

共鳴超音波スペクトロスコピー法への境界要素法の適用

APPLICATION OF BOUNDARY ELEMENT METHOD FOR RESONANT ULTRASOUND SPECTROSCOPY

荒井 政大¹⁾, 上村 元祥²⁾, 足立 忠晴³⁾, 山路 昭彦⁴⁾
 Masahiro ARAI, Motoaki KAMIMURA, Tadaharu ADACHI and Akihiko YAMAJI

- 1) 信州大学工学部機械システム工学科 (〒380-8553 長野市若里4-17-1, E-mail: arai@gipwc.shinshu-u.ac.jp)
 2) 東京工業大学大学院 (〒152-8552 目黒区大岡山2-12-1, E-mail: motoaki@stu.mech.titech.ac.jp)
 3) 東京工業大学大学院機械物理工学専攻 (〒152-8552 目黒区大岡山2-12-1, E-mail: adachii@mech.titech.ac.jp)
 4) 東京工業大学大学院機械物理工学専攻 (〒152-8552 目黒区大岡山2-12-1, E-mail: yamaji@mech.titech.ac.jp)

Resonant ultrasound spectroscopy (RUS) is widely used to determine the elastic moduli of small solid specimens like superconductor of a single crystal. The variation of elastic moduli can be related to the microscopic structure or defect of the solids. In this paper, an alternative numerical method based on boundary element method is discussed acquiring and analyzing the resonant ultrasound frequencies of anisotropic solid. The resonant frequencies derived by present formulation of BEM are comparable to those obtained from other more conventional technique and those derived from experiment of RUS. Some numerical simulations for the steel and Si single crystal are conducted to demonstrate the effectiveness of the present method.

Key Words: Boundary Element Method, Resonant Ultrasound Spectroscopy, Resonant Frequency, Elastic Moduli, Non-destructive Testing

1. 緒論

超電導材料といった小さな固体電解質材料の弾性定数を測定する手法として共鳴超音波スペクトロスコピー法 (RUS : Resonant ultrasound spectroscopy) が近年注目されるようになった⁽¹⁾⁽²⁾⁽³⁾。固体電解質材料では、電子のキャリアとなる微細な格子欠陥の構造を知ることが重要であり、RUS により測定された弾性定数の微小な変化量によりそれらを同定する試みがなされている。

RUS では Fig.1 に示されるように、2つの圧電ピックアップにより固体材料を挟み、一方の圧電素子にスイープ信号を与えて材料を励振し、同時に他方の圧電素子より出力される電気信号のピーク値を計測することによって試料の共振周波数を得る。さらに弾性定数に適当な初期値を与えて対象物の固有値解析を行い、測定により得られた共振周波数に一致するよう弾性定数の探索を実施することによって、試料の弾性定数が決定される。

一般に RUS に対しては単純な試行関数を用いる Ritz 法⁽⁴⁾が用いられることが多いが、近年は任意の形状の試験片に対応できるといった利点から有限要素法の適用も試みられ

ている。しかしながら微細な格子欠陥に基づく弾性定数の変化は極めて微小であり、より高精度な振動解析法を見出すことは重要である。

本研究は RUS における共振周波数の計算に際し、境界要素法を適用することを目的として固有値解析手法に関する基礎検討を行ったものである。多様な結晶構造での解析を可能とするため、3次元異方性材料に関する境界要素解析プログラムを作成し、精度評価を行った。定式化には静的問題に対する基本解を用い、慣性力項の領域積分を行う領域-境界積分法を適用した。共振周波数の測定結果ならびに他の数値解法の結果との比較を通して、異方性材料に対する境界要素法の有用性を検証した。

2. 理論

2.1 境界積分方程式 定常振動状態にある均質材料について考える。線形弾性体におけるつり合い方程式的一般形は次式で与えられる。

$$\sigma_{ij,j} + b_i = \rho \ddot{u}_i, \quad (i, j = 1, 2, 3) \quad \dots \quad (1)$$

