純ではなく、摩擦環境や固体表面形状などの様々な要因が摩擦係数の中に含まれる.

式(1-3)の導出過程において,真実接触点での圧力が全て降伏応力に達しているという仮 定を置いた.もし真実接触点が弾性変形しかしていないとすると,単一の真実接触点におけ る荷重と接触面積の関係は,真実接触点を半球と見なすと Hertz の接触理論[5]より

$$A_r \propto W^{\frac{2}{3}} \tag{1-4}$$

と表され、荷重と真実接触面積は比例しない.この問題に対して、Greenwoord と Williamson は単一球の弾性接触理論である Hertz の接触理論を多点接触に拡張したモデルを構築し、弾 性変形においても真実接触面積が荷重に比例することを示した[6].そのため、真実接触点 における変形が弾性変形、塑性変形のどちらの場合においても、真実接触面積は荷重に比例 し、摩擦力は真実接触面積に比例するという摩擦の凝着説が成立する.

凝着に加えて、掘り起こしも摩擦発生の主要な原因だと考えられている. 掘り起こしによる摩擦は、硬い突起が軟らかい表面を掘り起こすことで発生する. 凝着力によって生じる摩 擦F_{adh}と掘り起こしによって生じる摩擦F_{plow}は互いに独立しているわけではないが、摩擦 現象のモデル化において、しばしばこの2つは分離して考えら、全摩擦力Fは

$$F = F_{adh} + F_{plow} \tag{1-5}$$

と表される.ただし、実験的には金属の摩擦係数は、このモデルで予想される摩擦係数より も数倍大きい値となることが分かっており、実際は凝着と掘り起こしに加えて、加工硬化と 接合部成長というメカニズムも寄与していると言われている[7].

動摩擦力の発生メカニズム,および摩擦係数の速度非依存性については,スティックスリ ップ運動モデルを用いて説明される[8].スティックスリップ運動モデルでは,動摩擦は以 下のメカニズムで発生する.

(1) 2 つの固体表面間で、真実接触点のアスペリティが凝着してスティックする.

(2) 摺動に伴ってアスペリティがせん断変形し、弾性エネルギーが蓄積される.

(3) 凝着が切断され、アスペリティは溜まった弾性エネルギーを解放してスリップする.

(4) アスペリティは新たに生じた平衡状態周りで振動し、その振動エネルギーが散逸することで動摩擦損失が生じる.

このようなスティックスリップ運動に起因するエネルギー散逸の速度スケールは,系全体の滑り運動の時間スケールに比べて十分速い.そのため,1回のスティックスリップ運動によるエネルギー散逸は系全体の滑り速度に非依存であると考えられる.単位時間あたりのエネルギー散逸は,単位時間あたりの真実接触点の生成・消滅回数に比例し,全体の滑り速度に比例する.したがって,(摩擦力)×(滑り速度)=(単位時間あたりのエネルギー散逸)であるため,摩擦力はすべり速度に非依存である.

実際は、摩擦係数は滑り速度によって変化するが、その変化は滑り速度の対数に依存する と考えられている[9]. そのため、それほど広くない速度スケール領域で観察する場合は、摩 擦係数の速度依存性は観測されない.

1.2.2 ミクロスケールにおける固体間摩擦理論

前項で述べたように、摩擦の起源は原子間の相互作用である.そのため、摩擦について詳細な議論をするには、ミクロスケールにおける摩擦現象を理解する必要がある.これまで、 原子間力顕微鏡(Atomic Force Microscope: AFM)による実験や分子動力学シミュレーション等による計算によって、ミクロスケールの摩擦はマクロスケールの摩擦とは異なった 様々な現象が発生するということが分かってきている[7][8].

ミクロスケールの摩擦に特徴的な現象の1つに, 摩擦の結晶軸角度依存性, および特定の 角度において摩擦が限りなく0になる超潤滑現象がある(例えば平野ら[10]).また,その 現象を説明するモデルとして, Frenkel-Kontorova (FK)モデル[11]が広く用いられている.

FK モデルでは、2 つの固体表面のうち片方を1 次元のばねから構成される原子の鎖で表現し、もう片方を剛体と見なして周期的なポテンシャル場で表現する.このとき、系全体のエネルギー*E_{FK}*は以下の式で表される.

$$E_{FK} = \sum_{i} \left\{ \frac{K}{2} (x_{i+1} - x_i - l_0)^2 + V_0 \cos\left(\frac{2\pi x_i}{a}\right) \right\}$$
(1-6)

ただし、Kは原子鎖のばね定数、 l_0 は格子定数、 V_0 とaは周期ポテンシャルの振幅と周期であるとする.また、模式図を Fig. 1-3 に示す. Fig. 1-3(a)は、 l_0 とaが同じ、もしくはその比が有理数の場合 (commensurate) であり、Fig. 1-3(b)は無理数の場合 (incommensurate) である.

(a)のとき,原子鎖が横に移動するためには,全ての原子が一斉にポテンシャルを乗り越え る必要があり,このとき大きな摩擦力が発生すると考えられる.またこの現象を atomistic locking,または単に locking と呼ぶ.

(b)では、原子鎖が横に移動するとき、ポテンシャルの山を乗り越える原子もあれば 降りる原子もあり、系全体としてのエネルギーの得失は非常に小さくなるため、摩擦力は非 常に小さくなると考えられる.また原子鎖が無限に長い場合、摩擦力は理論上0となる.結 晶軸の角度によって超潤滑が発生する理由は、角度によって向かい合う原子構造の周期の 比が無理数となるためであると考えられている.



1.2.3 **近年の研究**

Koと Gellman は Ni 間の摩擦の結晶軸角度依存性を実験的に調査し, incommensurate 構造 においても有限の摩擦力が発生することを発見した[12]. また一般に, incommensurate 構造 による超潤滑現象は, この現象を再現するために用意された実験において観察されるだけ である. これは現実の滑り界面のほとんどが incommensurate 構造であることに反する.

この問題に対し Robbins らは、2 つの固体表面間に存在する「第三物体」が有限の摩擦力 を引き起こしていることを、古典分子動力学(Classical Molecular Dynamics: MD)シミュレ ーションを用いて示した[13]. 第三物体とは、周辺環境にある何かしらの汚染物質である. しかし、Ko と Gellman の実験は超高真空環境で行われており、不純物質が存在していない ことも確認していたため、第三物体の存在だけでは説明が不十分だった.これに対し、Qi ら は、Ko と Gellman の実験で用いられた Ni 表面が機械研磨されていたことに注目し、原子レ ベルの表面粗さも摩擦力を引き起こす要因の 1 つであることを MD シミュレーションによ って示した[14].

このように、摩擦現象のメカニズムを解明するのにシミュレーションが有効に用いられ てきた[7].特に、実験では摩擦最中に表面で発生している現象を直接観察することが基本 的に不可能であり、摩擦後の表面を観察し、発生した現象を推測するに留まる.そのため、 摩擦現象のメカニズムを解明するにはシミュレーションが有効である.

固体間摩擦を取り扱うシミュレーション手法として,有限要素法(Finite Element Method: FEM)と古典分子動力学法(MD)が広く用いられている.FEMの接触摩擦解析を含んだ解 析は工学的に幅広く応用されている.しかし,FEMにおける摩擦係数は入力パラメータで あり,また固体間摩擦現象の本質である凝着や掘り起こしを扱うことはできない.そのため, 非凝着の弾性接触解析等には適用できるものの(例えば[15]),摩擦現象そのものの解明に 適用するのは困難である.この問題に対し,世古口は Cohesive Zone Model を用いて凝着摩 擦を再現した[16].

MD は凝着や掘り起こし、第三物体の存在や原子レベルの表面粗さなど、摩擦を発生させるのに重要だと考えられている様々な要因をモデリングすることができるため、摩擦現象の解明を目的とした研究に利用されてきた。例えば Burnham らは、AFM の実験時に表面間の凝着によってカンチレバーに不安定性が生じることを指摘し、MD によってそのメカニズムを解明した[17]. Soresen らは銅表面上に銅の短針を滑らせる MD シミュレーションを行い、金属の面方位に摩擦・摩耗メカニズムが依存することを発見した[18].

これらの研究のような AFM による実験を模擬した MD に加えて,より一般的でスケール の大きなモデルを用いた MD も行われている. Zhang らはダイヤモンドの突起と flat な Cu 間の二次元摩擦解析を押し込み深さを変えて行い,押し込み深さを大きくするにつれて摩 擦・摩耗メカニズムが(1) no wear regime (2) adhering regime (3) ploughing regime (4) cutting regime の4つのモードに変化していくことを示した[19]. Li らは flat な NiAl 平面間の摩擦 解析を行い、マクロスケールでの理論と同様に、ミクロスケールな弾性変形がミクロなステ ィックスリップ運動を引き起こしていることを明らかにした[20].また彼らは、有限温度に おける Ni 平面-Al 平面間および NiAl 平面間の摩擦解析を行い、摩擦最中に発生する熱の多 くが塑性変形によるものであると主張した[21].Qiら[14]や Tartaglinoら[22]は、原子レベル でflat な平面間では FK モデルで予想されるような超潤滑現象が MD で再現される一方で、 わずかでも表面粗さが存在すると有限の摩擦が発生することを計算により示した.Moらは 水素終端アモルファスカーボンの単一半球と平板間の摩擦解析を行い、凝着力を考慮しな い場合はマクロな固体間摩擦理論と結果が一致するが、凝着力を考慮すると JKR 理論[23] や DMT 理論[24]で予想されるように垂直荷重と接触面積が非線形な関係になり、マクロな 理論がそのまま適用できないことを計算で示した[25].Spijker らは、セルフアフィンフラク タル表面をもつ Al 間に働く摩擦力を、表面粗さ、滑り速度、温度、荷重を変化させて計算 し、それぞれのパラメータが摩擦に与える影響を調査した[26]-[28].

このように MD を用いて摩擦現象を解明する試みが多数行われているが, MD は扱える 空間スケールが~数十 nm と小さいため, ナノスケールの現象しか再現されない. これより 大きな空間スケールで起こる現象を捉えるために, 空間スケールが摩擦現象に与える影響 についての研究もなされている. 梶田らは固体間摩擦を二次元のばねマスモデルを用いて モデリングし, グリーン関数を用いて無限の空間スケールにおける摩擦係数を解析的に計 算した[29]-[31]. 彼らはスティックスリップ時に発生する低周波数の弾性波を表現するため に, 厚さ方向にある程度の空間スケールが必要であることを示した. Zhang らは剛体円筒と flat な平面の間の摩擦を二次元 MD を用いて計算し, 空間スケールを大きくしていくと転位 が発生しやすくなり摩擦力が下がることを示した[32]. Aghababaei らは二次元 MD を用いて 半円状の突起を 1 つもつ表面間の摩擦解析を行い, 空間スケールが小さいと突起は表面か ら滑らかに潰されていくが, 空間スケールを大きくしていくと突起が根元から折れて摩耗 粉の核となり, その核が成長して摩耗粉が形成されていく過程を再現した[33]. また彼らは その 2 つの摩耗モードのどちらが発生するかを決定する Critical length scale の理論式を提案 し, 実験で観察されていた現象をよく説明した.

このように、摩擦現象のマルチスケール性についての研究は二次元解析で行われてきた. しかし、本来の原子は三次元的な構造をしており、その構造によって転位の発生などの様々 な現象が支配されている.そのため、二次元解析で摩擦現象を正確に再現できているかは不 明である.しかし MD で扱える空間スケールには限界があるため、表面テクスチャ形状や 表面粗さ等の複雑な形状を十分大きな空間スケールまで考慮した三次元摩擦解析を行うの は非常に困難である.

この課題を解決する手法として,FEM-MD 連成解析が期待されている.FEM-MD 連成解 析とは、ミクロスケールの現象を再現したい部分を MD で、それ以外を連続体と見なして FEM でモデリングし、両者を空間的に結合する手法であり、これまでに様々な連成手法が 提案されている[34],[35]. Luan らは表面を MD,内部を FEM でモデリングすることで固体 間摩擦解析の二次元 FEM-MD 連成解析を行った[36], [37]. しかし彼らは, 2 つの固体のう ち片方を flat な剛体薄膜でモデリングしている. 彼らはこのモデリングの妥当性について, 表面粗さ $h_1 \ge h_2$ の間の接触は表面粗さ $h_1 - h_2 \ge$ flat な表面の間の接触と等価であるという 弾性接触理論を根拠としており, その理論に合うように原子間ポテンシャルに表面間の凝 着と塑性的効果を無視した harmonic potential を使用した. しかし,現実の一般的な摩擦は接 触理論のみでは説明されず, 凝着の効果を無視できず,表面の塑性変形を伴った複雑な現象 が発生する. そのため固体間摩擦現象を解析によってより精度よく再現するためには, 2 つ の固体の表面形状を考慮し,両固体とも弾塑性的な変形を許容するようなモデリングをす る必要がある. しかし, FEM-MD 連成解析を用いたそのような摩擦解析はまだ行われてい ない.

また、マルチスケール性を考慮した大規模な固体間摩擦解析を行うためには、ごく一部の 真実接触領域を MD で、その他を FEM でモデリングする必要がある.しかし摩擦解析では 時間発展とともに真実接触領域が移動するため、その移動と共に MD 領域も移動する必要 がある.しかしそのような計算のモデル化はまだ行われていない.

1.3 研究の目的

従来の研究に基づき本研究では,マルチスケール制を考慮した大規模な固体間摩擦解析のための FEM-MD 連成解析手法の開発を目的とする.

従来の FEM-MD 連成手法の固体間摩擦解析はモデリングや境界条件に制約があるため、 そのまま適用することができない.本研究では固体間摩擦解析へ応用できるように従来の 手法を修正した手法を提案し,提案手法の Verification を行う.

また本研究では、真実接触領域近傍のみを MD でモデリングし、真実接触領域の移動と 共に MD 領域を移動させる計算モデルを提案する.また、実際に提案したモデリング手法 の Verification を行う.

1.4 本論文の構成

本論文の構成を以下に示す.

第1章「序論」

本研究の背景,従来の研究,および研究の目的を述べる.

第2章「表面粗さパワースペクトル」

固体表面の統計的特性を表す表面粗さパワースペクトルおよびセルフアフィンフラクタ ル性について説明する.

第3章「固体間摩擦解析のための FEM-MD 連成手法の開発」

既存の FEM-MD 連成手法を固体間摩擦解析に応用する際の問題点を指摘し、それらの問題点を修正した FEM-MD 連成手法を提案する.

第4章「表面粗さ形状を考慮した固体間摩擦解析」

提案した連成手法を用いて固体間摩擦解析を行い、結果について考察する.

第5章「Shifting Region Modelの提案と検証」

真実接触領域の近傍のみを MD でモデリングし,真実接触領域の移動とともに MD 領域 も移動する計算モデルである Shifting Region Model を提案する.

第6章「結論と今後の課題」

本研究の結論と今後の課題について述べる.

