

運用碎形理論建立微奈米粒子之形貌

Applying the Fractal Theory on Micro/Nano Particle Morphology

劉正倫¹ 蔡及銘² 林仁輝³

¹ 空軍航空技術學院飛機工程系助理教授

² 國立成功大學機械工程學系碩士班研究生

³ 國立成功大學機械工程學系講座教授

Jeng-Luen Liou¹, Chi-Ming Tsai², Jen-Fin Lin³

¹Assistant Professor, Department of Aircraft Engineering, Air Force Institute of Technology

² Graduate Student, Department of Mechanical Engineering, National Cheng Kung University

³ Chair Professor, Department of Mechanical Engineering, National Cheng Kung University

摘要

本文建立微奈米粒子的二維輪廓與三維形貌之理論模式。一般有關粒子的形貌研究皆利用富立葉級數展開建立二維粒子的輪廓方程式，然而富立葉分析需利用大量的參數描述粒子。為了簡化分析過程，本研究採用 Weierstrass-Mandelbrot 函數取代富立葉分析，利用碎形維度(D)與高度尺度常數(G)等碎形理論參數建立基於球體與橢圓體的粒子輪廓方程式，進而推展 Weierstrass-Mandelbrot 函數至三維粒子的形貌方程式。最後根據推導之理論模式成功模擬具等向性與均質性的二維、三維粒子。

關鍵字： 粒子形貌模擬、(R,θ)法、Weierstrass-Mandelbrot 函數

Abstract

In the present study, a morphological equation has been developed to simulate both of two and three dimensional rough particles. In general, the analysis of contour on the particle morphology are based on Fouier series expansion. However, a lot of coefficients must be used in Fouier analysis and the system became much more complicated. In order to simplify the analytical process, a modified Weierstrass-Mandelbrot function was developed to replace Fouier analysis in the present study. Fractal parameters including factal dimension (D) and topothesis constant (G) are used to describe the contour of paricles, and then extend the simulation fumula to three dimensional particles. The final results are shown that two or three dimensional isotropic and homogeneous particles can be gernerated

successfully .

Key Words : Particle Morphology、(R, θ) method、Weierstrass-Mandelbrot function

一、前言

奈米科技的發展帶動了一波材料科學與工業技術的革命，奈米級的材料開發與精密加工技術為各國高度重視的研究領域。然而，微奈米尺度的基礎理論研究仍處於起步的階段。奈米粒子的研究在整個奈米科技的發展中具有重要的地位，許多材料性能的改善或是奈米級的精密加工技術皆需要利用奈米顆粒達成。傳統的顆粒研究常將顆粒的形狀簡化為圓球或理想的幾何外型，藉以計算粒子間的黏著力(adhesion)、磨粒磨損的移除率(abrasive wear rate)或其他與粒子外型有關的機械性質，但實際上粒子的形狀通常是不規則的。而且在巨觀下看似平滑的粒子表面，放大後可發現在表面上佈滿高低起伏的粗糙峰(asperity)。隨著粒子的製備進入奈米級的尺寸大小，顆粒的比表面積(specific surface area)提高，表面形貌對於顆粒性質的影響更加劇烈。因此，如何正確地描述粒子的形貌成為研究顆粒性質的首要工作。例如添加在奈米漆當中的陶瓷顆粒與牆壁之間的黏著力與效能分析，或是化學機械研磨(chemical mechanical polishing)的過程中添加的奈米顆粒對於晶圓表面粗糙度的影響，都需要透過粒子形貌的研究來建立數學模型，以精確獲得定性與定量的分析。

碎形幾何(fractal geometry)可用來描述自然界中的非線性行為，由數學家Mandelbrot所創立而成。Mandelbrot觀察到許多看似不規則的現象，在不同尺度上卻有相似的行為；例如海岸線長度、流體紊流、股市波動等。碎形是一種由部分相似於整體所組成的形狀(A fractal is a shape made of parts similar to the whole in some way.)。碎形幾何最大的特徵就是尺度無關性(scale independent)與自我相似性(self-

similarity)。尺度無關性是指這些看似非線性的行為存在著某些不變量，不會隨觀察尺度的變化而改變；自我相似性則是將物體經過不同程度的放大或縮小，仍然呈現相似的結構。粒子的表面形貌即具備碎形特徵，相關研究中指出粒子凹凸不平的外型和不規則的表面粗糙度皆符合碎形的特徵。但是碎形理論對於顆粒表面粗糙度的研究局限於定性描述，目前仍然沒有有效的方法利用碎形參數做定量的數學分析。有鑑於此，本研究試圖利用碎形幾何理論來建立顆粒輪廓的數學方程式，模擬具有碎形特徵的粒子。

目前描述顆粒形貌主要有兩種方式：第一種是用簡單的歐氏幾何體來代表顆粒，如球體、橢圓球等。這一類描述方式最大的優點在於歐氏幾何體可以用數學方程式來表達，並且建立簡單的物理模型。但是奈米級的顆粒以此模式描述則過於簡化。奈米顆粒的外型具有：1.外型通常是不規則的；2.表面是粗糙的。所以歐氏幾何不足以計算出正確的物理量。而第二種描述方式則是利用形狀參數，如伸長度(elongation)、圓度(sphericity)、形狀因子(shape factor)等參數來描述粒子的外型[1-2]。這些數字化參數雖然可以定量的描述顆粒形狀，但是單一個參數值卻有可能對應出多種不同的形狀，因此難以用來做數學計算的處理。較精確的描述顆粒的外型是利用(R, θ)法[3-5]再加上富立葉級數展開做粒子外型的功率譜分析(power spectrum analysis)。富立葉轉換可以完整的描述粒子的外型，但是必須要用無窮個富立葉係數來表示，並不適合用於數學建模。

