

非晶性ポリマに対する
結晶塑性論的分子鎖塑性モデルおよび
大変形 FEM シミュレーション

2007 年度

灘 裕統

目 次

第 1 章	緒 言	1
1.1	本研究の背景	2
1.1.1	ポリマの工学的実用性	2
1.1.2	ポリマの分類と微視構造	2
1.1.3	ポリマの大変形特性	5
1.2	ポリマの材料モデルに関する従来の研究と問題点	8
1.2.1	巨視的塑性論	8
1.2.2	クレイズ進展に基づく破断予測モデル	9
1.2.3	分子鎖網目理論	9
1.2.4	微視的情報に基づく降伏理論および非線形粘弾性理論	10
1.2.5	結晶塑性論的分子鎖塑性モデルの概念	12
1.3	本研究の目的	12
1.4	本論文の構成	13
1.5	本論文で用いる記号	14
第 2 章	分子鎖すべり系の概念	29
2.1	ポリマの塑性変形の素過程	30
2.2	8 鎖モデルと分子鎖すべり系の概念	31
第 3 章	運 動 学	35
3.1	変形こう配の分解	36
3.2	ひずみの弾・非弾性分解	38
3.2.1	ひずみの定義	38
3.2.2	弾・非弾性ひずみの各配置への変換則	38
3.2.3	微小弾性変形の仮定	39
3.3	ひずみ速度の弾・非弾性分解	39
3.4	変形速度の弾・非弾性分解	40
3.4.1	速度こう配の弾・非弾性分解	40
3.4.2	各配置における変形速度	41
3.4.3	ひずみ速度と変形速度	41
3.4.4	変形速度と変形尺度	42
3.5	非弾性変形速度および非弾性スピンの導出	43
3.5.1	非弾性速度こう配の配置変換則	43
3.5.2	非弾性変形速度および非弾性スピンの運動学的関係式	45

3.6	分子鎖基底の発展式	46
3.7	分子鎖基底ベクトルの更新	49
第 4 章	内力の定義と釣合い方程式	51
4.1	内力の定義	52
4.2	連続の式	53
4.3	力学的釣合い方程式	54
4.4	エネルギー方程式	55
4.5	エントロピー不等式	55
4.6	Updated Lagrange 形式の仮想仕事率の原理の定式化	56
第 5 章	構成式の導出と硬化則の引数	57
5.1	Clausius-Duhem の不等式	58
5.2	保存部分の熱力学的制限	59
5.3	散逸部分の熱力学的制限	60
5.4	速度形等方性弾性構成式	61
5.5	速度形異方性弾性構成式	63
5.6	硬化則の引数の検討	65
5.7	弾粘塑性構成式	66
5.8	結晶塑性論に基づく応力速度の導出	67
5.9	多絡み点モデルへの拡張	68
5.9.1	拡張 Taylor モデル	68
5.9.2	配向強度・配向方向パラメータ	69
5.10	異方性変数テンソルの定義	71
第 6 章	自由体積変化に基づく非弾性応答則	73
6.1	自由体積変化に基づく非弾性変形モデル	74
6.2	自由体積と分子鎖のキンク回転との関係	76
6.3	非弾性応答則の定式化	76
6.4	非弾性応答則における積分計算	81
6.5	速度形構成式の時間積分 (接線係数法)	82
6.6	自由体積率の導出	85
第 7 章	大変形 FEM 解析	87
7.1	仮想仕事率の原理の離散化	88
7.2	解析の流れ	91
7.3	解析条件および材料定数	91
7.4	FEM 解析結果および検討	93
7.4.1	単絡み点モデルの解析結果	93
7.4.2	多絡み点モデルの解析結果	103
7.4.3	弾性異方性を導入した解析結果	112
第 8 章	結 言	115

8.1	本論文の結言	116
8.2	今後の課題と展開	116
8.2.1	熱伝導現象	117
8.2.2	静水圧応力の効果	117
8.2.3	除荷時の粘弾性応答	117
8.2.4	弾性の変形誘起異方性に関する実験的検証	117
8.2.5	非晶性ポリマにおける寸法効果	117
8.2.6	結晶性ポリマへの応用	118
	謝 辞	119
	参考文献	121
	定期刊行誌掲載論文および口頭発表論文	127
	定期刊行誌掲載論文(主論文に関連する原著論文)	127
	国際会議発表	127
	国内学会発表	127
補足 A	第 1 章の補足	129
A.1	成形性	129
A.2	透明性	129
A.3	電気絶縁性	129
A.4	吸音性	129
A.5	エンジニアリングプラスチック	130
A.6	結晶性ポリマと非晶性ポリマ	130
A.7	ポリマアロイ	130
A.8	ポリマブレンド	130
A.9	ポリマコンポジット	131
A.10	熱可塑性エラストマ	131
A.11	再結晶温度	131
A.12	リュウダース帯	131
A.13	応力緩和とクリープ	131
A.14	結晶塑性論	133
補足 B	第 2 章の補足	135
B.1	Eyling の反応速度論	135
B.2	塑性せん断ひずみ速度	136
補足 C	第 3 章の補足	139
C.1	Mandel-Kratochvil 速度の導出	139
C.2	速度こう配の配置変換則	139
C.2.1	速度こう配の定義	139
C.2.2	中間配置における速度こう配	140
C.2.3	各配置における速度こう配の弾・非弾性分解	140

C.2.4	各配置における速度こう配の対称・反対称分解	142
C.3	Cotter-Rivlin 速度の導出	143
C.4	分子鎖基底の配置変換則	143
C.5	従来の体積変化を考慮した結晶塑性論における問題点	146
C.6	分子鎖基底の更新における問題点	148
C.7	式 (3.94) の導出	148
補足 D	第 4 章の補足	151
D.1	内力のなす仮想仕事率に関する変形	151
D.2	式 (4.13) の導出	152
D.3	式 (4.24) の導出	152
D.4	式 (4.27) の導出	153
D.5	Jacobian の物質時間微分	154
D.6	式 (4.30) の導出	154
D.7	Kirchhoff 応力の Jaumann 速度に対する仮定	155
補足 E	第 5 章の補足	157
E.1	弾性構成式における応力速度と弾性変形速度の逆変換	157
E.2	等方性弾性係数の成分	158
E.3	異方性係数テンソル	158
E.4	4 階のテンソルの Mandel-Kratochvil 速度の導出	159
E.5	分子鎖網目理論における背応力の構成式	160
E.5.1	背応力の構成式	160
E.5.2	背応力に対する分解せん断応力	161
E.5.3	非アフィンモデルと絡み点数変化の関係式	162
E.5.4	逆 Langevin 関数の近似計算	164
E.6	異方性変数テンソルを用いた配向強度パラメータの定義	164
補足 F	第 6 章の補足	167
F.1	非弾性応答則における内部変数の検討	167
F.2	Argon による硬化則への接線係数法の適用	167
F.3	分解せん断応力速度の導出	169
F.4	接線係数法を適用した弾性係数テンソルの非対称性	170
補足 G	第 7 章の補足	171
G.1	連立 1 次方程式の解法	171
G.2	要素形状および要素数の選定根拠	171
G.3	分子鎖配向による弾性率の変化に関する実験結果との比較	173

第 1 章

緒 言

1.1 本研究の背景

1.1.1 ポリマの工学的実用性

ポリマは、軽量でかつ、成形性 [補足 A.1]，透明性 [補足 A.2]，電気絶縁性 [補足 A.3]，吸音性 [補足 A.4] などに富み，石油を原料として安価に製造することができるという他材料にない有用な性質をもつため，日常生活に不可欠な材料として多く用いられている．近年では，より過酷な力学的条件下でも耐えうるエンジニアリングプラスチック⁽¹⁾⁽²⁾[補足 A.5] と呼ばれる新材料が開発されており，金属に替わる構造材料として使用されることが多くなっている．特に乗用車や航空機において，軽量なポリマを内装材として使用することによる燃費の向上などに多大な期待が寄せられている．

このような大変形下におけるポリマの使用に対する需要の増加に伴い，CAE においてポリマの大変形挙動が有限要素法 (FEM) などによって解析されるようになってきている．例として，図 1.1 [提供: 日産自動車 (株)] に強化ポリプロピレン (FR-PP) で作製された乗用車のドアトリムとダミーの側面衝突シミュレーション用解析モデルを示す．このようなシミュレーションの計算精度を高めるためには，ポリマの大変形挙動をより正確に再現できる構成モデルを構築することが重要である．

1.1.2 ポリマの分類と微視構造

多くの化合物の分子量が 500 以下であるのに対し，分子量が 10 000 以上の分子を高分子または巨大分子と呼び，その化合物を高分子化合物という．高分子化合物は，その組成や分子の構造により有機高分子化合物および無機高分子化合物，あるいは天然高分子化合物および合成高分子化合物に分類される．天然高分子化合物の分子は，小さな構成単位が繰り返し多数結合した構造をしており，合成高分子化合物は，1 種類またはそれ以上の種類の小さな分子を多数結合させて作られている．この小さな分子を単量体またはモノマという．ポリマとは，モノマが次々に結合する反応である重合により生成する高分子のことであり，重合体とも呼ばれる．

ポリマは熱可塑性ポリマ，熱硬化性ポリマおよびエラストマに分類される．熱可塑性ポリマは，線状の分子

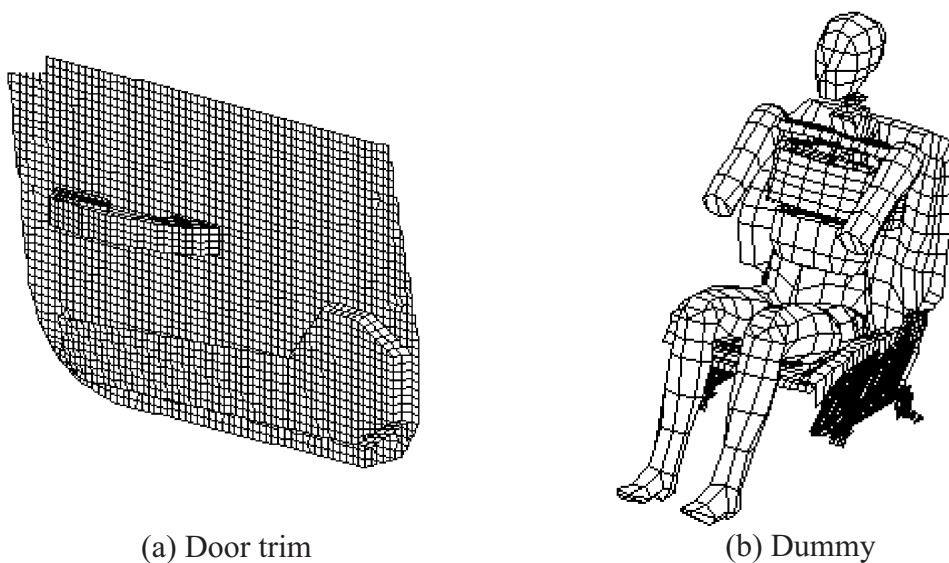


Fig. 1.1 Finite element meshes for side impact simulation

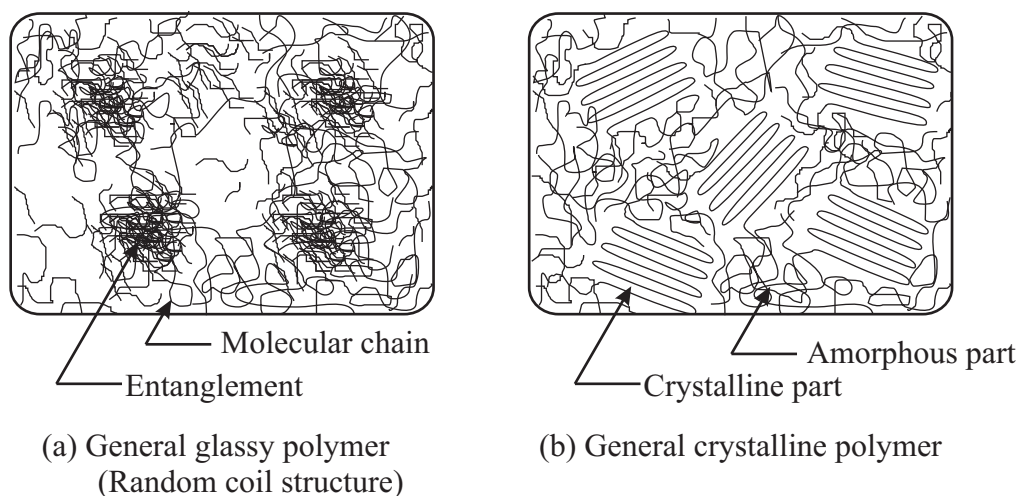


Fig. 1.2 Structure of polymers

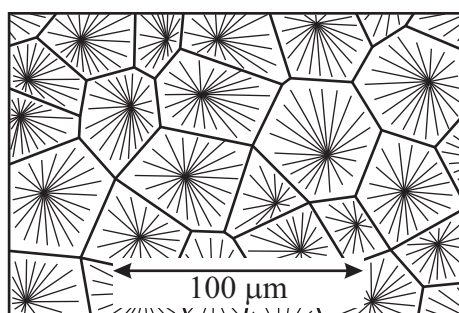


Fig. 1.3 Spherulite structure of PP

により構成されているため、ガラス転移温度以上に保つと軟らかくなって延性を示すようになり、いろいろな形に成形できる。また、逆にガラス転移温度以下では硬く、脆性的になる。このように可逆的な変化を生じるのは、温度変化によって分子構造が化学的な変化を起こさず、物理的にのみ変化するためである⁽¹⁾。また、適当な溶媒に溶かすことによってフィルム状にしたり、引き伸ばすことによって繊維状に加工することもできる。近年開発されているエンジニアリングプラスチックの多くは熱可塑性ポリマであり⁽²⁾、本研究ではこの熱可塑性ポリマのみを対象とする。

熱可塑性ポリマは結晶化を生じるものとその性質のないものにさらに分類されており、前者は結晶性ポリマ、後者は非晶性ポリマと呼ばれている [補足 A.6]。非晶性ポリマの内部は、図 1.2(a) に示すように、高分子鎖が絡み合いながら Van del Waals 力で不規則に凝集している、いわゆるランダムコイル構造をなしていると考えられ、ポリスチレン (PS)、ポリカーボネイト (PC)、ポリメタクリル酸メチル (PMMA) などはその代表的なものであり、各種シート、フィルム、乗用車のランプ部分や光学材料などに多く用いられる。一方、結晶性ポリマの結晶構造は 100% に近い結晶組織ではなく、一部は非晶の状態である場合が多く⁽¹⁾、図 1.2(b) に示すように結晶質部分 (ラメラ) と非晶質部分 (フィブリル) とが混在した構造をもつ。結晶質・非晶質部分からなる微視構造は、互いに交互に積層された構造となっており、さらにラメラが回転を伴いながら放射状に成長することによって、球晶と呼ばれる構造を形成する。溶融状態からの球晶の成長過程において、球晶同士がぶつかり合うことによって直線状の境界ができ、図 1.3 に示すような組織が形成される⁽³⁾。このような構造をもつ代表的な結晶性ポリマとしてはポリエチレン (PE)、ポリプロピレン (PP)、ポリアミド (PA) などを挙げる事が

できる．この結晶性ポリマやそれをマトリックスとする複合材料（ポリマアロイ [補足 A.7]，ポリマブレンド [補足 A.8]，ポリマコンポジット [補足 A.9]）は，乗用車や航空機の内装など構造材料として，過酷な力学的環境下においても使用されるようになってきている．また，ポリマの結晶化の割合については，成形過程，特に冷却条件によって大きく異なっており，高分子溶液を融点から急激に冷却すればより非晶質に近いポリマが，逆に融点から緩やかに冷却すればより結晶化度の高いポリマがそれぞれ形成される．そしてこれらの材料は，各々の相の性質に複雑な形で依存した複合材料としての性質を示す．このような材料についての研究に対する工業的な要請は強いが，複合材料として取り扱うために必要な各相の特性については未知な部分が多いのが現状であり，本研究においては非晶性ポリマの力学的応答を対象とする．なお，結晶性ポリマのガラス転移温度は室温以下，非晶性ポリマでは室温以上であることが多く，一般に室温においては結晶性ポリマは延性的，非晶性ポリマは脆性的である．

一方，熱硬化性ポリマは，立体的網目状構造をもつため，加熱すると硬化する．熱硬化性ポリマは縮合重合によって作られるものが多く，合成過程の加熱処理で縮合重合がさらに進み，立体的網目状構造が発達して硬くなる．すなわち，熱硬化性ポリマではいったん網状に高分子構造が結合されると，再び過熱しても軟らかくならず，非可逆変化を示す．これは分子構造変化（化学変化）を生じたためである⁽¹⁾．なお，硬化剤を用いたり，大量の充てん剤や補強剤を加えて硬化させることが多い．熱硬化性ポリマとしては，フェノール樹脂，アミノ樹脂，エポキシ樹脂などが挙げられ，一般に硬くて耐熱性が大きいという性質をもつため，食器，電気器具，家具，板などの構造材，雑貨などに広く利用されている．

ポリマの分子鎖の立体構造においては，炭素原子の周りの置換基は正四面体構造をとるように配置する．ポリマを構成する炭素結合間は 109.5° であり，基本骨格を構成する炭素原子は自由に回転することができる．特定の方法を用いれば，重合時に図 1.4 のように炭素鎖のある方向のみ置換基をそろえることができるが，そのような配列をタクチシティーと呼び，ランダムに置換基が配列したものをアタクチック [同図 (a)]，同一方

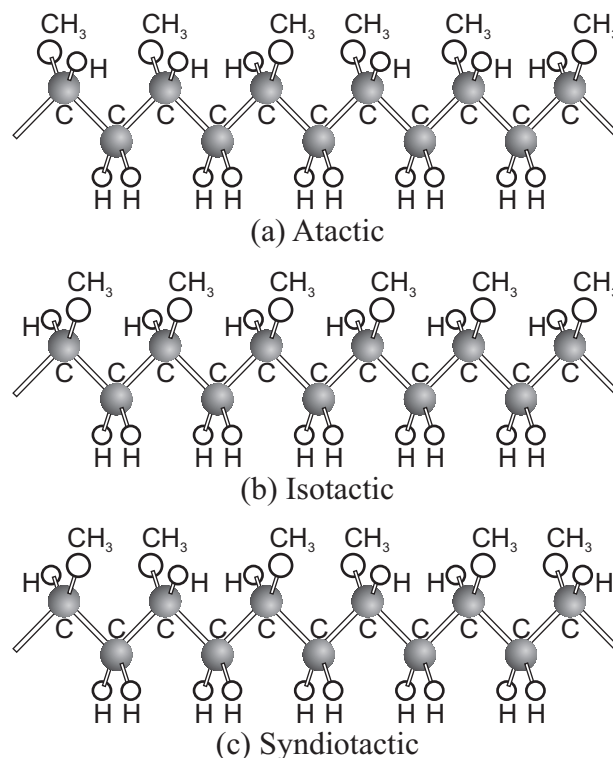


Fig. 1.4 Structural isomerism of PP

向に規則正しく並んだ場合をアイソタクチック [同図 (b)]，交互に並んだものをシンジオタクチック [同図 (c)] と呼ぶ。タクチシティーはポリマの結晶化度に影響する。例えば、アイソタクチックな成分の多いポリプロピレンは結晶化度が高く、高剛性、高強度で硬い⁽⁴⁾。

また、エラストマ(ゴム弾性体)は、生ゴムに硫黄を5~8%混ぜ合わせて練り(混練)、さまざまな形に塑性変形をさせた後(成形)、約140°Cに加熱し、ゴム分子同士を化学的に硫黄原子によって結合(架橋または加硫)したものである。通常、生ゴムは分子量100,000以上の糸状高重合体であり、室温において分子運動が活発であり、また分子同士が互いに絡み合っている。生ゴムは引張られると絡み合いがほぐれ、分子同士がすべりながら伸び、長い時間伸ばした後で除荷すると伸びたままで元に戻らなくなる(塑性変形)。生ゴムのこの性質を利用して種々の形状のゴム製品が作られている。しかし、除荷しても元の形に回復できないため、成形加工した製品をそのままゴム弾性体として利用することはできない。そこで、上述のように成形加工した後の生ゴムに加硫を行い、ゴム分子同士を架橋点で結合することによって、ゴム分子のすべりが抑制され、除荷されるとほとんど瞬間的に元の形状に戻るようになる⁽⁵⁾。これが加硫ゴム、すなわちエラストマ(ゴム弾性体)である。一方、エラストマと同様なランダムコイル構造をもつ非晶質の熱可塑性ポリマは、大きなひずみを与えられると塑性変形を起こし、エラストマのような超弾性を示すことはない。このような違いが現れるのは上述のような分子鎖同士の架橋の有無という微視的な構造における決定的な違いがあるためである。エラストマの弾性は、本来規則的な構造をもたない分子鎖の配列が、外部からの力により規則的になり、これが元の不規則な配列に戻ろうとするときの力によるものである。熱力学的には応力によるエントロピーの低下が元に戻ろうとする力による弾性であるから、これをエントロピー弾性と呼ぶ。エラストマの例としては、ポリブタジエン、天然ゴム(ポリイソプレン)、ポリウレタンゴムなどが挙げられる[補足A.10]。

1.1.3 ポリマの大変形特性

図1.5に代表的な非晶性ポリマとしてPMMAの単軸引張試験より得られた公称応力-公称ひずみ線図⁽⁶⁾を示し、図1.6に一般的な非晶性ポリマのくびれ部位における真応力-真ひずみ関係とそれに対応する変形状態の模式図を示す。通常、ガラス転移温度以上における非晶性ポリマの力学的特性は、図1.6で表される真応力-

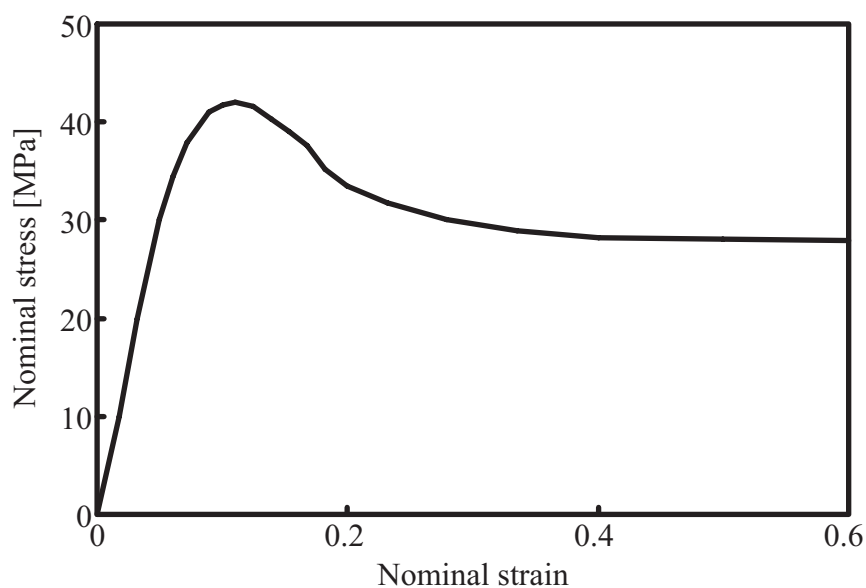


Fig. 1.5 Tensile nominal stress-strain data on PMMA at 338K⁽⁶⁾

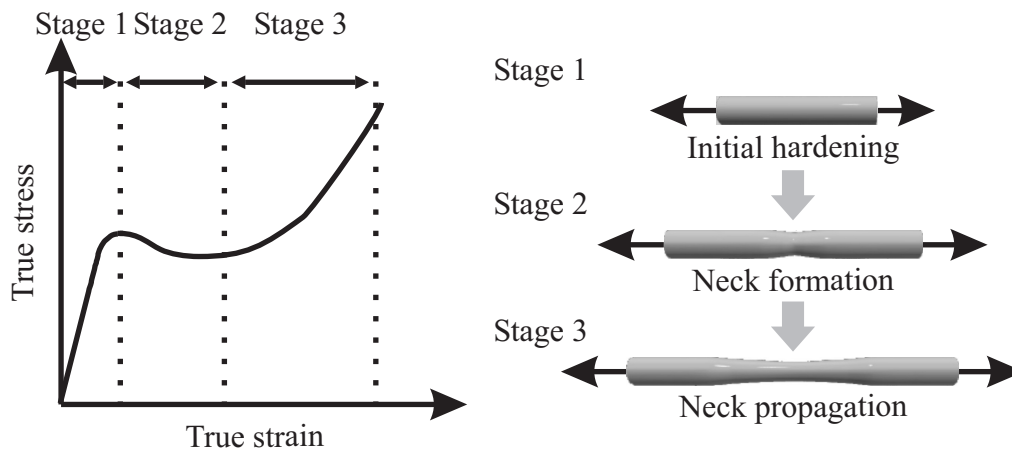


Fig. 1.6 Stress-strain behavior of glassy polymer

真ひずみ曲線を3つの段階に分けて説明される。まずステージ1では、降伏前において非線形粘弾性応答が現れ、応力-ひずみ線図はカーブを描きながら初期降伏点へと到達する。またステージ2では、分子鎖の絡み合いがほぐれることによりくびれの形成および発達が起こり、それによって変形が局所化し、ひずみ軟化現象が現れる。さらにステージ3では、くびれ部分で分子鎖が引張方向へ配向し、それが未配向部位へ伝ばすることによってくびれの伝ば現象が生じるとともに、再硬化によってくびれ領域の応力値は増加する。

その他のポリマの力学的特性を金属と比較しつつ以下に詳述する。

(a) ひずみ速度依存性

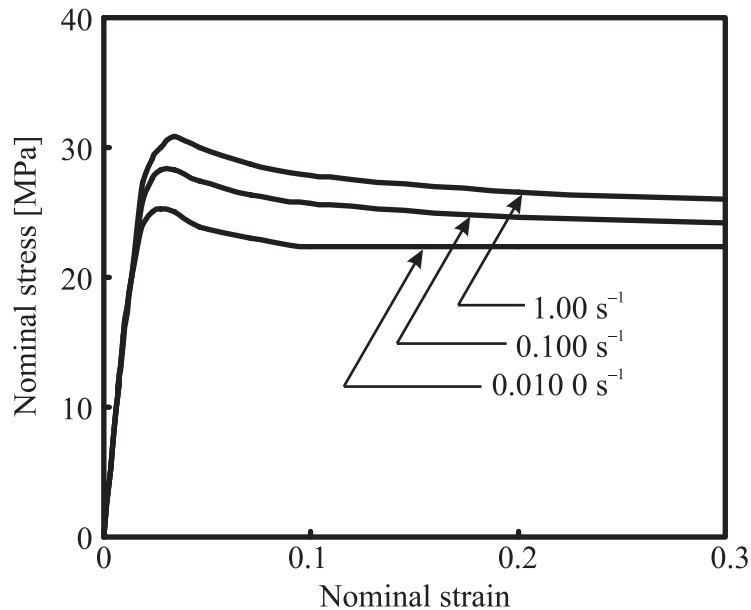
ポリマは室温においても、ひずみ速度の増加によって公称応力-公称ひずみ曲線が上昇する。すなわち、ひずみ速度に対して正の硬化特性をもつ。このような力学的特性をひずみ速度依存性あるいは粘塑性と呼ぶ。ひずみ速度依存性は、金属ではひずみ速度 $1s^{-1}$ 程度以上⁽⁷⁾ の高速変形時もしくは再結晶温度 [補足 A.11] 以上のいわゆる熱間加工の温度範囲においてのみ現れる性質であるが、ポリマでは低速変形時あるいは常温でも顕著に現れる性質である。図 1.7 は、エチレンプロピレンラバー (EPR) を 5% 内添したブロック PP を用いた単軸引張試験から得られた公称応力-公称ひずみ線図である⁽⁸⁾。

(b) くびれの形成と安定伝ば

小林・岡田⁽⁸⁾ の報告によれば PP などのポリマにおいて、初期降伏直後からくびれが発生する。そして、くびれは後続ひずみ硬化とともに幅方向への成長を弱め、徐々に引張方向に伝ばしていく。一方、金属においては、くびれが成長すると急激に破壊が生じる。

くびれはせん断帯を伴うといわれている。せん断帯とは、引張方向にある角度を保って板厚方向にひずみが集中した線状のくびれ帯のことであり、ひずみの局所化とも呼ばれる。せん断帯は高々板厚程度の幅の帯領域に入る板厚方向のくびれなので、薄板ではせん断帯に沿って破断がすぐに生じる。丸棒のくびれは拡散くびれに相当し、幾何学的な制約からせん断帯は表面には生じ得ない⁽⁹⁾。ただし、材料内部に生じるせん断帯がカップアンドコーン破壊の一因になっているといわれている。また、ポリマの引張りでは、くびれの安定伝ばに伴い、せん断帯は徐々に局所化の程度を弱めることが知られている。

なお、軟鋼の薄板引張りにおいて材料表面で観察されるリュウダース帯 [補足 A.12] は降伏時に現れるものであり、せん断帯とは区別されている。

Fig. 1.7 Strain rate dependence of PP⁽⁸⁾

(c) 変形誘起異方性

ポリマを延伸すると、分子鎖が引張方向へ配向するので、初期等方性をもつ材料でも異方性をもつようになり、縦弾性係数は引張方向に著しく向上する。この主な原因は、分子鎖方向には強い共有結合による力、分子鎖に垂直な方向には Van der Waals 力が働くためである。くびれの通過した部位を切り出した PC に対する引張試験結果⁽¹⁰⁾によれば、縦弾性係数が延伸後、約 30% 増加しているため、精度の高い構成式を定式化するためには分子鎖の配向による変形誘起弾性異方性を考慮する必要がある⁽¹¹⁾。

(d) 温度依存性

ポリマには金属より顕著な温度依存性があることがわかっている。すなわち、温度の上昇によって硬化特性が弱まり、延性が増す。図 1.8 は、3つの環境温度における PP の真応力-真ひずみ線図である [提供: 宇部興産(株)]。材料内の温度は、変形による内部発熱と材料外部との熱伝導によって支配されると考えられる。富田らは変形の局所化に及ぼす熱発生の影響を考慮し、多くの解析例⁽¹²⁾⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾⁽¹⁵⁾⁽¹⁶⁾⁽¹⁷⁾を示している。ただし、これらの研究はあくまで数値解析の予測であり、実験から得られたデータに基づいたものではない。それは、くびれ領域に顕著な内部発熱および周囲との熱伝導の影響を反映した硬化応答を実験から得ることは現実的に難しいからである。そこで、上述の解析的研究では、図 1.8 のような周囲の温度変化に対する応力-ひずみ関係が、材料内部の温度依存性硬化データとして代用されている。

また、PP では熔融状態から除冷すると結晶化するが、急冷すると結晶化しないことが報告されている。すなわち、相変態においては温度速度依存性もあることがわかっている。

(e) 損傷依存性および静水圧応力依存性

ポリマでは、引張り時、特にくびれの伝ば時にクレイズという小さな損傷が引張方向に垂直に数多く形成される⁽⁶⁾⁽¹⁸⁾⁽¹⁹⁾。クレイズは主に材料表面あるいはクラック先端に発生し、最大引張方向に対して垂直に成長する。ただし、クラック(亀裂)とは異なり、フィブリル(配向分子鎖の束)がひび割れの両面を連結して応力を支えている。したがって、発生したクレイズが試験片を完全に横切っても、試験片は破断せずになお十分な強

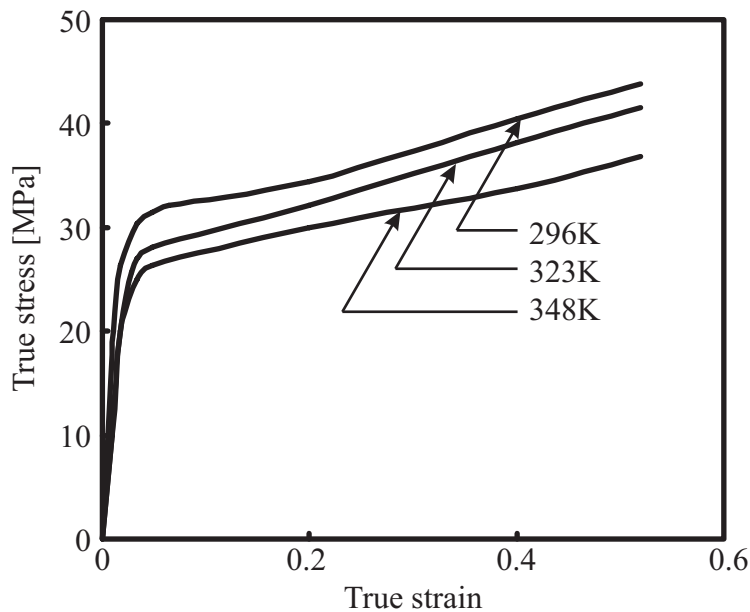


Fig. 1.8 Temperature dependence of PP

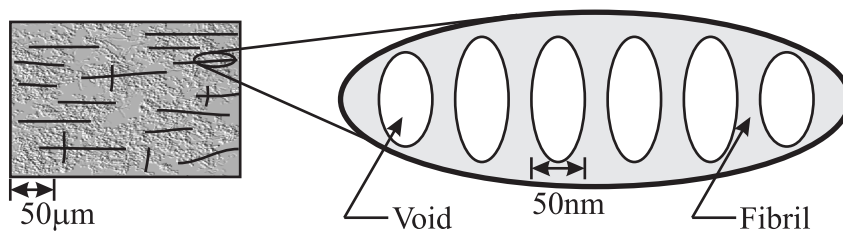


Fig. 1.9 Microscopic structure of craze

度を保つ．図 1.9 はクレイズの微視構造を模式的に示すものである．ポリマはフィブリルが破断するまで，ポイドあるいは分子鎖の希薄な領域である自由体積による体積変化を受ける．このようにポリマにおいては，塑性変形過程においても体積が変化するため，金属材料のように偏差応力のみでは塑性変形挙動をモデル化できず，クレイズあるいは自由体積による静水圧応力の効果も考慮する必要がある．ただし，材料の変形状態を進めずにクレイズや自由体積の様子を観察するのは困難である．また，クレイズ発生力の学的条件（クライテリオン）として，応力クライテリオン，ひずみクライテリオンあるいは静水圧応力クライテリオンなどが提案されているが，いずれも物理的根拠が不明である⁽¹⁸⁾⁽¹⁹⁾．現在まで，実験的観察による事実の乏しいまま数値解析的研究が先行しているのが現状である⁽⁶⁾．

1.2 ポリマの材料モデルに関する従来の研究と問題点

1.2.1 巨視的塑性論

前節で述べたポリマの力学的性質，特に塑性変形を伴う大変形特性を考慮したポリマの大変形挙動のモデリングおよびシミュレーションに関する研究は従来から盛んに行われている⁽²⁰⁾．降伏後のひずみ軟化および配向硬化に関しては，従来の巨視的塑性論における現象論的な応力-ひずみ関係⁽²¹⁾⁽²²⁾を用いることにより再現されており，ひずみ速度⁽²³⁾⁽²⁴⁾，非共軸性⁽²⁵⁾⁽²⁶⁾⁽²⁷⁾，熱発生および熱伝導など⁽¹⁵⁾⁽²⁸⁾⁽²⁹⁾がくびれの伝ば挙動

に及ぼす影響についても詳細に検討されている。また、巨視的なひずみから異方性テンソルを定義し、それをひずみエネルギー関数の引数に導入して弾性構成式を導出することで、変形に伴う弾性率の変化を予測している例⁽¹¹⁾もある。しかしながら、これらのモデルは全て古典的な塑性論に基づいており、分子鎖、クレイズ、自由体積など、ポリマ内部の微視構造の力学的挙動と巨視的な変形挙動とが互いに及ぼし合う影響については考慮されていない。

一方、近年では、材料科学で得られる情報を固体力学に取り込む形で非晶性ポリマの力学的特性を説明しようとするマルチスケールモデリングの試みが盛んに行われるようになってきている。ここで、マルチスケールモデリングとは異なるスケールの階層の相互作用から材料の変形挙動および微視的構造の変化を同時に表現する「多重階層橋渡し形」のモデリング手法である。非晶性ポリマには金属における Burgers ベクトルの大きさのような特性長が定義できないので、厳密な多重階層スケールを定義できないが、巨視的構造(固体力学の体系)と微視的構造(材料科学の体系)が相互作用するモデルという意味で、非晶性ポリマに対してもマルチスケールモデリングという呼び方をすることは可能である。そこで次項以降においては、主に材料科学の立場からポリマの力学的性質を説明した微視的理論について説明し、その問題点についても指摘していくことにする。

1.2.2 クレイズ進展に基づく破断予測モデル

ポリマの延性破壊は、金属とは異なり、くびれの伝ば後にくびれ進行端部で破断が生じるという特徴があり、破断部位は分子鎖配向領域と未配向領域の境界に位置する。ポリマの破壊機構を説明するには、塑性変形過程において発生するポリマ特有の損傷形態の1つであるクレイズの挙動を考慮する必要がある。降伏後の軟化段階においてくびれが発生すると、クレイズはひずみ局所化領域であるせん断帯に沿って多数発生する。その後、後続再硬化段階においてクレイズ集中領域はくびれとともに引張方向へと伝ばする。さらに荷重を増加させると、配向-未配向境界におけるクレイズは激しく成長し、応力がフィブリル強度⁽³⁰⁾を越えるとフィブリルが切断されてクラックとなり、それが進展した後、最終的に破断に至る。このような機構のために、破断部位はひずみ集中領域である試験片中央ではなく、くびれ進行端部になると考えられる。

小林ら⁽³¹⁾は、熱・力学的検討からクレイズの発生・成長を表現し得るクレイズ発展式を提案し、クレイズの影響を考慮した結晶性ポリマの破断予測モデルを構築している。

1.2.3 分子鎖網目理論

ひずみ軟化後の後続再硬化現象は、微視的には、ポリマを構成している高分子鎖が延伸方向へと配向して内部の分子鎖網目構造が変化する、いわゆる配向硬化が原因であるといわれている。これに対し、分子鎖の挙動に関する研究の歴史は古く、Kuhn-Grün⁽³²⁾の Langevin 関数を用いた1本の分子鎖の変形挙動のモデル化までさかのぼることができる。その後、分子鎖網目構造がゴム弾性応答を示すとするアフィンモデルを用いて3鎖⁽³³⁾⁽³⁴⁾、8鎖⁽³⁵⁾、連続鎖分布⁽³⁶⁾モデルなどの分子鎖網目理論⁽¹⁷⁾⁽³⁷⁾⁽³⁸⁾が提案されている。中でも Arruda-Boyce⁽³⁵⁾は、分子鎖網目構造が単位ブロックあたり絡み点を中心とする8本の分子鎖で構成されるとする8鎖モデルを提案し、分子鎖の配向に対する抵抗すなわち背応力を塑性構成式へ導入することでポリマの配向硬化を評価している。この方法に基づく非晶性ポリマの引張・圧縮変形に関する数値シミュレーションは、実験結果をよく再現することが知られている。

しかしながら、Arruda-Boyce のモデルでは、主ストレッチ方向が大きく回転する単純せん断問題において、大変形時に応力値を実験値よりも大きく評価してしまうことが Wu-Van der Giessen⁽³⁶⁾によって指摘されている。田中ら⁽¹⁶⁾、Tomita-Tanaka⁽³⁹⁾および Tomita ら⁽⁴⁰⁾は、その原因がアフィンモデルにおける分子鎖の絡み

点数を一定とする仮定にあると考え、分子鎖の絡み点数変化を許容する非アフィンモデル⁽⁴¹⁾⁽⁴²⁾を提案している。非アフィンモデルでは、絡み点の数が温度および局所的な変形状態に依存すると考えて絡み点数変化の関係式が導出されており、これを用いた絡み点数の減少が1本の分子鎖に含まれるセグメント数を増加させ、その結果限界ストレッチが増加し配向硬化の発生が抑制される。これによって、上述の単純せん断問題における応力の過大評価が改善されている。以上のようなアフィンモデルあるいは非アフィンモデルを用いてひずみ軟化後の再硬化現象を再現することができる。

以上のような分子鎖網目理論を用いたポリマに対するシミュレーション例は多く、田中ら⁽⁴³⁾はポリマブレンド内に介在するゴム粒子の大きさや体積含有率が変形挙動に及ぼす影響を調べている。また、せん断強度(流れ応力に相当)に正規分布を導入して非晶性ポリマ内部の分子鎖の不均一な分布を表現している例⁽⁴⁴⁾⁽⁴⁵⁾や、カーボンブラック充填ゴムの繰り返し変形によるヒステリシスを再現する有限要素均質化モデル⁽⁴⁶⁾など、さまざまなモデルが提案されている。さらに、結晶性ポリマに対して球晶構造の変形挙動をモデル化するため、結晶相には金属の結晶塑性論を適用し、非晶相には分子鎖網目理論を用いるという研究⁽⁴⁷⁾⁽⁴⁸⁾⁽⁴⁹⁾⁽⁵⁰⁾も行われている。

しかし、非晶性ポリマに対するいずれのモデルも J_2 -流れ理論や J_2 -変形理論⁽¹³⁾⁽⁵¹⁾に基づくモデルを塑性構成式として採用しているため、巨視的情報である延伸比を介して分子鎖の配向状態を間接的に表現しており、微視的な内部構造の情報から配向現象などを直接表現することはできない。特に J_2 -流れ理論に基づくモデルでは、せん断帯の形成・伝播を再現できないという問題もある。さらに、従来の等方均質体に対する塑性構成式を用いているため、共回転スピンの特定できないという問題もある。

1.2.4 微視的情報に基づく降伏理論および非線形粘弾性理論

非晶性ポリマの降伏現象を分子レベルでの微視的機構から説明した理論は複数挙げることができる⁽⁵²⁾。Bowden-Raha⁽⁵³⁾は、せん断変形により分子鎖が新しい配列状態になるとし、そのときに必要となる活性化エネルギーを金属結晶における転位ループの移動と同様に考えて転位論に基づく降伏の微視的機構を提案している。Robertson⁽⁵⁴⁾は、分子鎖の形態にはトランス状態とシス状態の2つのコンフォメーションが存在し、シス状態は運動の自由度も大きく、変形および温度によってこの割合が増加することは材料の粘性抵抗が減少することを意味するとしており、せん断応力を作用させるとこの2つの状態のエネルギー差が小さくなることでトランスからシスへの形態遷移が起こり、降伏が生じると考えている。一方、Argon⁽⁵⁵⁾は、金属結晶における転位運動との類比から、ポリマにおける塑性変形の素過程を分子鎖におけるキンク回転として捉えている。この中で、Bowden-Rahaによるモデルについては、結晶性ポリマのような特定の内部構造をもたない非晶性ポリマに対し、転位ループを考えることの物理的必然性を疑問視する向きが多い。Robertsonの理論は、降伏機構として分子レベルでの微視的機構を取り入れながら実験的に得られる降伏応力の温度およびひずみ速度依存性を定量的に解釈しようとする点で、評価されるものである。しかし、粘性抵抗が本来高分子溶液に対する粘度式であるWLF式⁽⁵⁶⁾を用いて評価されているため、このモデルの適用はガラス転移温度に近い温度での降伏挙動に対する範囲に限られてしまう。一方、Argonによって提案されたモデルは、低温域までの降伏応力の温度およびひずみ速度依存性を説明できるものとしてガラス状態の非晶性ポリマを対象としたシミュレーションによく用いられる。これらの理論を用いることにより降伏応力の温度およびひずみ速度依存性を再現することは可能であるが、非線形粘弾性応答および粘塑性応答を再現するには至っていない。

ガラス状非晶性ポリマの粘弾性挙動は、伸長を受けた際の分子間ポテンシャル変化あるいは共有結合の回転角変化により発現する弾性的抵抗と、凍結されていた高分子鎖の運動が再開して形態を変える際に、周囲との摩擦によって生じる粘性抵抗との釣合いで決まってくる⁽¹⁸⁾。このため弾性は変形と力の関係が時間に関係なく一義的に決まってしまうという純エネルギー論あるいは平衡論として取り扱われるのに対し、粘弾性は変形

と力の間に粘性に起因する遅れという時間因子が入り、速度論として取り扱われる。一般にポリマの非線形粘弾性応答は、応力緩和 [補足 A.13] の特性時間 (緩和時間) がひずみの増加に伴って減少する過程であるとされ⁽⁵⁷⁾、この過程はポリマの内部に存在する自由体積の変化と関連づけてモデル化されることが多い⁽⁵⁷⁾⁽⁵⁸⁾⁽⁵⁹⁾。ここで自由体積とは、分子鎖の周りに分配された微小な空隙のことであり、自由体積が大きいほど分子鎖の動きに対する周囲の分子鎖からの摩擦抵抗、言い換えれば粘性抵抗が小さくなると考えられている。例えば、Knauss-Emri⁽⁶⁰⁾ は、自由体積に関連した状態変数を用いてガラス状非晶性ポリマにおける非線形粘弾性応答をモデル化しており、自由体積は温度、時間および静水圧応力に依存するとされている。また Rendell ら⁽⁶¹⁾ は、緩和時間および応力依存項を用いて非線形応力緩和現象を物理的に表し、自由体積と等価な仮想温度の概念を用いて応力緩和に伴う内部構造の変化を表現している。しかし、これらいずれの理論も初期降伏現象および降伏後の粘塑性応答をモデル化しておらず、降伏前の非線形粘弾性応答から降伏後の粘塑性応答への遷移を統一的に扱えるような理論体系にはなっていない。

降伏直後からの真ひずみ軟化現象は、その詳細な力学的解釈は未だ不十分であるが、微視せん断帯など不均一変形に伴うポリマの巨視的な応答であると解釈されることが多い。例えば Boyce ら⁽³⁴⁾ は、その微視的メカニズムを次のように仮定している。すなわち、降伏直後からの塑性流れの拡大により分子鎖の局所的な解けなど分子鎖配置の再構成が生じ、分子間抵抗が減少することによって巨視的な真ひずみ軟化が生じるとしている。そしてせん断強度 (流れ応力に相当) の発展式を Argon の硬化則⁽⁵⁵⁾ に導入することにより真ひずみ軟化を現象論的發展式によって再現している。一方、Hasan ら⁽⁶²⁾ は、陽電子消滅寿命測定法 (PALS)⁽⁶³⁾ による実験から、非弾性変形に伴う材料内部の自由体積の増加が真ひずみ軟化の原因となっており、局所自由体積率の高い領域において局所せん断変形が生じると考えている。そして自由体積の数密度に関する発展式を導入し、微視的降伏機構として Argon モデルを採用することにより降伏後のひずみ軟化を表現している。しかし、粘弾性応答に伴う降伏前の非線形挙動を再現できないことが同時に指摘され、これは局所せん断変形に対する障壁となる活性化エネルギーの分布を考慮していないことが原因であるとされている。すなわち、非晶性ポリマの内部には局所せん断変形が可能な自由体積率の高い領域が散在しており、変形の初期においてはそのような高自由体積領域 (低活性化エネルギー領域) が急激に減少する。一方、せん断変形を生じた際に生じた弾性ひずみエネルギーはその周囲に貯蔵され、その領域の活性化エネルギーを増大させることにより変形に対する抵抗力となる。このようにして低自由体積領域、すなわち高活性化エネルギー領域でしか変形できなくなり、非線形粘弾性応答が発現する。さらに、変形しきった領域が十分大きくなると、材料内に弾性ひずみエネルギーを貯蔵することが困難となり、それ以上のエネルギーを蓄えるため新たな高自由体積領域が作り出されることになる。そして、この低活性化エネルギー領域では構造緩和によって分子鎖セグメントの回転など永久変形が生じるために、この領域の形成および増大が巨視的には降伏および降伏後のひずみ軟化挙動となって現れる。Hasan-Boyce⁽⁶⁴⁾ は、以上のような考えに基づき、微視的降伏機構を特定しない Eyring の速度論⁽⁶⁵⁾ における活性化エネルギーに対して、その確率密度関数を導入することにより局所せん断変形が可能な領域 (自由体積) の分布を表し、その集積として非弾性ひずみ速度を計算する方法を提案している。この Hasan-Boyce の応答則を用いてせん断応力-せん断ひずみ関係をプロットすれば、非晶性ポリマに対する非単調負荷状態での非線形粘弾性挙動および粘塑性挙動を高精度に再現できることが確認されており (図 1.10 参照)、さらには定応力下におけるクリープ挙動 [補足 A.13] まで表現できることが明らかになっている。この応答則を用いれば、降伏前の非線形粘弾性応答および降伏後のひずみ軟化を自由体積の分布あるいは活性化エネルギー分布を用いて統一的な理論で説明することが可能である。しかしながら、図 1.10 は有限要素法を用いてくびれの発生を伴うような不均一変形を解析した結果ではなく、この微視的情報に基づく非弾性応答則を用いてマルチスケール大変形 FEM 解析を行った研究例は未だ報告されていない。また、ひずみ軟化後の再硬化現象についても考慮されていない。

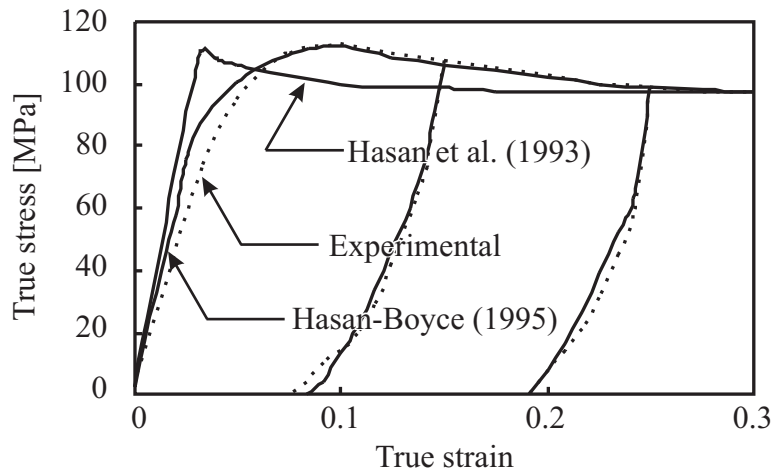


Fig. 1.10 Comparison between experimental data and model predictions for nonmonotonic deformation of PMMA at true strain rate -0.001 s^{-1} and temperature 300K ⁽⁶²⁾⁽⁶⁴⁾

1.2.5 結晶塑性論的分子鎖塑性モデルの概念

高松・志澤⁽⁶⁶⁾は、非晶性ポリマにおける塑性変形の素過程(分子鎖のキック回転)を金属結晶におけるすべりと類似した現象として捉え、「分子鎖すべり系」の概念を新たに提案し、本来ならば結晶格子をもたないポリマに対して、金属における結晶塑性論⁽⁶⁷⁾[補足 A.14]的なアプローチを試みている。また、Hasan-Boyce⁽⁶⁴⁾による非弾性応答則を硬化則として採用することを提案している。さらに、Arruda-Boyce⁽³⁵⁾による8鎖モデルを用いた背応力の構成式を採用することで配向硬化を再現できるとしている。

しかしながら、高松・志澤はモデルの概念を示しているのに過ぎず、具体的なモデリングおよびFEMシミュレーションについては行っていない。

1.3 本研究の目的

以上に述べたポリマの大変形特性および従来の研究の問題点を踏まえ、本研究では次のことを目的とする。

- (1) 高松・志澤⁽⁶⁶⁾による「分子鎖すべり系」の概念に基づき、非晶性ポリマに対する結晶塑性論的分子鎖塑性モデルを構築する。構築したモデルに基づき、PMMAを例としてマルチスケール大変形FEM解析を行い、せん断帯状の高ひずみ速度領域の形成・伝ばを伴う大変形挙動を再現し、その際の分子鎖配向を可視化する。
- (2) 分子鎖すべり系の独立回転を許容することにより配向硬化が再現できることを示すとともに、背応力とすべり系の独立回転が配向硬化に対してもつ役割について検討する。
- (3) Hasan-Boyce⁽⁶⁴⁾による非弾性応答則を硬化則として採用することで、非晶性ポリマの硬化曲線における非線形粘弾性応答を再現する。また、非弾性応答則に新たにひずみ速度感度指数の影響を導入し、その効果について考察する。
- (4) 分子鎖が不規則に絡まり合った非晶質状態をより望ましい形で表現するため、金属の多結晶塑性解析においてよく用いられる拡張Taylorモデル⁽⁶⁸⁾を本理論に適用し、非晶質状態からの分子鎖の配向性を再現する。得られた分子鎖の配向度の情報を異方性弾性構成式へ導入することで、弾性の変形誘起異方性

の表現を試みる．

なお本研究では，変形時の内部発熱および熱伝導については考慮しない．さらに，ポリマ内部の損傷および自由体積の情報から静水圧応力依存性に関するデータを取得することが難しいため，静水圧応力依存性についても考慮しないものとする．また，分子鎖網目理論や本理論のように，分子鎖の挙動に基づいてポリマの塑性挙動をモデル化する体系を総称して「分子鎖塑性モデル」と呼ぶことにする．

1.4 本論文の構成

第2章では，分子鎖すべり系の概念を提案する．本研究では非晶性ポリマの塑性変形の素過程を「1本の分子鎖におけるキंक数の減少による応力方向への配向」と捉える．またポリマの内部は分子鎖の絡み点を架橋点とみなした分子鎖網目構造をなしており1絡み点あたり8本の分子鎖で構成されていると考える．さらに架橋点を挟む4本の分子鎖が同一平面上にあってそれに垂直な面の対角方向にキंक回転による分子鎖のせん断変形が生じると考えれば，単位ブロックあたりすべり面が4個規定され各面に1個ずつせん断方向があるため合計4つのすべり系が定義できる．このような分子鎖すべり系の概念に基づけば，分子鎖に対する拡張された分子鎖基底テンソルが基底ベクトルを用いて定義され，金属の結晶塑性論⁽⁶⁷⁾に類似した方法によって分子鎖挙動を表現することが可能であることを示す．

第3章では，第1中間配置および第2中間配置 (Isoclinic 配置⁽⁶⁹⁾) を定義し，さらに Isoclinic 配置において回復可能な量と経路に依存する回復不可能な量が存在することを示す．これによって，Isoclinic 配置が構成式の参照配置として熱・力学的体系に整合していることを明らかにする．次に結晶塑性論と同様に，初期配置における非弾性速度こう配を非弾性せん断ひずみ速度，すべり面に垂直な非弾性ひずみ速度および分子鎖基底によって表し，塑性構成式を用いることなく非弾性変形速度および非弾性スピンを運動学的に決定できるようにする．さらに，各すべり系の分子鎖基底ベクトルが独立に回転できるように分子鎖基底の発展式をモデル化することにより，分子鎖の配向方向を直接表現する．

第4章では，熱・力学的体系にひずみ速度依存性および変形誘起異方性を導入する方法について説明する．すなわち，全自由エネルギーの引数に内部変数として非弾性変形尺度の速度および異方性変数を導入し，各引数に共役な熱力学的力を定義する⁽⁷⁰⁾．次に，保存則に基づいて力学的釣合い方程式，エネルギー方程式およびエントロピー不等式を導出し，従来の方程式系と比較する．

第5章では，構成式の導出過程および硬化則の引数について説明する．まず，Clausius-Duhem の不等式を Green-Zerna⁽⁷¹⁾ の手法を介して保存部分と散逸部分に分離し，その保存部分から変形誘起異方性の情報を含んだ熱弾性構成式を導出する．その際，系の強い非平衡性を考慮して温度速度を引数としてもつ散逸エントロピーを導入する．一方，構成式の散逸部分については，応力をその等方部分と偏差部分に分離した後に相当量で表現することで，分解せん断応力の引数に非弾性せん断ひずみのみならず静水圧応力や非弾性せん断ひずみ速度などが熱・力学的整合性をもって導入されることを示す．また，得られた熱弾性構成式と第3章で得た非弾性変形速度の運動学的関係式を統合することにより弾粘塑性構成式を導出し，さらに結晶塑性論に基づく応力速度を導出する．さらに，ポリマ内部の非晶質状態を表現するために，多結晶体に対する拡張 Taylor モデルを本モデルに適用し，多絡み点モデルを構築する．その際，分子鎖配向に対する異方性強度を定義し，上述の異方性変数を具体化する．

第6章では，Hasan-Boyce によって提案された自由体積変化に基づく非弾性応答則⁽⁶⁴⁾を紹介し，これを本モデルに用いれば初期降伏前の非線形粘弾性応答ならびに降伏後のひずみ軟化を再現できることを示す．この非弾性応答則には Pan-Rice 硬化則⁽⁷²⁾におけるひずみ速度感度指数にあたるものが導入されていないため，これを新たに導入し，ひずみ速度依存性の強さを制御できるよう変更する．また，ポリマのミクロな情報と塑

性変形の素過程を関係づけることで非弾性応答則を結晶塑性論的分子鎖塑性モデルへ適用する。

第7章では、上述のモデルを用いて PMMA 平板に対する FEM シミュレーションを行い、得られた結果について考察する。まず、全ての積分点で一定の分子鎖すべり系初期方位を与えて解析を行い、得られた公称応力-公称ひずみ線図や非弾性せん断ひずみ速度分布、分子鎖の配向状態などの結果を示す。せん断帯の形成およびその伝ばや分子鎖の配向の様子、降伏前の非線形粘弾性応答を再現する。また、確率論的非弾性応答則に新たに導入したひずみ速度感度指数の効果について検討する。さらに、すべり系の独立回転を許容すれば、配向硬化を表現するために分子鎖網目理論において採用されてきた背応力の構成式を用いる必要がなくなることを論ずる。

次に、拡張 Taylor モデル⁽⁶⁸⁾を導入した解析を行い、その結果を示す。内部構造の不均一性から生じるマイクロシアバンドの形成およびその伝ば、ポリマ内部に生じる変形誘起異方性を再現する。

さらに、塑性変形によって生じる変形誘起異方性を弾性構成式に反映させた解析をも行い、分子鎖配向が弾性係数に及ぼす影響についても検討する。

第8章は結言であり、本研究によって得られた知見を要約する。

1.5 本論文で用いる記号

本論文では特に断りのない限り物理量を表すスカラーを斜字体の細字で、ベクトルを斜字体の小文字の太字で、2階以上のテンソルを斜字体の大文字の太字で表す。そして、初期配置、第1中間配置、Isoclinic 配置および現配置における配置表示記号はそれぞれ $\beta_{(I)}$ 、 $\beta_{(M)}$ 、 $\beta_{(m)}$ および $\beta_{(c)}$ のように表す。また、テンソルの配置表示記号は次のように表す。

初期配置	: $A_{(I)}$
第1中間配置	: $A_{(M)}$
Isoclinic 配置	: $A_{(m)}$
現配置	: A

次に、ベクトルおよびテンソルの成分をそれぞれ小文字および大文字の斜字体で表し、添字を付して、 a_i 、 b_i 、 c_i 、 \dots 、 A_{ij} 、 B_{ij} 、 C_{ij} 、 \dots のように表す。

また、線形変換、微分の関係の後形記法で表し、直接表示および指標表示による線形変換、内積、外積、テンソル積および2重積を次のように表す。

線形変換	: $A B$, $A_{ik} B_{kj}$
内積	: $A \cdot B$, $A_{ij} B_{ij}$
外積	: $A \times B$, $e_{jlm} A_{il} B_{mk}$
テンソル積	: $A \otimes B$, $A_{ij} B_{kl}$
2重積	: $e \cdot \cdot A$, $e_{ijk} A_{kj}$
	: $A : B$, $A_{ijkl} B_{kl}$
	: $A : B$, $A_{ijmn} B_{mnkl}$

また、微分演算を直接表示および指標表示により次のように表す。

微分演算子	: ∇	, \cdot_i
こう配	: $\text{grad } A$, $A_{ij,k}$
発散	: $\text{div } A$, $A_{i,j}$
回転	: $\text{curl } A$, $e_{jkl} A_{il,k}$

ここで、記号 $(\cdot)_i$ は座標 x_i による偏微分を表し、記号 e_{ijk} は交代記号を表す。

さらに、上記の記号に関する規約で、1つの項に現れる2つ1組の指標については、1~3の総和記号を省略する、総和の規約を適用する。例えば、 $\sum_{j=1}^3 A_{ij} b_j = A_{ij} b_j$ のように記号 $\sum_{j=1}^3$ を省略する。

以下に、各記号の意味をまとめて示しておく。

主な記号

A	: Argon 硬化則における定数 ($A \equiv 3\pi\omega^2 e'^3 / (16 \times 0.077 k_B)$)
\mathbf{A}	: $\mathbf{A} \equiv \mathbf{I}^{(4)} - \chi \mathbf{C}^{e-1} : \mathbf{C}^A$
A_1, A_2	: 確率密度関数における係数
a	: 確率分布の最小値 (内部変数)
a_{eq}	: 確率分布の最小値の平衡値
a_i	: 速度形弾性構成式導出の際に用いた係数 ($i = 1, 10, 11, \dots, 2, 20, 21, \dots, 4, 40, 41, \dots$)
a'	: Hasan-Boyce の非弾性応答則における変数 ($a' = a + \pi\alpha/2$)
\mathbf{B}	: 背応力テンソル
$[\mathbf{B}]$: \mathbf{B} マトリックス
B_i	: 背応力テンソル \mathbf{B} の主値
b	: 単位立方体 1 辺あたりの 8 鎖ブロックの数
b_i	: 背応力テンソル \mathbf{B} の主方向ベクトル
\mathbf{C}^A	: $C_{ijkl}^A \equiv \delta_{ik} H_{jl} + H_{ik} \delta_{jl}$
\mathbf{C}^e	: 4 階の弾性係数テンソル ($C_{ijkl}^e \equiv \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + 2\mu \delta_{ik} \delta_{jl}$)
\mathbf{C}^{eA}	: 4 階の異方性弾性係数テンソル ($\mathbf{C}^{eA} \equiv \mathbf{C}^e : \mathbf{A}^{-1}$)
\mathbf{C}^R	: 背応力の構成式における係数 ($\mathbf{C}^R \equiv n k_B \theta$)
\mathbf{C}^{tan}	: 4 階の接線係数テンソル
$\bar{\mathbf{C}}$: $\bar{C}_{ijkl} \equiv -\frac{1}{2} C_{ijmn}^{e-1} C_{mnpq}^A C_{pqkl}^{e-1}$
c	: ゆがみ量 ξ が絡み点数の変化に及ぼす影響に関する定数
D	: 自由体積の数密度
\mathbf{D}	: 変形速度テンソル
\mathbf{D}^e	: 変形速度テンソルの弾性部分
\mathbf{D}^i	: 変形速度テンソルの非弾性部分
\mathbf{D}^p	: 変形速度テンソルの塑性部分

D^*	: 変形速度テンソルの弾・剛体回転部分 ($D^* = \mathbf{0}$)
D_∞	: 自由体積の数密度の平衡値
d	: 温度の関数 $f_\theta(\theta)$ における定数
d'	: 熱の影響を受けない絡み点数に関連した分子鎖数
da	: 微小面積要素
da_0	: 初期配置における微小面積要素
ds	: 微小線素
dt	: 微小時間
dv	: 微小体積要素
dv_0	: 初期配置における微小体積要素
$d\mathbf{x}$: 微小線素ベクトル
E	: 縦弾性係数 (Young 率)
E	: Green のひずみテンソル
$[E]$: 速度-速度こう配マトリックス
E^e	: Green のひずみテンソルの弾性部分
E^{eH}	: 異方性材料に発生する応力状態を等方性材料で実現するためのひずみテンソル
E^i	: Green のひずみテンソルの非弾性部分
\bar{E}	: 変形尺度を含む全ひずみテンソル
\bar{E}^i	: 非弾性変形尺度テンソル
e_i	: 単位基底ベクトル
e_{ijk}	: 交代記号
e'	: 分子間平均距離
e''	: 分子鎖数と温度の関係に関する定数
F	: 変形こう配テンソル

\bar{F}	: 幾何学的非線形性に起因するマトリックス
F^i	: 非弾性変形こう配テンソル
F^p	: 塑性変形こう配テンソル
F^*	: $F^* = R^* \hat{U}^e$
\bar{F}	: $\bar{F} = \hat{U}^e F^i$
f	: 単位質量あたりの物体力ベクトル
$f_\theta(\theta)$: 温度 θ が絡み点数の変化に及ぼす影響を表した関数
$f_\xi(\xi)$: ゆがみ量 ξ が絡み点数の変化に及ぼす影響を表した関数
G	: Gibbs 関数
$[G]$: 幾何学的非線形性に起因するマトリックス
G_i	: $G_i \equiv F g_i$ により表されるベクトル
\bar{G}^d	: Gibbs 関数の散逸部分
g	: 単位温度あたりの温度こう配ベクトル
g_i	: 非弾性変形開始時に材料の主ストレッチ方向に埋め込んだ基底ベクトル
$g^{(\alpha)}$: すべり系 α における流れ応力
H	: エントロピー
\mathbf{H}	: 分子鎖の配向により生じる弾性の変形誘起異方性を表す 2 階の異方性変数テンソル
H^c	: エントロピーの保存部分
H^d	: エントロピーの散逸部分
$[H^d]$: 配向方向 $\bar{\phi}$ が x'_1 軸に一致するような x'_i 系で測った異方性変数 H の対角マトリックス
H^e	: 弾性変位こう配テンソル ($H^e \equiv \frac{\partial \mathbf{u}^e}{\partial \mathbf{x}_{(M)}}$)
$\ H_{\max}\ $: 最も配向が強い場合の異方性変数テンソルの大きさ
\hat{H}	: 異方性係数テンソル χ によって写像された異方性変数テンソル
$[\hat{H}^d]$: 配向方向 $\bar{\phi}$ が x'_1 軸に一致するような x'_i 系で測った異方性変数 \hat{H} の対角マトリックス