2 表面粗さパワースペクトル

2.1 表面粗さパワースペクトルの定義および計算手法

2.1.1 表面粗さパワースペクトルの定義

固体表面は一見滑らかに見えるが、ミクロに観察すると凹凸した表面粗さが存在し、様々 なスケールの山や谷で構成されている.そして、表面粗さの形状によって固体間の摩擦係数 は変化することが広く認められている.表面粗さを表現する指標として、工学的には算術平 均粗さ(*R_a*)や二乗平均平方根粗さ(Root Mean Square: RMS)が広く用いられているが、こ れはマクロスケールの表面粗さを表現するに留まるため、表面粗さと固体間摩擦の関係を 詳細に議論するためには、メゾ・ミクロスケールを含む幅広いスケールに対応する指標が必 要である.

表面粗さのマルチスケール性を表現するのに有効な指標として、表面粗さパワースペクトルがある.表面粗さパワースペクトルは以下のように定義される[38][39].

$$C(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2x \, \langle h(\mathbf{x} + \mathbf{\tau}) h(\mathbf{\tau}) \rangle e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}$$
(2-1)

ただし、 $h(\mathbf{x})$ は位置 $\mathbf{x} = (x, y)$ における高さプロファイルであり、 $\langle \cdots \rangle$ はアンサンブル平均を 表す.路面表面の統計的性質は基準位置に依らないと仮定しているため、高さプロファイル において $h(\mathbf{x_0} + \mathbf{x})h(\mathbf{x_0}) = h(\mathbf{x})h(\mathbf{0})$ であることに注意されたい.つまり、路面の表面粗さパ ワースペクトルは、路面表面の高さプロファイルの自己相関関数を計算し、そのアンサンブ ル平均をフーリエ変換したものと定義される.物理的には、固体表面の表面粗さパワースペ クトルは、固体表面の凹凸の波数成分ごとの強さであると表現できる.

2.1.2 計算手法

式(2-1)に基づいて表面粗さパワースペクトルを数値的に計算するためには、高さデータ h(x)の自己相関関数を求める必要があり、計算時間が大きくなり得る.そこで、式(2-1)を展 開することで、自己相関関数を求めずに、表面粗さパワースペクトルを計算する[40].

高さデータ $h(\mathbf{x})$ について,測定長さをLとし測定範囲の面積を $A(=L^2)$ とすると,自己相関数は次式で表される.

$$\langle h(\mathbf{x} + \mathbf{\tau})h(\mathbf{\tau}) \rangle = \lim_{A \to \infty} \frac{1}{A} \int d^2 \tau h(\mathbf{x} + \mathbf{\tau})h(\mathbf{\tau})$$
 (2-2)

これを式(2-1)に代入すると,

$$C(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \lim_{A \to \infty} \frac{1}{A} \int d^2 x \int d^2 \tau h(\mathbf{x} + \mathbf{\tau}) h(\mathbf{\tau}) e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x}}$$
(2-3)

と表される.ここで、高さh(x)のフーリエ変換をH(q)と定義すると、

$$h(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2 q \, H(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}$$
(2-4)

で表わされるので、式(2-4)を用いて式(2-3)を整理すると、

$$C(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^4} \lim_{A \to \infty} \frac{1}{A} \int d^2 x \int d^2 \tau \int d^2 q' \int d^2 q'' H(\mathbf{q}') H(\mathbf{q}'') e^{i(\mathbf{q}' + \mathbf{q}'') \cdot \mathbf{\tau}} e^{i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{x}}$$
$$= \lim_{A \to \infty} \frac{1}{A} H(\mathbf{q}) H(-\mathbf{q})$$
(2-5)

が得られる.ただし,式(2-5)中の変換には,以下に示されるフーリエ変換とデルタ関数の公式を用いた.

$$\int d^2 x \, e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} = (2\pi)^2 \delta(\mathbf{q})$$
$$\int d^2 q' \, H(\mathbf{q}') \delta(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) = H(\mathbf{q})$$

さらに,

$$H(\mathbf{q}) = \int d^2 x \, h(\mathbf{x}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}$$
$$= \int d^2 x \, h(\mathbf{x}) \cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}) + i \int d^2 x \, h(\mathbf{x}) \sin(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x})$$
$$H(-\mathbf{q}) = \int d^2 x \, h(\mathbf{x}) \cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}) - i \int d^2 x \, h(\mathbf{x}) \sin(\mathbf{q}\cdot\mathbf{x})$$

であるから, H(-q)はH(q)の複素共役であることがわかる. したがって, 式(2-5)(2-5)は,

$$C(\mathbf{q}) = \lim_{A \to \infty} \frac{1}{A} |H(\mathbf{q})|^2$$
(2-6)

と表される.以上より,高さデータ $h(\mathbf{x})$ の自己相関関数を求めずに, $h(\mathbf{x})$ のフーリエ変換 $H(\mathbf{q})$ を計算することで表面粗さパワースペクトル $C(\mathbf{q})$ を算出することができる.ここでは 固体表面の等方性を仮定しているため,固体表面の表面粗さパワースペクトルは波数ベク トル \mathbf{q} の絶対値 $|\mathbf{q}| = q$ のみに依存する.よって,波数ベクトル \mathbf{q} のスカラーqを用いて2次元 データ $C(\mathbf{q})$ を1次元データC(q)に変換して表現する.

上記をもとに,表面高さデータから表面粗さパワースペクトルを生成するプログラミン グコードを付録 A に記す.

また,表面粗さパワースペクトル $C(\mathbf{q})$ より二乗平均平方根粗さ h_{rms} を表現することができる.ここで,二乗平均平方根粗さ h_{rms} は,

$$h_{rms}^2 = \lim_{A \to \infty} \frac{1}{A} \iint_A d^2 x \ |h(\mathbf{x})|^2$$
(2-7)

で定義される.ここで、Persevalの定理より

$$\iint_{A} d^{2}x |h(\mathbf{x})|^{2} = \frac{1}{(2\pi)^{2}} \iint d^{2}q |H(\mathbf{q})|^{2}$$
(2-8)

であるため、式(2-6)、(2-8)を(2-7)に代入することで、h_{rms}は

$$h_{rms}^2 = \lim_{A \to \infty} \frac{1}{A} \frac{1}{(2\pi)^2} \iint d^2 q \ |H(\mathbf{q})|^2$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \iint d^2 q \quad \lim_{A \to \infty} \frac{1}{A} |H(\mathbf{q})|^2$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \iint d^2 q \quad \mathcal{C}(\mathbf{q}) \tag{2-9}$$

と表される.ここで、測定領域を円とする.固体表面の等方性を仮定していることから、波数空間を直交座標から極座標へ座標変換すると、

$$\begin{cases} q_x = q \cos \phi \\ q_y = q \sin \phi \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} dq_x = \cos \phi dq - q \sin \phi d\phi \\ dq_y = \sin \phi dq + q \cos \phi d\phi \end{cases}$$
$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} dq_x \\ dq_y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \phi & -q \sin \phi \\ \sin \phi & q \cos \phi \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dq \\ d\phi \end{bmatrix}$$

右辺の行列式||/は,

$$|J| = q\cos^2\phi + q\sin^2\phi = q.$$

よって,

$$\mathrm{d}^2 q = \mathrm{d} q_x \mathrm{d} q_y = q \, \mathrm{d} q \mathrm{d} \phi.$$

以上より,式(2-9)は次式のとおりとなる.

$$h_{rms} = \left\{ \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int dq \ qC(\mathbf{q}) \right\}^{\frac{1}{2}} \\ = \left\{ \frac{1}{2\pi} \int dq \ qC(\mathbf{q}) \right\}^{\frac{1}{2}}$$
(2-10)

2.2 セルフアフィンフラクタル表面

自然生成された表面は、多くの場合セルフアフィンフラクタル表面であることが知られ ている.セルフアフィンフラクタル表面とは、表面の観察倍率を上げる際、高さを平面座標 とは異なる倍率で表示すると、観察倍率を上げる前の表面と同じ表面プロファイルが見ら れる表面のことである.具体的には、次のようなスケール変換を考える.

$$x \to \zeta x, y \to \zeta y, z \to \zeta^H z,$$
 (2-11)

このとき、表面の統計的性質が倍率変更前後で変化しない表面がセルフアフィンフラクタル表面である.ここで、*H*は Hurst 数であり、フラクタル次元 D_f と、 D_f =3-Hの関係がある.さらに、セルフアフィンフラクタル表面では、

$$C(q) \sim q^{-2(H+1)}$$
 (2-12)

の関係が成り立つ. 自然に生成された一般的な表面形状に見られるパワースペクトルと波数の関係を Fig. 2-1 に示す. ここで、セルフアフィンフラクタル性は、 $q_0 < q < q_1$ の範囲で みられる. q_0 はロールオフ波数であり、セルフアフィンフラクタル性を示す波数の最小値 を示す. q_1 はカットオフ波数であり、その波数は分子スケールである.



Fig. 2-1 : The surface roughness power spectrum of a surface with a self-affine fractal for $q_0 < q < q_1$.

2.3 セルフアフィンフラクタル表面の作成手法

2.1節では,表面の高さデータから表面粗さパワースペクトルを求める方法について述べ, 2.2節では得られた表面粗さパワースペクトルが現実の表面ではセルフアフィンフラクタル 性を示すということについて述べた.本節では,コンピュータシミュレーションなどで疑似 表面を作成する際に必要な,セルフアフィンフラクタル性を仮定した表面粗さパワースペ クトルから表面の高さデータを生成する方法について述べる.

代表的な手法として, Midpoint Displacement 法[41]と Fourier Filitering 法[42]が知られている. Midpoint Displacement 法は再帰的なアルゴリズムであり,高速に疑似表面の高さデータを生成することができる.また,この手法を修正した Square Subdivision 法[43]も提案されている.

本研究では、Fourier Filtering 法を使用する.この手法は表面粗さパワースペクトルを逆フ ーリエ変換することで、表面高さデータを生成する.そのため周期境界が仮定されてしまい、 真に現実の表面を再現することはできないが、古典分子動力学などの周期境界条件をよく 用いる計算手法には適している.

高さデータの離散逆フーリエ変換は,

$$h(x_i, y_j) = \frac{1}{N^2} \sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} H_{k,l} e^{2\pi i (\frac{k}{N} x_i + \frac{l}{N} y_j)}$$
(2-13)

と表される.式(2-13)より,離散フーリエ係数 $H_{k,l}$ を求めることができれば,離散高さデー $\mathcal{P}h(x,y)$ を生成することができる.

また、固体表面の等方性を仮定すると、表面粗さパワースペクトルは波数ベクトル**q**の 絶対値 $|\mathbf{q}| = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$ のみに依存するため、表面粗さパワースペクトル $C(q_x, q_y)$ は

$$C(q_x, q_y) \propto \left(\sqrt{q_x^2 + q_y^2}\right)^{-2(H+1)} = \frac{1}{\left(q_x^2 + q_y^2\right)^{H+1}}$$
(2-14)

と表すことができる.更に、式(2-2)、(2-6)より、測定範囲の面積Aが有限であるとき、

$$C(k,l) \propto \langle \left| H_{k,l} \right|^2 \rangle$$
 (2-15)

である. 式(2-14), (2-15)より,

$$\langle |H_{k,l}|^2 \rangle \propto \frac{1}{(k^2 + l^2)^{H+1}}$$
 (2-16)

が成立する.

式(2-16)が成立するように $H_{k,l}$ を求めることで、式(2-13)より離散高さデータ $h(x_i, y_j)$ を求めることができる.ただしh(x, y)は実数であるため、式(2-16)に加えて $H_{k,l}$ は次の条件を満た

す必要がある.

$$H_{N-k,N-l} = \overline{H_{k,l}} \qquad \text{for } k, l > 0, \tag{2-17}$$

$$H_{0,N-l} = \overline{H_{0,l}}$$
 for $l > 0$, (2-18)

$$H_{N-k,0} = \overline{H_{k,0}}$$
 for $k > 0$, (2-19)

$$H_{0,0} = \overline{H_{0,0}} \qquad . \tag{2-20}$$

上記は正方形領域を仮定していた.一般に、x方向の離散点数をN、y方向の離散点数をMとし、離散点の間隔がx、y方向ともに同じだった場合、波数空間上で座標(k,l)に対応する 波数(q_x , q_y)には

$$q_x \propto \frac{k}{N}, \qquad q_y \propto \frac{l}{M}$$
 (2-21)

の関係が成立するため、式(2-16)は代わりに

$$\langle \left| H_{k,l} \right|^2 \rangle \propto \frac{1}{\left(\left(\frac{k}{N} \right)^2 + \left(\frac{l}{M} \right)^2 \right)^{H+1}}$$

$$\propto \frac{1}{\left(k^2 + \left(\frac{N}{M} \right)^2 l^2 \right)^{H+1}}$$
(2-22)

となる.上記をもとに,Hurst 数から表面高さデータを生成するプログラミングコードを付録 Bに記す.

上記の手法は、指定の Hurst 数をもつ表面高さデータを生成するだけであり、各離散点 (x_i, y_j) の間隔 Δx や二乗平均平方根粗さ h_{rms} は決定されない.それらの値は、下記に示す、表面粗さパワースペクトル $C(q_x, q_y)$ と Δx 、 h_{rms} の関係から決定する.

C(q)が $q_0 < q < q_1$ の範囲で

$$C(q) = K_0 q^{-2(H+1)}$$
(2-23)

と表されるとする.離散点の間隔を∆x,個数をNとすると、測定範囲Lは

$$L = N\Delta x \tag{2-24}$$

となり、表面高さデータに含まれる最大波数 q_{max} と最小波数 q_{min} は

$$q_{max} = \frac{2\pi}{\Delta x} \tag{2-25}$$

$$q_{min} = \frac{2\pi}{L} \tag{2-26}$$

である.式(2-10)に(2-23), (2-25), (2-26)を代入すると、以下の関係式が得られる.

$$h_{rms} = \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_{q_{min}}^{q_{max}} K_0 q^{-2H-1} dq \right\}^{\frac{1}{2}}$$
$$= \left\{ \frac{K_0}{4\pi H} \left(q_{min}^{-2H} - q_{max}^{-2H} \right) \right\}^{\frac{1}{2}}$$
(2-27)

この手法では、セルフアフィンフラクタル性を示さない、ロールオフ波数より小さな波数領域を含む高さデータを再現できない.より一般的な高さデータを生成する手法は Persson が提案している[40].

3 固体間摩擦解析のための FEM-MD 連成手法の開発

3.1 FEAt/CADD 法

3.1.1 **FEAt/CADD 法のアルゴリズム**

マルチスケール解析手法の1つとして、ミクロスケールの現象を再現したい部分を MD で、それ以外を連続体と見なして FEM でモデリングし、両者を空間的に結合する FEM-MD 連成手法がある.これまでに様々な手法が提案されている[34],[35]が、本研究では FEAt/CADD 法に属する手法[36],[37],[44]–[52]を対象とする.