近年來碎形理論逐漸受到重視而迅速發展，碎形維度(fractal dimension, D)已成為描述顆粒形貌最有效的參數[6-8]。碎形維度是衡量系統複雜的程度，當顆粒表面輪廓

的變化越劇烈，碎形維度也越大。而碎形維度具有尺度無關性，並不隨著不同的量測尺度而有所變化，相較於尺度相依的統計方法更能有效的描述粒子外型。計算顆粒輪廓的碎形維度最常利用尺碼法 (yardstick method) 來計算，最早是由 Richardson 提出 [9]，隨著不同的尺碼測量的海岸線長度也會改變。尺碼法是用不同尺度為標準，測量並計算碎形面的長度，如島嶼輪廓、粗糙面的形貌等，將量測尺寸 (ε) 與對應總長繪製成雙對數圖，即 Richardson Plot。Mandelbrot [10] 發現量測尺度與島嶼總長度間存在一碎形關係：Richardson Plot 中的斜率正好等於 $1-D$ 。這種方法被廣泛的運用在描述顆粒表面的不規則性，但是單用碎形維度來描述顆粒輪廓並無法有效的建立數學模型。

本文主要的目的是利用碎形理論建立一套描述奈米粒子外型的數學模型。碎形維度被運用於描述粒子表面的粗糙程度，但是仍然缺乏適合的數學方程式描述粒子的外型，本文希望透過碎形理論來達成數學建模的目的，而不再只是用參數敘述粒子的外觀。以往對於粒子外型的描述常利用形狀參數來描述，這些參數經由量測得到，但受到量測精度的影響這種方式往往不夠精確，無法真實的描述粒子輪廓形貌。而透過富立葉分析粒子輪廓雖然可以精確地得到粒子外型的方程式，但是大量的富立葉係數卻造成研究上的困難。因此本研究希望透過碎形理論結合參數與數學模型，利用特定參數帶入數學方程中，進而得到粒子輪廓的外型。

二、理論分析

2.1 Weierstrass-Mandelbrot 函數

碎形理論可用於粗糙表面的模擬 [2][11]，如碎形布朗運動 (fractal Brownian motion) 模擬法、逐次隨機增加法 (successive random additions)、逆富立葉轉換模擬法 (inverse fourier transformation)，以及本研究主要採用的 Weierstrass-

Mandelbrot 函數模擬法。利用 W-M 函數模擬粗糙表面最大的優點在於 W-M 函數直接透過方程式描述粗糙表面，而不是用演算法製造出碎形表面。W-M 函數是一具有連續性、處處不可微且滿足碎形特徵的數學方程式，其定義如下 [12]：

$$W(t) \equiv \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{(1-e^{i\gamma^n t})e^{i\psi_n}}{\gamma^{(2-D)n}} \quad (1)$$

其中 D 為介於 1 到 2 之間的碎形維度， γ 為大於 1 的參數，通常取 $\gamma=1.5$ ， ψ_n 為介於 0 到 2π 之間的亂數相位 (random phase)，用來生成隨機的函數圖形。W-M 函數常被改寫成餘弦形式用來模擬一維的粗糙表面 [13]：

$$z(x) = G^{D-1} \sum_{n=n_1}^{\infty} \frac{\cos(2\pi\gamma^n x + \psi_n)}{\gamma^{(2-D)n}} \quad (2)$$

其中 G 為高度尺度常數 (Topothesy)，與粗糙度的振幅有關，碎形維度 D 與粗糙峰的密度有關，兩者可經由量測得到。 n_1 與取樣長度有關，通常設為 0。應用碎形理論於粗糙面模擬的數學模型已經發展完備，但是吾人發現目前並沒有文獻探討將碎形理論應用於粒子輪廓的模擬，因此許多與粒子形貌相關的性質都無法建立正確的預測模型。為了建立模擬粒子輪廓的方程式，本文試圖將 W-M 函數與 (R, θ) 法結合，提出具碎形行為的粒子輪廓。

2.2 以 (R, θ) 法建立粒子輪廓外形

(R, θ) 法 ((R, θ) method，亦稱 radius-vector function method) 是以二維粒子輪廓的形心為中心，從 0 到 2π 沿著粒子表面量測，然後繪製成徑向距離對角度的關係圖 (如圖 1 所示)。一般量測程序如下：

1. 從光學式或電子式顯微鏡取得粒子影像。
2. 粒子影像數位化，得到粒子輪廓的直角座標 (x, y) 。
3. 以粒子的形心為原點，將輪廓的直角座標轉換成極座標 (R, θ) 。
4. 利用富立葉級數展開，得到：

$$R(\theta) = a_0 + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos n\theta + b_n \sin n\theta) \quad (3)$$

其中 a_0 、 a_n 、 b_n 為待定係數，粒子的等效半徑為 $a_0 + \frac{1}{2} \sum (a_n^2 + b_n^2)$ 。

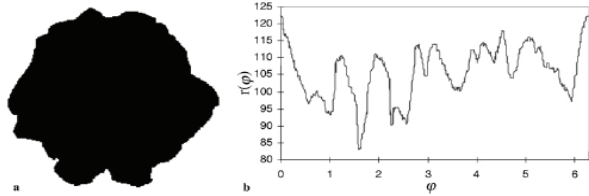


圖 1、 (R, θ) 法徑向距離對角度的關係圖 [14]

一般以 (R, θ) 法描繪的輪廓皆是採用富立葉分析，本研究改採 W-M 函數取代富立葉級數來模擬粒子的外型，這樣的作法有兩個優點：第一，富立葉級數需要大量的係數描述粒子的外型，而真實粒子的輪廓具有碎形的特徵，以碎形理論可簡化為只需利用 D、G 值來描述，可大幅簡化分析過程。其二，利用 W-M 函數表示粒子的粗糙表面輪廓可以結合參數的描述與數學模型，只要量測出粒子輪廓的碎形維度，再利用 W-M 函數即可得到輪廓表面的表示式。