ここで σ_{ij} は応力、 b_i は微小要素に作用する体積力、 ρ は密度であり、””は時間に関する2階微分を表す。また添字の繰り返しについては総和規約に従うものとする。

物体の占める領域 Ω 内の点 p において、静的な単位集中荷重 f_i が作用する場合の点 Q における j 方向変位の解を $U_{ij}(p, Q)$ とする。 U_{ij} を上式の両辺に乘じ、Gauss の発散定理を適用すると次式に帰着する。

$$\begin{aligned} u_i(p) + \int_{\Gamma} \{ T_{ij}(p, Q) u_j(Q) - U_{ij}(p, Q) t_j(Q) \} d\Gamma \\ = \int_{\Omega} \{ U_{ij}(p, Q) b_j(Q) + \rho U_{ij}(p, Q) \ddot{u}_j(Q) \} d\Omega \quad \dots \quad (2) \end{aligned}$$

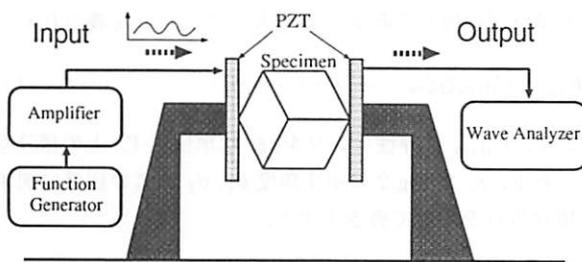


Fig.1 Schematic of resonant ultrasound spectroscopy method

ただし, Γ は有限領域 Ω の境界を表し, t_j は変位 u_j に対応する表面力, T_{ij} は U_{ij} を表面力の定義に従って微分することにより得られる積分核である。なお、本研究では後節に示すように異方性弾性体の静的問題に対する基本解を石川ら⁽⁵⁾ に従い算出した。

さて、定常振動問題においては変位 u_j を

$$u_j = \bar{u}_j e^{i\omega t} \dots \dots \dots \quad (3)$$

と置くことができる。ここで i は虚数単位, ω は角周波数, t は時間である。式(3)を積分方程式(2)に代入し、さらに $b_j = 0$, また境界 Γ 上にて $t_j = 0$ なる境界条件を与えれば次式となる。

$$\begin{aligned} \bar{u}_i(p) + \int_{\Gamma} T_{ij}(p, Q) \bar{u}_j(Q) d\Gamma \\ = -\rho\omega^2 \int_{\Omega} U_{ij}(p, Q) \bar{u}_j(Q) d\Omega \dots \dots \dots \quad (4) \end{aligned}$$

ただし、 $\ddot{u}_j = -\omega^2 \bar{u}_j$ となることを考慮した。さらに領域 Ω 内の点 p を境界 Γ 上の点 P に移行すると以下の境界積分方程式を得る。

$$\begin{aligned} C_{ij}(P) \bar{u}_j(P) + \int_{\Gamma} T_{ij}(P, Q) \bar{u}_j(Q) d\Gamma \\ = -\rho\omega^2 \int_{\Omega} U_{ij}(P, Q) \bar{u}_j(Q) d\Omega \dots \dots \dots \quad (5) \end{aligned}$$

ただし C_{ij} は境界の性状により決まる位置定数であり、通常は剛体変位条件により自動的に決定される。

領域 Ω および境界 Γ を適当な要素を用いて離散化すれば、式(4)および式(5)は以下のマトリクス方程式に帰着する。

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & 0 \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u}^{\Gamma} \\ \mathbf{u}^{\Omega} \end{bmatrix} = \rho\omega^2 [\mathbf{B}] \begin{bmatrix} \mathbf{u}^{\Gamma} \\ \mathbf{u}^{\Omega} \end{bmatrix} \dots \dots \dots \quad (6)$$