他手法と比較して,FEAt/CADD 法には以下の利点がある.

- (1) 計算精度, 効率が高い[35]
- (2) カットオフ距離の長い原子間ポテンシャルを用いても, gorst force が発生しない[35]
- (3) MD の原子と FEM の節点を1対1対応させる必要がない[36], [49]-[51]
- (4) MD と FEM の結合領域の形状に対する制約がない
- (5) MDと FEM を独立に計算するため、実装がシンプルであり拡張性が高い[36], [47]-[51]
- (6) 連成手法を応用した研究結果例がある[52][37]



Fig. 3-1 : FEAt/CADD based method.

本研究でベースとして用いる,FEAt/CADD 法に属する手法を,Fig. 3-1 を用いて説明する.この手法では,MD 領域である Region1 (白丸で図示),FEM 領域である Region4 (白格子で図示)に加えて,FEM-MD 結合領域として原子と節点が共存する Region2 (赤丸,格子で図示), Region3 (青丸,格子で図示)の2 層を新たに設ける.以下の手順で計算を行う.

- (1) Region3 の原子を固定し, Region1~Region3 の原子について MD 計算を数ステップ実行 する.
- (2) Region2 の原子の変位の低周波成分を計算する.
- (3) 手順(2)で計算した原子変位から、最小二乗法を用いて節点変位を外挿する.
- (4) 手順(3)で計算した節点変位を変位境界条件として、Region2~Region4 で FEM 計算を実行する.
- (5) 手順(4)で計算した節点の変位から, Region3の原子の変位を内挿し, 座標を更新する.
- (6) (1)~(5)を繰り返し実行する.

手順(2)で変位の低周波成分を計算するにあたり、Qu らは原子変位の時間平均をとることで計算し[48], Mathew らはより一般に時間についてのローパスフィルタを用いることで計算した[49]. Ramisetti らは、時間についてのフィルタでは位相遅れが生じることを指摘し、空間的ローパスフィルタを用いることを提案した[50], [51]. カットオフ周波数については、通常は原子の Phonon 分散曲線を元に、振動数が波数の一次関数で近似できる振動数領域で定める.

手順(3)において,原子変位から節点変位への外挿は以下のように行う.Region2の原子の平衡位置における座標をX,平衡位置からの変位をuとし,節点の変位をdとする.節点変位dから内挿される仮の原子変位ucは形状関数マトリックスN = N(X)を用いて以下のように対応づけられる.

$$\mathbf{u}_{\rm c} = \mathbf{N}\mathbf{d} \tag{3-1}$$

Region2 における原子と節点の変位差を最も小さくするには、変位差の二乗和

$$\mathbf{R} = (\mathbf{u}_{c} - \mathbf{u})^{2} = (\mathbf{N}\mathbf{d} - \mathbf{u})^{2}$$
(3-2)

を最小にすればよい.従って,

$$\frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{d}} = \mathbf{0} \tag{3-3}$$

を解くことにより, FEM の変位 d は

$$\mathbf{d} = (\mathbf{N}^{\mathrm{T}}\mathbf{N})^{-1}\mathbf{N}^{\mathrm{T}}\mathbf{u}$$
(3-4)

と求めることができる.なお、N^TNは数学的に対称行列となり、またNは成分のほとんど

が0であるスパース行列であるため、N^TNは対称スパース行列となり、逆行列は高速に求めることができる.

上記の手法は節点変位の周期境界条件を考慮していない.本研究では,FEM にて周期境 界条件を課すときは2つの境界端のうち片方をマスター,もう片方をスレーブとし,マス ターに属する節点の変位をスレーブに属する節点の変位に上書きすることにする.

またこの手法では、Region2、Region3の原子について、平衡位置における座標から対応する FEM 要素における局所座標を求める必要がある.この計算方法については付録 C で示す.

Region2 の厚さは任意であるが, FEM のある要素内に存在する原子数がその要素を構成 する節点数以上ないと,式(3-4)が解けない可能性がある.また Region3 の厚さは,原子間ポ テンシャルのカットオフ距離以上に取らなければならない.

3.1.2 FEAt/CADD 法の問題点

FEAt/CADD 法では、連成領域中に存在する原子の平衡位置が変化しないことを前提としている。そのため、もし連成領域に凸型表面が存在した場合、表面上の不安定な原子が現在の平衡位置から別の平衡位置に移動した際に計算が破綻する。

マルチスケール性を考慮した大規模な摩擦解析を行う際に,突起先端などの真実接触部 付近のみを MD でモデリングし,非接触部の形状を FEM でモデリングする必要がある. その際, Fig. 3-2 で示すように FEM と MD の連成領域に凸型表面が生じてしまうため,既 存の FEAt/CADD 法をそのまま適用することができない.

また, FEAt/CADD 法では外力の作用による系の並進運動を正しく再現することができない. 具体的な計算による例については 3.5 節で示す.

上記問題点の考えられる原因について, Fig. 3-3 を用いて説明する. Fig. 3-3(a)に示すよう に, MD の計算中は Region3 の原子が固定されていることにより, Region2 の原子の変形に は限界があり,大変形の一種である並進運動をすることができない. 結果として,原子の微 小変形のみを節点に伝えることになり, Fig. 3-3(b)に示すように FEM の計算時にも Region3 の節点が微小変形しかできない.

本章の以降の節では,連成領域中に凸型表面が存在するときに安定した計算を行う Mixed Region 法(MR法)と,外力の作用による系の並進運動を正しく再現する Velcity Constrained Region 法(VCR法)を提案する.



Fig. 3-2 : A model which has a convex surface in the FEM-MD transition Region.



Fig. 3-3 : Cause of the problem of conventional FEAt/CADD method.

3.1.3 FEAt/CADD 法に基づく FEM-MD 連成シミュレータの作成

本研究で実際に FEM-MD 連成解析を行う際に用いるシミュレータについて述べる.

古典 MD の計算には LAMMPS[53], [54]のソースコードを用いた. FEM のプログラムと 3.1.1 項で述べたアルゴリズムに基づく FEM-MD 結合プログラムは自作し, LAMMPS に実 装した. ただし,本研究で使用する FEM は全て幾何学的,材料的線形の枠組みで解いている.

本論文の以降で提案する手法についても全て LAMMPS に追加実装し、計算を行った.
3.2 Mixed Region 法(MR法)の提案

本節では、連成領域に凸型表面を有する系の連成手法として Mixed Region 法を提案する. 提案手法の概要図を Fig. 3-4 に示す.提案手法では、Region2 の原子のうち表面付近にい るものを Region1 の原子と同様に扱う、Mixed Region を設ける.すなわち、原子の変位を節 点に伝える時に、内部原子(Fig. 3-4 の赤丸)の変位のみを使用する.この手法を用いるこ とで、MD 内部の安定なバルクの情報のみを FEM に伝えることができ、計算が安定化する.



Fig. 3-4 : Mixed Region method.

3.3 MR法を用いた半球-平板間の凝着接触解析

本節では 3.2 節で提案した Mixed Region 法の適用例として,半球-平板間の凝着接触解析 を行い,結果を JKR 理論[23]と比較して Verification を行う.

3.3.1 計算条件

半径 50 [nm]の半球断面を変位制御して十分大きな平板と接触させ、半球断面に加わる荷 重を求める.このとき半球、平板それぞれにおいて接触部付近を MD で、それ以外を FEM でモデリングする.半球表面上の原子は不安定であるため、3.2 節の提案手法を用いてモデ リングする.

計算モデルの寸法を Fig. 3-5 に示す. (a)は系全体の寸法, (b)は半球の連成領域の詳細な 寸法, (c)は平板の連成領域の詳細な寸法, (d)は(a)-(c)で用いた文字の実際の数値である. た だし(c)において, Region1 の形状は直方体であり, Region2, Region3, Region4 は升の形状で ある. また FEM のメッシュは全て 20 節点 6 面体二次要素を使用する. 実際のメッシュサ イズを Fig. 3-6 に示す.

MD で用いる原子は Al とし、ポテンシャルの関数形は EAM を、パラメータは Winey ら が提案したもの[55]を用いる. 1.0 [K]における格子定数を 0.402494 [nm]とし、Fig. 3-5 を元



に原子を配置する. このとき半球, 平板のどちらも(001)面が z 軸と平行になるように配置 し, 半球-平板間において比が 1 の commensurate 構造をとるようにする (commensurate 構造 については 1.2.2 項参照).

本計算で用いた, 3.2節の提案手法を適用した半球のモデリング手順を示す.まず Region3 の原子を固定して MD を実行し Region1, Region2 の原子を十分に緩和させる.次に, Region2 に存在する原子について,半径 0.6 [nm]以内に存在する近接原子数が 45 個未満であるもの を表面原子であると見なし, Mixed Region を作成する.この条件で実際に作成された Mixed



Fig. 3-6 : Mesh sizes of FEM elements for the adhesive contact analysis.





Region を Fig. 3-7 に示す. Fig. 3-7 は x 軸に垂直な半球の断面図であり,原子について白色 が Region1,赤色が Region2,青色が Region3 であり,FEM メッシュについて橙色が Region2, 水色が Region3, 白色が Region4 である. 橙色の FEM メッシュの中に赤色の原子と白色の 原子が共存している領域が Mixed Region である.

半球断面から平板表面までの距離が半球の半径と等しくなる位置を基準として、半球断面に 20 [m/s]の速さで z 方向の強制変位を与えて十分緩和させ、半球断面が z 方向に受ける荷重を求める. ただし平板の底の節点は固定する. 強制変位が -0.75, -0.50, -0.25, 0.0, 0.25, 0.50, 0.75, 1.0 [nm]の 8 通りの条件について計算を行う.

詳細な MD の計算条件を Table 3-2 に, FEM の計算条件を Table 3-1 に示す.本計算では 熱的ゆらぎの影響を抑えるために,温度を 1.0 [K]で制御する.

本計算では MD を 100 step 計算する度に FEM を計算し,原子変位の 100 step 間にわたる 時間平均を FEM に伝える.この時間平均によるカットオフ周波数を求める.

平均値フィルタのカットオフ周波数fcutは、サンプリング周波数fs, サンプル数Nを用いて

$$f_{cut} = \frac{0.443}{\sqrt{N^2 - 1}} f_s \tag{3-5}$$

と表される. MD のタイムステップは 0.001 [pico sec.]であるため $f_s = 1000$ [THz]であり、ま たN = 100であることから、本計算では原子の変位に $f_{cut} = 4.43$ [THz]のローパスフィルタ をかけていることになる.本計算で使用している Al のフォノン分散曲線は、4.43 [THz]以下 においてほぼ直線で表されている[55]ため、このカットオフ周波数は妥当である.

Interatomic potential	Al: EAM (Winey et al [55])
Lattice constant	0.402494 [nm]
Ensemble	NVT ensemble
Thermostat	Nosé-Hoover thremostat
Temperature	1.0 [K]
Timestep	0.001 [pico sec.]

Table 3-2 : Calculational condition of MD.

Table 3-1 : Calculational condition of FEM.

Element	20-node hexahedron (second order element)
Number of integration points	27 (full integration)
C ₁₁	120.094 [GPa]
C ₁₂	61.774 [GPa]
C ₄₄	31.493 [GPa]
Timestep	0.1 [pico sec.]
Time integration	Static (implicit method)

3.3.2 計算結果

計算結果を Fig. 3-8 に示す. 縦軸は半球にかかる垂直方向荷重, 横軸は半球に与えた垂直 方向変位であり, 正の変位が引き剥がし方向, 負の変位が押し込み方向に対応する. 提案手 法による結果を四角で, JKR 理論曲線を破線で示してある. ただし JKR 理論曲線を求める 際に必要な表面エネルギー $\gamma_{(001)}$ は, 別の古典 MD 計算により $\gamma_{(001)} = 9.12 \times 10^{-4}$ [N/mm] と求めた.

Fig. 3-8 から分かるように、JKR 理論が成立する変位 $\delta < 0.3$ の範囲では提案手法による 計算結果とJKR 理論曲線がよく一致した.しかし、JKR 理論で凝着が切断される $\delta > 0.3$ の範囲においても提案手法では凝着が切断されず、変位の増加とともに垂直荷重も緩やか に増加し、 $\delta = 0.75$ [nm]で垂直荷重が最大となった後、 $\delta = 1.0$ [nm]で減少した.

 $\delta = -0.75$ [nm]および $\delta = 0.5$ [nm]における凝着接触解析の最終状態における z 方向変 位分布を Fig. 3-9, Fig. 3-10 に示す. ただし図は系を x 方向に垂直な面で切断したときの断 面図である. また,半球のメッシュにひびのような線が入っているのは可視化に用いたソ フトウェア ParaView[56]の仕様であり,計算結果との関連はない.

変位場が FEM と MD で連続しているが、これは FEM-MD 間で変位をやり取りする FEAt/CADD 法の特徴である.また接触領域の境界において平板の変位が正の z 方向に上昇 している.これは原子間の相互作用によって半球-平板間に引力が働いているからであり、 本計算によって凝着接触解析特有の変位場が再現されたことが分かる.



Fig. 3-8 : Result of the adhesive contact analysis between the hemisphere and the flat plate.



Fig. 3-9 : Cross-section map of the z-direction displacement at $\delta = -0.75$.

(FEM メッシュにひびが入っているように見えるのは ParaView で可視化したときの仕様であり,計算結果に関係はない. MD 領域中に不連続な面が見られるのは,離散的な原子集団を断面図で可視化しているためである.)



3.3.3 考察

JKR 理論が成立する範囲では提案手法の結果が JKR 理論とよく一致したため,提案手法 および本計算の結果は妥当であったと考えられる.

JKR 理論では真球を仮定しているが,古典 MD では離散的な形状しか作成できない.こ れについて Luan らは,JKR 理論が成立する範囲において表面の離散的形状は荷重-変位曲 線にほとんど影響を与えないことを報告している[57].そのため本計算においても表面の離 散的な形状は結果に影響を与えていないと考えられる.

 $\delta = 0.5$ [nm]において提案手法で凝着が切断されなかったのは、離散的形状を持った半球 の平面部と平板が commensurate 構造をなして凝着しているためであると考えられる. JKR 理論では連続体を仮定しており、変位の変化に伴って接触面積も連続的に変化するが、本計 算は半球の表面形状のために接触面積が離散的に変化すると考えられる. また本計算では、 半球モデルの最下層は平面になっているため、平板と隙間なく密着し、また commensurate 構造であるため、凝着の切断を進展させるには複数の原子間結合を同時に切断しなければ ならない.

