

深層学習と説明可能 AI を用いた トライボフィルム化学組成と耐摩耗性能の相関解析

Correlation Analysis of Tribofilm Chemical Composition and Antiwear performance Using Deep Neural Network and Explainable AI

JAXA・科学大（正）*横山 崇 JAXA（正）間庭 和聡,（正）松本 康司 科学大（正）青木 才子

Takashi Yokoyama*, **, Kazuaki Maniwa*, Koji Matsumoto*, Saiko Aoki**

*Japan Aerospace Exploration Agency, **Institute of Science Tokyo

1. はじめに

月面有人探査計画等の宇宙ミッションの多様化が進むにつれ、宇宙機器の大型化、高速駆動化と、それに伴う機器しゅう動部の高負荷化が予想される。従来の宇宙機器では低蒸気圧のシクロペンタン油 (Multiply-alkylated cyclopentane, MAC) またはフッ素油 (Perfluoropolyether, PFPE) を極少量塗布する潤滑方式が用いられているが、将来予想される高負荷なしゅう動に対し耐摩耗性能が不足する可能性がある。そこで、耐摩耗添加剤を配合した潤滑油を浸漬条件下で用いる、宇宙機器では前例のない潤滑方式の実現を目指す。

地上機器ではリンや硫黄を含有する耐摩耗添加剤が多用されており、しゅう動面にリン酸塩や硫化物のトライボフィルムを形成して摩耗を抑制するトライボ化学的メカニズムについて、多数の報告がなされている¹⁾。一方、真空中における耐摩耗添加剤の作用に関する報告は限られている。著者らによる既報^{2,3)}にて、添加剤の分子構造を表す 100 以上のパラメータから大気および真空中の摩耗量を予測する機械学習モデルを構築し、ヒドロキシ基含有リン酸エステル等の真空中に適する組成を見出した。ただし、既報ではトライボフィルムに関する情報が含まれておらず、トライボ化学現象を正確に把握する上で改善の余地があった。

そこで本研究では、大気および真空中で形成されたトライボフィルムの化学組成としゅう動条件から摩耗量を予測する機械学習モデルを構築し、トライボフィルム化学組成と耐摩耗性能との相関を解析した。機械学習を活用することでトライボフィルム構成元素の比率や厚みなどパラメータ数の多い高次元データから傾向を見出すことができると考えた。構築した機械学習モデルを説明可能 AI で解析し、摩耗量と相関の強いトライボフィルム化学組成を見出し、真空中の耐摩耗添加剤のトライボ化学作用を解明することで真空中に適する添加剤組成を検討した。

2. 機械学習の活用コンセプト

昨今、大量の教師データを学習させ、潤滑油性能等を高精度に予測可能なモデルを構築する方法がしばしば用いられている⁴⁾。しかし、本研究で対象とする真空中の添加剤の特性に関する既往報告は少なく、著者らが実施できる真空試験数にも限りがある。そこで、少量のデータを用いて機械学習を活用しトライボ化学研究を推進するための工夫として、「特定のデータの予測に特化した AI/機械学習モデルを多量に構築する」手法を試行した。

3. 試験方法・分析方法

Table 1 に評価に供したリン、硫黄を含む耐摩耗添加剤を示す。リン酸エステル 4 種、亜リン酸エステル 2 種、有機硫黄化合物 2 種、チオリン酸 2 種である。芳香族の有無、不飽和結合の有無、リン酸エステルについてはモノエステル、ジエステル、トリエステルと、多様な化学構造の種類を網羅するように用意した。これらの添加剤を Poly- α -olefin (PAO) に 0.1 mass% P または 0.1 mass%S の濃度で溶解させ、試料油を調製した。

この試料油を用い Ball-on-disk 摩擦試験を実施してボール摩耗量を計測した。SUS440C 鋼のボールとディスクを用いた。試験条件は最大接触面圧 1.3 GPa、すべり速度 0.5 m/s、しゅう動距離 10.8 km、温度 80 °C、オイル浸漬条件とした。雰囲気は大気または $10^0 \sim 10^{-1}$ Pa 台の低真空とした。

摩擦試験後の試料を XPS 分析に供した。分析箇所はボールおよびディスクのしゅう動面内と、ディスクの非しゅう動面の 3 箇所とした。分析は C 1s, O 1s, P 2p, S 2p, Cr 2p, Fe2p とし、相対感度係数を用いてそれらのピークの面積を元素比率に換算した。

4. 解析方法

4.1 深層学習モデル(DNN)の構築

Figure 1 に解析手順を示した。初めに、XPS 分析結果およびしゅう動条件から摩耗量を予測する DNN を構築した。なお、入力したしゅう動条件は雰囲気条件（大気成分の有無）と添加剤のリンおよび硫黄の元素濃度であり、これらの情報はしゅう動に伴うトライボフィルムの生成と破壊に影響を与える因子と推定し入力した。

DNN の構築にあたっては、入出力データセットのうち 1 つを抽出し、そのデータ以外のデータを訓練データとしてモデル学習を行い、抽出した残りの 1 つ

Table 1 Evaluated additives

Code	Chemical name
DEHP	Di(2-ethylhexyl) phosphate
OP	Mono/Di oleyl phosphate
TCP	Tricresyl phosphate
TEHP	Tris(2-ethylhexyl) phosphate
THPi	Trihexyl phosphite
TBPI	Tributyl phosphite
OS	Olefin sulfide
DBDS	Dibenzyl disulfide
TASP	Trialkyl dithiophosphate
DTP	Dithiophosphate

