逆問題解析手法を用いた多相混合系における ミクロ組織の推定*

寺 木 潤 一^{*1}, 平 野 徹^{*1}, 若 島 健 司^{*2}

The Estimation of Microstructures in Multiphase Composites by Inverse Analysis

Junichi TERAKI, Tohru HIRANO and Kenji WAKASHIMA

This report deals with a method of estimating microstructures in multiphase composites by inverse analysis. First, the multiphase composites are modeled with a microstructure model which is composed of ellipsoidal reinforcements in a continuous matrix. Then, characteristic dimensions of the analytical model are determined so that the difference between experimental measurements on the macroscopic material properties, including anisotropy, and analytical values obtained from the above model is minimized by inverse analysis using mathematical programming. Finally, the present method is confirmed by application to metal/plastic composites.

Key Words: Functionally Gradient Material, Multiphase Composite, Inverse Analysis, Micromechanics, Mathematical Programming, Material Property

1. 緒 言

近年、宇宙往還機や核融合炉の開発において、耐熱材料選択が重要な課題となり、数多くの研究が進められている。特に耐熱材料にセラミックスを用いるとき、それ自身の耐熱応力特性のほかに、構造材である金属材料とセラミックスを張り合わせた接合性が大きな問題となっており、そのためセラミックス、金属などの異種材料の混合比を連続的に制御した「傾斜機能材料」が提案されている⁽¹⁾。

このような熱応力緩和を基調とする傾斜機能材料設計においては、その構成要素である多相混合系(2種類以上の物質よりなる不均質材料)の弾性定数、熱膨張係数、熱伝導率、比熱等の物性値が入力データとして必要である。混合系におけるこれらの値は構成物質、ミクロ組織によって大きく変動し、また実測が難しい異方性等の性質も大きく現れる場合もあるため、実測によるデータの収集のみでは実際の材料設計に必要な物性値データの獲得において効率が悪いばかりで

はなく、個々のデータの信頼性においても問題が多い。よって、多相混合系の物性値をミクロ組織モデルを用いて解析的に求めることが必要となる。

本研究ではこのような多相混合系に対して、実際の実験データから得られた材料物性値より、ミクロ組織の推定を行うことを目的とする。ここでは物性値を解析的に求めるため、連続する母相中に数種類の不連続な回転だ円体状の分散相が含まれる多相混合系のミクロ組織モデルを用いた。この場合、回転だ円体のアスペクト比および配向角をパラメータとし変化させることにより、多相混合系の多くのモデルについて適用が可能となる。ミクロ組織の推定方法としては逆問題解析手法として数理計画法を用い、物性値に関し実測データとの誤差を最少するようにミクロ組織モデルの幾何学的パラメータの探索を行った。

上記の方法を用いてプラスチック系の複合材に対して、その実験結果よりミクロ組織の推定を行い妥当な結果を得た。

2. 多相混合系のミクロ組織モデル

多相混合系のミクロ組織についてモデル化を行い、そのマクロな物性値を解析的に求める。定式化については参考文献⁽²⁾に説明してあるため、ここでは要点的

* 平成元年7月12日 逆問題のコンピュータ手法とその応用シンポジウムにおいて講演、原稿受付 平成元年12月18日。

*1 正員、ダイキン工業(株) (〒591 堺市金岡町1304)。

*2 東京工業大学精密工学研究所 (〒227 横浜市緑区長津田町4259)。

み述べる。

2.1 ミクロ組織モデル 図1に示されるような、母相中に N 種類の分散相が含まれている $N+1$ 相の多相混合系を考える。個々の分散相の形状は、

$$\frac{x_1^2 + x_2^2}{a^2} + \frac{x_3^2}{c^2} = 1 \quad (1)$$

なる回転だ円体で記述できるものとする。このマイクロ組織は、個々の分散相 $n=1 \sim N$ について幾何学的パラメータ、すなわちアスペクト比 $\eta^{(n)} (=c/a)$ 、配向角 $(\theta^{(n)}, \phi^{(n)})$ および体積分率 $f^{(n)}$ を求めることにより規定することができる。

このようなマイクロ組織モデルは構成相の一つが連続相であることを前提としているため、例えば金属多結晶のようなものには適用することはできない。しかしながら、アスペクト比を変化させることにより、繊維状から粒状、さらに板状までの広範囲な形状の分散相を持つ複合材料について取扱うことが可能になると考えられる。

