

マイクロカンチレバー試験による多結晶体の確率的な強度・剛性評価に関する検討

Investigation of Stochastic Estimation of Stiffness/Strength for Polycrystalline Materials Using Microcantilever Testing

辻井郁弥¹⁾, LeCongTin¹⁾, 藤瀬達哉¹⁾, 松井和己²⁾, 山田貴博³⁾
Fumiya Tsujii, Tin Cong Le, Tatsuya Fujise, Kazumi Matsui, and Takahiro Yamada

1) 横浜国立大学 大学院環境情報学府 (〒240-8501横浜市保土ヶ谷区常盤台79-7)

2) 博(工) 横浜国立大学 大学院環境情報研究院 准教授 (E-mail: kzm@ynu.ac.jp)

3) 博(学) 横浜国立大学 環境情報研究院 教授

In this study, we propose a new method for predicting the rigidity of polycrystalline materials in small regions. Using a Voronoi tessellation to model the internal structure as random while fixing the surface structure, we fabricated 200 polycrystalline microcantilevers, 100 of which had a completely random crystal structure and 100 of which had a random crystal structure only in the interior and analyzed their rigidity using the finite element method. We also evaluated rigidity distribution using statistical analysis.

Key Words: Polycrystalline Material, Microcantilever, Stochastic Stiffness/Strength

1. 緒言

多結晶構造は結晶粒と結晶粒界から構成されており、結晶粒界は原子の並びが不規則であるため、結晶粒内に比べて強度が低い。そのため、多結晶構造全体で見たとき、結晶粒内に比べて結晶粒界で破壊が生じやすいことが知られている。また、複数の試験サンプルを用いた強度の分布は、一般的にワイブル分布に従うことが知られている^[1]。ワイブル分布とは、最弱リンク説^[2]に基づき脆性材料の強度のばらつきを表す分布である。しかし、この分布で剛性のばらつきを表すことができるかはわからない。

多結晶材料試験片の上面の結晶構造を固定し、内部の結晶構造が異なる複数のFEMシミュレーションモデルを作成し、その剛性の分布を取得した。この分布に対し統計解析を行ったところ、非対称正規分布であるという帰無仮説と、ワイブル分布であるという帰無仮説が棄却されなかった。この剛性分布をFig.1に示す。実線が非対称正規分布、破線がワイブル分布を仮説としたときの確率密度曲線を表す。

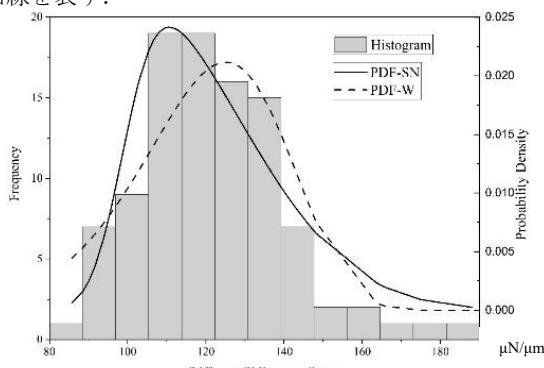


Fig.1 Stiffness distribution of the model with fixed surfaces

この剛性分布はワイブル分布に従うと言えるが、非対称正規分布に従っている、ともいえる。この原因を探るため、本研究では同様の手法を用いて、上面の結晶構造もランダムなシミュレーションモデルを作成する。そして、その剛性の分布がどのようになるか統計解析を行う。ワイブル分布に従うと言えることができれば、非対称正規分布となるのは表面を固定したことが理由と言えるため、この非対称正規分布を用いた統計的な剛性の推定が可能となる。

2. 統計解析

本研究では統計変数を剛性 k として統計解析を行う。 k はシミュレーション条件の荷重 F と、結果として得られる最大変位 d を用いて式(1)のように定義する。

$$k = \frac{F}{d} \quad (1)$$

累積密度関数 $P(k)$ は、確率密度関数 $p(k)$ を用いて次のように定義される。

$$P(k) = \int_0^k p(x)dx \quad (2)$$

シミュレーションによってえられた剛性分布に対して、本研究では正規分布への適合度とワイブル分布への適合度に対して検定を行う。また、理論的なワイブル分布に対する相関係数をプロットしたQ-Qプロットを作成する。剛性データが理論分布と完全に適合する場合、プロット上のすべての点は傾き1の直線上に位置する。