簡単な理論式から上記考察の妥当性を確認する.上記のような条件において凝着が切断 されるためには、凝着の切断によって新たに表面が生成されることによるエネルギー増分 よりも、解放される弾性エネルギーの方が大きいことが条件である.凝着が切断されたとき に解放される弾性エネルギーδ*E*_{elastic}は弾性論より

$$\delta E_{elastic} = \frac{8}{15} E^* \sqrt{R} \delta^{\frac{5}{2}} \tag{3-6}$$

と与えられる.ただしRは球の半径、 δ は変位であり、 E^* は球、平板のヤング率とポアソン 比をそれぞれ E_1 、 ν_1 、 E_2 、 ν_2 としたとき

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1 - \nu_1^2}{E_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{E_2}$$
(3-7)

と与えられる.また、新たに表面が生成されることによるエネルギー増分δEsurfは

$$\delta E_{surf} = 2\gamma A \tag{3-8}$$

である.ただし γ は表面エネルギー,Aは接触面積である.また本考察ではAは球の最下層の 原子数の数Nに比例するとし、また格子定数Lの FCC 構造の(001)表面では原子 1 つあたり $L^2/2$ の面積を占めるとして、

$$A = \frac{NL^2}{2} \tag{3-9}$$

と求めることにする.

Fig. 3-5 および Table 3-2, Table 3-1 に示した値と,本計算ではN = 349であることから,式(3-6), (3-8)より

 $\delta E_{elastic} = 2.97 \times 10^{-8} \text{ [nJ]}$ $\delta E_{surf} = 5.16 \times 10^{-8} \text{ [nJ]}$

と求まる.よって $\delta E_{elastic} < \delta E_{surf}$ となることから、 $\delta = 0.5$ [nm]において凝着が切断され なかったことが弾性論的にも確認された.

 $\delta = 0.75 \text{ [nm]} では$

$$\delta E_{elastic} = 8.19 \times 10^{-8} \text{ [nJ]}$$

であり $\delta E_{elastic} > \delta E_{surf}$ となるため弾性論的には凝着が切断されるが、本計算では凝着は切断されなかった.この原因を考察するために、 $\delta = 0.5$ 、0.75、1.0[nm]における半球先端部のz方向変位分布図をそれぞれ Fig. 3-11、Fig. 3-12、Fig. 3-13 に示す.

Fig. 3-11, Fig. 3-12, Fig. 3-13 から, $\delta = 0.5$ [nm]において確認される原子層のうち下から 1~3 層目が, $\delta = 0.75$, 1.0 [nm]では塑性変形により大変形して1つの原子層となっているこ とが分かる.よって, $\delta = 0.75$ [nm]において凝着が切断されなかったのは,半球先端が塑性 変形して接触面積を増加させたからであると考えられる.また $\delta = 0.75$ [nm]と比較すると, $\delta = 1.0$ [nm]では塑性変形の進展により 3 層目の原子層の面積が小さくなっている.そのた め, $\delta = 1.0$ [nm]では $\delta = 0.75$ [nm]に比べて荷重が減少したのだと考えられる.

塑性変形によって JKR 理論で予想されるよりも大きな接触面積が生じる現象については, Zhang らも報告している[32].



Fig. 3-11 : Map of the z-direction displacement at $\delta = 0.5$.



Fig. 3-12 : Map of the z-direction displacement at $\delta = 0.75$.



Fig. 3-13 : Map of the z-direction displacement at $\delta = 1.0$.

3.4 Velocity Constrained Region 法(VCR 法)の提案

本節では、外力の作用による並進運動を再現する連成手法として Velocity Constrained Region 法を提案する.

3.1.2 項の問題点の解決方法として, Region2 と Region3 の間に新たに Free Region を設け る方法が考えられる. Free Region では, 節点と原子を独立させる. このように Region2 と Region3 を空間的に離すことによって, Region2 が Region3 の影響を受けずに大変形および 並進運動を行えるようになり,外力の作用による並進運動が再現できる.

Free Region については,目的は異なるが Luan らも同様のものを導入している[36],[37]. しかし Free Region で原子と節点を完全に独立にしてしまうと,原子と節点の運動のわずか



Fig. 3-14 : Velocity Constrained Region.

なずれから,非物理的な振動が発生してしまう.Luan らは原子,節点のそれぞれに質量比 例減衰を与えることでこの問題を回避しているが,質量比例減衰は周波数の逆数に比例し た減衰を与える特性があるため,特に並進運動に対して過大な減衰を与えてしまう.そのた め,並進運動を再現したいモデルに対しては不適切である.

そこで本論文では、質量比例減衰を用いずに、もしくは十分小さな減衰係数を用いたとき にも、Free Region での振動を十分に減衰させる手法として Velocity Constrained Region 法

(VCR 法)を提案する. VCR 法では, Free Region において節点速度を基準に原子の振動を 減衰させる. 節点の速度を間接的に原子に与えることで, 節点と原子の運動を同期させ, 振 動を抑える. またこのような Free Region を, 新たに Velocity Constrained Region (VCR) と 定義する.

提案手法の詳細を説明する.まず、VCR内に存在する、とある原子の平衡位置における 座標が \mathbf{X}_{MD} であったとして、その位置におけるFEM上の速度 $\dot{\mathbf{X}}_{FEM}$ を

$$\dot{\mathbf{X}}_{\text{FEM}} = \sum_{i}^{n} N_{i}(\mathbf{X}_{\text{MD}}) \mathbf{V}_{i}$$
(3-10)

と内挿する.ただし N_i , V_i は、その原子を内包している FEM のn 節点要素を構成する節点のうちのi番目における形状関数と速度である.次に、節点の運動と原子の運動を同期させるために、原子に以下の Langevin 方程式に基づいた減衰を与える.

$$m\ddot{\mathbf{X}}_{\mathrm{MD}} = \mathbf{F}_{\mathrm{MD}} - m\gamma \left(\dot{\mathbf{X}}_{\mathrm{MD}} - \dot{\mathbf{X}}_{\mathrm{FEM}} \right) + \mathbf{F}_{\mathrm{random}}(\gamma, T_0)$$
(3-11)

ただしmは原子の質量、 \mathbf{F}_{MD} は原子間の相互作用力、 γ は減衰係数である、 $\mathbf{F}_{random}(\gamma, T_0)$ は γ と制御温度 T_0 に依存する乱数であり、以下の式で与えられる.

$$\mathbf{F}_{\text{random}}(\gamma, T_0) = \sqrt{\frac{2m\gamma k_B T_0}{\Delta t}} \mathbf{N}(0, 1)$$
(3-12)

ただし k_B はボルツマン定数、 Δt はタイムステップ、N(0,1)は平均が 0、分散が 1 のガウス分布に従う乱数を成分とするベクトルである.

式(3-11)の右辺第二項は FEM 上の速度を基準とした散逸項であり、原子と節点の運動の 差が大きいほど、その差を小さくするための減衰力が働く.式(3-11)の右辺第三項は揺動項 であり、揺動散逸定理より $\dot{\mathbf{X}}_{\text{FEM}} = \mathbf{0}$ のときに温度 T_0 で散逸項と釣り合う.

提案手法の妥当性については 3.5 節で検証する.また提案手法の問題点についても 3.5 節で述べる.

3.5 VCR 法を用いた平板の並進運動解析

本節では 3.4 節で提案した手法の妥当性検証を目的に,平板に外力を作用させて並進運動 解析を行い,提案手法について考察する.

3.5.1 計算条件

計算モデルの寸法を Fig. 3-15 に示す. 最上端の節点に 100 [MPa]相当の外力を負の z 方向 に与え,最下端に含まれる原子の z 方向変位の空間平均の時刻歴応答を計算する.

本計算では VCR の長さが与える影響を調査するために, VCR の長さが異なるモデルを 8 つ用意し, Fig. 3-15(b)のようにそれぞれのモデルを L0, L2, L4, L6, L8, L10, L12, L28 と定義する. FEM のメッシュは全て 8 節点 6 面体一次要素を使用し, メッシュの大きさは 全て 5L×5L×2L の直方体とする. また, 系全てを MD または FEM としたモデルも用意し, それぞれ full MD, full FEM と定義する.

外力の与え方は,最上端にある複数の節点または原子の z 方向変位が全て等しくなるように多点拘束し,節点または原子に加わる外力の和を断面積で割った値が 100 [MPa]と等しくなるようにする.



(b)

L=0.402578 [nm]			
Name	H_1	H ₂	H3
LO	18L	0	18L
L2	18L	2L	16L
L4	16L	4L	16L
L6	16L	6L	14L
L8	14L	8L	14L
L10	14L	10L	12L
L12	12L	12L	12L
L28	4L	28L	4L

FEM mesh size:

8-node hexahedron

 $5L \times 5L \times 2L$ (rectangular solid)

Fig. 3-15 : Calculational model for the translational motion analysis.

x, y方向は周期境界条件, z方向は自由境界条件とする.詳細な MD の計算条件を Table 3-3 に, FEM の計算条件を Table 3-4 に示す.本計算では熱的揺らぎの影響を抑え,かつ並 進自由度由来の温度が振動自由度由来の温度に比べて十分小さくなるように,温度を 10 [K] に制御する. VCR の長さのほかに,式(3-11)中のパラメータγ, T₀も複数変えて計算を行う.

本計算では MD を 10 step 計算する度に FEM を計算し,原子変位の 10 step 間にわたる時 間平均を FEM に伝える.式(3-5)よりカットオフ周波数は 44.3 [THz]相当となるが,Al のフ オノン振動数は~10 [THz] 程度であるため,実質的には高周波数の振動をカットしていな い.これはローパスフィルタによる位相遅れの影響を無くし,full MD モデルや full FEM モ デルの結果と比較しやすくするためである.

Interatomic potential	Al: EAM (Winey et al [55])
Lattice constant	0.402578 [nm]
Ensemble	NVT ensemble
Thermostat	Langevin thermostat: $\gamma_{\text{langevin}} = 0.05 \text{ [THz]}$
Temperature	10.0 [K]
Timestep	0.001 [pico sec.]

Table 3-3 : Calculational condition of MD.

Table 3-4 : (Calculational	condition	of FEM.
---------------	---------------	-----------	---------

Element	8-node hexahedron
Number of integration points	8 (full integration)
C ₁₁	113.76 [GPa]
C ₁₂	61.71 [GPa]
C ₄₄	31.25 [GPa]
Timestep	0.01 [pico sec.]
Time integration	Dynamic (implicit method)
Rayleigh damping parameter	$\alpha = 0.05, \ \beta = 0.01$

3.5.1 **計算結果と考察**

最下端に含まれる原子のz方向変位の空間平均の時刻歴応答を示し、結果の考察を行う.

(1) VCR の長さが与える影響 (γ = 5.0 [THz], T₀ = 10.0 [K])

<計算結果>

式(3-11)中でγ = 5.0 [THz], T₀ = 10.0 [K]としたときの各モデルの計算結果を Fig. 3-16 に 示す. 縦軸が最下端の z 方向変位, 横軸が時刻である.

L0 は既存手法と同一であるが, Fig. 3-16 より既存手法では full MD および full FEM で見 られる並進運動が再現できていないことが分かる.提案手法を導入した場合は, VCR が長 くなるにつれて並進運動距離が増加していき, L8, L10 では full MD および full FEM の結果 をほぼ再現した.しかし L12 では full MD および full FEM よりも並進運動距離が大きくな り, L28 で更に並進運動距離が大きくなった.

最終時刻=100 [pico sec.]において, VCR を 2L だけ伸ばしたときの並進運動距離の増加量 ΔZ を Fig. 3-17 に示す. L0 から L10 までは, VCR が長くなるにつれて ΔZ が減少した. しか し L10→L12 に VCR を伸ばした場合はその傾向が変わり, L6→L8 や L8→L10 に比べて ΔZ が増加した.



Fig. 3-16 : Effect of the VCR's length on the translational motion.



Fig. 3-17 : Difference of moving distances at time = 100 [pico sec.]

<考察>

VCR が短いほど並進運動距離が小さく, VCR を長くしていくと結果が改善されていった 理由は, Region2 と Region3 の距離が十分に離れていない場合は Region3 の固定原子が Region2 に影響を与えるからだと考えられる.本計算の条件では, L10 でΔZ が収束し, また 最も full MD や full FEM の結果を再現できていることから, L10 が最も適切な VCR 長さで あったと考えられる.

L12 やL28 で更に並進運動距離が増加し, full MD や full FEM と合わなくなった理由は, VCR を長くしたために原子と節点のずれが生じる領域が増加し, そのずれによる振動が大 きくなっていったからであると考えられる. Fig. 3-18 は Fig. 3-16 の拡大図であるが, 系は 並進運動だけでなく振動運動もしており, 特に L28 でその振幅が大きくなていることが分 かる. このことから, 原子と節点のずれから生じる振動が減衰しきれず, その一部が並進運 動に変換されたと考えられる.

以上より、提案手法では VCR を適切な大きさにしなければならないことが分かった.



Fig. 3-18 : Oscillation in the Z direction.

(2) 減衰係数が与える影響 (L10 モデル, T₀ = 10.0 [K])

<計算結果>

L10 モデル, $T_0 = 10.0$ [K]において減衰係数を $\gamma = 0$, 1, 2, 3, 4, 5, 10 [THz]と変えた ときの結果を Fig. 3-19 に示す. Fig. 3-19(a)から分かるように, VCR で節点と原子が完全に 独立する $\gamma = 0$ [THz]では値が発散した. Fig. 3-19(b)から分かるように, $\gamma = 1$ [THz]では full MD や full FEM よりも並進運動距離が大きいが, $\gamma = 2$ [THz]以上では結果がほぼ同じとな り, 並進運動をよく再現した.

<考察>

 $\gamma = 0, 1$ [THz]で full MD や full FEM より大きな値となったのは,原子と節点のずれから 生じる振動が減衰しきれず,その一部が並進運動に変換されたと考えられる. γ を大きくし ていくと結果は収束していくため, γ は一定以上の大きさが必要であることが分かった.



Fig. 3-19 : Effect of the damping parameter on the translational motion.

(3) 制御温度が与える影響 (L10 モデル, γ = 5.0 [THz])

<計算結果>

L10 モデル, $\gamma = 5.0$ [K]において制御温度を $T_0 = 0$, 10, 20 [K]と変えたときの結果を Fig. 3-20 に示す. Fig. 3-20 から分かるように, $T_0 = 0$ [K]では並進運動距離が小さく, $T_0 = 20$ [K]では full MD や full FEM より大きくなってしまった.

<考察>

 $T_0 = 0$ [K]は式(3-11)において右辺第三項の揺動項が存在しないことに相当する.よって $T_0 = 0$ [K]では並進運動距離が小さくなったのは、散逸項によって振動自由度だけでなく並 進自由度の運動エネルギーも減衰されてしまったためであると考えられる.

 $T_0 = 20$ [K]では並進運動距離が大きくなったのは, MD 領域が 10 [K]で温度制御しているために, Region2 から節点へ伝わる運動と VCR 中の原子の運動にずれが生じて振動が発生し、その一部が並進運動に変換されたと考えられる.

よって提案手法では、VCR の制御温度を Region2 の制御温度と一致させる必要があることが分かった.

(1)~(3)の議論より,提案手法はVCRの長さ,減衰係数,制御温度の3つのパラメータ 全てを適切な値にすることで,外力の作用による並進運動を再現できることが確認された.



