粒子分散複合材料のサイズ効果を考慮した曲げ強度計算手法

Bending Strength Calculation Method of Particulate Composite with Size Effect

藤原 誠*・請井 博一*・吉良 佳子*
Makoto FUJIHARA, Hiroichi UKEI and Yoshiko KIRA

(Received October 20 2015)

The mechanical strength of composite functional films is investigated by numerical simulation in this paper. Such functional film is often required bending strength during assembly. It is calculated composites with method to calculate equivalent macroscopic properties such as equivalent inclusion method and homogenization method, but these methods cannot be considered size effect. Therefore, we developed method to evaluate bending strength of particulate composite film by bending calculation of RVE with relative periodic condition. From the results of DOE bending calculations by the developed method, filler size shows a high contribution rate, however the size under 0.1 μm doesn't affects the contribution rate.

Key Words: Particulate Composite, Bending Strength, Size Effect, FEM, RVE

1. 緒言

機能性フィルムでは樹脂の中にフィラーを分散させた粒子分散複合材料や発泡などにより樹脂内に空孔を生じさせた多孔質材などにより多種の機能を付加する製品が多い。このような複合材料により巨視的に様々な機能、例えば、絶縁性、断熱／放熱、低誘電性、大変形性（衝撃などの緩衝材用途）などを付与することができる。しかし、これらの機能性を向上できる反面、強度・剛性・回復性（弾性）などの機械物性の低下が問題とされることがある。材料物性の予測には材料を巨視的にみて均質材料とみなし、等価物性を求める手法^{1),2)}がよく利用されるが、これらの手法は基本的にマイクロモデル（フィラー・樹脂を別々とみなせるスケールでのモデル）は求める複合材料のスケールに対し非常に小さいという仮定を元に、一様な変位場に対する強度、弾性を議論している。そのため、フィラーサイズの影響が計算されない。しかし、曲げ剛性・強度は現実的にフィラーサイズの影響を無視できない場合がある。特に、フィルム状の製品ではフィラーサイズの影響を無視できず、曲げ剛性・強度を必要とされる場合、これらの手法では材料設計が不十分となる。そこで、本稿では代表体積要素 (RVE : Representative Volume Element) モデルでの曲げモード変形計算による粒子分散複合材料の曲げ強度設計を検討した。

2. RVE モデル作成ツール

本稿では粒子分散複合材料の曲げ強度設計の際の多数条件での計算を考慮し、RVE モデルを半自動的に作成する

Fig.1 User interface of RVE modeling tool implemented on Excel

Fig.2 Schematic model of filler shapes and sizes

仕組みを構築することとした。メッシュ作成には CUBIT ver.13.1（現 Cube-it³⁾）を利用し、パラメータを入力すると CUBIT 専用のジャーナルファイルを生成する Excel マクロを作成した (Fig.1)。生成ジャーナルファイルを用いると CUBIT により自動的に RVE 形状が作成される。

本ツールにて考慮したパラメータは以下。

・フィラー形状（六角板、六角柱、球）(Fig.2)

* 日東電工株式会社（〒441-3194 愛知県豊橋市中原町字平山18 番地）
Nitto Denko Corporation (18 Hirayama, Nakahara, Toyohashi, Aichi, 441-3194 Japan)

- ・フィラーサイズ（単分散）
- ・RVE モデルサイズ
- ・フィラー個数
- ・フィラー配向ばらつき
- ・フィラー間距離

フィラーは近傍のフィラーと干渉せず、かつ、指定された距離を中心とする正規分布の確率で配置されるようにした。フィラーのサイズ・個数と RVE 領域の比率を入力することにより含有率を制御可能とした。Fig.2 に示すフィラータイプの内、Fig.2(a) の六角板（柱）と Fig.2(b) の立方体の配向は式 (1) の確率関数⁴⁾を用いて決定した。配向ばらつきは式 (1)、(2) 内の σ の値を変更することにより制御可能である。なお、位置や配向の決定にはランダム関数を利用しており、初期値の変更により同条件で異なるモデルが作成できるよう配慮した。

$$f_0(\theta) = \frac{1}{C\sqrt{2\sigma}} \exp\left(-\frac{\theta^2}{2\sigma^2}\right) \sin\theta \quad (1)$$