- h : Boyce らの発展式における係数
- h_P : Planck 定数 ($h_P = 6.62607 \times 10^{-34}$ J·s)
- $h^{(\alpha\beta)}$: すべり系 α にすべり系 β が及ぼす効果に関する硬化係数
- I : 恒等 (単位) テンソル
- $I^{(4)}$: 4 階の恒等 (単位) テンソル ($I_{ijkl}^{(4)} \equiv \delta_{ik} \delta_{jl}$)
- I_1, I_2, I_3, I_4 : Hasan-Boyce の非弾性応答則における積分計算に用いた記号
- I_{T1}, I_{T2}, I_{T3} : $\tilde{T}_{(m)}$ に対する基本不変量 ($I_{T1} \equiv \text{tr} \tilde{T}_{(m)}$, $I_{T2} \equiv \text{tr} \tilde{T}_{(m)}^2$, $I_{T3} \equiv \text{tr} \tilde{T}_{(m)}^3$)
- I_{T4} : $I_{T4} \equiv \tilde{T}_{(m)ij} \bar{C}_{(m)ijkl} \tilde{T}_{(m)kl}$ で定義される不変量
- J : 変形こう配テンソル $F \equiv x_{i,j} e_i \otimes e_j$ の Jacobian ($J \equiv \det F \neq 0$)
- J_1, J_2 : 自由体積率の計算に用いた記号
- K : 運動エネルギー密度
- $[K]$: 全体剛性マトリックス
- k_B : Boltzmann 定数 ($k_B = 1.38065 \times 10^{-23}$ J/K)
- $[k^e]$: 要素剛性マトリックス
- L : 解析モデルの長さ
- L : 速度こう配テンソル
- L^e : 速度こう配テンソルの弾性ストレッチ部分
- L^i : 速度こう配テンソルの非弾性部分
- L^p : 塑性速度こう配テンソル
- $L(x)$: Langevin 関数 ($L(x) = \coth x - 1/x$)
- L^* : 速度こう配テンソルの弾・剛体回転部分
- \bar{L} : 剛体回転部分を除いた速度こう配テンソル ($\bar{L} = L^e + L^i = L - L^*$)
- l_1, l_2 : Hasan-Boyce の非弾性応答則において数式の記述省略のために用いたスカラー
- M : 非弾性変形速度に共役な内力テンソル

$M_{\alpha\beta}$: $N_{\alpha\beta}$ の逆行列
m	: 単位体積中の絡み点数
m_0	: 初期の温度 $\theta = \theta_0$, 変形状態 $\xi = 1$ の場合の絡み点数
m_{ult}	: 絡み点数の極限值
m_w	: 幾何学的初期不整の波数
$\mathbf{m}^{(\alpha)}$: すべり系 α におけるすべり面の法線方向の分子鎖基底ベクトル
N	: 1 本の分子鎖中の平均的なセグメント数
$[N]$: 形状関数マトリックス
N_A	: 立方体中の分子鎖のセグメント総数
N_g	: 1 物質点あたりの結晶粒数または絡み点数
N^I	: 形状関数
N_s	: 1 つの絡み点に配置されたすべり系の個数
$N_{\alpha\beta}$: 接線係数法で用いた行列
n	: 単位体積あたりの分子鎖数
\mathbf{n}	: 閉曲面 da の外向き法線ベクトル
\mathbf{n}_0	: 初期配置における閉曲面 da_0 の外向き法線ベクトル
P	: 内力のなす仕事率
\mathbf{P}	: $\dot{\mathbf{I}}$ を Cauchy 応力の共回転速度に変換する際に用いるテンソル
P_B	: 物体力のなす仕事率
P_b	: 純粋な物体力のみでのなす仕事率
P_I	: 慣性力のなす仕事率
P_s	: 表面力のなす仕事率
$\mathbf{P}^{(\alpha)}$: すべり系 α における分子鎖基底テンソル ($\mathbf{P}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)}$)
$\bar{\mathbf{p}}$: 単位面積あたりに供給される熱量ベクトル

- Q_b : 単位体積に供給される単位時間あたりの熱量
- Q_s : 単位面積に供給される単位時間あたりの熱量
- $Q^{(\alpha)}$: すべり系 α における分子鎖基底テンソル ($Q^{(\alpha)} \equiv s^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)} + m^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} + t^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)}$)
- q : 微小面積要素 da に流入する熱流束ベクトル
- q_a : 絡み点の熱解離エネルギー
- R : 気体定数 ($R = 8.31451 \text{ J}/(\text{mol}\cdot\text{K})$)
- $[R]$: 基準座標系 x_i から x'_i 系に座標変換するための直交行列
- \hat{R}^i : 非弾性回転を表す直交テンソル
- $\overline{\hat{R}}^{i(\alpha)}$: すべり系 α 以外の全てのすべり系の活動により起こる非弾性回転を表す直交テンソル
- R^* : 弾・剛体回転を表す直交テンソル
- r : 放射熱密度
- S : 局所貯蔵ひずみエネルギー (内部変数)
- S : 異方性変数に共役な内力テンソル
- S^c : 異方性変数に共役な内力テンソル S の保存部分
- S^d : 異方性変数に共役な内力テンソル S の散逸部分
- S^e : 三角形要素の面積
- S : 体積 \mathcal{V} を囲む物質検査面
- S_0 : 初期配置における体積 \mathcal{V}_0 を囲む物質検査面
- S^e : 要素体積 \mathcal{V}^e を囲む物質検査面
- s : せん断強度 (流れ応力)
- s_0 : せん断強度 (定数)
- s_{ss} : せん断強度 s の平衡値
- $s^{(\alpha)}$: すべり系 α におけるすべり方向の分子鎖基底ベクトル
- \tilde{s} : 静水圧応力の影響を考慮したせん断強度 ($\tilde{s} \equiv s - \alpha_p(\text{tr } \mathbf{T})/3$)

T	: x_2 方向の反力
\boldsymbol{T}	: Cauchy 応力テンソル
\boldsymbol{T}^l	: 荷重ベクトル
$\hat{\boldsymbol{T}}$: 有効応力テンソル ($\hat{\boldsymbol{T}} \equiv \boldsymbol{T} - \boldsymbol{B}$)
$\tilde{\boldsymbol{T}}$: Kirchhoff 応力テンソル ($\tilde{\boldsymbol{T}} \equiv \boldsymbol{J}\boldsymbol{T}$)
\mathcal{T}	: 時間についての積分領域
t	: 時刻
$\overset{(0)}{\boldsymbol{t}}$: 初期配置における法線ベクトル \boldsymbol{n}_0 をもつ面における表面力ベクトル
$\overset{(n)}{\boldsymbol{t}}$: 法線ベクトル \boldsymbol{n} をもつ面における表面力ベクトル
t_p	: 自由体積の進展に関する特性無次元時間
$\boldsymbol{t}^{(\alpha)}$: $\boldsymbol{t}^{(\alpha)} = \boldsymbol{s}^{(\alpha)} \times \boldsymbol{m}^{(\alpha)}$ で与えられる分子鎖基底ベクトル
U	: 端面強制変位
$\hat{\boldsymbol{U}}^e$: 弾性ストレッチテンソル
$\hat{\boldsymbol{U}}^i$: 非弾性ストレッチテンソル
\hat{U}	: 内部変数を含んだ内部エネルギー
u	: Hasan-Boyce の非弾性応答則におけるひずみ速度感度指数
\boldsymbol{u}	: 変位ベクトル
\boldsymbol{u}^e	: 弾性変位ベクトル ($\boldsymbol{u}^e \equiv \boldsymbol{x}_{(m)} - \boldsymbol{x}_{(M)}$)
u_s	: 単純せん断による変位
V	: Eyring の反応速度論における反応速度
V_b	: Eyring の反応速度論における負方向への反応速度
V_f	: Eyring の反応速度論における正方向への反応速度
\boldsymbol{V}^i	: 左非弾性ストレッチテンソル
V_i^i	: 左非弾性ストレッチテンソルの主値

- \mathcal{V} : 物質検査体積
- \mathcal{V}_0 : 初期配置における物質検査体積
- \mathcal{V}^e : 要素体積
- \mathbf{v}_i^i : 左非弾性ストレッチの主方向ベクトル
- v : Hasan-Boyce の非弾性応答則におけるひずみ速度感度指数
- \mathbf{v} : 物質速度ベクトル
- \mathbf{v}^I : 節点 I における節点速度ベクトル
- W : 解析モデルの初期平均幅
- \mathbf{W} : 連続体スピン (全スピン) テンソル
- W_1, W_2 : 不整振幅
- \mathbf{W}^e : スピンテンソルの弾性ストレッチ部分 ($\mathbf{W}^e = \mathbf{0}$)
- \mathbf{W}^i : 非弾性スピンテンソル
- \mathbf{W}^* : 下部構造スピン (Substructure スピン) テンソル ($\mathbf{W}^* \equiv \mathbf{W} - \mathbf{W}^i$)
- $\mathbf{W}^{*(\alpha)}$: すべり系 α における分子鎖基底の回転を表すテンソル
- w : 膨張率
- \mathbf{w} : 連続体スピン \mathbf{W} に双対な軸性ベクトル
- $\mathbf{w}^{*(\alpha)}$: $\mathbf{W}^{*(\alpha)}$ に双対な軸性ベクトル
- X : Eyring の速度式における材料依存の係数
- \mathbf{x} : 物質点の位置ベクトル
- \mathbf{x}^I : 節点 I の位置ベクトル
- x_i : 基準座標系
- x'_i : 配向方向 $\bar{\phi}$ が x'_1 軸に一致するような座標系
- Y : Eyring の速度式における材料依存の係数
- $\mathbf{Y}^{(\alpha)}$: $\mathbf{Y}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{C}^{eA} : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}$

$\mathbf{Z}^{(\alpha)}$: 接線係数法で用いたテンソル
α	: 確率分布の標準偏差 (内部変数)
α_{eq}	: 確率分布の標準偏差の平衡値
α_h	: 熱弾性構成式における熱膨張係数
α_p	: 圧力係数
β	: 単純せん断による角度変化
$\beta_1, \beta_2, \beta_3$: Hasan-Boyce の非弾性応答則における材料定数
$\beta^{(\alpha)}$: 結晶塑性論に基づく応力速度の導出に用いるテンソル ($\beta^{(\alpha)} \equiv \mathbf{P}_A^{(\alpha)} \mathbf{T} - \mathbf{T} \mathbf{P}_A^{(\alpha)}$)
$\mathbf{\Gamma}$: $\mathbf{\Gamma} \equiv \mathbf{C}^{eA} : \mathbf{C}^{e-1} : \overset{\nabla}{\mathbf{C}}^A : \mathbf{C}^{e-1}$
γ_0	: 1 回のエネルギー障壁乗り越えにより起こるせん断ひずみの体積積分値
γ_a	: 各すべり系の非弾性せん断ひずみの合計値 ($\gamma_a \equiv \sum_{\alpha} \gamma^{(\alpha)}$)
$\overset{[i]}{\dot{\gamma}}$: 内部エントロピー生成速度の密度
γ^p	: 塑性せん断ひずみ
$\gamma^{(\alpha)}$: すべり系 α における非弾性せん断ひずみ
$\dot{\gamma}_0$: Argon 硬化則における参照ひずみ速度
$\dot{\gamma}_r$: Hasan-Boyce の非弾性応答則における参照ひずみ速度
$\Delta a^{(\alpha)}$: すべり系 α における確率分布 $a^{(\alpha)}$ の最小値の増分
ΔF	: 活性化エネルギー
ΔF_0	: 無応力状態での活性化エネルギー
ΔF_f	: 正方向への反応が生じるための活性化エネルギー
$\{\Delta \bar{\mathbf{F}}\}$: 全体外力増分ベクトル
$\{\Delta \mathbf{f}\}$: 物体力増分ベクトル
$\{\Delta \bar{\mathbf{f}}\}$: 外力増分ベクトル
ΔG_0	: 活性化エネルギーの参照値

ΔG^*	: Argon のダブルキックモデルに基づく自由エネルギー変化
ΔH	: 活性化エンタルピー変化
$\Delta \mathbf{R}^{(\alpha)}$: すべり系 α における分子鎖基底の回転を表す直交テンソル
ΔS	: 活性化エントロピー変化
$\Delta S^{(\alpha)}$: すべり系 α における局所貯蔵ひずみエネルギー $S^{(\alpha)}$ の増分
$\Delta \bar{s}^{(\alpha)}$: すべり系 α におけるせん断強度 $\bar{s}^{(\alpha)}$ の増分
Δt	: 時間増分
$\{\Delta \mathbf{t}^{(n)}\}$: 表面力増分ベクトル
$\{\Delta \mathbf{U}\}$: 全体節点変位増分ベクトル
$\{\Delta \mathbf{u}\}$: 節点変位増分ベクトル
ΔW	: 材料の幾何学的不均一性を表す形状初期不整
$\Delta \alpha^{(\alpha)}$: すべり系 α における確率分布の標準偏差 $\alpha^{(\alpha)}$ の増分
$\Delta \gamma^{(\alpha)}$: すべり系 α における非弾性せん断ひずみ $\gamma^{(\alpha)}$ の増分
$\Delta \tau^{(\alpha)}$: すべり系 α における分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ の増分
Δv	: 活性化体積
$\Delta v^{(\alpha)}$: $\Delta v^{(\alpha)} = \dot{v}^{(\alpha)} \Delta t$
δ_{ij}	: Kronecker のデルタ
ε_a	: Maxwell モデルおよび Voigt モデルにおける全体のひずみ
ε_e	: ばね部分のひずみ
$\varepsilon_m^{i(\alpha)}$: すべり系 α におけるすべり面に垂直な非弾性ひずみ
$\varepsilon_m^{p(\alpha)}$: すべり系 α におけるすべり面に垂直な塑性ひずみ
ε_v	: ダッシュポット部分のひずみ
$\bar{\varepsilon}^p$: 相当塑性ひずみ
$\hat{\varepsilon}$: 内部変数を含んだ内部エネルギー密度

ζ	: Hasan-Boyce の非弾性応答則における材料定数
η	: エントロピー密度
η_v	: ダッシュポットの粘性係数
Θ	: 配向強度パラメータ
Θ^H	: 異方性変数テンソルを用いて定義した配向強度パラメータ
θ	: 温度
θ_0	: 初期温度
ϑ	: 接線係数法における補間係数
$\kappa^{(\alpha)}$: すべり面 α 上の $M'_{(m)}$ の値 ($\kappa^{(\alpha)} \equiv M'_{(m)} \cdot P_{(m)S}^{(\alpha)}$)
Λ^e	: Young 率 E , Poisson 比 ν , 熱膨張係数 α_h の温度依存性を表す 2 階のテンソル
Λ^{eA}	: 異方性弾性構成式における温度依存性を表す 2 階のテンソル
λ	: 弾性構成式における Lamé 定数
λ_{ch}	: $\lambda_{ch} \equiv \sqrt{(V_1^{i2} + V_2^{i2} + V_3^{i2})/3}$
λ_i	: 主ストレッチ
λ_m	: $\lambda_m \equiv \sqrt{(\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2)/3}$
λ_S	: 分子鎖の伸び
μ	: 横弾性係数
ν	: Poisson 比
\mathcal{E}	: 局所せん断変形の起こりやすさを表す確率分布 ($\mathcal{E}(\Delta F_0, \theta)$)
ξ	: 材料内に埋め込まれた直交棒の直交性からのゆがみ量
Π	: 第 1 種 Piola-Kirchhoff 応力 (公称応力) テンソル
ω	: 試行頻度
ω_0	: 頻度因子
ω_c	: Eyring の反応速度論における頻度係数

ρ	: 現配置における密度
ρ_0	: 初期配置における密度
ϱ	: 変形に対するエネルギー障壁を乗り越えようとする単位時間あたりの試行回数
σ	: すべり系の方位のばらつきを表す標準偏差
σ_0	: 全てのすべり系が等方的に配置された場合にとる標準偏差の最大値
$\sigma_i^{(3ch)}$: 3鎖モデルにおける応力テンソルの主値
$\sigma_i^{(8ch)}$: 8鎖モデルにおける応力テンソルの主値
σ_a	: Maxwell モデルおよび Voigt モデルにおける全体の応力
σ_{a0}	: Maxwell モデルにおける全体の初期応力
σ_{ch}	: 分子鎖に加わる応力
σ_e	: ばね部分の応力
σ_m	: 静水圧応力
σ_V	: Eyring の反応速度論における応力
σ_v	: ダッシュポット部分の応力
σ_y	: 無次元化された降伏応力
$\bar{\sigma}$: 相当応力
$\bar{\sigma}_0$: すべり系が等方的に配置された場合の分子鎖基底ベクトル成分の平均値
$\bar{\sigma}_1$: 配向方向 $\bar{\phi}$ へ射影した分子鎖基底ベクトル成分の平均値
$\bar{\sigma}_2$: 配向方向 $\bar{\phi}$ の垂直方向へ射影した分子鎖基底ベクトル成分の平均値
τ	: (相当) せん断応力
τ_0	: Hasan-Boyce の非弾性応答則における限界強度
τ_a	: 各すべり系の分解せん断応力の合計値 ($\tau_a \equiv \sum_{\alpha} \tau^{(\alpha)}$)
τ_R	: 緩和時間 ($\tau_R \equiv \eta_v/E$)
τ_r	: Eyring の速度式における参照応力

$\tau^{(\alpha)}$: すべり系 α における分解せん断応力
$\tau_b^{(\alpha)}$: すべり系 α における背応力に対する分解せん断成分
$\hat{\tau}_a$: 各すべり系の有効分解せん断応力の合計値 ($\hat{\tau}_a \equiv \sum_{\alpha} \hat{\tau}^{(\alpha)}$)
$\hat{\tau}^{(\alpha)}$: すべり系 α における有効分解せん断応力
τ^*	: 遅延時間 ($\tau^* \equiv \eta_v/E$)
$\Upsilon^{(\alpha)}$: 接線係数法で用いたテンソル
$\psi^{(\alpha)}$: 接線係数法で用いたスカラー
Φ	: 散逸関数
ϕ	: すべり系の方位を表す一般角
$\bar{\phi}$: 配向方向パラメータ
φ	: 活性化エネルギーの確率密度関数 ($\varphi(\Delta F_0)$)
χ	: 異方性弾性構成式における異方性を表す項の係数
χ	: 2 階の異方性係数テンソル
$[\chi^d]$: 配向方向 $\bar{\phi}$ が x'_1 軸に一致するような x'_i 系で測った異方性係数 χ の対角マトリックス
Ψ	: Helmholtz の自由エネルギー
$\bar{\Psi}$: 全自由エネルギー
$\bar{\Psi}^d$: 全自由エネルギーの散逸部分
$\bar{\Psi}^i$: 非弾性仕事
$\hat{\Psi}$: $\hat{\Psi} = \hat{U} - \theta H$
$\bar{\psi}$: 全自由エネルギー密度
$\Omega^{(\alpha)}$: 結晶塑性論に基づく応力速度の導出に用いるテンソル ($\Omega^{(\alpha)} \equiv C^{eA} : \mathbf{P}_S^{(\alpha)} + \beta^{(\alpha)}$)
ω	: キンクの折れ曲がりの回転角
$\frac{D}{Dt}$: 物質時間微分を表す演算子
$A(0)$: A の初期値

A^{-1}	: A の逆テンソル
A_A	: テンソル A の反対称部分 ($A_A \equiv (A - A^T)/2$)
$\det A$: テンソル A の Jacobian
$A^{[k]}$: 第 k 番目の結晶粒または絡み点における量
A_S	: テンソル A の対称部分 ($A_S \equiv (A + A^T)/2$)
A^T	: テンソル A の転置
$\text{tr} A$: テンソル A のトレース (跡) ($\text{tr} A \equiv A_{ii}$)
$A^{(\alpha)}$: すべり系 α における量
\dot{A}	: A の物質時間微分
\widehat{A}	: 結晶粒数または絡み点数 N_g についての A の平均値 ($\widehat{A} \equiv (\sum_k A^{[k]}) / N_g$)
\widetilde{A}	: A の J 倍を表す記号 ($\widetilde{A} \equiv JA$)
\check{A}	: A の仮想量を表す記号
A'	: テンソル A の偏差部分 ($A' \equiv A - (\text{tr} A / 3) I$)
∇A	: テンソル A の Mandel-Kratochvil 速度 ($\nabla A \equiv \dot{A} - W^* A + A W^*$)
\hat{A}	: テンソル A の Cotter-Rivlin 速度 ($\hat{A} \equiv \dot{A} + L^T A + A L$)
$\overset{\circ}{A}$: テンソル A の Jaumann 速度 ($\overset{\circ}{A} \equiv \dot{A} - W A + A W$)
$\square A$: テンソル A の Truesdell 速度 ($\square A \equiv \dot{A} - L A - A L^T + (\text{tr} L) A$)
$[A]$: テンソル A のマトリックス表示
$\ A\ $: テンソル A の大きさ ($\ A\ \equiv \sqrt{A \cdot A}$)
$\{a\}$: ベクトル a のマトリックス表示
$\ a\ $: ベクトル a の大きさ ($\ a\ \equiv \sqrt{a \cdot a}$)

第2章

分子鎖すべり系の概念

本章では、「分子鎖すべり系」の概念⁽⁶⁶⁾について述べる．具体的には，Argon⁽⁵⁵⁾によって提案されたポリマに対する塑性変形の微視的メカニズムを紹介する．そしてこれを基に「分子鎖すべり系」の概念が新たに提案されるまでの過程を説明する．

2.1 ポリマの塑性変形の素過程

本理論では，従来の分子鎖網目理論と同様に，分子鎖のキンク回転をポリマの微視的な塑性変形の素過程とする Argon モデルを採用する．Argon モデルの真偽については未解決の部分が残されているが，第6章で述べる確率論的非弾性応答則における活性化エネルギーの考え方によく整合するため，ここではこれを用いることにする．

Argon は，変形前のポリマの内部では分子鎖がランダムに配置されており，分子鎖1本には図2.1に示すような多数のキンクが含まれていると考え，応力が負荷されて分子鎖が応力方向に伸びて配向する過程は，キンクが周りの分子鎖によって付加された分子間抵抗に打ち勝って次々と回転し，キンク数が減少していく過程であるとしている．これは，図2.1に示すように，応力が増加することによりキンクのAB部分が回転して，応力方向に配列し，いくつかのモノマによって構成される分子鎖セグメントが伸びることを意味している．このような回転が生じるためには，セグメントは隣接するセグメントからの弾性的なエネルギー障壁を越える必要がある．Argon は，このような現象を表す2重キンクの発生とその伝ばを表したダブルキンクモデルに基づき，せん断応力 τ を負荷した際の自由エネルギー変化 ΔG^* を次式のように表している．

$$\Delta G^* = \frac{3\pi\mu\omega^2 e'^3}{16(1-\nu)} \left[1 - \left\{ \frac{\tau}{0.077\mu/(1-\nu)} \right\}^{\frac{5}{6}} \right] \dots\dots\dots (2.1)$$

ただし， ω はキンクの折れ曲がりの回転角， e' は分子間平均距離， μ および ν はそれぞれ横弾性係数および Poisson 比である．一方，Eyring による反応速度論 [補足 B.1] によれば塑性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^p$ は次式のように表せる．

$$\dot{\gamma}^p = \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\frac{\Delta G^*}{k_B \theta}\right) \dots\dots\dots (2.2)$$

ここで， $\dot{\gamma}_0$ は参照ひずみ速度， k_B は Boltzmann 定数， θ は温度である．ゆえに式(2.1)を式(2.2)へ代入する

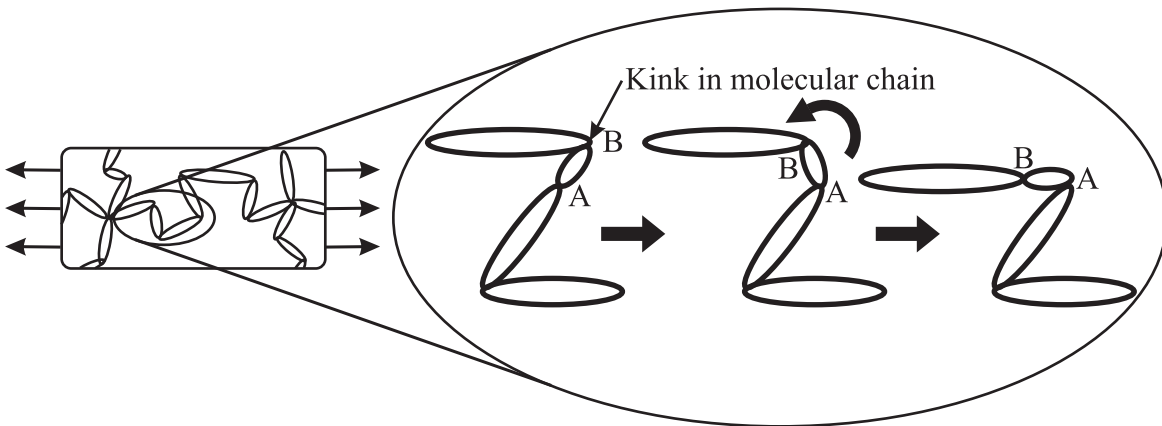


Fig. 2.1 Concept of Argon's model

ことにより，塑性せん断ひずみ速度 [補足 B.2] は温度およびせん断応力を用いて次式のように表される．

$$\dot{\gamma}^p = \dot{\gamma}_0 \exp \left[-\frac{A s_0}{\theta} \left\{ 1 - \left(\frac{\tau}{s_0} \right)^{\frac{5}{6}} \right\} \right] \dots \dots \dots (2.3)$$

ただし， $s_0 \equiv 0.077\mu / (1 - \nu)$ は流れ応力に相当するせん断強度， $A \equiv 3\pi\omega^2 e'^3 / (16 \times 0.077 k_B)$ は定数である．また，式(2.3)をせん断応力について解けば，次式が得られる．

$$\tau = s_0 \left[1 - \frac{\theta}{A s_0} \ln \left(\frac{\dot{\gamma}_0}{\dot{\gamma}^p} \right) \right]^{\frac{6}{5}} \dots \dots \dots (2.4)$$

上式(2.4)で表される硬化則は，低温域までの降伏応力の温度依存性ならびにひずみ速度依存性を説明できるものとしてよく用いられる．

本理論では，非晶性ポリマにおける塑性変形の素過程を，これまで述べてきたような「1本の分子鎖におけるキंक数の減少による応力方向への配向」と捉え，これを金属結晶における転位運動によるすべりと類似した現象であるとみなす．そして第6章において詳述するように，初期降伏後ポリマの内部で形成される新たな高自由体積領域，すなわち周囲の分子鎖の引き抜きなど構造緩和が進んだ領域において分子鎖のキंक回転が生じているものと考え，高自由体積領域の増減を活性化エネルギーの分布を用いて表現した Hasan-Boyce⁽⁶⁴⁾ の非弾性応答則を硬化則として用いることにする．非弾性応答則を用いることで，式(2.3)または式(2.4)で表される Argon 硬化則を直接には使用しないことになるが，その概念は，非晶性ポリマにおける塑性変形の微視的メカニズムを具体的に説明したものとして，Hasan-Boyce の応答則に間接的な影響を及ぼすと同時に，次節で示す「分子鎖すべり系」の概念を構築する上でも欠かすことのできない重要なものである．

2.2 8鎖モデルと分子鎖すべり系の概念

まず，「分子鎖すべり系」の概念の基礎となる分子鎖網目理論⁽³⁴⁾⁽⁴¹⁾⁽⁴²⁾について簡単に説明しておく．分子鎖網目理論では，ポリマの微視的構造を考慮するにあたり，通常図 2.2 に示すような単純化した分子鎖網目モデルが用いられる．すなわち，図 2.2(a) の非晶性ポリマは同図 (b) に示すような多数の分子鎖で構成され，同図 (c) のように分子鎖の絡み点を架橋点とみなした分子鎖網目構造をなしているものとする．1本の分子鎖は同図 (c) における2つの絡み点によって定義され，この分子鎖は同図 (d) に示すようないくつかのモノマからなる複数のセグメントによって構成される．そして図 2.2(c) で示される分子鎖網目構造は，通常図 2.3 のよう

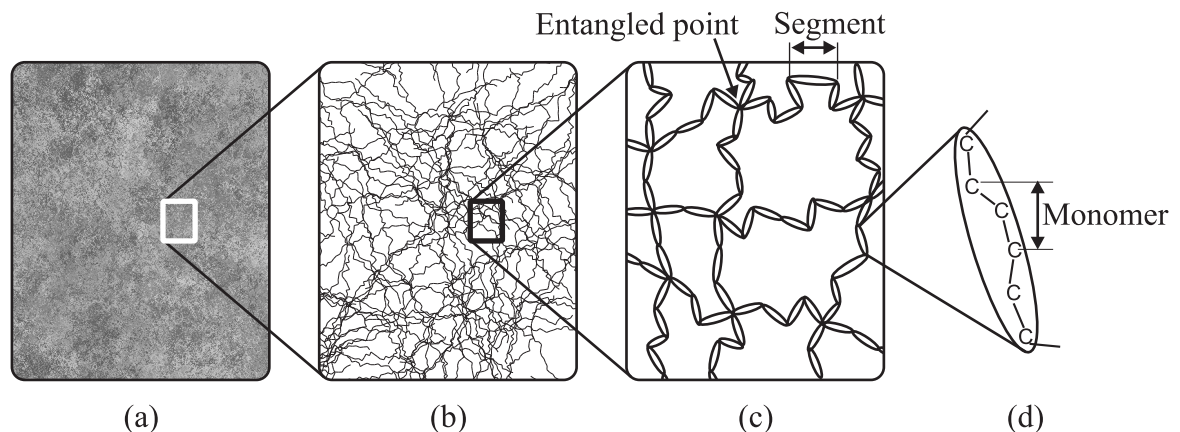


Fig. 2.2 Schematic hierarchical structure of glassy polymer

な3鎖あるいは8鎖モデルに置き換えられて解析が行われており、これらの分子鎖網目構造がゴム弾性応答を示すとするアフィンモデルを塑性論へ拡張し、ポリマの塑性変形に対する抵抗すなわち背応力を現象論的塑性論へ導入する手法が用いられる。中でも図2.3(b)で示される8鎖モデル⁽³⁵⁾を用いた引張・圧縮変形に関する数値シミュレーションは、実験結果をよく再現することが知られている。

高松・志澤⁽⁶⁶⁾は、分子鎖網目理論における8鎖モデルを応用して、次のようなポリマの微視的内部構造を考案し、「分子鎖すべり系」を定義している。すなわち、ポリマの内部は分子鎖の絡み点を架橋点とみなした分子鎖網目構造をなしており、そのユニットは1絡み点あたり図2.4(a)に示すような8本の分子鎖で構成されていると考える。ただし、8鎖モデル内における絡み点は、配向硬化へ影響を及ぼすことを特に想定しているわけではなく、単に分子鎖同士の交点としての意味合いで設定したものである。さらに架橋点を挟む4本の分子鎖が同一平面内に含まれているとする。本来、分子鎖は3次元的なねじれ構造をもつと考えられるが、ここではすべり系を定義するために、あえて上述のような2次元的配置をとると仮定している。そして、その対角方向にキック回転による分子鎖のせん断変形が生じると考えれば[同図(b)], 1絡み点あたりすべり面が4個規定され、各面に1個ずつすべり方向があるため、合計4つのすべり系が存在することになる。ただし、ここでいう「すべり」とは、2本の分子鎖間の実際のすべりを意味するものではない。また、図2.4における8鎖

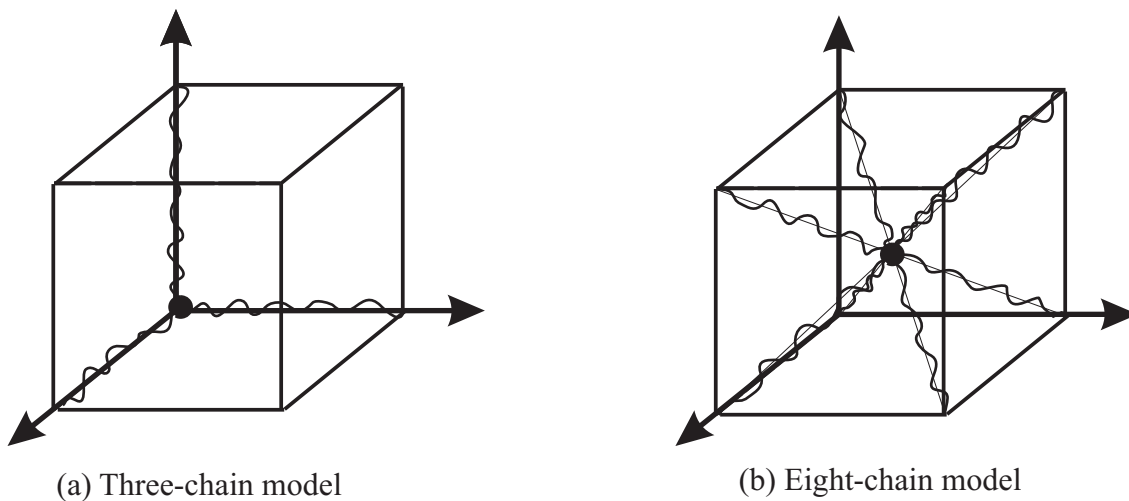


Fig. 2.3 Molecular chain models of polymer⁽³⁵⁾⁽⁴¹⁾⁽⁴²⁾

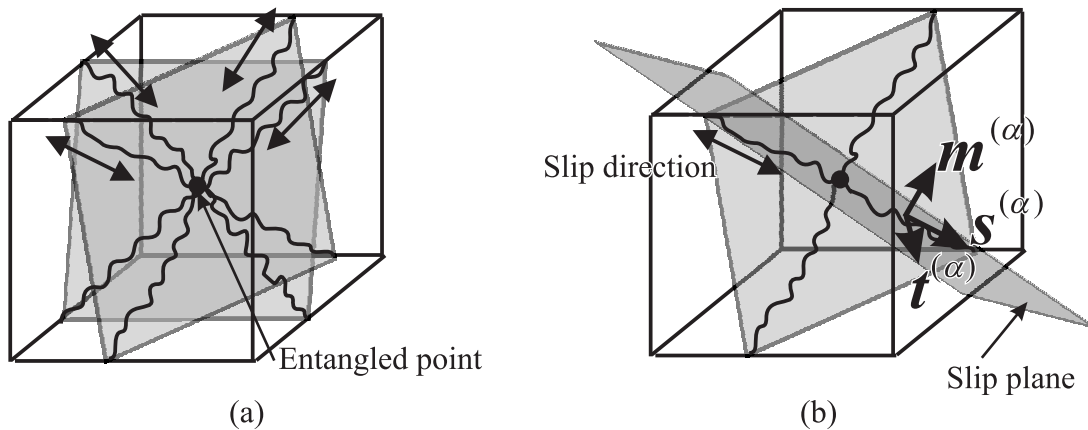


Fig. 2.4 Modified eight-chain model and slip system

モデルは分子鎖端が立方体頂点に置かれておらず、従来の分子鎖網目理論における8鎖モデル [図 2.3(b)] とは若干異なっている。これは、分子鎖端を立方体頂点に置くと立方体の集合である全体構造が周期的になってしまい、不均一な非晶質状態とは不整合となるためである。以上のような8鎖モデルを構築した結果、分子鎖基底テンソル $P^{(\alpha)}$ および $Q^{(\alpha)}$ がそれぞれ次の式 (2.5) および式 (2.6) のように定義できる。

$$P^{(\alpha)} \equiv s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.5)$$

$$Q^{(\alpha)} \equiv s^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)} + m^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} + t^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.6)$$

ただし、通常の結晶塑性論において用いられる $P^{(\alpha)}$ に加えて、本理論では、ポリマに特有の現象である塑性変形中の体積変化を考慮して式 (2.6) で表される新たな分子鎖基底テンソル $Q^{(\alpha)}$ (等方均質体の恒等テンソルに相当) を導入している。また、 $s^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)}$ はそれぞれすべり方向およびすべり面の法線方向を表す大きさ1の分子鎖基底ベクトルであり、 $t^{(\alpha)}$ は $t^{(\alpha)} = s^{(\alpha)} \times m^{(\alpha)}$ で与えられる分子鎖基底ベクトルである。ここで、 α はすべり系の番号を表しており、8鎖モデルの場合は1~4の値をとる。また、 $()^{(\alpha)}$ はすべり系 α における量を表す。

以上のような分子鎖すべり系の概念を FEM 解析に適用すれば、ポリマの微視的内部状態を反映したシミュレーションを行うことが可能となる。また、図 2.4 に示した8鎖モデルでは、隣接する2つの絡み点間を結ぶ1本の直線上に分子鎖が沿っていると仮定しているため、分子鎖基底ベクトル $s^{(\alpha)}$ の方向から大変形に伴う分子鎖の配向状態を可視化することができる。そこで次章からは、式 (2.5) および式 (2.6) で表される考え方に基づいた運動学的関係式ならびに構成式の導出を行い、非晶性ポリマに対する新たな FEM 解析スキームを構築する。

第3章

運動学

本章では、結晶塑性論的分子鎖塑性モデルに対する運動学を従来の結晶塑性論⁽⁶⁷⁾の運動学に基づいて論ずる。ただし、本研究では Shizawa-Zbib⁽⁷³⁾ に代表される、第2中間配置 (Isoclinic 配置⁽⁶⁹⁾) の導入による明確な4配置構成を用いているところが従来とは異なる。さらに、その配置において回復可能な量と経路に依存する回復不可能な量が存在することを示す。これによって、Isoclinic 配置が構成式の参照配置として熱・力学的体系に整合していることを明らかにする。次に初期配置における非弾性速度こう配を非弾性せん断ひずみ速度、すべり面に垂直な非弾性ひずみ速度および分子鎖基底によって表し、塑性構成式を用いることなく非弾性変形速度および非弾性スピンを運動学的に決定できるようにする。以上については Shizawa-Zbib⁽⁷³⁾ による手法に基づいて、3.1節~3.5節において理論展開していく。

従来の結晶塑性論においては塑性変形の微視的メカニズムをすべり面における転位の移動と捉えているため、結晶基底が塑性変形こう配で変換を受けた後も各すべり系間の角度は変化しない。これに対し、本理論においては、非弾性変形を受けると分子鎖が配向するという非晶性ポリマの内部構造変化を表現するために、各すべり系の分子鎖基底ベクトルが独立に回転できるように分子鎖基底の発展式をモデル化する。この分子鎖基底の発展は本研究独自のものであり、3.6節および3.7節において述べる。

なお、ポリマにおいては粘弾性変形と塑性変形が同時に生じるので、その総称として非弾性変形という用語を用いている。

3.1 変形こう配の分解

本研究では、連続体スピン W と非弾性スピン W^i の差として与えられる下部構造スピン (Substructure スピン) $W^* \equiv W - W^i$ を共回転応力速度に導入するために、Shizawa-Zbib⁽⁷³⁾ の議論に基づき、図3.1に示すような中間配置を考える。図3.1では、初期配置 $\beta_{(l)}$ から現配置 $\beta_{(c)}$ への変形過程を次のように分解することを想定している。まず初期配置 $\beta_{(l)}$ から非弾性変形こう配 F^i により第1中間配置⁽⁷⁴⁾ $\beta_{(M)}$ へ、次に弾性ストレッチ \hat{U}^e により第2中間配置 $\beta_{(m)}$ へ、さらに第2中間配置 $\beta_{(m)}$ から弾・剛体回転 R^* により現配置 $\beta_{(c)}$ に写像されたと考える。このことは変形こう配 F を次のように分解することに他ならない。

$$F = R^* \bar{F} = F^* F^i = R^* \hat{U}^e F^i \dots \dots \dots (3.1)$$

ここで、 R^* は弾・剛体回転を表す直交テンソル、 \hat{U}^e は弾性回転を完全に取り除いた弾性ストレッチを表すテンソルであり、 F^i は非弾性変形を表すテンソルである (図3.1参照)。また、 $\bar{F} = \hat{U}^e F^i$ および $F^* = R^* \hat{U}^e$ である。ただし、 $R^* \hat{U}^e$ は F^* の極分解になっていないことに注意が必要である。すなわち、 R^* は $(\dot{F}^* F^{*-1})_A \equiv \dot{R}^* R^{*T}$ を満たすように定義された直交テンソルであり、全ての弾・剛体回転を含んだものとなっている。したがって、

$$\begin{aligned} (\dot{F}^* F^{*-1})_A &= \left[(R^* \hat{U}^e) \cdot (R^* \hat{U}^e)^{-1} \right]_A \\ &= \dot{R}^* R^{*T} + R^* (\hat{U}^e \hat{U}^{e-1})_A R^{*T} \equiv \dot{R}^* R^{*T} \dots \dots \dots (3.2) \end{aligned}$$

であるから、 \hat{U}^e は

$$(\hat{U}^e \hat{U}^{e-1})_A = \mathbf{0} \dots \dots \dots (3.3)$$

を満たすテンソルであり、回転成分が完全に取り除かれている。そのため、 $\hat{U}^e \hat{U}^{e-1}$ は対称部分のみを有しており、必ずしも \hat{U}^e は対称テンソルであるとは限らない。このような第2中間配置 $\beta_{(m)}$ を導入することによって $W^* \equiv W - W^i = \dot{R}^* R^{*T}$ が満足される⁽⁷³⁾。

現配置 $\beta_{(c)}$ における任意の2階のテンソル A は $A_{(m)} = R^{*T} A R^*$ のように配置変換され、 $A_{(m)}$ の物質時間微分は

$$\dot{A}_{(m)} = R^{*T} \overset{\nabla}{A} R^* \quad , \quad \overset{\nabla}{A} \equiv \dot{A} - W^* A + A W^* \dots \dots \dots (3.4)$$

で与えられる．式 (3.4) における共回転速度 $\overset{\nabla}{A}$ は Mandel-Kratovichil 速度⁽⁷⁵⁾⁽⁷⁶⁾ となる [補足 C.1]．したがって，構成式の参照配置として $\beta_{(m)}$ を採用すれば，共回転速度のスピンが W^* となることがわかる．また，弾性除荷は $\hat{U}^{e-1} R^{*T} F = F^i$ で表されるため， F^i は残留変形に相当し，第 1 中間配置は応力開放配置となる．

次に，分子鎖基底ベクトルの各配置における向きを考える．図 3.1 に示すように，初期配置 $\beta_{(l)}$ から第 1 中間配置 $\beta_{(M)}$ の非弾性変形においてすべり系 1 のみが活動した場合，金属の塑性変形では結晶基底の向きは変わることなく，結晶格子の形状を保ったまません断変形が生じるが，本理論では $s_{(l)}^{(1)}$ に平行な方向へのせん断変形が生じるため，すべり系 1 における分子鎖基底は回転しないが，その他の分子鎖基底は回転を受けると考えられる．次に，第 1 中間配置 $\beta_{(M)}$ から Isoclinic 配置 $\beta_{(m)}$ の弾性ストレッチ変形においては，前述のように \hat{U}^e からは回転成分が完全に除かれているため， \hat{U}^e によってたとえせん断変形が生じてても，それは主軸に沿う純粋せん断のみであると考えられる．したがって， \hat{U}^e によって分子鎖基底は回転を受けないものと考えられる．さらに，Isoclinic 配置 $\beta_{(m)}$ から現配置 $\beta_{(c)}$ までは弾・剛体回転を受けて写像されるため，各分子鎖基底は等しく回転する．

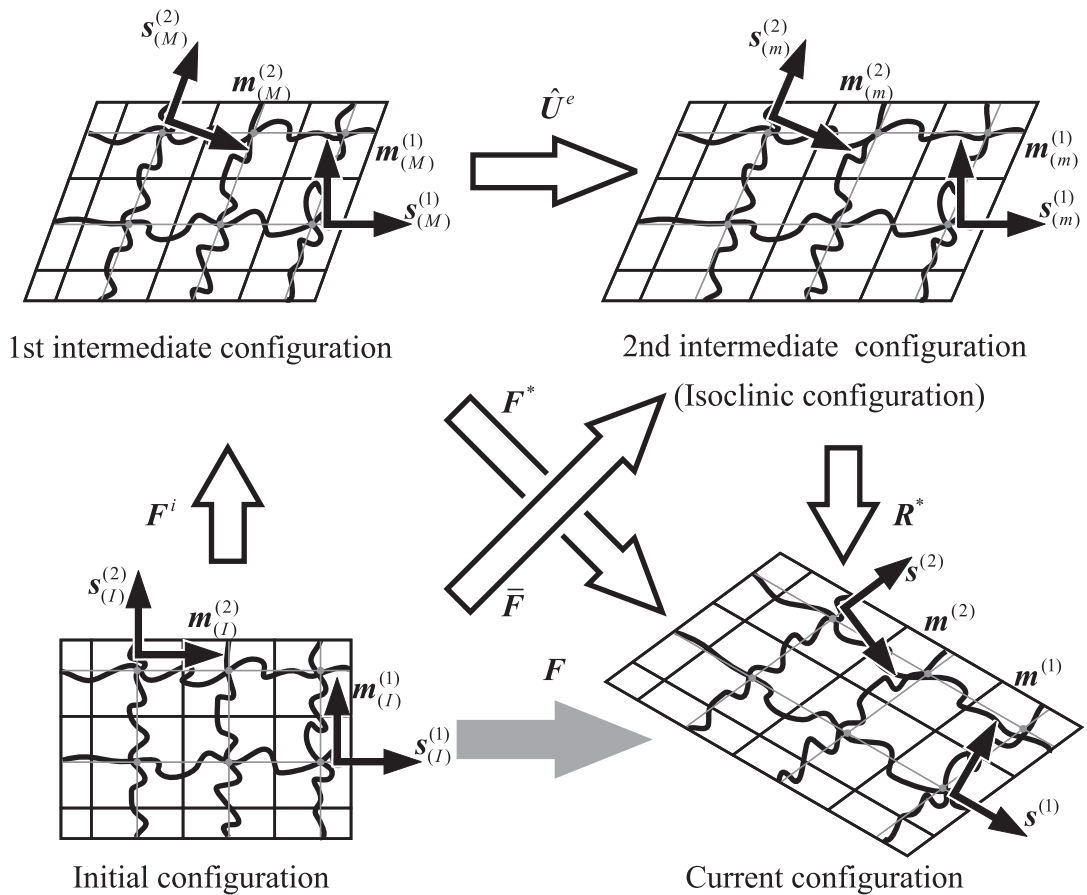


Fig. 3.1 Configurations for molecular chain structure

3.2 ひずみの弾・非弾性分解

3.2.1 ひずみの定義

従来と同様に微小線素の2乗の差を用いて、ひずみを定義する。図3.1より各配置での微小線素ベクトル間の関係は次のように表される。

$$d\mathbf{x} = \mathbf{R}^* d\mathbf{x}_{(m)} \dots\dots\dots (3.5)$$

$$d\mathbf{x}_{(m)} = \hat{\mathbf{U}}^e d\mathbf{x}_{(M)} \dots\dots\dots (3.6)$$

$$d\mathbf{x}_{(M)} = \mathbf{F}^i d\mathbf{x}_{(I)} \dots\dots\dots (3.7)$$

弾性ひずみおよび非弾性ひずみの参照配置が第1中間配置 $\beta_{(M)}$ および初期配置 $\beta_{(I)}$ であることを考慮し、微小線素 ds の2乗の差を変形させると次式のようなになる。

$$\begin{aligned} ds^2 - ds_{(I)}^2 &= ds^2 - ds_{(M)}^2 + ds_{(M)}^2 - ds_{(I)}^2 \\ &= (d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - d\mathbf{x}_{(M)} \cdot d\mathbf{x}_{(M)}) + (d\mathbf{x}_{(M)} \cdot d\mathbf{x}_{(M)} - d\mathbf{x}_{(I)} \cdot d\mathbf{x}_{(I)}) \\ &= (\mathbf{F}^* d\mathbf{x}_{(M)} \cdot \mathbf{F}^* d\mathbf{x}_{(M)} - d\mathbf{x}_{(M)} \cdot d\mathbf{x}_{(M)}) + (\mathbf{F}^i d\mathbf{x}_{(I)} \cdot \mathbf{F}^i d\mathbf{x}_{(I)} - d\mathbf{x}_{(I)} \cdot d\mathbf{x}_{(I)}) \\ &= 2\mathbf{E}_{(M)}^e \cdot d\mathbf{x}_{(M)} \otimes d\mathbf{x}_{(M)} + 2\mathbf{E}_{(I)}^i \cdot d\mathbf{x}_{(I)} \otimes d\mathbf{x}_{(I)} \dots\dots\dots (3.8) \end{aligned}$$

ただし、式(3.8)におけるGreenひずみの弾性部分 $\mathbf{E}_{(M)}^e$ および非弾性部分 $\mathbf{E}_{(I)}^i$ は次式のように定義される。

$$\mathbf{E}_{(M)}^e \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{*T} \mathbf{F}^* - \mathbf{I}) = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{U}}^{eT} \hat{\mathbf{U}}^e - \mathbf{I}) \dots\dots\dots (3.9)$$

$$\mathbf{E}_{(I)}^i \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{iT} \mathbf{F}^i - \mathbf{I}) \dots\dots\dots (3.10)$$

ここで、 \mathbf{I} は恒等テンソルを表す。式(3.5)、式(3.6)および式(3.7)を式(3.8)に適用すれば、各配置における弾性ひずみはそれぞれ

$$\mathbf{E}_{(I)}^e \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{F}^{iT} \mathbf{F}^i), \quad \mathbf{E}_{(m)}^e \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \hat{\mathbf{U}}^{e-1}), \quad \mathbf{E}^e \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \mathbf{F}^{*-T} \mathbf{F}^{*-1}) \dots\dots\dots (3.11)$$

のように定義できる。また、各配置における非弾性ひずみはそれぞれ次式のように定義できる。

$$\mathbf{E}_{(M)}^i \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \mathbf{F}^{i-T} \mathbf{F}^{i-1}), \quad \mathbf{E}_{(m)}^i \equiv \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} - \bar{\mathbf{F}}^{-T} \bar{\mathbf{F}}^{-1}), \quad \mathbf{E}^i \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{*-T} \mathbf{F}^{*-1} - \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1}) \dots (3.12)$$

3.2.2 弾・非弾性ひずみの各配置への変換則

各配置での弾性ひずみは次式のような関係として表現できる。

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{(I)}^e \cdot (d\mathbf{x}_{(I)} \otimes d\mathbf{x}_{(I)}) &= \mathbf{E}_{(M)}^e \cdot (d\mathbf{x}_{(M)} \otimes d\mathbf{x}_{(M)}) = \mathbf{E}_{(m)}^e \cdot (d\mathbf{x}_{(m)} \otimes d\mathbf{x}_{(m)}) \\ &= \mathbf{E}^e \cdot (d\mathbf{x} \otimes d\mathbf{x}) \dots\dots\dots (3.13) \end{aligned}$$

同様に各配置での非弾性ひずみは次式のような関係として表現できる。

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{(I)}^i \cdot (d\mathbf{x}_{(I)} \otimes d\mathbf{x}_{(I)}) &= \mathbf{E}_{(M)}^i \cdot (d\mathbf{x}_{(M)} \otimes d\mathbf{x}_{(M)}) = \mathbf{E}_{(m)}^i \cdot (d\mathbf{x}_{(m)} \otimes d\mathbf{x}_{(m)}) \\ &= \mathbf{E}^i \cdot (d\mathbf{x} \otimes d\mathbf{x}) \dots\dots\dots (3.14) \end{aligned}$$

式 (3.13) に式 (3.5), 式 (3.6) および式 (3.7) を代入すれば, 弾性ひずみの変換則が次式のように得られる.

$$\mathbf{E}^e = \mathbf{R}^* \mathbf{E}_{(m)}^e \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* (\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \mathbf{E}_{(M)}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1}) \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (3.15)$$

同様に, 式 (3.14) に式 (3.5), 式 (3.6) および式 (3.7) を代入すれば, 非弾性ひずみの変換則が次式のように得られる.

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^i &= \mathbf{R}^* \mathbf{E}_{(m)}^i \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* (\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \mathbf{E}_{(M)}^i \hat{\mathbf{U}}^{e-1}) \mathbf{R}^{*T} \\ &= \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^{e-T} (\mathbf{F}^{i-T} \mathbf{E}_{(I)}^i \mathbf{F}^{i-1}) \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (3.16) \end{aligned}$$

式 (3.15) および式 (3.16) から, ひずみの変換則が次式のように得られる.

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= \mathbf{R}^* \mathbf{E}_{(m)} \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* (\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \mathbf{E}_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{e-1}) \mathbf{R}^{*T} \\ &= \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^{e-T} (\mathbf{F}^{i-T} \mathbf{E}_{(I)} \mathbf{F}^{i-1}) \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (3.17) \end{aligned}$$

3.2.3 微小弾性変形の仮定

金属材料に対する有限変形理論では, 弾性変形は微小であり塑性変形は有限であると仮定することが多く, 本理論に対してもこの微小弾性変形の仮定を導入する. すなわち, 弾性ストレッチ $\hat{\mathbf{U}}^e$ の 2 次に関する項においては $\hat{\mathbf{U}}^e = \mathbf{I}$ とみなす. 一方, \mathbf{R}^* には弾性回転が含まれているが, 剛体回転と区別することができないので, \mathbf{R}^* に関しては微小弾性変形の仮定は適用しない. 微小弾性変形の仮定を導入すると, 第 1 中間配置におけるひずみ $\mathbf{E}_{(M)}$ および第 2 中間配置におけるひずみ $\mathbf{E}_{(m)}$ は式 (3.17) から次式のように近似できる.

$$\mathbf{E}_{(m)} = \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \mathbf{E}_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \approx \mathbf{E}_{(M)} \dots\dots\dots (3.18)$$

微小弾性変形の仮定を考慮して式 (3.15) を書き直すと, 弾性ひずみの変換則は

$$\mathbf{E}^e = \mathbf{R}^* \mathbf{E}_{(m)}^e \mathbf{R}^{*T} \approx \mathbf{R}^* \mathbf{E}_{(M)}^e \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (3.19)$$

となる.

3.3 ひずみ速度の弾・非弾性分解

弾性変形の参照配置は第 1 中間配置 $\beta_{(M)}$ であるため, $\mathbf{E}_{(M)}^e$ の物質時間導関数は次式のようになる.

$$\dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e \approx \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e = (\mathbf{R}^{*T} \dot{\mathbf{E}}^e \mathbf{R}^*) \dots\dots\dots (3.20)$$

Mandel-Kratochvil 速度を用いれば, 弾性ひずみ速度の変換則は次式のように得られる.

$$\overset{\nabla}{\mathbf{E}}^e = \mathbf{R}^* \overset{\nabla}{\mathbf{E}}_{(m)}^e \mathbf{R}^{*T} \approx \mathbf{R}^* \overset{\nabla}{\mathbf{E}}_{(M)}^e \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (3.21)$$

ここで, $\overset{\nabla}{\mathbf{E}}^e$ は

$$\overset{\nabla}{\mathbf{E}}^e \equiv \dot{\mathbf{E}}^e - \mathbf{W}^* \mathbf{E}^e + \mathbf{E}^e \mathbf{W}^* \dots\dots\dots (3.22)$$

で与えられる. ただし, $\mathbf{W}^* \equiv \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T}$ である [補足 C.2.4].