ここで \mathbf{u}^{Γ} は境界上の変位を、 \mathbf{u}^{Ω} は領域内部の変位を表す。またマトリクス $\mathbf{A}_{11}, \mathbf{A}_{12}, \mathbf{A}_{21}, \mathbf{A}_{22}$ の具体形はそれぞれ以下のように表される。

$$\mathbf{A}_{11} = \begin{bmatrix} T_{11} + C_1 & T_{12} & \cdots & T_{1N} \\ T_{21} & T_{22} + C_2 & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ T_{N1} & \cdots & & T_{NN} + C_N \end{bmatrix} \dots \dots \dots \quad (7)$$

$$\mathbf{A}_{21} = \begin{bmatrix} T_{(N+1)1} & T_{(N+1)2} & \cdots & T_{(N+1)N} \\ T_{(N+2)1} & T_{(N+2)2} & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \\ T_{M1} & \cdots & & T_{MN} \end{bmatrix} \dots \dots \dots \quad (8)$$

$$\mathbf{A}_{22} = \begin{bmatrix} C_{N+1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \\ 0 & & C_M \end{bmatrix} \dots \dots \dots \quad (9)$$

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} U_{11} & \cdots & U_{1M} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ U_{M1} & \cdots & U_{MM} \end{bmatrix} \dots \dots \dots \quad (10)$$

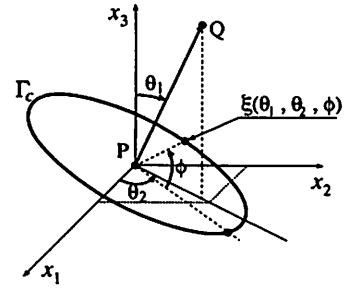


Fig.2 Definition of Γ_c , θ_1 and θ_2

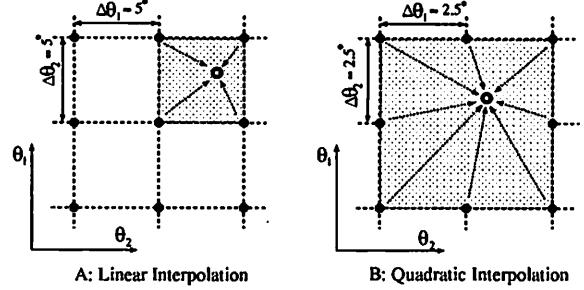


Fig.3 Interpolation of fundamental solution on $\theta_1-\theta_2$ plane

Table 1 Specification of analyzed model : Mild Steel

Young's Modulus	199.6	[GPa]
Density	7.898×10^3	[kg/m ³]
Poisson's Ratio	0.290	
Dimensions	$h = 4.994$	[mm]
	$w = 10.005$	[mm]
	$d = 13.950$	[mm]

ただし、 N は境界上の節点数、 M は領域内部と境界上の総節点数を表す。最終的に式(6)は以下の固有値問題の標準形:

$$\mathbf{Ax} = \lambda \mathbf{Bx} \dots \dots \dots \quad (11)$$

の形となり、標準的なライブラリ関数を用いることにより固有値および固有ベクトルを求めることができる。

2.2 異方性体における基本解の計算 ここでは、3次元異方性体における基本解の計算法の概略について述べる。点 P を原点とすれば、基本解 $U_{ij}(P, Q)$ は以下の形となる。

$$U_{ij}(P, Q) = \frac{1}{8\pi r^2} I_{ij} = \frac{1}{8\pi r^2} \int_{\Gamma_c} K_{ij}^{-1} d\phi \dots \dots \dots \quad (12)$$