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\sigma}} \int_0^{\pi/2} \exp\left(-\frac{\theta^2}{2\sigma^2}\right) \sin\theta d\theta \quad (2)$$

また、RVE モデルを単位とした周期構造となる様にフィ

ラーが配置される様にした。本ツールによる RVE モデルの作成例として、Fig.3 にランダム配向 ($\sigma \rightarrow \infty$) と $\pm 30^\circ$ 配向 ($\sigma = \pi/18$) の場合の RVE モデルを示す。Fig.3 に示す様なモデルを CUBIT で周期性を考慮しつつメッシュ作成することにより Fig.4 に示す様な RVE モデルのメッシュが作成できる。

3. サイズ効果を考慮した曲げ変形計算手法

十分薄い単一材料のフィルムの曲げ弾性変形では Fig.5 の様に中立軸を境に引張／圧縮が反転するが、厚み方向に線形にひずみが分布していると考えられる。

等価介在物法や均質化法などではフィラーは巨視構造（フィルム全体の構造）より十分小さいと仮定することにより RVE モデルを Fig.5 の厚み方向の 1 点とみなすことができ、変形は一樣に加わっているとみなす。これはフィラーサイズが巨視構造と比較して十分に小さい場合には問題ない。しかし、フィルムの様な製品では巨視構造の代表寸法である厚みも小さく、フィラーのサイズは巨視構造に対して十分に小さいとは見なせない場合があり、前述の様な一樣変形場を仮定できるとは限らない。Fig.6 にサイズの違う構造に曲げ変形を加える場合の模式図を示す。図中ではフィルムの曲げ模式図の上に複合材料の RVE を 1 つだけ重ねている。Fig.5 で示した様な曲げ変形の場合、異なるサ

Fig.3 Examples of solid model of RVE

Fig.5 Schematic strain distribution during bending deformation

Fig.4 Tetrahedral mesh of RVE with random oriented fillers

Fig.6 Schematic deformation with size effect

イズの2つのRVEの下辺を中立軸の位置に揃えたとしても、両者とも下辺のひずみは0となるが、RVEの上辺に与えられるひずみはRVEのサイズが半分ではひずみも半分となる。これら2つのRVEをサイズが紙面上で同じになる様に拡大表示すると、Fig.6の最下段に示す様になり、両者の間に破線で示した様な変形の相違が生ずる。このため、サイズの異なる相似形のフィラー／樹脂構造（マイクロ構造）であっても発生する応力分布が異なり、巨視的な曲げ強度はフィラーサイズによって変化することとなる。等価介在物法や均質化法などの計算法ではFig.6中のRVEの上辺と下辺のひずみの差は無視されるために曲げ強度へのフィラーサイズの影響が計算できず、フィルムの曲げ強度設計には不十分と考える。そこで、本稿ではRVEモデルの曲げ変形計算を利用する方法について考える。

Fig.5の様なひずみ分布になるのは線形弾性範囲内であり、塑性変形や微小破壊が生ずる現象では成り立たない。RVEモデル単位で考えるとこのような非線形現象は隣接RVEの影響を加味せねばならず、非常に計算負荷が大きい。そこで、本稿では非線形領域でもFig.5の様な変形となる一定曲率の曲げ変形を仮定した。この仮定のため定量的には不十分だが、材料設計における定性的な判断は可能となる。

RVEは周期性を仮定したモデルであり、その境界には式(3)の様な周期境界条件が適用される。

$$u_t = u_r \quad (3)$$

u_t は境界上の変位であり、 u_r は周期的に対応する境界上の変位である。式(3)の周期境界条件では変位が周期的となるために伸びや圧縮といった変形が拘束される。これを回避するために周期的に対応する境界面の変形を相対的に拘束することにより、境界面間の位置関係に自由度を持たせる手法がある⁹⁾。この手法ではFig.7に示す様に相対変位 ΔU を付加することにより周期境界面間の伸びや圧縮などの変形を許容する。逆に、この ΔU を規定することにより巨視的な変形場をRVEモデルに与えることができる。