一方, 非弾性ひずみの変換則を表す式 (3.16) は次式のように書き換えられる.

$$\mathbf{E}^i = \mathbf{R}^* \mathbf{E}_{(m)}^i \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{F}^{*T} \mathbf{E}_{(M)}^i \mathbf{F}^{*-1} = \mathbf{F}^{-T} \mathbf{E}_{(I)}^i \mathbf{F}^{-1} \dots\dots\dots (3.23)$$

非弾性変形の参照配置が初期配置 $\beta_{(I)}$ であることを考慮し, $\mathbf{E}_{(I)}^i$ の物質時間微分は

$$\dot{\mathbf{E}}_{(I)}^i = (\mathbf{F}^{iT} \mathbf{E}_{(M)}^i \mathbf{F}^i) \cdot = (\bar{\mathbf{F}}^T \mathbf{E}_{(m)}^i \bar{\mathbf{F}}) \cdot = (\mathbf{F}^T \mathbf{E}^i \mathbf{F}) \cdot \dots \dots \dots (3.24)$$

となり, $\dot{\mathbf{E}}_{(I)}^i = (\mathbf{F}^{iT} \mathbf{E}_{(M)}^i \mathbf{F}^i) \cdot$ を計算すれば

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{E}}_{(I)}^i &= \dot{\mathbf{F}}^{iT} \mathbf{E}_{(M)}^i \mathbf{F}^i + \mathbf{F}^{iT} \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^i \mathbf{F}^i + \mathbf{F}^{iT} \mathbf{E}_{(M)}^i \dot{\mathbf{F}}^i \\ &= \mathbf{F}^{iT} (\dot{\mathbf{E}}_{(M)}^i + \mathbf{L}_{(M)}^{iT} \mathbf{E}_{(M)}^i + \mathbf{E}_{(M)}^i \mathbf{L}_{(M)}^i) \mathbf{F}^i \dots \dots \dots (3.25) \end{aligned}$$

となる. 式 (3.24) における他の関係も同様に計算すれば

$$\dot{\mathbf{E}}_{(I)}^i = \bar{\mathbf{F}}^T (\dot{\mathbf{E}}_{(m)}^i + \bar{\mathbf{L}}_{(m)}^T \mathbf{E}_{(m)}^i + \mathbf{E}_{(m)}^i \bar{\mathbf{L}}_{(m)}) \bar{\mathbf{F}} \dots \dots \dots (3.26)$$

$$\dot{\mathbf{E}}_{(I)}^i = \mathbf{F}^T (\dot{\mathbf{E}}^i + \mathbf{L}^T \mathbf{E}^i + \mathbf{E}^i \mathbf{L}) \mathbf{F} \dots \dots \dots (3.27)$$

が得られる. ただし, $\mathbf{L}_{(M)}^i \equiv \dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1}$, $\bar{\mathbf{L}}_{(m)} = \mathbf{L}_{(m)}^e + \mathbf{L}_{(m)}^i \equiv \hat{\mathbf{U}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} + \hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} = \dot{\bar{\mathbf{F}}} \bar{\mathbf{F}}^{-1}$ および $\mathbf{L} \equiv \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}$ は各配置における速度こう配である [補足 C.2.3]. 式 (3.25), 式 (3.26) および式 (3.27) から非弾性ひずみ速度の変換則が次式のように得られる.

$$\hat{\mathbf{E}}^i = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{E}}_{(m)}^i \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{F}^{*-T} \hat{\mathbf{E}}_{(M)}^i \mathbf{F}^{*-1} = \mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{E}}_{(I)}^i \mathbf{F}^{-1} \dots \dots \dots (3.28)$$

ここで, $\hat{\mathbf{A}}$ は初期配置 $\beta_{(I)}$ を参照したときの Cotter-Rivlin 速度であり, それぞれ次式のように定義できる [補足 C.3].

$$\hat{\mathbf{E}}_{(M)}^i \equiv \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^i + \mathbf{L}_{(M)}^{iT} \mathbf{E}_{(M)}^i + \mathbf{E}_{(M)}^i \mathbf{L}_{(M)}^i \dots \dots \dots (3.29)$$

$$\hat{\mathbf{E}}_{(m)}^i \equiv \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^i + \bar{\mathbf{L}}_{(m)}^T \mathbf{E}_{(m)}^i + \mathbf{E}_{(m)}^i \bar{\mathbf{L}}_{(m)} \dots \dots \dots (3.30)$$

$$\hat{\mathbf{E}}^i \equiv \dot{\mathbf{E}}^i + \mathbf{L}^T \mathbf{E}^i + \mathbf{E}^i \mathbf{L} \dots \dots \dots (3.31)$$

3.4 変形速度の弾・非弾性分解

3.4.1 速度こう配の弾・非弾性分解

現配置 $\beta_{(C)}$ および初期配置 $\beta_{(I)}$ における速度こう配は次式のように定義される [補足 C.2.1].

$$\mathbf{L} \equiv \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} \dots \dots \dots (3.32)$$

$$\mathbf{L}_{(I)} \equiv \mathbf{F}^{-1} \dot{\mathbf{F}} \dots \dots \dots (3.33)$$

よって, 速度こう配の変換則は

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &\equiv \mathbf{R}^* \mathbf{L}_{(m)} \mathbf{R}^{*T} \equiv \mathbf{R}^* (\hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{L}_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{e-1}) \mathbf{R}^{*T} \\ &\equiv \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e (\mathbf{F}^i \mathbf{L}_{(I)} \mathbf{F}^{i-1}) \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (3.34) \end{aligned}$$

のように得られる ⁽⁷³⁾[補足 C.2.2]. ここで, 式 (3.1) を式 (3.32) に代入すると次式のようになる.

$$\begin{aligned}
 L &= \dot{F}F^{-1} \\
 &= (R^* \hat{U}^e F^i) (\dot{R}^* \hat{U}^e F^i)^{-1} \\
 &= \dot{R}^* R^{*T} + R^* \dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1} R^{*T} + R^* \hat{U}^e \dot{F}^i F^{i-1} \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots\dots\dots (3.35)
 \end{aligned}$$

式 (3.35) から，現配置における速度こう配の弾・剛体回転部分 L^* ，弾性ストレッチ部分 L^e および非弾性部分 L^i は次のように定義される [補足 C.2.3] .

$$L^* \equiv \dot{R}^* R^{*T} \dots\dots\dots (3.36)$$

$$L^e \equiv R^* \dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots\dots\dots (3.37)$$

$$L^i \equiv R^* \hat{U}^e \dot{F}^i F^{i-1} \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots\dots\dots (3.38)$$

3.4.2 各配置における変形速度

式 (3.37) を用いれば，現配置 $\beta_{(c)}$ における変形速度の弾性部分 D^e は次式のように与えられる .

$$D^e = (L^e)_S = (R^* \dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1} R^{*T})_S = R^* \dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots\dots\dots (3.39)$$

ただし，式 (3.3) で表される $\hat{U}^e \hat{U}^{e-1}$ の対称性を利用している . また，補足 C.2.3 および補足 C.2.4 における検討 (式 (C.19) および式 (C.39)) から，第 2 中間配置 $\beta_{(m)}$ における変形速度の弾性部分 $D_{(m)}^e$ は

$$D_{(m)}^e = (L_{(m)}^e)_S = \dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1} \dots\dots\dots (3.40)$$

となる . 一方，式 (3.38) および微小弾性変形の仮定を用いて現配置 $\beta_{(c)}$ における変形速度の非弾性部分 D^i は

$$D^i = (L^i)_S = (R^* \hat{U}^e \dot{F}^i F^{i-1} \hat{U}^{e-1} R^{*T})_S = R^* (\hat{U}^e \dot{F}^i F^{i-1} \hat{U}^{e-1})_S R^{*T} \approx R^* (\dot{F}^i F^{i-1})_S R^{*T} \dots\dots\dots (3.41)$$

と書ける . 補足 C.2.3 および補足 C.2.4 における検討 (式 (C.16)，式 (C.20)，式 (C.47) および式 (C.48)) から，第 1 中間配置 $\beta_{(M)}$ および第 2 中間配置 $\beta_{(m)}$ における変形速度の非弾性部分 $D_{(M)}^i$ および $D_{(m)}^i$ は次式のように表される .

$$D_{(m)}^i = (L_{(m)}^i)_S = (\hat{U}^e \dot{F}^i F^{i-1} \hat{U}^{e-1})_S \approx (\dot{F}^i F^{i-1})_S = (L_{(M)}^i)_S = D_{(M)}^i \dots\dots\dots (3.42)$$

3.4.3 ひずみ速度と変形速度

ひずみ速度と変形速度の弾性部分における関係を求めるため，まず式 (3.9) の両辺を物質時間微分すると次式のようになる .

$$\dot{E}_{(M)}^e = \frac{1}{2} (\dot{\hat{U}}^{eT} \hat{U}^e + \hat{U}^{eT} \dot{\hat{U}}^e) \dots\dots\dots (3.43)$$

一方，式 (3.40) の対称性を利用して

$$D_{(m)}^e = \dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1} = \frac{1}{2} (\hat{U}^{e-T} \dot{\hat{U}}^{eT} + \dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1}) \dots\dots\dots (3.44)$$

微小弾性変形の仮定を用いれば，式 (3.43) および式 (3.44) から次式の関係が得られる．

$$\begin{aligned}
 \mathbf{D}_{(m)}^e &= \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \hat{\mathbf{U}}^{eT} \hat{\mathbf{U}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} + \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \hat{\mathbf{U}}^{eT} \hat{\mathbf{U}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1}) \\
 &= \frac{1}{2} \hat{\mathbf{U}}^{e-T} (\hat{\mathbf{U}}^{eT} \hat{\mathbf{U}}^e + \hat{\mathbf{U}}^{eT} \hat{\mathbf{U}}^e) \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \\
 &= \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \hat{\mathbf{E}}_{(M)}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \\
 &\approx \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e \dots\dots\dots (3.45)
 \end{aligned}$$

また，ひずみ速度と変形速度の非弾性部分の関係を求めるために，まず式 (3.10) の両辺を物質時間微分すると次式が得られる．

$$\dot{\mathbf{E}}_{(I)}^i = \frac{1}{2}(\dot{\mathbf{F}}^{iT} \mathbf{F}^i + \mathbf{F}^{iT} \dot{\mathbf{F}}^i) \dots\dots\dots (3.46)$$

一方，式 (3.42) は次式のように分解できる．

$$\mathbf{D}_{(M)}^i = (\dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1})_S = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{i-T} \dot{\mathbf{F}}^{iT} + \dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1}) \dots\dots\dots (3.47)$$

式 (3.46) および式 (3.47) から次式の関係が得られる．

$$\begin{aligned}
 \mathbf{D}_{(M)}^i &= \frac{1}{2}(\mathbf{F}^{i-T} \dot{\mathbf{F}}^{iT} \mathbf{F}^i \mathbf{F}^{i-1} + \mathbf{F}^{i-T} \mathbf{F}^{iT} \dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1}) \\
 &= \frac{1}{2} \mathbf{F}^{i-T} (\dot{\mathbf{F}}^{iT} \mathbf{F}^i + \mathbf{F}^{iT} \dot{\mathbf{F}}^i) \mathbf{F}^{i-1} \\
 &= \mathbf{F}^{i-T} \dot{\mathbf{E}}_{(I)}^i \mathbf{F}^{i-1} \dots\dots\dots (3.48)
 \end{aligned}$$

式 (3.39)，式 (3.40) および式 (3.45) から各配置における弾性変形速度と弾性ひずみ速度の関係が

$$\mathbf{D}^e = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(m)}^e \mathbf{R}^{*T} \approx \mathbf{R}^* \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (3.49)$$

と得られ，式 (3.41)，式 (3.42) および式 (3.48) から各配置における非弾性変形速度と非弾性ひずみ速度の関係が

$$\mathbf{D}^i = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(m)}^i \mathbf{R}^{*T} \approx \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(M)}^i \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* \mathbf{F}^{i-T} \dot{\mathbf{E}}_{(I)}^i \mathbf{F}^{i-1} \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (3.50)$$

と得られる．式 (3.21) と式 (3.49) および式 (3.28) と式 (3.50) を比べ，微小弾性変形の仮定を用いれば，各配置における弾性および非弾性ひずみと変形速度の関係はそれぞれ次式のようになる．

$$\mathbf{D}^e \approx \overset{\nabla}{\mathbf{E}}^e \quad , \quad \mathbf{D}_{(m)}^e \approx \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e \dots\dots\dots (3.51)$$

$$\mathbf{D}^i \approx \overset{\Delta}{\mathbf{E}}^i \quad , \quad \mathbf{D}_{(m)}^i \approx \overset{\Delta}{\mathbf{E}}_{(m)}^i \quad , \quad \mathbf{D}_{(M)}^i \approx \overset{\Delta}{\mathbf{E}}_{(M)}^i \dots\dots\dots (3.52)$$

3.4.4 変形速度と変形尺度

式 (3.51) および式 (3.52) を用いて第 2 中間配置 $\beta_{(m)}$ での変形速度は次式のように表現できる．

$$\mathbf{D}_{(m)} = \mathbf{D}_{(m)}^e + \mathbf{D}_{(m)}^i \approx \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \overset{\Delta}{\mathbf{E}}_{(m)}^i \dots\dots\dots (3.53)$$

式 (3.53) を物質時間積分すれば

$$\int_{\mathcal{T}} \mathbf{D}_{(m)} dt = \int_{\mathcal{T}} \mathbf{D}_{(m)}^e dt + \int_{\mathcal{T}} \mathbf{D}_{(m)}^i dt \approx \mathbf{E}_{(m)}^e + \bar{\mathbf{E}}_{(m)}^i \quad , \quad \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \overset{\Delta}{\mathbf{E}}_{(m)}^i \approx \mathbf{D}_{(m)}^e + \mathbf{D}_{(m)}^i \dots\dots\dots (3.54)$$

となる．すなわち，式 (3.54) から

$$\bar{E}_{(m)}^i \neq E_{(m)}^i \dots\dots\dots (3.55)$$

であることがわかる．式 (3.55) における非弾性ひずみ $\bar{E}_{(m)}^i$ は熱力学的状態変数となり得ない回復不可能な経路に依存する非弾性変形尺度と定義できる．それに対し，弾性ひずみ $E_{(m)}^e$ は熱力学的状態変数となる回復可能な弾性ひずみ尺度であると定義できる．以上のことから，現配置から弾・剛体回転を取り除いた第 2 中間配置 $\beta_{(m)}$ で定義された量は客観性を有するので，第 2 中間配置を構成式の参照配置に選ぶのが妥当であるといえる．

3.5 非弾性変形速度および非弾性スピンの導出

3.5.1 非弾性速度こう配の配置変換則

補足 C.2.3 における検討から，初期配置 $\beta_{(I)}$ における非弾性速度こう配 $L_{(I)}^i$ は次式で定義される．

$$L_{(I)}^i = F^{i-1} \dot{F}^i \dots\dots\dots (3.56)$$

また，式 (3.34) で表される速度こう配の配置変換則と同様に，非弾性速度こう配 L^i の配置変換則は次のように表される [補足 C.2.3] ．

$$\begin{aligned} L^i &= R^* L_{(m)}^i R^{*T} = R^* (\hat{U}^e L_{(M)}^i \hat{U}^{e-1}) R^{*T} \\ &= R^* \hat{U}^e (F^i L_{(I)}^i F^{i-1}) \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots\dots\dots (3.57) \end{aligned}$$

また，結晶塑性論の体系から， $L_{(I)}^i$ は全すべり系の非弾性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ およびすべり面に垂直な非弾性ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)}$ の総和をとり，次式で表される．

$$L_{(I)}^i \equiv \sum_{\alpha} (\dot{\gamma}^{(\alpha)} P_{(I)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} Q_{(I)}^{(\alpha)}) \dots\dots\dots (3.58)$$

ここで，初期配置における分子鎖基底テンソル $P_{(I)}^{(\alpha)}$ および $Q_{(I)}^{(\alpha)}$ はそれぞれ次のように定義される．

$$P_{(I)}^{(\alpha)} \equiv s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.59)$$

$$Q_{(I)}^{(\alpha)} \equiv s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes s_{(I)}^{(\alpha)} + m_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} + t_{(I)}^{(\alpha)} \otimes t_{(I)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.60)$$

式 (3.58) における両辺のトレース (跡) をとれば

$$\text{tr} L_{(I)}^i = \sum_{\alpha} [\dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(I)}^{(\alpha)} \cdot m_{(I)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} (s_{(I)}^{(\alpha)} \cdot s_{(I)}^{(\alpha)} + m_{(I)}^{(\alpha)} \cdot m_{(I)}^{(\alpha)} + t_{(I)}^{(\alpha)} \cdot t_{(I)}^{(\alpha)})] \dots\dots\dots (3.61)$$

となり， $s_{(I)}^{(\alpha)} \cdot m_{(I)}^{(\alpha)} = 0$ および $s_{(I)}^{(\alpha)} \cdot s_{(I)}^{(\alpha)} + m_{(I)}^{(\alpha)} \cdot m_{(I)}^{(\alpha)} + t_{(I)}^{(\alpha)} \cdot t_{(I)}^{(\alpha)} = 3$ であるから，式 (3.61) は結局次のように整理される．

$$\text{tr} L_{(I)}^i = \sum_{\alpha} (3 \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)}) \dots\dots\dots (3.62)$$

よって，すべり面に垂直な非弾性ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)}$ は次のように表される．

$$\sum_{\alpha} \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} = \frac{1}{3} (\text{tr} L_{(I)}^i) \dots\dots\dots (3.63)$$

すなわち、すべり面に垂直な非弾性ひずみ速度は、非弾性速度こう配の等方部分となる。したがって、式(3.58)における $\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(I)}^{(\alpha)}$ の項は、非弾性速度こう配の偏差部分であることがわかる。

一方、第1中間配置 $\beta_{(M)}$ における非弾性速度こう配 $L_{(M)}^i$ は式(3.57)および式(3.58)から、次のように表される。

$$\begin{aligned}
 L_{(M)}^i &= \mathbf{F}^i L_{(I)}^i \mathbf{F}^{i-1} \\
 &= \sum_{\alpha} \mathbf{F}^i \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(I)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(I)}^{(\alpha)} \right) \mathbf{F}^{i-1} \\
 &= \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{F}^i s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{i-1} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{F}^i \left(s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes s_{(I)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)} \right) \mathbf{F}^{i-1} \right] \\
 &= \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} \| \mathbf{F}^i s_{(I)}^{(\alpha)} \| \| \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{i-1} \| s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right. \\
 &\quad \left. + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{F}^i \left(s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes s_{(I)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)} \right) \mathbf{F}^{i-1} \right] \dots \dots \dots (3.64)
 \end{aligned}$$

ただし、分子鎖基底ベクトルは回転のみを受け、その大きさは変わらず正規性を保つとし、変形こう配の回転成分のみによって配置変換されると考えている。なぜならば、基底 $s_{(\bullet)}^{(\alpha)}$ や $\mathbf{m}_{(\bullet)}^{(\alpha)}$ はすべり系の向きのみを表すものであり、材料の変形とともに伸縮を受けてその大きさが変化するようなベクトルではないからである。すなわち、 $s_{(I)}^{(\alpha)}$ が写像 \mathbf{F}^i を受けて第1中間配置 $\beta_{(M)}$ に写されるならば、 $\mathbf{F}^i s_{(I)}^{(\alpha)}$ の大きさは $\| \mathbf{F}^i s_{(I)}^{(\alpha)} \|$ であり、向きは $s_{(M)}^{(\alpha)}$ 方向であるから、 $\mathbf{F}^i s_{(I)}^{(\alpha)}$ は $\| \mathbf{F}^i s_{(I)}^{(\alpha)} \| s_{(M)}^{(\alpha)}$ のように書くことができる。ここで、 $\|a\|$ はベクトル a の大きさを表す。

また、式(3.64)は次のように整理される [補足 C.4][補足 C.5]。

$$\begin{aligned}
 L_{(M)}^i &= \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \left(s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes s_{(M)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \right] \\
 &= \sum_{\alpha} \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(M)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (3.65)
 \end{aligned}$$

式(3.57)、式(3.65)および微小弾性変形の仮定から、第2中間配置 $\beta_{(m)}$ ならびに現配置 $\beta_{(c)}$ における非弾性速度こう配についても同様に、それぞれ次のように求められる。

$$\begin{aligned}
 L_{(m)}^i &= \hat{\mathbf{U}}^e L_{(M)}^i \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \\
 &= \sum_{\alpha} \hat{\mathbf{U}}^e \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(M)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \\
 &= \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} \hat{\mathbf{U}}^e s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \hat{\mathbf{U}}^e \left(s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes s_{(M)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \right] \\
 &= \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} \| \hat{\mathbf{U}}^e s_{(M)}^{(\alpha)} \| \| \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \| s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} \right. \\
 &\quad \left. + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \hat{\mathbf{U}}^e \left(s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes s_{(M)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \right] \\
 &\approx \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \left(s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes s_{(m)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \right] \\
 &= \sum_{\alpha} \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (3.66)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 L^i &= R^* L_{(m)}^i R^{*T} \\
 &= \sum_{\alpha} R^* \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} P_{(m)}^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} Q_{(m)}^{(\alpha)} \right) R^{*T} \\
 &= \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} R^* s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes m_{(m)}^{(\alpha)} R^{*T} + \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} R^* \left(s_{(m)}^{(\alpha)} \otimes s_{(m)}^{(\alpha)} + m_{(m)}^{(\alpha)} \otimes m_{(m)}^{(\alpha)} + t_{(m)}^{(\alpha)} \otimes t_{(m)}^{(\alpha)} \right) R^{*T} \right] \\
 &= \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} \left(s^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)} + m^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} + t^{(\alpha)} \otimes t^{(\alpha)} \right) \right] \\
 &= \sum_{\alpha} \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} P^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} Q^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (3.67)
 \end{aligned}$$

なお，式 (3.56) および式 (3.57) より $L_{(M)}^i = \dot{F}^i F^{i-1}$ であるから，式 (3.65) より F^i の発展方程式が

$$\begin{aligned}
 \dot{F}^i &= \sum_{\alpha} \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} P_{(M)}^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} Q_{(M)}^{(\alpha)} \right) F^i \\
 &\approx R^{*T} \sum_{\alpha} \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} P^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} Q^{(\alpha)} \right) R^* F^i \dots \dots \dots (3.68)
 \end{aligned}$$

のように得られる．ただし，ここでも微小弾性変形の仮定を用いている．

3.5.2 非弾性変形速度および非弾性スピンの運動学的関係式

3.4.1 項における検討より，速度こう配 L を弾・剛体回転部分，弾性ストレッチ部分および非弾性部分に分解すれば

$$L = L^* + L^e + L^i \dots \dots \dots (3.69)$$

となる．さらに対称部分と反対称部分に分解すれば

$$\begin{aligned}
 L &= (L^*)_S + (L^e)_S + (L^i)_S + (L^*)_A + (L^e)_A + (L^i)_A \\
 &= D^* + D^e + D^i + W^* + W^e + W^i \\
 &= D + W \dots \dots \dots (3.70)
 \end{aligned}$$

となる．ここで， $D = L_S$ は変形速度テンソルおよび $W = L_A$ は連続体スピンテンソルである．補足 C.2.4 より， $(L^*)_S = D^* = \mathbf{0}$ および $(L^e)_A = W^e = \mathbf{0}$ であるから，式 (3.70) は

$$L = D^e + D^i + W^* + W^i \dots \dots \dots (3.71)$$

と書ける．すなわち， D および W は次のように分解することができる．

$$D = D^e + D^i \dots \dots \dots (3.72)$$

$$W = W^* + W^i \dots \dots \dots (3.73)$$

ここで， D^e および D^i はそれぞれ弾性変形速度および非弾性変形速度であり， W^* および W^i はそれぞれ下部構造スピン⁽⁷⁵⁾⁽⁷⁶⁾ および非弾性スピンである．式 (3.72) および式 (3.73) と式 (3.36) ~ (3.38) を比較することによって

$$L^i = D^i + W^i = R^* \hat{U}^e \dot{F}^i F^{i-1} \hat{U}^e R^{*T} \dots \dots \dots (3.74)$$

$$D^e = R^* \dot{U}^e \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots\dots\dots (3.75)$$

$$W^* = \dot{R}^* R^{*T} \dots\dots\dots (3.76)$$

が得られる．

ここで，非弾性変形速度 D^i および非弾性スピン W^i は，式 (3.67) の右辺を対称部分と反対称部分に分解することにより，それぞれ次のように表される．

$$D^i = \sum_{\alpha} \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} P_S^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} Q^{(\alpha)} \right) \dots\dots\dots (3.77)$$

$$W^i = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_A^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.78)$$

ただし， $P_S^{(\alpha)}$ および $P_A^{(\alpha)}$ はそれぞれ次のように表される．

$$P_S^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left(s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} + m^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)} \right) \dots\dots\dots (3.79)$$

$$P_A^{(\alpha)} = \frac{1}{2} \left(s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} - m^{(\alpha)} \otimes s^{(\alpha)} \right) \dots\dots\dots (3.80)$$

なお， $P_S^{(\alpha)}$ は Schmid テンソルである．本理論は従来のポリマを対象とした現象論的塑性論とは異なり，式 (3.77) および式 (3.78) に示した運動学的関係式から非弾性変形速度および非弾性スピンを計算することができるという金属における結晶塑性論と同様の利点をもつ．

3.6 分子鎖基底の発展式

分子鎖基底の発展式を導出するにあたり，まず初期配置 $\beta_{(I)}$ から第 1 中間配置 $\beta_{(M)}$ へ至る変形過程である非弾性変形こう配 F^i をさらにその回転成分とストレッチ成分に次式のように分解する (図 3.2 参照)．

$$F^i = \hat{R}^i \hat{U}^i \dots\dots\dots (3.81)$$

ここで， \hat{R}^i は $(\dot{F}^i F^{i-1})_A \equiv \dot{\hat{R}}^i \hat{R}^{iT}$ を満たすように定義した非弾性回転を表す直交テンソル， \hat{U}^i は非弾性回転を完全に取り除いた非弾性ストレッチである．すなわち，式 (3.81) は極分解ではなく， \hat{U}^i は $(\dot{\hat{U}}^i \hat{U}^{i-1})_A = \mathbf{0}$ を満たすテンソルとなっており，回転成分が完全に取り除かれている．また，図 3.2 中の $s_{(M)}^{(1)}$ は初期配置から非弾性ストレッチを受けた配置におけるすべり系 1 の分子鎖基底を表す．

図 3.1 によると，分子鎖基底ベクトルの初期配置 $\beta_{(I)}$ から第 1 中間配置 $\beta_{(M)}$ への回転は，自身のすべり系の活動によっては起こらず，他のすべり系の活動により起こる．すべり系 α の活動により起こる非弾性回転を表す直交テンソルを $\hat{R}^{i(\alpha)}$ と表し ($\hat{R}^i = \prod_{\alpha} \hat{R}^{i(\alpha)}$)，すべり系 α 以外の全てのすべり系の活動により起こる非弾性回転を表す直交テンソルを $\overline{\hat{R}}^{i(\alpha)} = \prod_{\beta \neq \alpha} \hat{R}^{i(\beta)}$ と表すと，分子鎖基底ベクトル $s^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)}$ に対する配置変換則はそれぞれ次のようになる．

$$s_{(m)}^{(\alpha)} = R^* s_{(M)}^{(\alpha)} = R^* s_{(I)}^{(\alpha)} = R^* \overline{\hat{R}}^{i(\alpha)} s_{(I)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.82)$$

$$m_{(m)}^{(\alpha)} = R^* m_{(M)}^{(\alpha)} = R^* m_{(I)}^{(\alpha)} = R^* \hat{R}^{i(\alpha)} m_{(I)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.83)$$

ただし通常の結晶塑性論と同様に，基底は回転のみを受けその大きさは変わらないものとし，他すべり系の活動による F の回転成分 ($R^* \overline{\hat{R}}^{i(\alpha)}$) のみによって変換されると考え，自己すべり系の活動による非弾性回転

$\hat{R}^{i(\alpha)}$ ，非弾性ストレッチ \hat{U}^i および弾性ストレッチ \hat{U}^e によっては変換を受けないとしている．初期配置は時間的に変化せず $\dot{s}_{(l)}^{(\alpha)} = 0$ であるから，式 (3.82) の両辺を時間微分すれば次式が得られる．

$$\begin{aligned} \dot{s}^{(\alpha)} &= \left(\mathbf{R}^* \bar{\hat{R}}^{i(\alpha)} s_{(l)}^{(\alpha)} \right) \dot{} \\ &= \dot{\mathbf{R}}^* \bar{\hat{R}}^{i(\alpha)} s_{(l)}^{(\alpha)} + \mathbf{R}^* \dot{\bar{\hat{R}}}^{i(\alpha)} s_{(l)}^{(\alpha)} \\ &= \dot{\mathbf{R}}^* \bar{\hat{R}}^{i(\alpha)} \left(\bar{\hat{R}}^{i(\alpha)T} \mathbf{R}^{*T} \right) s^{(\alpha)} + \mathbf{R}^* \dot{\bar{\hat{R}}}^{i(\alpha)} \left(\bar{\hat{R}}^{i(\alpha)T} \mathbf{R}^{*T} \right) s^{(\alpha)} \\ &= \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} s^{(\alpha)} + \mathbf{R}^* \left(\dot{\bar{\hat{R}}}^{i(\alpha)} \bar{\hat{R}}^{i(\alpha)T} \right) \mathbf{R}^{*T} s^{(\alpha)} \dots\dots\dots (3.84) \end{aligned}$$

いま仮にすべり系の総数が3で，すべり系2およびすべり系3が活動する場合を想定して $\bar{\hat{R}}^{i(1)} = \hat{R}^{i(3)} \hat{R}^{i(2)}$ とすると，初期配置 $\beta_{(l)}$ におけるすべり系1の分子鎖基底 $s_{(l)}^{(1)}$ は図3.2のように第1中間配置 $\beta_{(M)}$ における基底 $s_{(M)}^{(1)}$ へ変換される．ただし，分子鎖基底 $s_{(l)}^{(1)}$ は非弾性ストレッチ \hat{U}^i および自身のすべり系1の活動による非弾性回転 $\hat{R}^{i(1)}$ による変換を受けても回転しない．ここで，図3.2中の $s_{(M)}^{(1)}$ は初期配置 $\beta_{(l)}$ から非弾性ストレッチ \hat{U}^i およびすべり系1の活動による非弾性回転 $\hat{R}^{i(1)}$ により変換された配置における分子鎖基底， $s_{(M')}^{(1)}$ は第1中間配置 $\beta_{(M)}$ からすべり系3の活動による非弾性回転 $\hat{R}^{i(3)}$ 分だけ戻した配置における分子鎖基底を表す．このとき， $\bar{\hat{R}}^{i(1)} \bar{\hat{R}}^{i(1)T}$ は

$$\begin{aligned} \dot{\bar{\hat{R}}}^{i(1)} \bar{\hat{R}}^{i(1)T} &= (\hat{R}^{i(3)} \hat{R}^{i(2)}) \cdot (\hat{R}^{i(3)} \hat{R}^{i(2)})^T \\ &= (\hat{R}^{i(3)} \hat{R}^{i(2)}) (\hat{R}^{i(2)T} \hat{R}^{i(3)T}) + (\hat{R}^{i(3)} \dot{\hat{R}}^{i(2)}) (\hat{R}^{i(2)T} \hat{R}^{i(3)T}) \\ &= \dot{\hat{R}}^{i(3)} \hat{R}^{i(3)T} + \hat{R}^{i(3)} \dot{\hat{R}}^{i(2)} \hat{R}^{i(2)T} \hat{R}^{i(3)T} \dots\dots\dots (3.85) \end{aligned}$$

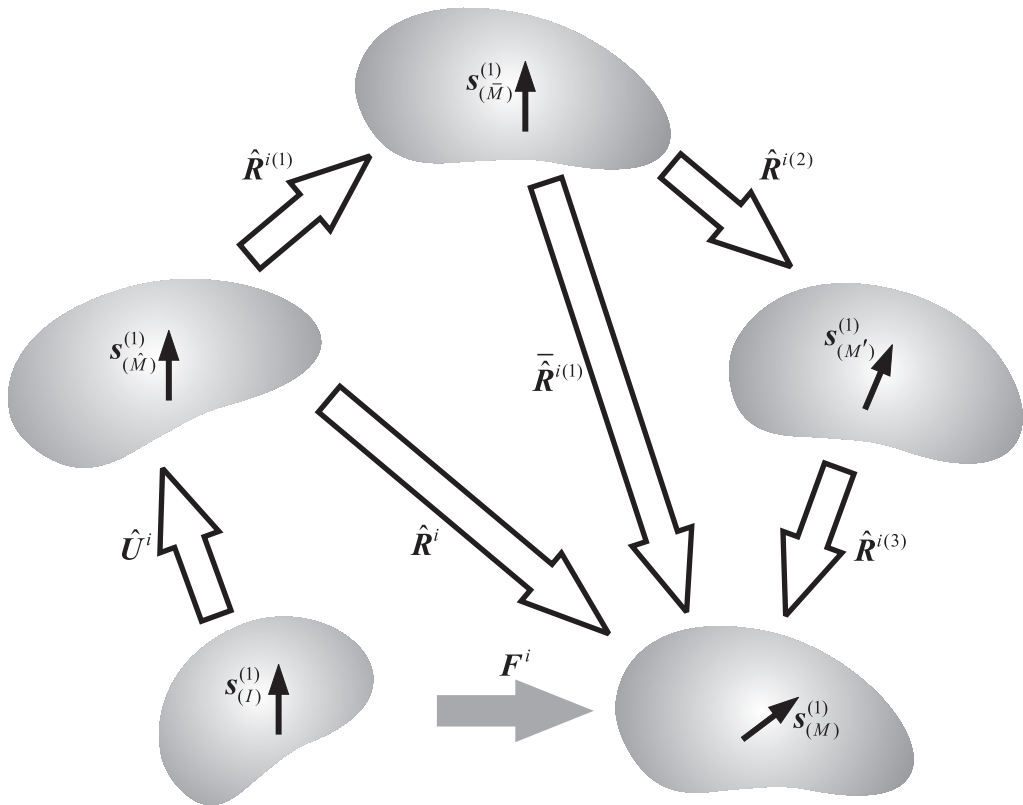


Fig. 3.2 Inelastic rotation of slip system

となる．ここで，第1中間配置 $\beta_{(M)}$ におけるすべり系3の活動による非弾性スピン $W_{(M)}^{i(3)}$ は $W_{(M)}^{i(3)} \equiv \dot{\hat{R}}^{i(3)} \hat{R}^{i(3)T}$ ，第1中間配置 $\beta_{(M)}$ から $\hat{R}^{i(3)}$ 分だけ戻した配置におけるすべり系2の活動による非弾性スピン $W_{(M')}^{i(2)}$ は $W_{(M')}^{i(2)} \equiv \dot{\hat{R}}^{i(2)} \hat{R}^{i(2)T}$ のように表されるので，式(3.85)は

$$\begin{aligned} \dot{\hat{R}}^{i(3)} \hat{R}^{i(3)T} + \dot{\hat{R}}^{i(3)} \dot{\hat{R}}^{i(2)} \hat{R}^{i(2)T} \hat{R}^{i(3)T} &= W_{(M)}^{i(3)} + \hat{R}^{i(3)} W_{(M')}^{i(2)} \hat{R}^{i(3)T} \\ &= W_{(M)}^{i(3)} + W_{(M)}^{i(2)} \\ &= \sum_{\beta \neq 1} W_{(M)}^{i(\beta)} \dots \dots \dots (3.86) \end{aligned}$$

となり，活動すべり系が任意の個数の場合に一般化した表示でも $\dot{\hat{R}}^{i(\alpha)} \hat{R}^{i(\alpha)T} = \sum_{\beta \neq \alpha} W_{(M)}^{i(\beta)}$ と書けることがわかる．したがって，式(3.84)は次のようになる．

$$\dot{s}^{(\alpha)} = W^* s^{(\alpha)} + R^* \left(\sum_{\beta \neq \alpha} W_{(M)}^{i(\beta)} \right) R^{*T} s^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.87)$$

ただし， W^* は先に示した下部構造スピンである．

一方， $\dot{m}_{(I)}^{(\alpha)} = \mathbf{0}$ を考慮して式(3.83)を時間微分すれば式(3.87)と同様に次式が得られる．

$$\begin{aligned} \dot{m}^{(\alpha)} &= \left(R^* \bar{\hat{R}}^{i(\alpha)} m_{(I)}^{(\alpha)} \right) \\ &= W^* m^{(\alpha)} + R^* \left(\sum_{\beta \neq \alpha} W_{(M)}^{i(\beta)} \right) R^{*T} m^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.88) \end{aligned}$$

さらに，微小弾性変形の仮定を用いれば，補足C.2.4における検討(式(C.51)および式(C.52))より $W_{(M)}^{i(\alpha)} \approx W_{(m)}^{i(\alpha)}$ となるため，式(3.87)および式(3.88)における $R^* \left(\sum_{\beta \neq \alpha} W_{(M)}^{i(\beta)} \right) R^{*T}$ の部分は

$$\begin{aligned} R^* \left(\sum_{\beta \neq \alpha} W_{(M)}^{i(\beta)} \right) R^{*T} &= \sum_{\beta \neq \alpha} \left(R^* W_{(M)}^{i(\beta)} R^{*T} \right) \\ &\approx \sum_{\beta \neq \alpha} \left(R^* W_{(m)}^{i(\beta)} R^{*T} \right) = \sum_{\beta \neq \alpha} W^{i(\beta)} \dots \dots \dots (3.89) \end{aligned}$$

のように現配置における非弾性スピン $\sum_{\beta \neq \alpha} W^{i(\beta)}$ に置き換えることができ，分子鎖基底ベクトル $s^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)}$ の発展はそれぞれ次のように記述できる．

$$\begin{aligned} \dot{s}^{(\alpha)} &= \left(W^* + \sum_{\beta \neq \alpha} W^{i(\beta)} \right) s^{(\alpha)} \\ &= \left(W - \sum_{\beta} W^{i(\beta)} + \sum_{\beta \neq \alpha} W^{i(\beta)} \right) s^{(\alpha)} \\ &= \left[W - \left(W^{i(\alpha)} + \sum_{\beta \neq \alpha} W^{i(\beta)} \right) + \sum_{\beta \neq \alpha} W^{i(\beta)} \right] s^{(\alpha)} \\ &= \left(W - W^{i(\alpha)} \right) s^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.90) \end{aligned}$$

$$\dot{m}^{(\alpha)} = \left(W - W^{i(\alpha)} \right) m^{(\alpha)} \dots \dots \dots (3.91)$$

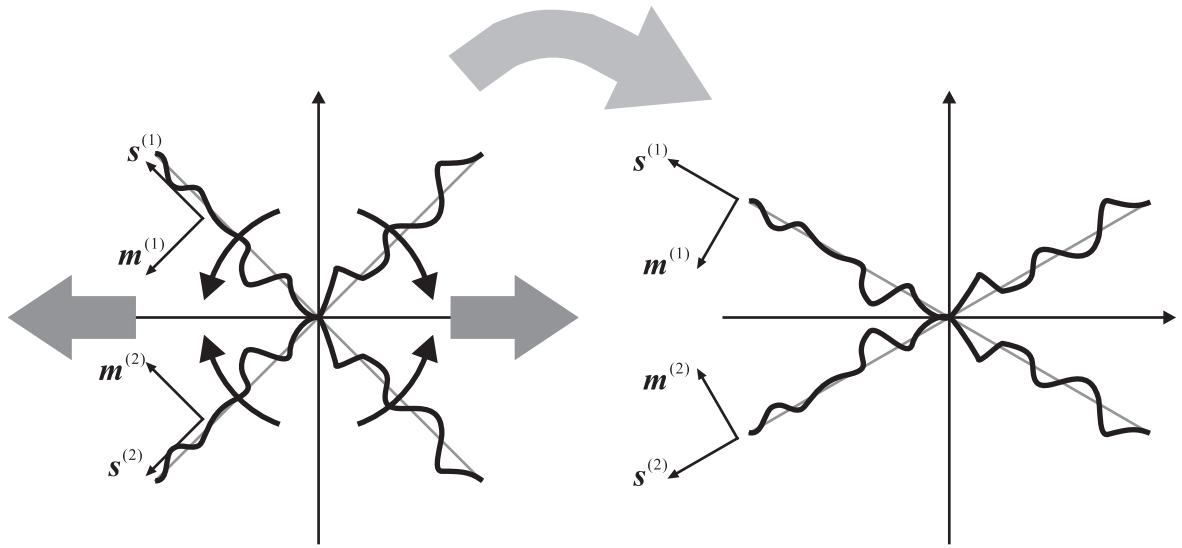


Fig. 3.3 Independent rotation of molecular chain slip systems

ただし、 $W^* = W - W^i = W - \sum_{\alpha} W^{i(\alpha)}$ という関係を用いており、 W は連続体スピンである。

通常の金属における結晶塑性論では、結晶基底ベクトル $s^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)}$ はすべり系によらない下部構造スピンのみで回転を受ける。これに対して本理論では、分子鎖すべり系は式 (3.90) および式 (3.91) に従って図 3.3 に示すようにそれぞれ独立に回転することになり、これによってすべり系ごとの分子鎖の配向方向を直接表現できる。この点が通常の結晶塑性論とは一線を画する点である。

3.7 分子鎖基底ベクトルの更新

分子鎖基底ベクトル $s^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)}$ の発展式は、式 (3.90) および式 (3.91) で表される。しかしながら、式 (3.90) および式 (3.91) を単純に数値解析に適用し、時間増分を求めて分子鎖基底を更新すると、分子鎖基底の正規性および直交性が保たれなくなる恐れがある [補足 C.6]。そこで、本研究では Taylor 展開を利用して分子鎖基底ベクトルを更新する。一般に反対称テンソルは軸性ベクトルをもつ⁽⁷⁷⁾ ことから、 $W^{*(\alpha)} = W - W^{i(\alpha)}$ とおくと、 $W^{*(\alpha)}$ に対する軸性ベクトル $w^{*(\alpha)}$ が存在する。角速度ベクトル $w^{*(\alpha)}$ が一定であるとして、時間 Δt 経過後に分子鎖基底ベクトル $s^{(\alpha)}(t)$ が回転して $s^{(\alpha)}(t + \Delta t)$ になったとすれば、この間の回転を表す直交テンソルを $\Delta R^{(\alpha)}$ として、

$$s^{(\alpha)}(t + \Delta t) = \Delta R^{(\alpha)} s^{(\alpha)}(t) \dots\dots\dots (3.92)$$

とおいたとき、

$$\Delta R^{(\alpha)} = I + W^{*(\alpha)} \Delta t + \frac{1}{2!} (W^{*(\alpha)} \Delta t)^2 + \frac{1}{3!} (W^{*(\alpha)} \Delta t)^3 + \dots\dots\dots (3.93)$$

が成り立つ。また、反対称テンソルには以下のような関係が成り立つ [補足 C.7]。

$$\left. \begin{aligned} W^{*(\alpha)2n-1} &= (-1)^{n-1} \|w^{*(\alpha)}\|^{2(n-1)} W^{*(\alpha)} \\ W^{*(\alpha)2n} &= (-1)^{n-1} \|w^{*(\alpha)}\|^{2(n-1)} W^{*(\alpha)2} \quad (n = 1, 2, \dots) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.94)$$

式 (3.94) を式 (3.93) に適用することにより以下のような式が得られる。

$$\Delta R^{(\alpha)} = I + \frac{\sin \|w^{*(\alpha)}\| \Delta t}{\|w^{*(\alpha)}\| \Delta t} W^{*(\alpha)} \Delta t + \frac{1}{2} \left\{ \frac{\sin(\|w^{*(\alpha)}\| \Delta t / 2)}{\|w^{*(\alpha)}\| \Delta t / 2} \right\}^2 (W^{*(\alpha)} \Delta t)^2 \dots\dots\dots (3.95)$$

ただし式 (3.95) の導出の際，以下のような $\|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|\Delta t = 0$ 周りの Taylor 展開を利用した．

$$\frac{\sin(\|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|\Delta t)}{\|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|\Delta t} = 1 - \frac{(\|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|\Delta t)^2}{3!} + \frac{(\|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|\Delta t)^4}{5!} - \dots + (-1)^n \frac{(\|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|\Delta t)^{2n}}{(2n+1)!} \pm \dots \quad (3.96)$$

$$\frac{1}{2} \left\{ \frac{\sin(\|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|\Delta t/2)}{\|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|\Delta t/2} \right\}^2 = \frac{1}{2!} - \frac{(\|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|\Delta t)^2}{4!} + \frac{(\|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|\Delta t)^4}{6!} - \dots + (-1)^n \frac{(\|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|\Delta t)^{2n}}{(2n+2)!} \pm \dots \quad (3.97)$$

これにより，相当な大ひずみ域まで計算を進めても， $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ と $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ が単位ベクトルであること，直交することの 2 つの条件が倍精度計算において十分に保持できる⁽⁷⁸⁾．

第 4 章

内力の定義と釣合い方程式

本章では、保存エネルギーである自由エネルギーのみならず散逸エネルギーをも考慮した全自由エネルギーの引数に内部変数として非弾性変形尺度の速度および弾性異方性の強度を表す変数を導入し、各引数に共役な熱力学的力を定義する。

また、連続の式、力学的釣合い方程式、エネルギー方程式およびエントロピー不等式をそれぞれ質量保存則、仮想仕事率の原理、熱力学の第1法則および熱力学の第2法則に基づいて導出する。仮想仕事率の原理からは、運動方程式および角運動方程式とともに力学的境界条件も得られる。

なお、本章で述べる手法は村上⁽²⁵⁾⁽²⁶⁾によるものに基づくが、全自由エネルギーの引数に内部変数として弾性異方性の強度を表す変数を導入している点は本研究独自なものである。

4.1 内力の定義

まず、全自由エネルギーの引数を考え内力を定義する。背応力を導入するために非可逆量である非弾性変形尺度、ひずみ速度依存性を表現するために非弾性変形尺度の速度⁽²⁷⁾、さらに変形誘起弾性異方性を表現するために異方性変数を内部変数として全自由エネルギーの引数に導入すれば、第2中間配置 $\beta_{(I)}$ における全自由エネルギーの関数形は次式ようになる。

$$\bar{\Psi} = \bar{\Psi}(\theta, \bar{\mathbf{E}}_{(m)}, \bar{\mathbf{p}}_{(m)}; \bar{\mathbf{E}}_{(m)}^i, \dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)}^i, \mathbf{H}_{(m)}) \dots \dots \dots (4.1)$$

ここで、 \bar{A} は非状態量、 $\bar{\Psi} \equiv \rho_0 \bar{\psi}$ は全自由エネルギー、 $\bar{\psi}$ は全自由エネルギー密度、 ρ_0 は初期配置 $\beta_{(I)}$ での密度、 θ は温度、 $\bar{\mathbf{E}}_{(m)}$ は変形尺度を含む全ひずみである。なお、セミコロン;は巨視的変数と内部変数を区別するために用いており、セミコロン;の左に記した量は巨視的変数、右に記した量は内部変数であることを意味している。また、 $\bar{\mathbf{E}}_{(m)}^i$ は非弾性変形尺度、 $\dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)}^i$ は非弾性変形尺度の速度、 $\bar{\mathbf{p}}_{(m)}$ は単位面積あたりに供給される熱量であり、熱流束の時間積分で次式のように定義される。

$$\bar{\mathbf{p}}_{(m)} \equiv \int_{\mathcal{T}} \mathbf{q}_{(m)} dt \quad \text{or} \quad \dot{\bar{\mathbf{p}}}_{(m)} \equiv \mathbf{q}_{(m)} \dots \dots \dots (4.2)$$

ここで、 $\mathbf{q}_{(m)}$ は熱流束である。さらに、 $\mathbf{H}_{(m)}$ は分子鎖の配向により生じる弾性の変形誘起異方性を表す2階の異方性変数テンソルである。異方性変数テンソルの概念を図4.1に示す。等方性材料に図4.1(a)のような等方的な弾性ひずみ \mathbf{E}^e を加えると、等方的な応力 \mathbf{T} が発生する。一方、図4.1(b)のように x_1 方向に分子鎖が配列したような異方性材料を考えると、同様に等方的な弾性ひずみ \mathbf{E}^e を加えた場合、 x_1 方向は剛性が高く、 x_2 方向は剛性が低いいため、応力 \mathbf{T} は x_1 方向に大きく、 x_2 方向に小さく発生する。もしこのような応力状態を等方性材料で実現するならば、図4.1(b)下段のような x_1 方向に大きく、 x_2 方向に小さな弾性ひずみ \mathbf{E}^{eH} を加えなければならない。異方性変数テンソル \mathbf{H} は、等方的な弾性ひずみ \mathbf{E}^e に乘じられることにより、 \mathbf{E}^e を \mathbf{E}^{eH} に変換する役割をもつテンソルであり、分子鎖の配向方向に正の成分、その直交方向に負の成分をもつ。また、 $\mathbf{H} = \mathbf{0}$ のときは等方性材料の弾性ひずみ状態に帰着し、 $\mathbf{E}^e = \mathbf{E}^{eH}$ となる。なお、異方性変数テンソル \mathbf{H} の具体的な定義は、後述の5.10節で行う。

さて、式(4.1)における全自由エネルギー $\bar{\Psi}$ の物質時間微分は次式のようになる。

$$\begin{aligned} & \dot{\bar{\Psi}}(\theta, \bar{\mathbf{E}}_{(m)}, \bar{\mathbf{p}}_{(m)}; \bar{\mathbf{E}}_{(m)}^i, \dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)}^i, \mathbf{H}_{(m)}) \\ &= -H\dot{\theta} + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)} - \tilde{\mathbf{g}}_{(m)} \cdot \dot{\bar{\mathbf{p}}}_{(m)} - \tilde{\mathbf{B}}_{(m)} \cdot \dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)}^i + \tilde{\mathbf{M}}_{(m)} \cdot \dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)}^i + \tilde{\mathbf{S}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{H}}_{(m)} \\ &= -H\dot{\theta} + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)} - \tilde{\mathbf{g}}_{(m)} \cdot \mathbf{q}_{(m)} - \tilde{\mathbf{B}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^i + \tilde{\mathbf{M}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^i + \tilde{\mathbf{S}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{H}}_{(m)} \dots \dots \dots (4.3) \end{aligned}$$

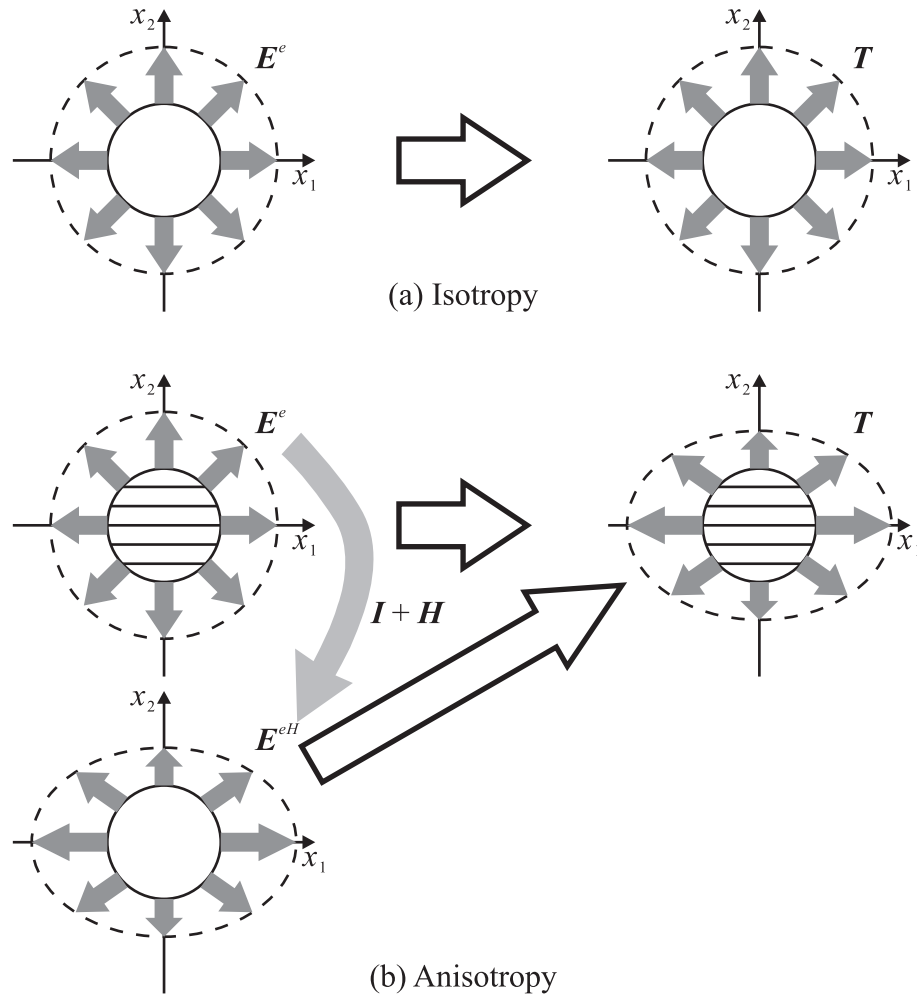


Fig. 4.1 Concept of anisotropy parameter

上式 (4.3) より各内力を熱力学的力として次式のように定義する .

$$\left. \begin{aligned} -H &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \theta}, & \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \mathbf{E}_{(m)}}, & -\tilde{\mathbf{g}}_{(m)} &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \bar{\mathbf{p}}_{(m)}} \\ -\tilde{\mathbf{B}}_{(m)} &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^i}, & \tilde{\mathbf{M}}_{(m)} &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^i}, & \tilde{\mathbf{S}}_{(m)} &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \mathbf{H}_{(m)}} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (4.4)$$

ここで $\tilde{\mathbf{A}}$ は, Jacobian J によって $\tilde{\mathbf{A}} \equiv J \mathbf{A}$ と定義され, H はエントロピー, $\tilde{\mathbf{T}}_{(m)}$ は Kirchhoff 応力, $\tilde{\mathbf{g}}_{(m)}$ は J 倍された単位温度あたりの温度こう配 $\mathbf{g}_{(m)} \equiv \nabla_{(m)} \theta / \theta$ である. また, $\tilde{\mathbf{B}}_{(m)}$ は J 倍された背応力, $\tilde{\mathbf{M}}_{(m)}$ は非弾性変形速度に共役な J 倍された内力⁽²⁷⁾, $\tilde{\mathbf{S}}_{(m)}$ は異方性変数に共役な J 倍された内力とする .

4.2 連続の式

質量保存則は次式のように定式化できる .

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}} \rho \, dv = 0 \dots \dots \dots (4.5)$$

ここで、 ρ は現配置の密度、 \mathcal{V} は物質検査体積、 dv は微小体積要素、また、 $\frac{D}{Dt}$ は物質時間微分 $\frac{DA}{Dt} \equiv \dot{A}$ を表す演算子である。

式 (4.5) の左辺に Reynolds の輸送定理

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}} A dv = \int_{\mathcal{V}} (\dot{A} + A \operatorname{div} \boldsymbol{v}) dv \dots \dots \dots (4.6)$$

を適用し局所化すると次のような連続の式を得る。

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{div} \boldsymbol{v} = 0 \dots \dots \dots (4.7)$$

ここで、 \boldsymbol{v} は物質速度である。式 (4.7) は通常の連続の式である。

4.3 力学的釣合い方程式

内部変数の導入は、状態の自由度の増加を意味する。この自由度すなわち変数の増加に伴い釣合い方程式系を検証する必要がある。そこで、式 (4.4) で定義した内力に対する力学的釣合い方程式を仮想仕事率の原理に基づいて導出する。この原理は一般に、「表面力のする仮想仕事率と物体力のする仮想仕事率の総和は、内力のする仮想仕事率に等しい。」と述べられ、次のように定式化できる。

$$\oint_S \check{P}_s da + \int_{\mathcal{V}} \check{P}_b dv = \int_{\mathcal{V}} \check{P} dv \dots \dots \dots (4.8)$$

ここで、 \check{A} は仮想量を表し、 S は体積 \mathcal{V} を囲む物質検査面、 da は微小面積要素、 \check{P}_s 、 \check{P}_b 、 \check{P} は、それぞれ表面力のなす仮想仕事率、物体力のなす仮想仕事率および内力のなす仮想仕事率である。これらは次のように表現できる。

$$\check{P}_s = \overset{(n)}{\boldsymbol{t}} \cdot \check{\boldsymbol{v}} \dots \dots \dots (4.9)$$

$$\check{P}_b = \check{P}_b - \check{P}_I = \rho \boldsymbol{f} \cdot \check{\boldsymbol{v}} - \rho \dot{\boldsymbol{v}} \cdot \check{\boldsymbol{v}} \dots \dots \dots (4.10)$$

$$\check{P} = \rho \dot{\check{\psi}} \Big|_{\theta, \bar{E}^i, \bar{E}^i, H} = \boldsymbol{T} \cdot \check{\boldsymbol{D}} \dots \dots \dots (4.11)$$

ここで、 $\overset{(n)}{\boldsymbol{t}}$ は表面力、 \boldsymbol{v} は物質速度、 \check{P}_b は純粋な物体力 $\rho \boldsymbol{f}$ のなす仮想仕事率、 \check{P}_I は慣性力 $\rho \dot{\boldsymbol{v}}$ のなす仮想仕事率である。

\check{P} に関しては、内部変数を考慮しない場合、等温過程における全自由エネルギーは、ひずみエネルギーに等しいことが知られている。よって温度は一定としている。また、内部変数理論によると、内部変数は巨視的な力学的仕事率には陽に現れないので、内部変数も一定としている。このとき式 (4.11) は以下のように書き換えることができる [補足 D.1]。

$$\begin{aligned} \check{P} &= \boldsymbol{T} \cdot \check{\boldsymbol{D}} \\ &= \boldsymbol{T} \cdot (\check{\boldsymbol{L}} - \check{\boldsymbol{W}}) \\ &= \boldsymbol{T} \cdot (\operatorname{grad} \check{\boldsymbol{v}} - \boldsymbol{I} \times \check{\boldsymbol{w}}) \\ &= \operatorname{div} (\boldsymbol{T}^T \check{\boldsymbol{v}}) - (\operatorname{div} \boldsymbol{T}) \cdot \check{\boldsymbol{v}} - (\boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{T}) \cdot \check{\boldsymbol{w}} \dots \dots \dots (4.12) \end{aligned}$$

ここで、 $\check{\boldsymbol{L}}$ および $\check{\boldsymbol{W}}$ は、それぞれ速度こう配 \boldsymbol{L} およびその反対称部分 \boldsymbol{W} の仮想量である。また、 $\check{\boldsymbol{w}}$ は反対称テンソル $\check{\boldsymbol{W}}$ に双対な軸性ベクトルである。ただし、 $\boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{T} \equiv e_{ijk} T_{kj} \boldsymbol{e}_i$ である。

式 (4.9), 式 (4.10) および式 (4.12) を仮想仕事率の原理の式 (4.8) に代入して, さらに Gauss の発散定理を用いると次式を得る [補足 D.2] .

$$\oint_S (\mathbf{t} - \mathbf{T} \mathbf{n}) \cdot \mathbf{v} da + \int_V [\{\operatorname{div} \mathbf{T} + \rho(\mathbf{f} - \dot{\mathbf{v}})\} \cdot \mathbf{v} + (\mathbf{e} \cdot \mathbf{T}) \cdot \dot{\mathbf{w}}] dv = 0 \dots\dots\dots (4.13)$$

ここで, \mathbf{n} は微小面積要素の単位法線ベクトルである .

式 (4.13) が任意の仮想量 $\mathbf{v}, \dot{\mathbf{w}}$ について成立するための条件として式 (4.14) ~ (4.16) を得る .

$$\mathbf{t} = \mathbf{T} \mathbf{n} \dots\dots\dots (4.14)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{T} + \rho(\mathbf{f} - \dot{\mathbf{v}}) = \mathbf{0} \dots\dots\dots (4.15)$$

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{T} = \mathbf{0} \dots\dots\dots (4.16)$$

式 (4.14) は Cauchy の基本定理, 式 (4.15) は運動方程式および式 (4.16) は角運動方程式である . なお, Cauchy の基本定理は連続体の表面における通常の力学的境界条件である . また, 運動方程式および角運動方程式は通常の力学的釣合い方程式である .

4.4 エネルギー方程式

熱力学の第 1 法則 (エネルギー保存則) は, 「系内の全エネルギーの時間変化は, 単位時間あたりに系になされる外力のする仕事と系に供給される熱量の総和に等しい .」と述べられ, 次式のように定式化できる .

$$\oint_S P_s da + \int_V P_b dv + \oint_S Q_s da + \int_V Q_b dv - \frac{D}{Dt} \int_V \rho(\hat{\varepsilon} + K) dv = 0 \dots\dots\dots (4.17)$$

ここで, Q_s および Q_b はそれぞれ単位面積および単位体積に供給される単位時間あたりの熱量であり, K は単位質量に供給される単位時間あたりの運動エネルギーである . また, $\hat{\varepsilon}$ は単位質量に供給される単位時間あたりの内部エネルギーであり, 内部変数によるエネルギーを含む . これらは次式のように与えることができる .

$$Q_s \equiv -\mathbf{q} \cdot \mathbf{n}, \quad Q_b \equiv \rho r, \quad K \equiv \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \dots\dots\dots (4.18)$$

ここで, r は放射熱密度である .

ところで, 力学的エネルギーの釣合い方程式は仮想仕事率の原理における仮想量を現実量に置換することにより次式のように表せる .

$$\oint_S P_s da + \int_V P_b dv - \frac{D}{Dt} \int_V \rho K dv - \int_V P dv = 0 \dots\dots\dots (4.19)$$

式 (4.17) と式 (4.19) で辺々を差し引きして, 局所化すると次のようなエネルギー方程式を得る .

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - \operatorname{div} \mathbf{q} + \rho(r - \dot{\hat{\varepsilon}}) = 0 \dots\dots\dots (4.20)$$

これは通常のエネルギー方程式と同形式ではあるが, 内部エネルギー速度が内部変数を含んだ $\dot{\hat{\varepsilon}}$ となっているところが異なる .

4.5 エントロピー不等式

熱力学の第 2 法則 (エントロピー増大則) は, 「系内のエントロピーの時間変化は, 系に供給されるエントロピーよりも大きく, その差は内部エントロピー生成によって補われる .」と述べられ, 次のように定式化できる .

$$\int_V \rho \dot{\eta} dv = \frac{D}{Dt} \int_V \rho \eta dv - \left\{ \oint_S \frac{\mathbf{q}}{\theta} \cdot (-\mathbf{n}) da + \int_V \frac{\rho r}{\theta} dv \right\} \geq 0 \dots\dots\dots (4.21)$$

ここで、 $\overset{[i]}{\gamma}$ は内部エントロピー生成速度の密度、 η はエントロピー密度である。

式 (4.21) を局所化すると次のようなエントロピー不等式を得る。

$$\rho \overset{[i]}{\gamma} = \rho \dot{\eta} - \frac{\mathbf{g} \cdot \mathbf{q}}{\theta} + \frac{\text{div } \mathbf{q} - \rho r}{\theta} \geq 0 \dots \dots \dots (4.22)$$

これは通常のエントロピー不等式である。

4.6 Updated Lagrange 形式の仮想仕事率の原理の定式化

式 (4.8) の仮想仕事率の原理式に式 (4.9) ~ (4.11) を代入し、左辺と右辺を入れ替えれば

$$\int_{\mathcal{V}} \mathbf{T} \cdot \check{\mathbf{D}} \, dv = \oint_S \overset{(n)}{\mathbf{t}} \cdot \check{\mathbf{v}} \, da + \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{f} \cdot \check{\mathbf{v}} \, dv \dots \dots \dots (4.23)$$

となる。ここで $\check{\mathbf{A}}$ は仮想量を表す。ただし、準静的な場を考え、 $\check{\mathbf{v}} \approx \mathbf{0}$ としている。仮想仕事率の原理式 (4.23) の形では応力速度で与えられた構成式をそのまま適用することはできない。そこで、本研究で用いる updated Lagrange 形式に式の変形を行う。式 (4.23) を初期配置表示に戻せば次のようになる [補足 D.3]。

$$\int_{\mathcal{V}_0} \mathbf{II} \cdot \text{Grad } \check{\mathbf{v}} \, dv_0 = \oint_{S_0} \overset{(0)}{\mathbf{t}} \cdot \check{\mathbf{v}} \, da_0 + \int_{\mathcal{V}_0} \rho_0 \mathbf{f} \cdot \check{\mathbf{v}} \, dv_0 \dots \dots \dots (4.24)$$

ここで、以下のような変換法則が用いられている。

$$\mathbf{n} \, da = J \mathbf{F}^{-T} \mathbf{n}_0 \, da_0, \quad dv = J \, dv_0, \quad \mathbf{T} = J^{-1} \mathbf{I} \mathbf{F}^T, \quad \overset{(n)}{\mathbf{t}} = \mathbf{T} \mathbf{n}, \quad \overset{(0)}{\mathbf{t}} = \mathbf{II} \mathbf{n}_0 \dots \dots \dots (4.25)$$

ただし、 $(\)_0$ は初期配置における量を表しており、 \mathbf{II} は第 1 種 Piola-Kirchhoff 応力 (公称応力) である。さらに、 $\check{\mathbf{v}} = \mathbf{0}$ の条件で式 (4.24) の両辺を物質時間微分すると次式を得る。

$$\int_{\mathcal{V}_0} \dot{\mathbf{II}} \cdot \text{Grad } \check{\mathbf{v}} \, dv_0 = \oint_{S_0} \overset{(0)}{\dot{\mathbf{t}}} \cdot \check{\mathbf{v}} \, da_0 + \int_{\mathcal{V}_0} \rho_0 \dot{\mathbf{f}} \cdot \check{\mathbf{v}} \, dv_0 \dots \dots \dots (4.26)$$

この式は仮想仕事率の原理の total Lagrange 形式と呼ばれる。

次に式 (4.26) の $\dot{\mathbf{II}}$ を Cauchy 応力の共回転速度に変換する [補足 D.4]。

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{II}} \mathbf{F}^T &= J(\overset{\square}{\mathbf{T}} + \mathbf{LT}) = J(\overset{\circ}{\mathbf{T}} - \mathbf{P} : \mathbf{D} + (\text{tr } \mathbf{L}) \mathbf{T} + \mathbf{LT}) \\ &= J \left(J^{-1}(\overset{\circ}{\mathbf{T}} - \tilde{\mathbf{P}} : \mathbf{D}) + \mathbf{LT} \right) \dots \dots \dots (4.27) \end{aligned}$$

ここで、 $\overset{\square}{\mathbf{T}}$ は Truesdell 速度、 $\overset{\circ}{\mathbf{T}}$ は Jaumann 速度、 $\tilde{\mathbf{T}}$ は Kirchhoff 応力であり、 $\tilde{\mathbf{T}} \equiv J \mathbf{T}$ と定義される。また、 $\overset{\square}{\mathbf{T}}$ および \mathbf{P} は次のように定義される。

$$\overset{\square}{\mathbf{T}} \equiv \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{LT} - \mathbf{TL}^T + (\text{tr } \mathbf{L}) \mathbf{T} \dots \dots \dots (4.28)$$

$$P_{ijkl} \equiv \delta_{il} T_{kj} + T_{ik} \delta_{jl}, \quad \tilde{P}_{ijkl} \equiv \delta_{il} \tilde{T}_{kj} + \tilde{T}_{ik} \delta_{jl} \dots \dots \dots (4.29)$$

式 (4.27) を式 (4.26) に代入し、現配置へ進めれば次式を得る [補足 D.6]。

$$\int_{\mathcal{V}} \left[J^{-1}(\overset{\circ}{\mathbf{T}} - \tilde{\mathbf{P}} : \mathbf{D}) \cdot \check{\mathbf{D}} + (\mathbf{LT}) \cdot \check{\mathbf{L}} \right] dv = \oint_S \overset{(n)}{\mathbf{t}} \cdot \check{\mathbf{v}} \, da + \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{f} \cdot \check{\mathbf{v}} \, dv \dots \dots \dots (4.30)$$

ここで、 $\overset{(n)}{\mathbf{t}} \, da \equiv \overset{(0)}{\mathbf{t}} \, da_0$ とする。Updated Lagrange 形式においては現配置が参照配置となるため、 $\overset{(0)}{\mathbf{t}} \rightarrow \overset{(n)}{\mathbf{t}}$ および $J \rightarrow 1$ を考慮し、弾性変形は微小であり、非弾性変形中は体積不変である ($\text{tr } \mathbf{L} \approx 0$) と仮定 [補足 D.7] すれば、updated Lagrange 形式の仮想仕事率の原理が以下のように得られる。

$$\int_{\mathcal{V}} \left[(\overset{\circ}{\mathbf{T}} - \mathbf{P} : \mathbf{D}) \cdot \check{\mathbf{D}} + (\mathbf{LT}) \cdot \check{\mathbf{L}} \right] dv = \oint_S \overset{(n)}{\mathbf{t}} \cdot \check{\mathbf{v}} \, da + \int_{\mathcal{V}} \rho \mathbf{f} \cdot \check{\mathbf{v}} \, dv \dots \dots \dots (4.31)$$

第 5 章

構成式の導出と硬化則の引数

本章では、構成式の導出および硬化則の引数についての検討を行う。まず、Clausius-Duhem の不等式を Green-Zerna⁽⁷¹⁾ の手法を介して保存部分と散逸部分に分離し、その保存部分から熱弾性構成式を導出する。その際、系の強い非平衡性を考慮して温度速度を引数としてもつ散逸エントロピーを導入している。また、異方性変数テンソルを導入することで、変形誘起異方性を有する弾性構成式をも導出する。一方、構成式の散逸部分については、応力をその等方部分と偏差部分に分離した後に相当量で表現することで、分解せん断応力の引数に静水圧応力および非弾性せん断ひずみ速度が熱・力学的整合性をもって導入されることを示す。さらに、得られた速度形熱弾性構成式の弾性変形速度を全変形速度と非弾性変形速度の差で表し、非弾性変形速度を第 3 章で得た運動学的関係式によって書き表すことで結晶塑性タイプの弾粘塑性構成式を導出する。さらに、ポリマ内部の非晶質状態を表現するために、多結晶体に対する拡張 Taylor モデルを本モデルに適用し、多絡み点モデルを構築する。その際、分子鎖配向に対する異方性強度を定義し、上述の異方性変数テンソルを具体化する。

なお、5.1 節～5.4 節は村上ら⁽²⁵⁾⁽²⁶⁾ による手法に基づく。また、5.6 節～5.8 節は通常の結晶塑性構成式の導出と同様である。5.5 節で述べる速度形異方性弾性構成式の導出、5.9 節で述べる多絡み点モデルへの拡張および 5.10 節で述べる異方性変数テンソルの定義については本研究独自のものである。

5.1 Clausius-Duhem の不等式

式 (4.20) を用いて式 (4.22) における供給熱の部分を消去し、両辺に温度 ($\theta \geq 0$) を乗ずれば、次のような Clausius-Duhem の不等式を得る。

$$\Phi = \rho \theta \dot{\eta} - \rho \dot{\varepsilon} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{q} \geq 0 \dots\dots\dots (5.1)$$

ただし、 $\Phi \equiv \rho \theta \dot{\gamma}$ は散逸関数である。式 (5.1) を J 倍して第 2 中間配置へ戻せば、次のようになる。

$$\tilde{\Phi} = \theta \dot{H} - \hat{U} + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)} - \tilde{\mathbf{g}}_{(m)} \cdot \mathbf{q}_{(m)} \geq 0 \dots\dots\dots (5.2)$$

ただし、 ρ_0 は初期配置における密度、 H は $H \equiv \rho_0 \eta$ 、 \hat{U} は内部変数を考慮した内部エネルギー $\hat{U} \equiv \rho_0 \varepsilon$ である。

ここで、温度とエントロピーの独立・従属関係を逆にするために次のような自由エネルギーを導入し、Legendre 変換を行う。

$$\hat{\Psi} = \hat{U} - \theta H \dots\dots\dots (5.3)$$

式 (5.3) を式 (5.2) に代入すれば、

$$\tilde{\Phi} = -(\dot{\hat{\Psi}} + H \dot{\theta}) + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)} - \tilde{\mathbf{g}}_{(m)} \cdot \mathbf{q}_{(m)} \geq 0 \dots\dots\dots (5.4)$$

となる。

一方、全自由エネルギーの散逸部分 $\bar{\Psi}^d$ は散逸関数により次式のように定義される。

$$\bar{\Psi}^d \equiv \int_{\tau} \tilde{\Phi} dt \dots\dots\dots (5.5)$$

上式 (5.5) より散逸関数は次式のように書ける。

$$\tilde{\Phi} = \dot{\bar{\Psi}} - \dot{\Psi} \equiv \dot{\bar{\Psi}}^d \geq 0 \dots\dots\dots (5.6)$$

上式 (5.6) において，全自由エネルギー速度 $\dot{\Psi}$ に式 (4.3) を代入したものと式 (5.4) を比較すれば次のような関係式を得る．

$$\dot{\Psi} = \dot{\Psi} + \widetilde{\mathbf{B}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^i - \widetilde{\mathbf{M}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i - \widetilde{\mathbf{S}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{H}}_{(m)} \dots \dots \dots (5.7)$$

上式 (5.7) は内部変数の陰および陽表示間で成り立つ関係式である．

Clausius-Duhem の不等式は，物体内部での非可逆過程の進むべき方向を表すものであるので，ここで初めて内部変数のなす仕事率を陽に表示する．すなわち，式 (5.7) を式 (5.4) に適用して次式を得る．

$$\widetilde{\Phi} = -(\dot{\Psi} + H\dot{\theta}) + \widetilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)} - \widetilde{\mathbf{B}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^i + \widetilde{\mathbf{M}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i + \widetilde{\mathbf{S}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{H}}_{(m)} - \widetilde{\mathbf{g}}_{(m)} \cdot \mathbf{q}_{(m)} \geq 0 \dots \dots (5.8)$$

さて，弾塑性体あるいは粘塑性体などの塑性体は，ばね，摩擦板 (St. Venant 要素) およびダッシュポットを直列結合した Maxwell 要素にモデル化される．ゆえに，ひずみやひずみ速度が構成量に，応力や応力速度がその引数にならなければならない．そこで，状態量としての Gibbs 関数 G を Legendre 変換

$$G \equiv \Psi - \widetilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{E}_{(m)}^e \dots \dots \dots (5.9)$$

によって導入し，熱力学的ポテンシャル Ψ から G へ変更することによって応力と弾性ひずみの間でそれらの役割を逆転させる．その結果，式 (5.8) は次式のようになる．

$$\widetilde{\Phi} = -(\dot{G} + H\dot{\theta}) - \widetilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \widetilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^i - \widetilde{\mathbf{B}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^i + \widetilde{\mathbf{M}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i + \widetilde{\mathbf{S}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{H}}_{(m)} \geq 0 \dots (5.10)$$