由於碎形幾何描述的是表面的不規則行為，必須建構於粒子的主要形狀。因此利用歐氏幾何體與碎形表面結合，再推廣至形狀更不規則的粒子外形。許多粒子的外型都可以當成為圓形，例如使用珠磨法製備粒子時，粒子的外型可視為接近具有粗糙表面的圓形顆粒，而長短軸不一的粒子可以橢圓體表示。對於圓形粒子輪廓方程式可表示為：

$$R(r, \theta) = r + G^{D-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\cos(2\pi\gamma^n\theta + \psi_n)}{\gamma^{(2-D)n}} \quad (4)$$

其中 $0 \leq \theta < 2\pi$ ， r 是圓形粒子的特徵半徑。而橢圓形粒子輪廓方程式則可表示為：

$$R(a, b, \theta) = \left(\frac{a^2 b^2}{a^2 \sin^2 \theta + b^2 \cos^2 \theta} \right)^{1/2} + G^{D-1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\cos(2\pi\gamma^n\theta + \psi_n)}{\gamma^{(2-D)n}} \quad (5)$$

其中， a 、 b 為橢圓的長短軸。(4)、(5) 式結合了粒子的主要輪廓外型與表面粗糙度效果，這種描述方式利用 W-M 函數直接取代富

立葉級數展開，但是在 $\theta=0$ 與 $\theta=2\pi$ 會出現不連續的斷點，這是由於亂數相位的隨機變化，造成 W-M 函數在 $\theta=0$ 與 2π 處發生不連續現象。使用簡單的曲線擬合雖然可以加以修正，但是若兩點數值差異過大還是會使得粒子外型嚴重變形，而粒子輪廓的性質亦會受到影響。

2-3 廣義 Weierstrass-Mandelbrot 函數與三維粒子模擬

直接利用 W-M 函數取代 (R, θ) 法雖然可以描繪出具有碎形外觀的粒子，但是在 $\theta=0$ 與 $\theta=2\pi$ 的接合處卻產生斷點。為了改善這個缺點，本研究發現可從高維度的 W-M 函數簡化而加以改善。Ausloos 等人 [15] 利用重疊的方式擴展 W-M 函數至多維度空間，修正後的廣義 W-M 函數仍然滿足均質性 (homogeneous, $V(\tau) = \langle |w(x+\tau) - w(x)|^2 \rangle$ 與 x 無關) 與自我仿射性 (self-affine, $V(\gamma\tau) = \gamma^{2(2-D)} V(\tau)$) 的碎形特徵。具雙變數的 W-M 函數可表示如下：

$$W(\vec{r}) = \left(\frac{\ln \gamma}{M} \right)^{1/2} \sum_{m=1}^M A_m \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[1 - e^{ik_0 \gamma^n \vec{r} \cos(\theta - \alpha_m)} \right] e^{i\psi_{m,n}} (k_0 \gamma^n)^{D-3} \quad (6)$$

其中， $(\ln \gamma / M)^{1/2}$ 為正規化因子， M 為組成粗糙面的皺摺數量， $\alpha_m = \pi m / M$ 是粗糙面的皺摺方向， $k_0 = 2\pi / L$ ， L 為試件長度， $\psi_{m,n}$ 為亂數相位 (random phase)， A_m 為振幅，對於等向性粗糙面，其 $A_m = 2\pi (2\pi / G)^{2-D}$ [16]。所以，三維具等向性碎形面可表示為：

$$Z(\rho, \theta) = L \left(\frac{G}{L} \right)^{D-2} \left(\frac{\ln \gamma}{M} \right)^{1/2} \times \quad (7)$$

$$\sum_{n=1}^M \sum_{m=0}^{N_{ms}} \gamma^{(D-3)n} \left\{ \cos \psi_{m,n} - \cos \left[\frac{2\pi \gamma^n \rho}{L} \cos \left(\theta - \frac{\pi m}{M} \right) + \psi_{m,n} \right] \right\}$$

其中，碎形維度 $2 < D < 3$ 、 $\rho = 0 \sim L$ 、 $\theta = 0 \sim 2\pi$ 。若是限定 (7) 式中的 $\rho = L = r$ 為粒子的特徵半徑，只取三維碎形面某一個封閉圓環的高度值，加上粒子半徑即可得到處處連續的圓形粒子輪廓方程式。雖然利用三維的碎形面簡化成二維粒子的輪廓可以解決粒子輪廓邊

界不連續的問題，但是(7)式中碎形維度的值介於 2 到 3 之間，而粒子輪廓的碎形維度卻只在 1 到 2 之間。這是由於限定原本碎形面在徑向的自由度，使得面退化成線段所致。為了修正這樣的問題，可以改寫(7)式中的 D 值用 $D-1$ 取代，可降低一個自由度。所以修正後的圓形粒子輪廓方程式可表示為：

$$R(r, \theta) = r + G' \sum_{m=1}^M \sum_{n=0}^{N_{ms}} \gamma^{(D-1)n} \left\{ \cos \psi_{mn} - \cos \left[2\pi \gamma^n \cos \left(\theta - \frac{\pi m}{M} \right) + \psi_{mn} \right] \right\} \quad (8)$$