Fig. 3-20 : Effect of the controlled temperature on the translational motion.

(4) FEM・MD間の対称性の検証 (L10 モデル, γ = 5.0 [THz], T₀ = 10 [K])

提案手法は VCR において FEM から MD への片方向連成を行っているため、外力が FEM 側から作用したときと MD 側から作用したときで挙動が異なる可能性がある.本計算では どちらに外力が作用しても結果が等しくなることを検証する.

<計算条件>

Fig. 3-15 に示したモデルから領域の配置を逆順にしたものを用意し, MD 側に 100 [MPa] 相当の外力を与える. モデルは L10 を使用し, $\gamma = 5.0$ [THz], $T_0 = 10$ [K]とする.

<計算結果>

計算結果を Fig. 3-21 に示す.外力を FEM 側から作用させたものを push FEM, MD 側か ら作用させたものを push MD と定義している. Fig. 3-21 から分かるように, どちら側から 外力を作用させても結果は一致し, 並進運動をよく再現した.

く考察>

提案手法は VCR においては片方向連成であるが, Region2, Region3 で両方向連成を行っているために MD 側, FEM 側のどちらに外力が作用しても同じ結果になったのだと考えられる.



Fig. 3-21 : Symmetry between FEM and MD.

3.5.2 **提案手法の問題点**

3.5.1, 3.5.1 項では z 方向の運動に着目していたが、本項では外力の作用していない x, y 方向の運動に着目し、提案手法の問題点を述べる.

L10 モデル, $\gamma = 5.0$ [THz], $T_0 = 10$ [K]の条件での計算結果において,最下端の x 方向 の変位と y 方向の変位の時刻歴応答をそれぞれ Fig. 3-22, Fig. 3-23 に示す. full FEM では外 力が作用していない方向には全く動かないが,full MD は Langevin 熱浴における揺動力の和 が 0 にならないためにランダムウォークをする.提案手法も同様の理由でランダムウォー クが見られ,full MD や full FEM とは結果が一致しないことが分かる.

この問題を解決するために、各計算ステップで揺動力の和が0となるように揺動力をシフトする方法が考えられる.即ち、式(3-11)は以下のようになる.







$$m\ddot{\mathbf{X}}_{\mathrm{MD}} = \mathbf{F}_{\mathrm{MD}} - m\gamma \left(\dot{\mathbf{X}}_{\mathrm{MD}} - \dot{\mathbf{X}}_{\mathrm{FEM}} \right) + \mathbf{F}_{\mathrm{random}}(\gamma, T_0) - \langle \mathbf{F}_{\mathrm{random}}(\gamma, T_0) \rangle \qquad (3-13)$$

ただし($\mathbf{F}_{random}(\gamma, T_0)$)は、ある計算ステップにおける、各原子に働く揺動力の平均である.

式(3-13)の改善された提案手法を用いて同様の解析を行った. 結果を Fig. 3-24, Fig. 3-25 に示す. ただし full MD についても同様に揺動力の和を 0 にシフトした. Fig. 3-24, Fig. 3-25 から分かるように, full MD は結果が改善したが,提案手法では改善が見られなかった.

full MD と提案手法における数式上の差は式(3-13)中の $m\gamma \dot{\mathbf{X}}_{FEM}$ の項のみである.そのため提案手法で改善が見られなかった原因は、MD で Region2 の原子の変位が揺らぐために節点変位も揺らぎ、 $m\gamma \dot{\mathbf{X}}_{FEM}$ の和が 0 にならなかったからであると考えられる.



Fig. 3-24 : Result of the improved proposed method (X-displacement).



4 表面粗さ形状を考慮した固体間摩擦解析

4.1 VCR 法による固体間摩擦解析の Verification

提案した VCR 法を用いて表面粗さをもつ固体間の摩擦解析を行い, full MD モデルと結 果を比較して Verification を行う.

4.1.1 計算条件

計算モデルの寸法を Fig. 4-1 に示す. 下部最下端の節点を固定して上部最上端の節点に 100 [MPa] 相当の垂直荷重を-z 方向に与える. 系が緩和した後, 上部最上端の節点に 10 [m/s] の y 方向速度拘束を与えて 2 つの固体を 6 周分だけ摺動させ, 下部固定端が受ける z 方向 垂直荷重と y 方向接線荷重の時刻歴応答を計算し, そこから摩擦係数を算出する. ただし垂



Fig. 4-1 : Calculational model for the friction analysis.

直荷重の与え方は3.5.1項の条件と同様である.

古典 MD は速度分布の初期値や減衰に疑似乱数を用いるため,疑似乱数の seed によって 計算結果が時間発展とともに分岐し,変化する.本計算では FEM-MD, full MD のそれぞれ について seed のパターンを変えて 3 回計算する (FEM-MD: seed1 ~ seed3, full MD: seed4 ~ seed6).

表面粗さ形状は Hurst 数が 0.7, 二乗平均平方根粗さ RMS が 1.1524 [nm]のセルフアフィ ンフラクタル表面でモデリングする. commensurate 構造に起因する Atomistic locking (1.2.2 項参照)を避けるために,下部は z 軸周りに arctan(3/4) [rad],上部は x 軸周りに arctan(3/4) [rad]だけ結晶を回転させ, x, y 方向に周期境界条件が成立するようにする.

熱的揺らぎの影響を抑えて提案手法と full MD モデルの結果を比較しやすくするために, 系の温度を 10 [K]で制御する. なお古典 MD による Al の摩擦解析では,温度の依存性は十 分小さいことが報告されている[28].

連成手法には 3.4 節で提案した手法を利用し, VCR 長さを上部で 10L, 下部で 6L (L = 0.402578 [nm]) だけ設ける. VCR における減衰係数を 5.0 [THz], 制御温度を 10 [K] とする.

原子間ポテンシャルは Winey らの EAM 系 Al ポテンシャル[55]を使用するが、現実の固 体表面は潤滑剤、酸化層、空気中の汚染物質などで覆われているため、バルク内に働く原子 間相互作用力より弱い相互作用力が働いていると考えられる. ここでは簡単のため、上部と 下部の相互作用力は Lennard-Jones ポテンシャル(LJ)で表現する. カットオフ距離は Al ポテ ンシャルと同じ 0.6365 [nm]とし、格子定数が Al ポテンシャルと同じで凝集エネルギーが Al ポテンシャルの 1/10 となるように、LJ のパラメータを $\epsilon = 0.0326679444$ [eV]、 $\sigma = 0.259734$ [nm]とする.

詳細な MD の計算条件を Table 4-1 に, FEM の計算条件を Table 4-2 に示す.

同様の解析を full MD モデルでも行い,結果を比較する.また,以下の手順で上部を下部 に押しつける.

- (1) 500 [psec]の間,上部の最上端節点の x, y 方向の変位を 0 に拘束して-z 方向に荷重を与 え,上部と下部を接触させる.
- (2) (1)で与えた x, y 方向の拘束を解放し, 500 [psec] 緩和する.
- (3) 上部最上端節点に y 方向に 10 [m/s]の速度拘束を与える.

上記計算手順を取ることで, 3.5.2 項で指摘した問題点を克服し, 初期の表面間接触状態 を2つの解析の間で揃える.

MD, FEM ともに質量比例減衰を設定する.下部は減衰係数を 1.0 [THz]とするが,上部に 大きな減衰係数を設定すると低周波数の運動である並進運動に影響を及ぼすため,十分小 さな値として減衰係数を 0.05 [THz]とする.また質量比例減衰が y 方向の並進運動に影響を 与えないように,上部は MD, FEM をそれぞれ以下の運動方程式を用いて解く.

$$m\ddot{\mathbf{X}}_{\text{MD}} = \mathbf{F}_{\text{MD}} - m\gamma (\dot{\mathbf{X}}_{\text{MD}} - \dot{\mathbf{X}}_{\text{const}}) + \mathbf{F}_{\text{random}}(\gamma, T_0)$$
(4-1)

$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{X}}_{\text{FEM}} + \mathbf{C}\{\dot{\mathbf{X}}_{\text{MD}} - \dot{\mathbf{X}}_{\text{const}}\} + \mathbf{Q}_{\text{FEM}} = \mathbf{F}_{\text{FEM}}$$
(4-2)

ただし**X**_{const}は y 方向自由度の成分が全て 10 [m/s]で,その他の成分が全て 0 の定ベクトル である.

Interatomic potential	upper-upper Al : EAM (Winey et al [55])
	lower-lower Al : EAM (Winey et al [55])
	upper-lower Lennard Jones
	$\epsilon = 0.0326679444$ [eV]
	$\sigma = 0.259734 \text{ [nm]}$
	$r_{cutoff} = 0.6365 \ [nm]$
Lattice constant	0.402578 [nm]
Ensemble	NVT ensemble
Thermostat	Langevin thermostat
	upper part: $\gamma_{langevin} = 0.05$ [THz]
	lower part: $\gamma_{\text{langevin}} = 1.0 \text{ [THz]}$
Temperature	10.0 [K]
Timestep	0.005 [pico sec.]

Table 4-1 : Calculational condition of MD.

Table 4-2 : Calculational condition of FEM.

Element	8-node hexahedron
Number of integration points	8 (full integration)
C ₁₁	113.76 [GPa]
C ₁₂	61.71 [GPa]
C ₄₄	31.25 [GPa]
Timestep	0.05 [pico sec.]
Time integration	Dynamic (implicit method)
Rayleigh damping parameter	upper part: $\alpha = 0.05$, $\beta = 0.01$
	upper part: $\alpha = 1.0$, $\beta = 0.01$

4.1.2 **計算結果・考察**

下部固定端に加わる z 方向垂直荷重を Fig. 4-2 に示す. 縦軸は垂直荷重の和を面積で割っ た平均圧力で表示してあり, 横軸は時間である. FEM-MD 連成解析による結果を赤線で, full MD 解析による結果を黒線で示しており, 異なる 3 つの乱数 seed による結果をそれぞれ 実線, 破線, 点線で示してある. 提案手法と full MD で時刻歴応答がほぼ一致しており, ま た上部に加えた垂直荷重である 100 [MPa]と釣り合っていることから, 提案手法によって垂 直方向の並進運動が再現されたことが分かる.

6周分の摺動にわたる摩擦係数の変化を Fig. 4-3 に示す.縦軸は摩擦係数,横軸は摺動距



Fig. 4-2 : Calculated normal force.



離であり, FEM-MD 連成解析による結果を赤線で, full MD 解析による結果を黒線で示す. Fig. 4-3 から分かるように,提案手法によって摩擦係数を定性的,定量的によく再現できて いることが分かる.

1周ごとの平均摩擦係数の変化を Fig. 4-4 に示す. 縦軸はある摺動回数における摩擦係数の時間平均を,3つの異なる乱数 seed による結果についてそれぞれ求めて平均した値であり,エラーバーはその標準誤差を示してある. 横軸はその摺動が何週目であるかを示しており,横軸の最終項目は全摺動にわたる平均摩擦係数であることを示している.. Fig. 4-4 より,提案手法と full MD で得られた平均摩擦係数はよく一致していることが分かる. また平均摩擦係数の減少傾向も再現できている.

6周分摺動し終えたときの下部表面の変位分布図を Fig. 4-5 に示す. ただし変位は,変位の各成分の二乗和の平方根で計算された値である. Fig. 4-5 から,提案手法によって摩耗による表面原子の変形もよく再現できていることが分かる.

上記の結果より,提案手法を用いた FEM-MD 連成解析手法は固体間摩擦解析に適用可能 であると結論付ける.





Fig. 4-5 : Displacement distribution maps at the final state.

4.2 空間スケールが固体間摩擦現象に与える影響

従来の研究では、空間スケールが固体間摩擦現象に与える影響の調査は二次元解析でし か行われていない、本節では4.1節で計算したモデルと、そのサイズを0.5倍にしたモデル と2倍にしたモデルで三次元の固体間摩擦解析を行い、それぞれを比較して空間スケール が固体間摩擦解析に与える影響について考察する.

4.2.1 計算条件

計算モデルの寸法を Fig. 4-6 に示す. 4.1 節で計算したモデルと同じサイズのモデルを M1 モデル, M1 モデルのサイズを 0.5 倍にしたモデルを M0.5 モデル, M1 モデルのサイズを 2



Fig. 4-6 : Calculational models of for the friction analysis.

倍にしたモデルを M2 モデルと定義する. ただし M0.5 モデルは MD のみで計算を行う. 4.1 節と同様の条件・手順で 2 つの固体を M0.5 モデルは 24 周分, M1 モデルは 12 周分, M2 モデルは 6 周分だけ摺動させ,下部固定端が受ける z 方向垂直荷重と y 方向接線荷重の時 刻歴応答を計算し,そこから摩擦係数を算出する.

M0.5, M1, M2 モデルそれぞれについて, 3 ペアの異なる表面粗さ形状を作成し, 計算を 行う. Husrt 数を 0.7, 二乗平均平方根粗さ RMS を M0.5 モデルで 0.70813 [nm], M1 モデル で 1.1524 [nm], M2 モデルで 1.8734 [nm]とし, Fig. 4-7 に示すように全ての表面粗さ形状が 同様の表面粗さパワースペクトルをもつようにする. また実際の表面粗さ形状を Fig. 4-8, Fig. 4-9, Fig. 4-10 に示す.



詳細な MD の計算条件を Table 4-3 に, FEM の計算条件を Table 4-4 に示す.

Fig. 4-7 : Power spectrum density of the height of each surface roughness model.







Fig. 4-9 : M1-1 lower.



Interatomic potential	upper-upper Al : EAM (Winey et al [55])
	lower-lower Al : EAM (Winey et al [55])
	upper-lower Lennard Jones
	$\epsilon = 0.0326679444$ [eV]
	$\sigma = 0.259734$ [nm]
	$r_{cutoff} = 0.6365 \ [nm]$
Lattice constant	0.402578 [nm]
Ensemble	NVT ensemble
Thermostat	Langevin thermostat
	M0.5 upper part: $\gamma_{langevin} = 0.1$ [THz]
	lower part: $\gamma_{\text{langevin}} = 2.0 \text{ [THz]}$
	M1 upper part: $\gamma_{\text{langevin}} = 0.05$ [THz]
	lower part: $\gamma_{\text{langevin}} = 1.0$ [THz]
	M2 upper part: $\gamma_{\text{langevin}} = 0.025$ [THz]
	lower part: $\gamma_{\text{langevin}} = 0.5$ [THz]
Temperature	10.0 [K]
Timestep	0.005 [pico sec.]

Table 4-3 : Calculational condition of MD.

Table 4-4 : Calculational condition of FEM.