(1) シャピロ・ウィルク検定^[3]

シャピロ・ウィルク検定は、式(3)を用いて W 値を決定する。

$$W = \left(\sum_{i=1}^n a_i y_{(i)} \right)^2 / \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \quad (3)$$

ここで, $y_i (y_1, y_2, \dots, y_n)$ は, 剛性のサンプルに対応する順序統計量を表す. また, データの大きさに応じて決まる定数 $a_i (a1, a2, \dots, a_n)$ と臨界値 W_{CRI} は, Royston らの研究の値を用いる^[3]. W 値が 1 に近いほどデータは非対称正規分布への適合度が低いといえる.

また, W 値を用いて p 値の算出を行う. この算出には W 値を正規化したものを統計量とする Royston らの研究の式を用いる^[3]. p 値が大きいほど標準正規分布に近いグラフであるといえる. 臨界値である p_{CRI} は有意水準である 0.05 とする.

(2) コルモゴロフ・スミルノフ検定^[4]

コルモゴロフ・スミルノフ検定は, 式(4)~(6)を用いて D 値を決定する.

$$D^+ = \max \left[\frac{i}{n} - F_0(x_{(i)}) \right] \quad (4)$$

$$D^- = \max \left[F_0(x_{(i)}) - \frac{(i-1)}{n} \right] \quad (5)$$

$$D = \max(D^+, D^-) \quad (6)$$

ここで, x_i は順序統計量, n はサンプル数, $F_0(x_i)$ はワイブル分布における累積分布関数の値を表す. この D 値が大きいほどワイブル分布への適合度が低いといえる. 臨界値である D_{CRI} は, 式 (7) にて $D_{5\%}$ に補正をかけたものを用いる.

$$D_{CRI} = D_{5\%} (\sqrt{n} + 0.12 + 0.11/\sqrt{n}) \quad (7)$$

$D_{5\%}$ は Stephens らの研究^[4]より有意水準を 0.05 とした場合の臨界値である.

3. シミュレーション条件

本研究ではすべての結晶構造の異なるモデルを作成した. 固定条件を設定するための壁部分と, 多結晶構造を持つ試験片部分で構成した.

材料パラメータは作成したモデルの結晶粒ごとに設定した. ここでは直行異方性弾性材料モデルに, -180° から 180° まで 5° 刻みで作成した結晶方位を割り当てたものを各結晶にランダムに設定した.

また, 荷重は設定した座標の点に対し垂直に 100 [μN] を負荷し, その点から RBE3 要素を用いて荷重を複数の節点 (約 25 点) に分散させた. 最後に壁の奥側の面を完全固定とした. 荷重をかけた位置を Fig.2 に示す.

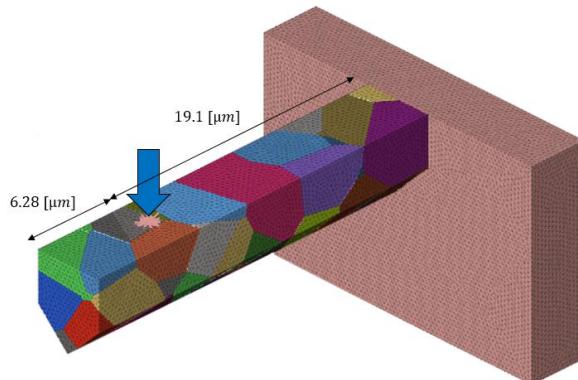


Fig.2 Load/fixing position

4. 結果

シャピロ・ウィルク検定に用いた p 値と p_{CRI} 値, W 値と W_{CRI} 値, コルモゴロフ・スミルノフ検定に用いた D 値と D_{CRI} 値を Table.1 に示す. また, ヒストグラムと確率密度関数を Fig.3 に, 完全にランダム構造による剛性分布と理論ワイブル分布の Q-Q プロットを Fig.4 に, 表面を固定したモデルによる剛性分布と理論ワイブル分布の Q-Q プロットを Fig.5 に示す.