其中，比例因子 $G' = r(G/r)^{D-1} (\ln \gamma / M)^{1/2}$ ，為了簡化分析過程，往後的分析將利用 G' 取代原本的高度尺度常數。(7)式即為利用三維 W-M 函數簡化而成的圓形粒子輪廓。若為橢圓形粒子，可將(8)式中的 r 帶入橢圓極座標方程式：

$$R(a, b, \theta) = \left(\frac{a^2 b^2}{a^2 \sin^2 \theta + b^2 \cos^2 \theta} \right)^{1/2} + G' \sum_{m=1}^M \sum_{n=0}^{N_{ms}} \gamma^{(D-1)n} \left\{ \cos \psi_{mn} - \cos \left[2\pi \gamma^n \cos \left(\theta - \frac{\pi m}{M} \right) + \psi_{mn} \right] \right\} \quad (9)$$

而(8)、(9)兩式中粒子輪廓的碎形維度介於 1 到 2 之間。

立體的粒子輪廓也可以利用簡化高維 W-M 函數的方法得到。一個 d 維的 W-M 函數可表示為[15]：

$$W(\vec{r}) = \left(\frac{\ln \gamma}{M} \right)^{1/2} \sum_{m=1}^M \sum_{n=0}^{\infty} A_m \left[1 - \exp(i k_0 \gamma^n \hat{n}_m \cdot \vec{r}) \right] \exp(i \psi_{mn}) (k_0 \gamma^n)^{D(d+1)} \quad (10)$$

其中， $\hat{n}_m$ 為組成 d 維超球面(hypersphere)皺摺的單位向量， m 代表 $d-1$ 個序集(ordered set)。(10)式代表在 d 維(或 d 自由度)空間中任何一點位置都可以決定一個 W 值，即 W-M 函數的振幅。當 $d=3$ ，廣義 W-M 函數可表示為：

$$W(\vec{r}) = W(\rho, \theta, \varphi) = \left(\frac{\ln \gamma}{MS} \right)^{1/2} \sum_{m=1}^M \sum_{s=1}^S \sum_{n=0}^{\infty} A_{ms} \left[1 - \exp(i k_0 \gamma^n \hat{n}_{ms} \cdot \vec{r}) \right] \exp(i \psi_{msn}) (k_0 \gamma^n)^{D4} \quad (11)$$

其中， $\varphi_a = \frac{\pi s}{S}$ ， $\theta_a = \frac{2\pi m}{M}$ ， $\left(\frac{\ln \gamma}{MS} \right)^{1/2}$ 是正規化因子， M 是在 θ 方向組成粗糙面的皺摺個

數， S 是在 φ 方向的皺摺個數， $\hat{n}_{ms}$ 是某一皺摺在 r 方向的單位向量，與 $\vec{r}$ 做內積後得到：

$$\hat{n}_{ms} \cdot \vec{r} = \left[\cos(\theta_a) \sin(\varphi_a) \hat{i} + \sin(\theta_a) \sin(\varphi_a) \hat{j} + \cos(\varphi_a) \hat{k} \right] \cdot \left[r \cos(\theta) \sin(\varphi) \hat{i} + r \sin(\theta) \sin(\varphi) \hat{j} + r \cos(\varphi) \hat{k} \right] = r \left[\sin(\varphi_a) \sin(\varphi) \cos(\theta - \theta_a) + \cos(\varphi_a) \cos(\varphi) \right] \quad (12)$$

而 $A_{ms} = 2\pi \left(\frac{2\pi}{G} \right)^{3-D}$ ， $k_0 = \frac{2\pi}{L}$ 。代入 $L=r$ ，則

(11)式的實數部分可表示立體的圓形粒子形貌方程式：

$$R(r, \varphi, \theta) = r + G' \sum_{m=1}^M \sum_{s=1}^S \sum_{n=0}^{\infty} \gamma^{n(D-3)} \left[\cos(\psi_{msn}) - \cos \left(\frac{2\pi \gamma^n}{r} \hat{n}_{ms} \cdot \vec{r} + \psi_{msn} \right) \right] \quad (13)$$

其中，比例因子 $G' = (\ln \gamma / MS)^{1/2} r(G/r)^{D-2}$ ，而粒子表面的碎形維度介於 2 到 3 之間。(13)式結合橢圓球方程式也可以推導橢圓球粒子形貌方程式：

$$R(a, b, c, \varphi, \theta) = r_c + G' \sum_{m=1}^M \sum_{s=1}^S \sum_{n=0}^{\infty} \gamma^{n(D-3)} \left[\cos(\psi_{msn}) - \cos \left(\frac{2\pi \gamma^n}{r_c} \hat{n}_{ms} \cdot \vec{r} + \psi_{msn} \right) \right] \quad (14)$$

其中， a 、 b 、 c 為橢圓球的三個主軸， $r_c = abc / \left(a^2 b^2 + c^2 (a^2 - b^2) \sin^2 \varphi \sin^2 \theta + b^2 (c^2 - a^2) \sin^2 \varphi \right)^{1/2}$ 。

三、結果與討論

3.1 二維粒子輪廓模擬

二維粒子輪廓的模擬可利用(8)、(9)式來完成，為了確保得到的粒子輪廓具有足夠的亂度，組成粗糙面的皺摺數 M 值取為 10，而亂數相位 $\psi_{m,n}$ 則為 0 到 2π 的隨機變數。模擬過程中假設粒子的特徵半徑為 1，而 $\gamma = 1.5$ ， $N_{\max}$ 理論上取無窮大，但隨著 n 值越大，W-M 函數中疊加的振幅衰減越快，所以實際上約取為 20 左右即可。圖 2(a) 是利用(8)式模擬基於圓形粒子輪廓的 (R, θ) 圖，其中碎形維度 $D=1.2$ ，高度尺度常數 $G'=0.04$ ，虛線是圓形的特徵半徑。圖 2(b) 為圖 2(a) 模擬而成的粒子輪廓，由圖 2(b) 可看出粒子表面的不規則性，而利用