この手法を拡張し、Fig.8に示す様に一樣曲率での曲げ変形が加わったとし、周期境界条件式を定式化することとした。Fig.8では変形前のRVEモデルを実線四角、その周囲のRVEモデルを点線四角で表現している。このような周期的に並んだRVEモデルに一樣曲率での曲げ変形が加わったとすると、薄墨実線および破線の様な扇形に変形すると考えられる。このように考えると、変形後は紙面横方向には周期構造となるが、紙面上下方向には相似形を許容した周期構造となる。

定式化に際し、更新ラグランジュ法による非線形計算への拡張を考慮した。またRVEモデルでの曲率を一樣と仮定しているので、曲げ変形の進行は曲率半径の変化で表現できる。しかし、曲率半径を直接制御する場合、Fig.9(b)の

Fig.7 Relative periodic boundary condition

Fig.8 Schematic bending deformation of periodic RVE

(a) Schematic deformation (b) Radius control (c) Angle control

Fig.9 Two types of bending deformation control for RVE model

様に曲率半径に対する変形が非線形となり制御が困難となる。そこで、Fig.9(a)に示す様な曲げ変形によるRVEの対となる境界面のなす角度を制御することとした。これにより、Fig.9(c)に示す様に角度に対する変形が線形となり制御が容易となる。なお、Fig.9中では変形後の境界面も直線で表現しているが、実際には直線とは限らず、境界面の変形も許容される。

RVEモデルは曲げを与える巨視構造のフィルムの中立軸からFig.10の様に ΔR 離れた箇所の構造を抜き出したと仮定すると、中立軸の曲率半径 R とRVEモデルの対となる境界面のなす角度 θ' との間には次式の関係がある。

$$\theta' = \frac{L}{R' + \Delta R} \quad (4)$$

Fig.10 Position of RVE in bending film

ただし、 L は RVE の一辺の長さである。

以上を前提として定式化を考える。まずは周方向周期境界条件、すなわち Fig.9(a) の対となる太線の境界について考える。周方向は変形後も周期構造だが、境界面が曲げにより θ' 回転している。このため、対となる境界面上変位の直交座標成分に直接周期境界条件を与えることはできない。また、円筒座標成分に周期境界条件を与える事を考えた場合、時間ステップの進行とともに座標系原点が変わるために、一つの円筒座標系では記述できない。そこで、時々刻々と変化する円筒座標系上の座標成分を一つの固定された直交座標系上に変換して考えることとする。ある時間ステップ t の計算が終了し、座標 x^t が確定しており、次の時間ステップ $t + \Delta t$ での座標 $x^{t+\Delta t}$ を計算することを考える。簡便化のため RVE は Fig.9(a) で示す様に左辺の境界を yz 平面平行面に固定（実際には境界面内での節点は個々に変形し、対象の yz 平面平行面内にはとどまらないが、全体的に平均するとこの境界面は yz 平面平行面に固定されているとみなす）して、右辺が変形するものとする。時間ステップ $t + \Delta t$ における対となる境界面がなす角度は $\theta^{t+\Delta t}$ であり、Fig.9(a) 右辺の境界面上の座標 $x^{t+\Delta t}$ は次式の様になる。

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_t^{t+\Delta t} + \begin{Bmatrix} L_x/2 \\ R^{t+\Delta t} + \Delta R \\ 0 \end{Bmatrix} &= \mathbf{T}^t \cdot \left(\mathbf{x}_r^{t+\Delta t} + \begin{Bmatrix} L_x/2 \\ R^{t+\Delta t} + \Delta R \\ 0 \end{Bmatrix} \right) \\ &= \begin{bmatrix} \cos\theta^{t+\Delta t} & \sin\theta^{t+\Delta t} & 0 \\ -\sin\theta^{t+\Delta t} & \cos\theta^{t+\Delta t} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_r^{t+\Delta t} \\ y_r^{t+\Delta t} \\ z_r^{t+\Delta t} \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} L_x/2 \\ R^{t+\Delta t} + \Delta R \\ 0 \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (5)$$

ただし、右下添え字の t, r はそれぞれ Fig.9(a) の右辺の境界上、左辺の境界上の値であることを示している。時間ステップ $t + \Delta t$ での Fig.9(a) 右辺の境界面上の座標 $x_t^{t+\Delta t}$ は未知数なので、時間ステップ t の右辺境界面上の座標 x_t^t と変位で表現すると次式の様になる。