検定結果は「2. 統計解析」より, p 値は臨界値より大きいと, D 値と W 値は臨界値より小さいと, それぞれの理論分布に従うと結論付けられる. Table.1 より, この剛性分布は正規分布よりワイブル分布に従った分布であると分かる. また, Fig.4 と Fig.5 より結晶構造をランダムに作成したモデルの剛性分布のほうがプロットした点は傾き 1 の直線上におおよそ並んでいることが分かる.

Table.1 Results of each test

p -value	p_{CRI}	W -value	W_{CRI}	D -value	D_{CRI}
0.0106 < 0.05		0.9658 > 0.9642		0.0842 < 0.134	

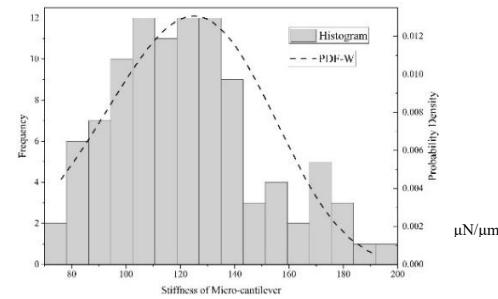


Fig.3 Histograms and probability density curves

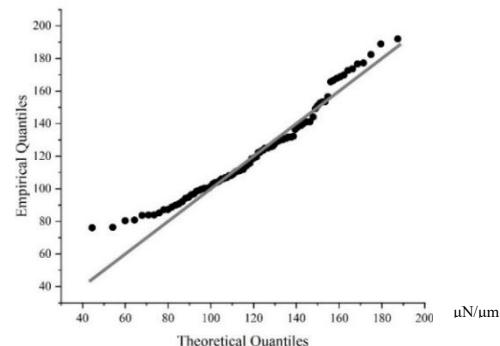


Fig.4 Q-Q plots with completely random models

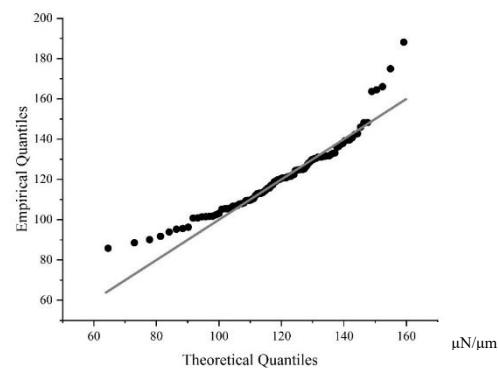


Fig.5 Q-Q plots with fixed surface models

5. 結言

本研究では、完全にランダムな多結晶材料モデルを作成し、その剛性分布に対し統計解析を行うことを目的とした。その結果、完全にランダムな多結晶材料モデルによる剛性分布はワイブル分布に従うことが確認された。さらに、表面を固定した場合の結果と比較することで、ワイブル分布以外にも非対称正規分布であるという帰無仮説が棄却されなかつたのは、表面形状や特定の位置の結晶構造を固定したためであることが明らかとなった。

今回は剛性分布を確認した。しかし、本研究の結果から、表面形状や特定位置の結晶構造を固定した場合、強度分布もワイブル分布とは異なる分布となる可能性がある。今後は、同様の手法を用いて強度分布の確認が必要である。

参考文献

- [1] Dongfang Wu, Jiancheng Zhou, Yongdan Li. "Methods for estimating Weibull parameters for brittle materials." *Journal of materials science*, 41, 5630-5638, 2006.
- [2] Obinna Anayo Osuchukwu, et al. "Weibull analysis of Ceramics and related materials: A review," *Heliyon*. 2024.
- [3] Royston Patrick. "Approximating the Shapiro-Wilk W-test for non-normality." *Statistics and Computing*, 2: 117-119, 1992.
- [4] Michael A. Stephens. "EDF statistics for goodness of fit and some comparisons." *Journal of the American statistical Association* 69.347, 730-737, 1974.