W-M 函數取代 (R, θ) 法中的富立葉級數確實能模擬出具有碎形特徵的粒子輪廓。

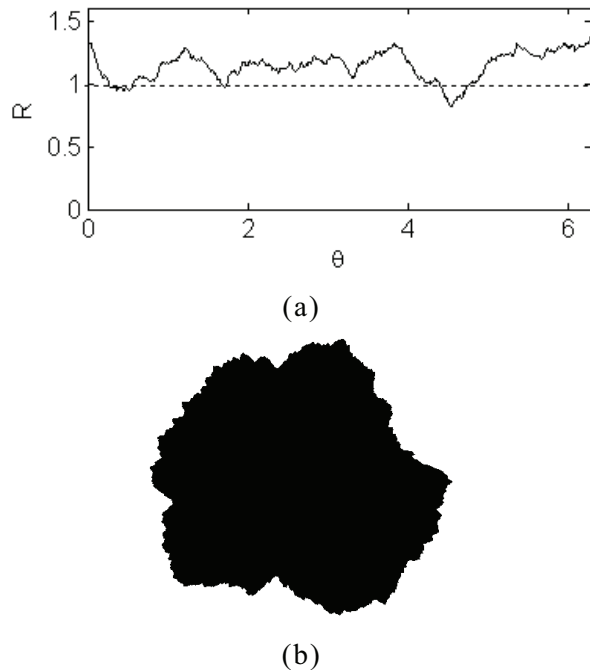


圖 2、(a)利用(8)式模擬粒子的 (R, θ) 圖；
(b)二維圓形粒子輪廓。

圖 3 是不同碎形維度的粒子輪廓，為了便於比較差異，固定同一組亂數相位模擬，所以粒子的形狀大致相同，而輪廓邊界的粗糙度則隨碎形維度改變，其中 $G'=0.04$ ， D 分別為 1.2、1.4、1.6、1.8。由不同的碎形維度可以看出 D 值越小粒子的表面越趨近於光滑，而 D 值越大粒子表面的粗糙程度越明顯。圖 4 是圖 3(a)($D=1.2$)與圖 3(d)($D=1.8$)兩組粒子輪廓的雙對數功率譜圖。其中碎形維度值越大粒子輪廓的高頻振幅遞減較慢，因此斜率較緩。反之， D 值越小振幅遞減越快，譜圖上的斜率則較陡。圖 4 顯示利用(8)式模擬而成的粒子輪廓其功率譜的雙對數圖呈線性關係，表示這些粒子外形確實具有碎形的行為。研究顯示粒子輪廓的功率譜雙對數圖中斜率等於負 $(5-2D)$ [13]。

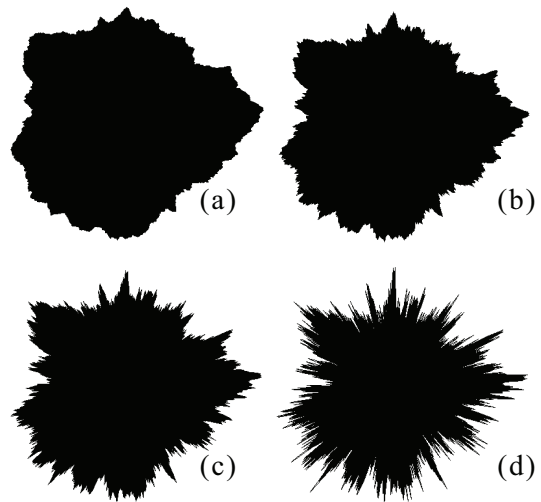


圖 3、不同 D 值做比較 ($G'=0.04$)：
(a) $D=1.2$ ；(b) $D=1.4$ ；(c) $D=1.6$ ；(d) $D=1.8$

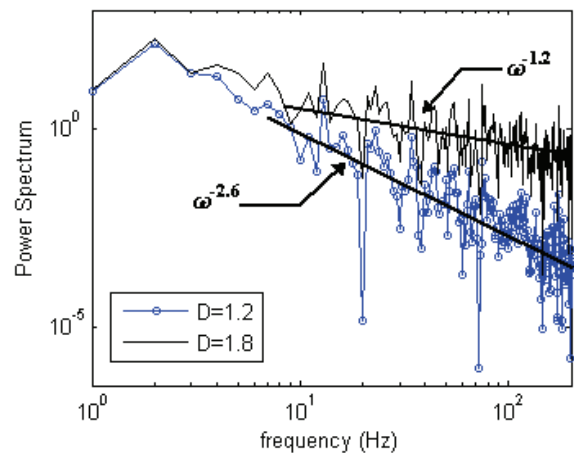


圖 4、不同 D 值粒子輪廓的雙對數功率譜

圖 5 是以四組不同 G' 值做比較。其中圖 5(a)和 5(b)的 D 、 G' 值皆相同，藉由不同的亂數相位產生不同的粒子，可以發現兩者輪廓的粗糙程度相似。雖然利用碎形參數模擬粒子並無法得到真實的粒子外型，但是藉由量測粒子的碎形參數代入(8)式中可以得到具有代表性的粒子輪廓，可簡化了分析粒子輪廓的過程，並可以利用(8)式製造出一系列具有相同碎形特徵的粒子。高度尺度常數 G' 對粒子輪廓的影響可由圖 5(a)、5(c)、5(d)比較。觀察(8)式可以發現 G' 影響 W-M 函數的振幅， G' 越大，表面的起伏越大；反之輪廓越趨近於圓形。

