

機械学習を用いたトライボフィルムの化学分析と 摩擦面の形状測定による摩擦係数の推定

Estimation of friction coefficient from chemical analysis of tribofilms and
profilometry of friction surface using machine learning

東工大・院（学）*野間 央 東工大（正）青木 才子 出光興産（正）小林 兼士

Hiroshi Noma*, Saiko Aoki*, Kenji Kobayashi**

*Tokyo Institute of Technology, **Idemitsu Kosan Co.,Ltd.

1. 緒言

自動車の燃費効率向上の方策として潤滑油の低粘度化は有効な手段の一つである。潤滑油の低粘度化に向けて、混合・境界潤滑領域での摩擦摩耗の低減、焼付きの防止などの課題を克服する必要がある。潤滑油に含まれる添加剤が重要な鍵となる。例えば、ATF, CVTF 等変速機油では、リン(P)、硫黄(S)系極圧剤やカルシウム(Ca)系清浄剤など各種添加剤併用下で形成される反応被膜（トライボフィルム）が境界潤滑下での摩擦摩耗特性の制御に寄与するため、複数の添加剤併用下で形成されるトライボフィルムの化学組成や構造、その摩擦発現機構を明らかにする必要がある。既往研究において、P 系極圧剤と Ca 系清浄剤の併用により摩擦増大を確認し、これは Ca 系清浄剤の添加に伴うトライボフィルムを含む摩擦面形状の変化に起因すると考察した¹⁾。P 系および Ca 系添加剤の併用と摩擦増大との因果関係を明らかにするため、トライボフィルムの元素分布や摩擦面の表面形状など種々の因子と摩擦係数との相関性を統括的に検討することが必要である。そこで、本研究では、機械学習を導入して摩擦係数に関連する因子を特徴量として抽出し、摩擦係数と特徴量との相関性を明らかにすることに着想した。P, S, Ca 系の各種添加剤併用下における摩擦試験により得られた実験データを用いて各種機械学習モデルを構築し、摩擦に関与する因子の相関性を評価した。

2. 摩擦係数の推定に向けた機械学習モデルの構築プロセス

2.1 摩擦面の形状測定および化学分析によるデータ収集

自作の高速往復動摩擦試験機を用いて摩擦試験を実施した。試料油温度 100°C、試験荷重 29 N、試験時間 4 h として、上部ボール試験片 (SUJ2, ϕ 9.525 mm) を振動数 15 Hz、振幅 2.8 mm で往復しゅう動させ、下部ディスク試験片 (SUJ2, ϕ 8×8 mm) の間で生じる摩擦力を測定し摩擦係数を算出した。供試油には、基油として 100 °C における動粘度が 3.88 mm²/s であるポリ α オレフィン (PAO), P 系および S 系極圧剤としてリン酸トリクレジル (TCP, Tricresyl Phosphate) およびジベンジルジスルフィド (DBDS, Dibenzyl Disulfide), Ca 系清浄剤として過塩基性カルシウムスルホネート (OBCS, Overbased Calcium Sulfonate) を用いて、各添加剤濃度が異なる 36 種類の試料油を準備した。

摩擦試験後、ディスク試験片に形成した摩耗痕の形状測定およびトライボフィルムの元素分析を共焦点レーザ顕微鏡および電子線マイクロアナライザ (EPMA, Electron Probe Micro Analyzer) を用いてそれぞれ実施した。分析位置は摩耗痕の中央部とした。レーザ顕微鏡により摩耗痕表面の高さ像を測定し、12 種類の粗さパラメータを算出した。12 種類の粗さパラメータは、算術平均粗さ (S_a)、アスペクト比 (S_{tr})、クルトシス (S_{ku})、スキューネス (S_{sk})、山頂点密度 (S_{pd})、山部の実体体積 (V_{mp})、谷部の空隙容積 (V_{vv})、突出山部高さ (S_{pk})、突出谷部高さ (S_{vk})、突出山部とコア部を分離する負荷面積率 (S_{mr1})、突出谷部とコア部を分離する負荷面積率 (S_{mr2})、極点高さ (S_{xp}) である。EPMA により摩耗痕内に形成されたトライボフィルムの P, S, Ca 元素のマッピング画像を測定し、P および Ca について元素強度と元素分布のアスペクト比を算出した。元素マッピング画像から強度に対する頻度分布より算出された最頻値を元素強度と定義した。一方、元素分布のアスペクト比は、0.2 以上の自己相関係数の領域から近似楕円を算出し、近似楕円の短径を長径で割ることで算出した。本研究では S の検出量は極僅かであったため、S の元素強度およびアスペクト比の算出は実施しなかった。