Element	8-node hexahedron	
Number of integration points	8 (full integration)	
C ₁₁	113.76 [GPa]	
C ₁₂	61.71 [GPa]	
C ₄₄	31.25 [GPa]	
Timestep	0.05 [pico sec.]	
Time integration	Dynamic (implicit method)	
Rayleigh damping parameter	M1 upper part: $\alpha = 0.05$, $\beta = 0.01$	
	lower part: $\alpha = 1.0$, $\beta = 0.01$	
	M2 upper part: $\alpha = 0.025$, $\beta = 0.005$	
	lower part: $\alpha = 0.5$, $\beta = 0.005$	

4.2.2 **計算結果・考察**

摺動距離に対する摩擦係数の変化を, M0.5 モデル, M1 モデル, M2 モデルについてそれ ぞれ Fig. 4-11, Fig. 4-12, Fig. 4-13 に示す.全ての結果において,摩擦係数の変化には周期 性が見られ,摺動距離の増加とともにその振幅が減少していることが分かる.これは摺動に よって表面が摩耗し,より滑らかな形状に変形していくためであると考えられる.これにつ いては Spijker らも同様の結果,考察を報告している[26],[28].





Fig. 4-11 : Calculated friction coefficient of M0.5 models.



Fig. 4-13 : Calculated friction coefficient of M2 models.

摺動距離 80L ごと(L=0.402578 [nm], 80L は M1 モデルで2周分に相当)の真実接触面 積比率の変化を Fig. 4-14 に示す.縦軸は,摺動距離 80L ごとの真実接触面積比率の時間平 均を3ペアの異なる表面粗さ形状についてそれぞれ求めて平均した値であり,エラーバー はその標準誤差を示している.古典 MD で厳密な真実接触面積を求めることは困難であり, これまでに様々な真実接触面積の計算方法が提案されている[25][58].本研究では簡単に, x-y 平面を格子定数 L 刻みに分割した計算格子を考え,各格子点の近傍における固体表面の 高さを求めて表面高さデータを抽出し,向かい合う表面の高さの差が L 以下のときにその 格子が接触していると判定した.真実接触面積比率は,接触判定した格子の総数を格子の総 数で割った値として求めた.

また, 摺動距離 80L ごとの平均摩擦係数の変化を Fig. 4-15 に示す. 縦軸は, 摺動距離 80L ごとの摩擦係数の時間平均を 3 ペアの異なる表面粗さ形状についてそれぞれ求めて平均した値であり, エラーバーはその標準誤差を示している.

Fig. 4-14, Fig. 4-15 の共通点として, M0.5 モデルは表面粗さ形状の違いによって結果の標準誤差が大きく, それに対して M1 モデル, M2 モデルでは小さい. これは空間スケールが大きい程,より多くの波を含んだ表面粗さ形状を表現できるために, 摩擦係数が初期表面粗さ形状に依存しにくくなるためであると考えられる.

Fig. 4-14 から分かるように,空間スケールが小さいほど真実接触面積比率が大きくなった.マクロスケールの理論では,接合部成長の効果を無視すれば,真実接触面積比率は式(1-2)より垂直方向の押し込み圧力と材料の降伏応力に依存し,空間スケールには依存しない.よって本計算の空間スケールではマクロスケールの理論が適用できないことが分かる.

空間スケールが小さいほど真実接触面積比率が大きくなった理由は、本計算で周期境界 条件を設定しているために、短い周期では高周波数の波しか表現できず、現実の表面粗さの 凹凸を再現できないためであると考えられる. MD では離散的にしか空間を表現できないた め、空間スケールを小さくしていくと表面粗さは flat な形状に近づいていき、真実接触面積 比率は増加していくと考えられる(空間の周期が格子定数と等しくなると表面粗さは flat な 形状しか表現できなくなる).また空間スケールを大きくしていくと低周波数の波も含まれ るようになるため,低周波な凹凸の凸先端部分のみが接触するようになり,真実接触面積比 率は減少していくと考えられる.

また Fig. 4-15 から分かるように,空間スケールが大きいほど摩擦係数が大きくなっている. この理由は,真実接触面積が大きいほど凝着摩擦が大きくなるからであると考えられる.







4.3 表面粗さ形状のなじみが与える影響

4.2節では表面粗さを有する2つの固体間について、そのペアを変えずに周期境界条件を 用いて数周だけ摺動させた.このため、表面粗さ形状は相手の表面粗さ形状になじむように 変形すると考えられる.しかし現実の摩擦現象において、表面の全く同じ位置どうしで2回 以上摺動が発生することは考えにくい.

そのため本節では、1周摺動するごとに表面のペアを変えて摩擦解析を行い、同じ表面のペアで数周摺動させた場合との結果を比較し、表面粗さ形状のなじみが与える影響について考察する.

4.3.1 計算条件

4.2 節で用いた M2 モデルを用いて計算を行う.3 つの表面のペアについて,1 周分摺動す るごとに表面粗さ形状の変形を保存し,ペアを変更して再び摺動する.全部で3 通りのペア の組み合わせについて計算を行う.

便宜上,ペアを変更する計算モデルを changed モデル,変更しないこれまでの計算を no changed モデルと定義する.

その他の計算条件は全て4.2節と同様とする.

4.3.2 **計算結果・考察**

1周摺動するごとの平均摩擦係数の変化を Fig. 4-16 に示す. changed モデルによる結果を 赤線で, no changed モデルによる結果を青線で示してある. 1 周目は全く同じ計算条件・結 果であるが, 2 周目は平均値がほぼ同じでも changed モデルの標準誤差が大きくなり, 3 周 目は changed モデルにおいて摩擦係数があまり減少せずに no changed モデルより大きな摩



Fig. 4-16 : Averaged friction coefficient of changed models.
擦係数となった.

changed モデルの方が no changed モデルより摩擦係数の減少量が小さい理由は, no changed モデルで表面粗さ形状がなじんだためであると考えられる.そのため, no changed モデルによる固体間摩擦解析では,定常状態における最終的な表面粗さ形状がペアの表面の初期形状に大きく依存してしまうことが懸念される.

changed モデルを用いた解析について,ある表面粗さ形状の各摺動後の変位図を Fig. 4-17 に示す.ただし変位は,変位の各成分の二乗和の平方根で計算された値である.Fig. 4-17よ り,表面粗さ形状の変形は主に1周目の摺動で生じており,2周目,3周目の摺動ではあま り変形していないことが分かる.また,他の表面粗さ形状についても同様の傾向が見られた. そのため changed モデルによる固体間摩擦解析でも,定常状態における最終的な表面粗さ形 状はペアの表面の初期形状に大きく依存すると考えられる.

以上より,固体間摩擦による表面粗さ形状の時刻歴変化をより現実的に再現するためには,1周分の摺動で平衡状態に達するように系のサイズを十分大きくとる必要があると考えられる.

(a) 1st sliding







Fig. 4-17 : Displacement distribution map of the changed-model analysis.

5 Shifting Region Model の提案と検証

5.1 Shifting Region Model の概要

5.1.1 Shifting Region Model の概要

摩擦解析では時間発展とともに真実接触領域が移動するため、真実接触領域近傍のみを MDでモデル化する場合,MD領域も移動する必要がある.また、一度接触してから非接触 になった領域は、再度接触することも考えられる.そこで本研究では、真実接触領域の移動 と共にMD領域も移動させる、Shifting Region Model (SRM)を提案する.

SRM の概要図を Fig. 5-1 に示す.まず予想される接触領域のみを MD でモデリングする. 摺動に伴い接触領域は移動するため, MD 領域も移動させる.その際,移動前の節点・ 原子の最終変位・速度の情報を移動後の節点・原子の初期変位・速度条件として計算を再開 することで,連続した計算を行う.この再開方法を SRM リスタートと定義する.





5.1.2 MD 領域と FEM 領域が置き換わる領域での SRM リスタート方法 MD 領域を移動させる時に, MD モデルの後端部では MD 領域が FEM 領域に置き換わり (Fig. 5-2(A)),前端部では FEM 領域が MD 領域に置き換わる (Fig. 5-2(B)). これら 2 つの 領域は, SRM リスタート時に節点,原子を直接的に対応付けられない. そこで,新たに MD から FEM に置き換わった場合は原子変位・速度を外挿して節点変位・速度とする. 新たに FEM から MD に置き換わった場合は節点変位・速度を内挿して原子変位・速度とする.

上記概要について具体的に述べる. Fig. 5-2(A)のように MD から FEM に置き換わる領域 における SRM リスタート条件は、対応する原子の最終変位、速度条件を節点に外挿するこ とで決定する. ただし原子の速度をそのまま外挿すると、MD に特有の温度に依存する高周 波な振動を FEM に与えてしまう. それを防ぐため、移動前の計算において、最終時刻tにお ける原子の変位の節点外挿値 $\mathbf{u}_{FEM}(t)$ と、その 1 FEM ステップ Δt_{FEM} 前の原子の変位の節 点外挿値 $\mathbf{u}_{FEM}(t - \Delta t_{FEM})$ を式(3-4)より計算し、その節点変位の時間変化から節点速度を計 算する.

具体的には、節点速度の SRM リスタート条件 u_{FEM}(t)を、中心差分法に従って、

$$\dot{\mathbf{u}}_{\text{FEM}}(t) = \frac{\mathbf{u}_{\text{FEM}}(t + \Delta t_{\text{FEM}}) - \mathbf{u}_{\text{FEM}}(t - \Delta t_{\text{FEM}})}{2\Delta t_{\text{FEM}}}$$
(5-1)



(A) MD to FEM

(B) FEM to MD

Fig. 5-2 : Replacement of MD with FEM (A) and of FEM with MD (B).

と求める. ただし
$$\mathbf{u}_{\text{FEM}}(t + \Delta t_{\text{FEM}})$$
は $\mathbf{u}_{\text{FEM}}(t) \ge \mathbf{u}_{\text{FEM}}(t - \Delta t_{\text{FEM}})$ を用いて,中心差分法より

$$\left(\frac{\mathbf{M}}{\Delta t_{\text{FEM}}^2} + \frac{\mathbf{C}}{2\Delta t_{\text{FEM}}}\right) \mathbf{u}_{\text{FEM}}(t + \Delta t_{\text{FEM}})$$

$$= \mathbf{F}_{\text{FEM}}(t) - \mathbf{Q}_{\text{FEM}}(t) + \frac{1}{\Delta t_{\text{FEM}}^2} \mathbf{M} \{2\mathbf{u}_{\text{FEM}}(t) - \mathbf{u}_{\text{FEM}}(t - \Delta t_{\text{FEM}})\}$$

$$+ \frac{\mathbf{C}}{2\Delta t_{\text{FEM}}} \mathbf{u}_{\text{FEM}}(t - \Delta t_{\text{FEM}})$$
(5-2)

と求める.ただしMは質量マトリックス、Cは減衰マトリックス、 $F_{FEM}(t)$ は外力ベクトル、 $Q_{FEM}(t)$ は内力ベクトルである.

Fig. 5-2(B)のように FEM から MD に置き換わる領域における SRM リスタート条件は,対応する節点の SRM リスタート条件を内挿することで決定する.まず移動前の計算の終了時刻tにおける節点の変位 $u_{FEM}(t)$ と速度 $\dot{u}_{FEM}(t)$ を形状関数を用いて内挿し,原子の変位 $u_{MD}(t)$ と仮の速度 $\dot{u}'_{MD}(t)$ を求める

$$\mathbf{u}_{\mathrm{MD}}(t) = \mathbf{N}(\mathbf{X}_{\mathrm{MD}}(0))\mathbf{u}_{\mathrm{FEM}}(t)$$
(5-3)

$$\dot{\mathbf{u}}'_{\mathrm{MD}}(t) = \mathbf{N}(\mathbf{X}_{\mathrm{MD}}(0))\dot{\mathbf{u}}_{\mathrm{FEM}}(t)$$
(5-4)

ただしN(X)は形状関数, $X_{MD}(0)$ は平衡状態における原子の位置ベクトルである.式(5-4)では低周波数の速度しか与えられないため、制御温度 T_0 に応じた乱数を更に加える.

$$\dot{\mathbf{u}}_{\mathrm{MD}}(t) = \dot{\mathbf{u}}'_{\mathrm{MD}}(t) + \dot{\mathbf{u}}_{\mathrm{random}}(T_0)$$
(5-5)

上記のようにして求めた $\mathbf{u}_{MD}(t)$ と $\dot{\mathbf{u}}_{MD}(t)$ を, FEM から MD に置き換わる領域の SRM リス タート条件とする.

5.1.3 表面粗さ形状と非弾性変形を考慮した Shifting Region Model

本項では、表面粗さ形状とその非弾性変形を考慮したモデリング手法を説明する.

原子レベルのラフネスは FEM と滑らかに結合出来ないため,接触領域遠方のラフネスは 摩擦現象に影響を与えないと仮定し,連成領域付近の MD 表面の形状を flat にして FEM と 結合する.この領域を Flatten Region と定義する (Fig. 5-3(A)).

ラフネスを持った真実接触領域では、一周目の摺動時に表面が非弾性変形して滑らかに なることで、二周目の摺動に影響を与える.その挙動を再現するため、1 周目に非弾性変形 した MD 領域が移動して flat な MD 領域に置き換わる時、その領域での SRM リスタートは 変位を 0、速度を温度に従う乱数として計算を行う.このような領域を Reset Region と定義 する (Fig. 5-3(B)).

また、Plastic Region で生じた転位をそのまま連成領域に移動させると、転位が FEM に到 達して計算が破綻する.そのため、Plastic Region が移動してその一部が Flatten Region に置 き換わる時、その領域では SRM リスタートをせず、初期変位を 0、初期速度を温度に従う 乱数とする.このような領域を Reset Region と定義する (Fig. 5-3(C)).

また、Plastic Region と Reset Region の境界は不連続になるため、不連続な形状由来の非弾 性変形が Plastic Region で生じる可能性がある. MD 領域の移動後にこの変形を残さないた めに、Plastic Region のうち Reset Region と近接している領域を Elastic Region (Fig. 5-3(D)) と定義し、Elastic Region で SRM リスタートをする時は、微小でない変位はその変位を 0 と して計算を行う.



- (A) Flatten Region (including FEM-MD transition region)
- (B) Plastic Region
- (C) Reset Region
- (D) Elastic Region

Fig. 5-3 : Four subregions of SRM.

5.2 Shifting Region Model O Verification

表面を全て原子でモデリングしたこれまでのモデルと SRM で固体間摩擦解析を行って結 果を比較し, SRM の Verification を行う.

5.2.4 計算条件

計算モデルの寸法を Fig. 5-4 に示す.表面テクスチャ形状を模擬した上部の三角柱(接触部先端は半径 2L [nm]の円筒,L = 0.40294)を剛体とし,50 [MPa]相当の垂直荷重を加えて緩和した後,接線方向に 50L [m/s]の速度を与えて2周分だけ摺動し,摩擦係数を計算する.

表面粗さ形状を Hurst 数が 0.7, RMS が 1.0 [nm]のセルフアフィンフラクタル表面でモデ リングする.上部三角柱の結晶軸を x 軸周りに arctan(3/4) [rad],下部表面の結晶軸を z 軸周 りに arctan(3/4) [rad]だけ回転させ, incommensurate 構造にする.