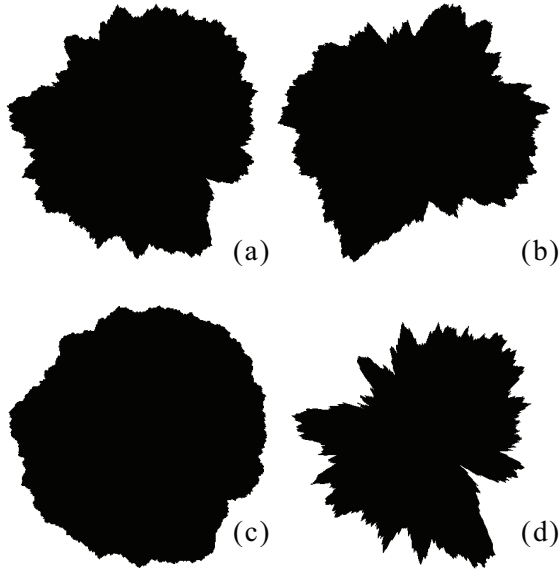
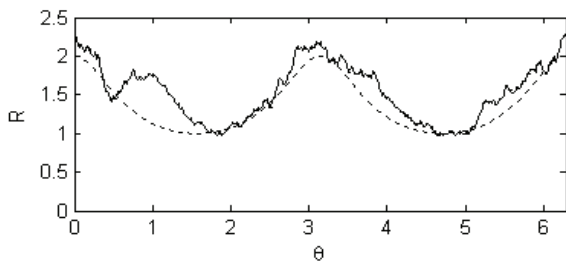


圖 5、不同 G' 值做比較($D=1.3$)：(a) $G'=0.04$ ；(b) $G'=0.04$ ；(c) $G'=0.02$ ；(d) $G'=0.08$

(9)式是基於橢圓形的二維粒子輪廓方程式，藉由改變 a 、 b 軸長度可以模擬出不同長寬比的橢圓形粒子。圖 6(a)是利用(9)式繪製的 (R, θ) 圖，其中長軸 $a=2$ ，短軸 $b=1$ ， $D=1.3$ ， $G'=0.04$ ，虛線是構成粒子輪廓的橢圓基底。圖 6(b)為利用圖 6(a)模擬而成的橢圓粒子。圖 7 為不同長寬比與碎形維度的橢圓粒子，輪廓的粗糙度皆隨 D 值越大而變動越劇烈。圖 7(c)和 7(d)的長寬比為 $a/b=5$ ，表示(9)式能模擬橢圓粒子。值得注意的是，本研究採用結合 W-M 函數與 (R, θ) 法雖能模擬圓形、橢圓形的粒子外形，但是由於 (R, θ) 法的限制，W-M 函數模擬出來的粗糙面與粒子基本外形疊加後所有的粗糙峰方向皆是由粒子的幾何中心出發。



(a)

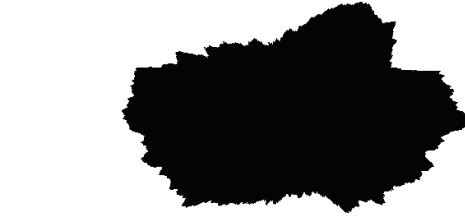


圖 6、(a)利用(9)式模擬粒子的 (R, θ) 圖；
(b)二維橢圓形粒子輪廓($a=2$, $b=1$)

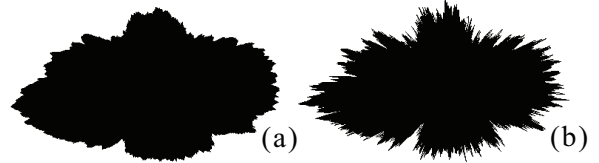


圖 7、不同長短軸、 D 值的橢圓粒子：
(a) $a=2$, $b=1$, $D=1.3$, $G'=0.04$ ；(b) $a=2$, $b=1$, $D=1.7$, $G'=0.04$ ；(c) $a=5$, $b=1$, $D=1.3$, $G'=0.04$ ；(d) $a=5$, $b=1$, $D=1.7$, $G'=0.04$

3.2 三維粒子模擬

一般的粒子形貌用富立葉級數建構二維粒子的輪廓方程式，對於三維的粒子一直無有效的數學模型。為了建構三維粒子的方程式，吾人利用廣義的 W-M 函數描述粒子的不規則表面，再加上球圓、橢球等歐氏幾何體推導出三維粒子輪廓方程式。廣義的 W-M 函數可以產生具等向性且均質的碎形表面，因此本文所模擬出的粒子也具有相同的性質。圖 8(a)是利用(13)式模擬出的三維圓球粒子，為了減少模擬時間，在 θ 與 ϕ 方向組成粗糙面的皺摺個數 M 、 S 設為 6， $\gamma=1.5$ ， $N_{\max}=20$ ，粒子特徵半徑為 1， $D=2.2$ ， $G'=0.008$ 。觀察圖 8(a)可以發現三維粒子的二維輪廓其碎形維度剛好等於 $D-1$ ，即輪廓的碎形維度等於 1.2。圖 8(b)是將