2.2 機械学習モデルの構築

機械学習モデルの入力値として利用した特徴量は、粗さパラメータ (S_a , S_{tr} , S_{ku} , S_{sk} , S_{pd} , V_{mp} , V_{vv} , S_{pk} , S_{vk} , S_{mr1} , S_{mr2} , S_{xp}) およびトライボフィルムの元素分布特性 (P および Ca の元素強度およびアスペクト比) の計 16 個である。一方、出力値は、摩擦試験終了時の平均摩擦係数であり、摩擦係数を推定する回帰モデルを構築した。機械学習モデルの構築に使用したデータセットのデータ数は、試料油の数と同じ 36 個であり、ランダムに 4:1 の割合で訓練データセットとテストデータセットを分割した。さらに、機械学習ライブラリの scikit-learn の中の GridSearchCV による交差検証を行うことで、機械学習モデルのハイパーパラメータを調整した。ハイパーパラメータの調整では、訓練データセットを CV = 5 で分割した内の 1 つを検証データセットとし、最も性能が高いハイパーパラメータを選択した。機械学習モデルには、重回帰分析 (MLR)、リッジ回帰 (RR)、ラッソ回帰 (LR)、k-近傍法 (KNN)、ランダムフォレスト (RF)、バギング (BR)、アダブースト (AB) の 7 種類を使用した。

次に、摩耗痕の高さ分布やトライボフィルムの元素分布である画像データを入力値として用いることで、高さ分布および元素分布における一つ一つのピクセル情報から特徴を捉え、摩擦係数を予測する畳み込みニューラルネットワ

ーク(CNN)モデルの構築と次元削減を行った。また、Gradient-weighted class activation mapping (Grad-CAM)を用いて、出力値予測に重要な画像内の箇所を可視化し、摩擦係数予測に重要な元素分布の特徴について検討した。CNN モデルの入力値には、共焦点レーザ顕微鏡により測定された摩耗痕表面の高さ像と EPMA による元素マッピング画像を用いた。高さ像および元素マッピング画像の両方ともグレースケールに変更に CNN モデル用にリサイズした。また、元素マッピング画像について、リサイズ後のグレースケールの画像に RGB カラースケールを合わせて、3つのPの元素マッピング画像からなるP-P-P画像データセット、P、S、Caの元素マッピング画像からなるP-S-Ca画像データセット、3つのCa元素マッピング画像からなるCa-Ca-Ca画像データセットの3種類のRGBカラー画像データセットを作成し、高さ像データセットを含め、計4種類の画像データセットを準備した。出力値には摩擦試験終了時の平均摩擦係数を用い、0.08から0.13の6つの摩擦係数クラスを予測する分類モデルを構築した。CNNモデルを構築するために、36個のオリジナルの画像データをランダムに4:1の割合で訓練データセットとテストデータセットに分割し、180度回転させた画像データや反転させた画像データを作成することで、画像データ数を試料油の数の4倍の144個に拡張させた。CNNモデルには、残差ネットワーク(ResNet, Residual network)の一つであるResNet18を用いた。本研究では検証データセットを作成せずに、ResNetモデルのハイパーパラメータを調整することで精度の向上に努めた。

3. 結果および考察

3.1 決定木系機械学習モデルによる摩擦係数の推定

摩擦係数を推定する機械学習モデルを構築し、機械学習モデル性能を評価した。得られた結果より、本研究で構築した機械学習モデルの中ではABが最も高い性能を示した。また、摩擦係数の推定する際、決定木を用いた機械学習モデルでは分岐する際のジニ不純度の減少幅を算出することで各特徴量の重要度を評価することができる。ABにおける特徴量重要度の結果をFig.1に示す。Figure1より、Caの元素強度およびアスペクト比は摩擦係数の推定に重要な特徴量であることが推察される。