ただし、 r は PQ 間の距離であり、閉曲線 Γ_c は Fig.2 で示されるような、 PQ ベクトルに垂直で、着力点 P を中心とする単位円の境界である。また K_{ij} は次式で定義される。

$$K_{ij} = C_{ilm} \xi_l \xi_m \dots \dots \dots \quad (13)$$

ここに、 C_{ilm} は弾性テンソル、 ξ_i は単位円 Γ_c 上の積分座標である。 ξ_i を Fig.2 に示す角度 θ_1, θ_2 および円弧に関する積分角 ϕ を用いて書き下すと、

$$\begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \theta_1 \cos \theta_2 & -\sin \theta_2 \\ \cos \theta_1 \sin \theta_2 & \cos \theta_2 \\ -\sin \theta_1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{bmatrix} \dots \dots \dots \quad (14)$$

Table 2 Resonant frequencies of steel block estimated by BEM analysis [Hz]

Mode	BEM : 81Nodes 24 Boundary Elements 8 Volume Elements				BEM : 208Nodes 54 Boundary Elements 27 Volume Elements				BEM : 425 Nodes 96 Boundary Elements 64 Volume Elements			
	A	B	C	D	A	B	C	D	A	B	C	D
1	81.97	81.97	92.93	81.97	81.07	81.07	82.29	81.07	80.85	80.85	82.12	80.85
2	109.27	109.27	110.90	109.28	100.58	100.58	102.22	100.58	99.10	99.10	100.79	99.11
3	143.25	143.25	143.94	143.25	137.25	137.25	137.95	137.25	136.10	136.10	136.82	136.10
4	170.24	170.24	170.15	170.24	164.44	164.44	165.51	164.44	161.14	161.14	162.39	161.14
5	177.10	177.10	177.00	177.10	168.62	168.62	168.59	168.62	167.76	167.76	167.75	167.76
6	182.99	182.99	183.73	182.99	171.63	171.63	172.57	171.63	169.83	169.83	170.79	169.83
7	187.99	187.99	189.11	187.99	174.93	174.93	174.82	174.93	174.37	174.37	174.26	174.37
8	199.24	199.24	199.55	199.24	191.98	191.98	193.02	191.99	187.83	187.83	188.99	187.83
9	225.40	225.40	226.13	225.39	220.94	220.94	221.55	220.93	212.85	212.85	213.86	212.85
10	234.71	234.71	235.84	234.70	222.04	222.04	223.10	222.04	220.05	220.05	220.62	220.04

A : by Kelvin's fundamental solution
 B : by anisotropic fundamental solution eq.(12)
 C : by anisotropic fundamental solution using linear interpolation
 D : by anisotropic fundamental solution using quadratic interpolation

Table 3 Resonant frequencies estimated by FEM, Ritz Method, and experimental values⁽⁴⁾ [Hz]

Mode	Experiment	Ritz Method $8 \times 8 \times 8$ Polynomials	FEM : 270 Nodes $4 \times 5 \times 8$ Elements
1	80.93	80.62	81.81
2	98.06	98.25	102.15
3	134.53	135.42	138.55
4	158.50	158.94	164.12
5	165.83	167.22	170.47
6	168.71	168.48	174.09
7	173.42	174.08	175.62
8	-	184.88	192.68
9	209.20	208.47	220.61
10	221.18	219.16	223.41

よって着力点 P と観測点 Q が決まれば、角度 θ_1, θ_2 が定まるから、式(12)を角度 ϕ に関して積分することができ、基本解を求めることができる。ただし、等方性体の場合などと異なり、一つの積分点に関する基本解の計算毎に、式(12)の周積分を実行しなければならない。

本論文ではこの問題を避けるため、石川ら⁽⁵⁾に従って θ_1 と θ_2 について適当な増分を設定して代表値 $I_{ij}(\theta_1^l, \theta_2^m)$ をあらかじめ求めておき、実際の計算では計算点近傍の値を用いて内挿近似する方法を用いた。なお、今回の解析では Fig.3 に示すように θ_1, θ_2 の各々について 5° 間隔で関数値を求めて線形補間を行う場合と、 2.5° 間隔で求めて 2 次補間を行う場合の二通りについて比較検討した。