(13)式模擬出的碎形面做二維的頻譜分析，得到二維功率譜的等高線圖。對於等向性的表面而言，其二維功率譜呈軸對稱分佈[16]。

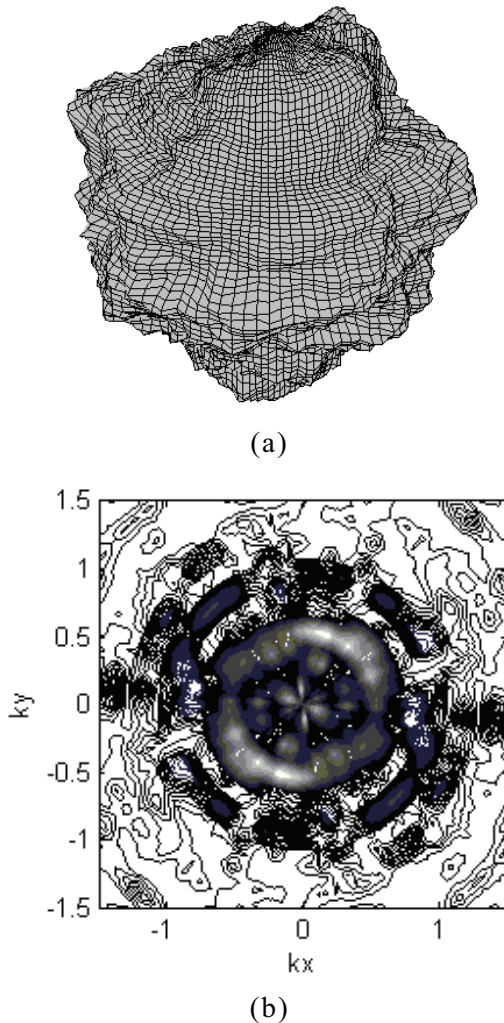


圖 8、模擬三維圓球粒子($D=2.2$, $G'=0.008$)
(a)模擬三維粒子，(b)二維功率譜圖

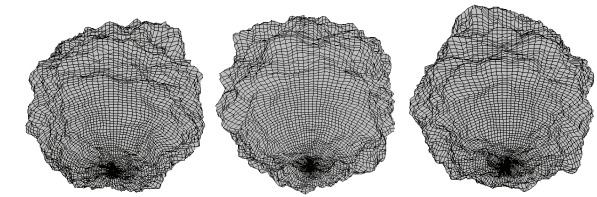
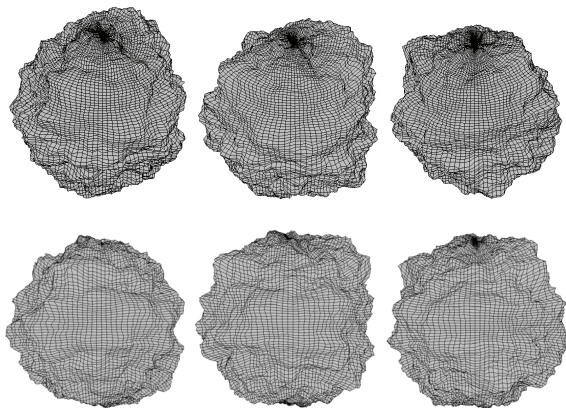


圖 9、三維粒子在不同角度的投影圖
($D=2.2$, $G'=0.008$)

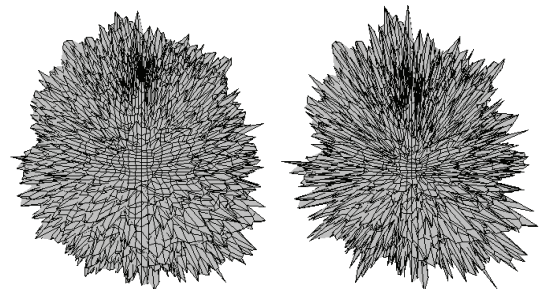
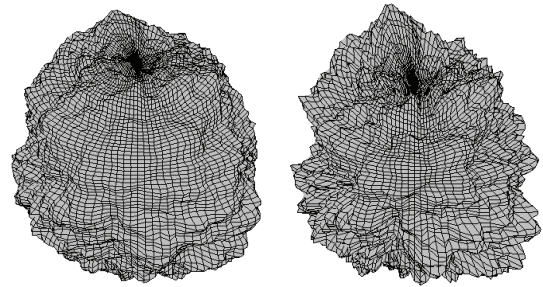


圖 10、不同 D 、 G' 值的圓球粒子：(a) $D=2.2$, $G'=0.008$ ；(b) $D=2.2$, $G'=0.016$ ；(c) $D=2.8$, $G'=0.008$ ；(d) $D=2.8$, $G'=0.016$

圖 9 是同一個粒子在不同方向的投影圖，由圖可知不管從那個方向觀察，粒子粗糙表面的劇烈程度均相同，與位置、角度無關，即具備均質性。而同一粒子在不同方向的二維輪廓性質也相同。三維粒子的模擬與二維粒子輪廓方法相同，皆以控制 D 、 G' 值來模擬不同的粒子。圖 10 是多組不同 D 、 G' 值比較。不同的 D 值其粗糙面的劇烈程度不同；不同的 G' 值影響粗糙峰振幅的大小，這兩點與二維粒子輪廓的模擬結果相符。

除了以圓球做基底的三維粒子，(14)式還可以模擬不同 a 、 b 、 c 軸的橢圓體粒子。圖 11(a)、11(b)是具有不同長短軸的三維粒子，而箭頭是指橢球的 a 、 b 、 c 軸方向。在橢球粒子的模擬當中，不同長短軸的粒子還是能夠描繪出等向且均質的粒子表面。而圖

11(b)最大的長短軸比為 4，顯示(14)式在模擬出不同 a 、 b 、 c 軸的橢圓球粒子，不會隨著長短軸比例加大而變形。

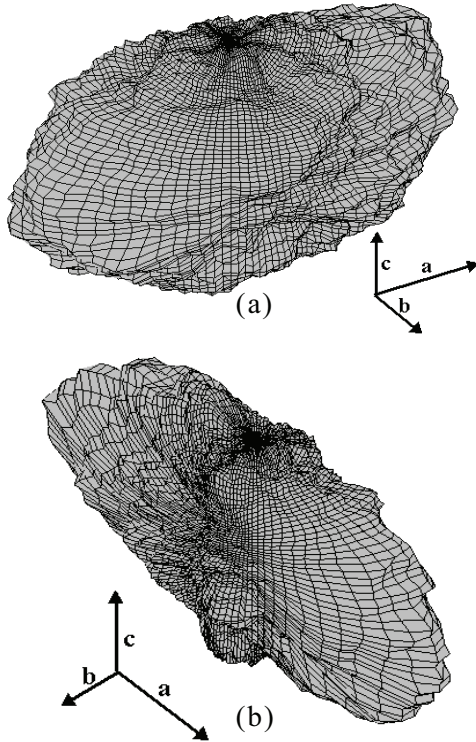


圖 11、三維橢圓球粒子：(a) $a=2$, $b=c=1$, $D=2.2$, $G'=0.068$ ；(b) $a=2$, $b=0.5$, $c=1$, $D=2.2$, $G'=0.068$

