

非ガウス分布に従う材料表面の計算機合成

Computer synthesis of non-gaussian material surfaces

阪公大・工（学）*森島 達弥 東理大・工（正） 佐藤 魁星 東理大・工（正） 佐々木 信也
 モルゲンロット株式会社（非） 伊藤 寿 阪公大・工（正） 桑原 卓哉
 Tatsuya Morishima*, Kaisei Sato**, Shinya Sasaki**, Hiroshi Ito***, Takuya Kuwahara*
 *Osaka Metropolitan University, **Tokyo University of Science, ***Morgenrot Corporation

1. 緒言

材料表面が有する幾何形状（粗さ）は、摩擦・接着・濡れ・熱伝導といった様々な特性・機能に影響を及ぼす。特に、ナノスケールの凹凸（アスペリティ）は、真実接触域における垂直応力を左右し、添加剤由来のトライボフィルムの生成の起点となる。故に、形状の正確な測定と得られたデータを活用した数値解析が、特性・機能の予測・制御に求められる。しかし、測定には設備の制約に加え測定誤差が伴う上、ナノスケール形状の取得には膨大な時間を要する。さらに、表面形状を特徴づける平均二乗粗さ（ h_{rms} ）、歪度（ S_k ）、および尖度（ K_u ）といった統計量が表面の特性・機能に及ぼす影響を解析するには膨大なデータの取得が必要である。こうした背景から、計算機上で疑似表面データを生成する試みが数多く行われており、様々なアルゴリズムが提案されてきた。その中には解析的関数により定義されたもの [1] や、疑似乱数を用いて表面の高さ分布を模倣するものがある。従来の手法の多くはガウス分布に従う手法である一方、表面処理の影響や摩擦後の表面特有の異方性を考慮するために非ガウス分布に沿った表面形状の生成アルゴリズムも開発されている [2]。

一方、疑似表面は、実空間における高さ分布と同時に、パワースペクトル密度（PSD）により特徴づけられる空間的な性質、具体的にはマルチスケールに渡る自己相似性（self-affinity）を再現することが求められる。しかし、実空間と波数空間の両方の性質を同時に満たす手法は少なく、 S_k や K_u といった指定したパラメータに合致する形状を取得することは長年の課題であった。近年、Almqvist らは、時系列データ解析に使用されるサロゲート法を 2 次元に拡張することで材料表面の生成に応用することで、上記の問題を解決するアルゴリズムを開発した [3]。そこで本研究では、この手法を基に、非ガウス分布として Johnson's Su を採用し、さらに実験データとの組み合わせにより、より現実的な非ガウス疑似材料表面の生成手法の構築を目的とする。異なる材料を対象とした検証により手法の有効性を確認し、材料特有の表面形状の抽出を行う。

2. 手法

Almqvist らの手法は、実空間分布を厳密にガウス分布に保ちながら、波数空間特性（PSD）を満たすことを可能にした。任意の PSD に関してフーリエ変換を行い、振幅スペクトルと位相スペクトルに分解する。ここで、振幅スペクトルは保持しつつ、位相スペクトルに乱数を加えて逆フーリエ変換を行う。これによりガウス分布に従う実空間分布を持つ中間表面が構築される。その後、この表面に関して非線形変換を行うことで、所望の PSD を持つガウス表面が生成される。この手法は実空間と波数空間の両方の性質を同時に満たしているが、実測表面の再現には至っていない。

そこで本研究では、実測表面の実空間、波数空間特性を再現した表面の生成を目指す。

本研究においてガウス分布から非ガウス分布への変換には Johnson's Su を用いる。変換式を式 (1) に示す。

$$z = \gamma + \delta \sinh^{-1} \left(\frac{x - \xi}{\lambda} \right) \quad (1)$$

これにより、表面の波数空間における特性を変えずに S_k および K_u を柔軟に制御することが可能になる。振幅スペクトルを維持したままこの変換を行い、波数空間特性を満たしたまま非ガウス分布に従う表面を生成する。

また、実測表面として ta-C、a-C:H、SUJ2、および Al_2O_3 の 4 種類を扱う。それぞれの材料のナノスケール表面形状を、原子間力顕微鏡（AFM）を用いて測定（スキャン面積： $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ 、ピクセル数： 256×256 ）し、表面生成に活用する。