2.2 定式化 上記のマイクロ組織を考慮した固体モデルに基づいて、Eshelby の等価介在物法⁽³⁾⁽⁴⁾ を利用した微視力学的解析により各構成式を導出すると、結果として混合系の各物性値を構成相の物性値およびマイクロ組織の幾何学的パラメータの関数として以下のように表すことができる。

$$M_{ijkl} = \sum f^{(n)} M_{ijmn}^{(n)} B_{mnkl}^{(n)} \quad (2)$$

$$\alpha_{ij} = \sum f^{(n)} \alpha_{kl}^{(n)} B_{kl ij}^{(n)} \quad (3)$$

$$(\chi_{ij})^{-1} = \sum f^{(n)} (\chi_{ik}^{(n)})^{-1} B_{ij}^{(n)} \quad (4)$$

ただし、 M_{ijkl} 、 α_{ij} 、 χ_{ij} は混合系のコンプライアンス、熱膨張係数および熱伝導率のテンソルであり、 $M_{ijmn}^{(n)}$ 、 $\alpha_{kl}^{(n)}$ 、 $\chi_{ik}^{(n)}$ は各構成相のコンプライアンス、熱膨張係数および熱伝導率のテンソルである。添字 (n) は構成相を表し、 $n=0$ は母相、 $n=1 \sim N$ は分散相となり、 Σ は $n=0 \sim N$ までの総和を表す。また $B_{ijkl}^{(n)}$ 、 $B_{ij}^{(n)}$ は Concentration-Factor Tensor と呼ばれる微視力学演算子である。その導出については省略するが、具体

的には $B_{ijkl}^{(n)}$ に関して、

$$B_{ijkl}^{(n)} = L_{ijmn}^{(0)} R_{mn pq}^{(n)} \times \langle R_{pqrs} \rangle^{-1} M_{rs kl}^{(0)} \quad (5)$$

となる。ただし、 $L_{ijkl}^{(0)}$ は母相の弾性スティフネスであり、

$$L_{ijkl}^{(0)} = (M_{ijkl}^{(0)})^{-1} \quad (6)$$

また、

$$R_{ijkl}^{(n)} = I_{ijkl} - (S_{ijmn}^{(n)} - I_{ijmn}) \times (L_{mn pq}^{(0)} + L_{mn rs}^{(n)} S_{rs pq}^{(n)})^{-1} \times L_{pq kl}^{(n,0)} \quad (7)$$

$$\langle R_{ijkl} \rangle = \sum f^{(n)} R_{ijkl}^{(n)} \quad (8)$$

$$L_{ijkl}^{(n,0)} = L_{ijkl}^{(n)} - L_{ijkl}^{(0)} \quad (9)$$

$$I_{ijkl} = (1/2)(\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk}) \quad (10)$$

(δ_{ij} : クロネッカのデルタ)

となる。上式の $S_{ijkl}^{(n)}$ は Eshelby Tensor と呼ばれるものでだ円体のアスペクト比、配向角、および母相の弾性定数に依存する定数である。

同様に $B_{ij}^{(n)}$ に関して、

$$B_{ij}^{(n)} = Q_{ik}^{(n)} \langle Q_{kj} \rangle^{-1} \quad (11)$$

となる。ただし、

$$Q_{ij}^{(n)} = \chi_{ik}^{(n)} P_{kl}^{(n)} (\chi_{ij}^{(0)})^{-1} \quad (12)$$

$$P_{ij}^{(n)} = [I_{ij} + S_{ij}^{(n)} (\chi_{ik}^{(0)})^{-1} \times (\chi_{kj}^{(n)} - \chi_{kj}^{(0)})]^{-1} \quad (13)$$

$$\langle Q_{ij} \rangle = \sum f^{(n)} Q_{ij}^{(n)} \quad (14)$$

$$I_{ij} = \delta_{ij} \quad (15)$$

である。上式の $S_{ij}^{(n)}$ は、ニュートンポテンシャルより得られ、だ円体のアスペクト比、配向角に依存する定数である。

3. パラメータ同定法

2章で述べたマイクロ組織モデルを実際の複合材料に反映させる場合、各分散相のアスペクト比や配向角等のデータが必要となるが、これらの幾何学的なパラメータの実測が困難な場合、測定可能な実験値よりこれらのパラメータを逆に同定することが必要となる。本論文ではこのような逆問題解析の手法として、最適設計手法等に用いられる数理計画法を用い、実測値に近い物性値が得られるように各パラメータの同定を行った。