3. 数 値 実 験

はじめに等方性のモデルに関する基本的例題について数値実験を行った。解析対象は Table 1 に示されるような直方体形状の軟鋼である。解析においては、境界を 8 節点 2 次適合要素、体積要素の内部セルには 20 点 2 次適合要素を用いた。

まず境界要素法による本解析の結果を Table 2 に示す。解析は要素分割数の異なる 3 通りのモデルについてそれぞれ 4 通り実施し、A は基本解に等方性の Kelvin 解を用いた

Table 4 Dimension of Si specimens (length = [mm])

Silicon 1	$3.037 \times 3.664 \times 3.738$
Silicon 2	$3.040 \times 3.628 \times 3.635$
Silicon 3	$5.141 \times 5.632 \times 6.137$

Table 5 Elastic constants of Si single crystal

C_{11}	165[GPa]
C_{12}	64[GPa]
C_{44}	79.2[GPa]

場合の結果、B は異方性体に対する基本解(12)を用い、計算において式(12)の周積分を実行した場合の結果である。なお、本計算例では式(12)の周積分に際し、を 90° 每に 20 点の Gauss 公式を適用した。また C, D は基本解の離散値をあらかじめ求めておき、多項式による補間を行った場合であり、C は線形補間の場合、D は 2 次補間の場合である。Table 2 に示されるように、等方性の基本解を用いた場合(A)と異方性の基本解を用いた場合(B)の結果はほぼ等しい。また、基本解を 2 次補間により求めた場合の結果 D も A, B と概ね一致していることが確かめられる。

なお本論文の計算に用いた 2 次補間を適用して基本解の計算を行う方法(D)によれば、全ての基本解を周積分により計算する方法(B)に比較して、20 倍程度数値積分に要する時間を短縮することができた。よって、数値積分を高速化するうえでは、基本解に含まれる θ_1, θ_2 に適当な増分を設定してあらかじめ計算を行った上で、それらの代表値を用いた 2 次補間を適用する方法が有効であるといえる。

次に、Table 3 にこのモデルに関する共振周波数の実測値(Experiment)、Ritz 法による解析結果、FEM による解析結果の文献値⁽⁴⁾を示しておく。Ritz 法は x_1, x_2, x_3 の各軸方向に対してそれぞれ 8 次の試行関数を用いた場合の結果であり、FEM は $4 \times 5 \times 8 = 160$ の線形 8 節点要素(270 節点)による解析結果である。離散化要素等が異なるため、直接的な比較は難しいものの、BEM による本解析結果を FEM の結果と比較すれば、208 節点による BEM 解は 270

Table 6 Resonant frequencies of Si single crystal by BEM analysis and RUS test [Hz]

Mode	Silicon 1		Silicon 2		Silicon 3	
	RUS	BEM	RUS	BEM	RUS	BEM
1	676.10	667.47	694.75	685.30	429.60	424.66
2	765.10	755.73	785.10	775.00	480.90	477.01
3	841.60	831.57	847.90	855.18	502.35	497.26
4	847.00	853.20	866.30	857.27	514.20	514.22
5	883.05	857.66	885.45	857.80	558.25	551.12
6	897.90	888.64	915.20	906.02	563.00	554.30
7	927.25	915.35	950.85	937.23	592.30	586.73
8	956.75	947.85	970.20	962.23	600.40	594.07
9	991.65	964.28	993.35	982.19	610.30	605.85
10	991.65	991.76	1001.2	1000.9	610.90	611.75
11	1031.9	1027.6	1047.6	1032.9	632.55	625.75
12	1036.3	1017.8	1052.3	1033.0	642.55	631.61
13	1109.0	1099.5	1123.4	1114.1	670.35	663.59
14	1115.3	1103.9	1125.7	1114.4	686.85	680.67
15	1150.5	1136.6	1189.6	1174.2	689.90	682.95