3. 結果

それぞれの材料における実測表面について統計的特性を評価するため、各データセットに対して h_{rms} 、 S_k 、 K_u の分布を算出した。その結果を以下 Fig. 1 に示す。また、それぞれのデータで計測エラーによる外れ値は除外している。

この結果から、 h_{rms} に関して ta-C と Al_2O_3 に関して大きな差は見られず同程度の表面粗さを持っており、a-C:H はそれらよりも表面粗さが大きく、SUJ2 に関しては著しく表面粗さが小さい材料であると言える。 S_k と K_u に関して、ta-C においてはばらつきが大きい。すなわち、実空間分布の歪みが大きく、尖った形状を取りやすい材料である。この要因として、ta-C が主に sp-3 結合を形成し高密度かつ高剛性な構造を持っているが、局所的に sp-2 結合を形成する部分が存在し、硬度が高い部分と低い部分が不均一となり、局所的に急峻な起伏が生じやすいことが挙げられる。また、急峻な起伏を有する表面でばらつきが生じる要因として AFM の精度も挙げられる。表面に急峻な突起や深い谷が存在する場合、AFM 探針の形状や応答性に起因して正確な表面追従が困難であることが知られており、その影響が生じていると考えられる。他の 3 材料ではばらつきが小さく、 K_u に関しては同程度の値を取ることが分かる。 S_k のピークはそれぞれ 0 付近であるが a-C:H は正、SUJ2 および Al_2O_3 は負の値で見られる。ここから a-C:H は突起優位の表面で接触・摩擦に影響を与えやすい材料であると言える。これらの実測表面データを用いて非ガウス分布表面の計算機生成を行っていくが、まず最もパラメータが取る値の範囲が広い ta-C のデータから行い、その表面再現性を検証する。

ta-C の実測データから非ガウス分布に従う表面生成を行った。その際に実測表面から Johnson's SU のパラメータをフィッティングした。その中で S_k および K_u が比較的小さい値を取る表面と、比較的大きい値を取る表面における実空間分布を Fig. 2 に示す。この図から、ta-C の実測表面が取り得る S_k 、 K_u に関して非ガウス分布の概形を再現できることが確認できた。その精度を定量的に解析するために実測表面のフィッティングカーブと生成表面の分布の相対誤差を

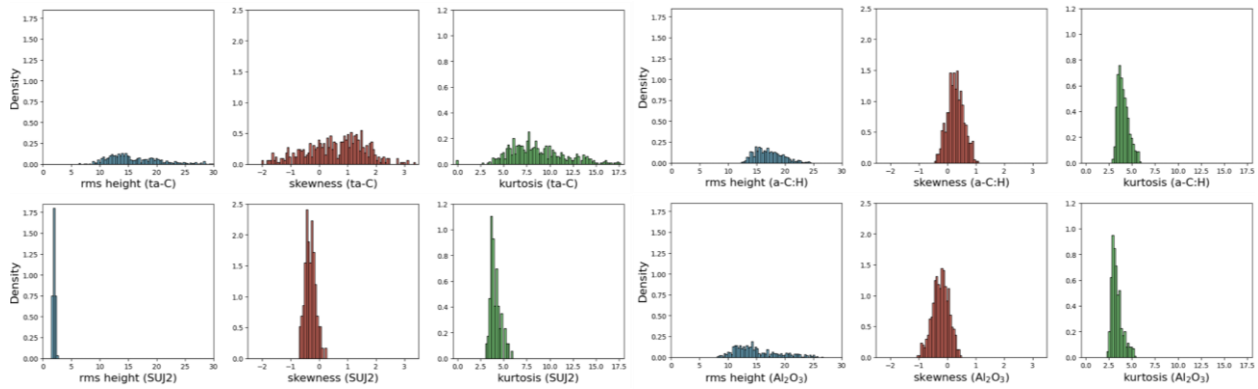


Fig1 Histograms of surface height characteristics for each material

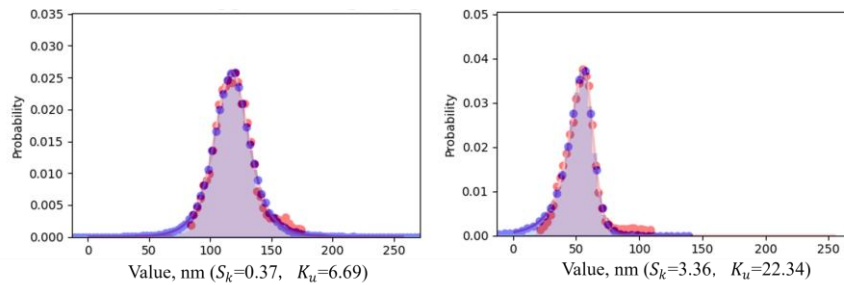


Fig.2 Comparison of surface height distributions between experimentally measured surface (red dots and bars) and synthetic surface (blue dots and bars) using histogram