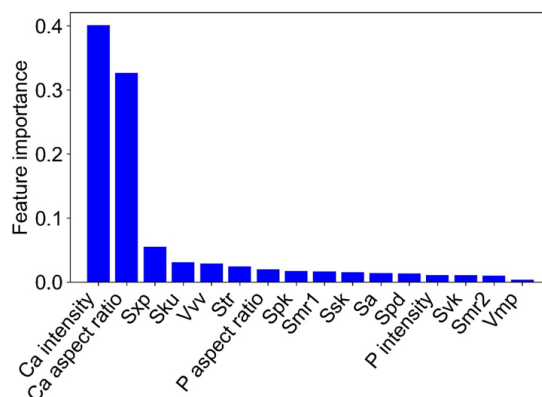


Fig. 1 The result of the feature importance using AB

3.2 CNNモデルによる画像からの摩擦係数クラス分類

4種類の画像データセットから摩擦係数クラスを分類するCNNモデルを構築し、CNNモデル性能を評価した。得られた結果より、P-S-Ca画像データセットが最も高い性能を示した。P-S-Ca画像データセットにおける高摩擦係数グループのGrad-CAM結果をFig.2に示す。Figure2より、摩擦係数クラス分類における画像内の特徴を可視化することにより、TCPとOBCSの併用下ではしゅう動方向に平坦に延びた高強度の分布に加え、摩耗痕端部でのトライボフィルムの形成が顕著な特徴として現れ、この特徴を捉えることで高摩擦係数グループにクラス分類したことが伺える。

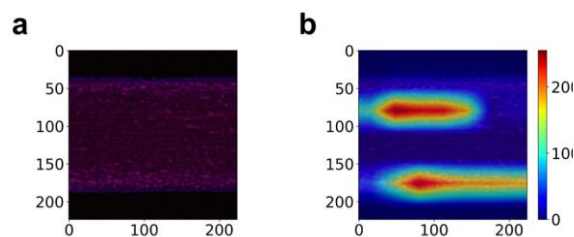


Fig. 2 The Grad-CAM result of the high friction group (a: original image, b: Grad-CAM image)

3.3 機械学習モデルが示す摩擦現象の妥当性

Grad-CAMと次元削減の結果より、摩擦係数クラス分類において摩耗痕端部の元素分布が大きく寄与していることがわかった。Figure3は、摩耗痕の高さ分布およびEPMAの元素マッピングをもとに作成したトライボフィルムの模式図である。TCPとOBCSの併用下では、摩耗痕端部において高強度のCaの分布であると同時に、摩耗痕中央部よりも端部の方が高くなっており、摩耗痕端部に高強度Caリッチなトライボフィルムが形成していることが伺える。これが潤滑油の中央部への流入や相手摩擦材との接触頻度などに影響を及ぼした結果、摩擦増大に起因したことが考えられる。

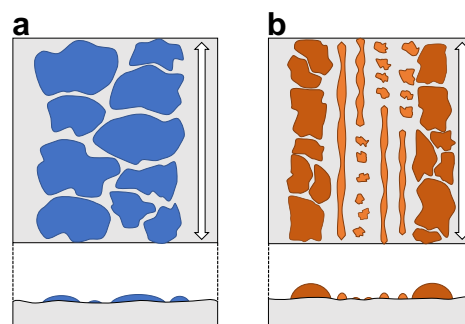


Fig. 3 The tribofilm formation (a: without OBCS, b: with OBCS)

4. 結言

本研究では、複数の添加剤併用下で形成されたトライボフィルムについて摩擦を制御する因子を抽出するため、機械学習を導入し、摩耗痕の高さ分布やトライボフィルムの元素分布を特徴量として摩擦係数を推定する機械学習モデルを構築した。機械学習モデルおよびCNNモデルから得られた結果より、摩擦係数の推定においてトライボフィルムの元素強度だけでなく元素分布も重要な因子であることが明らかになり、機械学習は実際の摩擦現象を理解する上で有用な手段であると言える。

文献

- 1) 野間・青木・小林, トライボロジー会議 2022 秋 福井, B29.