なお本研究では，Fourier の法則で表される熱流束 \mathbf{q} に関する構成式の導出を目的としないので， $\mathbf{q}_{(m)}$ の項を無視している．

5.2 保存部分の熱力学的制限

式 (5.10) において，可逆部分で力と速度の関係を逆転させたため，非可逆部分も同様に力と速度の関係を逆転させると考えれば，式 (5.10) より G の引数となる可能性のあるものは次のようになる．

$$G = G(\theta, \widetilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\theta}, \dot{\widetilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{B}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}, \dot{\mathbf{H}}_{(m)}) \dots \dots \dots (5.11)$$

等存在の公理⁽⁷⁹⁾ より，構成量の引数も熱力学的ポテンシャル G と全く同様に以下のように選ぶ．

$$\left. \begin{aligned} H &= H(\theta, \widetilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\theta}, \dot{\widetilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{B}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}, \dot{\mathbf{H}}_{(m)}) \\ \mathbf{E}_{(m)}^e &= \mathbf{E}_{(m)}^e(\theta, \widetilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\theta}, \dot{\widetilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{B}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}, \dot{\mathbf{H}}_{(m)}) \\ \mathbf{D}_{(m)}^i &= \mathbf{D}_{(m)}^i(\theta, \widetilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\theta}, \dot{\widetilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{B}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}, \dot{\mathbf{H}}_{(m)}) \\ \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i &= \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i(\theta, \widetilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\theta}, \dot{\widetilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{B}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}, \dot{\mathbf{H}}_{(m)}) \\ \widetilde{\mathbf{S}}_{(m)} &= \widetilde{\mathbf{S}}_{(m)}(\theta, \widetilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\theta}, \dot{\widetilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{B}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}, \dot{\mathbf{H}}_{(m)}) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (5.12)$$

本研究では，熱力学に反することなく粘塑性構成式に温度 θ を導入するために，温度速度 $\dot{\theta}$ に依存する散逸エントロピー H^d を新たに導入する．つまり式 (5.12) の H をその保存部分 H^c と散逸部分 H^d に，次式のように分解する．

$$\begin{aligned} H(\theta, \widetilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\theta}, \dot{\widetilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{B}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}, \dot{\mathbf{H}}_{(m)}) \\ = H^c(\theta, \widetilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{B}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}) + H^d(\theta, \widetilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\theta}, \dot{\widetilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{B}}_{(m)}, \widetilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}, \dot{\mathbf{H}}_{(m)}) \dots (5.13) \end{aligned}$$

ただし，保存エントロピー H^c は $\dot{\theta}$ ， $\dot{\tilde{T}}_{(m)}$ および $\dot{\mathbf{H}}_{(m)}$ に依存しないものとする．また，異方性変数に共役な内力 $\tilde{S}_{(m)}$ についても同様に，その保存部分 $\tilde{S}_{(m)}^c$ と散逸部分 $\tilde{S}_{(m)}^d$ に次式のように分解する．

$$\begin{aligned} \tilde{S}_{(m)}(\theta, \tilde{T}_{(m)}, \dot{\theta}, \dot{\tilde{T}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{B}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}, \dot{\mathbf{H}}_{(m)}) \\ = \tilde{S}_{(m)}^c(\theta, \tilde{T}_{(m)}, \tilde{\mathbf{B}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}) + \tilde{S}_{(m)}^d(\theta, \tilde{T}_{(m)}, \dot{\theta}, \dot{\tilde{T}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{B}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}, \dot{\mathbf{H}}_{(m)}) \dots \end{aligned} \quad (5.14)$$

式 (5.13) および式 (5.14) を考慮に入れて式 (5.11) を式 (5.10) に代入し，鎖状則で展開して次式を得る．

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi} = & - \left(H^c + \frac{\partial G}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \left(\mathbf{E}_{(m)}^e + \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}} \right) \cdot \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)} + \left(\tilde{S}_{(m)}^c - \frac{\partial G}{\partial \mathbf{H}_{(m)}} \right) \cdot \dot{\mathbf{H}}_{(m)} \\ & - \left(\frac{\partial G}{\partial \dot{\theta}} \dot{\theta} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{\mathbf{B}}}_{(m)}} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{B}}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{\mathbf{M}}}_{(m)}} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{M}}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\mathbf{H}}_{(m)}} \cdot \dot{\mathbf{H}}_{(m)} \right) \\ & - H^d \dot{\theta} + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^i - \tilde{\mathbf{B}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^i + \tilde{\mathbf{M}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^i + \tilde{S}_{(m)}^d \cdot \dot{\mathbf{H}}_{(m)} \geq 0 \dots \end{aligned} \quad (5.15)$$

式 (5.11) を考慮すれば，式 (5.15) の右辺第 4 項の括弧内各項は各速度について線形であるから，不等式 (5.15) が常に成立するためには

$$\frac{\partial G}{\partial \dot{\theta}} = 0, \quad \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{\mathbf{B}}}_{(m)}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{\mathbf{M}}}_{(m)}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial G}{\partial \dot{\mathbf{H}}_{(m)}} = \mathbf{0} \dots \quad (5.16)$$

でなければならない．したがって G の引数を

$$G = G(\theta, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}) \dots \quad (5.17)$$

のように制限できる．また，弾性ひずみ $\mathbf{E}_{(m)}^e$ は保存量であるため，応力速度 $\dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}$ に依存しないとする．式 (5.13) および式 (5.14) から，保存エントロピー H^c および異方性変数に共役な内力の保存部分 $\tilde{S}_{(m)}^c$ はそれぞれ温度速度 $\dot{\theta}$ と異方性変数の速度 $\dot{\mathbf{H}}_{(m)}$ に依存しないので，式 (5.15) の右辺第 1 項，第 2 項および第 3 項の各速度についても線形となり，次のような熱力学的関係式が得られる．

$$H^c = - \frac{\partial G}{\partial \theta}, \quad \mathbf{E}_{(m)}^e = - \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}}, \quad \tilde{S}_{(m)}^c = \frac{\partial G}{\partial \mathbf{H}_{(m)}} \dots \quad (5.18)$$

式 (5.17) および式 (5.18) より，保存エントロピー H^c ，弾性ひずみ $\mathbf{E}_{(m)}^e$ および異方性変数に共役な内力の保存部分 $\tilde{S}_{(m)}^c$ の引数も

$$H^c = H^c(\theta, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}), \quad \mathbf{E}_{(m)}^e = \mathbf{E}_{(m)}^e(\theta, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}), \quad \tilde{S}_{(m)}^c = \tilde{S}_{(m)}^c(\theta, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \mathbf{H}_{(m)}) \dots \quad (5.19)$$

のように制限できる．

5.3 散逸部分の熱力学的制限

式 (5.16) および式 (5.18) を考慮して保存部分を取り除けば，式 (5.15) は次式のように散逸仕事率のみ残る．

$$\begin{aligned} \Phi = & -J^{-1} H^d \dot{\theta} + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^i - \tilde{\mathbf{B}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^i + \tilde{\mathbf{M}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^i + \tilde{S}_{(m)}^d \cdot \dot{\mathbf{H}}_{(m)} \\ = & -J^{-1} H^d \dot{\theta} + \hat{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^i + \tilde{\mathbf{M}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^i + \tilde{S}_{(m)}^d \cdot \dot{\mathbf{H}}_{(m)} \geq 0 \dots \end{aligned} \quad (5.20)$$

なお，不等式 (5.20) の両辺には J^{-1} が乗じられている．また， $\hat{\mathbf{T}}_{(m)} \equiv \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} - \mathbf{B}_{(m)}$ は有効応力である．このように，散逸関数を表す式に $\dot{\theta}$ の項が残ることは，後述の 5.6 節で熱・力学的整合性をもって硬化則の引数に温度を導入するにあたり重要な役割をなす．

5.4 速度形等方性弾性構成式

本節ではまず，変形誘起異方性を考慮しない等方性弾性構成式を導出する．そのため， $\mathbf{H}_{(m)} = \mathbf{0}$ とし， $\mathbf{H}_{(m)}$ を G の引数には導入しない．変形誘起異方性を考慮した異方性弾性構成式の導出は次節にて行う．

弾性ひずみの構成式を式 (5.18)₂ から得るために， G をその引数に対する基本不変量の多項式で表現することを考える．引数である $\tilde{\mathbf{T}}_{(m)}$ は，2 階の対称テンソルであるから，それに対する基本不変量は，Cayley-Hamilton の定理⁽⁸⁰⁾ より次の 3 個となる．

$$I_{T1} \equiv \text{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \quad I_{T2} \equiv \text{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}^2, \quad I_{T3} \equiv \text{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}^3, \dots \dots \dots (5.21)$$

ここで，樹脂材料の引張試験の結果から，鉄鋼材料と同様に弾性変形は微小であり，塑性変形は有限であると仮定する．したがって，弾性構成式は応力と弾性ひずみの関係が線形でなければならず，式 (5.21) において I_{T3} は不要となる．この結果， G の引数は次のように不変量で置き換えることができる．

$$G = G(\theta, I_{T1}, I_{T2}) \dots \dots \dots (5.22)$$

式 (5.22) を式 (5.18)₂ に代入すれば

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{(m)}^e &= - \frac{\partial G}{\partial I_{T1}} \frac{\partial I_{T1}}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}} - \frac{\partial G}{\partial I_{T2}} \frac{\partial I_{T2}}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}} \\ &= a_1 \mathbf{I} + 2 a_2 \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \dots \dots \dots (5.23) \end{aligned}$$

となる．ここで，係数 a_1 および a_2 は

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= a_1(\theta, I_{T1}, I_{T2}) \equiv - \frac{\partial G}{\partial I_{T1}} \\ a_2 &= a_2(\theta, I_{T1}, I_{T2}) \equiv - \frac{\partial G}{\partial I_{T2}} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (5.24)$$

である．式 (5.24) から明らかなように，これら 2 つの係数は不変量の関数であるから，構成式 (5.23) は線形にならない．そこで， $\theta = \theta_0$ ， $\tilde{\mathbf{T}}_{(m)} = \mathbf{0}$ を基準状態とし，このとき弾性ひずみが零になるとして式 (5.24) をこの基準状態の近傍で展開すると次式のようなになる．

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= a_{10} + a_{11}(\theta - \theta_0) + a_{12} \text{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} + a_{13} \text{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}^2 + \dots \\ a_2 &= a_{20} + a_{21}(\theta - \theta_0) + a_{22} \text{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} + a_{23} \text{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}^2 + \dots \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (5.25)$$

ここで， a_{10} および a_{20} は定数である．式 (5.25) を式 (5.23) に代入したとき，この構成式における応力と弾性ひずみの関係が線形となり， $\theta = \theta_0$ かつ $\tilde{\mathbf{T}}_{(m)} = \mathbf{0}$ のとき $\mathbf{E}_{(m)}^e = \mathbf{0}$ とならねばならないことを考慮すれば，式 (5.25) 中の各係数は

$$a_{10} = a_{13} = \dots = 0, \quad a_{21} = a_{22} = a_{23} = \dots = 0 \dots \dots \dots (5.26)$$

のようなになる．式 (5.26) を式 (5.25) に代入した結果を式 (5.23) に適用すれば，次式を得る．

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{(m)}^e &= a_{11}(\theta - \theta_0) \mathbf{I} + a_{12}(\text{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}) \mathbf{I} + 2 a_{20} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \\ &= \alpha_h(\theta - \theta_0) \mathbf{I} - \frac{\lambda}{(3\lambda + 2\mu)2\mu} (\text{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}) \mathbf{I} + \frac{1}{2\mu} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \dots \dots \dots (5.27) \end{aligned}$$

ここで， α_h は熱膨張係数， λ および μ は Lamé 定数である．

さらに, $\tilde{\mathbf{T}}_{(m)} = J \mathbf{T}_{(m)}$ を考慮すれば式 (5.27) は, まだ非線形であることがわかる. いま, 式 (3.1) より $\mathbf{F} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^i$ であるから, Jacobian は

$$\begin{aligned} J &= \det \mathbf{F} = \det (\mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^i) \\ &= \det \mathbf{R}^* \det \hat{\mathbf{U}}^e \det \mathbf{F}^i \approx \det \hat{\mathbf{U}}^e \dots \dots \dots (5.28) \end{aligned}$$

となる. ただし, $\det \mathbf{R}^* = 1$ を考慮しており, さらに非弾性変形中の体積変化はないものとして $\det \mathbf{F}^i \approx 1$ と仮定している. ところで, 弾性変位を $\mathbf{u}^e \equiv \mathbf{x}_{(m)} - \mathbf{x}_{(M)}$, 弾性変位こう配を $\mathbf{H}^e \equiv \frac{\partial \mathbf{u}^e}{\partial \mathbf{x}_{(M)}}$ とすると $\hat{\mathbf{U}}^e$ は

$$\hat{\mathbf{U}}^e = \frac{\partial \mathbf{x}_{(m)}}{\partial \mathbf{x}_{(M)}} = \frac{\partial (\mathbf{u}^e + \mathbf{x}_{(M)})}{\partial \mathbf{x}_{(M)}} = \mathbf{H}^e + \mathbf{I} \dots \dots \dots (5.29)$$

と書けるので, 微小弾性変形の仮定から $\|\mathbf{H}^e\| \ll 1$ とすれば $J \approx \det \hat{\mathbf{U}}^e = \det (\mathbf{H}^e + \mathbf{I}) \approx 1$ となる. したがって, 微小弾性変形の仮定から式 (5.27) を完全に線形化できる. すなわち, 式 (5.27) における Kirchhoff 応力を Cauchy 応力に置き換えることができ,

$$\mathbf{E}_{(m)}^e = \alpha_h (\theta - \theta_0) \mathbf{I} - \frac{\lambda}{(3\lambda + 2\mu)2\mu} (\text{tr} \mathbf{T}_{(m)}) \mathbf{I} + \frac{1}{2\mu} \mathbf{T}_{(m)} \dots \dots \dots (5.30)$$

となる. ここで, 上式 (5.30) 中の $\lambda/[(3\lambda + 2\mu)2\mu]$ および $1/(2\mu)$ を縦弾性係数 E と Poisson 比 ν を用いてそれぞれ書き表すと次式のようになる.

$$\frac{\lambda}{(3\lambda + 2\mu)2\mu} = \frac{\nu}{E}, \quad \frac{1}{2\mu} = \frac{1 + \nu}{E} \dots \dots \dots (5.31)$$

上式 (5.31) を式 (5.30) に代入すれば,

$$\mathbf{E}_{(m)}^e = \frac{1 + \nu}{E} \mathbf{T}_{(m)} - \frac{\nu}{E} (\text{tr} \mathbf{T}_{(m)}) \mathbf{I} + \alpha_h (\theta - \theta_0) \mathbf{I} \dots \dots \dots (5.32)$$

となり, これは第 2 中間配置における通常の熱弾性構成式である.

さらに, E, ν, α_h が一般に温度依存性を示すことを考慮に入れて式 (5.32) を両辺物質時間微分し, 指標表示すると次式のようになる.

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{E}}_{(m)ij}^e &= D_{(m)ij}^e = \left(\frac{1 + \nu}{E} \delta_{ik} \delta_{jl} - \frac{\nu}{E} \delta_{ij} \delta_{kl} \right) \dot{\mathbf{T}}_{(m)kl} \\ &\quad + \dot{\theta} \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1 + \nu}{E} \right) \delta_{ik} \delta_{jl} - \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\nu}{E} \right) \delta_{ij} \delta_{kl} \right\} T_{(m)kl} \\ &\quad + \dot{\theta} \left\{ \alpha_h + \frac{\partial \alpha_h}{\partial \theta} (\theta - \theta_0) \right\} \delta_{ij} \dots \dots \dots (5.33) \end{aligned}$$

上式 (5.33) で右辺第 1 項は通常の Hooke の法則であり, 右辺第 2 項, 第 3 項が温度依存性を表現している.

さて, 式 (5.33) において応力速度と弾性変形速度の逆関係を求め, さらに現配置へ回転させることにより, 次のような Mandel-Kratochvil 速度で表現された温度依存の速度形弾性構成式

$$\overset{\vee}{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^e : (\mathbf{D}^e - \mathbf{A}^e \dot{\theta}) \dots \dots \dots (5.34)$$

が得られる [補足 E.1]. ただし,

$$\mathbf{C}_{ijkl}^e \equiv \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + 2\mu \delta_{ik} \delta_{jl} \dots \dots \dots (5.35)$$

$$\mathbf{A}_{kl}^e \equiv \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1 + \nu}{E} \right) \delta_{ik} \delta_{jl} - \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\nu}{E} \right) \delta_{ij} \delta_{kl} \right\} T_{ij} + \left\{ \alpha_h + \frac{\partial \alpha_h}{\partial \theta} (\theta - \theta_0) \right\} \delta_{kl} \dots \dots \dots (5.36)$$

である．また，弾性変形速度 D^e の対称性を考慮すれば，式 (5.35) は次式のように書き換えられる⁽⁷⁷⁾⁽⁸¹⁾．

$$C_{ijkl}^e \equiv \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \dots \dots \dots (5.37)$$

よって， C^e は次式のような性質をもつため，その成分は 21 成分に制限される [補足 E.2]．

$$C_{ijkl}^e = C_{jikl}^e = C_{ijlk}^e = C_{klij}^e \dots \dots \dots (5.38)$$

5.5 速度形異方性弾性構成式

非晶性ポリマにおける非弾性変形によって誘起される弾性異方性を構成式に導入すべく，Gibbs 関数 G の引数として式 (5.21) で表される $\tilde{T}_{(m)}$ の基本不変量に加え，4 階のテンソル $\bar{C}_{(m)}$ を用いて

$$I_{T4} \equiv \tilde{T}_{(m)ij} \bar{C}_{(m)ijkl} \tilde{T}_{(m)kl} \dots \dots \dots (5.39)$$

で定義される不変量を導入する．ここで， $\bar{C}_{(m)}$ は 2 階の異方性変数テンソル $H_{(m)}$ (無次元) の関数である ($\bar{C}_{(m)} = \bar{C}_{(m)}(H_{(m)})$) とする．また，式 (5.39) より明らかに $\bar{C}_{(m)ijkl} = \bar{C}_{(m)klij}$ という対称性をもつ．この結果， G の引数は次のようになる．

$$G = G(\theta, I_{T1}, I_{T2}, I_{T4}) \dots \dots \dots (5.40)$$

式 (5.40) を式 (5.18)₂ に代入すれば

$$\begin{aligned} E_{(m)}^e &= -\frac{\partial G}{\partial I_{T1}} \frac{\partial I_{T1}}{\partial \tilde{T}_{(m)}} - \frac{\partial G}{\partial I_{T2}} \frac{\partial I_{T2}}{\partial \tilde{T}_{(m)}} - \frac{\partial G}{\partial I_{T4}} \frac{\partial I_{T4}}{\partial \tilde{T}_{(m)}} \\ &= a_1 \mathbf{I} + 2a_2 \tilde{T}_{(m)} + 2a_4 \bar{C}_{(m)} : \tilde{T}_{(m)} \dots \dots \dots (5.41) \end{aligned}$$

となる．ここで，係数 a_1, a_2 および a_4 は

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= a_1(\theta, I_{T1}, I_{T2}, I_{T4}) \equiv -\frac{\partial G}{\partial I_{T1}} \\ a_2 &= a_2(\theta, I_{T1}, I_{T2}, I_{T4}) \equiv -\frac{\partial G}{\partial I_{T2}} \\ a_4 &= a_4(\theta, I_{T1}, I_{T2}, I_{T4}) \equiv -\frac{\partial G}{\partial I_{T4}} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (5.42)$$

である．式 (5.25) と同様に， $\theta = \theta_0, \tilde{T}_{(m)} = \mathbf{0}$ を基準状態とし，このとき弾性ひずみが零になるとして式 (5.42) をこの基準状態の近傍で展開すると次式のようになる．

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= a_{10} + a_{11}(\theta - \theta_0) + a_{12} \text{tr} \tilde{T}_{(m)} + a_{13} \text{tr} \tilde{T}_{(m)}^2 + a_{14} \tilde{T}_{(m)} : \bar{C}_{(m)} : \tilde{T}_{(m)} + \dots \\ a_2 &= a_{20} + a_{21}(\theta - \theta_0) + a_{22} \text{tr} \tilde{T}_{(m)} + a_{23} \text{tr} \tilde{T}_{(m)}^2 + a_{24} \tilde{T}_{(m)} : \bar{C}_{(m)} : \tilde{T}_{(m)} + \dots \\ a_4 &= a_{40} + a_{41}(\theta - \theta_0) + a_{42} \text{tr} \tilde{T}_{(m)} + a_{43} \text{tr} \tilde{T}_{(m)}^2 + a_{44} \tilde{T}_{(m)} : \bar{C}_{(m)} : \tilde{T}_{(m)} + \dots \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (5.43)$$

式 (5.43) を式 (5.41) に代入したとき，この構成式における応力と弾性ひずみの関係が線形となり， $\theta = \theta_0$ かつ $\tilde{T}_{(m)} = \mathbf{0}$ のとき $E_{(m)}^e = \mathbf{0}$ とならねばならないことを考慮すれば，式 (5.43) 中の各係数は

$$a_{10} = a_{13} = a_{14} = \dots = 0, \quad a_{21} = a_{22} = a_{23} = a_{24} = \dots = 0, \quad a_{41} = a_{42} = a_{43} = a_{44} = \dots = 0 \dots (5.44)$$

のようになる．式 (5.44) を式 (5.43) に代入した結果を式 (5.41) に適用し，微小弾性変形の仮定を用いて $J \approx 1$ とすれば，次式を得る．

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{(m)}^e &= a_{11}(\theta - \theta_0)\mathbf{I} + a_{12}(\text{tr}\mathbf{T}_{(m)})\mathbf{I} + 2a_{20}\mathbf{T}_{(m)} + 2a_{40}\bar{\mathbf{C}}_{(m)} : \mathbf{T}_{(m)} \\ &= \alpha_h(\theta - \theta_0)\mathbf{I} - \frac{\lambda}{(3\lambda + 2\mu)2\mu}(\text{tr}\mathbf{T}_{(m)})\mathbf{I} + \frac{1}{2\mu}\mathbf{T}_{(m)} + 2\chi\bar{\mathbf{C}}_{(m)} : \mathbf{T}_{(m)} \\ &= \frac{1+\nu}{E}\mathbf{T}_{(m)} - \frac{\nu}{E}(\text{tr}\mathbf{T}_{(m)})\mathbf{I} + \alpha_h(\theta - \theta_0)\mathbf{I} + 2\chi\bar{\mathbf{C}}_{(m)} : \mathbf{T}_{(m)} \dots \dots \dots (5.45) \end{aligned}$$

ここで， χ は弾性異方性を表す項の係数（応力の次元）である．いま， $\mathbf{H}_{(m)} = \mathbf{0}$ のとき，式 (5.45) が前節で導出した等方性弾性構成式 (5.32) に帰着し，かつ弾性ひずみの対称性を満たすように $\bar{\mathbf{C}}_{(m)}$ の具体的な関数形を

$$\bar{\mathbf{C}}_{(m)ijkl} \equiv -\frac{1}{2}C_{ijmn}^{e-1}C_{(m)mnpq}^AC_{pqkl}^{e-1} \dots \dots \dots (5.46)$$

$$C_{(m)mnpq}^A \equiv \delta_{mp}H_{(m)nq} + H_{(m)mp}\delta_{nq} \dots \dots \dots (5.47)$$

と定義する [補足 E.3]．ただし， \mathbf{C}^e は式 (5.35) で表される等方性弾性構成式における 4 階の弾性係数テンソル， δ_{ij} は Kronecker のデルタである．式 (5.46) および式 (5.47) を式 (5.45) に代入すれば

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{(m)}^e &= \mathbf{C}^{e-1} : \mathbf{T}_{(m)} + \alpha_h(\theta - \theta_0)\mathbf{I} - \chi\mathbf{C}^{e-1} : \mathbf{C}_{(m)}^A : \mathbf{C}^{e-1} : \mathbf{T}_{(m)} \\ &= (\mathbf{I}^{(4)} - \chi\mathbf{C}^{e-1} : \mathbf{C}_{(m)}^A) : \mathbf{C}^{e-1} : \mathbf{T}_{(m)} + \alpha_h(\theta - \theta_0)\mathbf{I} \dots \dots \dots (5.48) \end{aligned}$$

が得られる．ここで， $\mathbf{C}_{ijkl}^{e-1} = [(1+\nu)/E]\delta_{ik}\delta_{jl} - (\nu/E)\delta_{ij}\delta_{kl}$ という関係を用いており， $\mathbf{I}^{(4)}$ は $I_{ijkl}^{(4)} \equiv \delta_{ik}\delta_{jl}$ で定義される 4 階の恒等テンソルである．

さらに， E, ν, α_h および χ が一般に温度依存性を示すことを考慮に入れて式 (5.48) を両辺物質時間微分し，指標表示すると次式のようになる．

$$\dot{\mathbf{E}}_{(m)ij}^e = \mathbf{D}_{(m)ij}^e = \left(\delta_{im}\delta_{jn} - \chi C_{ijpq}^{e-1}C_{(m)pqmn}^A\right)C_{mnkl}^{e-1}\dot{\mathbf{T}}_{(m)kl} - \chi C_{ijpq}^{e-1}\dot{C}_{(m)pqmn}^AC_{mnkl}^{e-1}\mathbf{T}_{(m)kl} + \Lambda_{(m)ij}^{eA}\dot{\theta} \dots \dots (5.49)$$

ここで， $\Lambda_{(m)}^{eA}$ は温度依存性を表す 2 階のテンソルであり，次のように表される．

$$\begin{aligned} \Lambda_{(m)ij}^{eA} &= -\left(\frac{\partial\chi}{\partial\theta}C_{ijpq}^{e-1} + \chi\frac{\partial C_{ijpq}^{e-1}}{\partial\theta}\right)C_{(m)pqmn}^AC_{mnkl}^{e-1}\mathbf{T}_{(m)kl} \\ &\quad + \left(\delta_{im}\delta_{jn} - \chi C_{ijpq}^{e-1}C_{(m)pqmn}^A\right)\frac{\partial C_{mnkl}^{e-1}}{\partial\theta}\mathbf{T}_{(m)kl} + \left\{\alpha_h + \frac{\partial\alpha_h}{\partial\theta}(\theta - \theta_0)\right\}\delta_{ij} \dots \dots \dots (5.50) \end{aligned}$$

式 (5.49) において応力速度と弾性変形速度の逆関係を求め，さらに現配置へ回転させることにより，次のような異方性弾性構成式

$$\overset{\nabla}{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^{eA} : (\mathbf{D}^e - \Lambda^{eA}\dot{\theta}) + \chi\mathbf{\Gamma} : \mathbf{T} \dots \dots \dots (5.51)$$

が得られる．ここで，

$$\mathbf{C}^{eA} \equiv \mathbf{C}^e : \mathbf{A}^{-1} \dots \dots \dots (5.52)$$

$$\mathbf{A} \equiv \mathbf{I}^{(4)} - \chi\mathbf{C}^{e-1} : \mathbf{C}^A \dots \dots \dots (5.53)$$

$$\mathbf{\Gamma} \equiv \mathbf{C}^{eA} : \mathbf{C}^{e-1} : \overset{\nabla}{\mathbf{C}}^A : \mathbf{C}^{e-1} \dots \dots \dots (5.54)$$

である．また，任意の 4 階のテンソル \mathbf{A} の Mandel-Kratovichil 速度 $\overset{\nabla}{\mathbf{A}}$ は

$$\overset{\nabla}{A}_{ijkl} = R_{im}^*R_{jn}^*R_{kp}^*R_{lq}^*\dot{A}_{(m)mnpq} \quad , \quad \overset{\nabla}{A}_{ijkl} \equiv \dot{A}_{ijkl} + A_{mjkl}W_{mi}^* + A_{imkl}W_{mj}^* + A_{ijml}W_{mk}^* + A_{ijkml}W_{ml}^* \dots \dots (5.55)$$

により定義される [補足 E.4] . したがって, $\overset{\nabla}{C}^A$ は

$$\begin{aligned} \overset{\nabla}{C}_{ijkl}^A &= R_{im}^* R_{jn}^* R_{kp}^* R_{lq}^* \overset{\nabla}{C}_{(m)mpq}^A \\ &= R_{im}^* R_{jn}^* R_{kp}^* R_{lq}^* (\delta_{mp} \dot{H}_{(m)nq} + \dot{H}_{(m)mp} \delta_{nq}) \\ &= \delta_{ik} \overset{\nabla}{H}_{jl} + \overset{\nabla}{H}_{ik} \delta_{jl} \dots \dots \dots \quad (5.56) \end{aligned}$$

となる .

異方性弾性構成式 (5.51) は, 弾性異方性を表す項の係数 χ が $\chi = 0$ であるとき, あるいは異方性変数テンソル \mathbf{H} が $\mathbf{H} = \mathbf{0}$ であるとき等方性弾性構成式 (5.34) に帰着する .

5.6 硬化則の引数の検討

通常の塑性論においては, 式 (5.20) で表される散逸関数に, 非可逆過程の進むべき方向を定めた最大散逸速度の原理を適用することにより塑性構成式が決定される . しかしながら, 本理論においては金属における結晶塑性論と同様, 式 (3.77) から \mathbf{D}^i が運動学的に決定されるので塑性構成式が不要である .

本節では, 硬化則の引数について熱力学的に検討を行う .

式 (3.77) で表される運動学的関係式を第 2 中間配置へと戻し, 式 (5.20) に代入すれば, 非弾性仕事率 $\dot{\Psi}^i$ は次式のように表される . ただし, 微小弾性変形の仮定から体積変化を無視し, $J \approx 1$ とする .

$$\dot{\Psi}^i = \hat{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \sum_{\alpha} (\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(m)}^{(\alpha)}) + \mathbf{M}_{(m)} \cdot \sum_{\alpha} (\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(m)}^{(\alpha)}) - H^d \dot{\theta} + \mathbf{S}_{(m)}^d \cdot \dot{\mathbf{H}}_{(m)} \dots \quad (5.57)$$

ここで, 式 (5.57) における有効応力 $\hat{\mathbf{T}}_{(m)}$ を $\hat{\mathbf{T}}_{(m)} = \hat{\mathbf{T}}'_{(m)} + \sigma_m \mathbf{I}$ のようにその偏差部分 (偏差応力 $\hat{\mathbf{T}}'_{(m)}$) と等方部分 (静水圧応力 $\sigma_m \mathbf{I}$) へ分離することを考える . また, 本研究では準静的な変形を考え, すべり面に垂直な方向をもつ非弾性ひずみ速度 $\dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)}$ は急変しないとの仮定より $\dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} \approx 0$ とする . 以上より, 式 (5.57) は次式のようになる .

$$\begin{aligned} \dot{\Psi}^i &= (\hat{\mathbf{T}}'_{(m)} + \sigma_m \mathbf{I}) \cdot \sum_{\alpha} (\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(m)}^{(\alpha)}) + \mathbf{M}'_{(m)} \cdot \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)} - H^d \dot{\theta} + \mathbf{S}_{(m)}^d \cdot \dot{\mathbf{H}}_{(m)} \\ &= \hat{\mathbf{T}}'_{(m)} \cdot \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)} + \sigma_m \mathbf{I} \cdot \sum_{\alpha} \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(m)}^{(\alpha)} + \mathbf{M}'_{(m)} \cdot \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)} - H^d \dot{\theta} + \mathbf{S}_{(m)}^d \cdot \dot{\mathbf{H}}_{(m)} \dots \quad (5.58) \end{aligned}$$

さらに式 (5.58) をすべり面上の量を用いて表現すれば次式が得られる .

$$\dot{\Psi}^i = \sum_{\alpha} \hat{\tau}^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + 3 \sum_{\alpha} \sigma_m^{(\alpha)} \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} + \sum_{\alpha} \kappa^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} - H^d \dot{\theta} + \mathbf{S}_{(m)}^d \cdot \dot{\mathbf{H}}_{(m)} \dots \quad (5.59)$$

ただし, $\hat{\tau}^{(\alpha)} \equiv \hat{\mathbf{T}}'_{(m)} \cdot \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)}$ は有効分解せん断応力であり, 分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ および分解せん断背応力 $\tau_b^{(\alpha)}$ を用いて $\hat{\tau}^{(\alpha)} = \tau^{(\alpha)} - \tau_b^{(\alpha)}$ と表される . 分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ および分解せん断背応力 $\tau_b^{(\alpha)}$ はそれぞれ

$$\tau^{(\alpha)} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (5.60)$$

$$\tau_b^{(\alpha)} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (5.61)$$

で得られるものとする . また, $\kappa^{(\alpha)} \equiv \mathbf{M}'_{(m)} \cdot \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)}$ はすべり面上の $\mathbf{M}'_{(m)}$ の値である . なお, ポリマの後続再硬化現象を再現するための背応力 \mathbf{B} の構成式としては, 分子鎖網目理論に基づいて Arruda-Boyce⁽³⁵⁾ により提案されたものが挙げられる [補足 E.5] .

負荷過程のみを考慮して式 (5.59) を全微分形で書き改めれば次のようになる .

$$d\bar{\Psi}^i = \sum_{\alpha} \hat{\tau}^{(\alpha)} d\gamma^{(\alpha)} + 3 \sum_{\alpha} \sigma_m^{(\alpha)} d\varepsilon_m^{i(\alpha)} + \sum_{\alpha} \kappa^{(\alpha)} d\dot{\gamma}^{(\alpha)} - H^d d\theta + \mathbf{S}_{(m)}^d \cdot d\mathbf{H}_{(m)} \dots \dots \dots (5.62)$$

ここで , Gibbs 関数の散逸部分 \bar{G}^d を

$$\bar{G}^d \equiv \bar{\Psi}^i - 3 \sum_{\alpha} \sigma_m^{(\alpha)} \varepsilon_m^{i(\alpha)} \dots \dots \dots (5.63)$$

と定義し , これを用いて式 (5.62) を Legendre 変換すると

$$d\bar{G}^d = \sum_{\alpha} \hat{\tau}^{(\alpha)} d\gamma^{(\alpha)} - 3 \sum_{\alpha} \varepsilon_m^{i(\alpha)} d\sigma_m^{(\alpha)} + \sum_{\alpha} \kappa^{(\alpha)} d\dot{\gamma}^{(\alpha)} - H^d d\theta + \mathbf{S}_{(m)}^d \cdot d\mathbf{H}_{(m)} \dots \dots \dots (5.64)$$

となる . 式 (5.64) より , Gibbs 関数の散逸部分 \bar{G}^d の関数形は次式のように求められる .

$$\bar{G}^d = \bar{G}^d(\gamma^{(\alpha)}, \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \sigma_m^{(\alpha)}, \theta, \mathbf{H}_{(m)}) \dots \dots \dots (5.65)$$

同様に , 式 (5.64) より , $\hat{\tau}^{(\alpha)} = \frac{\partial \bar{G}^d}{\partial \gamma^{(\alpha)}}$ と表されることから , 有効分解せん断応力 $\hat{\tau}^{(\alpha)}$ の関数形も次式のように得られる .

$$\hat{\tau}^{(\alpha)} = \hat{\tau}^{(\alpha)}(\gamma^{(\alpha)}, \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \sigma_m^{(\alpha)}, \theta, \mathbf{H}_{(m)}) \dots \dots \dots (5.66)$$

さらに式 (5.66) を非弾性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ について解けば , 次式のようなひずみ速度依存形の硬化則が得られる .

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}^{(\alpha)}(\hat{\tau}^{(\alpha)}, \gamma^{(\alpha)}, \sigma_m^{(\alpha)}, \theta, \mathbf{H}_{(m)}) \dots \dots \dots (5.67)$$

式 (5.66) および式 (5.67) より , 硬化則の引数に温度 θ ならびに静水圧応力 σ_m が熱・力学的体系に整合する形で導入されることが示された .

なお , 村上⁽²⁷⁾ によれば , \mathbf{M}' は $\overset{\nabla}{\mathbf{T}}'$ で表されるので , $\kappa^{(\alpha)}$ も $\hat{\tau}^{(\alpha)}$ で表現できる . よって , $\kappa^{(\alpha)}$ の硬化則は不要となる .

5.7 弾粘塑性構成式

ここでは , 得られた異方性弾性構成式 (5.51) へ運動学的関係式 (3.77) を代入し , 弾粘塑性構成式を導出する .

まず , 弾性構成式 (5.51) を非弾性変形速度を用いて次のように書き換えておく .

$$\begin{aligned} \overset{\nabla}{\mathbf{T}} &= \mathbf{C}^{eA} : (\mathbf{D}^e - \Lambda^{eA} \dot{\theta}) + \chi \mathbf{\Gamma} : \mathbf{T} \\ &= \mathbf{C}^{eA} : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^i - \Lambda^{eA} \dot{\theta}) + \chi \mathbf{\Gamma} : \mathbf{T} \\ &= \mathbf{C}^{eA} : (\mathbf{D} - \Lambda^{eA} \dot{\theta}) - \mathbf{C}^{eA} : \mathbf{D}^i + \chi \mathbf{\Gamma} : \mathbf{T} \dots \dots \dots (5.68) \end{aligned}$$

さらに第3章で得られた非弾性変形速度 \mathbf{D}^i に関する運動学的関係式 (3.77) において , 多くの実験事実からよく知られているように , $\dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} \ll \dot{\gamma}^{(\alpha)}$ であることを考慮して $\dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)}$ を無視したものを式 (5.68) へ代入すれば次のような弾粘塑性構成式が得られる .

$$\overset{\nabla}{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^{eA} : (\mathbf{D} - \Lambda^{eA} \dot{\theta}) - \mathbf{C}^{eA} : \left(\sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \right) + \chi \mathbf{\Gamma} : \mathbf{T} \dots \dots \dots (5.69)$$

ただし，応力速度 $\overset{\nabla}{\mathbf{T}}$ は

$$\overset{\nabla}{\mathbf{T}} \equiv \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{W}^* \mathbf{T} + \mathbf{T} \mathbf{W}^* \dots \dots \dots (5.70)$$

にて定義される Mandel-Kratochvil 速度であり，またスピン \mathbf{W}^* は式 (3.73) および式 (3.78) より

$$\begin{aligned} \mathbf{W}^* &= \mathbf{W} - \mathbf{W}^i \\ &= \mathbf{W} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_A^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.71) \end{aligned}$$

のように表される下部構造スピン (Substructure スピン) である．

5.8 結晶塑性論に基づく応力速度の導出

本節では，速度形弾粘塑性構成式を結晶塑性論に適する形で表現する．

まず，前節で得られた弾粘塑性構成式 (5.69) に対して Cauchy 応力の Mandel-Kratochvil 速度 $\overset{\nabla}{\mathbf{T}}$ を Jaumann 速度 $\overset{\circ}{\mathbf{T}}$ とそれ以外の部分に分解すると，次のように変形できる．

$$\begin{aligned} \overset{\nabla}{\mathbf{T}} &= \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{W}^* \mathbf{T} + \mathbf{T} \mathbf{W}^* \\ &= \dot{\mathbf{T}} - (\mathbf{W} - \mathbf{W}^i) \mathbf{T} + \mathbf{T} (\mathbf{W} - \mathbf{W}^i) \\ &= \overset{\circ}{\mathbf{T}} + (\mathbf{W}^i \mathbf{T} - \mathbf{T} \mathbf{W}^i) \dots \dots \dots (5.72) \end{aligned}$$

ここで， $\overset{\circ}{\mathbf{T}}$ は次式で与えられる Jaumann 速度であり，その共回転スピンは連続体スピン \mathbf{W} である．

$$\overset{\circ}{\mathbf{T}} = \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{W} \mathbf{T} + \mathbf{T} \mathbf{W} \dots \dots \dots (5.73)$$

また，式 (5.72) における右辺の第 2 項，第 3 項は，非弾性スピンの式 (3.78) のように非弾性せん断ひずみと分子鎖基底を用いて表されることを考慮すれば次のように示される．

$$\mathbf{W}^i \mathbf{T} - \mathbf{T} \mathbf{W}^i = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.74)$$

ただし， $\boldsymbol{\beta}^{(\alpha)}$ は次式で定義される．

$$\boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{P}_A^{(\alpha)} \mathbf{T} - \mathbf{T} \mathbf{P}_A^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.75)$$

式 (5.74) を式 (5.72) に用いると次式を得る．

$$\overset{\nabla}{\mathbf{T}} = \overset{\circ}{\mathbf{T}} + \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.76)$$

式 (5.76) を式 (5.69) に代入し，さらに非弾性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ の項を右辺にまとめると次式を得る．

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{\mathbf{T}} &= \mathbf{C}^{eA} : (\mathbf{D} - \Lambda^{eA} \dot{\theta}) - \mathbf{C}^{eA} : \left(\sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \right) - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} + \chi \mathbf{I} : \mathbf{T} \\ &= \mathbf{C}^{eA} : (\mathbf{D} - \Lambda^{eA} \dot{\theta}) - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\Omega}^{(\alpha)} + \chi \mathbf{I} : \mathbf{T} \dots \dots \dots (5.77) \end{aligned}$$

ただし， $\boldsymbol{\Omega}^{(\alpha)}$ は次式で定義される．

$$\boldsymbol{\Omega}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{C}^{eA} : \mathbf{P}_S^{(\alpha)} + \boldsymbol{\beta}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.78)$$

式 (5.77) は一見 Jaumann 速度を共回転速度に選んだ構成式のように見えるが、非弾性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(a)}$ の項を右辺にまとめたために左辺が Jaumann 速度形式となっただけであり、式 (5.77) は Mandel-Kratovich 速度を共回転速度に選んだ式 (5.69) と等価なものである。以上のように、本理論の構成式は降伏関数を用いる現象論的塑性論で与えられるような塑性構成式および塑性スピンの発展方程式を一切用いていない。本理論に必要なものは式 (5.77) の弾粘塑性構成式と次章で示す硬化則 (非弾性応答則) のみであり、体系が非常に簡潔である。

5.9 多絡み点モデルへの拡張

5.9.1 拡張 Taylor モデル

本理論を FEM 解析へ適用する際は、ポリマ内部の初期等方性を仮定して各絡み点におけるすべり方位は乱数を用いてランダムに与えることとする。また、図 2.4 で表される 8 鎖モデルの単位ブロックの大きさが解析対象に比べ圧倒的に小さいことから、1 物質点あたり多数のすべり方位を割り当てる金属に対する多結晶体の解析スキームを用いるのが適当と考えられる。結晶塑性論において 1 物質点に多数の結晶粒を埋め込む場合、用いられるモデルとしては Taylor モデル⁽⁸²⁾ やセルフコンシステントモデル⁽⁸³⁾ が考えられるが、ここでは単純な前者を用いた多結晶体の解析手法について簡単に説明した後に、本理論への適用方法を考えることにする。

Taylor モデルは、各結晶粒中のひずみは全て等しいという仮定を設けているため、ひずみ一定モデルとも呼ばれている。これは、多結晶体を引張った場合、どの結晶粒のひずみもほぼ同じという単純な考え方に基づいている。立方晶を前提に大ひずみ状態を解析する場合には、これはそれほど悪い近似ではないとされている。一方、応力は結晶粒ごとに異なると考える。この Taylor モデルはひずみ速度非依存の剛塑性仮定における提案であるが、Asaro-Needleman⁽⁶⁸⁾ は、これをひずみ速度依存の弾粘塑性形へと拡張している。まず、ひずみ一定の仮定により、巨視的な変形速度を D 、各結晶粒中の変形速度を $D^{[k]}$ とすると $D = D^{[k]}$ が成り立つ。ここで、 $()^{[k]}$ は第 k 番目の結晶粒における量を表す。さらに、全ての結晶粒の体積が等しいと仮定すると巨視的応力は単純に結晶粒数についての平均値で次式のように与えられる。

$$\widehat{T} = \frac{1}{N_g} \sum_{k=1}^{N_g} T^{[k]} \dots \dots \dots (5.79)$$

ここで、 \widehat{A} は A の結晶粒数についての平均値を表し、 N_g は 1 物質点あたりの結晶粒数である。また、Jaumann の応力速度 $\overset{\circ}{T}$ は次式で表される。

$$\overset{\circ}{T} = \dot{\widehat{T}} - W\widehat{T} + \widehat{T}W \dots \dots \dots (5.80)$$

これは弾性の影響を含んでおり、また速度依存性を考慮しているという点から、拡張 Taylor モデルと呼ばれることがある⁽⁷⁸⁾。

本モデルに対し上述の拡張 Taylor モデルの考え方を導入するにあたり、次のように解釈する。すなわち、絡み点を中心に 8 鎖で構成される単位ブロックが結晶塑性論における結晶粒と対応しており、単位ブロックごとのひずみが巨視的なひずみと等しいと仮定する。一方、絡み点ごとの応力値は異なると考える。このとき、絡み点ごとの変形速度 $D^{[k]}$ は巨視的な変形速度 D と等しく $D^{[k]} = D$ となる。また、式 (5.79) で結晶粒数として用いた N_g は、本モデルでは 1 物質点あたりの絡み点数に対応する。

以上のような考え方に基けば、式 (5.79) および式 (5.80) で表される拡張 Taylor モデルの解析スキームをそのまま利用することが可能となり、その際、式 (5.77) で表される弾粘塑性構成式は第 k 絡み点における構成

式として次式のように変更を受ける．

$$\overset{\circ}{\mathbf{T}}^{[k]} = \mathbf{C}^{eA} : (\mathbf{D} - \mathbf{A}^{eA[k]} \dot{\theta}) - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)[k]} \mathbf{Q}^{(\alpha)[k]} + \chi \mathbf{I}^{[k]} : \mathbf{T}^{[k]} \dots\dots\dots (5.81)$$

ただし， \mathbf{C}^{eA} は各物質点において絡み点数について平均化された異方性弾性係数であるため，絡み点によらない量である．また，絡み点によって環境温度および変形誘起異方性の度合は変わらないと仮定し， $\dot{\theta}$ および χ についても絡み点によらない量としている．式 (5.81) を絡み点数 N_g について平均化すれば，非晶質状態のポリマにおける巨視的構成式が次式のように得られる．

$$\overset{\circ}{\hat{\mathbf{T}}} = \mathbf{C}^{eA} : (\mathbf{D} - \widehat{\mathbf{A}}^{eA} \dot{\theta}) - \frac{1}{N_g} \sum_{k=1}^{N_g} \left(\sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)[k]} \mathbf{Q}^{(\alpha)[k]} - \chi \mathbf{I}^{[k]} : \mathbf{T}^{[k]} \right) \dots\dots\dots (5.82)$$

ただし，

$$\overset{\circ}{\hat{\mathbf{T}}} = \frac{1}{N_g} \sum_{k=1}^{N_g} \overset{\circ}{\mathbf{T}}^{[k]} \dots\dots\dots (5.83)$$

$$\widehat{\mathbf{A}}^{eA} = \frac{1}{N_g} \sum_{k=1}^{N_g} \mathbf{A}^{eA[k]} \dots\dots\dots (5.84)$$

である．

以上のように，各絡み点においてすべり方位をランダムに与え，かつ多結晶塑性論の解析スキームを利用した式 (5.82) を物質点ごとに用いることによってポリマ内部の非晶質状態を記述できる．拡張 Taylor モデルは本来，金属の多結晶塑性論において 1 物質点に多数の結晶粒を埋め込むためのモデルであるが，粒の相互作用や粒界の影響が考慮されていないという点で，多結晶体のモデル化に適さない面もある．むしろ本研究で対象とする非晶性ポリマのように，複数の分子鎖が互いに比較的弱く拘束し合う集合体を表現するのに適しているといえる．

なお，本研究では拡張 Taylor モデルを導入して各物質点に多数の絡み点をランダムな方位で与えた場合を「多絡み点モデル」と呼ぶことにする．また，それに対し，拡張 Taylor モデルを導入せず各物質点に 1 個ずつ絡み点を配置し，さらにすべり系の初期方位を全ての物質点で一定として与えた場合を「単絡み点モデル」と呼ぶことにする．

5.9.2 配向強度・配向方向パラメータ

次に，分子鎖の配向状態を可視化する方法について述べる．多絡み点モデルへ拡張した場合，1 物質点に多数のすべり方位が割り当てられるので，配向状態を表示するために全てのすべり方位を図中に描くと，煩雑になってしまう．そこで，配向の強さを表す θ と配向の方向を表す $\bar{\phi}$ の 2 つのパラメータを各物質点において求め，これらを用いて配向状態を表示する．1 つの絡み点に配置されたすべり系の個数を N_s とすれば，各物質点には $N_s \times N_g$ 個のすべり系が存在することになる．各すべり系方位を表す一般角 $\phi^{(\alpha)[k]}$ の平均値 $\sum_k \sum_{\alpha} \phi^{(\alpha)[k]} / (N_s N_g)$ は配向方向パラメータ $\bar{\phi}$ として扱うことができる．一方，配向強度 θ の計算には，標準偏差を用いる．すべり系方位のばらつきを表す標準偏差 σ は次式のように求められる．

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_k \sum_{\alpha} (\phi^{(\alpha)[k]} - \bar{\phi})^2}{N_s N_g}} \dots\dots\dots (5.85)$$

全てのすべり系が同じ方位をもつ場合は $\sigma = 0$ となり，全てのすべり系が等方的に配置された場合は最大値 $\sigma = \sigma_0$ をとることから，配向強度 θ を

$$\theta \equiv 1 - \frac{\sigma}{\sigma_0} \dots\dots\dots (5.86)$$

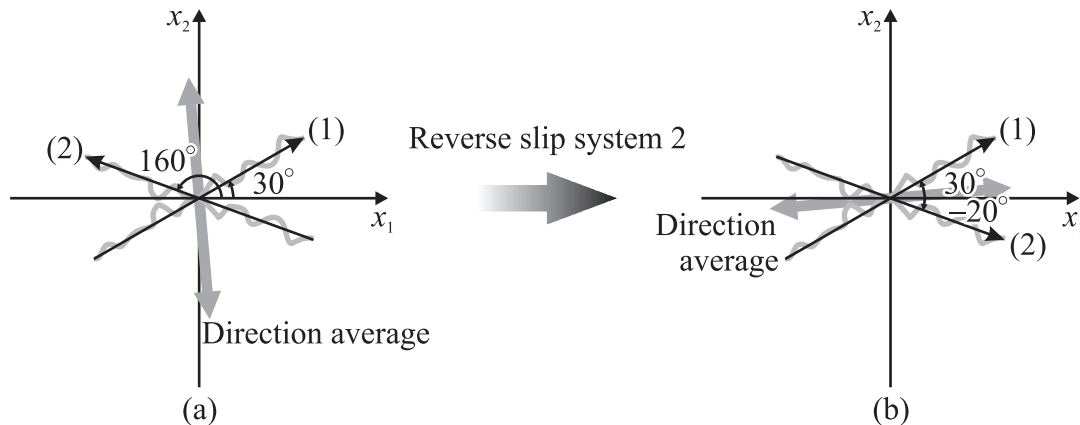


Fig. 5.1 Determination of oriented direction parameter

と定義すれば、全てのすべり系が同じ方位をもつ場合は $\theta = 1$ ，等方的に配置された場合は $\theta = 0$ となり， θ によって配向の強さを表すことができる．

ただし，すべり系方位の平均値 $\bar{\phi}$ の導出に注意が必要である．例えば，図 5.1 のように 1 物質点に 2 つのすべり系が割り当てられ ($N_s \times N_g = 2 \times 1 = 2$)，すべり系 1 の方位が $\phi^{(1)} = 30^\circ$ ，すべり系 2 の方位が $\phi^{(2)} = 160^\circ$ である場合を例にとって考える．上記の手法に従って配向強度および配向方向を求めると， $\theta = -0.44$ ， $\bar{\phi} = 95^\circ$ となり，配向強度の値が負となってしまう．これは，図 5.1(b) のように平均的な方向を決めるべきところを，図 5.1(a) のように決めてしまったことが原因である．すなわち，単純に一般角 $\phi^{(\alpha)}$ の平均値をとただけではすべり系の平均的な方向を求めることができない．そこで，すべり系はその方位を 180° 反転させても等価であることから，図 5.1(b) のようにすべり系 2 の方位を $\phi^{(2)} = -20^\circ$ と反転させ，同様に上記の手法に従って配向強度および配向方向を求めると， $\theta = 0.44$ ， $\bar{\phi} = 5^\circ$ となる．このように，すべり系の方向の一般角 $\phi^{(\alpha)}$ が大きいものから順に 180° 反転させて θ および $\bar{\phi}$ を $N_s \times N_g$ 通り求め， θ が最大となった場合，そのときの θ および $\bar{\phi}$ を配向強度パラメータおよび配向方向パラメータとして採用することにする．以上のアルゴリズムをまとめると以下ようになる．

- (1) 全てのすべり系 ($N_s \times N_g$ 個) を仮想的に等間隔に配置し，式 (5.85) に従って，全てのすべり系が等方的に配置された場合の標準偏差 σ_0 を導出．
- (2) 実際のすべり系方位に対して，平均方向 $\bar{\phi} = \sum_k \sum_\alpha \phi^{(\alpha)[k]} / (N_s N_g)$ および標準偏差 σ を導出．
- (3) 式 (5.86) により θ を導出．
- (4) 全すべり系 ($N_s \times N_g$ 個) のうち，方位の一般角 $\phi^{(\alpha)[k]}$ が最大のを 180° 反転させ，一般角を $\phi^{(\alpha)[k]} - 180^\circ$ に再設定．
- (5) (2)~(4) を $N_s \times N_g$ 回繰り返す．
- (6) 上記の方法により $N_s \times N_g$ 通り計算した θ のうち，最大のを配向強度パラメータとして，また，そのときの $\bar{\phi}$ を配向方向パラメータとして最終的に決定．

このように各物質点において配向強度および配向方向パラメータを導出し，ポリマ内部の配向状態の表現に用いる [補足 E.6]．

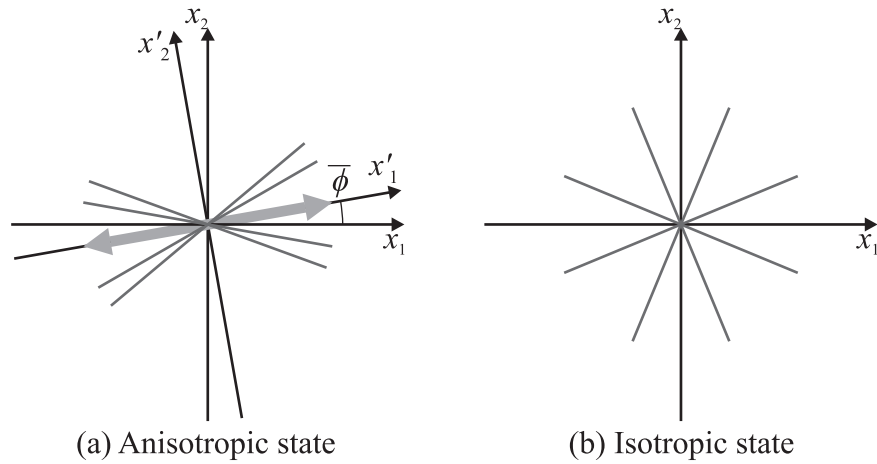


Fig. 5.2 Determination of anisotropy parameter

5.10 異方性変数テンソルの定義

本節では、5.5 節で導出した異方性弾性構成式 (5.51) における異方性変数テンソル H を、分子鎖すべり系方位のばらつきから定義する。各物質点における分子鎖すべり系の方位を図 5.2(a) のように考え、各すべり系方位を表す角を $\phi^{(\alpha)[k]}$ とすれば、前節で求めた各分子鎖基底の配向方向 $\bar{\phi}$ およびその垂直方向への射影の平均値 $\bar{\sigma}_1, \bar{\sigma}_2$ はそれぞれ次式により算出される。

$$\bar{\sigma}_1 = \frac{1}{N_s N_g} \sum_{k=1}^{N_g} \sum_{\alpha=1}^{N_s} |\cos(\phi^{(\alpha)[k]} - \bar{\phi})| \dots \dots \dots (5.87)$$

$$\bar{\sigma}_2 = \frac{1}{N_s N_g} \sum_{k=1}^{N_g} \sum_{\alpha=1}^{N_s} |\sin(\phi^{(\alpha)[k]} - \bar{\phi})| \dots \dots \dots (5.88)$$

また、すべり系が図 5.2(b) に示すように等方的に配置されている場合、射影の平均値は配向方向およびその垂直方向のいずれにおいても等しく、 $\bar{\sigma}_0$ として次式から得られる。

$$\bar{\sigma}_0 = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi |\cos \phi| d\phi = \frac{2}{\pi} \dots \dots \dots (5.89)$$

すべり系の配向方向が x'_1 軸に一致するような x'_i 系で測った異方性変数テンソル H の成分を行列表示すれば、対角行列となるので、それを $[H^d]$ とおいて次式のように定義する。

$$[H^d] \equiv \begin{bmatrix} \frac{\bar{\sigma}_1}{\bar{\sigma}_0} - 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\bar{\sigma}_2}{\bar{\sigma}_0} - 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \dots \dots \dots (5.90)$$

分子鎖配向が等方的であれば $\bar{\sigma}_1$ および $\bar{\sigma}_2$ は $\bar{\sigma}_0$ と等しくなり、 $[H^d] = [0]$ となる。基準座標系 x_i で記述した $[H]$ を対角化するための直交行列 $[R]$ は、2 次元モデルの場合、

$$[R] = \begin{bmatrix} \cos \bar{\phi} & \sin \bar{\phi} & 0 \\ -\sin \bar{\phi} & \cos \bar{\phi} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \dots \dots \dots (5.91)$$

と表されるので, x_i 系における $[H]$ は次式で与えられる.

$$[H] = [R]^T [H^d] [R] \dots \dots \dots (5.92)$$

このように定義した異方性変数テンソル H は対称性を有する.

第6章

自由体積変化に基づく非弾性応答則

本章では、Hasan-Boyce⁽⁶⁴⁾ によって提案された自由体積変化に基づく非弾性応答則を紹介し、これを本理論へ適用することによってポリマの微視的な情報と塑性変形の素過程を関係づけるとともに、降伏前の非線形粘弾性応答ならびに降伏後のひずみ軟化を再現可能なモデルを構築する。その際、この非弾性応答則には Pan-Rice 硬化則⁽⁷²⁾ におけるひずみ速度感度指数にあたるものが導入されていないため、これを新たに導入し、ひずみ速度依存性の強さを制御できるよう変更する。

なお、6.1 節は Hasan-Boyce モデルの紹介であり、6.2 節では Argon モデルと Hasan-Boyce モデルの関連づけを本研究において独自に行う。また、6.3 節は Hasan-Boyce による非弾性応答則の定式化であるが、結晶塑性論の体系に適合するよう若干修正を加えるほか、新たにひずみ速度感度指数を導入する。さらに、6.4 節～6.6 節では本非弾性応答則を採用して数値解析を行うにあたり必要となる積分計算などを本研究で独自に行う。

6.1 自由体積変化に基づく非弾性変形モデル

ここでは、ポリマの力学的特性の中で特に降伏前の非線形粘弾性応答および降伏後のひずみ軟化を再現するために提案された自由体積変化に基づく非弾性応答則について説明する。

一般にポリマは、分子鎖によって占められている部分と分子鎖間に存在する空隙とからなり、前者は占有体積、後者は自由体積と呼ばれている。Hasan ら⁽⁶²⁾ は、ポリメタクリル酸メチル (PMMA) に対する陽電子消滅寿命測定法 (Position Annihilation Lifetime Spectroscopy) を用いた実験により、この自由体積の大きさが降伏後のひずみ軟化に伴って急激に増大することを見出している。すなわち、降伏後のひずみ軟化は、非弾性変形に伴う材料内部での自由体積の増加が原因となっており、自由体積密度の高い領域において分子鎖の引き抜きなど構造緩和が進み、分子鎖セグメントの回転など、局所的なせん断変形が生じているものと考えられる。このような考え方に基づき、Hasan らは、自由体積の数密度 D の塑性せん断ひずみに対する発展式を次のように表している。

$$\frac{\partial D}{\partial \gamma^p} = -\frac{D - D_\infty}{t_p} \dots\dots\dots (6.1)$$

ここで、 D_∞ は自由体積の数密度の平衡値、 t_p は自由体積の進展に関する特性無次元時間であり、定数として与えられる。また Hasan らは、微視的降伏機構としては第 2 章において詳述した Argon モデルを採用し、式 (2.3) における参照ひずみ速度 $\dot{\gamma}_0$ を新たに自由体積の数密度を用いて表現することにより、自由体積変化を考慮した次式のような粘塑性応答則を提案している。

$$\dot{\gamma}^p = \gamma_0 \varrho D \left[-\frac{\Delta G_0}{k_B \theta} \left\{ 1 - \left(\frac{\tau}{s_0} \right)^{\frac{5}{6}} \right\} \right] \dots\dots\dots (6.2)$$

ここで、 γ_0 は 1 回のエネルギー障壁乗り越えにより起こるせん断ひずみの体積積分値、 ϱ は変形に対するエネルギー障壁を乗り越えようとする単位時間あたりの試行回数および ΔG_0 は活性化エネルギーの参照値であり、これらは定数で与えられる。式 (6.1) および式 (6.2) を用いた数値解析の結果、降伏後のひずみ軟化応答をある程度再現できることが確認されている。しかしながら、本来粘性を含むために非線形となる粘弾性応答を線形近似しているため、弾性から非弾性流れへの緩やかな遷移を再現できないこと (図 1.10 参照)、ならびに非弾性変形を自由体積の数密度という 1 つの内部変数のみを用いて特徴づけるには限界があることが同時に指摘されている。

そこで Hasan-Boyce⁽⁶⁴⁾ は、降伏前の粘弾性挙動まで再現可能な新たな非弾性応答則を次のような考え方に基づき定式化している。すなわち、ポリマの内部状態は非常に不均一な性質をもっており、この状態を表現するため、局所自由体積の分布と活性化エネルギー分布とを関連づけて考えれば、非晶性ポリマにおける非弾性

変形の微視的メカニズムが図 6.1 のような模式図を用いて説明できる。すなわち、非晶性ポリマの内部には局所せん断変形が可能な自由体積率の高い領域 (図 6.1 における白円) が散在しており [図 6.1(a)], 変形の初期においてはそのような低活性化エネルギー状態の領域でのみせん断変形が生じ、応力-ひずみ線図は線形性を示す。一方、せん断変形による弾性ひずみエネルギーがその周囲に貯蔵され (図 6.1 における黒点), 後続変形に必要な活性化エネルギーを増大させるために変形に対する抵抗として作用することになる [同図 (b)]。上記 (a)~(b) の過程においては、変形を受けて延伸された分子鎖が自由体積に流れ込んでくる。そのため、変形可能な高自由体積領域は急激に減少し、低自由体積領域、すなわち高活性化エネルギー領域でしか変形できなくなり、非線形粘弾性挙動が発現する [同図 (c)]。さらに変形が進むと、弾性ひずみエネルギーを蓄えることのできる領域は使い尽くされ、もはや材料内にそれ以上のエネルギーを貯蔵することは困難となる。そこで、それ以上のエネルギーを貯えるための新たな高自由体積領域が形成され [同図 (d)], この領域において分子鎖セグメントの回転などの永久変形が生じるために巨視的な降伏が起こる。さらに、この低活性化エネルギー領域が増大することにより [同図 (e)], 材料内部の構造緩和が進み、巨視的なひずみ軟化が発生することになる。

Hasan-Boyce は、以上のような考えに基づき、微視的降伏機構を特定しない Eyring の反応速度論⁽⁶⁵⁾ における活性化エネルギーに対して、その確率密度関数を導入することにより、局所せん断変形が可能な領域の分布を表している。さらに、その集積として非弾性ひずみ速度を計算する方法を提案している (次節以降を参照のこと)。その際、局所自由体積の分布あるいは局所貯蔵ひずみエネルギーの分布を表す 3 つの内部変数を用いており、シミュレーションの結果、図 1.10 に示すように非単調負荷状態における非線形粘弾性応答および降伏後のひずみ軟化を高精度に再現できることが確認されている。なお、Hasan ら⁽⁶²⁾ による陽電子消滅寿命測定法 (PALS) を用いた実験から、実際の自由体積の大きさは降伏前には変化せず、降伏後に急激に増大することが観測されているが、Hasan-Boyce⁽⁶⁴⁾ は降伏前の非線形粘弾性応答を自由体積の挙動に関連づけて説明するため、自由体積は降伏前に減少し、降伏後に増加するという上記のようなモデルを提案している。

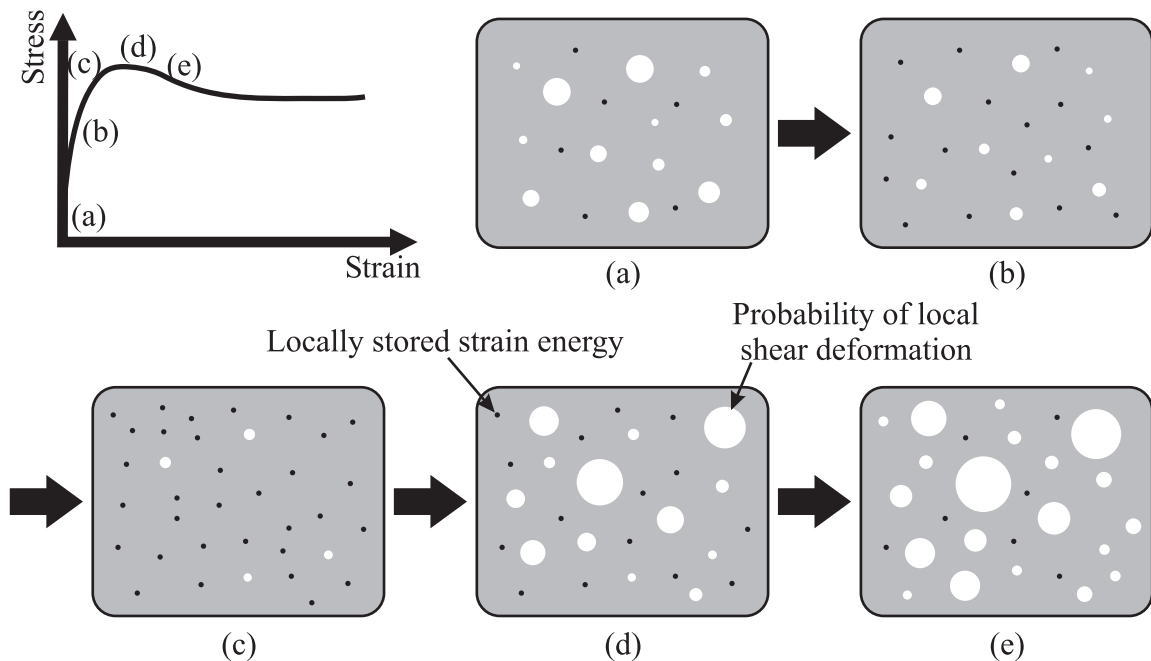


Fig. 6.1 Evolution of shear deformation sites with increase of strain

6.2 自由体積と分子鎖のキック回転との関係

前節のような Hasan-Boyce によって提案された活性化エネルギーの考えに基づく非弾性変形応答を, Argon による非晶性ポリマの塑性変形の微視的メカニズムに結びつけて解釈すれば, 次のようになる. 非晶性ポリマの内部には自由体積率の高い領域, すなわち分子鎖が希薄で局所せん断変形が可能な領域が散在しており, 変形の初期においてはこのような高自由体積 (低活性化エネルギー) 領域のみが急激に減少することにより非線形粘弾性挙動が発現する. その後, 変形が進み周囲の母材領域に貯蔵される弾性ひずみエネルギーがあるしきい値を越えると, それ以上のエネルギーを蓄えるための新たな高自由体積領域が形成され, 巨視的な降伏が現れる. また, 降伏後は高自由体積領域が増大するため, 分子鎖の絡み合いの解けなどが生じることによってひずみ軟化挙動を示すようになる. 本研究では, 図 6.2 に示すように, この新たに形成された高自由体積領域において周囲の分子鎖の引き抜きなど構造緩和が進み, 1 本の分子鎖におけるキック回転による応力方向への配向が生じるためのポテンシャル障壁が低くなってせん断変形が生じやすくなるものと考え, Argon モデルと Hasan-Boyce モデルを結びつけている. このように考えることで, これら 2 つのモデルを 1 つの論理体系の中で同時に使用することを整合させている. 以上の概念を活性化エネルギーの分布を用いて定式化した次節で示すような硬化則を採用する.