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} x_t^t \\ y_t^t \\ z_t^t \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} u_t^{t+\Delta t} \\ v_t^{t+\Delta t} \\ w_t^{t+\Delta t} \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} L_x/2 \\ R^{t+\Delta t} + \Delta R \\ 0 \end{Bmatrix} \\ = \begin{bmatrix} \cos\theta^{t+\Delta t} & \sin\theta^{t+\Delta t} & 0 \\ -\sin\theta^{t+\Delta t} & \cos\theta^{t+\Delta t} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_r^t \\ y_r^t \\ z_r^t \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} u_r^{t+\Delta t} \\ v_r^{t+\Delta t} \\ w_r^{t+\Delta t} \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} L_x/2 \\ R^{t+\Delta t} + \Delta R \\ 0 \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (6)$$

Fig.11 Schematic deformation of relative periodic condition

u, v, w はそれぞれ変位の x, y, z 成分である。変位間の条件式としてまとめると、最終的に周方向の条件式は次式のようにになる。

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} u_t^{t+\Delta t} \\ v_t^{t+\Delta t} \\ w_t^{t+\Delta t} \end{Bmatrix} &= \begin{bmatrix} \cos\theta^{t+\Delta t} & \sin\theta^{t+\Delta t} & 0 \\ -\sin\theta^{t+\Delta t} & \cos\theta^{t+\Delta t} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_r^{t+\Delta t} \\ v_r^{t+\Delta t} \\ w_r^{t+\Delta t} \end{Bmatrix} \\ &+ \begin{bmatrix} \cos\theta^{t+\Delta t} & \sin\theta^{t+\Delta t} & 0 \\ -\sin\theta^{t+\Delta t} & \cos\theta^{t+\Delta t} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_r^t \\ y_r^t \\ z_r^t \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} L_x/2 \\ R^{t+\Delta t} + \Delta R \\ 0 \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} x_t^t \\ y_t^t \\ z_t^t \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} L_x/2 \\ R^{t+\Delta t} + \Delta R \\ 0 \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (7)$$

次に Fig.11 に示す径方向境界条件の定式化、すなわち Fig.11 中の下辺と上辺の境界面上の座標についての関係を考える。径方向（紙面上下方向）の変形後の RVE は前述した様に相似形になるものと仮定するので、Fig.11 中の下辺と上辺の境界面も相似形になるものと考えられる。ここで、この両辺の相似比率は各境界面の曲率半径の比率に従い次式のようにになる。

$$\alpha^{t+\Delta t} = \frac{R^{t+\Delta t} + \Delta R + L/2}{R^{t+\Delta t} + \Delta R - L/2} \quad (8)$$

両境界面上での座標は次式の様な関係になる。

$$\begin{Bmatrix} x_t^t \\ y_t^t \\ z_t^t \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} u_t^{t+\Delta t} \\ v_t^{t+\Delta t} \\ w_t^{t+\Delta t} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha^{t+\Delta t} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha^{t+\Delta t} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_r^t \\ y_r^t \\ z_r^t \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} u_r^{t+\Delta t} \\ v_r^{t+\Delta t} \\ w_r^{t+\Delta t} \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} L/2 \\ L/2 \\ 0 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} -L/2 \\ -L/2 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (9)$$

式 (7) と同様に変位の関係式として、次式の様にまとめる。

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} u_t^{t+\Delta t} \\ v_t^{t+\Delta t} \\ w_t^{t+\Delta t} \end{Bmatrix} &= \begin{bmatrix} \alpha^{t+\Delta t} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha^{t+\Delta t} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_r^{t+\Delta t} \\ v_r^{t+\Delta t} \\ w_r^{t+\Delta t} \end{Bmatrix} \\ &+ \begin{bmatrix} \alpha^{t+\Delta t} & 0 & 0 \\ 0 & \alpha^{t+\Delta t} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_r^t \\ y_r^t \\ z_r^t \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} L/2 \\ L/2 \\ 0 \end{Bmatrix} + \begin{Bmatrix} -L/2 \\ -L/2 \\ 0 \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} x_t^t \\ y_t^t \\ z_t^t \end{Bmatrix} \end{aligned} \quad (10)$$