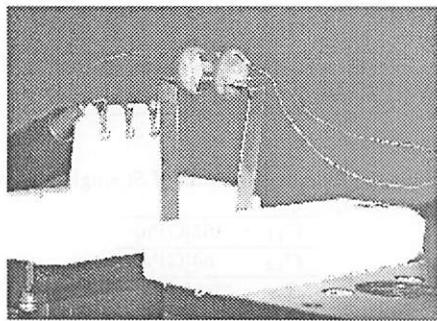


Fig.4 A picture of RUS test equipment

節点のFEM解と比較しても良好な精度の解を得ていると判断できる。

4. Si 単結晶による実験結果と考察

次に、立方晶の結晶構造を有するSi単結晶に関してRUSによる共振周波数の測定を行い、本解析プログラムによる計算結果との比較を行った。試料はTable 4に示される3種類の直方体形状の単結晶であり、結晶方位を直方体の面に合わせて切削した。単結晶Siの弾性定数はTable 5に示されるとおりである。BEM解析に際しては、各片を6等分し、領域要素数216、境界要素数216とした。またRUS法の実験装置をFig.4に示す。スペクトラムアナライザには、TakedaRiken TR4171を用い、プリアンプHewlett Pakard 8447Dを介してPZT圧電振動子を駆動している。

Table 6に3つの試料におけるRUSの測定結果とBEMによる解析結果を併せて示す。表には15次までの値を示したが、実際には40次の範囲まで測定結果と解析結果は±2%の範囲で一致した。なお、3つの試料ともに誤差が大きくなっているモードが等しい傾向にあることから、直方体試料を切り出した際の結晶方位のずれが少なからず誤差を及ぼしているものと推察される。また、今回用いた試料はアニールを行っていないため、残留応力の影響も無視できない可能性も示唆される。これらの点については今後さらに検討を進める必要があるものと考えられる。

5. 結論

本研究では共鳴超音波スペクトロスコピー法(RUS)における共振周波数計算および弾性定数の同定に対し、境界要素法を適用することを目的として基礎的な検討を行った。異方性体に対する静的な基本解を用いた領域-境界積分法に基づく固有振動数解析プログラムを作成し、Ritz法およびFEMとの精度比較を行った。また立方晶の結晶構造を有するSi単結晶を用いたRUS実験を行い、測定された共振周波数と計算結果との比較を通して本解析法の妥当性を確認した。

共振周波数解析に関する今回の結果を見る限り、境界要素法によるアプローチは他の数値解法と比較して明らかな優位性を示すまでには至っていない。今後はさらに精度を改善するための改良を施すとともに、弾性定数が未知の电解質材料等に本手法を適用して弾性定数の探索に関する逆解析への適用を図る予定である。

参考文献

- (1) Ohno, I., Free Vibration of a Rectangular Parallelepiped Crystal and Its Application to Determination of Elastic Constants of Orthorhombic Crystals, *J. Phys. Earth*, Vol.24, (1976), pp.355-379.
- (2) Migliori, A., Sarrao, J. L., Visscher, W. M., Bell, T. M., Lei, M., Fisk, Z. and Leisure, R. G., Resonant Ultrasound Spectroscopy Techniques for Measurement of the Elastic Moduli of Solids, *Physica B*, Vol.183, (1993), pp.1-24.
- (3) Inohara, M. and Suzuki, T., Measurement of Elastic Moduli by Rectangular Parallelepiped Resonance Method II, *Jpn. J. Appl. Phys.*, Vol.32, (1993), pp.2238-2242.
- (4) Heyliger, P. and Ledbetter, H., Detection of Surface and Subsurface Flaws in Homogeneous and Composite Solids by Resonant Ultrasound, *J. Nondestructive Evaluation*, Vol.17, No.2, (1998), pp.79-87.
- (5) 石川, 高木, 3次元異方性体の境界要素法による弾性解析, 日本機械学会論文集(A編), Vol.55, No.515, (1989), pp.1554-1559.