6.3 非弾性応答則の定式化

微視的降伏機構を特定しない Eyring の反応速度論へ活性化エネルギーの確率分布を導入した Hasan-Boyce⁽⁶⁴⁾ による非弾性応答則を第 2 章および第 3 章で述べた非晶性ポリマに対する結晶塑性論的分子鎖塑性モデルへ適用すれば, 非弾性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(a)}$ は次式のように表される.

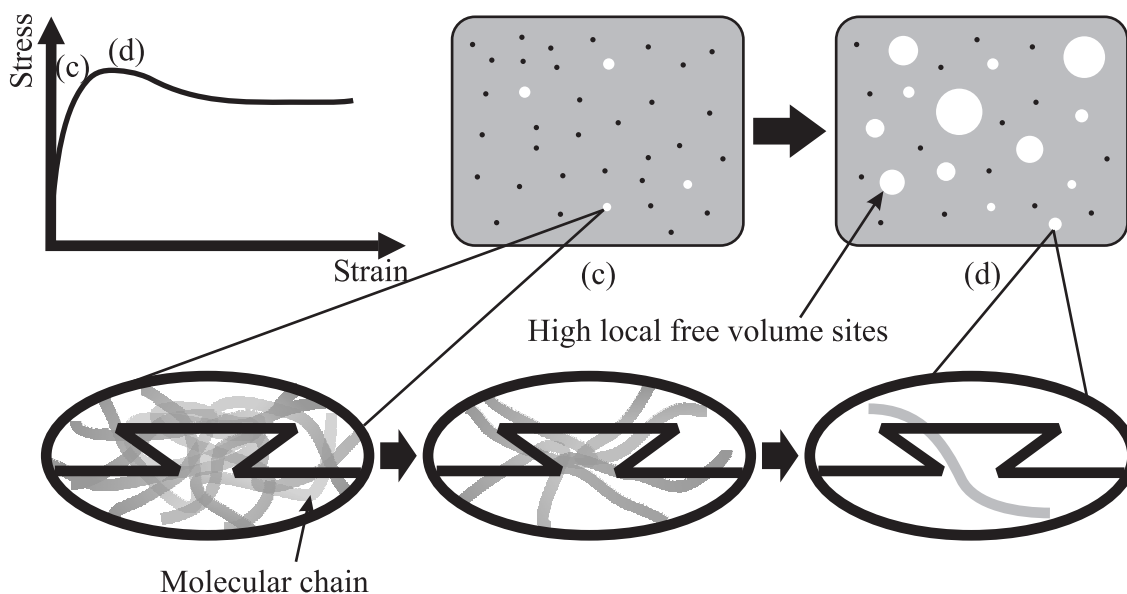


Fig. 6.2 Schematic representation of relationship between local free volume and rotation of kink in molecular chain

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_r \operatorname{sgn}(\hat{\tau}^{(\alpha)}) \int_0^\infty \varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) \left[\exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 - |\hat{\tau}^{(\alpha)}/\tau_0|^{1/u}\}^{1/v}}{k_B \theta}\right) - \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 + |\hat{\tau}^{(\alpha)}/\tau_0|^{1/u}\}^{1/v} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right] d\Delta F_0 \dots\dots\dots (6.3)$$

ここで、 $\dot{\gamma}_r$ は参照ひずみ速度、 k_B は Boltzmann 定数、 ΔF_0 は活性化エネルギー、 $S^{(\alpha)}$ は局所貯蔵ひずみエネルギー、 $\hat{\tau}^{(\alpha)}$ は有効分解せん断応力、 τ_0 は参照応力に相当する限界強度、 u および v は材料依存のパラメータであり、Argon の硬化則や Pan-Rice 形硬化則⁽⁷²⁾ と比較すれば、これらはひずみ速度感度指数としての役割をもつと予想される。Hasan-Boyce は $u = v = 1$ として定式化しているが、本研究ではひずみ速度依存性の強さを制御するため、これらを変数のまま式 (6.3) に導入している。また、 $\varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0)$ は図 6.3 に示すような活性化エネルギーの確率密度関数であり、次式で与えられる。

$$\varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) = \begin{cases} \frac{1}{2A_1^{(\alpha)}} \exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) & \left(a^{(\alpha)} \leq \Delta F_0 \leq a^{(\alpha)} + \frac{3\pi\alpha^{(\alpha)}}{4}\right) \\ \frac{1}{2A_2^{(\alpha)}} \exp\left(-\frac{\Delta F_0 - a'^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a'^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) & \left(a^{(\alpha)} + \frac{3\pi\alpha^{(\alpha)}}{4} \leq \Delta F_0 \leq a^{(\alpha)} + \frac{3\pi\alpha^{(\alpha)}}{2}\right) \\ 0 & \text{(otherwise)} \end{cases} \dots\dots\dots (6.4)$$

ここで、 $a^{(\alpha)}$ および $\alpha^{(\alpha)}$ はそれぞれ活性化エネルギー ΔF_0 の確率分布の最小値および標準偏差を表し、 $A_1^{(\alpha)}$ 、 $A_2^{(\alpha)}$ および $a'^{(\alpha)}$ はそれぞれ次のように表される。

$$A_1^{(\alpha)} = \frac{\alpha^{(\alpha)}}{2} \left[1 + \sqrt{2} \exp\left\{\frac{3\pi}{4}\right\} \right] = e^\pi A_2^{(\alpha)} \dots\dots\dots (6.5)$$

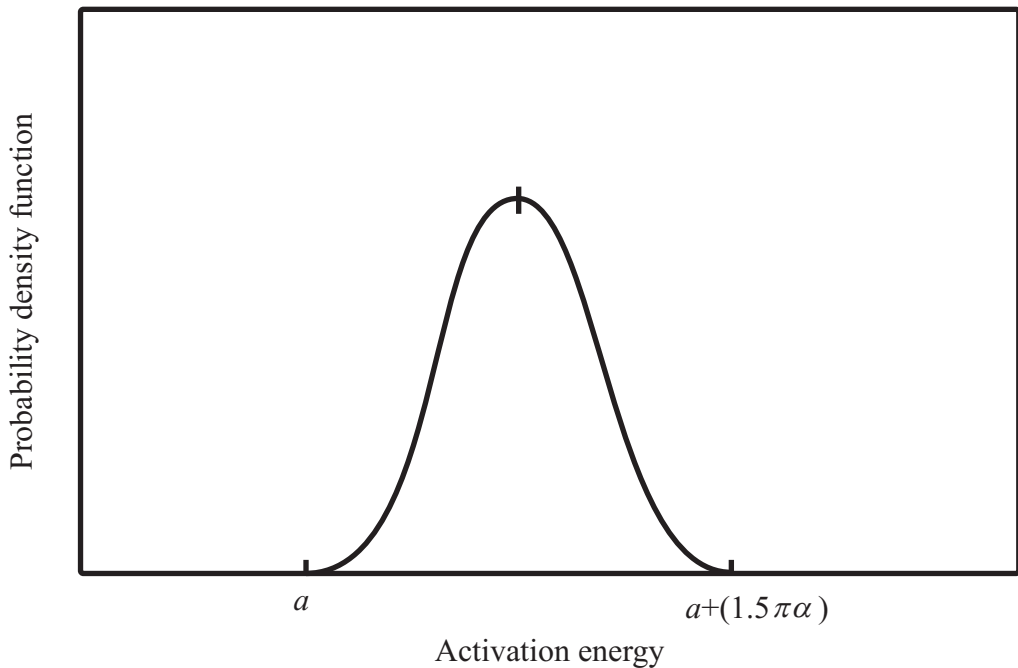


Fig. 6.3 Probability density function with respect to activation energy

$$a^{(\alpha)} = a^{(\alpha)} + \frac{\pi\alpha^{(\alpha)}}{2} \dots\dots\dots (6.6)$$

式 (6.4) における $\varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0)$ および図 6.3 は, ある活性化エネルギーをもつ局所的な部分の体積率を表している. すなわち, 式 (6.4) を $0 \leq \Delta F_0 < \infty$ の範囲で ΔF_0 について積分して図 6.3 の曲線と横軸で囲まれた面積を求めると 1 となる. この $\varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0)$ に, 図 6.4 に示した局所せん断変形が起こる確率 $\exp[-\Delta F_0/(k_B \theta)]$ を乗ずることで, ある活性化エネルギーの値に対して, 実際に変形が起こる部分の体積率を求めることができる. すなわち, これが次式 (6.7) および図 6.5 に示す確率分布関数 $\Xi^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta)$ である.

$$\Xi^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta) = \varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) \exp\left\{-\frac{\Delta F_0}{k_B \theta}\right\} \dots\dots\dots (6.7)$$

確率分布関数 $\Xi^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta)$ を $0 \leq \Delta F_0 < \infty$ の範囲で ΔF_0 について積分すると, 局所せん断変形を起こす体積率 (局所せん断変形を起こす期待値) を求めることができる. すなわち, 図 6.5 の曲線と横軸で囲まれた面積 $\int_0^\infty \Xi^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta) d\Delta F_0$ の増減は, Hasan-Boyce モデルにおける高自由体積領域の増減と一致しているといえるため, 本研究では $\int_0^\infty \Xi^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta) d\Delta F_0$ の値を「自由体積率」と呼ぶことにする.

また, 式 (6.3) および式 (6.4) における 3 つの内部変数 $a^{(\alpha)}$, $\alpha^{(\alpha)}$ ならびに $S^{(\alpha)}$ の発展式はそれぞれ次の式 (6.8) ~ (6.10) にて与えられる⁽⁶⁴⁾[補足 F.1].

$$\dot{a}^{(\alpha)} = -(a^{(\alpha)} - a_{eq}) \exp[-\zeta \exp(-\zeta \gamma_a)] \sum_{\beta} \varpi^{(\beta)} \dots\dots\dots (6.8)$$

$$\dot{\alpha}^{(\alpha)} = -(\alpha^{(\alpha)} - \alpha_{eq}) \sum_{\beta} \varpi^{(\beta)} \dots\dots\dots (6.9)$$

$$\dot{S}^{(\alpha)} = \beta_1 [1 + \beta_2 \exp(-\beta_3 \gamma_a)] \hat{\tau}_a \sum_{\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| - S^{(\alpha)} \sum_{\beta} \varpi^{(\beta)} \dots\dots\dots (6.10)$$

ここで, a_{eq} および α_{eq} はそれぞれ $a^{(\alpha)}$ および $\alpha^{(\alpha)}$ の平衡値, $\zeta, \beta_1, \beta_2, \beta_3$ は材料定数, $\gamma_a = \sum_{\alpha} \gamma^{(\alpha)}$, $\hat{\tau}_a = \sum_{\alpha} \hat{\tau}^{(\alpha)}$ であり, $\varpi^{(\alpha)}$ は頻度因子 ϖ_0 を用いて次のように表される.

$$\varpi^{(\alpha)} = \varpi_0 \int_0^\infty \varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) \left| \exp\left(\frac{-\Delta F_0 \{1 - |\hat{\tau}^{(\alpha)} / \tau_0|^{1/u}\}^{1/v}}{k_B \theta}\right) - \exp\left(\frac{-\Delta F_0 \{1 + |\hat{\tau}^{(\alpha)} / \tau_0|^{1/u}\}^{1/v} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right| d\Delta F_0 \dots\dots\dots (6.11)$$

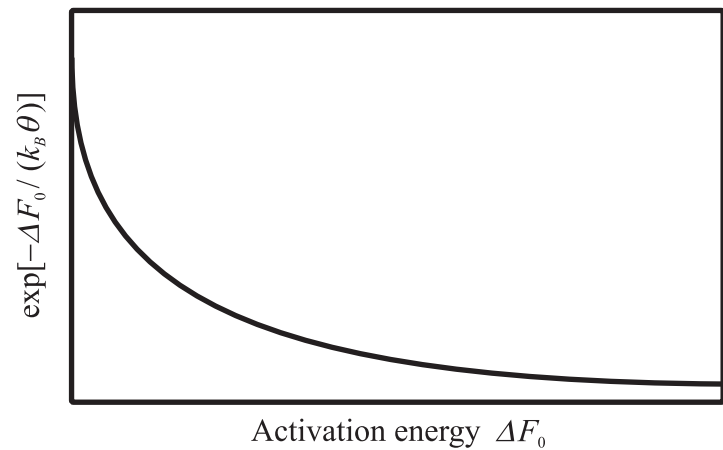


Fig. 6.4 Probability of local shear deformation with respect to activation energy

式 (6.3) と式 (6.11) を比較すれば、次の関係が得られる。

$$\varpi^{(\alpha)} = \frac{\varpi_0}{\dot{\gamma}_r} |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| \dots \dots \dots (6.12)$$

本硬化則では、通常の結晶塑性論における流れ応力に相当する τ_0 の発展式は存在せず、 τ_0 の値は変化しない。その代わりに、発展式 (6.8) ~ (6.10) により 3 つの内部変数 $a^{(\alpha)}$ 、 $\alpha^{(\alpha)}$ および $S^{(\alpha)}$ が変化することで粘弾性応答およびひずみ軟化現象が再現される。また、式 (6.8) ~ (6.10) においては、 $|\dot{\gamma}^{(\beta)}|$ あるいは $\varpi^{(\beta)}$ を各すべり系について合計した値として導入している。いま、式 (6.8) ~ (6.10) を従来の金属の結晶塑性論における流れ応力 $g^{(\alpha)}$ の発展式

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h^{(\alpha\beta)} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \dots \dots \dots (6.13)$$

と比較すると、本モデルでは、すべり系間の相互作用を表す硬化係数行列 $h^{(\alpha\beta)}$ における対角成分 (自己硬化) と非対角成分 (潜在硬化) の値を等しくおいていることがわかる。これは、ポリマにおいては主すべり系の活動ではもちろん、2 次すべり系の活動によっても自由体積が生じるので、いずれか一方が活動すれば、活性化エネルギーは減少すると考えられるからである。

次に、内部変数 $a^{(\alpha)}$ および $\alpha^{(\alpha)}$ がどのように確率分布関数 $E^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta)$ に関与するかについて述べる。図 6.6 に示すように、内部変数の発展式 (6.8) および式 (6.9) により、変形とともにまず $\alpha^{(\alpha)}$ が増加し、少し遅れて

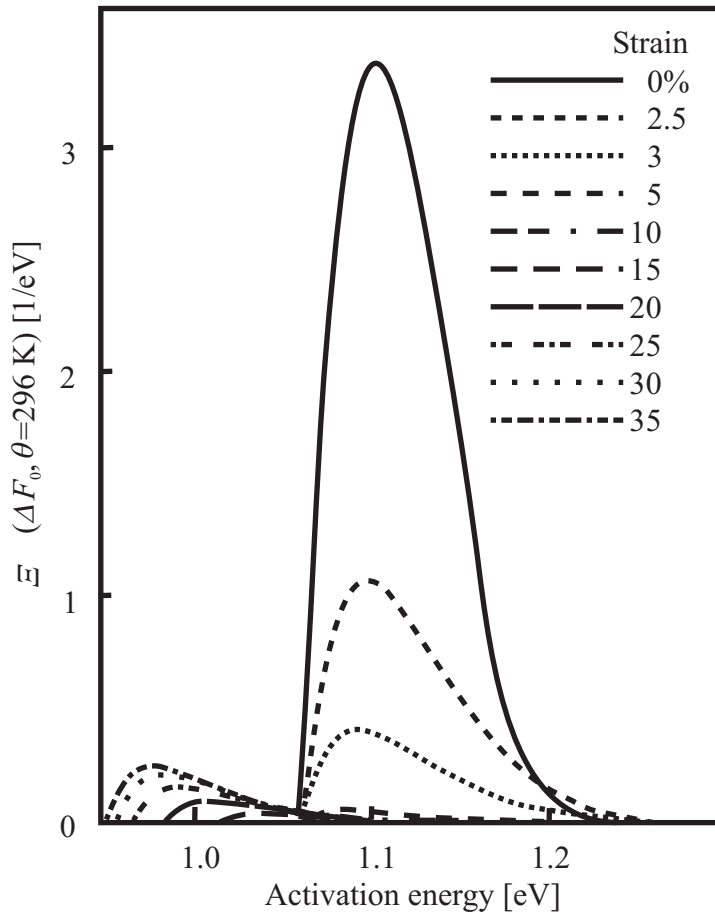


Fig. 6.5 Probability distribution function of local free volume with respect to activation energy

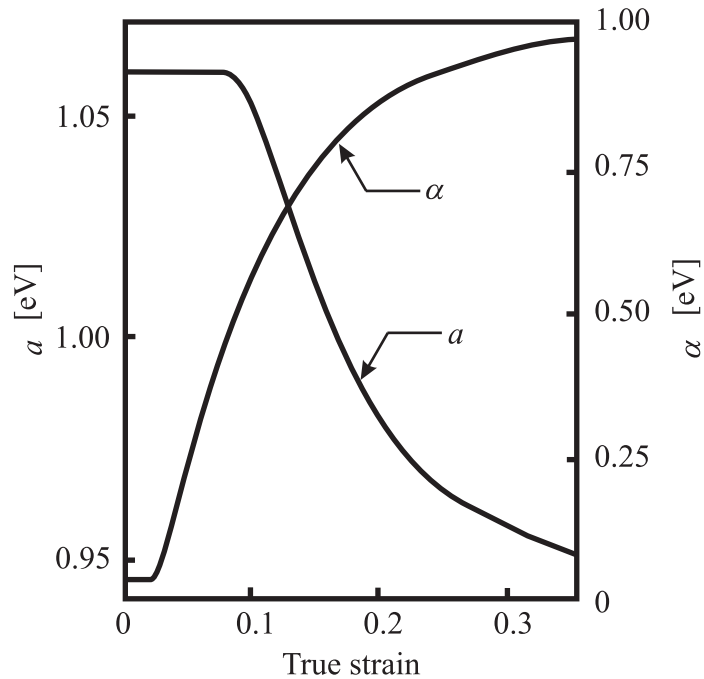


Fig. 6.6 Evolution of internal variables of probability density function with increase of true strain

$a^{(\alpha)}$ が減少し始めている．変数 $\alpha^{(\alpha)}$ は，図 6.3 における活性化エネルギー分布の標準偏差であるから，その増加は図 6.3 の分布のばらつきをより大きくする働きをもつ．関数 $\varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0)$ の積分値は常に 1 となるはずであるが，確率分布関数 $\mathcal{E}^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta)$ には局所せん断変形が起こる確率が乗じてあるため， $\alpha^{(\alpha)}$ が増加し $\varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0)$ の分布がばらつくと， $\mathcal{E}^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta)$ の積分値は減少していくことになる（図 6.5 の 0～5% ひずみ）．すなわち，高自由体積領域が減少し，ついにはほぼ零に等しくなる．これが弾性変形から降伏へ向かう過程を表現している．一方， $a^{(\alpha)}$ は図 6.3 における活性化エネルギー（横軸）の最小値を表すことから， $a^{(\alpha)}$ の減少は図 6.3 の分布を左に平行移動させる働きがある．分布の移動によって $\varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0)$ の分布形状は変わらないが，局所せん断変形の起こる確率がより高くなるため， $\mathcal{E}^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta)$ の積分値は増加する．すなわち，高自由体積領域が再び形成され増加することになる．これが初期降伏からひずみ軟化へ向かう過程を表現している（図 6.5 の 10～35% ひずみ）．以上のように， $\alpha^{(\alpha)}$ の進展は降伏前の自由体積の減少を意味し，非線形粘弾性変形を支配している．一方， $a^{(\alpha)}$ の進展は初期降伏および降伏後の新たな高自由体積領域の形成ならびに増加を意味し，降伏とひずみ軟化を支配している．この $\alpha^{(\alpha)}$ および $a^{(\alpha)}$ の進展を組み合わせることにより変形に伴う活性化エネルギー分布の変化，すなわち局所自由体積の増減・分布形状の変化を表現できる．

一方，式 (6.10) で表される $S^{(\alpha)}$ の進展は変形による局所貯蔵ひずみエネルギーの増減および除荷時のエネルギー散逸による非弾性的なひずみ回復現象を表している．

以上のような式 (6.3)～(6.11) で表される非弾性応答則を，第 2 章および第 3 章で述べた非晶性ポリマに対する結晶塑性論的分子鎖塑性モデルへ適用することにより，ポリマの微視的内部情報と塑性変形の素過程とが関係づけられ，微視的情報に基づく非晶性ポリマに対する新たな塑性論を構築することが可能となる．

6.4 非弾性応答則における積分計算

非弾性せん断ひずみ速度を求める式 (6.3) には ΔF_0 に関する積分が含まれているため，そのままの形では解析コードに適用しづらい．そこで，積分記号を部分積分法によって外す作業を行う．

式 (6.3) 右辺積分記号内第 1 項は次式のようになる．

$$\begin{aligned}
 & \int_0^\infty \varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 - |\hat{\tau}^{(\alpha)}/\tau_0|^{1/u}\}^{1/v}}{k_B \theta}\right) d\Delta F_0 \\
 &= \frac{1}{2A_1^{(\alpha)}} \int_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 - |\hat{\tau}^{(\alpha)}/\tau_0|^{1/u}\}^{1/v}}{k_B \theta}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \\
 & \quad + \frac{1}{2A_2^{(\alpha)}} \int_{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/2} \exp\left(-\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 - |\hat{\tau}^{(\alpha)}/\tau_0|^{1/u}\}^{1/v}}{k_B \theta}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \\
 &= \frac{I_1^{(\alpha)}}{2A_1^{(\alpha)}} + \frac{I_2^{(\alpha)}}{2A_2^{(\alpha)}} \dots\dots\dots (6.14)
 \end{aligned}$$

ただし，以下のようにおいた．

$$I_1^{(\alpha)} \equiv \int_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 - |\hat{\tau}^{(\alpha)}/\tau_0|^{1/u}\}^{1/v}}{k_B \theta}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \dots\dots (6.15)$$

$$I_2^{(\alpha)} \equiv \int_{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/2} \exp\left(-\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 - |\hat{\tau}^{(\alpha)}/\tau_0|^{1/u}\}^{1/v}}{k_B \theta}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \dots\dots (6.16)$$

次に， $\{1 - |\hat{\tau}^{(\alpha)}/\tau_0|^{1/u}\}^{1/v} \equiv l_1^{(\alpha)}$ において， $I_1^{(\alpha)}$ および $I_2^{(\alpha)}$ を部分積分法によって求める．まず $I_1^{(\alpha)}$ において，

$$\begin{aligned}
 I_1^{(\alpha)} &= \left[\exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0 l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) (-\alpha^{(\alpha)}) \cos\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \right]_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \\
 & \quad - \int_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \left(\frac{1}{\alpha^{(\alpha)}} - \frac{l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0 l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) (-\alpha^{(\alpha)}) \cos\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \\
 &= -\alpha^{(\alpha)} \left[\exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0 l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \cos\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \right]_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \\
 & \quad + \left(1 - \frac{l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \left[\exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0 l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \alpha^{(\alpha)} \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \right]_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \\
 & \quad - \left(1 - \frac{l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right)^2 I_1^{(\alpha)} \dots\dots\dots (6.17)
 \end{aligned}$$

式 (6.17) 右辺の $I_1^{(\alpha)}$ の項を左辺へ移項し，整理すると

$$\begin{aligned}
 I_1^{(\alpha)} &= \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + \left[1 - l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)} / (k_B \theta) \right]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 - \frac{l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \exp\left(\frac{3\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4\} l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right. \\
 & \quad \left. + \exp\left(\frac{-a^{(\alpha)} l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right] \dots\dots\dots (6.18)
 \end{aligned}$$

同様に $I_2^{(\alpha)}$ についても計算すると

$$I_2^{(\alpha)} = \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + [1 + l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)} / (k_B \theta)]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 + \frac{l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \exp\left(-\frac{\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi \alpha^{(\alpha)})/4\} l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right. \\ \left. + \exp(-\pi) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi \alpha^{(\alpha)})/2\} l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right] \dots \quad (6.19)$$

式 (6.3) 右辺積分記号内第 2 項についても，第 1 項と同様に，

$$\int_0^\infty \varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) \exp\left(\frac{-\Delta F_0 \{1 + |\hat{\tau}^{(\alpha)} / \tau_0|^{1/\nu}\}^{1/\nu} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) d\Delta F_0 \\ = \frac{I_3^{(\alpha)}}{2A_1^{(\alpha)}} + \frac{I_4^{(\alpha)}}{2A_2^{(\alpha)}} \dots \quad (6.20)$$

次に， $\{1 + |\hat{\tau}^{(\alpha)} / \tau_0|^{1/\nu}\}^{1/\nu} \equiv l_2^{(\alpha)}$ とおいて $I_3^{(\alpha)}$ および $I_4^{(\alpha)}$ を計算すると，

$$I_3^{(\alpha)} = \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + [1 - l_2^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)} / (k_B \theta)]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 - \frac{l_2^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \exp\left(\frac{3\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi \alpha^{(\alpha)})/4\} l_2^{(\alpha)} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right. \\ \left. + \exp\left(\frac{-a^{(\alpha)} l_2^{(\alpha)} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right] \dots \quad (6.21)$$

$$I_4^{(\alpha)} = \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + [1 + l_2^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)} / (k_B \theta)]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 + \frac{l_2^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \exp\left(-\frac{\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi \alpha^{(\alpha)})/4\} l_2^{(\alpha)} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right. \\ \left. + \exp(-\pi) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi \alpha^{(\alpha)})/2\} l_2^{(\alpha)} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right] \dots \quad (6.22)$$

以上より，式 (6.3) は次式のように表される．

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_r \operatorname{sgn}(\hat{\tau}^{(\alpha)}) \left(\frac{I_1^{(\alpha)}}{2A_1^{(\alpha)}} + \frac{I_2^{(\alpha)}}{2A_2^{(\alpha)}} - \frac{I_3^{(\alpha)}}{2A_1^{(\alpha)}} - \frac{I_4^{(\alpha)}}{2A_2^{(\alpha)}} \right) \dots \quad (6.23)$$

6.5 速度形構成式の時間積分 (接線係数法)

弾粘塑性構成式 (5.77) を仮想仕事率の原理式 (4.31) に導入することにより有限要素剛性方程式が導出されるが，その前に非弾性せん断ひずみ速度のもつ強い非線形性を軽減するために接線係数法⁽⁸⁴⁾による補間を行う．なお，本節では Hasan-Boyce による非弾性応答則についてのみ行う．Argon 硬化則を用いる場合については，補足 F.2 を参照されたい．また，背応力 B の速度の導出が非常に煩雑であることから，背応力を導入した解析においては接線係数法は適用しない．それに伴い，本節では，有効分解せん断応力 $\hat{\tau}^{(\alpha)}$ を分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ に置き換えて式展開を行う．

時刻 t と $t + \Delta t$ 間の非弾性せん断ひずみの増分 $\Delta \gamma^{(\alpha)}$ を次式のように定める．

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = \gamma^{(\alpha)}(t + \Delta t) - \gamma^{(\alpha)}(t) \dots \quad (6.24)$$

ここで， Δt は時間増分を示す．式 (6.24) を Δt 間の線形補間を用いて次のように近似する⁽⁸⁴⁾．

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = \Delta t [(1 - \vartheta) \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \vartheta \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t + \Delta t)] \dots \quad (6.25)$$

ここで, ϑ は $0 \leq \vartheta \leq 1$ の係数であり, $\vartheta = 0$ のとき Euler 法, $\vartheta = 1/2$ のとき Crank-Nickolson 法, $\vartheta = 1$ のとき完全に陰的な積分法になる. 時刻 $t + \Delta t$ における非弾性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t + \Delta t)$ を時刻 t において Taylor 展開すると

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t + \Delta t) = \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t \Delta \tau^{(\alpha)} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial a^{(\alpha)}} \right)_t \Delta a^{(\alpha)} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \alpha^{(\alpha)}} \right)_t \Delta \alpha^{(\alpha)} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial S^{(\alpha)}} \right)_t \Delta S^{(\alpha)} \dots \dots \dots (6.26)$$

となる. 式 (6.26) を式 (6.25) に導入することにより

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = \Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \Delta t \vartheta \left[\left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t \Delta \tau^{(\alpha)} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial a^{(\alpha)}} \right)_t \Delta a^{(\alpha)} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \alpha^{(\alpha)}} \right)_t \Delta \alpha^{(\alpha)} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial S^{(\alpha)}} \right)_t \Delta S^{(\alpha)} \right] \dots \dots \dots (6.27)$$

ここで, $\Delta \tau^{(\alpha)} = \dot{\tau}^{(\alpha)} \Delta t$, $\Delta a^{(\alpha)} = \dot{a}^{(\alpha)} \Delta t$, $\Delta \alpha^{(\alpha)} = \dot{\alpha}^{(\alpha)} \Delta t$ および $\Delta S^{(\alpha)} = \dot{S}^{(\alpha)} \Delta t$ という関係を用いれば以下のように表せる.

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = \Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \Delta t \vartheta \left[\left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t \dot{\tau}^{(\alpha)} \Delta t + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial a^{(\alpha)}} \right)_t \dot{a}^{(\alpha)} \Delta t + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \alpha^{(\alpha)}} \right)_t \dot{\alpha}^{(\alpha)} \Delta t + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial S^{(\alpha)}} \right)_t \dot{S}^{(\alpha)} \Delta t \right] \dots \dots (6.28)$$

ここで, $\tau^{(\alpha)} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)}$ の両辺を物質時間微分 [補足 F.3] して, 弾粘塑性構成式 (5.69) を代入すると

$$\begin{aligned} \dot{\tau}^{(\alpha)} &= \left(\overset{\nabla}{\mathbf{T}} - \sum_{\beta \neq \alpha} \dot{\gamma}^{(\beta)} \boldsymbol{\beta}^{(\beta)} \right) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \\ &= (\mathbf{C}^{eA} : \mathbf{D} - \mathbf{C}^{eA} : \mathbf{D}^i + \chi \boldsymbol{\Gamma} : \mathbf{T}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} - \left(\sum_{\beta \neq \alpha} \dot{\gamma}^{(\beta)} \boldsymbol{\beta}^{(\beta)} \right) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \\ &= \mathbf{Y}^{(\alpha)} \cdot \left(\mathbf{D} - \sum_{\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \mathbf{P}_S^{(\beta)} \right) + (\chi \boldsymbol{\Gamma} : \mathbf{T}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} - \left(\sum_{\beta \neq \alpha} \dot{\gamma}^{(\beta)} \boldsymbol{\beta}^{(\beta)} \right) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \dots \dots \dots (6.29) \end{aligned}$$

ただし, $\mathbf{Y}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{C}^{eA} : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}$, $\mathbf{D}^i = \sum_{\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \mathbf{P}_S^{(\beta)}$ であり, 環境温度を一定として $\Lambda^{eA} \dot{\theta}$ の項は無視している. また, 式 (6.12) を内部変数の発展式 (6.8) ~ (6.10) に代入すると,

$$\dot{a}^{(\alpha)} = -(a^{(\alpha)} - a_{\text{eq}}) \exp[-\zeta \exp(-\zeta \gamma_a)] \frac{\overline{\omega}_0}{\dot{\gamma}_r} \sum_{\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \dots \dots \dots (6.30)$$

$$\dot{\alpha}^{(\alpha)} = -(\alpha^{(\alpha)} - \alpha_{\text{eq}}) \frac{\overline{\omega}_0}{\dot{\gamma}_r} \sum_{\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \dots \dots \dots (6.31)$$

$$\dot{S}^{(\alpha)} = \left\{ \beta_1 [1 + \beta_2 \exp(-\beta_3 \gamma_a)] \tau_a - S^{(\alpha)} \frac{\overline{\omega}_0}{\dot{\gamma}_r} \right\} \sum_{\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \dots \dots \dots (6.32)$$

となる. ただし, $\tau_a \equiv \sum_{\alpha} \tau^{(\alpha)}$ である. さらに, 式 (6.29) ~ (6.32) を式 (6.28) に代入すれば以下のような式が得られる.

$$\begin{aligned} \Delta \gamma^{(\alpha)} &= \Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \Delta t \vartheta \left[\left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t \left\{ \mathbf{Y}^{(\alpha)} \cdot \left(\mathbf{D} - \sum_{\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \mathbf{P}_S^{(\beta)} \right) + (\chi \boldsymbol{\Gamma} : \mathbf{T}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} - \left(\sum_{\beta \neq \alpha} \dot{\gamma}^{(\beta)} \boldsymbol{\beta}^{(\beta)} \right) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \right\} \Delta t \right. \\ &\quad - \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial a^{(\alpha)}} \right)_t (a^{(\alpha)} - a_{\text{eq}}) \exp[-\zeta \exp(-\zeta \gamma_a)] \frac{\overline{\omega}_0}{\dot{\gamma}_r} \sum_{\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \Delta t \\ &\quad - \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \alpha^{(\alpha)}} \right)_t (\alpha^{(\alpha)} - \alpha_{\text{eq}}) \frac{\overline{\omega}_0}{\dot{\gamma}_r} \sum_{\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \Delta t \\ &\quad \left. + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial S^{(\alpha)}} \right)_t \left\{ \beta_1 [1 + \beta_2 \exp(-\beta_3 \gamma_a)] \tau_a - S^{(\alpha)} \frac{\overline{\omega}_0}{\dot{\gamma}_r} \right\} \sum_{\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \Delta t \right] \dots \dots \dots (6.33) \end{aligned}$$

また, $\dot{\gamma}^{(\alpha)} \Delta t = \Delta \gamma^{(\alpha)}$ を考慮して, $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ に関する項を左辺へ移項すると,

$$\sum_{\beta} N_{\alpha\beta} \Delta \gamma^{(\beta)} = \Delta t \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \mathbf{Z}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{D} + \Delta t \vartheta \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t (\chi \Gamma : \mathbf{T}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \right] \dots \dots \dots (6.34)$$

ただし,

$$\begin{aligned} N_{\alpha\beta} \equiv & \delta_{\alpha\beta} + \Delta t \vartheta \left[\left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t \left\{ \mathbf{Y}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{P}_S^{(\beta)} + (1 - \delta_{\alpha\beta}) \mathbf{P}_S^{(\beta)} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \right\} \right. \\ & + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial a^{(\alpha)}} \right)_t (a^{(\alpha)} - a_{\text{eq}}) \exp[-\zeta \exp(-\zeta \gamma_a)] \frac{\overline{\omega}_0}{\dot{\gamma}_r} \text{sgn}(\tau^{(\beta)}) \\ & + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \alpha^{(\alpha)}} \right)_t (\alpha^{(\alpha)} - \alpha_{\text{eq}}) \frac{\overline{\omega}_0}{\dot{\gamma}_r} \text{sgn}(\tau^{(\beta)}) \\ & \left. - \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial S^{(\alpha)}} \right)_t \left\{ \beta_1 [1 + \beta_2 \exp(-\beta_3 \gamma_a)] \tau_a - S^{(\alpha)} \frac{\overline{\omega}_0}{\dot{\gamma}_r} \right\} \text{sgn}(\tau^{(\beta)}) \right] \dots \dots \dots (6.35) \end{aligned}$$

$$\mathbf{Z}^{(\alpha)} \equiv \Delta t \vartheta \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t \mathbf{Y}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (6.36)$$

とおいた.

次に, 式 (6.34) を $\Delta \gamma^{(\alpha)}$ について解くために, $N_{\alpha\beta}$ の逆行列を $M_{\alpha\beta}$ として,

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} \equiv \sum_{\beta} M_{\alpha\beta} \left[\dot{\gamma}^{(\beta)}(t) + \Delta t \vartheta \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\beta)}}{\partial \tau^{(\beta)}} \right)_t (\chi \Gamma : \mathbf{T}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\beta)} \right] \dots \dots \dots (6.37)$$

$$\mathbf{Y}^{(\alpha)} \equiv \sum_{\beta} M_{\alpha\beta} \mathbf{Z}^{(\beta)} \dots \dots \dots (6.38)$$

とおくと, 式 (6.34) は以下のように表すことができる.

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = \Delta t (\dot{\gamma}^{(\alpha)} + \mathbf{Y}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{D}) \dots \dots \dots (6.39)$$

式 (6.39) の両辺を無限小の時間増分 Δt で割り $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ を求め, 弾粘塑性構成式 (5.77) に代入し, $\Lambda^{eA} \dot{\theta}$ の項を無視すれば, 次のような接線係数表示の構成式が得られる.

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{\mathbf{T}} &= \mathbf{C}^{eA} : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{Q}^{(\alpha)} + \chi \Gamma : \mathbf{T} \\ &= \mathbf{C}^{eA} : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{Q}^{(\alpha)} - \sum_{\alpha} (\mathbf{Y}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{D}) \mathbf{Q}^{(\alpha)} + \chi \Gamma : \mathbf{T} \\ &= \mathbf{C}^{eA} : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{Q}^{(\alpha)} - \sum_{\alpha} (\mathbf{Q}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{Y}^{(\alpha)}) : \mathbf{D} + \chi \Gamma : \mathbf{T} \\ &= \mathbf{C}^{\text{tan}} : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{Q}^{(\alpha)} + \chi \Gamma : \mathbf{T} \dots \dots \dots (6.40) \end{aligned}$$

また, 係数 \mathbf{C}^{tan} は次式で表される.

$$\mathbf{C}^{\text{tan}} \equiv \mathbf{C}^{eA} - \sum_{\alpha} (\mathbf{Q}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{Y}^{(\alpha)}) \dots \dots \dots (6.41)$$

接線係数法が適用された式 (6.40) を updated Lagrange 形式の仮想仕事率の原理式 (4.31) に代入し離散化すれば, 要素剛性方程式が得られ, 通常有限要素解析の手法を用いることにより, 本モデルを用いた数値解析が可能となる. なお, 接線係数法が適用された \mathbf{C}^{tan} は一般に非対称になるため, 有限要素法に適用する場合は後述の 7.1 節における剛性マトリックスも非対称となり [補足 F.4], 非対称ソルバを用いる必要がある.

Pan-Rice 形硬化則を用いる場合、ひずみ速度感度指数は金属では 0.001、ポリマでは 0.04 程度の値をとるため、硬化則にはその逆数の 25 ~ 1 000 乗程度の指数計算を含み、これが計算の不安定化につながる。そこで、ある程度大きな時間増分で FEM 解析を行うためには本節で示したような接線係数法を適用しなければならない。しかし、本研究で用いる Hasan-Boyce の非弾性応答則では、ひずみ速度感度指数の値が 1 ~ 0.4 程度であるため、指数計算は 1 ~ 2 乗程度であり、接線係数法を適用しなくても、現実的な時間増分で計算を進めることができる。そのため本解析においては、本節で示した接線係数法を適用せずに数値解析を行っても支障はないものと考えられる。

6.6 自由体積率の導出

6.3 節で述べたように、式 (6.7) および図 6.5 で示した確率分布関数 $\Xi^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta)$ を $0 \leq \Delta F_0 \leq \infty$ の範囲で ΔF_0 について積分する (図 6.5 の曲線と横軸で囲まれた面積を求める) ことで、局所せん断変形を起こす体積率、すなわち局所的な自由体積率を求めることができる。ここでは、 $\int_0^{\infty} \Xi^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta) d\Delta F_0$ の積分計算の過程を具体的に示す。6.4 節で行った定積分の計算と同様な過程で、以下のように計算できる。

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{\infty} \Xi^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta) d\Delta F_0 \\
 &= \int_0^{\infty} \varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) \exp\left(\frac{-\Delta F_0}{k_B \theta}\right) d\Delta F_0 \\
 &= \frac{1}{2A_1^{(\alpha)}} \int_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0}{k_B \theta}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \\
 &\quad + \frac{1}{2A_2^{(\alpha)}} \int_{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/2} \exp\left(-\frac{\Delta F_0 - a'^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0}{k_B \theta}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a'^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \\
 &= \frac{J_1^{(\alpha)}}{2A_1^{(\alpha)}} + \frac{J_2^{(\alpha)}}{2A_2^{(\alpha)}} \dots\dots\dots (6.42)
 \end{aligned}$$

ただし、以下のようにおいた。

$$J_1^{(\alpha)} \equiv \int_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0}{k_B \theta}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \dots\dots\dots (6.43)$$

$$J_2^{(\alpha)} \equiv \int_{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/2} \exp\left(-\frac{\Delta F_0 - a'^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0}{k_B \theta}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a'^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \dots\dots\dots (6.44)$$

次に、 $J_1^{(\alpha)}$ および $J_2^{(\alpha)}$ を部分積分法によって求める。まず $J_1^{(\alpha)}$ において、

$$\begin{aligned}
 J_1^{(\alpha)} &= \left[\exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0}{k_B \theta}\right) (-\alpha^{(\alpha)}) \cos\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \right]_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \\
 &\quad - \int_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \left(\frac{1}{\alpha^{(\alpha)}} - \frac{1}{k_B \theta} \right) \exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0}{k_B \theta}\right) (-\alpha^{(\alpha)}) \cos\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \\
 &= -\alpha^{(\alpha)} \left[\exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0}{k_B \theta}\right) \cos\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \right]_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \\
 &\quad + \left(1 - \frac{\alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \left[\exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0}{k_B \theta}\right) \alpha^{(\alpha)} \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \right]_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \\
 &\quad - \left(1 - \frac{\alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right)^2 \dots\dots\dots (6.45)
 \end{aligned}$$

式 (6.45) 右辺の $J_1^{(\alpha)}$ の項を左辺へ移項し, 整理すると

$$J_1^{(\alpha)} = \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + [1 - \alpha^{(\alpha)}/(k_B \theta)]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 - \frac{\alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \exp\left(\frac{3\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4\}}{k_B \theta}\right) + \exp\left(\frac{-a^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right] \dots \quad (6.46)$$

同様に $J_2^{(\alpha)}$ についても計算すると

$$J_2^{(\alpha)} = \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + [1 + \alpha^{(\alpha)}/(k_B \theta)]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 + \frac{\alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \exp\left(-\frac{\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4\}}{k_B \theta}\right) \right. \\ \left. + \exp(-\pi) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/2\}}{k_B \theta}\right) \right] \dots \dots \dots \quad (6.47)$$

式 (6.46) および式 (6.47) を式 (6.42) に代入することにより, 自由体積率 $\int_0^\infty \Xi^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta) d\Delta F_0$ が求まる.

第 7 章

大变形 FEM 解析

本章では、前章までに述べた理論に基づき、非晶性ポリマの大変形 FEM 解析を行う。

まず、弾粘塑性有限要素法の定式化を示す。

次に、PMMA 平板に対する大変形解析を行い、解析結果に対して考察を行う。まずは等方性弾性構成式 (5.34) を用い、弾性の等方性を仮定する。全ての積分点で一定のすべり系初期方位を与えた単絡み点モデルによる解析を行い、得られた公称応力-公称ひずみ線図から、確率論的非弾性応答則を硬化則に採用することの優位性を示す。また、本モデルがせん断帯の形成・伝ばを再現可能であることおよび分子鎖の配向状態を可視化できることを示す。さらに、確率論的非弾性応答則に新たに導入したひずみ速度感度指数の効果についても検討する。また、すべり系同士の独立回転を許容することで、配向硬化を表現するために分子鎖網目理論において採用されてきた背応力の構成式を用いる必要がなくなることを論ずる。

次に、本モデルに拡張 Taylor モデルを導入し、各積分点でランダムにすべり系初期方位を与えた多絡み点モデルによる解析を行い、内部構造の不均一性から生じるマイクロシアバンドの形成およびその伝ば、ポリマ内部に生じる変形誘起異方性を再現する。

さらに、異方性弾性構成式 (5.51) を導入し、分子鎖の配向による弾性の変形誘起異方性を考慮した解析を行い、分子鎖配向が弾性係数に及ぼす影響についても検討する。

なお、全ての解析例は自作の結晶塑性 FEM ソースコードによるものである。本 FEM ソースコードにおける連立 1 次方程式の解法については、補足 G.1 を参照されたい。

7.1 仮想仕事率の原理の離散化

ここでは、接線係数法適用後の弾粘塑性構成式を updated Lagrange 形式の仮想仕事率の原理式へ代入し、離散化を行う⁽⁸¹⁾⁽⁸⁵⁾。

よく知られているように、有限要素法とは、微分方程式で表される場の境界値問題を積分形で記述して解くための解析手法の 1 つで、連続体を有限の大きさの要素に分割して扱うのが特徴である。したがって、要素内の任意の位置における物理量は要素を分割する各節点における量の内挿で表される。各節点における量すなわち離散化された量の計算には、マトリックスあるいは列ベクトルを用いると都合がよい。ただし、ここでいうベクトルとは座標変換に対して不変なベクトル量ではなく、ある量の成分を適当に並べたものを意味する。本節以降、物理量 A のマトリックス表示を $[A]$ 、列ベクトル表示を $\{A\}$ で表す。

接線係数表示の弾粘塑性構成式 (6.40) を updated Lagrange 形式の仮想仕事率の原理式 (4.31) に代入すれば

$$\int_V \left[\{(C^{tan} - P) : D\} \cdot \check{D} + (LT) \cdot \check{L} \right] dv = \oint_S \check{t} \cdot \check{v} da + \int_V \rho \check{f} \cdot \check{v} dv + \int_V \left(\sum_{\alpha} \dot{v}^{(\alpha)} \Omega^{(\alpha)} \right) \cdot \check{D} dv - \int_V (\chi F : T) \cdot \check{D} dv \dots \dots \dots (7.1)$$

となる。式 (7.1) を離散化し、要素剛性方程式を導く。

まず、式 (6.40) を平面ひずみ問題の場合についてマトリックス表示すると次式のようになる。

$$\begin{Bmatrix} \dot{T}_{11} \\ \dot{T}_{22} \\ \dot{T}_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111}^{tan} & C_{1122}^{tan} & (C_{1112}^{tan} + C_{1121}^{tan})/2 \\ C_{2211}^{tan} & C_{2222}^{tan} & (C_{2212}^{tan} + C_{2221}^{tan})/2 \\ C_{1211}^{tan} & C_{1222}^{tan} & (C_{1212}^{tan} + C_{1221}^{tan})/2 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_{11} \\ D_{22} \\ 2D_{12} \end{Bmatrix} - \sum_{\alpha} \dot{v}^{(\alpha)} \begin{Bmatrix} \Omega^{(\alpha)}_{11} \\ \Omega^{(\alpha)}_{22} \\ \Omega^{(\alpha)}_{12} \end{Bmatrix} + \chi \begin{Bmatrix} \Gamma_{11ij} T_{ij} \\ \Gamma_{22ij} T_{ij} \\ \Gamma_{12ij} T_{ij} \end{Bmatrix} \dots \dots \dots (7.2)$$

また、式 (7.1) には、変形速度 D の他に速度こう配 L も含まれている。平面ひずみ問題の場合、 D は D_{11} 、

D_{22} , D_{12} が独立な非零成分であるが , L は L_{11} , L_{22} , L_{12} , L_{21} の 4 成分が非零独立となる .

$$\left. \begin{aligned} L_{11} &= \frac{\partial v_1}{\partial x_1} = \sum_I \frac{\partial N^I}{\partial x_1} v_1^I \\ L_{22} &= \frac{\partial v_2}{\partial x_2} = \sum_I \frac{\partial N^I}{\partial x_2} v_2^I \\ L_{12} &= \frac{\partial v_1}{\partial x_2} = \sum_I \frac{\partial N^I}{\partial x_2} v_1^I \\ L_{21} &= \frac{\partial v_2}{\partial x_1} = \sum_I \frac{\partial N^I}{\partial x_1} v_2^I \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (7.3)$$

ただし , v_1^I , v_2^I は節点 I における節点速度の x_1 , x_2 成分である . また , N^I は形状関数である . 本研究で用いる三角形要素の場合 , 形状関数 N^I は次式で表される .

$$\left. \begin{aligned} N^1 &= \frac{1}{2S^e} \left\{ (x_1^2 x_2^3 - x_1^3 x_2^2) + (x_2^2 - x_2^3)x_1 + (x_1^3 - x_1^2)x_2 \right\} \\ N^2 &= \frac{1}{2S^e} \left\{ (x_1^3 x_2^1 - x_1^1 x_2^3) + (x_2^3 - x_2^1)x_1 + (x_1^1 - x_1^3)x_2 \right\} \\ N^3 &= \frac{1}{2S^e} \left\{ (x_1^1 x_2^2 - x_1^2 x_2^1) + (x_2^1 - x_2^2)x_1 + (x_1^2 - x_1^1)x_2 \right\} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (7.4)$$

ここで , S^e は三角形要素の面積を表し , 次式で計算される .

$$2S^e = \begin{vmatrix} 1 & x_1^1 & x_2^1 \\ 1 & x_1^2 & x_2^2 \\ 1 & x_1^3 & x_2^3 \end{vmatrix} \dots\dots\dots (7.5)$$

ただし , x_1^I , x_2^I は節点 I の x_1 座標 , x_2 座標である . 形状関数を用いて形状関数マトリックス $[N]$ を以下のように定める .

$$[N] = [\{N^1\} \{N^2\} \{N^3\}] \quad (N^I = N^I I \quad , \quad I = 1, 2, 3) \dots\dots\dots (7.6)$$

ここで , N^I は (2×2) の行列であり , I は (2×2) の単位行列である . さらに , 式 (7.3) をマトリックス形式で示すと , 次式となる .

$$\left\{ \begin{matrix} L_{11} \\ L_{22} \\ L_{12} \\ L_{21} \end{matrix} \right\} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N^1}{\partial x_1} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x_1} & 0 & \frac{\partial N^3}{\partial x_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial x_2} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x_2} & 0 & \frac{\partial N^3}{\partial x_2} \\ \frac{\partial N^1}{\partial x_2} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x_2} & 0 & \frac{\partial N^3}{\partial x_2} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial x_1} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x_1} & 0 & \frac{\partial N^3}{\partial x_1} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} v_1^1 \\ v_2^1 \\ v_1^2 \\ v_2^2 \\ v_1^3 \\ v_2^3 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (7.7)$$

これらをまとめると , 以下のように書ける .

$$\{L\} = [E]\{v\} \dots\dots\dots (7.8)$$

一方 , D は $D_{11} = L_{11}$, $D_{22} = L_{22}$, $2D_{12} = L_{12} + L_{21}$ であるから , 以下のように表される .

$$\left\{ \begin{matrix} D_{11} \\ D_{22} \\ 2D_{12} \end{matrix} \right\} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N^1}{\partial x_1} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x_1} & 0 & \frac{\partial N^3}{\partial x_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial x_2} & 0 & \frac{\partial N^2}{\partial x_2} & 0 & \frac{\partial N^3}{\partial x_2} \\ \frac{\partial N^1}{\partial x_2} & \frac{\partial N^1}{\partial x_1} & \frac{\partial N^2}{\partial x_2} & \frac{\partial N^2}{\partial x_1} & \frac{\partial N^3}{\partial x_2} & \frac{\partial N^3}{\partial x_1} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} v_1^1 \\ v_2^1 \\ v_1^2 \\ v_2^2 \\ v_1^3 \\ v_2^3 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (7.9)$$

これらをまとめて以下のように記述する .

$$\{D\} = [B]\{v\} \dots \dots \dots (7.10)$$

なお, $[B]$ は B マトリックスと呼ばれ, 要素節点変位と要素内ひずみを結びつける行列の表示として慣用されている .

弾粘塑性構成式 (7.2) は増分形で表現することができる . 仮想仕事率の原理も増分形で表現すると, 変位や応力の加え合わせが簡単にできる . そこで, 式 (7.8) および式 (7.10) を増分形に書き直すと次式で表される .

$$\left. \begin{aligned} \{L\Delta t\} &= [E]\{\Delta u\} \\ \{D\Delta t\} &= [B]\{\Delta u\} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (7.11)$$

ここで, $\{\Delta u\}$ は節点変位増分である . このようにして仮想仕事率の原理式 (7.1) を離散化すると, 式 (7.2) を用いて, 最終的に次のような要素剛性方程式が得られる .

$$\begin{aligned} &\int_{V^e} \{[B]^T ([C^{tan}] - [F])[B] + [E]^T [G][E]\} dv \{\Delta u\} \\ &= \oint_{S^e} [N]^T \{\Delta \bar{t}\} da + \int_{V^e} [N]^T \{\Delta f\} \rho dv + \int_{V^e} [B]^T \sum_{\alpha} \{\Omega^{(\alpha)}\} \Delta v^{(\alpha)} dv - \int_{V^e} [B]^T \{\Gamma : T\} \chi \Delta t dv. \end{aligned} \quad (7.12)$$

これは通常の静的陽解法における要素剛性方程式の形で次のようにまとめることができる .

$$[k^e]\{\Delta u\} = \{\Delta \bar{f}\} \dots \dots \dots (7.13)$$

ただし, 要素剛性マトリックス $[k^e]$, $\{\Delta \bar{f}\}$, $[F]$ および $[G]$ はそれぞれ次のように表される .

$$[k^e] = \int_{V^e} \{[B]^T ([C^{tan}] - [F])[B] + [E]^T [G][E]\} dv \dots \dots \dots (7.14)$$

$$\{\Delta \bar{f}\} = \oint_{S^e} [N]^T \{\Delta \bar{t}\} da + \int_{V^e} [N]^T \{\Delta f\} \rho dv + \int_{V^e} [B]^T \sum_{\alpha} \{\Omega^{(\alpha)}\} \Delta v^{(\alpha)} dv - \int_{V^e} [B]^T \{\Gamma : T\} \chi \Delta t dv \quad (7.15)$$

$$[F] = \begin{bmatrix} 2T_{11} & 0 & T_{12} \\ & 2T_{22} & T_{12} \\ \text{Sym.} & & \frac{1}{2}(T_{11} + T_{22}) \end{bmatrix} \dots \dots \dots (7.16)$$

$$[G] = \begin{bmatrix} T_{11} & 0 & T_{12} & 0 \\ & T_{22} & 0 & T_{12} \\ & & T_{22} & 0 \\ \text{Sym.} & & & T_{11} \end{bmatrix} \dots \dots \dots (7.17)$$

構造全体に対して式 (7.13) の和をとれば, 次式のような全体剛性方程式が得られる .

$$[K]\{\Delta U\} = \{\Delta \bar{F}\} \dots \dots \dots (7.18)$$

$$[K] = \sum_e [k^e] \dots \dots \dots (7.19)$$

ここで、 $\{\Delta U\}$ および $\{\Delta \bar{F}\}$ は構造の全節点について番号順にそれぞれ節点変位増分および節点力増分を並べてできるベクトルである。また、 \sum は要素から構造全体への和を意味し、 $[K]$ は全体剛性マトリックスと呼ばれる。これを用いて FEM 解析を行う。

式 (7.18) が弾性境界値問題と異なるのは、節点力と変位の関係ではなく、節点力増分と変位増分の関係であること、剛性マトリックスの中に、構成関係式 $[C^{tan}]$ だけでなく、幾何学的非線形⁽⁸¹⁾⁽⁸⁵⁾⁽⁸⁶⁾ に起因する $[F]$ 、 $[G]$ という 2 つのマトリックスが付加されていること、粘塑性特有の項が付加されている点などである。

7.2 解析の流れ

本節では、実際に解析を行う際の流れを簡単に紹介する。

- (1) 要素データや材料定数・数値パラメータなどの初期値の決定および各値の初期化。 $(T(0) = \mathbf{0}, \gamma^{(\alpha)}(0) = 0, F^{i(\alpha)}(0) = I, R^*(0) = I$ など)
- (2) 式 (7.14) により要素剛性マトリックス $[k^e]$ を導出し、全体剛性マトリックス $[K]$ を作成。
- (3) 式 (7.18) により節点変位増分 $\{\Delta U\}$ を求め、式 (7.11)₂ によりひずみ増分 $\{D\Delta t\}$ を得る。
- (4) (異方性弾性構成式を用いた場合) 式 (5.52) により C^{eA} を導出。
- (5) (背応力を導入した解析の場合) 左非弾性ストレッチの 2 乗を $V^{i(\alpha)^2} = F^{i(\alpha)} F^{i(\alpha)T}$ と表し、 $V^{i(\alpha)^2}$ の主値および主方向を求め、得られた主値の平方根をとることで $V^{i(\alpha)}$ の主値を計算。
- (6) (背応力を導入した解析の場合) 補足 E.5.2 で示した手順により有効分解せん断応力を導出。
- (7) 式 (6.23) によって非弾性せん断ひずみ速度を算出。
- (8) 式 (6.42) により自由体積率を導出。
- (9) 式 (6.39) および式 (6.40) からそれぞれ非弾性せん断ひずみの増分および応力増分を算出し、非弾性せん断ひずみ、応力の値を更新。
- (10) (多絡み点モデルによる解析の場合) 各絡み点における応力を平均化し、積分点における応力を算出。
- (11) 式 (6.30) ~ (6.32) により内部変数を、式 (3.68) の $\dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)}$ の項を無視し、すべり系ごとに記述した $\dot{F}^{i(\alpha)} = \dot{\gamma}^{(\alpha)} R^{*T} P^{(\alpha)} R^* F^{i(\alpha)}$ により非弾性変形こう配 $F^{i(\alpha)}$ を、式 (3.92) により分子鎖基底を、また式 (3.76) により弾・剛体回転 R^* をそれぞれ更新。
- (12) (多絡み点モデルによる解析の場合) 5.9 節で示した手順により配向強度および配向方向パラメータを導出。
- (13) (異方性弾性構成式を用いた場合) 5.10 節で示した手順により異方性変数テンソル H を算出。
- (14) (3) で求めた節点変位増分 $\{\Delta U\}$ から節点座標を更新し、式 (7.14) により再び要素剛性マトリックス $[k^e]$ を導出し、全体剛性マトリックス $[K]$ を作成。
- (15) 指定の変形率に達していなければ (3) に戻る。
- (16) 解析終了。

7.3 解析条件および材料定数

解析対象は非晶性ポリマであるポリメタクリル酸メチル (PMMA) 平板とし、図 7.1 に示すように、寸法は長さ $2L = 80 \text{ mm}$ 、幅 $2W + 2\Delta W$ 、アスペクト比 $L/W = 4$ とする。試験片形状として平板を用いる理由は、本解析の妥当性を確認するために比較を行う PMMA の引張試験⁽⁶⁾ が平板を対象としているためである。また、

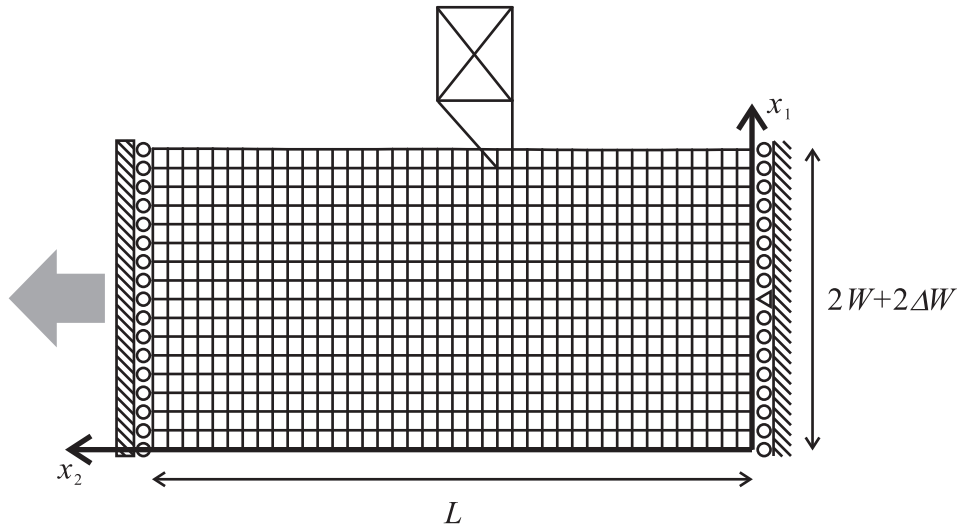


Fig. 7.1 Finite element specimen and boundary condition

\$2W\$ は初期平均幅，\$2\Delta W\$ は材料の幾何学的不均一性を表す形状初期不整であり，次式により与える⁽⁸⁷⁾．

$$\Delta W = W \left[-W_1 \cos\left(\frac{\pi x_2}{L}\right) + W_2 \cos\left(\frac{m_w \pi x_2}{L}\right) \right] \dots\dots\dots (7.20)$$

ここで，\$x_2\$ は長手方向座標である．また，不整振幅を \$W_1 = 0.00375\$ および \$W_2 = 0.00150\$，波数を \$m_w = 4\$ とする．板厚は無限であると仮定し，\$x_3\$ 方向（紙面に対して垂直方向）の変位を拘束した平面ひずみ問題を対象とする．平面応力問題では構造依存性のせん断帯が発生することがあるので，本解析では，発生するせん断帯が材料モデルに起因するものであることを確認するために平面ひずみ問題を採用する．変形の対称性を仮定してモデルの \$1/2\$ のみを解析し，長手方向に強制引張変位 \$U\$ を \$U/L = 1\$ となるまで一定速度 \$\dot{U}/L = 0.550 \text{ ks}^{-1}\$ で与え，静的陽解法を用いて FEM 解析を行う．ただし，強制引張変位速度は，井上・山本⁽⁶⁾の実験と同じ値を選んでいる．なお，時間ステップ数は \$10000\$ とする．用いる要素は解析対象を幅方向 \$16\$ 分割，長手方向 \$40\$ 分割して得られる長方形要素を，さらにその対角線で分割してできる \$2560\$ 個の crossed triangles 要素である [補足 G.2]．また，解析領域の境界条件は変位 \$u\$ と荷重 \$T^l\$ を用いて次のように規定される．

$$\left. \begin{aligned} u_1 = 0, \quad u_2 = 0 & \quad \text{at } x_1 = W \text{ and } x_2 = 0 \\ u_2 = 0, \quad T_1^l = 0 & \quad \text{at } x_1 \neq W \text{ and } x_2 = 0 \\ T_1^l = T_2^l = 0 & \quad \text{at } (x_1 = -\Delta W \text{ or } x_1 = 2W + \Delta W) \text{ and } 0 < x_2 < L \\ u_2 = U, \quad T_1^l = 0 & \quad \text{at } x_2 = L \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (7.21)$$