最後に z 軸方向（Fig.9(a)、Fig.11 上の紙面垂直方向）の条件式は平面ひずみ状態を仮定し、次式に示す様に対となる境界面で変位が同じ、一般的な周期境界条件を適用する。

$$\begin{Bmatrix} u_i^{t+\Delta t} \\ v_i^{t+\Delta t} \\ w_i^{t+\Delta t} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} u_r^{t+\Delta t} \\ v_r^{t+\Delta t} \\ w_r^{t+\Delta t} \end{Bmatrix} \quad (11)$$

以上、式 (7)、(10)、(11) が曲げ変形のための相似周期境界条件式となり、この条件式を対となる境界面上の対応する節点对に対し適用すればよい。

変形の計算はエムエスシー・ソフトウェア(株)の商用構造解析ソフト Marc2010.2⁶⁾ を利用した。式 (7)、(10)、(11) の適用には Marc の Link 機能とユーザーサブルーチン uformsn を利用した。Link 機能を適用する節点对の指定は手入力でも可能だが、複数条件での計算を考慮し、自動的に節点对を探出し、式 (7)、(10)、(11) の式を適用したプリポストソフト Mentat 用の入力ファイルを出力するソフトを自社開発した。

一般的に機能性フィルムでは剛性は主として要求されず、ユーザーの製品への取り付け時の変形などでフィルムが破断せず、必要な機能が保たれるならば、微小破壊は許容される。したがって、計算では樹脂の破壊を考慮した。今回は Marc のユーザーサブルーチン uactive を利用し、しきい値を超えた要素の不活性化により破壊を表現することとした。しきい値には相当ひずみを用いた。

4. RVE 曲げ強度計算

計算で利用した物性値を Table 1 に示す。

フィラーはセラミックスと考え、脆性材料とし、線形弾性体で模擬した。樹脂は Fig.12 に示すようにわずかに非線形となるが、塑性領域が狭くすぐに破断するので垂弾性体としてモデル化し、Table 1 に示すような関数で近似した。

Fig.12 の実測データは一見滑らかにみえるが、実際には微妙に値が上下に変動している。構造解析ソフト Marc の非線形大変形計算では Newton 法を利用しており、この微妙な上下変動により接線剛性が大きく変動し、計算の収束性を悪化させる。その対策として表 1 に示すような単純な近似関数でデータ点をなめらかに補正している。また、Table 1 の近似関数は二次関数をベースとしているが、その二次関数の最大点は Fig.12 に示す様に破断ひずみよりも大きな点であり、計算上問題無いように考えられるが、実際の収束計算中や収束後の要素不活性化判定時にこの最大点を超えるひずみとなることがあり、計算を不安定にする。そこで、破断ひずみ以上は線形に外挿した Table 1 の近似関数を採用した。

まず、対象複合材料の一軸引張試験の実測と計算の比較を行う。六角形様フィラー含有率 12.3 % ランダム配向の複合材料であり、RVE モデルとメッシュはそれぞれ Fig.3(a)、Fig.4 に示す。RVE モデルは 1 辺 4 μm の立方体であり、フィラーは Fig.2(a) の六角板で $W = 1 \mu\text{m}$ 、 $t = 0.2 \mu\text{m}$ とした。その結果を Fig.13 に示す。

Table 1 Material properties

material	characteristic
Matrix resin	Hypoelastic:
	$\sigma = \begin{cases} -7373\varepsilon^2 + 1755\varepsilon & (\varepsilon \leq 0.075) \\ 649\varepsilon + 41 & (\varepsilon > 0.075) \end{cases} [\text{MPa}]$ Break point : $\varepsilon=0.075$
Filler	Elastic: 100MPa

Fig.12 Tensile stress-strain diagram of matrix resin

Fig.13 Comparison between measurement and calculation of tensile test

Fig.13 では複合材料の実測結果は樹脂のみよりも傾きが大きく、破断ひずみは約半分となっていることがわかる。これに対し RVE モデルの計算結果はほぼ複合材料実測と同様の傾きとなっているのがわかる。樹脂の微小な破壊を考慮しない計算結果ではひずみ 0.02 あたりまでは実測とよい一致を示すが、ひずみ 0.02 以上では実測の曲線はわずかに傾きが小さくなり、破断に至る。微小破壊による全体剛性の低下が生じているためである。これに対し、樹脂の微小破壊を考慮した計算結果は実測の傾きの変化も追従できており、応力の最大点も実測の破断点に近く、よい一致を示している。この結果により、計算モデルが妥当であることが確認できた。