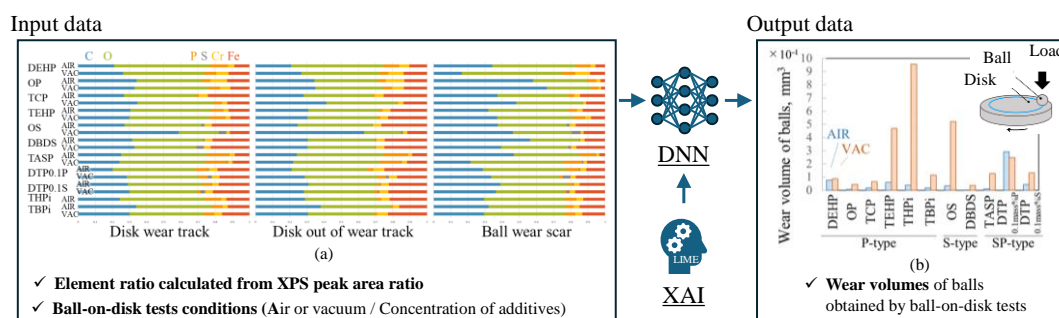


Fig. 1 Analyses procedure. (a) Element ratio calculated from XPS peak area ratio, (b) Wear volumes obtained by friction tests.

のデータセットをテストデータとして、摩擦量を高精度に予測するよう構築した。すなわち、摩擦試験数と同数の DNN を構築した。

それぞれの DNN は 3 層の多層パーセプトロンで構築し、損失は平均二乗誤差とした。Leave-one-out 交差検証とドロップアウトを用いた。エポック数とバッチサイズはランダムサーチおよび Optuna により決定した。ノード数と活性化関数は、1 層目 64-ReLU, 2 層目 32-ReLU, 3 層目 20-Sigmoid とした。

次いで、構築した多数の DNN の予測値と実際の摩擦試験で得られた摩擦量の誤差を評価し、決定係数 R^2 が 0.7 以上となるよう、予測精度の高いモデルを抽出した。

4.2 説明可能 AI(XAI)による解析

抽出された DNN に対し XAI の LIME を用い、各入力データが摩擦量の予測に影響を及ぼした度合い（特徴量寄与度）を算出した。得られた寄与度から、摩擦量の増大および低減に対する影響度合いをスコアとして算出した。

5. 結果・考察

Figure 1 (b)に摩擦試験で得た摩擦量の結果を、Fig. 1 (a)に XPS 分析により得た元素比率の結果を示す。これらの結果を用いて構築した DNN の R^2 は 0.9 以上となり、トライボフィルムの化学組成と摩擦量との相関関係を精度良く得た。次いで、XAI による解析結果を Fig. 2

に示す。スコアは摩擦増減との相関の強さを示している。次の結果を得た。(1) 大気存在は摩擦低減と相関が強い、(2) トライボフィルム中の硫黄量は摩擦増大と相関が強い、(3) トライボフィルム中のリンおよび酸素の組成は、大気中では摩擦増大と、真空中では摩擦減少と相関が強い。

これらの相関関係がトライボ化学的な因果関係として妥当であるか判断する必要がある。まず、(1)は大気中酸素の新生面保護作用³⁾や大気中水分のリン酸エステル加水分解反応の促進^{2,3)}に関する既往研究と合致した。(2)は Hard and Soft Acid and Base (HSAB)則より硫黄組成が新生面に作用しやすことから、新生面の露出頻度を反映したものと推測された。(3)は、加水分解反応を介さず金属表面に作用できるヒドロキシ基含有リン酸エステルが真空中に適するとの既報^{2,3)}と合致した。

6. まとめ

真空中の耐摩擦添加剤のトライボ化学作用を解明し、宇宙用潤滑油に適する添加剤組成を検討するため、トライボフィルムの化学組成およびしゅう動条件と摩擦量との相関を機械学習により解析した。その結果、耐摩擦性能に対し最も影響度が大きい因子は大気存在であること、また、真空中ではトライボフィルムとしてリン酸塩の形成のされやすさが重要となる可能性が示唆される結果が得られた。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 24K07297 の助成を受けたものです。また、ENEOS 株式会社より潤滑油試料をご提供いただきました。深く御礼申し上げます。

文献

- 1) B. Kim, R. Mourhatch, P. B. Aswath, Properties of tribofilms formed with ashless dithiophosphate and zinc dialkyl dithiophosphate under extreme pressure conditions, *Wear* 268 (2010) 579–591
- 2) 横山・青木：深層学習と説明可能 AI の併用による宇宙用潤滑油の検討，第 68 回宇宙科学技術連合講演会 予稿集
- 3) T. Yokoyama, K. Maniwa, K. Matsumoto, S. Obara, S. Aoki : Performance of the Antiwear Additives under Lubricants Immersion Condition in Vacuum, 49th Leeds-Lyon Symposium on Tribology 2024
- 4) 小林：潤滑油の耐摩擦性能予測における機械学習の適用 第 2 報，トライボロジー会議 2024 春 東京 予稿集