また，\$x_2\$ 方向の反力 \$T\$ は次式で与えられる．

$$T = \frac{1}{2W + 2\Delta W} \int_{-\Delta W}^{2W + \Delta W} T_2^l(x_1, L) dx_1 \dots\dots\dots (7.22)$$

なお，本理論は図 2.4 に示したように，単位ブロック中の \$8\$ 本の分子鎖のうち \$4\$ 本が同一平面上にあると仮定している．その \$4\$ 本の分子鎖によって定義される \$2\$ つの平面のうち \$1\$ つを選ぶと，その面上の \$2\$ つのすべり系の分子鎖基底 \$t^{(1)}\$ および \$t^{(2)}\$ は平行となり，そのまま平面ひずみ問題に適用することができる．

材料定数および数値パラメータについては，Young 率 \$E = 600.0 \text{ MPa}\$，Poisson 比 \$\nu = 0.3000\$，温度は井上・山本⁽⁶⁾の実験と同じく \$\theta = 338.0 \text{ K} (65^\circ\text{C})\$ とする．また，前述のように本解析で用いる Argon 硬化則および Hasan-Boyce の非弾性応答則では，6.5 節で示した接線係数法を適用しなくても数値解の誤差は少ない．その理由は以下のように考えられる．Pan-Rice 形硬化則を用いる場合，ひずみ速度感度指数は金属では \$0.001\$，ポ

リマでは 0.04 程度の値をとる．そのため，硬化則にはその逆数の 25 ~ 1 000 乗程度の指数計算を含み，これが計算の不安定化につながる．そこで，ある程度大きな時間増分で FEM 解析を行うためには $\vartheta \neq 0$ としなければならない．しかし，Argon 硬化則や Hasan-Boyce の非弾性応答則では，ひずみ速度感度指数の値が 1 ~ 0.4 程度であるため，指数計算は 1 ~ 2 乗程度であり，接線係数法を適用しなくても，現実的な時間増分で計算を進めることができる．そのため，本解析では接線係数法は適用せず，式 (6.25) 中の ϑ は $\vartheta = 0$ とする．

Argon 硬化則を用いた解析では，以下の材料定数および数値パラメータを用いる．

$$\left. \begin{array}{l} s^{(a)}(0) = 70.00 \text{ MPa} \quad s_{ss} = 0.9100 s^{(a)}(0) \quad \alpha_p = 0.2600 \\ \dot{\gamma}_0 = 28.00 \mu\text{s}^{-1} \quad A = 200.0 \text{ K/MPa} \quad h = 315.0 \text{ MPa} \end{array} \right\} \dots\dots\dots (7.23)$$

また，Hasan-Boyce の非弾性応答則を用いた解析では，以下の材料定数および数値パラメータを用いる．

$$\left. \begin{array}{l} \tau_0 = 60.00 \text{ MPa} \quad v = 1.000 \quad \dot{\gamma}_r = 15.10 \text{ ns}^{-1} \quad \varpi_0 = 500.0 \text{ ns}^{-1} \\ a^{(a)}(0) = 1.060 \text{ eV} \quad a_{\text{eq}} = 0.9450 \text{ eV} \\ \alpha^{(a)}(0) = 0.04350 \text{ eV} \quad \alpha_{\text{eq}} = 1.000 \text{ eV} \quad S^{(a)}(0) = 0.000 \text{ eV} \\ \zeta = 30.00 \quad \beta_1 = 1.442 \text{ nm}^3 \quad \beta_2 = 4.000 \quad \beta_3 = 15.00 \end{array} \right\} \dots\dots\dots (7.24)$$

ただし，(0) を付した記号はそれぞれの変数の初期値であることを表す．また，ひずみ速度感度指数 u については，特に断りのない限り $u = 1.000$ を用いる．式 (7.24) の材料定数および数値パラメータは，実験や観察から直接的には得られないものであり，非弾性応答則 (6.3) から得られる応力-ひずみ線図を実験値と比較し，フィッティングを行うことで決定すべきものである．本研究では，Hasan-Boyce の非弾性応答則に対して，結晶塑性論に適合するよう式を若干変形したり，ひずみ速度感度指数を新たに導入したりしているが，それらの点以外はほぼそのままの形で硬化則として採用しているため，式 (7.24) で示した材料定数の値に関しても Hasan-Boyce が決定したものを参考に選んでいる．PMMA 以外の非晶性ポリマ (PC, PS など) に材料を変更するには，これらの材料定数を変更することで対応可能である．また，本研究では高精度のシミュレーションを行うことよりむしろ非晶性ポリマの力学的挙動のモデリングを行うこと自体に重点を置いているため，材料定数を決定する実験と変形様式を観察する実験での試験片形状の相違が材料定数に及ぼす影響については考慮せず，Hasan-Boyce が同定した材料定数を本解析でもほぼそのまま用いている．さらに，背応力を導入した解析では，1 本の分子鎖中の平均的なセグメント数 $N = 2.603$ ，単位体積あたりの分子鎖数 $n = 2.222 \text{ nm}^{-3}$ を用いる．

7.4 FEM 解析結果および検討

7.4.1 単絡み点モデルの解析結果

まず，本モデルの妥当性を検証するため，各積分点に 1 個ずつ絡み点を配置し，さらにすべり系の初期方位を全ての積分点で一定として与えて解析を行う．なお，本項および次項では，弾性の等方性を仮定し，等方性弾性構成式 (5.34) を用いることとする．異方性弾性構成式 (5.51) を用いた解析は 7.4.3 項にて行う．

すべり系は 1 絡み点あたり 2 個配置する．初期方位は，分子鎖の配向の様子を観察しやすいように，分解せん断応力が最大となる方位である x_1 軸方向から 45° および 135° とする．また，すべり系の独立回転を許容することで配向硬化を表現できるため，背応力の構成式は用いず，分解せん断応力をそのまま有効分解せん断応力として取り扱う．このことに関する考察は細項 (c) にて行う．

(a) 本モデルの妥当性

まず，図 7.2 に公称応力-公称ひずみ線図を示す．同図の曲線 (i) は Argon の硬化則を用いた場合の解析結果，曲線 (ii) は Hasan-Boyce の非弾性応答則を用いた本解析の結果であり，プロットは実験値⁽⁶⁾である．

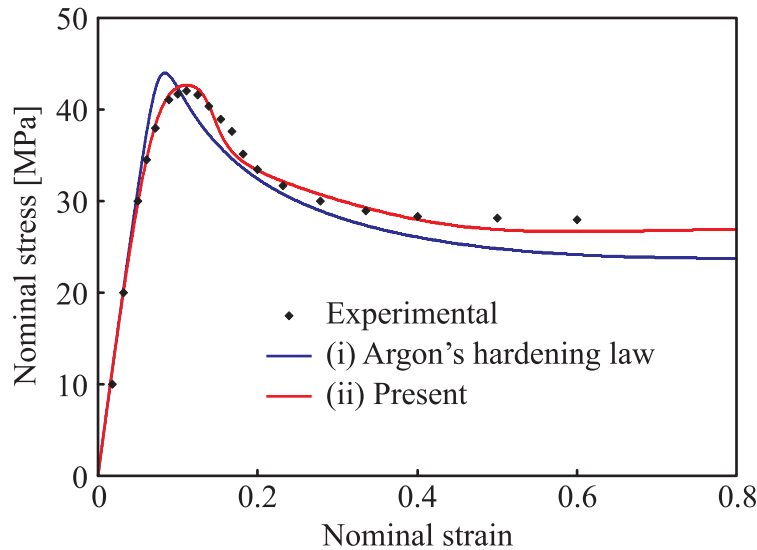


Fig. 7.2 Numerical and experimental nominal stress-strain curves

Argon 硬化則を用いた解析結果 (i) を見ると、伸び率約 8% 時に降伏を迎え、その後応力値は減少し、伸び率 40% 以降はほぼ一定荷重のまま延伸している。このことから、非晶性ポリマの大変形の特徴である降伏後のひずみ軟化および後続再硬化をよく再現できていることがわかる。しかし、実験値に見られる降伏点近傍の曲線を再現できてはいない。これは、Argon のモデルにポリマ内部の自由体積の分布が考慮されていないことが原因であり、この硬化則を採用した他の文献⁽¹⁶⁾⁽³⁴⁾を参照しても同様の解析結果が報告されている。次に本解析の結果 (ii) を見ると、ひずみ軟化および後続再硬化がよく再現されていることに加え、Argon 硬化則を用いた場合に比べて実験値の降伏点近傍の曲線によく一致していることから、初期降伏前の非線形粘弾性応答が再現できているといえる。このように、非線形粘弾性挙動およびひずみ軟化挙動の両方が 1 つの硬化則 (6.3) によって再現できる点が、自由体積変化を考慮した非弾性応答則を用いることの大きな利点である。また、図 1.6 の真応力-真ひずみ関係の模式図に見られるようなひずみ軟化後の応力値の上昇 (再硬化) を図 7.2 からは見ることができないが、これは図 7.2 が試験片の端部に作用する反力を初期断面積で除したもの (公称応力) と試験片全体の伸びを初期長さで除したもの (公称ひずみ) の関係を示した公称応力-公称ひずみ線図であるからであり、変形前後で体積が一定であると仮定して図 7.2 の曲線 (ii) を図 7.3 に示すように真応力-真ひずみ線図に変換すると、図 7.2 の曲線 (ii) において降伏後に応力値が一定となっている段階は、図 7.3 では配向硬化段階にあたることからわかる。そのため、本解析では公称応力-公称ひずみ線図における降伏後の応力一定段階をもって配向硬化段階であると判断している。また、図 7.4 に示すように、くびれが最初に発生する試験片中央部の要素 (要素番号 9) における相当応力 ($\sqrt{3/2}T^v \cdot T^v$)-非弾性ひずみ ($\int_{\mathcal{T}} \sqrt{D^i} \cdot D^i dt$) 線図 (くびれ部位における真応力-真ひずみ線図に相当) を見れば、ひずみ軟化後に相当応力の値が上昇しており、同図からも配向硬化が生じていることを確認できる。

次に、図 7.5 は要素番号 1 (図 7.1 中の最も右下に位置する要素) のすべり系 1 における内部変数 a および α の発展を示したものである。同図においては、 a の値を左側の縦軸で、 α の値を右側の縦軸で示している。この図によると、公称ひずみの増加とともにまず α が増加し始め、伸び率 10% を過ぎるとほぼ一定値となっている。また、 a は α よりやや遅れて伸び率約 10% 時に減少し始め、伸び率約 18% 以降はほぼ一定値となっている。この傾向を図 7.2(ii) の結果と比較してみると、 α が増加し始めると同時に非線形粘弾性応答が現れ始めていることがわかる。また、 α が増加し終わり、 a が減少し始める伸び率約 10% 時に降伏を迎え、さらにその後はひずみ軟化が現れる。このように、本解析で得られた内部変数 a および α の発展と変形応答との関係は、

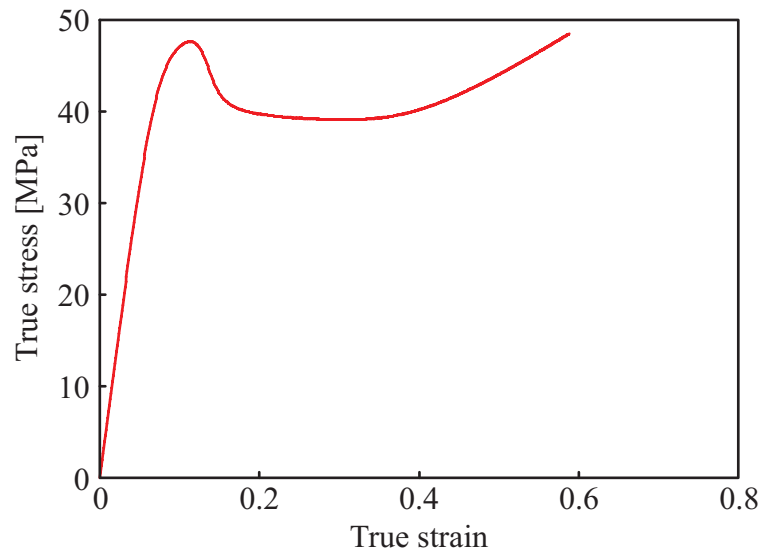


Fig. 7.3 True stress-strain curve

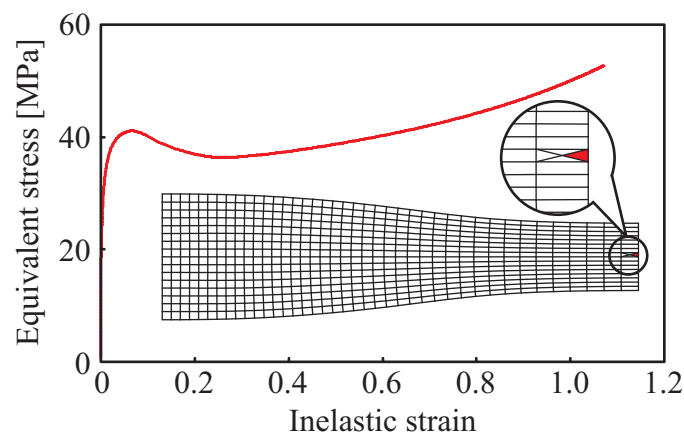


Fig. 7.4 Equivalent stress-inelastic strain curve

第6章で述べた内容と一致するものである。

続いて、図7.6にメッシュ変形図と非弾性せん断ひずみ速度分布を示す。降伏後の軟化に伴い、伸び率30%において材料中心部にくびれが生じており、非弾性せん断ひずみ速度の値が大きくなっている。さらに変形が進むにつれ、くびれは一定の幅を保ちながら引張方向へ伝ばしており、高ひずみ速度領域もくびれとともに伝ばしている。しかしながら、この図からはひずみ速度の局所化領域であるX形のせん断帯を明瞭に視認することは難しい。ポリマにおいては実験的にもせん断帯があまり明瞭には見られないことがわかっているが、潜在的にはX形のせん断帯は確かに発生しており⁽⁸⁸⁾、これがポリマのくびれ伝ば現象や破壊現象と密接に結びついている。そのためせん断帯の形成を予測することは重要であるが、この結果からはそれが困難である。

そこで、せん断帯の形成・伝ばをより明瞭に可視化できるように、実際のPMMAよりも降伏後の軟化傾向をやや強め、材料定数を $\omega_0 = 500.0 \text{ ns}^{-1} \rightarrow 1000 \text{ ns}^{-1}$ 、 $a_{\text{eq}} = 0.9450 \text{ eV} \rightarrow 0.8450 \text{ eV}$ のように変更する。ただし、他の材料定数および解析条件はそのままとして以降の解析を行う。図7.7はその場合の公称応力-公称ひずみ線図、図7.8はメッシュ変形図と非弾性せん断ひずみ速度分布である。材料定数 ω_0 を増加させることは、式(6.8)~(6.10)で表される内部変数の発展を速める効果があり、 a_{eq} を減少させることは、活性化エネ

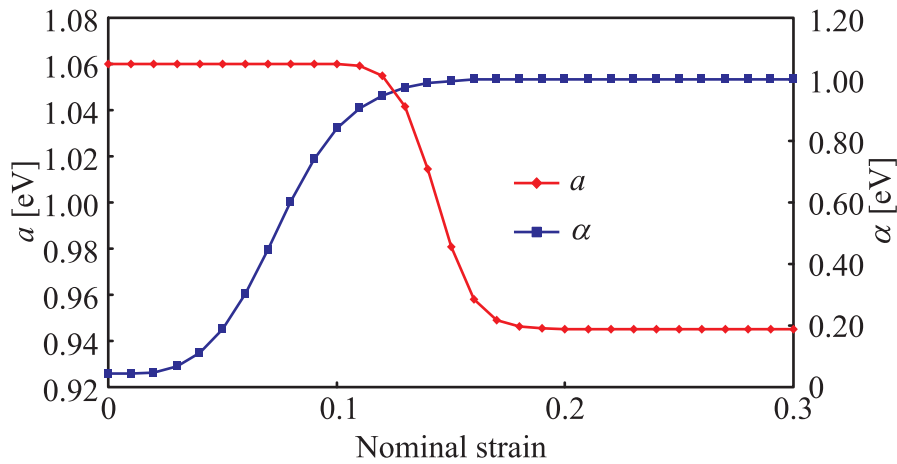


Fig. 7.5 Evolution of internal variables with increase of nominal strain

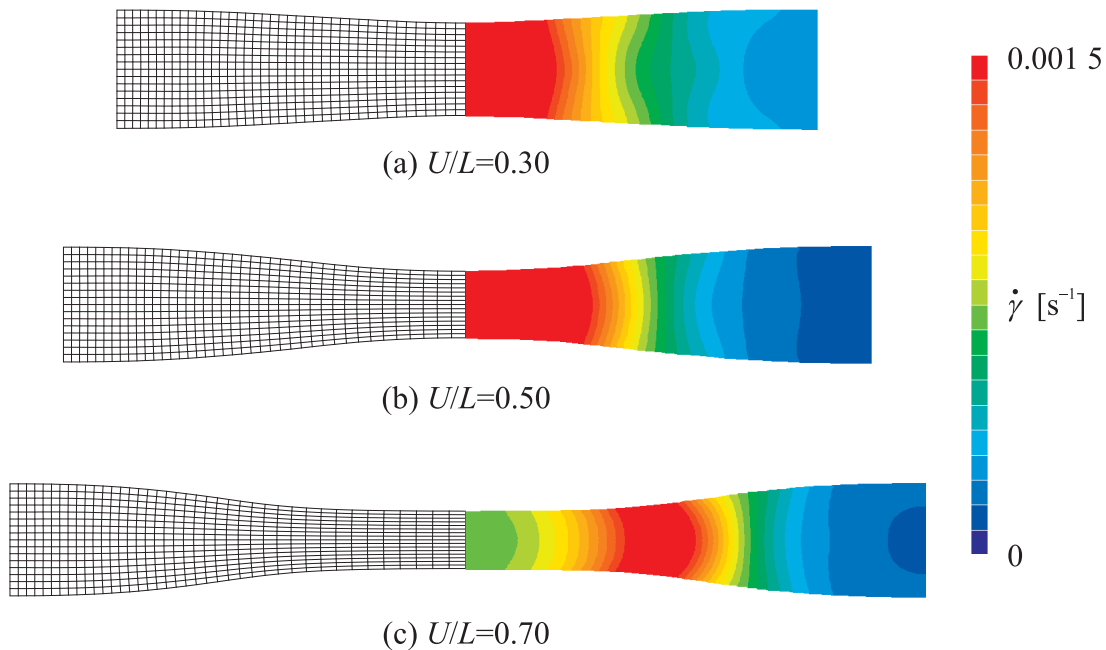


Fig. 7.6 Deformed meshes and distributions of inelastic shear strain rate

ルギー分布の最小値である内部変数 a の平衡値を下げ、より軟化の度合を大きくする効果がある。このように材料定数を変化させ、図 7.7 に見られるように軟化が顕著に現れるようにすることで、図 7.8 で示したように、くびれ進行端部に X 形せん断帯状の高ひずみ速度領域が現れることがわかる。これは、本理論による結晶塑性タイプの構成式が非共軸性を有することに起因している。非共軸とは非弾性変形速度方向と応力方向の不一致を意味しており、せん断帯の形成を再現するには非共軸構成式が必要であるといわれている。本解析で用いた構成式は、結晶塑性論の体系に基づいて運動学的関係式から導かれたものであり、従来の巨視的理論のように複雑な降伏条件や塑性構成式を用いなくても元来から非共軸性を内在しており、簡潔な方程式系で図 7.8 で示したようなせん断帯の形成を表現できるという利点がある。また、Hasan-Boyce の非弾性応答則に新たに導入したひずみ速度感度指数を下げることによって、さらに明瞭なせん断帯の形成を再現することができるが、その詳細については次の細項 (b) で述べる。

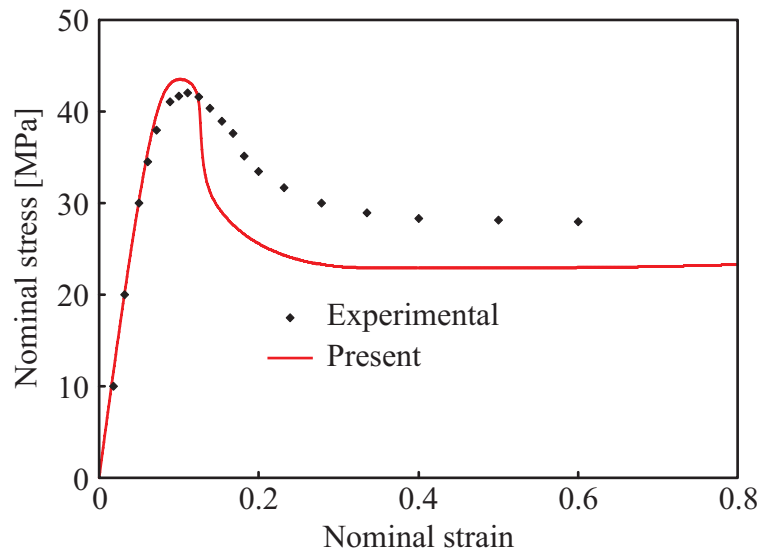


Fig. 7.7 Numerical and experimental nominal stress-strain curves with strengthening softening

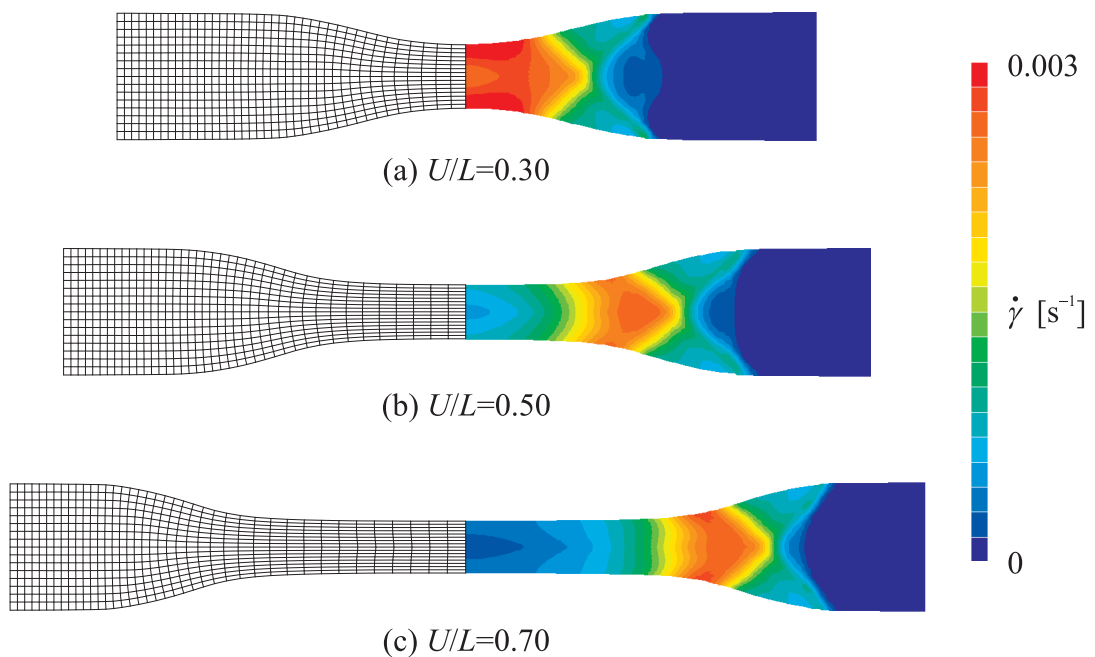


Fig. 7.8 Deformed meshes and distributions of inelastic shear strain rate with strengthening softening

さらに、非弾性せん断ひずみ速度は値を下げながら引張方向へ伝ばしているが、この数理的機構は次のように考えられる。初期状態では各すべり系は分解せん断応力が最も大きい方向 (x_1 軸方向から 45° および 135° 方向) を向いているが、初期降伏後は分解せん断応力が零となる方向 (x_1 軸方向から 90° 方向) へ向かって配向し始めるため、式 (6.3) 中の $\hat{\gamma}^{(\alpha)}$ は減少し、その結果非弾性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ も減少することになる。

次に、図 7.9 に分子鎖配向の様子を可視化した模式図を示す。同図中の各線素は分子鎖すべり系の方位を表しており、2 個のすべり系間の角度により色分けして示している。また、1 つの四角形を構成する 4 つの三角

形要素のうち、最も右側に位置する要素における方位を表示している。くびれ領域においては分子鎖が引張方向へと配向しており、すべり系間の角度は小さくなっている。一方、くびれのまだ到達していない領域においては、ほぼ初期方位のままの状態を維持している。このことから、くびれの生じた領域では分子鎖の配向による硬化が起こり、さらなる変形が起こりにくい状態になるため、ひずみ速度の局所化領域が中心部から端部方向へ次々と伝ばしていくという、ポリマの変形応答の微視的機構を再現できているといえる。このように、配向硬化を分子鎖挙動という微視的な観点から再現できることが本解析の大きな利点である。配向現象以外にも分子鎖の絡み合い点の密度も配向硬化に大きな影響を及ぼすと考えられるが、本モデルでは変形中に絡み点数は変化しないと仮定 (アフィンモデル [補足 E.5]) しているため、絡み点数が配向硬化に及ぼす影響については考慮しておらず、分子鎖の配向挙動のみから配向硬化を評価している。

図 7.10 は 6.6 節で示した方法により導出した自由体積率の分布である。伸び率 5% ~ 10% にかけては、材料全体において自由体積率は減少するが、伸び率 10% を境にくびれ領域において減少から増加に転じていることがわかる。第 6 章で述べたように、Hasan-Boyce モデルにおいて、 $\int_0^\infty \mathcal{E}^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta) d\Delta F_0$ の値は降伏点を境に減少から増加に転じる。そのため、本解析では伸び率約 10% において初期降伏に達しているといえ、このことは図 7.7 の応力-ひずみ線図の結果ともよく整合している。ただし、6.3 節および 6.6 節で述べたように、ここでいう自由体積率とは正確には「せん断変形が生じる期待値」のことであり、陽電子消滅寿命測定法 (PALS) などにより得られる実際の自由体積率の値とは定量的に比較できないものであることに注意されたい。

(b) ひずみ速度感度指数の効果

ここでは、Hasan-Boyce の確率論的非弾性応答則に新たに導入したひずみ速度感度指数の効果について、詳細な検討を行う。

第 6 章において、Hasan-Boyce の確率論的非弾性応答則にひずみ速度感度指数 u および v を新たに導入し

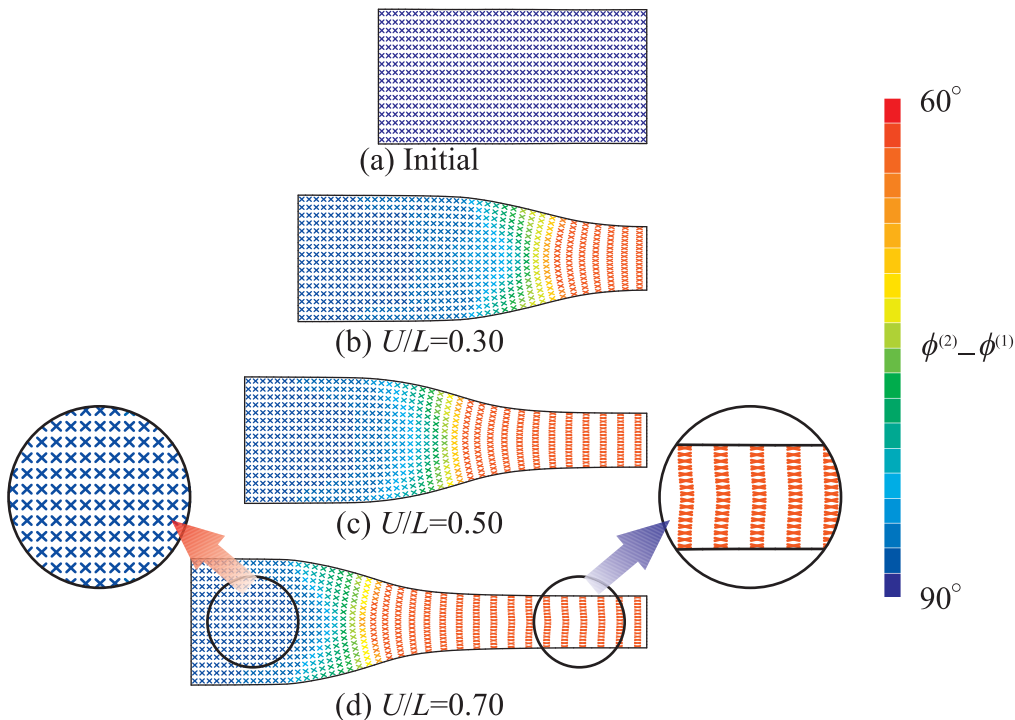


Fig. 7.9 Direction of molecular chain slip systems

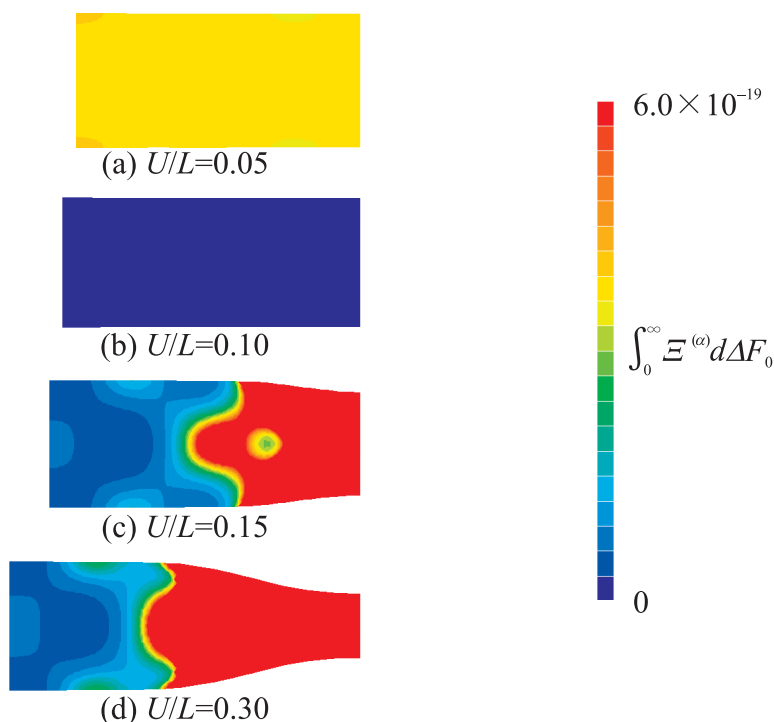


Fig. 7.10 Distributions of local free volume ratio

た．このうち， u の値を変化させた場合の効果について検討を行う．一方， v については Hasan-Boyce と同様に $v = 1.0$ のまま一定とするが，これは従来のひずみ速度硬化則におけるひずみ速度感度指数の役割から類推する限り，ひずみ速度依存性の強さを制御するためには u のみを変数とすれば十分であると考えられるからである．

図 7.11 は $u = 1.0, 0.8, 0.6$ および 0.4 のそれぞれの場合について，3 通りの強制ひずみ速度 $\dot{U}/L = 5.50 \text{ ks}^{-1}$ ， 0.550 ks^{-1} および 0.0550 ks^{-1} に対する応答を調べた結果である．ただし，縦軸の値は $\dot{U}/L = 0.550 \text{ ks}^{-1}$ のときの降伏応力で正規化している．また，それぞれの場合について降伏応力の値を比較したものが表 7.1 である．図 7.11 および表 7.1 によると， u が減少するに従って強制ひずみ速度の違いによる応力値の差異が小さくなっている．したがって，新たに導入した u はひずみ速度感度指数としての役割をもっており， u の値を変化させることによって，ひずみ速度依存性の強さを制御することができるといえる．

次に，それぞれの u の値における伸び率 70% のメッシュ変形図および非弾性せん断ひずみ速度分布を図 7.12 に示す．ただし，同図は強制ひずみ速度を $\dot{U}/L = 0.550 \text{ ks}^{-1}$ に設定して解析を行った結果である．同図より， u が減少するに従って，高ひずみ速度領域はより局在化し，X 形のせん断帯がより明瞭に現れるとともに，くびれの伝ばが遅れることがわかる．これは，従来の Pan-Rice 形ひずみ速度硬化則⁽⁷²⁾におけるひずみ速度感度指数を変化させた場合と同様の傾向であり，このことから新たに導入した u がひずみ速度感度指数としての役割をもつことがわかる．

(c) すべり系の独立回転が配向硬化に及ぼす影響

図 7.6，7.8 および図 7.12 に示したように，分子鎖すべり系の独立回転を許容する本理論を用いた場合，背応力の構成式を導入しなくても配向硬化およびそれに伴うくびれの伝ばを再現可能であることがわかる．この数理的機構は以下のように考えられる．すべり系の独立回転を許容すれば，各すべり系は式 (3.90) および式 (3.91) に従って x_2 軸方向へと回転し，分解せん断応力は減少する．一方，背応力を導入する場合，塑性変

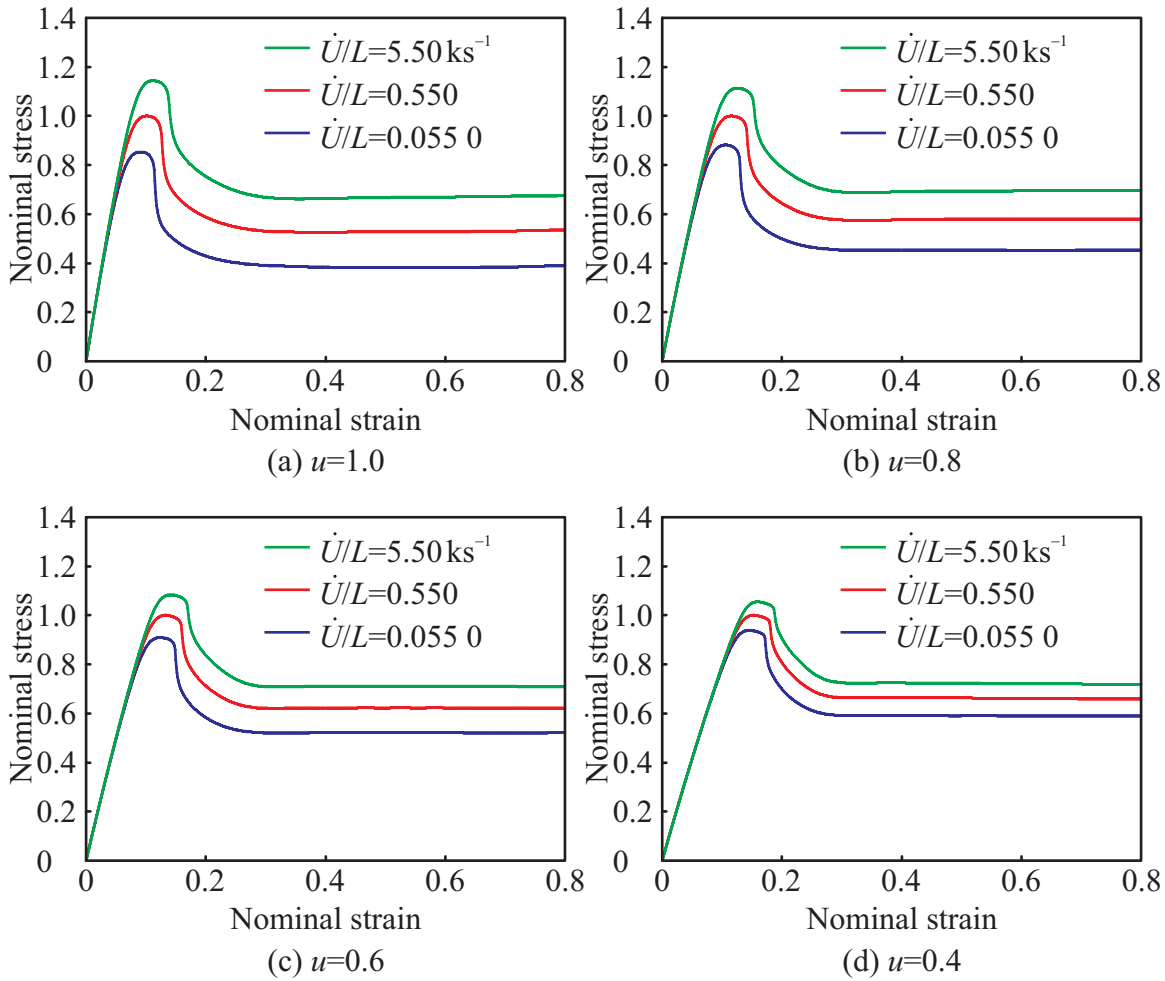
Fig. 7.11 Dependence of stress-strain curves on strain rate for various values of u

Table 7.1 Strain rate dependence of nondimensional yield stress

σ_y [-]	$u = 1.0$	$u = 0.8$	$u = 0.6$	$u = 0.4$
$\dot{U}/L = 5.50 \text{ ks}^{-1}$	1.14	1.11	1.08	1.06
$\dot{U}/L = 0.550$	1.00	1.00	1.00	1.00
$\dot{U}/L = 0.055 0$	0.854	0.881	0.910	0.939

形の進行に伴って抵抗力(背応力)が増大するため、有効分解せん断応力は減少することになる。すなわち、すべり系の独立回転を許容することと、背応力を導入することは式(6.3)に代入される応力を減少させるという意味で数理的には同等の効果があるといえる。そのため、すべり系の独立回転を許容すれば、背応力の構成式を導入しなくても配向硬化を再現することができると考えられる。

次に、すべり系の独立回転と背応力との関係についてさらに詳しく検討する。本理論では、各分子鎖すべり系は式(3.90)および式(3.91)で示した発展式により独立に回転することができる。この点が通常の結晶塑性論とは異なる点である。以降、式(3.90)および式(3.91)によりすべり系の独立回転を許容するという条件で行った解析のことを「独立回転を導入した解析」、通常の結晶塑性論と同様に下部構造スピン W^* で基底の発展を行うという条件(この場合はすべり系間の相対角度が初期の角度を保ったまますべり系が回転する)で行った解析のことを「独立回転を除いた解析」と呼ぶことにする。一方、背応力を導入した解析では、式(E.26)で

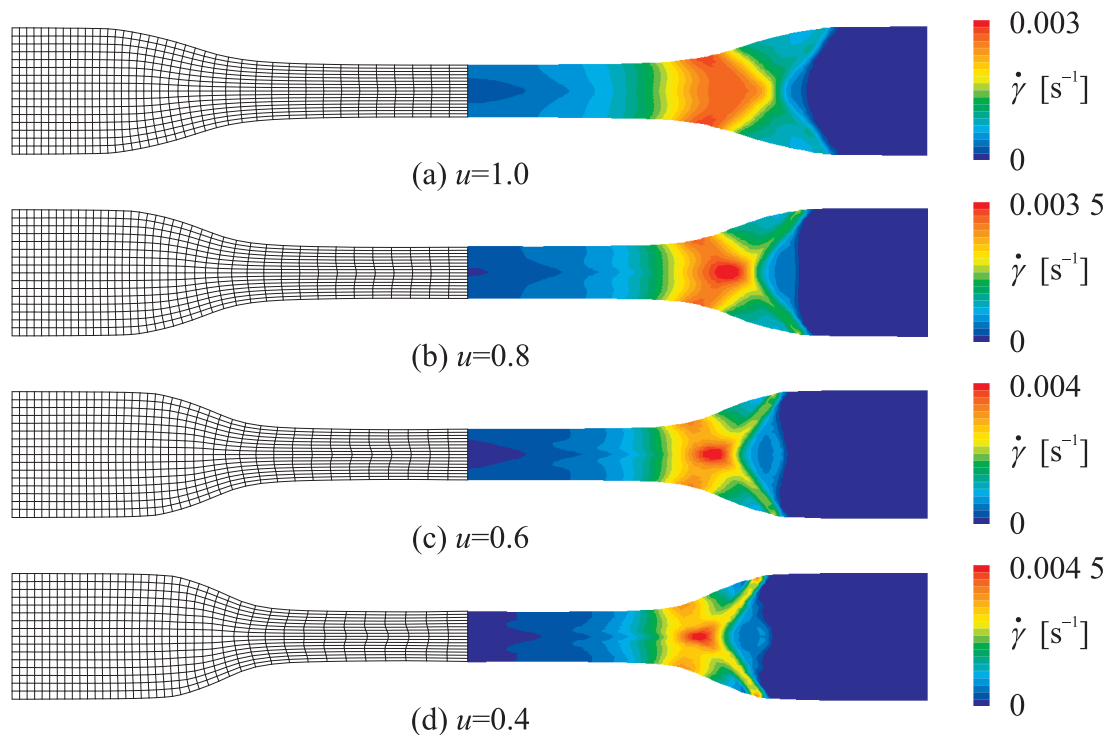


Fig. 7.12 Deformed meshes and distributions of inelastic shear strain rate at 70% elongation

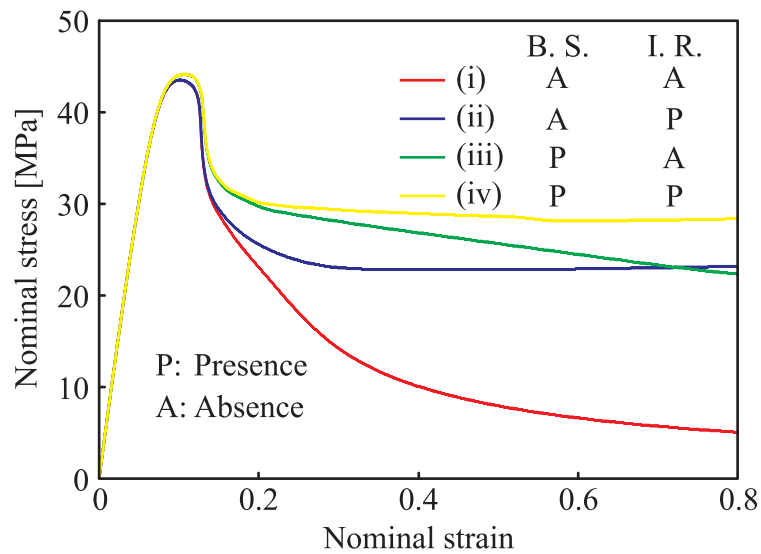


Fig. 7.13 Influence of independent rotation of slip systems on nominal stress-strain curves

与えられる背応力の分解せん断成分を分解せん断応力から減じることにより配向硬化を表現できる。

このすべり系の独立回転の有無および背応力の有無によって分類した 4 通りのケースについて解析を行い、得られた公称応力-公称ひずみ線図を図 7.13 に示す。同図の曲線 (i) は背応力と独立回転をともに除いた解析結果、曲線 (ii) は背応力を用いず独立回転のみを導入した解析結果、曲線 (iii) は独立回転を除き、背応力のみを導入した解析結果、曲線 (iv) は両方を導入した解析結果である。なお、図中の B. S. (Backstress) は背応力、I. R. (Independent Rotation) は独立回転の略称である。図 7.13 によると、降伏前の傾向はいずれの曲線も同様

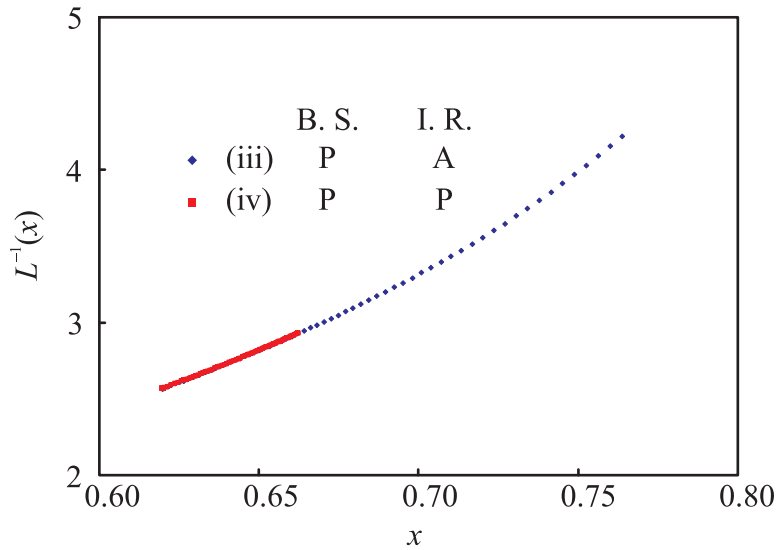


Fig. 7.14 Profile of inverse Langevin function

であることがわかる．降伏後について比較してみると，背応力と独立回転の両方を除いたケース (i) と背応力のみを導入したケース (iii) を比べることにより，背応力による硬化が現れていることがわかる．一方，ケース (i) と独立回転のみを導入したケース (ii) についても比べてみると，すべり系の独立回転を導入することによっても硬化が現れることがわかる．すなわち，独立回転と背応力のどちらも，材料を硬化させる役割をもつといえる．また，曲線 (i) と曲線 (iii) の変形応答の違いに比べ，曲線 (ii) と曲線 (iv) では差異が小さくなっていることから，独立回転を導入したケース (iv) では背応力の影響が小さくなることがわかる．そこで，独立回転の導入が背応力の値に及ぼす影響について考えることとする．図 7.14 は，背応力を導入したケース (iii) および (iv) において，背応力の構成式 (E.24) に代入される逆 Langevin 関数 $L^{-1}(x)$ の値の伸び率 80% までの推移を示したものである．同図横軸の x は $x \equiv \lambda_{ch}^{(a)} / \sqrt{N}$ であり，要素番号 1 (配向率の高い試験片中心部に位置する要素) のすべり系 1 における値を表示している．ケース (iii) における $L^{-1}(x)$ の値が急激に上昇しているのに対し，ケース (iv) では大きな変化は見られない．独立回転を導入したケース (iv) においては 2 つのすべり系がともに分解せん断応力 $\tau^{(a)}$ の最も小さい引張方向へと配向することで，非弾性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(a)}$ も減少する．そのため，左非弾性ストレッチ $V^{i(a)}$ の増加が抑えられることになり， $L^{-1}(x)$ の引数 $x = \lambda_{ch}^{(a)} / \sqrt{N}$ の増加も抑制され，このような結果が得られたものと考えられる．一方，独立回転を除いたケース (iii) においては，すべり系間の角度が 90° の状態を維持しており，分解せん断応力が大幅に減少することはない．このことから，独立回転を導入すると，背応力の効果が緩和されるといえる．

図 7.15 はケース (i) およびケース (ii) における伸び率 30%，50% および 70% の非弾性せん断ひずみ速度分布を示したものである．独立回転も背応力も導入していないケース (i) では，金属と同様にくびれが発生するが，その後くびれの伝ばは全く見られない．これに対して，背応力を導入せず独立回転のみを導入したケース (ii) においては，くびれとともに高ひずみ速度領域が引張方向へと伝ばしていることが確認できる．このことから，すべり系の独立回転を許容することで背応力の効果は小さくなり，配向硬化を表現するためには背応力を導入しなくてもすべり系の独立回転を許容するだけで十分であることがわかる．

以上，本細項 (c) で検討したことから，すべり系の独立回転を許容する本理論においては，背応力を用いることなく配向硬化を再現でき，また背応力で配向硬化を表すよりも分子鎖の回転で配向を表す方がより直接的であるといえる．さらに，背応力の構成式を用いなければ，左非弾性ストレッチの主値などの煩雑な計算をすることもないため，より簡潔な方程式系で配向挙動を解析することが可能となる．しかしながら，背応力を導

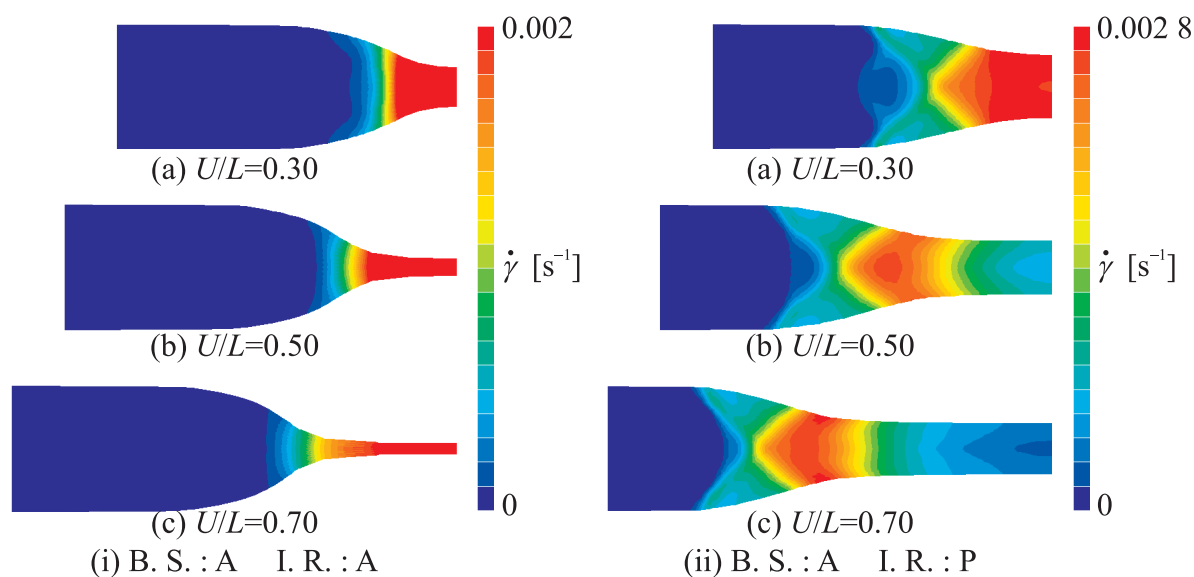


Fig. 7.15 Influence of independent rotation of slip systems on distributions of inelastic shear strain rate

入しない場合は分子鎖の方向のみから配向硬化を表現することになり、分子鎖の伸びに対する抵抗という情報を一切取り入れないことになる。そのため、物理的意味から考えれば背応力が全く不要になるというわけではなく、背応力を導入した方が物理的にはよりよいモデルであるといえる。

7.4.2 多絡み点モデルの解析結果

7.4.1 項において、本モデルを用いることにより、降伏前の非線形粘弾性応答、せん断帯の形成・伝ば、分子鎖配向の様子を表現可能であることが示された。しかしながら、このモデルでは1積分点あたりに分子鎖絡み点を1個しかもたないことに加え、全ての積分点ですべり系の初期方位を一定としているため、分子鎖が不規則に絡み合った非晶性ポリマの内部構造を適切に表現しているとはいえない。そこで本項では、5.9 節で述べたように、すべり系の初期方位をランダムに与え、さらに、図 2.4 で表される 8 鎖モデルの単位ブロックの大きさが解析対象に比べ圧倒的に小さいことから、微視的な分子鎖挙動と巨視的な変形挙動の間のスケールギャップを埋めるために、1積分点に多数の方位を与える金属の多結晶塑性論における拡張 Taylor モデル⁽⁶⁸⁾を導入した解析を行う。なお、単絡み点モデルと多絡み点モデルでは分子鎖すべり系の方位の与え方が大きく異なるため、多絡み点モデルによる解析では、ランダムな方位の与え方に適合するよう式 (7.24) より $\tau_0 = 44.00 \text{ MPa}$, $\varpi_0 = 300.0 \text{ ns}^{-1}$, $a_{\text{eq}} = 0.805 \text{ eV}$, $\zeta = 5.000$ と材料定数を変更している。また、7.4.1 項と同様、等方性弾性構成式 (5.34) を用いて解析を行う。

(a) 各積分点で異なる初期方位の組み合わせを与えた場合

すべり系は1絡み点あたり2個配置する。初期方位は、すべり系1に対しては x_1 軸方向から $0^\circ \sim 180^\circ$ の範囲で一様に分布する擬似乱数をコンピュータ上で発生させ、与える。すべり系2に対しては、すべり系1に設定された方位に 60° を加えた方位を与える。すべり系間の角度を 60° と固定したことに明確な根拠はないが、2つのすべり系の初期方位をそれぞれ独立に乱数で与えてしまうと、すべり系間の初期角度が非常に小さく最初から配向してしまっている(硬い)状態の絡み点と柔らかい状態の絡み点が混在することになり、その不連続性の結果、計算の不安定を招いてしまう。また、すべり系間の角度を 90° とすれば、例えばすべり系1

の初期方位が零度、すべり系 2 の初期方位が 90° であった場合、どちらのすべり系も活動し得ず、これも硬い状態の絡み点となってしまう。そのため、初期方位の与え方にある程度制限が必要であり、本解析では上記のようにすべり系間の角度を 60° と固定して方位を与えることとした。また、1 積分点あたりの絡み点数については、5 個、10 個、20 個、40 個および 80 個の 5 通りについて解析を行う。1 積分点あたりの絡み点数を変化させて解析を行うのは、1 積分点に多数存在する絡み点をどの程度粗視化するか（多数の絡み点を粗視化して、何個で代表させて表現するか）を検討するためであり、絡み点数密度を変化させて配向硬化への影響を検討するわけではない。1 積分点あたりいくつの絡み点サンプル数を割り当てればより均質な状態に近づくか（巨視的な変形応答が得られるか）を見るために行う検討であり、このような検討は金属の多結晶塑性解析ではよく行われる。

公称応力-公称ひずみ線図を図 7.16 に示す。実線はそれぞれの絡み点数における解析結果、プロットは実験値である。いずれの曲線も単絡み点モデルの場合と同様、降伏前の非線形粘弾性応答、降伏後のひずみ軟化および配向硬化をよく再現できていることがわかる。また、1 積分点あたりの絡み点数の増加に伴い、降伏応力の値にやや増加傾向が見られるが、これは絡み点数が増えるに従って硬い絡み点（分解せん断応力が小さい方位をもつ、降伏しにくい状態の絡み点）が増え、巨視的な降伏応力がそれに支配されるためであると考えられ、絡み点数が 20 個以上になると、やや収束していく傾向にあることもわかる。一方、降伏後は、絡み点数の増加とともに軟化が強くなる傾向があることがわかる。これは、絡み点を増やした場合では、硬い絡み点を降伏させるために大きな応力を加えれば、その周りの降伏しやすい状態の絡み点では軟化が進行しており、巨視的な応答がそれに支配されるためであると考えられる。さらに、いずれの曲線も伸び率約 60% を越えたあたりから応力値が上昇しているが、これはくびれが端部まで伝ばしきった後の 2 次硬化の影響であると考えられる。

次に図 7.17~7.21 に、それぞれの絡み点数に対するメッシュ変形図および非弾性せん断ひずみ速度分布を示す。いずれの図からも、非弾性せん断ひずみ速度の高い領域がバンド状に多数発生し、マイクロシアバンドを形成している様子がわかる。これは、積分点ごとに異なるすべり系初期方位を与えたことによる構造の不均一性がもたらした結果であると考えられる。さらに、1 積分点あたり 5 個の絡み点を割り当てた場合（図 7.17）は、マイクロシアバンドが伸び率 20% において試験片端部側に集中して発生し、中央部へ値を下げながら伝ばしており、1 積分点あたり 10 個以上の絡み点を割り当てた場合（図 7.18~7.21）は、マイクロシアバンドが伸び率 20% において試験片中央部側に集中して発生し、端部へ値を下げながら伝ばしている様子が確認でき

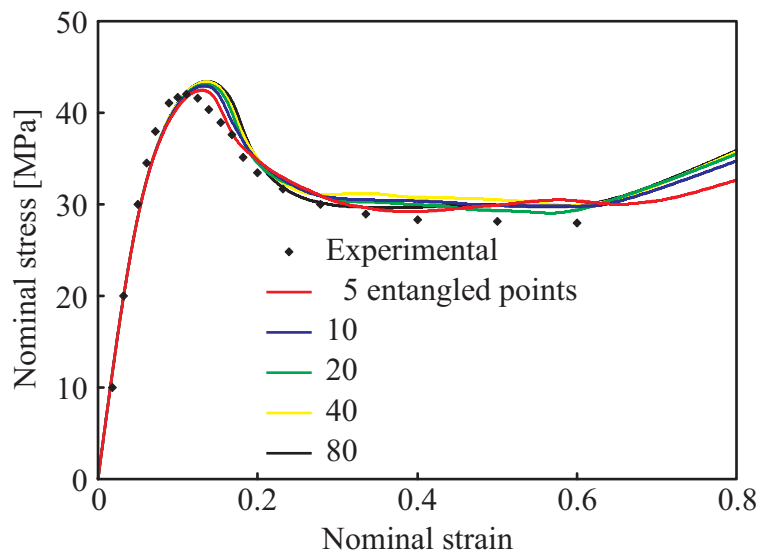


Fig. 7.16 Nominal stress-strain curves by use of poly-entangled point model

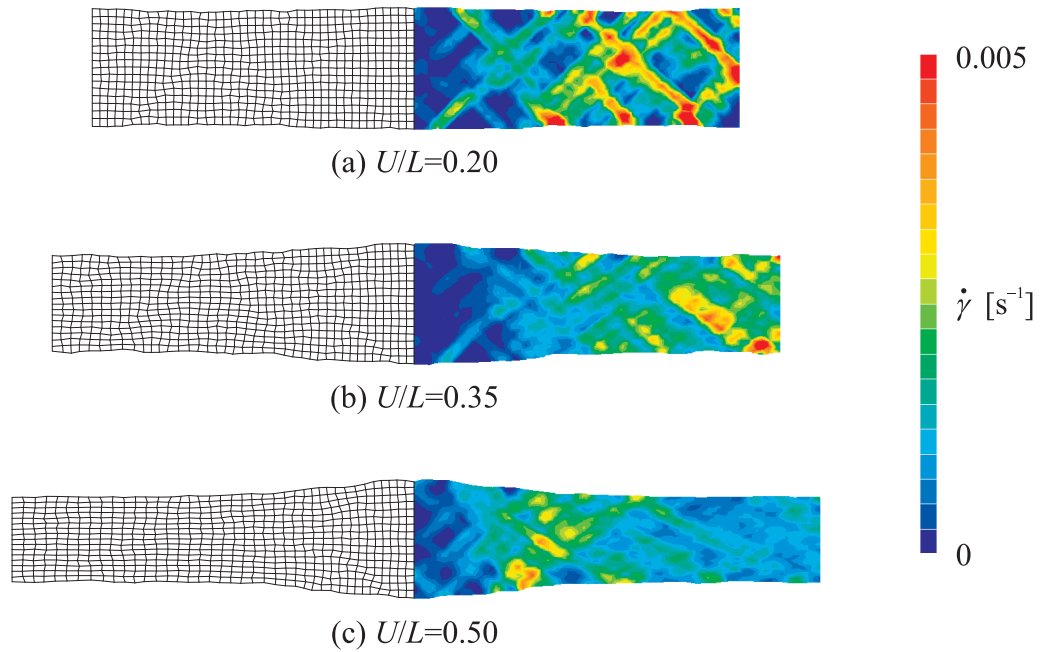


Fig. 7.17 Deformed meshes and distributions of inelastic shear strain rate (5 entangled points per a sampling point)

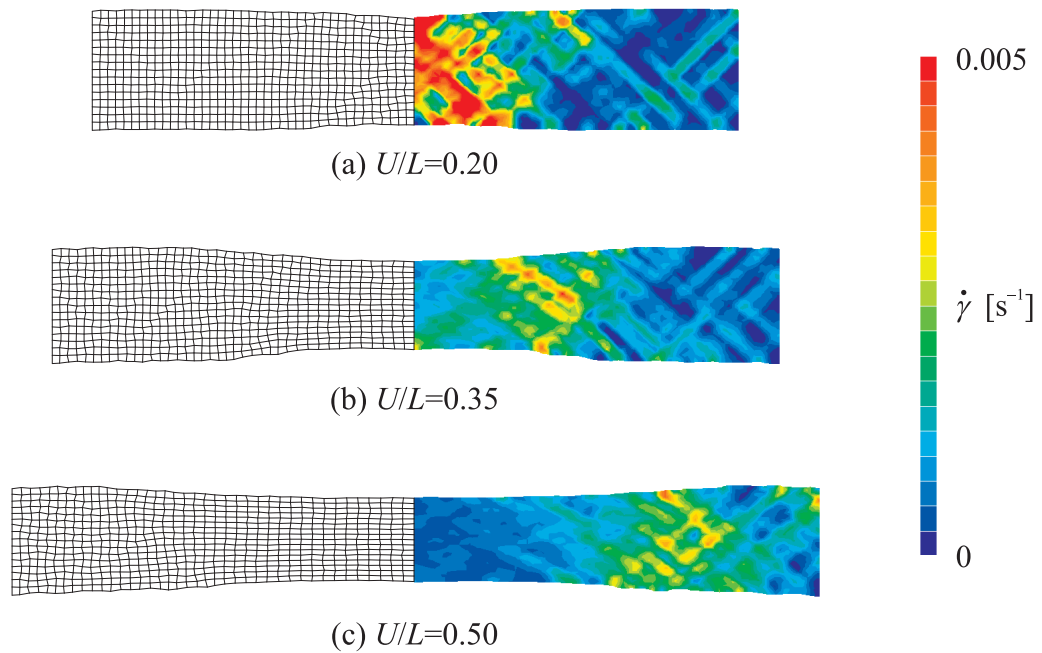


Fig. 7.18 Deformed meshes and distributions of inelastic shear strain rate (10 entangled points per a sampling point)

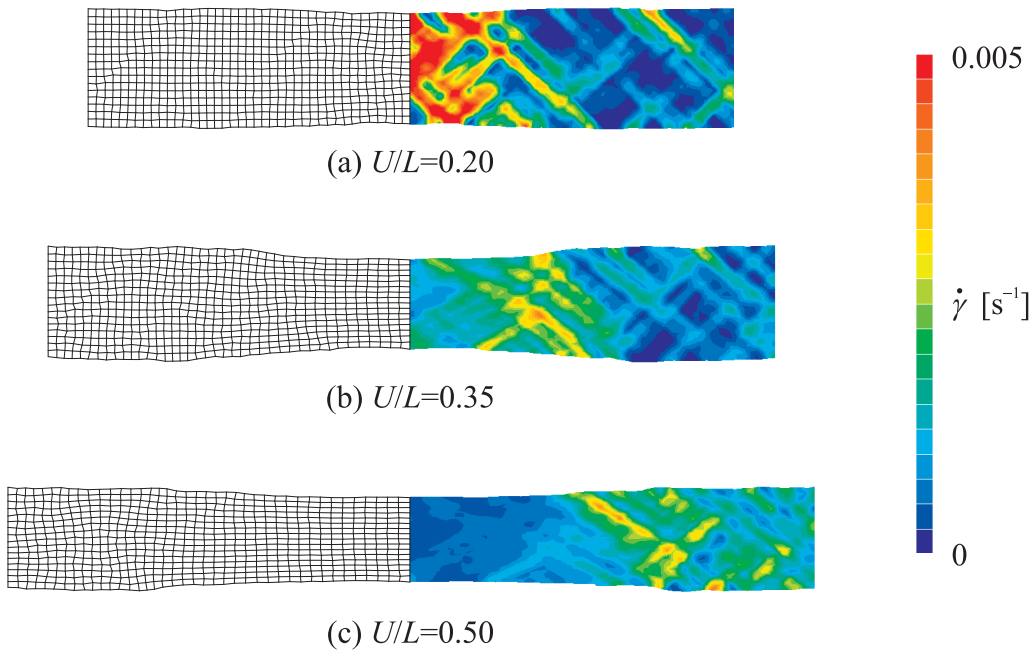


Fig. 7.19 Deformed meshes and distributions of inelastic shear strain rate (20 entangled points per a sampling point)

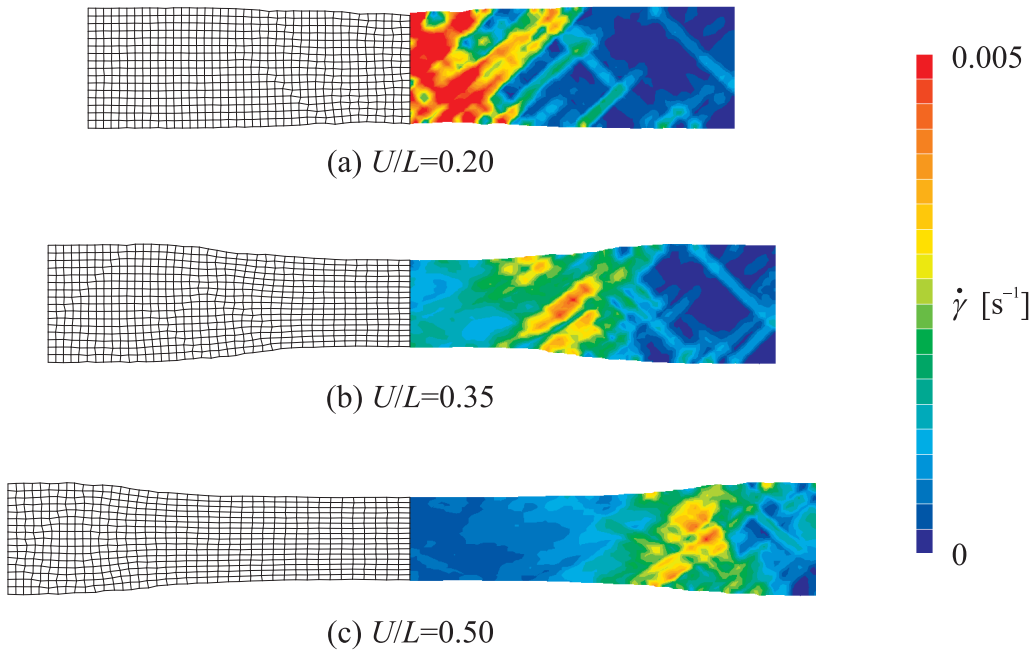


Fig. 7.20 Deformed meshes and distributions of inelastic shear strain rate (40 entangled points per a sampling point)