次に曲げ強度解析を実施した。結果を Fig.14 に示す。対象とした RVE モデルは Fig.14(a) に示しており、この RVE モデルの曲げ計算に前節で述べた式 (7)、(10)、(11) の境界条件を適用する。この際、Fig.14(b) に示す様に曲げ構造物の中立軸からの距離 ΔR の位置が RVE モデルの中心と考え、 ΔR の値を変えた条件での RVE モデルの曲げ計算を実施し、破壊状況から定性的に評価した。計算に用いた RVE モデルのメッシュを Fig.14(c) に示す。Fig.14(c) では樹脂を白色、フィラーを薄墨色に色分けしている。 ΔR の値を変えた計算結果を Fig.14(d) ~ (i) に示す。コンターは相当ひずみを示している。

Fig.14(d)、(e) に示す、それぞれ $\Delta R = 1, 2 \mu\text{m}$ の条件ではひずみが大きくなってきているが、RVE モデルへのき裂は見られない。しかし、Fig.14(f) の $\Delta R = 3 \mu\text{m}$ の条件ではき裂が RVE モデルの中央あたりまで入っているのが確認できる。RVE モデルの下辺あたりにも破壊が見られるがこれは相似周期境界条件の適用により、上辺が破壊すると下辺も破壊するためである。本来、下辺は破壊が生じないはずであり、厳密には正しくないが、破壊後の計算において上辺の破壊は進展するが、下辺の破壊は進展しておらず、最終的に Fig.14(f) の様に上辺からき裂が入っている様子が計算できており、ここでは下辺の破壊は無視するものとする。Fig.14(g) に示す $\Delta R = 4 \mu\text{m}$ ではき裂は RVE モデルを貫通しており、コンターもほぼひずみが 0 であり、RVE モデルは破断したことがわかる。その後、Fig.14(h)、(i) に示す $\Delta R \geq 5 \mu\text{m}$ では破断した RVE モデルの左右の領域が離れていることがわかる。Fig.14(d) ~ (i) のモデルはモデルサイズから考えても重なる領域があり、また破壊進展の観点からも厳密には正しくないが、それぞれ Fig.14(b) の曲げ構造物の中立軸からの ΔR での RVE モデルと見なすことにより、き裂が曲げ構造物の上側から途中まで進展している様子が計算できる。Fig.14 の結果から、計算対象となる複合材料ではき裂進展はほぼ $3 \mu\text{m}$ と見なす。この様な評価を異なる条件の複合材料で実施することにより、それぞれの材料構成の定性的な比較を行う。

Fig.14 の様なき裂進展計算では要素サイズの依存性があるが、本稿の計算手法では破壊後の挙動はあまり重要ではなく、かつ、周期構造の仮定から破壊の定量性を厳密には議論できない。したがって、RVE 内部の微小き裂の進展についての精度はあまり議論せず、RVE 自体が破断する様なき裂の発生までを議論することとした。そこで、要素サイズは Fig.13 の一軸引張試験の実験結果と齟齬が生じない程度で、かつ、本稿の計算手法は計算数が多くなるため、要素数が必要以上に多くならない程度として、Fig.14(c) のサイズとした。また、異なる RVE モデルにおいても、RVE サイズに対して相対的にはほぼ同じサイズとなるように全てのモデルで統一し、条件による要素サイズの影響度を小さくし、フィラー形状や曲げ曲率の差による影響が反映され

Fig.14 Bending strength calculation of RVE

るようにした。

以上のような曲げ強度評価手法を用い、フィラー含有率とサイズの異なる条件でのフィラーサイズや形状による強度の違いを計算した。その計算条件を Table 2 に示す。

フィラーは Fig.15 に示す 2 種類の形状を模擬し、Fig.2(a) の六角板（柱）でモデル化した。サイズのみ異なる条件では RVE モデル全体のサイズを変更した。そのため、