摺動距離が 2L [nm]になるごとに MD 領域を 2L [nm]だけ移動させて SRM リスタートを 行い,全部で 160 回分だけ MD 領域を移動させて計算を行う.

詳細な MD の計算条件を Table 5-1 に, FEM の計算条件を Table 5-2 に示す. また同様の 解析を従来の表面を全て MD で覆った FEM-MD 連成解析モデルで行い, 結果を比較す る.

Interatomic potential	upper-upper Al : EAM (Winey et al [55])
	lower-lower Al : EAM (Winey et al [55])
	upper-lower Lennard Jones
	$\epsilon = 0.0326679444$ [eV]
	$\sigma = 0.259734 \text{ [nm]}$
	$r_{cutoff} = 0.6365 \ [nm]$
Lattice constant	0.402578 [nm]
Ensemble	NVT ensemble
Thermostat	Langevin thermostat
	upper part: Rigid body
	lower part: $\gamma_{langevin} = 1.0$ [THz]
Temperature	1.0 [K]
Timestep	0.005 [pico sec.]

Table 5-1 : Calculational condition of MD.

Table 5-2 : Calculational condition of FEM.

Element	8-node hexahedron
Number of integration points	8 (full integration)
C ₁₁	113.76 [GPa]
C ₁₂	61.71 [GPa]
C ₄₄	31.25 [GPa]
Timestep	0.05 [pico sec.]
Time integration	Dynamic (explicit method)
Rayleigh damping parameter	upper part: $\alpha = 1.0$, $\beta = 0.01$

5.2.5 **計算結果・考察**

2 周分の摺動にわたる摩擦係数の時刻歴変化を Fig. 5-5 に示す. 縦軸が摩擦係数, 横軸が 摺動距離であり, SRM による結果を赤の実線で,表面を全て MD で覆ったモデルによる結 果を黒の破線で示す. Fig. 5-5 より, SRM によって摩擦係数の変化をよく再現できている ことが分かる.

1周摺動させるごとの平均摩擦係数の変化を Fig. 5-6 に示す. Fig. 5-6 より, 摺動距離の 増加による摩擦係数の減少傾向もよく再現できていることが分かる.

また本計算の結果より,接触領域遠方の詳細な表面粗さ形状は摩擦係数に影響を与えて いないことが分かった.



Fig. 5-5 : Friction coefficient of the proposed method.



Fig. 5-6 : Averaged friction coefficient of the proposed method.

2 周分だけ摺動し終えた後の表面形状の変位の分布図を Fig. 5-7 に示す. ただし変位は, 変位の各成分の二乗和の平方根で計算された値である. Fig. 5-7 (a)は提案手法による計算結 果であり, Plastic Region で累積して記録した変位の情報を元に全表面領域にわたる表面形 状の変形を復元した結果である. Fig. 5-7 より,表面粗さ形状の変形についても提案手法で よく再現できていることが分かる.

提案手法は、本計算の条件下では摩擦をよく再現した.しかし計算する空間スケールをより大きくした場合は遠方の表面粗さ形状が無視できなくなる恐れがある.そのようなスケールでは、FEM でも表面粗さ形状をモデル化する必要があると考えられる.



(a) Proposed

(b) full MD surface

Fig. 5-7 : Displacement distribution map of the proposed method.

6 結論と今後の課題

6 結論と今後の課題

6.1 結論

本研究では、固体間摩擦解析のための FEM-MD 連成解析手法の開発を目的とし、固体間 摩擦解析へ適用できるような FEM-MD 連成解析手法を提案した.また提案手法の Verification を行い、提案手法の妥当性を確認した.本研究で得られた結論を以下に整理す る.

- (1) 突起先端などの真実接触領域付近のみを MD とする解析のために, FEM-MD 連成領域 に凸型表面を有する系のための連成解析手法として Mixed Region 法を提案した.提案 した手法を用いて半球-平板間の凝着接触解析を行い,手法の Verification を行った.
- (2) 垂直方向の荷重制御を用いる固体間摩擦解析のために、外力の作用による並進運動を再 現する連成解析手法として Velocity Constrained Region 法を提案した.提案した手法を用 いて固体間摩擦解析を行い、全て MD で計算した結果と比較して手法の Verification を 行った.
- (3) 提案した手法を用いて,空間スケールが固体間摩擦現象に与える影響を調査した.空間 スケールが小さいと摩擦係数が高めに算出されるという結果を得た.
- (4) 大規模な固体間摩擦解析のために, 真実接触領域近傍のみを MD でモデリングし, 真実 接触領域の移動とともに MD 領域も移動する計算モデルとして Shifting Region Model を 提案した.提案したモデルを用いて固体間摩擦解析を行い,従来のモデルと比較して手 法の Verification を行った.

6.2 今後の課題

固体間摩擦は、あらゆる空間スケールにおいて様々な現象が発生し、それらが相互作用し あう、非常に複雑な現象である.しかし本研究では提案手法の Verification のために、摩擦 現象を決定する様々な要因を排除した簡単なモデルで計算を行った.そのため、摩擦現象の 解明のためには多くの課題が残っている.

本研究では、固体表面間の相互作用として LJ ポテンシャルを使用し、そのパラメータも 物理的根拠のないものを使用した.しかし摩擦現象の本質は表面間の相互作用であり、表面 の酸化層、空気中の汚染物質、潤滑剤分子、結晶軸角度などの様々な要因が表面間の相互作 用に寄与している.そのため、摩擦現象の解明のためにはこれらの要因を考慮した原子間ポ テンシャルの開発、または計算モデルの構築が必要不可欠である.

従来の研究では二次元解析を用いて固体間摩擦現象のマルチスケール性の研究がなされ てきたが、三次元解析では研究が不十分であった.本研究では提案手法による三次元解析を 行ったが、従来の二次元で検討されてきた空間スケールより遥かに小さいスケールでしか 解析をしていない.今後はより大きな空間スケールでの解析が課題として残る.

本研究で提案した Shifting Region Model (SRM)は、真実接触領域の遠方で弾性変形しか しないと仮定した.本研究での計算条件ではその仮定は正しかったが、空間スケールがより 大きくなったときにもその仮定が成立するかは不明である.また SRM では真実接触領域の 遠方の表面形状を flat にしたが、空間スケールがより大きくなったときは遠方の表面形状も ある程度 FEM でモデル化する必要があると考えられる.本研究で提案した SRM について、 更なる検討と改良が必要である.

本研究では、古典 MD と提案手法との比較を行い、その一致を確認したが、実験との比較 は行っていない.いくつかの研究では古典 MD が実験をよく再現することが確かめられて いるが、一般的な固体間摩擦現象については古典 MD と実験との関係は不明である.固体 間摩擦現象の解明のためには、実験との比較による固体間摩擦解析の Validation が必要であ る.

付録A 表面粗さパワースペクトルの計算

理論については 2.1.2 項で示した.本付録では,実際に表面粗さパワースペクトルを生成 するプログラミングコードを載せる.ただし,プログラミング言語は python2 を使用する. サンプルプログラムでは,ノイズ除去のために 100 データごとに波数とパワースペクト ルを平均したものを最終値として返している.本研究では周期境界を満たす理想的なセル フアフィン表面のみを取り扱ったが,実際の高さ計測データは周期境界ではなく,また計測 時にノイズを含む.そのため,離散フーリエ変換前に窓関数を掛けたり,メディアンフィル タに通す等のノイズ除去処理を行ったりする必要がある.

import numpy as np

h: 2D-array-height-data, dx: interval def SurfaceRoughnessPowerSpectrum(h, dx): h=np.array(h) nx = len(h)ny = len(h[0])lx = nx*dx $ly = ny^{*}dx$ A = lx * lyH = np.fft.fftshift(np.fft.fft2(h))*dx*dxnxhalf = nx/2nyhalf = ny/2Hquarter = np.abs(H[nxhalf:,nyhalf:]) coeff = 1/ACq2D = coeff*Hquarter*Hquarter dqx = 2*np.pi/lxdqy = 2*np.pi/lysize1D = nxhalf*nyhalf-1 q = [0.0] * size1D $\hat{C}q = [0.0]$ *size1D counter=0 for i in range(nxhalf): for j in range(nyhalf): if i != 0 or j != 0: q[counter] = np.sqrt(dqx*i*dqx*i+dqy*j*dqy*j) Cq[counter] = Cq2D[i][j]counter += 1# q-based sort qCq = zip(q,Cq)qCq.sort() q,Cq = zip(*qCq)q = list(q)Cq = list(Cq)

```
naverage = 100
if size1D % naverage == 0:
   size_aveq = size1D/naverage
else:
   size\_aveq = size1D/naverage+1
aveq = [0.0]*size_aveq
aveCq = [0.0]*size_aveq
for i in range(size_aveq-1):
   tempq = q[i*naverage:(i+1)*naverage]
tempCq = Cq[i*naverage:(i+1)*naverage]
aveq[i] = sum(tempq)/len(tempq)
aveCq[i] = sum(tempCq)/len(tempCq)
tempq = q[(size_aveq-1)*naverage:]
tempCq = Cq[(size_aveq-1)*naverage:]
aveq[size_aveq-1] = sum(tempq)/len(tempq)
aveCq[size_aveq-1] = sum(tempCq)/len(tempCq)
return aveq, aveCq
```

付録B セルフアフィンフラクタル表面の作成

理論については 2.3 節で示した.本付録では,実際に表面高さデータを生成するプログラ ミングコードを載せる.ただし,プログラミング言語は python2 を使用する.

```
import numpy as np
import random
import sys
## Hurst: Hurst number, N: x size, M: y size, seed: random seed
def FourierFilteringMethod(Hurst, N, M, seed):
  if Hurst <= 0 or Hurst >= 1:
    print "Hurst number must be 0<Hurst<1"
     sys.exit()
  random.seed(seed)
  H = [0] M for i in range(N)
  iunit = 1.0j
  coeff=(float(N)/M)**2
  for i in range(0, N/2+1):
     for j in range(0, M/2+1):
       phase = 2*np.pi*random.random()
       if i != 0 or i != 0:
         rad = (i*i+j*j*coeff)**(-(Hurst+1)/2)*random.gauss(0.0,1.0)
       else:
         rad = 0
       H[i][j] = rad*np.cos(phase)+iunit*rad*np.sin(phase)
       if i == 0:
         i0 = 0
       else:
         i0 = N-i
       if j == 0:
         j_{0} = 0
       else:
         j0 = M-j
       H[i0][j0] = rad*np.cos(phase)-iunit*rad*np.sin(phase)
  H[N/2][0] -= iunit*H[N/2][0].imag
  H[0][M/2] -= iunit*H[0][M/2].imag
  H[N/2][M/2] -= iunit*H[N/2][M/2].imag
  for i in range(1, N/2):
     for j in range(1,M/2):
       phase = 2*np.pi*random.random()
       rad = (i*i+j*j*coeff)**(-(Hurst+1)/2)*random.gauss(0.0,1.0)
       H[i][M-j] = rad*np.cos(phase)+iunit*rad*np.sin(phase)
       H[N-i][j] = rad*np.cos(phase)-iunit*rad*np.sin(phase)
  h = np.fft.ifft2(H)
  return h.real
```

表面粗さパワースペクトルから表面高さデータを生成し、その高さデータから表面パワ ースペクトルを再生成するプログラミングコードを以下に載せる.

以下の例では Hurst 数を 0.7,表面粗さパワースペクトルを両対数グラフでプロットした ときの切片を-5.0,離散点間隔を 0.5,離散点数を 256×256 とする.また,付録 A,付録 B に示した関数は既に定義済みとする.

表面高さデータを self_affine_fractal_surface.txt に,再生成した表面粗さパワースペクトル を surface_roughness_power_spectrum.txt に出力し,次ページにグラフを示す.

```
#input parameter
H = 0.7
log10K = -5.0
dx = 0.5
nx = ny = 256
### main ###
#create 2D height data based on Husrt number
seed = 12345
h = FourierFilteringMethod (H,nx,ny,seed)
#set RMS
h = h - np.array([[h.mean()]*ny for i in range(nx)])
rms = np.sqrt(np.sum(h*h)/(nx*ny))
K = 10.0 * * \log 10 K
lx = nx*dx
qmin = 2*np.pi/lx
qmax = 2*np.pi/dx
coeff = -2.0*H
rms target = np.sqrt(K*(qmin**coeff - qmax**coeff)/(4*np.pi*H))
scale = rms target/rms
h = h*scale
#create surface roughness power spectrum
q, Cq = SurfaceRoughnessPowerSpectrum(h,dx)
\log q = np.\log 10(q)
logCq = np.log10(Cq)
#print 2D height data
ofs = open("self affine fractal surface.txt","w")
for i in range(nx):
  for j in range(ny):
    print >>ofs, i*dx, j*dx, h[i][j]
  print >>ofs, ""
ofs.close()
#print surface roughness power spectrum
ofs = open("surface_roughness_power_spectrum.txt","w")
for (a, b) in zip(logq, logCq):
  print >>ofs, a,b
ofs.close()
```



Fig. B-1 : Example of self affine fractal surface.



Fig. B-2 : Example of power spectrum density of surface roughness.

付録C 要素内局所座標の計算法

原子座標 (x_a, y_a, z_a) から, FEM において対応する要素内の局所座標を求める計算方法について示す.

謝辞

要素を構成するi番目の節点座標を(\mathbf{x}_i, y_i, z_i)とすると、局所座標(ξ, η, ζ)は以下の関係式を満たす.

$$x_{a} = \sum_{i}^{N} N_{i}(\xi, \eta, \zeta) x_{i}$$
$$y_{a} = \sum_{i}^{N} N_{i}(\xi, \eta, \zeta) y_{i}$$
$$z_{a} = \sum_{i}^{N} N_{i}(\xi, \eta, \zeta) z_{i}$$

これは未知数(ξ , η , ζ)についての連立非線形方程式である. そのため, Newton-Raphson 法を 用いて解くことが可能である.

$$f_x(\xi,\eta,\zeta) = \sum_{i}^{N} N_i(\xi,\eta,\zeta) x_i - x_a = 0$$

$$f_y(\xi,\eta,\zeta) = \sum_{i}^{N} N_i(\xi,\eta,\zeta) y_i - y_a = 0$$

$$f_z(\xi,\eta,\zeta) = \sum_{i}^{N} N_i(\xi,\eta,\zeta) z_i - z_a = 0$$

$$\xi_{k+1} = \xi_k + \Delta \xi$$
$$\eta_{k+1} = \eta_k + \Delta \eta$$
$$\zeta_{k+1} = \zeta_k + \Delta \zeta$$

$$\begin{cases} \Delta \xi \\ \Delta \eta \\ \Delta \zeta \end{cases} = -\mathbf{A}^{-1} \begin{cases} f_x(\xi_k, \eta_k, \zeta_k) \\ f_y(\xi_k, \eta_k, \zeta_k) \\ f_z(\xi_k, \eta_k, \zeta_k) \end{cases}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_x}{\partial \xi} & \frac{\partial f_x}{\partial \eta} & \frac{\partial f_x}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial f_y}{\partial \xi} & \frac{\partial f_y}{\partial \eta} & \frac{\partial f_y}{\partial \zeta} \\ \frac{\partial f_z}{\partial \xi} & \frac{\partial f_z}{\partial \eta} & \frac{\partial f_z}{\partial \zeta} \end{pmatrix}$$

謝辞

謝辞

本研究を進めるにあたり,多くの方からご指導,ご協力を頂きました.感謝申し上げます. 泉聡志教授には,学部時代より3年間指導教員としてご指導して頂きました.研究会や打 ち合わせ等において相談させて頂く度に鋭いご指摘を頂き,ここまで研究を進めることが できました.学会や講習会を含めまして,多くの学外のイベントにも参加させて頂き,非常 に刺激的な研究生活になりました.また,研究の詳細に留まらず,研究者としてあるべき姿 勢や研究者的思考についてお話を伺うことができ,大変勉強になりました.誠にありがとう ございました.