以上推導的粒子輪廓方程式結合了粒子規則的輪廓外型與不規則的粗糙表面，已經可以模擬粒子的輪廓與立體形貌，但是仍有許多問題點有待突破：一、以圓形粒子為例，決定粒子輪廓的參數有 r 、 D 、 G 值，其中 r 值可利用粒子的平均粒徑來表示， D 值可透過建立粗糙面的 Richardson plot 或頻譜分析來決定其碎形維度，然而粒子輪廓的高度尺度常數(G)值並沒有有效的方法獲得。文獻上常利用結構函數法(structure function method)來計算 G 值[13]，但是結構函數的量測較為困難。二、雖然粒子的外型可以用圓形或橢圓形來近似，但是仍然有許多粒子呈現不規則狀，為了要建立泛用的模擬模型，勢必要考慮其他主要外型的粒子。De Pellegrin 與 Stachowiak[17]發展了一

套建立三維磨粒粒子外形的演算法，但是並沒有考慮粒子的粗糙表面。若將[17]中的三維粒子與(11)是結合，可以產生更真實的粒子形貌。三、Kaye[6]將粒子的輪廓分成在大尺度的結構(Structure)特徵與在小尺度的紋理(Texture)特徵，這表示粒子的碎形維度可能具有多重碎形行為(Mutlifractal)，但目前為止僅考慮單一的碎形行為，如何定義出符合碎形的尺度區間並結合多重的碎形將有助於模擬出更接近真實的粒子形貌。

四、結論

根據以上的理論分析與電腦繪圖模擬結果，本文所得的具體結果為：

1. 本研究利用廣義 W-M 函數與 (R, θ) 法結合，推導出二維的粒子輪廓方程式與三維的粒子形貌方程式。
2. 廣義 W-M 函數可以運用在 (R, θ) 法上描述粒子的不規則外形，利用碎形維度(D)與高度尺度常數(G)描述粒子表面，取代以富立葉級數展開的方式，大幅簡化粒子形貌的分析過程。
3. 藉由代入碎形維度(D)與高度尺度常數(G)成功地模擬出具有碎形特徵的粒子。這些粒子的二維輪廓與三維形貌皆滿足等向性與均質性。
4. 廣義 W-M 函數除了可以運用在球狀、橢球狀的粒子，還可以推廣至其他的幾何外形。

五、誌謝

本研究承蒙國科會研究經費補助，編號(NSC 96-2221-E-344-007)，在此致謝。

六、參考文獻

- [1] Rhodes, M.J., 1990, Principles of powder technology, Wiley, New York.
- [2] 葛世榮、朱華，摩擦學的分形，機械工業出版社，2005。
- [3] Luerkens, D.W., Beddow, J.K. and Vetter, A.F., 1984, Theory of

- Morphological Analysis, Beddow, J.K. eds. Particle Characterization in Technology Volume II: Morphological Analysis, CRC Press, pp.3-14.
- [4] Meloy, T.P., 1997, "Fast Fourier transforms applied to shape analysis of particle silhouettes to obtain morphological data", Powder Technology, 17, pp.27-35.
- [5] Schwartz, H.P. and Shane, K.C., 1969, "Measurement of Particle shape by Fourier analysis", Sedimentology, 13, 213-231.
- [6] Kaye, B.H., 1978, "Specification of the Ruggedness and/or Texture of a Fine Particle Profile by its Fractal Dimension", Powder Technology, 21, pp.1-16.
- [7] Kennedy, S.K. and Lin, W.H., 1992, "A Comparison of Fourier and Fractal Techniques in the Analysis of Closed Forms", Journal of Sedimentary Petrology, 62(5), pp.842-848.
- [8] Stachowiak, G.W. and Podsiadlo, P., 1999, "Surface characterization of wear particles", Wear, 225, pp.1171-1185.
- [9] Richardson, L.F., 1961, "The problem of contiguity: An appendix of statistics of deadly quarrels", General Systems Yearbook, 6, pp.139-187.
- [10] Mandelbrot, B.B., 1967, "How long is the coast of Britain? Statistical self-similarity and fractional dimension", Science, 155, pp.636-638.
- [11] Russ, J.C., 1994, Fractal Surface, Plenum, New York.
- [12] Berry, M.V. and Lewis, Z.V., 1980, "On the Weierstrass-Mandelbrot Fractal Function", Proceedings of the Royal Society of London. Series A, 370(1743), pp. 459-484.
- [13] Majumdar, A., and Bhushan, B., 1990, "Role of Fractal Geometry in Roughness Characterization and Contact Mechanics of Surface", ASME Journal of Tribology, 112, pp. 205-216.
- [14] Kindratenko, V.V., 2003, "On Using Functions to Describe the Shape", Journal of Mathematical Imaging and Vision, 18, pp.225-245.
- [15] Ausloos, M. and Berman, D.H., 1985, "A Multivariate Weierstrass-Mandelbrot Function", Proceedings of the Royal Society of London. Series A, 400(1819), pp. 331-350.
- [16] Yan, W., and Komvopoulos, K., 1998, "Contact Analysis of Elastic-Plastic Fractal Surfaces", Journal of Applied Physics, 84(7), pp. 3617-3624.
- [17] De Pellegrin, D.V., Stachowiak, G.W., 2005, "Simulation of Three-Dimensional Abrasive Particles", Wear, 258, pp.208-216.