Table 2 Parameters of RVE for bending strength evaluation

No.	Size of filler [μm]		Filler content rate	Size of RVE L [μm]
	W	t		
1	1.0	0.2	12.3Vol%	4.0
2	1.0	1.0		4.0
3	0.1	0.02		0.4
4	0.1	0.1		0.4
5	1.0	0.2	5.9Vol%	4.0
6	1.0	1.0		6.0
7	0.1	0.02		0.4
8	0.1	0.1		0.6

(a) Plate-like body

(b) Column-like body

Fig.15 Electron micrograph of two types of hexagonal prism filler

No.1 と 3、2 と 4、5 と 7、6 と 8 は寸法を無次元化すると **Table 2** の下段に示す様に同じモデルとなる。なお、計算では実寸法を考慮している。

以上の条件で計算を実施した。**Table 2** の条件毎に ΔR の異なる条件を複数計算し、き裂先端の位置を評価した。その結果を **Fig.16** に示す。**Fig.16** 中には参考のため、対象複合材料の樹脂単体の結果も示す。樹脂単体ならば、曲げ構造のフルモデル計算も可能だが、同じ条件で評価するために RVE モデルと相似周期境界条件を用いたき裂先端位置で評価した。

Fig.16 より樹脂単体に比べ、複合材料のき裂先端位置は半分以下となっており、**Fig.13** の一軸引張試験と同様の結果となっている。これはフィラー近傍の樹脂が大きくひずみ、微小破壊を生じ、それを起点にき裂が発生しやすくなっているためと考えられる。フィラー形状については以下のことが言える。

- ・フィラー量が少ない方が強度大
- ・フィラーサイズが小さいほうが強度大
- ・フィラー形状は扁平でない方が強度大

これらの結果は一軸引張試験結果 (**Fig.17**) と傾向が一

Fig.16 Results of bending strength evaluation

(a) Influence of consistent rate

(b) Influence of filler type

Fig.17 Results of uniaxial tensile experiment

致しており、本校で提案する RVE モデルの曲げ計算を利用した強度評価手法により各条件の優位差が判断できものとする。

5. 実験計画法を用いた複合材料パラメータの影響調査

前節で記述した様な RVE 曲げ強度評価手法を用い、製品開発の方向性を明確にするために、実験計画法を用いて各

Table 3 Orthogonal array table of DOE

No.	1	2	3	4	5	6	7	8	9
Factor									
1	Consistent rate [Vol%]	2.9	2.9	2.9	5.9	5.9	5.9	12.3	12.3
2	Type	Prism	Cube	Sphere	Prism	Cube	Sphere	Prism	Cube
3	Size [μm]	0.05	0.1	1	0.1	1	0.05	1	0.05
	L of RVE [μm]	0.2	0.6	6.0	0.4	6.0	0.2	4.0	0.2
	Filler image
4	Dispersibility	Low	Middle	High	High	Low	Middle	Middle	High

Fig.19 Correction frequency distribution

Fig.18 Dispersibility of RVE

Fig.20 Results of strength evaluation of DOE

種パラメータの影響度を調査した。選択したパラメータは含有率、形状、サイズ、分散性である。含有率とサイズはそれぞれ、2.9、5.9、12.3 Vol%と0.05、0.1、1 μmと水準をふり、形状はFig.2に示した六角板、立方体、球とした。Table 3に実験計画法の直交表を示す。それぞれのRVEモデルはモデル中のフィラー数が極端に少なくならない程度の領域を確保することとし、表中のサイズとした。分散性は開発したモデリングツールだけでは制御できないので、次の様に手動で補正した。フィラー間距離により、ある程度ベースのモデルを作成し、分散性、中、小のモデルはRVEモデルの中心にフィラーを寄せることにより分散性を制御することとした。立方体フィラーと球状フィラーの分散性を考慮したRVEモデルをFig.18に示す。

分散性の高いモデルはモデリングツールで自動作成した。分散性を制御する際に、フィラー形状、含有率などで可能な限り同じ条件とするためにFig.19に示す様に周期的に配列している事を考慮しつつ、RVEモデルの中心からの距離に対するフィラーの存在頻度分布を合わせこむこととした。ただし、中心からの距離に対する頻度分布は距離が離れるほど対象領域の増加に伴い頻度も増加するので、頻度分布は単位体積当たりとなるように補正した。