3.1 逆問題解析手法 拘束条件のない場合の最適問題の一般的な表示は、目的関数を F 、未知パラメータを $\mathbf{x}$ として、

$$F(\mathbf{x}) \rightarrow \min \quad (16)$$

となる $\mathbf{x}$ を求めることである。本論文では、 $\mathbf{x}$ を分散相の幾何学的パラメータ、 F を誤差の二乗和とし、

図1 多相混合系のマイクロ組織モデル

表 1 プラスチック系複合材料の物性値の実測値

Sample No.	Content (%)			Material Property				
	PTFE	Ag	Pore	E (TD)	E (PD)	α (TD)	α (PD)	κ (TD)
1	100.0	0.0	0.0	0.551	0.541	1.78	1.75	0.310
2	75.0	25.0	0.0	1.22	1.20	0.892	1.52	2.319
3	46.9	46.9	6.2	2.17	1.99	0.419	1.08	3.424
4	22.2	66.8	11.0	3.20	2.07	0.200	0.273	-

図 2 プラスチック系複合材料のマイクロ組織モデル

$$F = \sum_{i=1}^m \left[\frac{E_i - C_i}{E_i + C_i} \right]^2 \quad \dots\dots\dots (17)$$

と定義することにより逆問題解析を行っている。ただし、 E_i は実測された物性値、 C_i は解析による物性値を示し、 $i(=1 \sim m)$ は実測点である。

3・2 解法 式(16)で示されるような多変数の最適化問題の解法は、数理計画法として既に多くの方法が提案されており、ここでは詳しく述べない⁽⁵⁾⁽⁶⁾。一般的な極値探索法の場合は探索方向の決定、その方向の一次元探索という過程を繰返して求められる。しかしながら、このような方法では最終解が必ずしも最小値であるとは限らないため、探索の初期値あるいは手法の選択には十分な注意が必要である。

本論文では最適値探索法としてはBFGSの可変計量法を、また一次元探索法としては多項式近似を用いた。

4. 解析結果および考察

前章までの方法を用い、プラスチック系の複合材料に関しそのマイクロ組織の推定を行った。

4・1 プラスチック系複合材料 2成分系の複合材料として、PTFE(ポリテトラフルオロエチレン)とAg(銀)を用いたプラスチック系複合材料の合成を行った⁽⁷⁾。これはPTFEの粉末とAgの粉末を混合し圧

図 3 順解析手順

縮成形の後、400°C弱で焼結することによって作られる。表1に組成の違う4種類の試験片について物性値の実測値を示す。実測値では圧縮成形の際生じたと思われる異方性が存在し、加圧方向(PD)とそれに垂直な方向(TD)とでは物性値がかなり違っていることがわかる。また測定された各試料にはPTFE、AgのほかPore(空孔)が含まれており、物性値にかなりの影響を及ぼしているものと考えられる。

4・2 ミクロ組織のモデル化 前節で合成されたPTFE-Ag系の複合材料について、マイクロ組織のモデル化を行う。

ここでは製造条件および物性値の異方性より図2に示すように、PTFEを母相、Agをランダムに分散した回転だ円体状の分散相、Poreを回転だ円体状の分散相としてモデル化を行った。Agについてはランダムな分散状態を表すために7種類の違った配向角を持つものとした。

順解析手順を図3に示す。各構成相の物性値、形状、体積分率を入力とすることにより、マクロ的な物性値を解析的に得ることができる。ここでは、未知パラメータを、Ag、Poreのアスペクト比(η_1 , η_2)、および異

方向性を考慮するために Ag の配向角(θ)の 3 種類とし、逆問題解析を行いそれらを求めた。

4.3 未知パラメータの同定 前節のモデルを用いて実測値との誤差を最小化するように数理計画法により未知パラメータの同定を行う。

表 2 には解析に使用した物性値を示す。解析は表 3 に示すように 2 種類の初期値を用いて行い、最終的に得られた物性値の比較を行った。

図 4 には目的関数の収束状況を、図 5 には未知パラメータの収束状況を示す。図からわかるように初期値の違いによって全く違った解に収束している。これは極値探索を行う本方法のような場合には避けることのできない問題であり、最終的に得られた解の妥当性については、目的関数の値の比較、あるいは物理的な妥