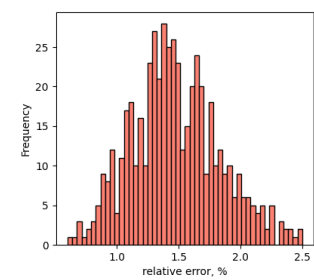


Fig.3 Histogram of relative error between experimentally measured and synthetic surface histogram

算出して Fig. 3 に示す。また、Fig. 2 で示したデータの相対誤差はそれぞれ 1.54%, 0.96%である。これらから表面生成における高い精度を確認できた。しかし、実測表面は単一のフィッティングカーブで表現できない実空間分布を取る箇所を有するため、より精度の高い実測表面の再現にはフィッティング精度の向上が必要である。

実空間分布が非ガウス分布に従うことが確認できたため、次に波数空間特性を満たすことを確認する。Fig. 4 に実測表面と生成表面における PSD 比較の例を示す。この例から PSD 形状の再現はできていることが分かるが、実測表面とのずれが見受けられる。そこで各 PSD に関して実測表面との誤差を、対数を取った相対誤差で算出し、その分布を Fig. 5 に示す。また、Fig. 4 に示した PSD における誤差は 1.6%である。今回生成した表面の PSD に関して、高周波領域で PSD が急激に減衰するロールオフ後にピークが生じるものが散見されている。それらの表面において誤差が大きくなる傾向にある。誤差の平均は 4.2%であったが、誤差が平均値を下回るデータにおいて S_k は広範囲の値を取っていたが、 K_u はほとんどが 10 未満の値を取っていた。すなわち、 S_k は波数空間特性の再現に大きな影響を持たないが、 K_u は大きく影響し、その値が小さい表面ほど波数空間特性の再現精度が高いと言える。これは、 K_u が大きい場合、表面には平均から大きく外れた突起や谷が多く含まれることを示唆しており、これらの局所的に急峻な構造はフーリエ変換において高周波成分として現れやすい。すなわち K_u の増大が表面上に存在する微細構造の存在を反映しており、それが結果として PSD の高周波成分におけるピークの発生に寄与していることが要因として考えられる。

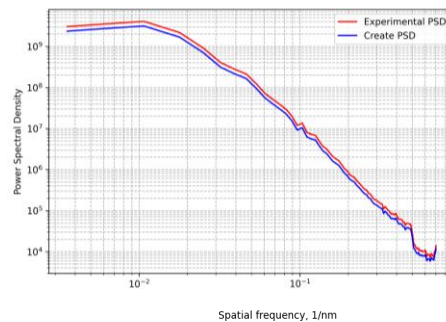


Fig.4 Comparison of PSD between experimentally measured surface and synthetic surface

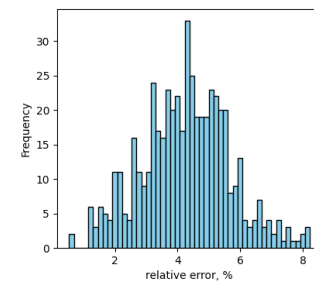


Fig.5 Histogram of relative error between experimentally measured and synthetic surface

4. 結言

本研究では実測表面を基にした実空間分布と波数空間特性の両方を満たす表面の生成に関してその精度を検証する。当日は他の材料に関して同様の表面生成を行い、各材料での精度の検証、材料間の比較も示す予定である。

参考文献

- [1] Z. Cheng, R. Liao, and W. Lu, Int. J. Solids Struct. **113–114**, 108 (2017).
- [2] M. Paggi and Q.-C. He, Wear **336–337**, 86 (2015).
- [3] A. Almqvist, F. Sahlin, R. Larsson, and S. Glavatskih, Tribol. Int. **40**, 574 (2007).