酒井信介教授には、研究会や授業におきまして多くの知見をご教授頂きました.酒井教授 からご指導いただいた統計的考え方や手法は今回の研究のみでなく、今後の人生において 様々な場面で生かせると思っております.誠にありがとうございました.

波田野明日可助教授には、本研究で有限要素法を実際にプログラミングするにあたり、数 多くの詳細な助言を頂きました.波田野助教授のご協力のもと、FEM-MD 連成解析シミュ レータを完成させることができました.誠にありがとうございました.

マツダ株式会社の宮内勇馬氏には、マツダの次世代エンジンの開発計画について教えて 頂き、その夢ある研究の一部に関わらせて頂きました.本研究テーマは私にとってとても興 味深く、研究していて楽しいものでした.打ち合わせの際にはいつも鋭いご指摘を頂きつつ、 激励して頂きました.また実際に本社の中や工場、ミュージアムを見学させて頂き、マツダ 車の魅力を存分に伝えて頂きました.誠にありがとうございました.

本研究室の OB であり千葉工業大学の原祥太郎准教授には,FEM-MD 連成手法のアルゴ リズムについて数多くの知見をご教授頂きました.また実際にプログラムのソースコード を頂き,シミュレータの開発の際に参考にさせて頂きました.シミュレータの開発が進まな くなったときは,親身にご相談にのって頂きました.誠にありがとうございました.

博士研究員の高本聡氏には, FEM, MD, および FEM-MD 連成についての基礎理論から 実際のコーディングにわたって, 数多くのご相談をさせて頂き, その度に的確な助言を頂き ました. 誠にありがとうございました.

修士課程1年の神田英慈氏には、固体間摩擦の研究について協力しあい、非常によく研究 し、その知見を頂きました. 誠にありがとうございました.

秘書の皆様には、書類申請や備品の手配等、陰ながら厚くご支援賜りました.

研究室の同期を含む酒井・泉研究室の諸兄には,日頃の研究生活を通して,大変お世話に なりました.お陰様で充実した研究室での日々を過ごすことができました.

これまで心身両面から私を支えてくださった家族にも別段の感謝を捧げます.

参考文献

- K. Holmberg, P. Andersson, and A. Erdemir, "Global energy consumption due to friction in passenger cars," *Tribol. Int.*, vol. 47, pp. 221–234, 2012.
- [2] R. Stribeck, "Characteristics of Plain and Roller Berings," Zeit. Ver. Deutsch. Ing., vol. 46, 1902.
- [3] S. Shinya, "Surface Texturing for Improvement of Tribological Properties," J. Surf. Finish. Soc. Japan, vol. 65, no. 12, pp. 568–572, 2014.
- [4] E. Rabinowicz, "Friction and Wear of Materials," 2nd ed., Wiley Interscience, 1995.
- [5] H. Hertz, "Über die berührung fester elastischer körper," *J. für die Reine und Angew. Math.*, vol. 92, pp. 156–171, 1881.
- [6] J. A. Greenwoood and J. B. P. Williamson, "Contact of norminally flat surfaces," *Proceeding R. Soc. London Ser. A*, pp. 300–319, 1966.
- [7] マシュー・メイト, "マイクロ・ナノスケールのトライボロジー -摩擦, 潤滑, 摩耗への ボトムアップ的探究-,"吉岡書店, 2013.
- [8] 松川宏, "摩擦の物理," 岩波書店, 2012.
- [9] F. Heslot, T. Baumberger, B. Perrin, B. Caroli, and C. Caroli, "Creep, stick-slip and dry-friction dynamics:Experiments and a heuristic model," *Phys. Rev. E*, vol. 49, pp. 4973–4988, 1994.
- [10] M. Hirano, K. Shinjo, R. Kaneko, and Y. Murata, "Observation of Superlubricity by Scanning Tunneling Microscopy," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 78, no. 8, pp. 1448–1451, 1997.
- [11] Y. Frenkel and T. Kontrova, "No Title," *Phys. Z. Sowietunion*, vol. 13, no. 1, 1938.
- [12] J. S. Ko and A. J. Gellman, "Friction anisotropy at Ni(100)/Ni(100) interfaces," *Langmuir*, vol. 16, no. 22, pp. 8343–8351, 2000.
- [13] G. He, M. H. Müser, and M. O. Robbins, "Adsorbed Layers and the Origin of Static Friction," *Science* (80-.)., vol. 284, no. 5420, pp. 1650–1652, 1999.
- [14] Y. Qi, Y.-T. Cheng, T. Çağin, and W. A. Goddard, "Friction anisotropy at Ni(100)/(100) interfaces: Molecular dynamics studies," *Phys. Rev. B*, vol. 66, no. 8, p. 85420, 2002.
- [15] S. Hyun and M. O. Robbins, "Elastic contact between rough surfaces: Effect of roughness at large and small wavelengths," *Tribol. Int.*, vol. 40, no. 10–12 SPEC. ISS., pp. 1413–1422, 2007.
- [16] 世古口涼, "Cohesive Zone Modelを用いた有限要素法解析による凹凸を有する摺動面の摩 擦係数予測,"東京大学 修士論文, 2017.
- [17] U. Landman, W. D. Luedtke, N. A. Burnham, and R. J. Colton, "Atomistic Mechanisms and Dynamics of Adhesion, Nanoindentation, and Fracture," *Science (80-.).*, vol. 248, no. 454, 1990.
- [18] M. Sorensen, K. Jacobsen, and P. Stoltze, "Simulations of atomic-scale sliding friction," Phys.

Rev. B, vol. 53, no. 4, pp. 2101–2113, 1996.

- [19] L. Zhang and H. Tanaka, "Towards a deeper understanding of wear and friction on the atomic scale—a molecular dynamics analysis," *Wear*, vol. 211, no. 1, pp. 44–53, 1997.
- [20] B. Li, P. C. Clapp, J. A. Rifkin, and X. M. Zhang, "Molecular dynamics simulation of stick-slip," *J. Appl. Phys.*, vol. 90, no. 6, pp. 3090–3094, 2001.
- [21] B. Li, "Molecular dynamics calculation of heat dissipation during sliding friction," Int. J. Heat Mass Transf., vol. 46, pp. 37–43, 2003.
- [22] U. Tartaglino, V. N. Samoilov, and B. N. J. Persson, "Role of surface roughness in superlubricity," J. Phys. Condens. Matter, vol. 18, no. 17, pp. 4143–4160, 2006.
- [23] K. L. Johnson, K. Kendal, and A. D. Roberts, "Surface energy and the contact of elastic solids," *Proceeding R. Soc. London Ser. A*, vol. 324, pp. 301–313, 1971.
- [24] B. V. Derjaguin, V. M. Muller, and Y. P. Toporov, "Effect of contact deformations on adhesion of particles," J. Colloid Interface Sci., vol. 53, pp. 314–326, 1975.
- [25] Y. Mo, K. T. Turner, and I. Szlufarska, "Friction laws at the nanoscale.," *Nature*, vol. 457, no. 7233, pp. 1116–1119, 2009.
- [26] P. Spijker, G. Anciaux, and J. F. Molinari, "Dry sliding contact between rough surfaces at the atomistic scale," *Tribol. Lett.*, vol. 44, no. 2, pp. 279–285, 2011.
- [27] P. Spijker, G. Anciaux, and J. F. Molinari, "The effect of loading on surface roughness at the atomistic level," *Comput. Mech.*, vol. 50, no. 3, pp. 273–283, 2012.
- [28] P. Spijker, G. Anciaux, and J. F. Molinari, "Relations between roughness, temperature and dry sliding friction at the atomic scale," *Tribol. Int.*, vol. 59, pp. 222–229, 2013.
- [29] S. Kajita, H. Washizu, and T. Ohmori, "Deep bulk atoms in a solid cause friction," *Europhys. Lett.*, vol. 87, no. 6, p. 66002, 2009.
- [30] S. Kajita, H. Washizu, and T. Ohmori, "Approach of semi-infinite dynamic lattice Green's function and energy dissipation due to phonons in solid friction between commensurate surfaces," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 82, no. 11, pp. 1–16, 2010.
- [31] S. Kajita, H. Washizu, and T. Ohmori, "Simulation of solid-friction dependence on number of surface atoms and theoretical approach for infinite number of atoms," *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 86, no. 7, pp. 1–8, 2012.
- [32] L. C. C. Zhang, K. L. L. Johnson, and W. C. D. C. D. Cheong, "A molecular dynamics study of scale effects on the friction of single-asperity contacts," *Tribol. Lett.*, vol. 10, no. 1, pp. 23–28, 2001.
- [33] R. Aghababaei, D. H. Warner, and J. F. Molinari, "Critical length scale controls adhesive wear mechanisms," *Nat. Commun.*, vol. 7, no. May, pp. 1–8, 2016.
- [34] W. a Curtin and R. E. Miller, "Atomistic / continuum coupling in computational materials science," *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 11, pp. R33–R68, 2003.

- [35] R. E. Miller and E. B. Tadmor, "A unified framework and performance benchmark of fourteen multiscale atomistic/continuum coupling methods," *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 17, no. 53001, 2009.
- [36] B. Q. Luan, S. Hyun, J. F. Molinari, N. Bernstein, and M. O. Robbins, "Multiscale modeling of two-dimensional contacts," *Phys. Rev. E - Stat. Nonlinear, Soft Matter Phys.*, vol. 74, no. 4, pp. 1–11, 2006.
- [37] B. Luan and M. O. Robbins, "Hybrid atomistic/continuum study of contact and friction between rough solids," *Tribol. Lett.*, vol. 36, no. 1, pp. 1–16, 2009.
- [38] P. R. Nayak, "Random Process Model of Rough Surfaces," J. Lubr. Technol., vol. 93, pp. 398– 407, 1970.
- [39] 吉村侯泰,"部分接触および非線形粘弾性を考慮したマルチスケール性に基づくタイヤゴムの摩擦係数予測およびその実験的検証,"東京大学 修士論文, 2016.
- [40] B. N. J. Persson, O. Albohr, U. Tartaglino, A. I. Volokitin, and E. Tosatti, "On the nature of surface roughnes with application to contact mechanics, sealing, rubber friction and adhesion," J. Phys. Condens. Matter, vol. 17, pp. 1–62, 2005.
- [41] A. Fournier, D. Fussell, and L. Carpenter, "Computer Rendering of Stochastic Models," *Commun. ACM*, vol. 25, no. 6, pp. 371–384, 1982.
- [42] H. Peitgen and D. Saupe, "The Science of Fractal Images," Springer, 1988.
- [43] G. S. P. Miller, "The Definition and Rendering of Terrain Maps," ACM SIGGRAPH Comput. Graph., vol. 20, no. 4, pp. 39–48, 1986.
- [44] S. Kohlhoff, P. Gumbsch, and H. F. Fischmeister, "Crack propagation in bcc crystals studied with a combined finite-element and atomistic model," *Phil. Mag. A*, vol. 64, no. 4, pp. 851–878, 1991.
- [45] L. E. Shilkrot, R. E. Miller, and W. A. Curtin, "Coupled atomistic and discrete dislocation plasticity," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 89, no. 25501, 2002.
- [46] L. E. Shilkrot, R. E. Miller, and W. A. Curtin, "Multiscale plasticity modeling: Coupled atomistic and discrete dislocation mechanics," *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 52, no. 4, pp. 755–787, 2004.
- [47] I. Satoshi, K. Takashi, and S. Shinsuke, "シリコンのFEM-MD結合手法," 日本機械学会論文 集(A編), vol. 65, no. 638, pp. 22–28, 1999.
- [48] S. Qu, V. Shastry, W. a Curtin, and R. E. Miller, "A finite-temperature dynamic coupled atomistic/discrete dislocation method," *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 13, pp. 1101–1118, 2005.
- [49] N. Mathew, R. C. Picu, and M. Bloomfield, "Concurrent coupling of atomistic and continuum models at finite temperature," *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 200, no. 5–8, pp. 765– 773, 2011.
- [50] S. B. Ramisetti, G. Anciaux, and J. F. Molinari, "A concurrent atomistic and continuum coupling method with applications to thermo-mechanical problems," *Int. J. Numer. Methods Eng.*, vol. 97,

pp. 707–738, 2014.

- [51] S. B. Ramisetti, G. Anciaux, and J. F. Molinari, "Spatial filters for bridging molecular dynamics with finite elements at finite temperatures," *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, vol. 253, pp. 28– 38, 2013.
- [52] S. Hara, T. Kumagai, S. Izumi, and S. Sakai, "Multiscale analysis on the onset of nanoindentation-induced delamination: Effect of high-modulus Ru overlayer," *Acta Mater.*, vol. 57, no. 14, pp. 4209–4216, 2009.
- [53] "LAMMPS WWW Site." [Online]. Available: http://lammps.sandia.gov.
- [54] S. Plimpton, "Fast parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics.," J. Comput. Phys., vol. 117, pp. 1–19, 1995.
- [55] J. M. Winey, A. Kubota, and Y. M. Gupta, "Thermodynamic approach to determine accurate potentials for molecular dynamics simulations: Thermoelastic response of aluminum," *Model. Simul. Mater. Sci. Eng.*, vol. 17, no. 55004, 2009.
- [56] "ParaView WWW Site." [Online]. Available: https://www.paraview.org.
- [57] B. Luan and M. O. Robbins, "The breakdown of continuum models for mechanical contacts.," *Nature*, vol. 435, no. 7044, pp. 929–32, 2005.
- [58] S. Solhjoo and A. I. Vakis, "Definition and detection of contact in atomistic simulations," *Comput. Mater. Sci.*, vol. 109, pp. 172–182, 2015.

以上

修士論文

固体間摩擦解析のための 有限要素法−分子動力学連成解析手法の開発

p.1 - p.94 完

2018年1月29日

指導教員 泉 聡志 教授

37-166224 松下 輝