Table 3の直交表の条件で前述の強度評価を実施した。その結果をFig.20に示す。

Fig.21 Factor effect plot (sensitivity)

Fig.20の強度評価結果から要因効果図を作成した。感度グラフをFig.21に示す。なお、Fig.21中には各因子の寄与率も併記する。

Fig.21より、含有率は低いほど良く、形状は六角板<立方体<球形の順でよく、サイズは小さいほど良い。分散性は高い方が良い。しかし、感度と寄与率から、以下のことが言える。

- ① サイズは寄与率が最も高く、0.1 μm以下で良い
 - ② 含有率は5.9 vol%以下が良い
 - ③ 形状は球形が良いが寄与率は低い
 - ④ 分散性は高い方が良いが寄与率は低い
- サイズが最も影響するが、0.1 μm以下ならば差は小さく

なり、形状（フィラータイプ）は球形の方が良いが影響度が低い。また、製造工程に起因する分散性は高い方が良いが、その影響度は低いことがわかった。

6. 結 言

本稿では粒子分散複合材料からなる機能性フィルムの曲げ強度評価手法を開発し、製品開発の方向性を示すために実験計画法を用い、要因効果分析を行った。

複合材料の各種パラメータから RVE モデルを自動生成するモデリングツールを開発し、周期構造を考慮した曲げ変形のための相似周期境界条件式を定式化した。その周期条件式を商用構造解析ソフト Marc に組み込み、要素不活性化による破壊を考慮した RVE の曲げ計算を実施した。フィルム曲げ構造中立軸からの厚み方向位置を抜き出した RVE モデルの曲げ強度計算による評価手法を提案した。

製品パラメータとして、フィラーの含有率、形状、サイズ、分散性を因子とした実験計画法の計算により、製品開発の方向性として、以下のことを示した。

- 1) サイズの寄与率は最も高く、0.1 μm 以下ならば良い。
- 2) 含有率は低い方が良いが、5.9 Vol% 以下は効果が低い
- 3) 形状は球形が最も良いが、寄与率は低い
- 4) 分散性は寄与率が予想に反し低い。

本稿の強度評価では複合材料の重要な課題の一つである材料界面強度を考慮していない。これは材料界面強度の定量値を実測で評価できていないためであり、ある程度の精度の実測データがあれば考慮することは可能である。また、一連の計算手法は、等価介在物法や均質化法などの複合材料の数値計算手法では困難なフィラーサイズの影響を考慮した曲げ強度解析手法だが、定性的な評価のみであり、複

数種の複合材料を組合せた製品の評価はできない。このような製品設計に適用するためにはサイズ効果を考慮した定量的な曲げ強度計算手法が必要となる。曲げ強度では曲げ剛性がフィラーサイズの影響を受けるので、例えば、曲げ剛性自体を巨視物性化した二次均質化法⁷⁾などの計算手法に期待する。

謝 辞

マイクロマグネティックス計算手法と共に配向モデリング手法をご教示いただいた長崎大学 福永博俊 教授に感謝の意を表します。

参 考 文 献

- 1) Toshio Mura, "Micromechanics of Defects in Solids", Second, Revised Edition Kluwer Academic Publishers, 1987.
- 2) 寺田賢二郎・菊池昇、日本計算工学会編、“均質化法入門”、丸善 (2003).
- 3) <http://www.cube-it.jp/>
- 4) 福永博敏、桐生一生、中野正基、柳井武志、“Nd-Fe-B 磁石の磁化反転過程に及ぼす静磁気相互作用の影響－計算機シミュレーション－”、日本金属学会、**76-1** (2012) 43-47.
- 5) 座古勝、藤原誠、“面内周期性と幾何学的非線形性を考慮した織物繊維強化複合材料の変形挙動解析手法”、繊維機械学会誌、**54-1** (2001) 45-52.
- 6) <http://www.mssoftware.com/ja>
- 7) M. Uchida, N. Tada, “Computational simulation of micro- to macroscopic deformation behavior of cavitated rubber blended amorphous polymer using second-order homogenization method”, Key Engineering Materials, **626** (2014) 74-80.