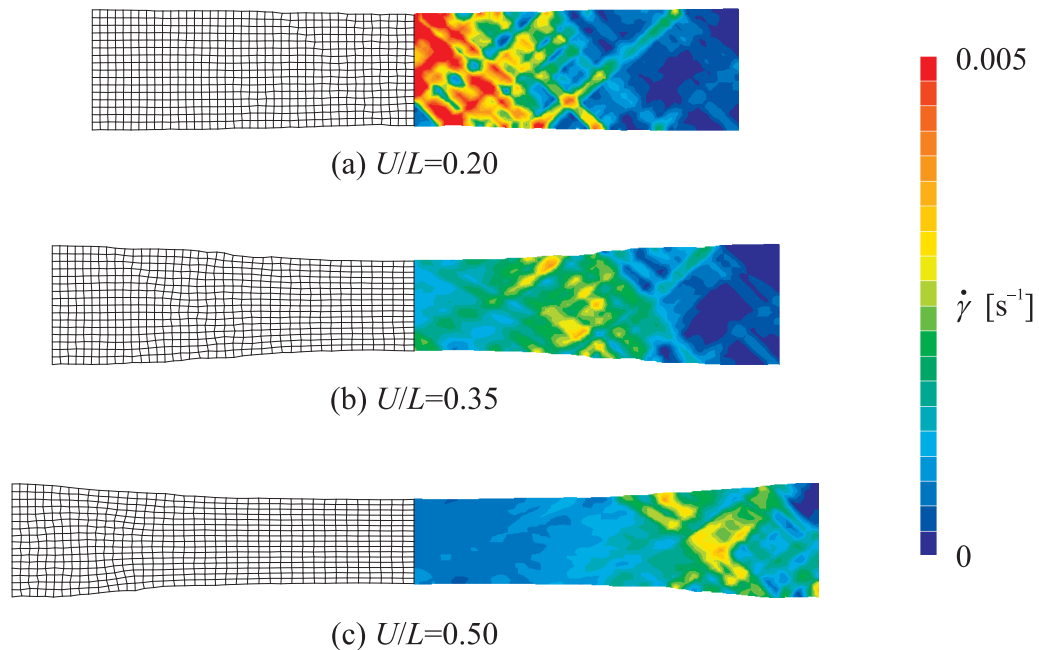


Fig. 7.21 Deformed meshes and distributions of inelastic shear strain rate (80 entangled points per a sampling point)

る．式 (7.20) で表される幅方向の幾何学的初期不整を導入することにより，試験片中央部において最も幅が短くなるため，材料が均質であった場合にはまず中央部に变形が局所化するはずであるが，1 積分点あたり絡み点を 5 個しか割り当てない場合は材料の不均一性が強く，その不均一性が变形挙動に及ぼす影響は幾何学的初期不整によるものよりも大きくなり，端部側からくびれおよびマイクロシアバンドが発生するという解析結果が得られたものと思われる．なお，今回の 1 積分点あたり絡み点数 5 個の解析では，端部側からくびれが伝ばするという結果が得られたが，くびれの生じる場所はすべり系の初期方位に大きく依存するため，異なる乱数を発生させ，異なる初期方位を与えて再度解析を行えば当然くびれの生じる場所は変わる．しかしこの点についても，1 積分点の絡み点数を増やしていけば，すべり系の初期方位を変えても解析結果に与える影響は小さくなり，収束していく傾向にあるといえる．

続いて，図 7.22～7.26 に分子鎖の配向状態を示す．同図においては，5.9 節で定義した配向強度パラメータ θ を線分の長さで，配向方向パラメータ $\bar{\phi}$ を線分の向きで表している．また，配向強度パラメータ θ の値によって，各線分を色分けして示している．いずれの図を見ても，くびれ領域では各線分が引張方向へ長く伸びており，くびれのまだ到達していない領域では各線分は短く，ほぼ初期状態のままであることがわかる．このことから，くびれ領域では分子鎖が引張方向に配向しており，異方性が強くなっているのに対し，未くびれ領域では等方的な状態を保っていることがわかる．これにより，ポリマの变形誘起異方性が表現できるといえる．

以上の解析結果を見たように，1 積分点あたりの絡み点数を 80 個まで増やしても，均質なモデルを解析した結果には近づいていない．これは，各積分点において別々に乱数を発生させ，異なる乱数による初期方位をそれぞれの積分点に与えているため，絡み点数を増やしたとしてもそれほど均質な状態には近づかないことが原因であると思われる．そこで，次の細項 (b) では，乱数を用いて 1 積分点に多数の方位を与えるが，一度発生させた乱数を他の積分点でも使い，各積分点に同じすべり系初期方位の組み合わせを与えた場合についても解析を試みる．

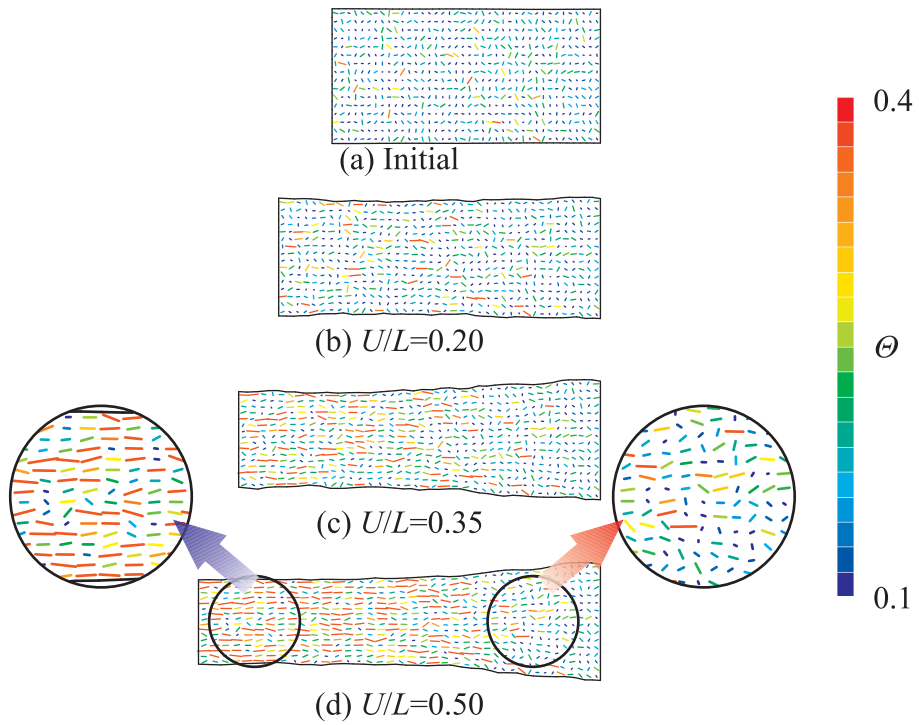


Fig. 7.22 Orientation of molecular chains (5 entangled points per a sampling point)

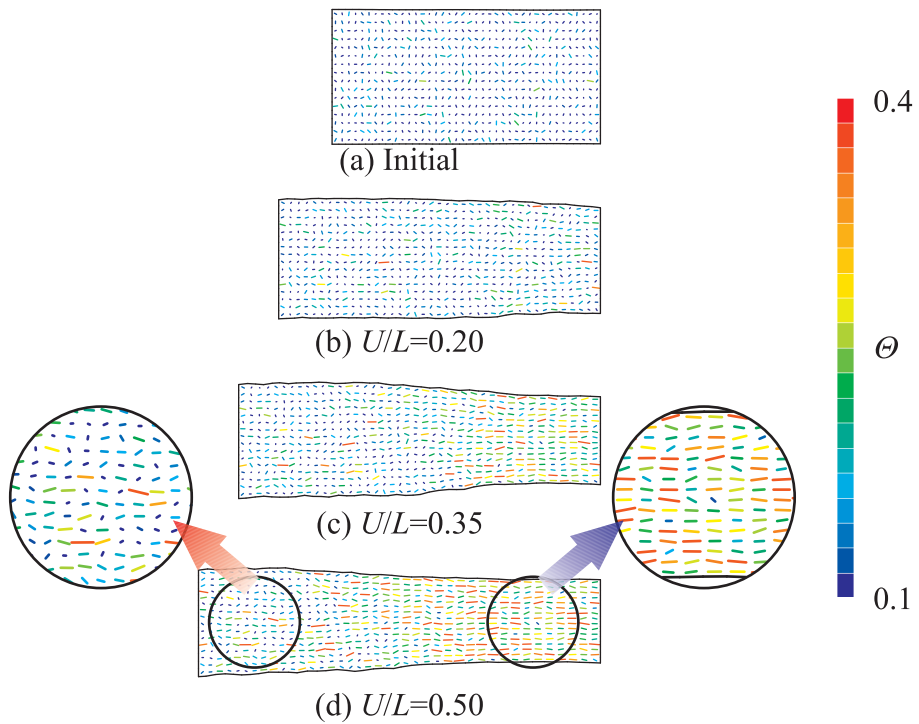


Fig. 7.23 Orientation of molecular chains (10 entangled points per a sampling point)

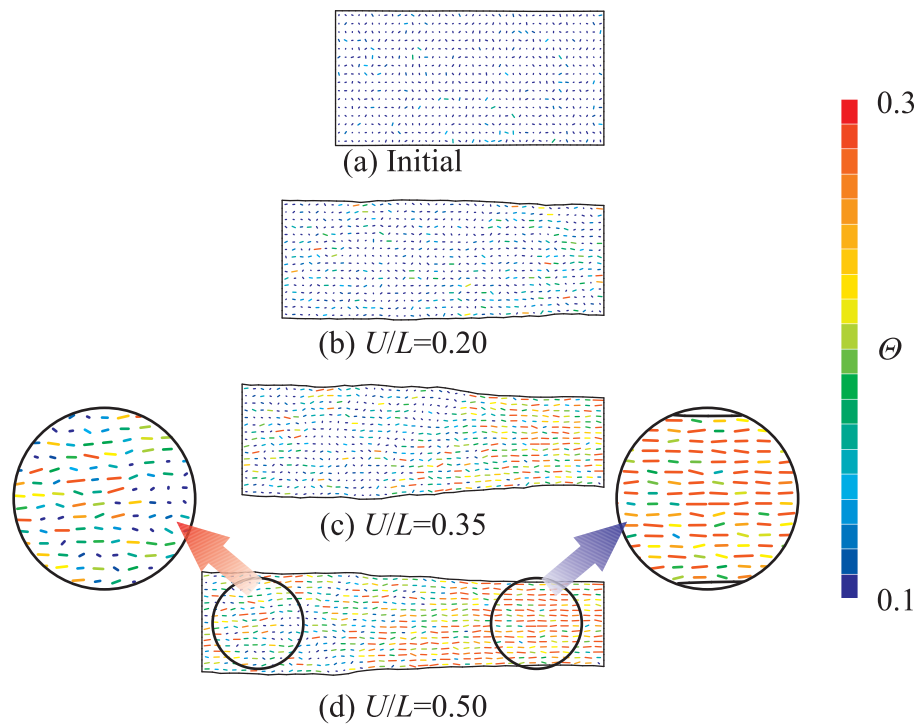


Fig. 7.24 Orientation of molecular chains (20 entangled points per a sampling point)

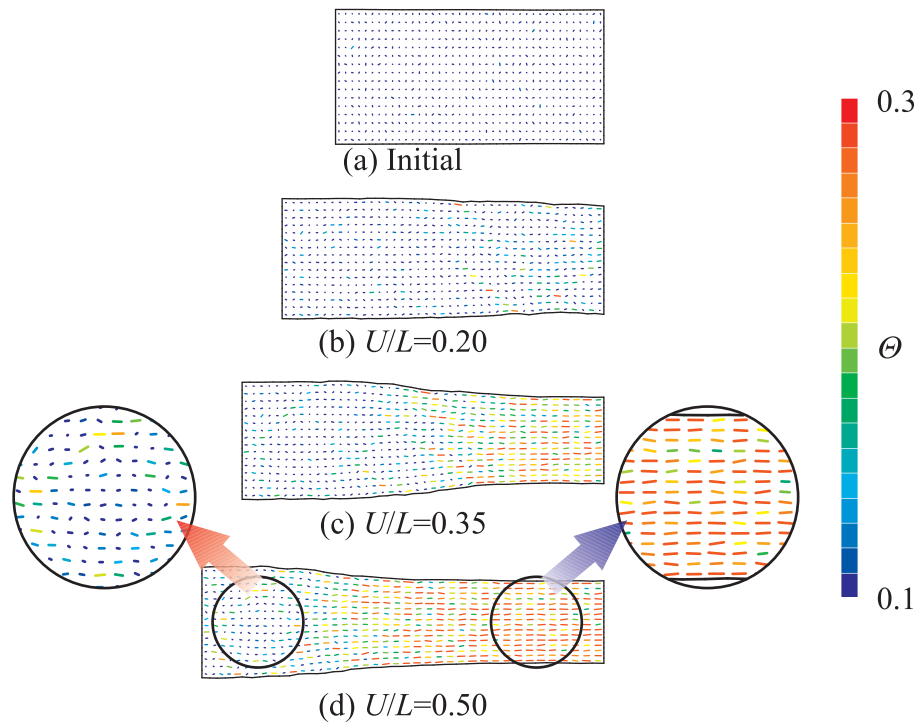


Fig. 7.25 Orientation of molecular chains (40 entangled points per a sampling point)

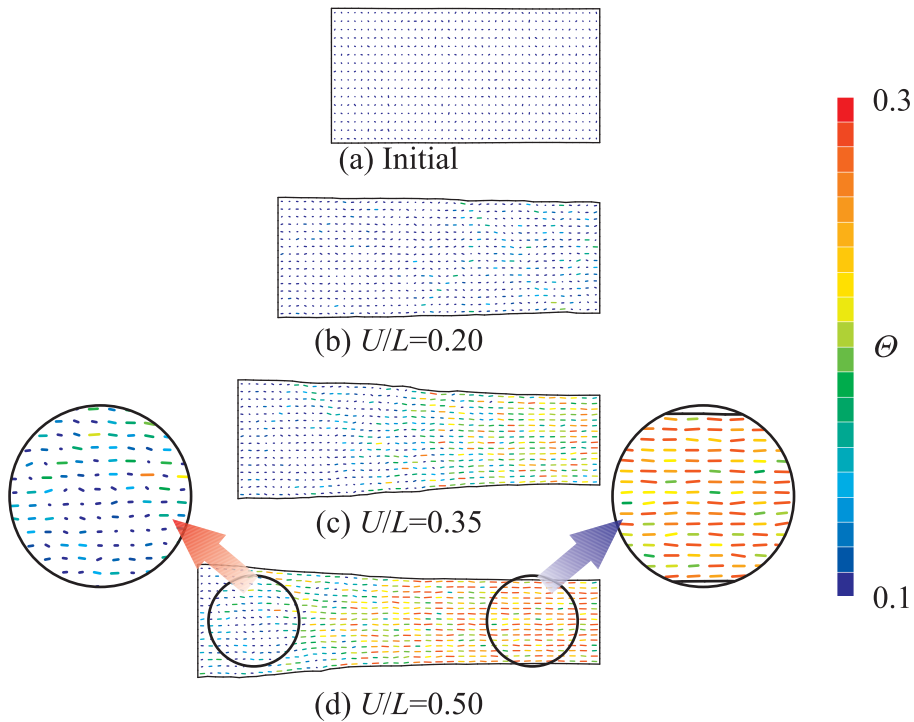


Fig. 7.26 Orientation of molecular chains (80 entangled points per a sampling point)

また、1 積分点に与えるべき絡み点の個数について、分子鎖網目理論における 8 鎖モデルから推測すると、以下のようなになる [補足 E.5.3]。実際の非晶性ポリマの絡み点密度を考慮すれば、単位体積あたりの分子鎖数が $n = 2.222 \text{ nm}^{-3}$ であることから、8 鎖モデルにおいては式 (E.27) より、単位体積あたりの絡み点数は $m = n/4 = 0.5555 \text{ nm}^{-3}$ である。この数値から、今回の解析モデル (幅 20 mm × 長さ 80 mm を想定) の 1 要素内の絡み点数を計算すると、 2.112×10^{11} 個となる。幅 20 mm × 長さ 80 mm の解析対象を想定するのであれば、これだけの絡み点数を 1 積分点に割り当てるべきであるが、解析に要する時間とコンピュータの性能を考えれば、現実的ではない。本解析では最大でも 1 積分点に 80 個しか絡み点数を割り当てていないので、そこから逆算すれば、実質的には幅 $0.3892 \text{ }\mu\text{m}$ × 長さ $1.557 \text{ }\mu\text{m}$ という非常に小さなサイズの解析対象を想定していたことになる。このような解析対象のサイズの違いがもたらす寸法効果に関する検討については、今後の課題としたい。

(b) 各積分点で同じ初期方位の組み合わせを与えた場合

これまでは積分点ごとに異なる初期方位を与えた解析を行い、構造の不均一性に起因するマイクロシアバンドの形成を再現してきたが、ここでは、各積分点内では乱数を用いて多数の初期方位を与えるが、一度発生させた乱数を他の積分点でも使い、各積分点に同じすべり系初期方位の組み合わせを与える場合について解析を行うこととする。初期方位は前細項 (a) と同様、すべり系 1 に対しては x_1 軸方向から $0^\circ \sim 180^\circ$ の範囲で一様に分布する擬似乱数をコンピュータ上で発生させ、与える。すべり系 2 に対しては、すべり系 1 に設定された方位に 60° を加えた方位を与える。1 積分点あたりの絡み点数は 40 個とする。図 7.27 はメッシュ変形図と非弾性せん断ひずみ速度分布、図 7.28 は分子鎖の配向状態である。全ての積分点で同じ組み合わせのすべり系初期方位を与えることにより均質な材料に近づくため、図 7.27 からは図 7.17~7.21 のようなマイクロシアバンドは見られなくなるが、単絡み点モデルによる解析で見られたものと同じようなせん断帯の形成・伝ばを確認することができる。ただし、初期方位を乱数により与えているため、引張軸に対して非対称なせん断帯が現

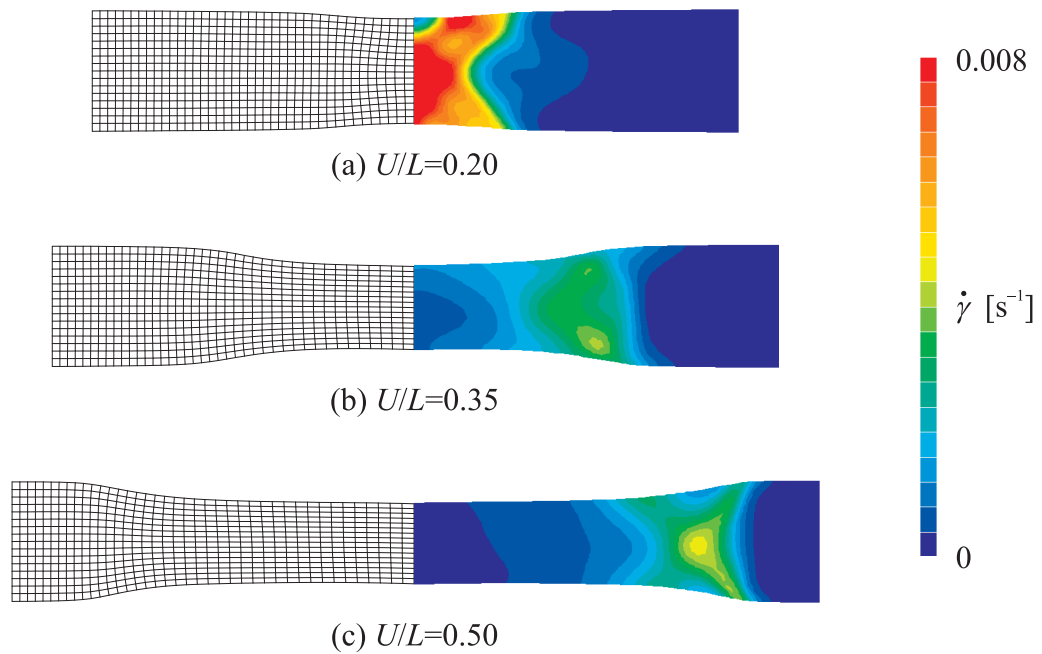


Fig. 7.27 Deformed meshes and distributions of inelastic shear strain rate (40 entangled points and same unsymmetric initial directions for each sampling point)

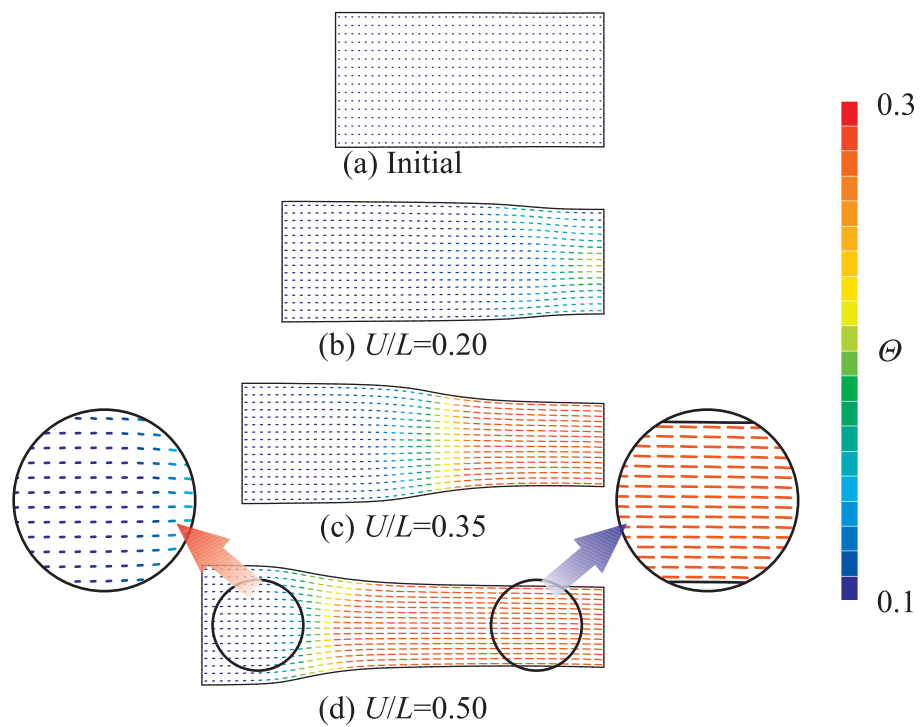


Fig. 7.28 Orientation of molecular chains (40 entangled points and same unsymmetric initial directions for each sampling point)

れている．また，図 7.28 から分子鎖の配向状態もこれまでの結果と同様な傾向にあることがわかる．

さらに，初期方位の与え方を次のように変更して解析を行う．すなわち，すべり系 1 に対しては x_1 軸方向から $30^\circ \sim 60^\circ$ の範囲で一様に分布する擬似乱数をコンピュータ上で発生させて与え，すべり系 2 に対してはすべり系 1 と x_2 軸について対称となるように方位を設定する．図 7.29 はメッシュ変形図と非弾性せん断ひずみ速度分布，図 7.30 は分子鎖の配向状態である．図 7.29 から，明瞭な X 形のせん断帯が引張軸について対称な形状で発生し，伝ばしている様子が確認できる．また，図 7.30 からは，本解析についてもこれまでの結果と同様な傾向にある分子鎖の配向状態を見ることができる．

7.4.3 弾性異方性を導入した解析結果

本項では，異方性弾性構成式 (5.51) を用いて，分子鎖配向により誘起される弾性異方性を導入して解析を行う．ただし，異方性を表す項の係数 χ を $\chi = 100.0 \text{ MPa}$ とする．また，1 積分点あたりの絡み点数は 40 個とし，各積分点で異なる初期方位の組み合わせを与える．初期方位の与え方は 7.4.2(a) 項と同様とする．

図 7.31 の左半分に異方性弾性係数の成分 C_{1111}^{eA} の分布を，右半分に C_{2222}^{eA} の分布を示す．異方性弾性係数の成分 C_{2222}^{eA} および C_{1111}^{eA} の変化は，それぞれ軸方向および幅方向に対する弾性率の変化を意味する．なお， $H = 0$ であるとき (等方的な状態) の C_{1111}^{eA} および C_{2222}^{eA} は互いに等しく，

$$C_{1111}^{eA} = C_{2222}^{eA} = C_{1111}^e = C_{2222}^e = \frac{E(1-\nu)}{(1+\nu)(1-2\nu)} = 807.7 \text{ MPa} \dots \dots \dots (7.25)$$

である．図 7.31 によれば，変形の初期 (伸び率 5%) においてはくびれがまだ発生しておらず，材料全体が等方的な状態に近くっており， C_{1111}^{eA} および C_{2222}^{eA} が 807.7 MPa 付近の値をとっている．変形が進行すると，くびれが発生・伝ばし，くびれ領域における C_{2222}^{eA} の増加および C_{1111}^{eA} の減少が顕著に現れている．すなわち，分子鎖が引張方向へ配向したくびれ領域においては，分子鎖の配向方向すなわち軸方向の弾性率が高く，幅方向の弾性率が低くなるという弾性異方性が現れていることがわかる．このことから，非晶性ポリマの弾性の変

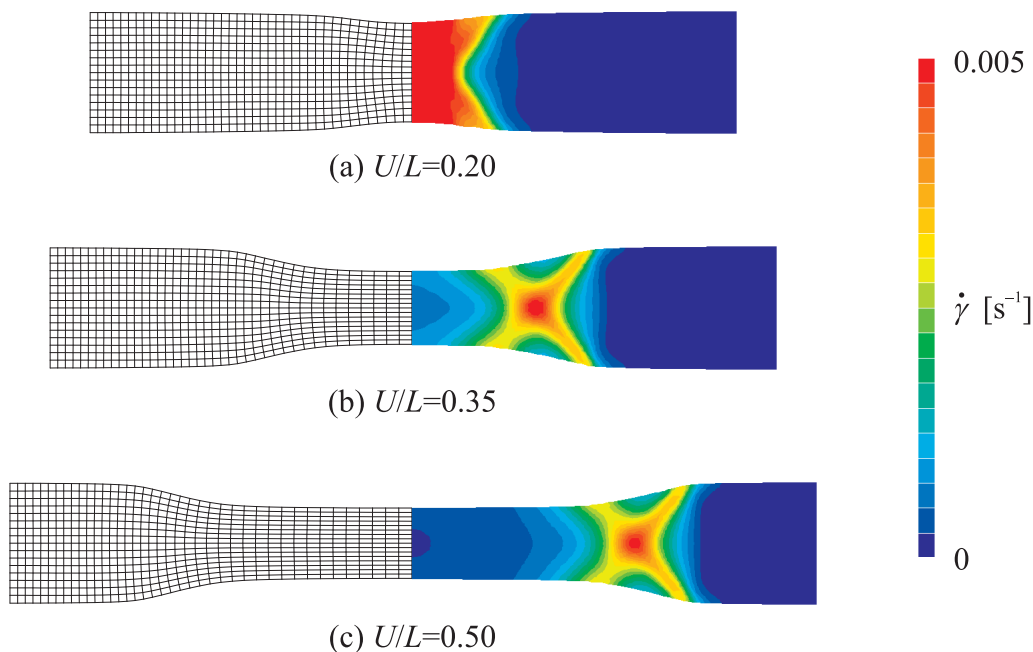


Fig. 7.29 Deformed meshes and distributions of inelastic shear strain rate (40 entangled points and same symmetric initial directions for each sampling point)

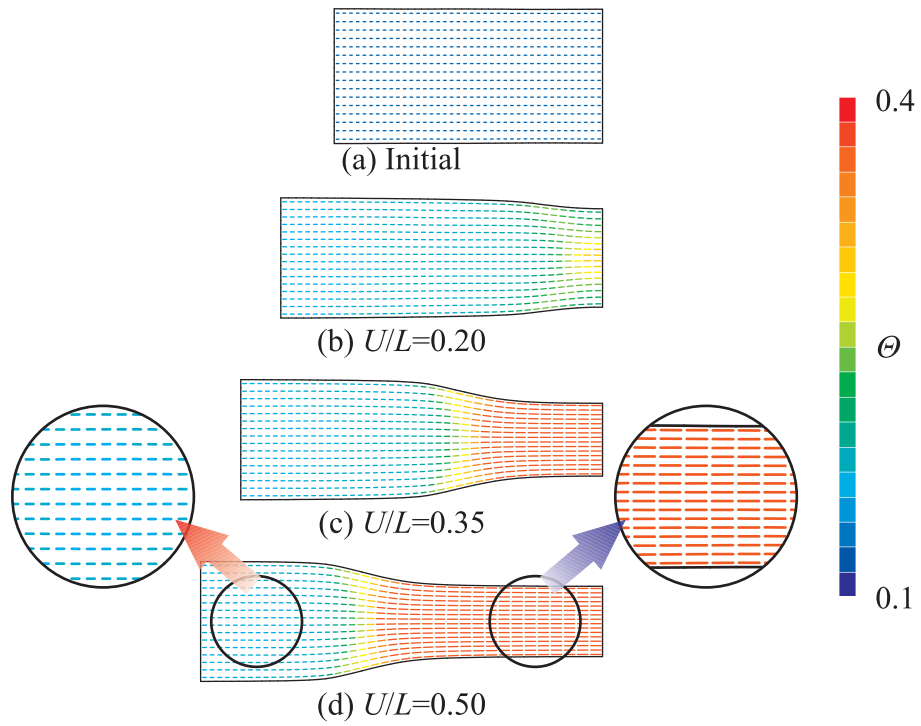


Fig. 7.30 Orientation of molecular chains (40 entangled points and same symmetric initial directions for each sampling point)

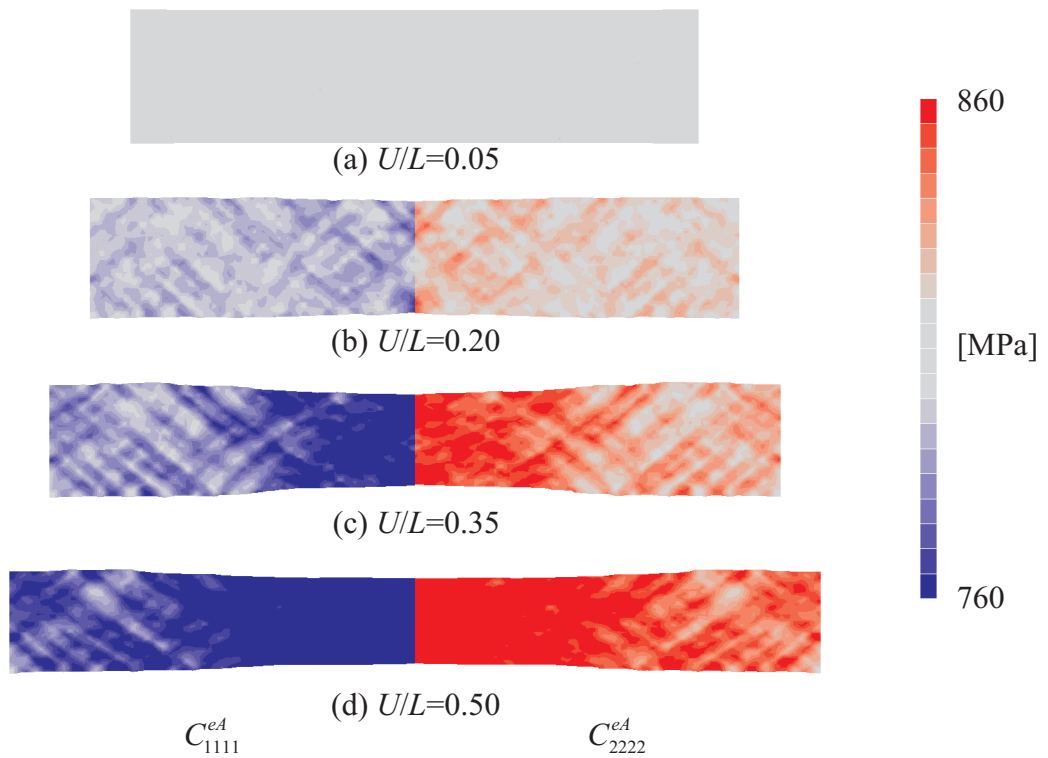


Fig. 7.31 Evolution of deformation-induced anisotropy of elastic modulus for transverse and tensile direction

形誘起異方性が表現できているといえる [補足 G.3] .

第 8 章

結 言

8.1 本論文の結言

本研究では、非晶性ポリマにおける塑性変形の素過程を分子鎖内におけるキンクの回転であるとし、従来の分子鎖網目理論における 8 鎖モデルに基づいて分子鎖すべり系を定義することにより、非晶性ポリマに対する結晶塑性論的な分子鎖塑性モデルを構築した。本モデルではすべり系の独立回転を許容することにより、分子鎖の配向挙動を表現することを試みた。また、従来の分子鎖網目理論において特定されていない共回転スピンを結晶塑性論の体系に基づく運動学的関係式から導出し、下部構造スピんに特定した。さらに、Hasan-Boyce による確率論的非弾性応答則に新たにひずみ速度感度指数の影響を導入し、硬化則として採用することで、非晶性ポリマ内部の自由体積変化を考慮した、微視的情報に基づく変形挙動のマルチスケールモデリングを行った。その際、分子鎖のキンク回転が低活性化エネルギー状態において起こると考え、非晶性ポリマにおける塑性変形の素過程と自由体積増加による降伏現象のモデルとを有機的に関連づけた。

次に、分子鎖が不規則に絡み合った非晶性ポリマの内部状態をよりよく表現すべく、金属の多結晶塑性解析においてよく用いられる拡張 Taylor モデルを本理論に適用し、分子鎖すべり系の初期方位をランダムに設定し、さらに 1 物質点に多数の絡み点を与える多絡み点モデルへの拡張を行った。

さらに、分子鎖すべり系の方位のばらつきから異方性強度を表すテンソルを定義し、これを弾性構成式へ導入することで弾性の変形誘起異方性の表現を試みた。

以上のモデルに基づき、PMMA を例として大変形 FEM 解析を平面ひずみ引張荷重下で行い、本モデルの妥当性を検討した結果、以下の結言を得た。

- (1) 本モデルを用いた非晶性ポリマに対する大変形 FEM 解析から、せん断帯状の高ひずみ速度領域が形成され、ひずみ速度の値を下げながら引張方向へ伝ばする様子を再現でき、その際のくびれ領域における分子鎖の引張方向への配向を直接表現できる。
- (2) 分子鎖すべり系の独立回転を許容すれば、配向硬化を表現するために背応力の構成式を用いる必要がなくなる。
- (3) 自由体積の変化を考慮した非弾性応答則を硬化則に採用することにより、ひずみ軟化および後続再硬化に加えて、従来の硬化則では表現できなかった降伏前の非線形粘弾性応答を再現することができる。また、この硬化則に新たに導入したパラメータはひずみ速度感度指数の役割をもち、この値を変化させることでひずみ速度依存性の強さを制御できる。
- (4) 多絡み点モデルを用いた FEM 解析から、材料の不均一性に起因するマイクロシアバンドの発生とその引張方向への伝ばが再現される。また、分子鎖すべり系の方位から定義した異方性変数テンソルを弾性構成式へ導入することで、分子鎖配向により生じる非晶性ポリマの弾性異方性を表現できる。

8.2 今後の課題と展開

本研究では、分子鎖や自由体積といった非晶性ポリマの微視構造に着目し、そのような微視構造の挙動から巨視的な力学現象を再現できるマルチスケールモデルを構築した。本節では、本モデルに残されている課題について述べるとともに、今後の展開に触れることとする。

8.2.1 熱伝導現象

本モデルでは、非弾性応答則 (6.3) に温度 θ が導入されており、環境温度が変形応答に及ぼす影響については考慮されている。しかし、ポリマの塑性変形において粘塑性散逸によりくびれ領域に顕著に現れる内部発熱、材料内部での熱伝導および周囲環境との熱伝達が考慮されておらず、熱の移動が生じるような非平衡状態における応力緩和を再現することができないモデルとなっている。ポリマには顕著な温度依存性があることが知られており、これらを無視することはできないと考えられる。富田らは変形の局所化に及ぼす熱発生の影響を考慮し、多くの解析例⁽¹²⁾⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾⁽¹⁵⁾⁽¹⁶⁾⁽¹⁷⁾を示しているが、内部発熱および熱伝導・伝達の影響を反映した硬化応答を実験から得ることは現実的に難しいため、これらの研究はあくまで数値解析的予測にとどまっている。今後は、内部発熱と熱伝導・伝達に関するより精密なモデル化が必要になると考えられる。

8.2.2 静水圧応力の効果

ポリマは金属とは異なり、クレイズ(ポイド)あるいは自由体積による塑性変形中の体積変化を無視することができないため、偏差応力のみならずクレイズあるいは自由体積による静水圧応力の効果も考慮する必要がある。本モデルにおいては非弾性変形速度を運動学的に表した式 (3.77) 中に、すべり面に垂直な非弾性ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_m^{(a)}$ の項が取り入れられているが、その値を求めるための硬化則をポイドや自由体積などの微視的な情報から定式化した例は報告されておらず、本研究では簡化のためこの項の影響を無視している。クレイズあるいは自由体積による静水圧応力依存性を本モデルに取り入れるには、高分子科学分野の研究結果を待たなければならない。また、クレイズはポリマの破壊の前駆現象であるため、将来的にポリマに対する破断予測シミュレーションを行うためにもクレイズの挙動をモデルに取り入れる必要がある。

8.2.3 除荷時の粘弾性応答

本研究では Hasan-Boyce による自由体積変化に基づく確率論的非弾性応答則を硬化則として採用することにより、初期降伏前の非線形粘弾性応答を再現した。本解析では単調引張解析のみを行ったが、負荷後に除荷を伴う変形では、荷重が零付近の値をとるときにも粘弾性が現れる。単調負荷時でもくびれが生じるような場合には、くびれ部以外では弾性除荷が生じているため、このような除荷時の粘弾性応答をもモデル化する必要があると考えられる。

8.2.4 弾性の変形誘起異方性に関する実験的検証

本解析では分子鎖の配向によって生じる弾性の変形誘起異方性を考慮し、くびれ伝ば後の軸方向と幅方向の弾性率の変化を予測した。しかしながら、詳細な実験結果との比較を行っておらず、検討は不十分である。分子鎖の配向状態と弾性率の関係を実験的に精密に調査し、その実験結果との比較から異方性弾性構成式における異方性を表す項の係数 χ の値を具体的に同定したうえで、より実現象と整合性のよい解析を行う必要がある。本モデルの発展により、分子鎖の配向による弾性異方性の精度のよい予測が可能となれば、ポリマの成形加工の際の強度予測が簡便になり、加工効率の向上が期待できる。

8.2.5 非晶性ポリマにおける寸法効果

非晶性ポリマにおいては、金属における Burgers ベクトルの大きさや結晶粒の平均的大きさのような明確な材料固有の特性長の存在が明らかとされていない。本解析では、多絡み点モデルによる解析における 1 積分点

に割り当てる絡み点数から、平均的な絡み点間距離を推測することができるが、この絡み点間距離の違いが変形応答に影響を及ぼすようにモデリングされておらず、解析対象サイズの違いによる変形応答への影響などの寸法効果について検討することはできない。そもそも、非晶性ポリマに対する寸法効果に関する検討は少なく、寸法効果の有無についても詳細は明らかとなっていない。今後、このような検討も必要である。

8.2.6 結晶性ポリマへの応用

実際に構造材料として用いられるのは非晶質部分と結晶質部分が混在した結晶性ポリマ(複合材料)であることが多いため、本モデルを結晶性ポリマにも応用できるよう発展させる必要があると考えられる。本モデルは「分子鎖の希薄な高自由体積領域においてキック回転が発生する」という塑性変形の素過程をもつ非晶性ポリマであれば適用可能である。そのため、結晶性ポリマの非晶質部分に対しては本モデルを適用可能であるが、「分子鎖の折りたたみ構造が形成する面で生じるすべり」を塑性変形の素過程とする結晶質部分に対してはこのままでは適用できない。そこで、非晶質部分においては本モデルを用いて分子鎖すべり系の独立回転を許容し、結晶質部分においては通常結晶塑性論と同様にすべり系間の角度を保つように基底ベクトルの発展を行うという手法を用いれば、結晶性ポリマに対しても本モデルが適用できると考えられる。その際、非晶質・結晶質のいずれの部分も結晶塑性論の体系として統一的に扱えるという利点がある。また、結晶性ポリマは結晶質・非晶質部分が交互に積層された構造が回転を伴いながら放射状に成長することによって形成される球晶構造をもつ。そのため、この構造は非常に複雑であり、一般的な試験片レベルのサイズの解析を行うには、膨大な計算容量が必要となることが予想される。このような問題を解決するため、材料の微視構造から巨視的な性質を予測する均質化法などを導入することによって、非晶質部分と結晶質部分からなる微視構造を粗視化する必要がある。また、本解析は分子鎖が全て同一平面上に置かれているという構造を考え、2次元解析を行ってきたが、上記のような複雑な球晶構造を再現するには、3次元解析が不可欠であると考えられる。

以上に挙げたような課題を解決し、本モデルをより実現象を精度よく再現できるモデルへと磨くことにより、ポリマの大変形挙動の微視的なメカニズムを数値実験の立場から解明していくことが期待できる。

謝 辞

本研究は、著者が慶應義塾大学大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻に在籍中に、本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻マルチスケール機械システム工学専修 志澤一之教授の御指導の下で行ったものであり、同教授より賜りました熱心な御指導、御鞭撻に対し厚く御礼申し上げます。同教授より1年間での早期学位取得の道を示していただいたことは、著者の人生にとって大きな転換点であったように思います。

また、学会などで熱心に御議論いただき、多くの資料を御提供いただいた神戸大学工学部機械工学科 富田佳宏教授、当時玉川大学工学部機械工学科 佐野村幸夫助教授、大阪府立大学工学部機械工学科 陸偉助教ならびに岡山大学工学部機械工学科 内田真助教に深く御礼申し上げます。

本論文の作成にあたり、御査読いただき、また有益な御討論ならびに貴重な御助言を賜りました本塾理工学部機械工学科 宗宮詮教授、泰岡顕治准教授および貴重な実験データを御提供いただきました堀田篤専任講師に深く感謝申し上げます。

また、本論文の作成において、有益な御助言をいただきました本塾理工学部機械工学科 只野裕一助教および青柳吉輝助教に心より感謝いたします。

旭化成エンジニアリング株式会社新事業開発センター応用シミュレーション技術部 山本敏治氏ならびに高橋順一氏には、実際に企業で行われているポリマに対するFEM解析の作業の一部を体験させていただいたほか、さまざまな面でお世話になりました。深く感謝申し上げます。

本研究の遂行にあたり、本分子鎖塑性モデルの土台を築かれた当時本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻 高松敦氏および本解析コードの基礎を作り上げられた中田裕氏の御尽力と御助言に対し、敬意を表するとともに、深く感謝いたします。また、多大な御協力をいただいた当時本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻 阿部真之氏、本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻 小倉正寛氏および石川毅氏に深謝いたします。さらに、分子鎖配向に関する実験の依頼を快く引き受けてくださった本塾大学院理工学研究科開放環境科学専攻堀田研究室 修士1年の長坂俊氏に厚く感謝申し上げます。

また、学部時代の先輩である当時本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻 安藤哲朗氏、中垣望氏、伊藤嘉崇氏、海老原誠氏、大石真吾氏、志田雅之氏、同期としてともに研究生活を送った当時本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻 味岡秀恭氏、海宝寿実雄氏、杉田賢太郎氏、松本吉博氏、山木直氏および当時本塾理工学部機械工学科 國保尚子氏ならびに山上裕基氏、本年度の研究室のメンバーである本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻 岡田敏氏、佐藤駿次氏、堀部尚裕氏、水谷賢治氏、黒澤瑛介氏、佐久間正寿氏、菅原英夫氏、武文智洋氏、村松真由氏ならびに本塾理工学部機械工学科 大森崇裕氏、岡野陽祐氏、小林遼太郎氏、杉町太郎氏、秦真浩氏および宮越亮丞氏に心より感謝の意を表します。

未筆ながら、幼い頃に深い愛情をもって接してくれた亡き父、5歳で父を亡くしてから著者をここまで養い、進学に理解してくれた母、いろいろな面で援助してくれた姉に心より感謝いたします。

2008年2月

矢上台の研究室にて

著者

漢 裕 統

参考文献

- (1) 大柳康, エンジニアリングプラスチック —その特性と成形加工—, (1985), 森北出版.
- (2) 井上俊英 他, エンジニアリングプラスチック, (2004), 共立出版.
- (3) Callister, W. D., Jr., *Materials Science and Engineering: An Introduction, 7th Edition*, (2007), John Wiley & Sons, Inc.
- (4) Osswald, T. A. and Menges, H. Georg L. [著], 旭化成工業株式会社樹脂開発・技術センター 若手技術者研究会 [訳], 武田邦彦 [監修], エンジニアのためのプラスチック材料工学, (1997), シグマ出版.
- (5) 小松公栄・山下晋三, ゴム・エラストマー活用ノート 増補改訂, (1999), 工業調査会.
- (6) 井上達雄・山本勲, “高分子材料の非弾性変形に伴うクレイジングのテンソル表示とその特性”, 日本機械学会論文集, Vol. 48, No. 426, A (1982), pp. 221–229.
- (7) 野田直剛・中村保, 基礎塑性力学, (1991), 日新出版.
- (8) 小林誠一・岡田裕, “樹脂材料の塑性変形に関する硬化則の同定”, 日本機械学会全国大会講演論文集, Vol. 76, No. 1 (1998), pp. 473–474.
- (9) 後藤學, 塑性学, (1982), コロナ社.
- (10) 佐野村幸夫, “ポリカーボネート押出丸棒の力学的挙動”, 成形加工, Vol. 12, No. 11 (2000), pp. 736–741.
- (11) 佐野村幸夫・早川邦夫・水野衛, “有理連続体力学に基づく延伸高分子材料の異方弾性構成式の定式化”, 成形加工, Vol. 18, No. 4 (2006), pp. 300–305.
- (12) 富田佳宏・進藤明夫・朝田誠治, “ひずみ速度依存性平面ひずみブロックの変形挙動 (第2報, 変形の局所化に及ぼす熱発生の影響)”, 日本機械学会論文集, Vol. 55, No. 514, A (1989), pp. 1382–1388.
- (13) 富田佳宏, 数値弾塑性力学 —有限要素シミュレーション 基礎と応用—, (1990), 養賢堂.
- (14) Tomita, Y., Shindo, A. and Sasayama, T., “Plane Strain Tension of Thermo-Elasto-Viscoplastic Blocks”, *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 32, No. 7 (1990), pp. 613–622.
- (15) Tomita, Y. and Hayashi, K., “Thermo-Elasto-Viscoplastic Deformation of Polymeric Bars Under Tension”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 30, No. 2 (1993), pp. 225–235.
- (16) 田中繁之・富田佳宏・安達泰治, “ポリマーの熱弾粘塑性変形挙動のシミュレーション”, 日本機械学会論文集, Vol. 64, No. 623, A (1998), pp. 1916–1922.
- (17) Tomita, Y., “Constitutive Modelling of Deformation Behavior of Glassy Polymers and Applications”, *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 42, No. 8 (2000), pp. 1455–1469.
- (18) 深堀美英, 設計のための高分子の力学 —高分子鎖が織りなす力学の世界—, (2000), 技報堂出版.
- (19) (社)高分子学会 高分子 ABC 研究会, ポリマー ABC ハンドブック, (2001), エヌ・ティー・エス.
- (20) 富田佳宏・林健一・田中繁之, “不安定伝ば挙動を示すポリマー棒の構成式の同定”, 日本機械学会論文集, Vol. 58, No. 554, A (1992), pp. 1859–1863.
- (21) Hutchinson, J. W. and Neale, K. W., “Neck Propagation”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 31, No. 5 (1983), pp. 405–426.

- (22) Chater, E. and Hutchinson, J. W., "On the Propagation of Bulges and Buckles", *Transactions of the ASME, Journal of Applied Mechanics*, Vol. 51, No. 2 (1984), pp. 269–277.
- (23) Tuğcu, P. and Neale, K. W., "Analysis of Plane-Strain Neck Propagation in Viscoplastic Polymeric Films", *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 29, No. 12 (1987), pp. 793–805.
- (24) Tuğcu, P. and Neale, K. W., "Analysis of Neck Propagation in Polymeric Fibres Including the Effects of Viscoplasticity", *Transactions of the ASME, Journal of Engineering Materials and Technology*, Vol. 110, No. 4 (1988), pp. 395–400.
- (25) 村上大介・小林誠一・鳥垣俊和・志澤一之, "ポリマの粘塑性大変形挙動に関する熱・力学的モデリングとシミュレーション (第1報, ひずみ速度依存性に由来する構成式の非共軸性)", 日本機械学会論文集, Vol. 68, No. 668, A (2002), pp. 674–681.
- (26) 村上大介・小林誠一・鳥垣俊和・志澤一之, "ポリマの粘塑性大変形挙動に関する熱・力学的モデリングとシミュレーション (第2報, 流れ則に基づく尖り点モデルとそのFEM解析)", 日本機械学会論文集, Vol. 68, No. 668, A (2002), pp. 682–689.
- (27) 村上大介, "せん断帯の伝ばを伴うポリマの粘塑性大変形挙動に対する熱力学的モデリングとFEMシミュレーション", 博士論文, 慶應義塾大学大学院, (2002).
- (28) Tuğcu, P. and Neale, K. W., "Cold Drawing of Polymers with Rate and Temperature Dependent Properties", *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 32, No. 5 (1990), pp. 405–416.
- (29) Tomita, Y. and Hayashi, K., "Deformation Behavior in Elasto-Viscoplastic Polymeric Bars Under Tension", *Proceedings of PLASTICITY '91*, (1991), pp. 524–527.
- (30) 石川優・杉本昌隆・畑田浩一・田仲直, "タクチシチーがポリプロピレンのタフネスに及ぼす効果", 高分子論文集, Vol. 52, No. 3 (1995), pp. 134–140.
- (31) 小林誠一・富井大介・志澤一之, "クレイズの進展・消滅を考慮したポリマの破断予測モデルおよび大変形シミュレーション", 日本機械学会論文集, Vol. 70, No. 694, A (2004), pp. 810–817.
- (32) Kuhn, W. and Grün, F., "Beziehungen Zwischen Elastischen Konstanten und Dehnungsdoppelbrechung Hochelastischer Stoffe", *Kolloid-Zeitschrift*, Vol. 101, No. 3 (1942), pp. 248–271.
- (33) James, H. M. and Guth, E., "Theory of the Elastic Properties of Rubber", *Journal of Chemical Physics*, Vol. 11, No. 10 (1943), pp. 455–481.
- (34) Boyce, M. C., Parks, D. M. and Argon, A. S., "Large Inelastic Deformation of Glassy Polymers. Part I: Rate Dependent Constitutive Model", *Mechanics of Materials*, Vol. 7, No. 1 (1988), pp. 15–33.
- (35) Arruda, E. M. and Boyce, M. C., "A Three-Dimensional Constitutive Model for the Large Stretch Behavior of Rubber Elastic Materials", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 41, No. 2 (1993), pp. 389–412.
- (36) Wu, P. D. and Van der Giessen, E., "On Improved Network Models for Rubber Elasticity and Their Applications to Orientation Hardening in Glassy Polymers", *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 41, No. 3 (1993), pp. 427–456.
- (37) Tomita, Y. and Adachi, T., "Network Models for Glassy Polymer and Prediction of Instability Propagation", *Materials Science Research International*, Vol. 3, No. 3 (1997), pp. 125–136.
- (38) Tomita, Y., Adachi, T. and Tanaka, S., "Computational Prediction of Instability Propagation in Glassy Polymers", *Archives of Computational Methods in Engineering*, Vol. 5, No. 2 (1998), pp. 167–198.
- (39) Tomita, Y. and Tanaka, S., "Prediction of Deformation Behavior of Glassy Polymers Based on Molecular Chain Network Model", *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 32, No. 23 (1995), pp. 3423–3434.

- (40) Tomita, Y., Adachi, T. and Tanaka, S., “Modelling and Application of Constitutive Equation for Glassy Polymer Based on Nonaffine Network Theory”, *European Journal of Mechanics, Series A: Solids*, Vol. 16, No. 5 (1997), pp. 745–755.
- (41) 富田佳宏, “ガラス状ポリマーの分子鎖網目理論による構成式と変形挙動のシミュレーション”, *塑性と加工*, Vol. 37, No. 424 (1996), pp. 485–491.
- (42) 富田佳宏, “非晶性ポリマーの分子鎖網目理論による構成式とその応用”, *日本機械学会論文集*, Vol. 66, No. 643, A (2000), pp. 420–427.
- (43) 田中繁之・富田佳宏・陸偉, “円柱状介在物を含む非晶性高分子材料の引張変形挙動のシミュレーション”, *日本機械学会論文集*, Vol. 66, No. 643, A (2000), pp. 454–463.
- (44) Tomita, Y. and Uchida, M., “Characterization of Micro- to Macroscopic Deformation Behavior of Amorphous Polymer with Heterogeneous Distribution of Microstructures”, *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 45, No. 10 (2003), pp. 1703–1716.
- (45) 内田真・富田佳宏, “非晶性高分子材料の微視組織の不均一性が変形挙動に及ぼす影響”, *日本機械学会論文集*, Vol. 70, No. 698, A (2004), pp. 1484–1490.
- (46) 古谷泰大・内藤正登・陸偉・富田佳宏, “カーボンブラック充填ゴムの繰り返し変形挙動の評価”, *日本機械学会論文集*, Vol. 71, No. 708, A (2005), pp. 1109–1115.
- (47) Tomita, Y. and Uchida, M., “Computational Characterization of Micro- to Mesoscopic Deformation Behavior of Semicrystalline Polymers”, *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 47, No. 4/5 (2005), pp. 687–700.
- (48) 内田真・富田佳宏, “異なる応力状態下における結晶性高分子材料メゾ領域の変形挙動”, *日本機械学会論文集*, Vol. 71, No. 707, A (2005), pp. 996–1002.
- (49) 内田真・富田佳宏, “部分結晶性高分子材料の球晶のマイクロからメゾスケールにおける変形挙動のモデル化と評価”, *日本機械学会論文集*, Vol. 72, No. 717, A (2006), pp. 608–615.
- (50) 内田真, “非晶性および結晶性高分子材料の構造のマルチスケールモデルの構築と変形挙動の評価”, 博士論文, 神戸大学大学院, (2005).
- (51) Tomita, Y., Tanaka, S. and Lu, W., “Constitutive Equation of Amorphous Polymer and Its Application to Prediction of Instability Propagation Behavior”, *Progress in Mechanical Behaviour of Materials (ICM8), Vol.3 - Advance Materials and Modelling of Mechanical Behaviour*, (1999), pp. 1061–1066.
- (52) 成沢郁夫, *高分子材料強度学*, (1982), オーム社.
- (53) Bowden, P. B. and Raha, S., “Molecular Model for Yield and Flow in Amorphous Glassy Polymers Making Use of a Dislocation Analogue”, *Philosophical Magazine*, Vol. 29, No. 1 (1974), pp. 149–166.
- (54) Robertson, R. E., “Theory for the Plasticity of Glassy Polymers”, *Journal of Chemical Physics*, Vol. 44, No. 10 (1966), pp. 3950–3956.
- (55) Argon, A. S., “A Theory for the Low-Temperature Plastic Deformation of Glassy Polymers”, *Philosophical Magazine*, Vol. 28, No. 4 (1973), pp. 839–865.
- (56) Williams, M. L., Landel, R. F. and Ferry, J. D., “The Temperature Dependence of Relaxation Mechanisms in Amorphous Polymers and Other Glass-Forming Liquids”, *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 77, No. 14 (1955), pp. 3701–3707.
- (57) Spathis, G. and Maggana, C., “A Non-Linear Viscoelastic Model for Predicting the Yield Stress of Amorphous Polymers”, *Polymer*, Vol. 38, No. 10 (1997), pp. 2371–2377.
- (58) Doolittle, A. K., “Studies in Newtonian Flow. II. The Dependence of the Viscosity of Liquids on Free-Space”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 22, No. 12 (1951), pp. 1471–1475.

- (59) Doolittle, A. K., “Studies in Newtonian Flow. IV. Viscosity vs Molecular Weight in Liquids; Viscosity vs Concentration in Polymer Solutions”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 23, No. 4 (1952), pp. 418–426.
- (60) Knauss, W. G. and Emri, I. J., “Non-Linear Viscoelasticity Based on Free Volume Consideration”, *Computers and Structures*, Vol. 13, No. 1-3 (1981), pp. 123–128.
- (61) Rendell, R. W., Ngai, K. L., Fong, G. R., Yee, A. F. and Bankert, R. J., “Nonlinear Viscoelasticity and Yield: Application of a Coupling Model”, *Polymer Engineering and Science*, Vol. 27, No. 1 (1987), pp. 2–15.
- (62) Hasan, O. A., Boyce, M. C., Li, X. S. and Berko, S., “An Investigation of the Yield and Postyield Behavior and Corresponding Structure of Poly(Methyl Methacrylate)”, *Journal of Polymer Science, Part B: Polymer Physics*, Vol. 31, No. 2 (1993), pp. 185–197.
- (63) (社) 日本アイソトープ協会, 陽電子計測の科学, (1993), 丸善.
- (64) Hasan, O. A. and Boyce, M. C., “A Constitutive Model for the Nonlinear Viscoelastic Viscoplastic Behavior of Glassy Polymers”, *Polymer Engineering and Science*, Vol. 35, No. 4 (1995), pp. 331–344.
- (65) Glasstone, S., Laidler, K. J. and Eyring, H., *The Theory of Rate Processes —The Kinetics of Chemical Reactions, Viscosity, Diffusion and Electrochemical Phenomena—*, (1941), McGraw-Hill.
- (66) 高松敦・志澤一之, “非晶性ポリマに対する分子鎖すべり理論の提案と大変形塑性現象への応用”, 理論応用力学講演会講演論文集, Vol. 52, (2003), pp. 227–228.
- (67) Peirce, D., Asaro, R. J. and Needleman, A., “Material Rate Dependence and Localized Deformation in Crystalline Solids”, *Acta Metallurgica*, Vol. 31, No. 12 (1983), pp. 1951–1976.
- (68) Asaro, R. J. and Needleman, A., “Texture Development and Strain Hardening in Rate Dependent Polycrystals”, *Acta Metallurgica*, Vol. 33, No. 6 (1985), pp. 923–953.
- (69) Forest, S., Cailletaud, G. and Sievert, R., “A Cosserat Theory for Elastoviscoplastic Single Crystals at Finite Deformation”, *Archives of Mechanics*, Vol. 49, No. 4 (1997), pp. 705–736.
- (70) Maugin, G. A., *The Thermomechanics of Plasticity and Fracture*, (1992), pp. 68–69, Cambridge University Press.
- (71) Green, A. E. and Zerna, W., *Theoretical Elasticity, 2nd Edition*, (1968), p. 72, Oxford University Press.
- (72) Pan, J. and Rice, J. R., “Rate Sensitivity of Plastic Flow and Implications for Yield-Surface Vertices”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 19, No. 11 (1983), pp. 973–987.
- (73) Shizawa, K. and Zbib, H. M., “A Thermodynamical Theory of Gradient Elastoplasticity with Dislocation Density Tensor. I: Fundamentals”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 15, No. 9 (1999), pp. 899–938.
- (74) Lee, E. H. and McMeeking, R. M., “Concerning Elastic and Plastic Components of Deformation”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 16, No. 8 (1980), pp. 715–721.
- (75) Kratochvil, J., “Finite-Strain Theory of Crystalline Elastic-Inelastic Materials”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 42, No. 3 (1971), pp. 1104–1108.
- (76) Mandel, J., *CISM Course No. 97*, (1971), Springer-Verlag.
- (77) 久田俊明, 非線形有限要素法のためのテンソル解析の基礎, (1992), 丸善.
- (78) 黒田充紀・志澤一之, “結晶塑性の理論と応用—結晶の大変形から転位蓄積まで—”, 塑性と加工, Vol. 43, No. 495 (2002), pp. 299–309.
- (79) Eringen, A. C., *Continuum Physics 2*, (1975), Academic Press.
- (80) Chakrabarti, S. K. and Wainwright, W. L., “On the Formulation of Constitutive Equations”, *International Journal of Engineering Science*, Vol. 7, No. 6 (1969), pp. 601–613.
- (81) 久田俊明・野口裕久, 非線形有限要素法の基礎と応用, (1995), 丸善.
- (82) Taylor, G. I., “Plastic Strain in Metals”, *Journal of the Institute of Metals*, Vol. 62, (1938), pp. 307–324.

- (83) 高橋寛, 多結晶塑性論, (1999), コロナ社.
- (84) Peirce, D., Shih, C. F. and Needleman, A., “A Tangent Modulus Method for Rate Dependent Solids”, *Computers and Structures*, Vol. 18, No. 5 (1984), pp. 875–887.
- (85) (社) 日本塑性加工学会, 非線形有限要素法 —線形弾性解析から塑性加工解析まで—, (1994), コロナ社.
- (86) 後藤學, 実践有限要素法 —大変形弾塑性解析—, (1995), コロナ社.
- (87) Tvergaard, V., Needleman, A. and Lo, K. K., “Flow Localization in the Plane Strain Tensile Test”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 29, No. 2 (1981), pp. 115–142.
- (88) Eisele, U., *Introduction to Polymer Physics*, (1990), p. 104, Springer-Verlag.
- (89) (社) 日本機械学会, 新版 機械工学便覧 A. 基礎編 B. 応用編, (1987), 丸善.
- (90) 小松公栄, 熱可塑性エラストマー —基礎・応用・市場・将来展望—, (1995), 日刊工業新聞社.
- (91) Peirce, D., Asaro, R. J. and Needleman, A., “An Analysis of Nonuniform and Localized Deformation in Ductile Single Crystals”, *Acta Metallurgica*, Vol. 30, No. 6 (1982), pp. 1087–1119.
- (92) Kocks, U. F., Argon, A. S. and Ashby, M. F., “Thermodynamics and Kinetics of Slip”, *Progress in Materials Science*, Vol. 19, (1975), pp. 1–288.
- (93) 吉田総仁, 弾塑性力学の基礎, (1997), 共立出版.
- (94) Kuroda, M., “Crystal Plasticity Model Accounting for Pressure Dependence of Yielding and Plastic Volume Expansion”, *Scripta Materialia*, Vol. 48, No. 5 (2003), pp. 605–610.
- (95) Haward, R. N. and Thackray, G., “The Use of a Mathematical Model to Describe Isothermal Stress-Strain Curves in Glassy Thermoplastics”, *Proceedings of the Royal Society of London, Series A: Mathematical and Physical Sciences*, Vol. 302, No. 1471 (1968), pp. 453–472.
- (96) 齋藤正彦, 線型代数入門, (1996), 東京大学出版会.
- (97) Raha, S. and Bowden, P. B., “Birefringence of Plastically Deformed Poly(Methyl Methacrylate)”, *Polymer*, Vol. 13, No. 4 (1972), pp. 174–183.
- (98) Botto, P. A., Duckett, R. A. and Ward, I. M., “The Yield and Thermoelastic Properties of Oriented Poly(Methyl Methacrylate)”, *Polymer*, Vol. 28, No. 2 (1987), pp. 257–262.

定期刊行誌掲載論文および口頭発表論文

定期刊行誌掲載論文 (主論文に関連する原著論文)

- (1) Nada, H., Abe, S. and Shizawa, K., “Multiscale Modeling for Large Deformation of Glassy Polymer Based on Molecular Chain Slip Model and Probabilistic Response Law of Inelasticity”, *Key Engineering Materials*, Vols. 340-341, (2007), pp. 1109-1114.
- (2) 灘 裕統・志澤一之, “自由体積変化に基づく確率論的非弾性応答則を用いた非晶性ポリマの結晶塑性論的分子鎖塑性モデル”, 日本機械学会論文集, Vol. 74, No. 737, A (2008), pp. 97-104.
- (3) 灘 裕統・志澤一之, “自由体積変化を考慮した結晶塑性論的分子鎖塑性モデルに基づく非晶性ポリマの大変形シミュレーション”, 日本機械学会論文集, Vol. 74, No. 737, A (2008), pp. 105-114.