当性から判断する必要がある。なお、図では 10 回程度の繰返して収束しているが、実際には目的関数のこの配を求めるための差分計算、および一次元探索による繰返し計算が必要であるために 80 回程度の順解析が必要となる。

図 6、図 7 にはそれぞれの最終的に得られた物性値を示す。この場合には、目的関数の値および実際のマイクロ組織を考慮すると、図 7 に示す結果が妥当なものであると考えられるが、この点に関しては実際のマイクロ組織についての画像処理等による解析が、今後必要になるものと思われる。また、図からわかるように解析結果と実験結果と完全には一致しないものの、その結果は異方性等の本材料の性質を良く表しているものと考えられる。

以上述べたようなマイクロ組織の推定法は、必ずしも実際のマイクロ組織を表しているとは限らず、それに近いと思われるような限定されたマイクロ組織モデルが得

表 2 解析に使用した物性値

E : Young's Modulus	(GPa)
ν : Poisson's Ratio	
α : Thermal Expansion Coef. (1/K)	$\times 10^{-4}$
κ : Thermal Conductivity (W/mK)	

Material Property	P T F E	A g
E	0.513	80.0
ν	0.46	0.38
α	1.75	0.192
κ	0.25	418.0

表 3 解析に使用した初期値

Case No.	Ag Aspect Ratio (η_1)	Ag Angle (θ) (deg.)	Pore Aspect Ratio (η_2)
Case 1	1.0	45.0	1.0
Case 2	5.0	45.0	1.0

(a) ケース 1

(b) ケース 2

図 4 目的関数の収束状況

(a) ケース 1

(b) ケース 2

図 5 幾何学的パラメータの収束状況

られるのみである。しかしながら、これによって実測値以外の物性値を解析的に求めることができるようになるため、当初の目的である傾斜機能材料やその他の複合材料の設計の際に有効に利用することができると考えられる。

5. 結 言

多相混合系に対して、回転だ円体状の分散相を持つマイクロ組織モデルと数値計画法を用いてマイクロ組織の推定を行った。

得られた結果を要約すると以下ようになる。

(1) 本論文で用いたマイクロ組織モデルは、分散相

を回転だ円体でモデル化しているため、繊維状から粒状、さらに板状までの広範囲な形状の分散相を持つ多相混合系に対して適用することが可能である。

(2) プラスチック系の複合材料に対して、マイクロ組織の推定を行った結果、得られたマイクロ組織モデルは実際の材料の性質を良く表していると考えられ、本手法は他の多くの複合材料についても有効であると思われる。

(3) 数値計画法を用いた逆問題解析により、パラメータ同定を行う場合には、パラメータの初期値により全く違った解に収束する場合があるため、使用に当たっては十分な注意が必要である。この点に関しては

図 6 物性値の解析値と実験値の比較(ケース 1)

図 7 物性値の解析値と実験値の比較(ケース 2)

別報⁽⁶⁾に、知識工学的手法と数理計画法を組合せることによって解決する方法を検討している。

なお、本研究では、科学技術庁の昭和 63 年度科学技術振興調整費による「熱応力緩和のための傾斜機能材料開発の基盤技術に関する研究」の一環として行ったものである。

文 献

- (1) 新野, 日本の科学と技術, **29**-251(1988), 64.

- (2) Wakashima, K., *Proc. of the 8th RISO Int. Sym.*, (1987), 543.
(3) Eshelby, J. D., *Proc. R. Soc., A*, **241**(1957), 376.
(4) Eshelby, J. D., *Proc. R. Soc., A*, **252**(1959), 561.
(5) Vanderplaats, G. N., *AIAA J.*, **22**-10(1984), 1458.
(6) 山田編, 構造システムの最適化, (1988), 73, 土木学会.
(7) 河内・ほか 2 名, 第 37 回高分子討論会, (1988-10).
(8) 平野・ほか 2 名, 機論, **57**-533, A (1991), 209.