国際会議発表

- (1) Nada, H.*, Abe, S. and Shizawa, K., “Multiscale Modeling for Large Deformation of Glassy Polymer Based on Molecular Chain Slip Model and Probabilistic Response Law of Inelasticity”, *Final Program and Abstracts the 8th Asia-Pacific Symposium on Engineering Plasticity and Its Applications, (AEPA2006)*, (2006-09), p. 271.
- (2) Nada, H.* and Shizawa, K., “Large Deformation Analysis of Glassy Polymers Based on Molecular Chain Slip Theory Using Extended Taylor Model and Probabilistic Response Law of Inelasticity”, *Proceedings of the 13th International Symposium on Plasticity and Its Current Applications, (Plasticity2007)*, (2007-06), pp. 319-321.

国内学会発表

- (1) 阿部真之*・灘 裕統・志澤一之, “分子鎖すべりモデルを用いた非晶性ポリマの大変形シミュレーション”, 日本機械学会第 18 回計算力学講演会講演論文集, No.05-2, (2005-11), pp. 679-680.
- (2) 灘 裕統*・阿部真之・志澤一之, “自由体積増加に基づく確率論的非弾性応答則を用いた非晶性ポリマの大変形シミュレーション”, 成形加工シンポジウム'05, (2005-11), pp. 187-188.
- (3) 灘 裕統*・阿部真之・志澤一之, “分子鎖すべりモデルおよび確率論的非弾性応答則による非晶性ポリマのマルチスケール大変形シミュレーション”, 日本材料学会第 55 期学術講演会講演論文集, (2006-05), pp. 407-408.
- (4) 灘 裕統*・志澤一之, “分子鎖すべりモデルと自由体積変化に基づく非弾性応答則を用いた非晶性ポリマの大変形 FEM 解析”, 日本レオロジー学会第 54 回レオロジー討論会講演予旨集, (2006-10), pp. 322-323.
- (5) 小倉正寛*・灘 裕統・只野裕一・志澤一之, “分子鎖すべり理論の多結晶モデルへの拡張および非晶性

- ポリマの大変形 FEM 解析”, 日本機械学会第 19 回計算力学講演会講演論文集, No.06-9, (2006-11), pp. 399-400.
- (6) 灘 裕統*・小倉正寛・只野裕一・志澤一之, “多結晶モデルへ拡張した分子鎖すべり理論および確率論的非弾性応答則による非晶性ポリマの大変形 FEM 解析”, 第 56 回理論応用力学講演会講演論文集, (2007-03), pp. 469-470.
- (7) 灘 裕統*・志澤一之, “分子鎖すべり理論に対する拡張 Taylor モデルの適用および分子鎖すべり系の独立回転と背応力に関する検討”, 日本材料学会第 56 期学術講演会講演論文集, (2007-05), pp. 241-242.
- (8) 石川 毅*・小倉正寛・灘 裕統・只野裕一・志澤一之, “分子鎖配向による弾性異方性を考慮した非晶性ポリマの結晶塑性論的大変形 FEM 解析”, 日本機械学会第 20 回計算力学講演会講演論文集, No.07-36, (2007-11), pp. 217-218.

補足 A

第 1 章の補足

A.1 成形性

ポリマの利点の 1 つは量産成形に適していることであり，微小精密部品からバスタブなどの大形製品まで広範囲な寸法に対して量産成形が可能である．熱硬化性ポリマの成形に主に用いられる圧縮成形法，瞬間的に成形できる射出成形法，押出し成形法など 10 種以上の成形方法がある⁽⁸⁹⁾．

A.2 透明性

ポリマの中には優れた光学特性をもつものがあり，容易に成形でき，さまざまな形状に加工することができるため，ガラスなどの透明材料に替わって用いられる．例えば，乗用車のヘッドライト，信号灯のカバー，光ファイバ，光ディスク，ディスプレイなどの用途に応用されている．ガラスのような脆性材料では容易に壊れるような高い衝撃が加わる用途に対しても，ポリマは優れている．

しかしながら，精密さを要する光学分野に対しては寸法安定性を維持するという困難な課題に直面するため，ポリマの実用化は適切でない．さらに，ガラスに比べると透明性や耐擦傷性に劣る点があり，未だ乗用車の窓ガラスなどへの実用化は実現されていない⁽⁴⁾．

A.3 電気絶縁性

電気絶縁性は，ポリマの長所として電気製品やプリント基板に利用されている．ポリマの分子結合は共有結合であるため，金属結合のように電子が自由に移動せず電気を伝えにくいためである．

このような性質を利用する一方で，導電性フィラーを混合充填するなどの手法によりポリマに導電性を付与した導電性ポリマも工学的に重要である．導電性ポリマは，静電気・電磁波防止シート，太陽電池，タッチパネルなどに利用されている⁽¹⁹⁾．

A.4 吸音性

熱可塑性ポリマ，特にエラストマは高い吸音性をもつため，防音材に用いられる．材料によっては音の吸収は熱に変換される．エラストマのシートを金属板の片面または両面に粘着させることで，金属板の共振曲げ振動を防ぎ，乗用車などで応用されている⁽⁴⁾．

A.5 エンジニアリングプラスチック

エンジニアリングプラスチック (エンブラ) とは、一般に 100°C 以上でも強度を失わないプラスチックの総称であり、電子部品、乗用車などの軽量化・エレクトロニクス化、光ファイバなどの最先端技術を担った新素材の 1 つである。また、150°C 以上でも強度を失わないものはスーパーエンブラと呼ばれる。多くのエンブラは、熱可塑性ポリマである⁽²⁾。

A.6 結晶性ポリマと非晶性ポリマ

結晶性ポリマはガラス転移温度と融点を有している (ガラス転移温度 < 融点) が、非晶性ポリマはガラス転移温度のみを有しており、結晶性・非晶性ポリマともガラス転移温度を越えると非晶質部分の分子鎖の運動が活発になり剛性が低下する。結晶性ポリマにおいては、ガラス転移温度～融点では結晶質部分が存在するので温度上昇による剛性低下は非晶性ポリマよりは小さいが、融点を越えると結晶が消失し、剛性が大きく低下する。その際、結晶構造の崩壊とともに、大きな体積増加 (結晶融解膨張) を伴う。なお、結晶性ポリマのガラス転移温度は室温以下、非晶性ポリマでは室温以上であることが多い。

また、一般に結晶性ポリマは硬く、剛性があり、非晶性ポリマは耐衝撃性に優れ、透明性を有している⁽²⁾。

A.7 ポリマアロイ

相容性または混和性ポリマブレンド、相溶性ポリマブレンド、多相系共重合体のどれかからなる、巨視的に見て均一なポリマのことをポリマアロイという。複数のポリマを混ぜ合わせてよりよい特性をもつ材料を作るために、金属材料における合金とよく似た手法をポリマに適用したものである。ここで、相溶性とは、混合系が単一相を形成する能力であり、相容性または混和性とは、非相溶性ポリマブレンドまたはポリマコンポジットにおいて、各成分物質が界面結合をする能力があることをいう⁽¹⁹⁾。このように、相溶性と相容性 (混和性) には異なる意味があり、これらを混同しないよう注意が必要である。

A.8 ポリマブレンド

2 種類またはそれ以上の異種のポリマの巨視的に見て均一な混合系をポリマブレンドという。この名称については、以下のような注意点がある⁽¹⁹⁾。

- (1) ほとんどの場合、ブレンドは可視光の波長の数倍以上のスケールで均一である。
- (2) 原則として、ブレンドの各成分は物理的な方法により分離可能である。
- (3) 構成成分のポリマ同士の相溶性または非相溶性については考慮しない。すなわち、ブレンド中に存在する相ドメイン数については問題としない。
- (4) ポリマブレンドに対してポリマアロイと呼ぶことは好ましくない。ポリマアロイには多相系共重合体が含まれるが、非相容性または非混和性ポリマブレンドは含まれないからである。
- (5) ブレンドを構成するポリマ成分の数は、2 元系、3 元系、4 元系ポリマブレンドなどとして表現する。

A.9 ポリマコンポジット

複合材料のうち、少なくとも1成分はポリマであるものをポリマコンポジットという。ただし、発泡材料は気体との複合材料には違いないが、通常複合材料とは呼ばない⁽¹⁹⁾。

A.10 熱可塑性エラストマ

新しいタイプのエラストマとしては、加硫不要の熱可塑性エラストマ (TPE) がある。TPE は、樹脂成分 (硬質ブロック) とゴム成分 (軟質ブロック) からなり、室温においては樹脂成分が架橋点としての作用をし、ゴム成分の塑性変形が阻止されているため、TPE は加硫ゴムと同様の挙動をとる。しかし、温度が上昇して樹脂成分が軟らかくなると架橋点としての働きを失い、ゴム成分の塑性変形が可能となり、任意の形に成形できるようになる。また、TPE は弾性率や硬度などの物性において、プラスチックと加硫ゴムの中間領域をカバーできること、共有結合による架橋構造をもたないので、成形品の再利用が可能となることといった利点をもつ。TPE の例としては、スチレン-ブタジエン-スチレン (SBS) ブロック共重合体、スチレン-イソプレン-スチレン (SIS) ブロック共重合体などが挙げられ、フィルム、アスファルト改良剤、粘着剤、接着剤などとして重要な地位を占めている⁽⁹⁰⁾。

A.11 再結晶温度

加工硬化した金属あるいは合金をある温度以上に加熱すると軟化し加工前の状態に戻る。これは、加熱により、変形した結晶粒の内部あるいは粒界に新しい結晶の核が生じ、時間とともに成長して新しい結晶粒が形成されることによる。このような現象を再結晶といい、再結晶の開始する温度を再結晶温度という。一般に金属材料について熱間あるいは冷間とは、その材料の再結晶温度を基準として、それより上あるいは下の温度領域をいう⁽⁸⁹⁾。軟鋼の再結晶温度は、約 500°C である⁽⁹⁾。

A.12 リューダース帯

軟鋼の単軸引張試験における応力-ひずみ曲線では鋭い上降伏点からの急激な降伏点降下が見られ、その後には応力一定でひずみが進行 (リューダースひずみと呼ばれる) する段階が見られる。この段階においては、既に降伏した部分 (弾塑性変形領域) と未降伏部分 (弾性変形領域) とが混在した不均一変形を示す。降伏領域と未降伏領域の境界は、薄板材の場合一般に引張軸方向に対し特定の方向をなす面であり、リューダース帯あるいはひずみ模様と呼ばれる。これは、試験片表面の仕上げがよければ光の加減で見えることがあり、化学的に腐食すればはっきり可視できる。リューダース帯の前後では変形が不連続なので、触覚でもわかることがある⁽⁹⁾。

せん断帯と似ている点は、引張軸方向に対して特定の方向に帯が入る点であり、異なる点は、軟鋼のように上降伏点や下降伏点を明確に示す材料に特有のものであるという点や初期降伏時に現れるものでせん断帯のように破壊に直結しないという点である。

A.13 応力緩和とクリープ

弾性域におけるひずみ速度依存性を粘弾性といい、ポリマにおいては粘弾性が顕著に現れる。応力緩和とクリープは粘弾性体の典型的な現象である。応力緩和とは、試験片に一定変形を加えたときに応力が時間とともに

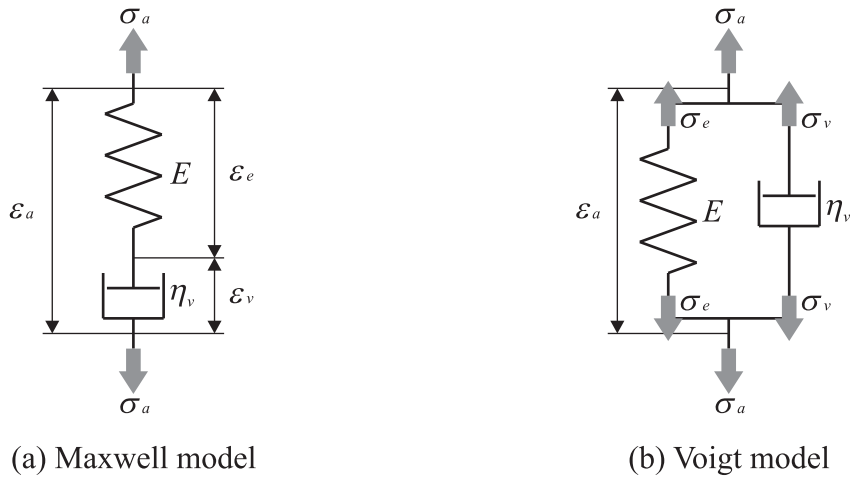


Fig. A.1 Linear viscoelastic models

に減少する挙動である．一方，クリープとは，試験片に一定荷重を加えたときひずみが時間とともに増加する挙動である．これらの挙動を表現するのに提案された代表的な力学モデルが，図 A.1(a) のようにばねとダッシュポットを直列につないだ Maxwell モデルと同図 (b) のように両者を並列につないだ Voigt モデルである．

ばねの縦弾性係数を E ，ダッシュポットの粘性係数を η_v とすると，ばね部分においては応力 σ_e とひずみ ε_e の間に次のような比例関係が成り立つ．

$$\sigma_e = E \varepsilon_e \dots \dots \dots (A.1)$$

一方，ダッシュポット部分においては応力 σ_v とひずみ速度 $\dot{\varepsilon}_v$ の間に比例関係が成り立ち，

$$\sigma_v = \eta_v \dot{\varepsilon}_v \dots \dots \dots (A.2)$$

となる．Maxwell モデルの場合，ばねとダッシュポットにかかる応力は等しく ($\sigma_a = \sigma_e = \sigma_v$)，全体のひずみ ε_a はばねとダッシュポットのひずみの和で与えられるので，次式が成り立つ．

$$\dot{\varepsilon}_a = \dot{\varepsilon}_e + \dot{\varepsilon}_v = \frac{\dot{\sigma}_a}{E} + \frac{\sigma_a}{\eta_v} \dots \dots \dots (A.3)$$

応力緩和試験では一定のひずみを与え (時刻 $t > 0$ で $\dot{\varepsilon}_a = 0$)，最初にばねが伸びるが，その後ダッシュポットが伸びるにつれ，ばねは逆に縮む．初期条件として $t = 0$ で $\sigma_a = \sigma_{a0}$ とおいて微分方程式 (A.3) を解けば

$$\sigma_a = \sigma_{a0} \exp\left(-\frac{t}{\tau_R}\right) \dots \dots \dots (A.4)$$

となる．ここで， $\tau_R \equiv \eta_v/E$ は緩和時間と呼ばれ， $t = \tau_R$ のとき応力は初期応力 σ_{a0} の $1/e$ 倍に低下する．この緩和時間の大小によってその物質の緩和挙動が推定できる．理想弾性体では $\tau_R = \infty$ ，純粘性体では $\tau_R = 0$ となる．

一方，Voigt モデルの場合，ばねとダッシュポットのひずみは等しく ($\varepsilon_a = \varepsilon_e = \varepsilon_v$)，全体の応力 σ_a はばねとダッシュポットの応力の和で与えられるので，次式が成り立つ．

$$\sigma_a = \sigma_e + \sigma_v = E \varepsilon_a + \eta_v \dot{\varepsilon}_a \dots \dots \dots (A.5)$$

クリープ試験では一定の応力を加え (時刻 $t > 0$ で $\dot{\sigma}_a = 0$)，最初にダッシュポットに大きな応力が負荷されるが，徐々にばねにかかる応力は増加，ダッシュポットにかかる応力は減少し，全ての応力がばねに負荷される

ようになったとき平衡ひずみに達する．初期条件として $t = 0$ で $\varepsilon_a = 0$ とおいて微分方程式 (A.5) を解けば

$$\varepsilon_a = \frac{\sigma_a}{E} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau^*}\right) \right\} \dots\dots\dots (A.6)$$

となる．ここで， $\tau^* \equiv \eta_v/E$ は遅延時間と呼ばれ，平衡ひずみ σ_a/E の $(1 - 1/e)$ 倍に達するまでの時間である．この遅延時間の大小によってその物質のクリープ特性 (粘弾性) が推定でき，遅延時間の長い物質ほどクリープはゆっくり生じる．なお，式 (A.6) で与えられるクリープひずみ ε_a を応力 σ_a で除して規格化した値 $\varepsilon_a/\sigma_a = \{1 - \exp(-t/\tau^*)\}/E$ をクリープコンプライアンスと呼ぶ⁽¹⁸⁾．

以上の両モデルでは，応力緩和挙動は Maxwell モデルでかなりよく近似できるが Voigt モデルでは全く近似できない．一方，クリープ挙動は Voigt モデルでかなりよく近似されるが Maxwell モデルでは難しい．このように，これらのモデルは非常に単純である一方，実際の材料挙動を必ずしも良好に表現できないことから，複数の Maxwell モデルを並列に結合する一般化 Maxwell モデルや，1 つの Maxwell モデルと複数の Voigt モデルを直列に結合する一般化 Voigt モデルが用いられることも多い．

A.14 結晶塑性論

金属における塑性現象の本質は，よく知られているように，外部負荷による転位の運動であり，それが結晶を通り抜けることですべりが生じ，さらにはすべりが集積して巨視的な塑性変形へとつながる．また，結晶中のさまざまな障害物によって転位運動が阻害されることで，材料の加工硬化が発生する．一方，現在汎用 FEM パッケージに搭載されている弾塑性解析コードは，有限変形塑性論に基づいて構築されているが，その理論体系には金属の微視組織に関する情報は一切入っていない．そこで，上述のような塑性現象の本質を捉え，材料科学で得られる微視的情報を固体力学に取り込む試みが近年盛んになされている．

材料の微視的情報を取り込むためには，何らかの内部変数を導入し，その構成式あるいは発展方程式を導出して支配方程式系に組み込むことになる．しかしながら，実現象をより精密に表現する方程式系を得るためには内部変数の数を増加させる必要が生じ，結局はそれに伴って構成式の数も増加することになる．その結果，構成式に表れる材料定数の数も増え，それを全て実験的に決定しなければならないという悪循環に陥る．

この問題を回避する 1 つの有力な論理体系として挙げられるのが結晶塑性論である．結晶塑性論は，古くは Taylor⁽⁸²⁾ により提案された塑性変形をメゾ領域すなわち単結晶の塑性特性を基礎として解析する手法であり，Peirce ら⁽⁹¹⁾ はすべり変形に基づいた結晶塑性有限要素法を提案し，金属結晶内の微細な変形機構を数値解析的に求める手法を開発している．結晶塑性論では，結晶のすべりを塑性変形の素過程として捉えるため，有限変形塑性論のような降伏条件も塑性構成式も不要となり，必要なものはすべり面上の分解せん断応力とすべりの関係を表すスカラー硬化則のみとなる．また，下部スケールの現象を表す塑性スピンについても構成式を用いることなく運動学的に導出することができる．したがって方程式系は簡潔なものとなり，決定すべき材料定数の数も少なくなるという利点がある．このような体系をもつ結晶塑性論は，すべりの根源である転位運動の情報をもたないものの，金属をマクロとミクロの間スケールで論じており，一步微視構造に踏み込んだ固体力学であるとみなすことができる．さらに近年，転位の情報を結晶塑性論の枠組みに取り込み，よりミクロな立場から結晶塑性論を本質論に近づけようとするマルチスケールモデリングの試みが世界的レベルで盛んに行われるようになってきている．

補足 B

第 2 章の補足

B.1 Eyring の反応速度論

ここでは、高分子材料の降伏過程に応用された Eyring らによる反応速度論 (遷移状態理論: Transition State Theory)⁽⁶⁵⁾ について詳しく説明する。

一般に、原子あるいは分子は平衡点周りで熱振動を行っている。図 B.1(a) に示すように、これらの原子あるいは分子が隣に位置する平衡点へ移動するためには熱エネルギーを獲得してポテンシャル障壁を越えなければならない。この獲得すべきエネルギーを活性化エネルギーといい、活性化エネルギーを獲得した状態を活性化された状態という。原子あるいは分子が熱振動の助けを借りて単位時間にポテンシャル障壁を乗り越える速さ (割合) V は次式で表される。

$$V = \omega_c \exp\left(-\frac{\Delta F}{k_B \theta}\right) \dots \dots \dots (B.1)$$

ここで、 ω_c は頻度係数であり、Planck 定数 h_p を用いて $\omega_c \equiv k_B \theta / h_p$ のように定義される。式 (B.1) は、反応速度が温度上昇に伴い指数関数的に増大することを経験的に見出した Arrhenius の名前を冠して、Arrhenius 形の関係式と呼ばれることもある。また、 ΔF は基底状態と活性化状態のエントロピー変化 (基底状態 > 活性化状態) も考慮した活性化エネルギーであり、活性化エンタルピー変化を ΔH 、活性化エントロピー変化を ΔS

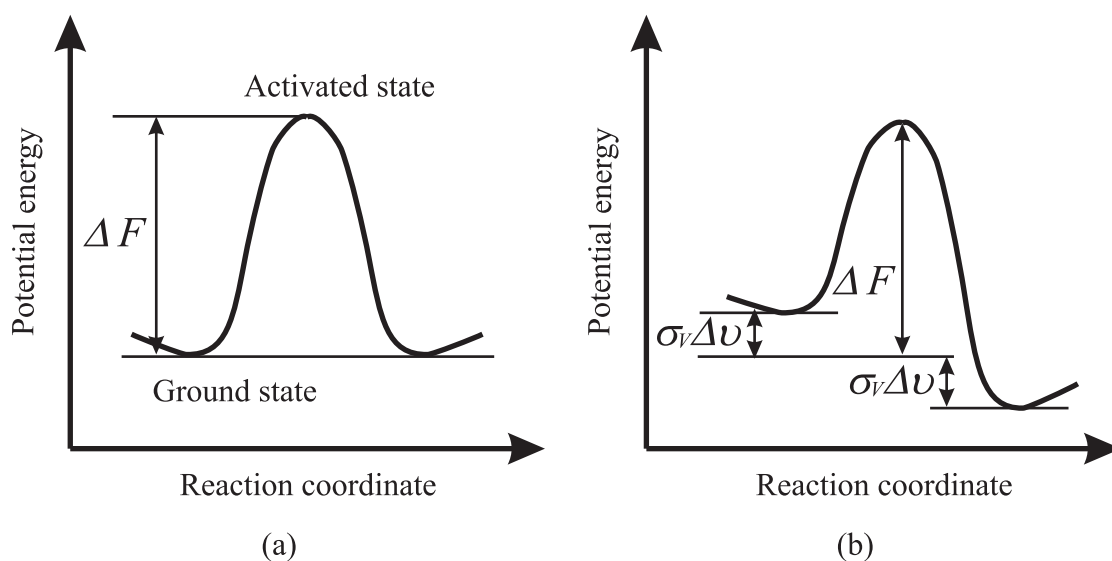


Fig. B.1 Change of the potential energy barrier due to applied stress

とすれば次式のような関係がある .

$$\Delta F = \Delta H - \theta \Delta S \dots\dots\dots (B.2)$$

原子あるいは分子が移動する前と後の基底状態が同じであれば、ポテンシャル障壁を乗り越える割合も同じであるから有効速度は零となり、原子あるいは分子の一方への移動は結果としては生じない . しかし、応力 σ_V が作用すると、ポテンシャル障壁は図 B.1(b) のように一方向に対してはポテンシャル障壁が高くなるため、原子あるいは分子の移動は低い方向へ生じるようになる . すなわち、正方向への速さ V_f は、

$$V_f = \varpi_c \exp\left(-\frac{\Delta F - \sigma_V \Delta v}{k_B \theta}\right) \dots\dots\dots (B.3)$$

となり、負方向の速さ V_b は

$$V_b = \varpi_c \exp\left(-\frac{\Delta F + \sigma_V \Delta v}{k_B \theta}\right) \dots\dots\dots (B.4)$$

となる . ここで、 Δv は活性化体積と呼ばれ、ある反応において反応系が原系から遷移状態へ移るときの体積変化を表す . 式 (B.3) および式 (B.4) より、有効速度 V は次式で表される .

$$\begin{aligned} V &= V_f - V_b \\ &= \varpi_c \left[\exp\left(-\frac{\Delta F - \sigma_V \Delta v}{k_B \theta}\right) - \exp\left(-\frac{\Delta F + \sigma_V \Delta v}{k_B \theta}\right) \right] \\ &= 2\varpi_c \exp\left(-\frac{\Delta F}{k_B \theta}\right) \sinh\left(\frac{\sigma_V \Delta v}{k_B \theta}\right) \dots\dots\dots (B.5) \end{aligned}$$

一般には、 $\sigma_V \Delta v \gg k_B \theta$ となることが多く、この場合式 (B.5) は次式のようになる .

$$V = \varpi_c \exp\left(-\frac{\Delta F - \sigma_V \Delta v}{k_B \theta}\right) \dots\dots\dots (B.6)$$

Kocks ら⁽⁹²⁾ は、非晶性ポリマの降伏現象を、分子鎖セグメントの不可逆的なすべりあるいは流動とみなすことにより、降伏応力のひずみ速度依存性ならびに温度依存性を速度論の立場から説明することを試みている . すなわち、式 (B.5) で表される Eyring の速度式を次のように書き換えている .

$$\dot{\gamma}^p = \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\frac{\Delta F_f}{k_B \theta}\right) \dots\dots\dots (B.7)$$

ここで、 $\dot{\gamma}^p$ は塑性せん断ひずみ速度、 $\dot{\gamma}_0$ は参照ひずみ速度、 ΔF_f は変形が生じるために必要となる活性化エネルギーであり、せん断応力 τ を用いて一般的に次式のように表される .

$$\Delta F_f = \Delta F_0 \left\{ 1 - \left(\frac{\tau}{\tau_r}\right)^X \right\}^Y \dots\dots\dots (B.8)$$

ここで、 ΔF_0 は無応力状態での活性化エネルギー、 τ_r は参照応力、 X および Y は材料依存の係数であり、例えば式 (2.1) で表される Argon 硬化則の場合、 $X = 5/6$ 、 $Y = 1$ となる . また、第 6 章で詳述される Hasan-Boyce の非弾性応答則は、負方向への反応速度まで考慮した式 (B.5) を基に議論されている .

B.2 塑性せん断ひずみ速度

一般に、 J_2 -流れ理論における塑性構成式は次のように表される .

$$\mathbf{D}^p = \frac{3}{2} \frac{\dot{\epsilon}^p}{\sigma} \mathbf{T}' \dots\dots\dots (B.9)$$

ここで、 D^p は塑性変形速度、 T' は偏差応力 ($T' \equiv T - (\text{tr}T/3)I$)、 $\dot{\varepsilon}^p$ および $\bar{\sigma}$ はそれぞれ相当塑性ひずみ速度および相当応力であり、次のように定義される⁽⁹³⁾。

$$\dot{\varepsilon}^p \equiv \sqrt{\frac{2}{3} D^p \cdot D^p} \dots\dots\dots (B.10)$$

$$\bar{\sigma} \equiv \sqrt{\frac{3}{2} T' \cdot T'} \dots\dots\dots (B.11)$$

相当塑性ひずみ速度 (あるいは相当応力) とは、多軸負荷状態の塑性ひずみ速度 (あるいは応力) を単軸負荷状態の塑性ひずみ速度 (あるいは応力) に相当させた量のことである。

一方、Boyce ら⁽³⁴⁾ および富田⁽⁴¹⁾ は、 J_2 -流れ理論における塑性構成式として次式を用いている。

$$D^p = \dot{\gamma}^p \frac{T'}{\sqrt{2}\tau} \dots\dots\dots (B.12)$$

$$\tau = \sqrt{\frac{T' \cdot T'}{2}} \dots\dots\dots (B.13)$$

富田⁽⁴¹⁾ は $\dot{\gamma}^p$ を「相当塑性せん断ひずみ速度」、 τ を「相当せん断応力」と呼んでいる。このうち τ については、多軸負荷状態の応力を純粋せん断状態の応力に相当させた量であるため、「相当せん断応力」と呼ぶことに問題はないと考えられるが、 $\dot{\gamma}^p$ を「相当塑性せん断ひずみ速度」と呼ぶことには問題がある。それは、以下のような理由による。

式 (B.11) を式 (B.9) に代入すると

$$D^p = \sqrt{\frac{3}{2}} \frac{\dot{\varepsilon}^p T'}{\sqrt{T' \cdot T'}} \dots\dots\dots (B.14)$$

となる。一方、式 (B.13) を式 (B.12) に代入すると

$$D^p = \dot{\gamma}^p \frac{T'}{\sqrt{T' \cdot T'}} \dots\dots\dots (B.15)$$

となる。式 (B.9) と式 (B.12) は等価なものであるため、式 (B.14) と式 (B.15) を比較すると、式 (B.10) から

$$\dot{\gamma}^p = \sqrt{\frac{3}{2}} \dot{\varepsilon}^p = \sqrt{D^p \cdot D^p} \dots\dots\dots (B.16)$$

という関係があることがわかる。すなわち、これはあくまでも「塑性変形速度の大きさ」にすぎず、純粋せん断状態における塑性せん断ひずみ速度にも、単純せん断状態における塑性せん断ひずみ速度にも相当していない。もし $\dot{\gamma}^p$ を「相当塑性せん断ひずみ速度」と呼ぶならば、純粋せん断状態における塑性せん断ひずみ速度 (理論せん断ひずみ速度) に相当する量としては

$$\dot{\gamma}^p \equiv \sqrt{\frac{D^p \cdot D^p}{2}} \dots\dots\dots (B.17)$$

単純せん断状態における塑性せん断ひずみ速度 (工学せん断ひずみ速度) に相当する量としては

$$\dot{\gamma}^p \equiv \sqrt{2(D^p \cdot D^p)} \dots\dots\dots (B.18)$$

と定義するのが妥当である。もしこれらの定義を行った場合は、塑性構成式 (B.12) はそれぞれ次のように変更を受ける。

$$D^p = \dot{\gamma}^p \frac{T'}{\tau} \dots\dots\dots (B.19)$$

$$D^p = \dot{\gamma}^p \frac{T'}{2\tau} \dots\dots\dots (B.20)$$

すなわち，式 (B.12) における (式 (B.16) で表される) $\dot{\gamma}^p$ を「相当塑性せん断ひずみ速度」と呼ぶことは好ましくないといえる。

また，結晶塑性論における「すべり」とは，工学せん断ひずみに相当する量 (式 (B.18) による定義) である。一方，Argon 硬化則 (2.3) および Hasan-Boyce の非弾性応答則 (6.3) から導出される非弾性せん断ひずみ速度は，非弾性変形速度の大きさ (式 (B.16) による定義) にあたるものである。式 (B.16) と式 (B.18) を比べれば，式 (B.18) は式 (B.16) の $\sqrt{2}$ 倍となっていることがわかる。そのため，Argon 硬化則 (2.3) および Hasan-Boyce の非弾性応答則 (6.3) を本結晶塑性論的分子鎖塑性モデルに適用する際，式 (2.3) または式 (6.3) から導出される非弾性せん断ひずみ速度を $\sqrt{2}$ 倍する必要がある。これに関しては参照ひずみ速度 (式 (2.3) における $\dot{\gamma}_0$ あるいは式 (6.3) における $\dot{\gamma}_r$) の値を $\sqrt{2}$ 倍することで対応可能であり，式 (7.23) および式 (7.24) で示した本解析で用いている $\dot{\gamma}_0$ および $\dot{\gamma}_r$ の値はすでに $\sqrt{2}$ 倍されたものである。

補足 C

第 3 章の補足

C.1 Mandel-Kratochvil 速度の導出

物理量 A に関する $A_{(m)} = R^{*T} A R^*$ の変換から，第 2 中間配置 $\beta_{(m)}$ における物理量 $A_{(m)}$ の共回転速度は次式のようになる．

$$\begin{aligned}
 \dot{A}_{(m)} &= (\dot{R}^{*T} A R^*) \\
 &= \dot{R}^{*T} A R^* + R^{*T} \dot{A} R^* + R^{*T} A \dot{R}^* \\
 &= R^{*T} R^* \dot{R}^{*T} A R^* + R^{*T} \dot{A} R^* + R^{*T} A \dot{R}^* R^{*T} R^* \\
 &= -R^{*T} \dot{R}^* R^{*T} A R^* + R^{*T} \dot{A} R^* + R^{*T} A \dot{R}^* R^{*T} R^* \\
 &= R^{*T} (\dot{A} - \dot{R}^* R^{*T} A + A \dot{R}^* R^{*T}) R^* \\
 &= R^{*T} (\dot{A} - W^* A + A W^*) R^* \\
 &= R^{*T} \overset{\nabla}{A} R^* \dots \dots \dots (C.1)
 \end{aligned}$$

ここで， $W^* \equiv \dot{R}^* R^{*T}$ であり，この導出は補足 C.2.4 で行う．式 (C.1) で表される A の共回転速度を Mandel-Kratochvil 速度と呼ぶ．

C.2 速度こう配の配置変換則

C.2.1 速度こう配の定義

まず，速度こう配の定義を示す．現配置における速度こう配 L は物質速度ベクトル v の現配置座標系 x におけるこう配であるから

$$\begin{aligned}
 L \equiv \text{grad } v &= \frac{\partial v}{\partial x} \\
 &= \frac{\partial v}{\partial x_{(l)}} \frac{\partial x_{(l)}}{\partial x} \\
 &= \left[\frac{\partial}{\partial x_{(l)}} \left(\frac{\partial x}{\partial t} \right) \right] \frac{\partial x_{(l)}}{\partial x} \\
 &= \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial x}{\partial x_{(l)}} \right) \right] \frac{\partial x_{(l)}}{\partial x} \\
 &= \dot{F} F^{-1} \dots \dots \dots (C.2)
 \end{aligned}$$

と定義される．ここで， $F \equiv \frac{\partial x}{\partial x_{(l)}}$ は変形こう配である．一方，初期配置における速度こう配 $L_{(l)}$ は，初期配置座標系 $x_{(l)}$ から観測した物質速度ベクトル $v_{(l)}$ の初期配置座標系 $x_{(l)}$ におけるこう配である．初期配置にお

る物質速度ベクトル $v_{(I)}$ は $dv_{(I)} = \frac{\partial \mathbf{x}_{(I)}}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{x}_{(I)}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \mathbf{F}^{-1} dv$ のように現配置から写像されるものと考えれば

$$\begin{aligned} L_{(I)} \equiv \text{Grad } v_{(I)} &= \frac{\partial v_{(I)}}{\partial \mathbf{x}_{(I)}} \\ &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{(I)}} \left(\frac{\partial \mathbf{x}_{(I)}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \right) \\ &= \frac{\partial \mathbf{x}_{(I)}}{\partial \mathbf{x}} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{(I)}} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \right) \right] \\ &= \frac{\partial \mathbf{x}_{(I)}}{\partial \mathbf{x}} \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}_{(I)}} \right) \right] \\ &= \mathbf{F}^{-1} \dot{\mathbf{F}} \dots \dots \dots \quad (\text{C.3}) \end{aligned}$$

のように初期配置における速度こう配 $L_{(I)}$ を定義できる．式 (C.2) と式 (C.3) の関係から，速度こう配の初期配置と現配置の間の変換則は次のように得られる．

$$\mathbf{L} = \mathbf{F} L_{(I)} \mathbf{F}^{-1} \quad , \quad L_{(I)} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{L} \mathbf{F} \dots \dots \dots \quad (\text{C.4})$$

C.2.2 中間配置における速度こう配

式 (C.4) に式 (3.1) を代入すれば

$$\mathbf{L} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^i L_{(I)} \mathbf{F}^{i-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots \quad (\text{C.5})$$

が得られる⁽⁷³⁾．したがって，第 1 中間配置 $\beta_{(M)}$ および第 2 中間配置 $\beta_{(m)}$ における速度こう配はそれぞれ次のようになる．

$$L_{(M)} = \mathbf{F}^i L_{(I)} \mathbf{F}^{i-1} \quad , \quad L_{(m)} = \hat{\mathbf{U}}^e L_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \dots \dots \dots \quad (\text{C.6})$$

式 (C.3) を式 (C.6) に代入すれば

$$L_{(M)} = \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{i-1} \dots \dots \dots \quad (\text{C.7})$$

$$L_{(m)} = \mathbf{R}^{*T} \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{i-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \dots \dots \dots \quad (\text{C.8})$$

という関係が得られる．

C.2.3 各配置における速度こう配の弾・非弾性分解

次に，各配置における速度こう配を弾・剛体回転部分，弾性ストレッチ部分および非弾性部分に分解する．まず，初期配置における速度こう配 $L_{(I)}$ の定義式 (C.3) に $\dot{\mathbf{F}} = (\mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^i) \dot{=} \dot{\mathbf{R}}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^i + \mathbf{R}^* \dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \mathbf{F}^i + \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^i$ を代入すれば

$$\begin{aligned} L_{(I)} &= \mathbf{F}^{-1} \dot{\mathbf{F}} \\ &= (\mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^i)^{-1} (\dot{\mathbf{R}}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^i + \mathbf{R}^* \dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \mathbf{F}^i + \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^i) \\ &= \mathbf{F}^{i-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dot{\mathbf{R}}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^i + \mathbf{F}^{i-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \dot{\hat{\mathbf{U}}}^e \mathbf{F}^i + \mathbf{F}^{i-1} \hat{\mathbf{F}}^i \dots \dots \dots \quad (\text{C.9}) \end{aligned}$$

となる．上式 (C.9) から，初期配置における速度こう配の弾・剛体回転部分 $L_{(I)}^*$ ，弾性ストレッチ部分 $L_{(I)}^e$ および非弾性部分 $L_{(I)}^i$ を次のように定義する．

$$L_{(I)}^* \equiv F^{i-1} \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dot{R}^* \hat{U}^e F^i \dots\dots\dots (C.10)$$

$$L_{(I)}^e \equiv F^{i-1} \hat{U}^{e-1} \dot{\hat{U}}^e F^i \dots\dots\dots (C.11)$$

$$L_{(I)}^i \equiv F^{i-1} \dot{F}^i \dots\dots\dots (C.12)$$

同様に，第 1 中間配置における速度こう配 $L_{(M)}$ は式 (C.7) から

$$\begin{aligned} L_{(M)} &= \hat{U}^{e-1} R^{*T} (\dot{R}^* \hat{U}^e F^i + R^* \dot{\hat{U}}^e F^i + R^* \hat{U}^e \dot{F}^i) F^{i-1} \\ &= \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dot{R}^* \hat{U}^e + \hat{U}^{e-1} \dot{\hat{U}}^e + \dot{F}^i F^{i-1} \dots\dots\dots (C.13) \end{aligned}$$

$$L_{(M)}^* \equiv \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dot{R}^* \hat{U}^e \dots\dots\dots (C.14)$$

$$L_{(M)}^e \equiv \hat{U}^{e-1} \dot{\hat{U}}^e \dots\dots\dots (C.15)$$

$$L_{(M)}^i \equiv \dot{F}^i F^{i-1} \dots\dots\dots (C.16)$$

となり，第 2 中間配置における速度こう配 $L_{(m)}$ は式 (C.8) から

$$\begin{aligned} L_{(m)} &= R^{*T} (\dot{R}^* \hat{U}^e F^i + R^* \dot{\hat{U}}^e F^i + R^* \hat{U}^e \dot{F}^i) F^{i-1} \hat{U}^{e-1} \\ &= R^{*T} \dot{R}^* + \hat{U}^e \hat{U}^{e-1} + \hat{U}^e \dot{F}^i F^{i-1} \hat{U}^{e-1} \dots\dots\dots (C.17) \end{aligned}$$

$$L_{(m)}^* \equiv R^{*T} \dot{R}^* \dots\dots\dots (C.18)$$

$$L_{(m)}^e \equiv \hat{U}^e \hat{U}^{e-1} \dots\dots\dots (C.19)$$

$$L_{(m)}^i \equiv \hat{U}^e \dot{F}^i F^{i-1} \hat{U}^{e-1} \dots\dots\dots (C.20)$$

となる．さらに，現配置における速度こう配 L は式 (C.2) から

$$\begin{aligned} L &= (\dot{R}^* \hat{U}^e F^i + R^* \dot{\hat{U}}^e F^i + R^* \hat{U}^e \dot{F}^i) F^{i-1} \hat{U}^{e-1} R^{*T} \\ &= \dot{R}^* R^{*T} + R^* \dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1} R^{*T} + R^* \hat{U}^e \dot{F}^i F^{i-1} \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots\dots\dots (C.21) \end{aligned}$$

$$L^* \equiv \dot{R}^* R^{*T} \dots\dots\dots (C.22)$$

$$L^e \equiv R^* \dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots\dots\dots (C.23)$$

$$L^i \equiv R^* \hat{U}^e \dot{F}^i F^{i-1} \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots\dots\dots (C.24)$$

となる．このように各配置における速度こう配の弾・剛体回転部分，弾性ストレッチ部分および非弾性部分への分解を定義すれば，弾・剛体回転部分の配置変換則は式 (C.10)，式 (C.14)，式 (C.18) および式 (C.22) から

$$L^* = R^* L_{(m)}^* R^{*T} = R^* \hat{U}^e L_{(M)}^* \hat{U}^{e-1} R^{*T} = F L_{(I)}^* F^{-1} \dots\dots\dots (C.25)$$

弾性ストレッチ部分の配置変換則は式 (C.11)，式 (C.15)，式 (C.19) および式 (C.23) から

$$L^e = R^* L_{(m)}^e R^{*T} = R^* \hat{U}^e L_{(M)}^e \hat{U}^{e-1} R^{*T} = F L_{(I)}^e F^{-1} \dots\dots\dots (C.26)$$

非弾性部分の配置変換則は式 (C.12)，式 (C.16)，式 (C.20) および式 (C.24) から

$$L^i = R^* L_{(m)}^i R^{*T} = R^* \hat{U}^e L_{(M)}^i \hat{U}^{e-1} R^{*T} = F L_{(I)}^i F^{-1} \dots\dots\dots (C.27)$$

と表され，分解前の速度こう配 L の配置変換則の式 (C.5) と一致することがわかる．

C.2.4 各配置における速度こう配の対称・反対称分解

各配置における速度こう配の弾・剛体回転部分を表す式 (C.10), 式 (C.14), 式 (C.18) および式 (C.22) を対称・反対称部分に分解すれば, 各配置における変形速度の弾・剛体回転部分 D^* および弾・剛体スピン (下部構造スピン, Substructure スピン) W^* が次のように定義できる.

$$D_{(I)}^* \equiv (F^{i-1} \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dot{R}^* \hat{U}^e F^i)_S \dots\dots\dots (C.28)$$

$$D_{(M)}^* \equiv (\hat{U}^{e-1} R^{*T} \dot{R}^* \hat{U}^e)_S \dots\dots\dots (C.29)$$

$$D_{(m)}^* \equiv (R^{*T} \dot{R}^*)_S = \mathbf{0} \dots\dots\dots (C.30)$$

$$D^* \equiv (\dot{R}^* R^{*T})_S = \mathbf{0} \dots\dots\dots (C.31)$$

$$W_{(I)}^* \equiv (F^{i-1} \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dot{R}^* \hat{U}^e F^i)_A \dots\dots\dots (C.32)$$

$$W_{(M)}^* \equiv (\hat{U}^{e-1} R^{*T} \dot{R}^* \hat{U}^e)_A \dots\dots\dots (C.33)$$

$$W_{(m)}^* \equiv R^{*T} \dot{R}^* \dots\dots\dots (C.34)$$

$$W^* \equiv \dot{R}^* R^{*T} \dots\dots\dots (C.35)$$

したがって, 次のような配置変換則が存在する.

$$W^* = R^* W_{(m)}^* R^{*T} \dots\dots\dots (C.36)$$

また, 各配置における速度こう配の弾性ストレッチ部分を表す式 (C.11), 式 (C.15), 式 (C.19) および式 (C.23) を対称・反対称部分に分解し, 式 (3.3) で表される $\hat{U}^e \hat{U}^{e-1}$ の対称性を考慮すれば, 各配置における弾性変形速度 D^e およびスピンの弾性ストレッチ部分 W^e が次のように定義できる.

$$D_{(I)}^e \equiv (F^{i-1} \hat{U}^{e-1} \hat{U}^e F^i)_S \dots\dots\dots (C.37)$$

$$D_{(M)}^e \equiv (\hat{U}^{e-1} \hat{U}^e)_S \dots\dots\dots (C.38)$$

$$D_{(m)}^e \equiv \hat{U}^e \hat{U}^{e-1} \dots\dots\dots (C.39)$$

$$D^e \equiv R^* \hat{U}^e \hat{U}^{e-1} R^{*T} \dots\dots\dots (C.40)$$

$$W_{(I)}^e \equiv (F^{i-1} \hat{U}^{e-1} \hat{U}^e F^i)_A \dots\dots\dots (C.41)$$

$$W_{(M)}^e \equiv (\hat{U}^{e-1} \hat{U}^e)_A \dots\dots\dots (C.42)$$

$$W_{(m)}^e \equiv (\hat{U}^e \hat{U}^{e-1})_A = \mathbf{0} \dots\dots\dots (C.43)$$

$$W^e \equiv R^* (\hat{U}^e \hat{U}^{e-1})_A R^{*T} = \mathbf{0} \dots\dots\dots (C.44)$$

したがって, 次のような配置変換則が存在する.

$$D^e = R^* D_{(m)}^e R^{*T} \dots\dots\dots (C.45)$$

さらに、各配置における速度こう配の非弾性部分を表す式 (C.12)、式 (C.16)、式 (C.20) および式 (C.24) を対称・反対称部分に分解すれば、各配置における非弾性変形速度 D^i および非弾性スピン W^i が次のように定義できる。

$$D_{(I)}^i \equiv (\mathbf{F}^{i-1} \dot{\mathbf{F}}^i)_S \dots\dots\dots (C.46)$$

$$D_{(M)}^i \equiv (\dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1})_S \dots\dots\dots (C.47)$$

$$D_{(m)}^i \equiv (\hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_S \dots\dots\dots (C.48)$$

$$D^i \equiv \mathbf{R}^* (\hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_S \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (C.49)$$

$$W_{(I)}^i \equiv (\mathbf{F}^{i-1} \dot{\mathbf{F}}^i)_A \dots\dots\dots (C.50)$$

$$W_{(M)}^i \equiv (\dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1})_A \dots\dots\dots (C.51)$$

$$W_{(m)}^i \equiv (\hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_A \dots\dots\dots (C.52)$$

$$W^i \equiv \mathbf{R}^* (\hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_A \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (C.53)$$

したがって、次のような配置変換則が存在する。

$$D^i = \mathbf{R}^* D_{(m)}^i \mathbf{R}^{*T} \quad , \quad W^i = \mathbf{R}^* W_{(m)}^i \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (C.54)$$

C.3 Cotter-Rivlin 速度の導出

初期配置 $\beta_{(I)}$ を参照配置とする物理量 $A_{(I)}$ の物質時間導関数を求めると次式のようになる。

$$\begin{aligned} \hat{A}_{(I)} &= (\mathbf{F}^T \mathbf{A} \mathbf{F})^\Delta \\ &= \dot{\mathbf{F}}^T \mathbf{A} \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \dot{\mathbf{A}} \mathbf{F} + \mathbf{F}^T \mathbf{A} \dot{\mathbf{F}} \\ &= \mathbf{F}^T (\mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{F}}^T \mathbf{A} + \dot{\mathbf{A}} + \mathbf{A} \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}) \mathbf{F} \\ &= \mathbf{F}^T (\hat{\mathbf{A}} + \mathbf{L}^T \mathbf{A} + \mathbf{A} \mathbf{L}) \mathbf{F} \\ &= \mathbf{F}^T \hat{\mathbf{A}} \mathbf{F} \dots\dots\dots (C.55) \end{aligned}$$

ここで、 $\hat{\mathbf{A}}$ は初期配置 $\beta_{(I)}$ を参照したときの Cotter-Rivlin 速度であり、式 (C.55) から次式のように定義される。

$$\hat{\mathbf{A}} \equiv \dot{\mathbf{A}} + \mathbf{L}^T \mathbf{A} + \mathbf{A} \mathbf{L} \dots\dots\dots (C.56)$$

なお、式 (C.55) では補足 C.2.1 で定義した $\mathbf{L} \equiv \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1}$ を用いている。

C.4 分子鎖基底の配置変換則

ここでは、式 (3.64) から式 (3.65) に至る導出過程、すなわち初期配置 $\beta_{(I)}$ における速度こう配の非弾性部分

$$L_{(I)}^i = \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} \left(s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes s_{(I)}^{(\alpha)} + m_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} + t_{(I)}^{(\alpha)} \otimes t_{(I)}^{(\alpha)} \right) \right] \dots\dots\dots (C.57)$$

を第 1 中間配置 $\beta_{(M)}$ へと配置変換する際の分子鎖基底ベクトル $s_{(I)}^{(\alpha)}$ および $m_{(I)}^{(\alpha)}$ の配置変換則について論ずる。

まず，図 C.1(a) に示すように， $s_{(I)}^{(\alpha)}$ 方向に x_1 軸， $m_{(I)}^{(\alpha)}$ 方向に x_2 軸， $t_{(I)}^{(\alpha)}$ 方向に x_3 軸をとり，その座標系上においた一辺の長さが 1 の立方体を考える．これが非弾性変形こう配 F^i を受けて一様に w だけ膨張し [同図 (b)]，さらに x_1 軸方向 ($s_{(I)}^{(\alpha)}$ 方向) へ変位 $u_s = w \tan \beta$ だけ単純せん断を受けたとする [同図 (c)]．この場合，変形前の立方体内にとった微小線素ベクトル $dx_{(I)}$ は次式のように変換され， $dx_{(M)}$ となる．

$$\left. \begin{aligned} dx_{(M)1} &= w dx_{(I)1} + w \tan \beta dx_{(I)2} \\ dx_{(M)2} &= w dx_{(I)2} \\ dx_{(M)3} &= w dx_{(I)3} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (C.58)$$

式 (C.58) より，非弾性変形こう配テンソル F^i の成分は w および β を用いて次式のように書き表せる．

$$[F^i] = \begin{bmatrix} w & w \tan \beta & 0 \\ 0 & w & 0 \\ 0 & 0 & w \end{bmatrix} \dots\dots\dots (C.59)$$

さらに，初期配置における分子鎖基底ベクトル $s_{(I)}^{(\alpha)}$ ， $m_{(I)}^{(\alpha)}$ および $t_{(I)}^{(\alpha)}$ を成分表示すれば，

$$\{s_{(I)}^{(\alpha)}\} = \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad \{m_{(I)}^{(\alpha)}\} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad \{t_{(I)}^{(\alpha)}\} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (C.60)$$

となる．

ここで，分子鎖基底ベクトル $s_{(I)}^{(\alpha)}$ の座標変換を考える．まず， $s_{(I)}^{(\alpha)}$ に対して式 (C.59) で成分表示される非弾性変形こう配 F^i を用いて左から座標変換を行えば，次式のようになる．

$$[F^i] \{s_{(I)}^{(\alpha)}\} = \begin{bmatrix} w & w \tan \beta & 0 \\ 0 & w & 0 \\ 0 & 0 & w \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} w \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (C.61)$$

一方， $s_{(I)}^{(\alpha)}$ に対して F^{i-1} を用いて右から座標変換を行えば，次式のようになる．

$$\{s_{(I)}^{(\alpha)}\} [F^{i-1}] = [F^{i-T}] \{s_{(I)}^{(\alpha)}\} = \begin{Bmatrix} 1/w \\ -\tan \beta/w \\ 0 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (C.62)$$

次に，分子鎖基底ベクトル $m_{(I)}^{(\alpha)}$ に対して式 (C.61) および式 (C.62) と同様の座標変換を行えば，その結果はそれぞれ次のようになる．

$$[F^i] \{m_{(I)}^{(\alpha)}\} = \begin{Bmatrix} w \tan \beta \\ w \\ 0 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (C.63)$$

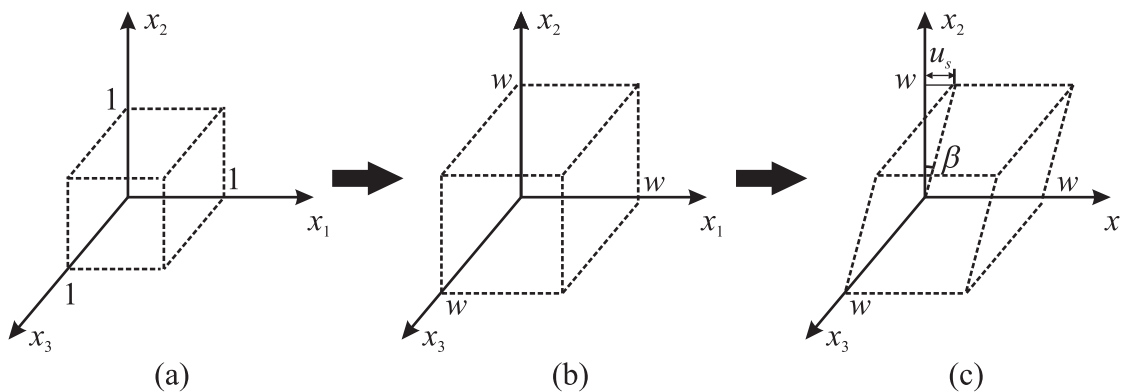


Fig. C.1 Concrete representation of inelastic deformation

$$\{\mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)}\}[\mathbf{F}^{i-1}] = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1/w \\ 0 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (C.64)$$

ところで，第 1 中間配置における速度こう配の非弾性部分 $L_{(M)}^i$ を表した式 (3.64) を再出すれば次式のとおりである．

$$\begin{aligned} L_{(M)}^i &= \sum_{\alpha} \mathbf{F}^i \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(I)}^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(I)}^{(\alpha)} \right) \mathbf{F}^{i-1} \\ &= \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} \|\mathbf{F}^i \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}\| \|\mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{i-1}\| \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right. \\ &\quad \left. + \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{F}^i \left(\mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)} \right) \mathbf{F}^{i-1} \right] \dots\dots\dots (C.65) \end{aligned}$$

ここで，式 (C.65) の右辺第 1 項におけるベクトルの大きさ $\|\mathbf{F}^i \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}\|$ および $\|\mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{i-1}\|$ については，それぞれ式 (C.61) および式 (C.64) を用いて具体的に計算することができ，

$$\|\mathbf{F}^i \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}\| = \sqrt{w^2} = w \dots\dots\dots (C.66)$$

$$\|\mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{i-1}\| = \sqrt{\frac{1}{w^2}} = \frac{1}{w} \dots\dots\dots (C.67)$$

となることから，結局次式が成り立つ．

$$\|\mathbf{F}^i \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}\| \|\mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{i-1}\| = w \times \frac{1}{w} = 1 \dots\dots\dots (C.68)$$

ゆえに，式 (C.65) の右辺第 1 項は次式のように整理できる．

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} \|\mathbf{F}^i \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}\| \|\mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{i-1}\| \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (C.69)$$

すなわち，非弾性変形こう配による配置変換によって，各分子鎖基底ベクトルの積をとったものの大きさは変換を受ける前の大きさと変わらないという結果が得られた．

一方，式 (C.65) 右辺第 2 項における初期配置での分子鎖基底テンソル $\mathbf{Q}_{(I)}^{(\alpha)}$ は式 (C.60) を用いて具体的に成分表示することができ，その導出過程は次のようなものである．

$$\{\mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}\} \otimes \{\mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}\} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \dots\dots\dots (C.70)$$

$$\{\mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)}\} \otimes \{\mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)}\} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \dots\dots\dots (C.71)$$

$$\{\mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)}\} \otimes \{\mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)}\} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \dots\dots\dots (C.72)$$

式 (C.70)，式 (C.71) および式 (C.72) を加えれば，

$$[\mathbf{Q}_{(I)}^{(\alpha)}] = \{\mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}\} \otimes \{\mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}\} + \{\mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)}\} \otimes \{\mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)}\} + \{\mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)}\} \otimes \{\mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)}\} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \dots\dots\dots (C.73)$$

となる．すなわち，初期配置での分子鎖基底テンソル $\mathbf{Q}_{(I)}^{(\alpha)}$ を成分表示すれば，それは恒等 (単位) テンソル \mathbf{I} そのものであることがわかる．ゆえに $\mathbf{Q}_{(I)}^{(\alpha)}$ はどのような配置変換を受けてもその成分は不変であり，当然ながら式 (C.65) の右辺第 2 項においても次式が成り立つ．

$$\begin{aligned} F^i \left(s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes s_{(I)}^{(\alpha)} + m_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} + t_{(I)}^{(\alpha)} \otimes t_{(I)}^{(\alpha)} \right) F^{i-1} &= F^i I F^{i-1} = I \\ &= s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes s_{(M)}^{(\alpha)} + m_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)} + t_{(M)}^{(\alpha)} \otimes t_{(M)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (C.74) \end{aligned}$$

したがって、これまでの分子鎖基底の配置変換に関する検討と式 (C.69) および式 (C.74) より得られた結論を考慮することにより、第 1 中間配置 $\beta_{(M)}$ における速度こう配の非弾性部分は次式のように整理される。

$$L_{(M)}^i = \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} \left(s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes s_{(M)}^{(\alpha)} + m_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)} + t_{(M)}^{(\alpha)} \otimes t_{(M)}^{(\alpha)} \right) \right] \dots \dots \dots \quad (C.75)$$

これより、式 (3.65) が得られる。

C.5 従来の体積変化を考慮した結晶塑性論における問題点

従来の体積変化を考慮した結晶塑性論⁽⁹⁴⁾においては、初期配置における塑性速度こう配 $L_{(I)}^p$ を次式のように定義している。

$$L_{(I)}^p = \sum_{\alpha} \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{p(\alpha)} m_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots \quad (C.76)$$

ここで、 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ はすべり、 $\dot{\varepsilon}_m^{p(\alpha)}$ はすべり面に垂直な塑性ひずみである。

いま、通常の結晶塑性論の体系に基づく 4 配置構成を考え (図 C.2 参照)、式 (C.76) を塑性変形こう配 F^p を用いて通常の第 1 中間配置における塑性速度こう配 $L_{(M)}^p$ は式 (C.65) と同様に次式のように求められる。

$$\begin{aligned} L_{(M)}^p &= F^p L_{(I)}^p F^{p-1} \\ &= \sum_{\alpha} F^p \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} s_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{p(\alpha)} m_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} \right) F^{p-1} \\ &= \sum_{\alpha} \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \|F^p s_{(I)}^{(\alpha)}\| \|m_{(I)}^{(\alpha)} F^{p-1}\| s_{(M)}^{(\alpha)} \otimes m_{(M)}^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{p(\alpha)} F^p m_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} F^{p-1} \right) \dots \dots \dots \quad (C.77) \end{aligned}$$

ここで、式 (C.77) における塑性変形こう配 F^p は、補足 C.4 における非弾性変形こう配 F^i に対応していることから、式 (C.77) 右辺第 1 項の $\|F^p s_{(I)}^{(\alpha)}\|$ および $\|m_{(I)}^{(\alpha)} F^{p-1}\|$ はそれぞれ式 (C.66) および式 (C.67) と同様に計算することができ、その結果は次のようになる。

$$\|F^p s_{(I)}^{(\alpha)}\| = \sqrt{w^2} = w \dots \dots \dots \quad (C.78)$$

$$\|m_{(I)}^{(\alpha)} F^{p-1}\| = \sqrt{\frac{1}{w^2}} = \frac{1}{w} \dots \dots \dots \quad (C.79)$$

式 (C.78) および式 (C.79) より、次式が成り立つ。

$$\|F^p s_{(I)}^{(\alpha)}\| \|m_{(I)}^{(\alpha)} F^{p-1}\| = w \times \frac{1}{w} = 1 \dots \dots \dots \quad (C.80)$$

すなわち、式 (C.68) と同様に、塑性変形こう配を用いた配置変換によって、各結晶基底の積をとったものの大きさは変換を受ける前の大きさと変わらない。これは、すべりのみを考慮した通常の結晶塑性論における運動学の体系を支持する結果となった。

次に、式 (C.77) 右辺第 2 項におけるテンソル積 $F^p m_{(I)}^{(\alpha)} \otimes m_{(I)}^{(\alpha)} F^{p-1}$ を式 (C.63) および式 (C.64) を用いて成分表示すれば、次式のようになる。

$$\left\{ F^p m_{(I)}^{(\alpha)} \right\} \otimes \left\{ m_{(I)}^{(\alpha)} F^{p-1} \right\} = \begin{Bmatrix} w \tan \beta \\ w \\ 0 \end{Bmatrix} \otimes \{ 0 \quad 1/w \quad 0 \} = \begin{bmatrix} 0 & \tan \beta & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \dots \dots \dots \quad (C.81)$$

一方、通常の結晶塑性論の体系において、初期配置における結晶基底 $\mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)}$ は、塑性変形こう配を用いて配置変換を受けてもその方向は変わらないはずであるから、変換後の結晶基底 $\mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)}$ の成分を表示すれば、

$$\{\mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)}\} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (C.82)$$

となる。式 (C.82) を用いてテンソル積 $\mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)}$ を計算すれば次式を得る。

$$\{\mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)}\} \otimes \{\mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)}\} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix} \otimes \begin{Bmatrix} 0 & 1 & 0 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \dots\dots\dots (C.83)$$

式 (C.81) と式 (C.83) を見比べれば、

$$\mathbf{F}^p \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{p-1} \neq \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (C.84)$$

となってしまう、式 (C.77) における右辺第 2 項は、通常の結晶塑性論のような配置変換ができないとわかる。すなわち、従来の体積変化を考慮した結晶塑性論では、塑性速度こう配 $L_{(I)}^p$ の等方部分を表すテンソルとして、 $\mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)}$ を用いてきたが、この部分は偏差部分を表す $\mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)}$ と同様の配置変換則を適用できない。一方、本研究のように非弾性速度こう配の等方部分を表す分子鎖基底テンソルを

$$\mathbf{Q}_{(I)}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (C.85)$$

と定義しておけば、式 (C.73) で示したようにその成分は恒等テンソル I の成分と等しくなり、通常の結晶塑性論における運動学の体系をそのまま適用することが可能となる。

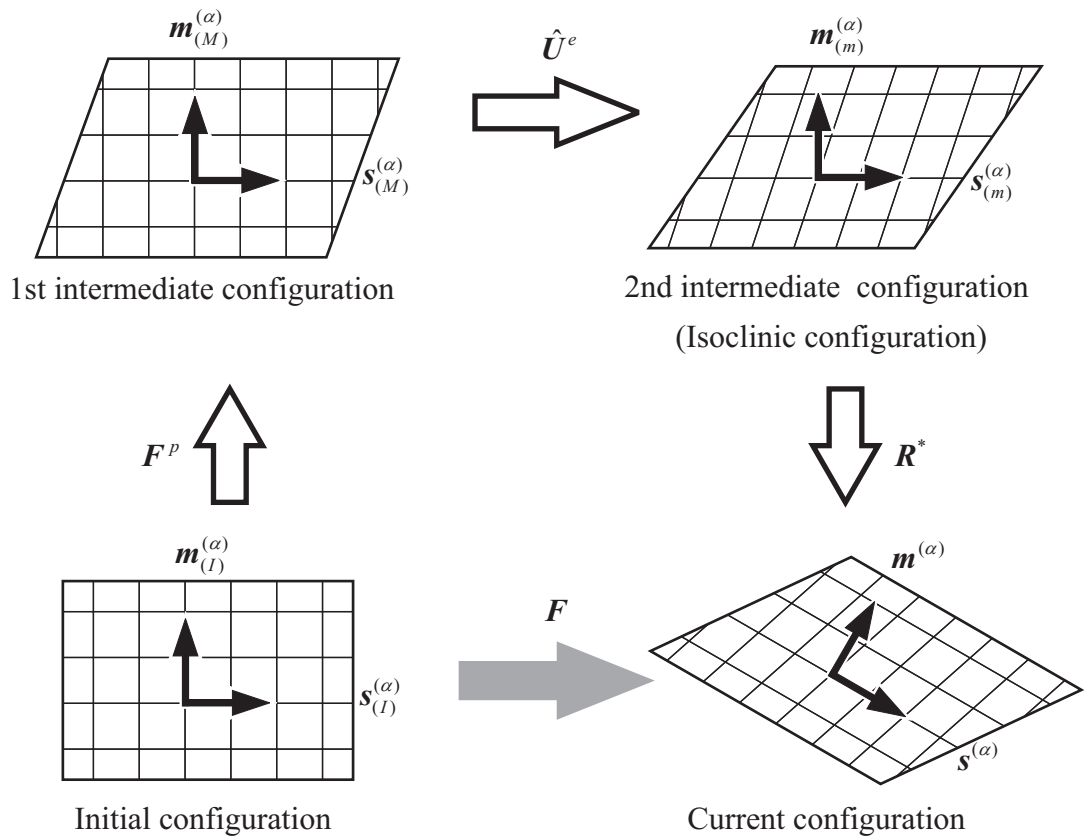


Fig. C.2 Configurations and crystal grids

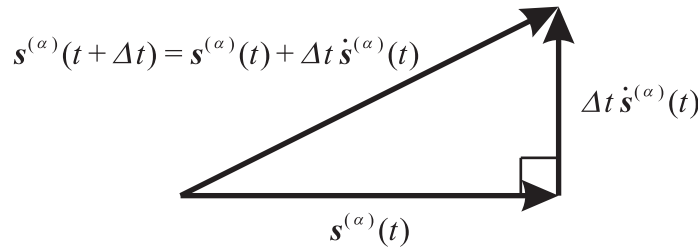


Fig. C.3 Update of molecular chain base vector

C.6 分子鎖基底の更新における問題点

式 (3.90) から $s^{(\alpha)}$ の時間増分を求めて $s^{(\alpha)}$ を更新すると

$$s^{(\alpha)}(t + \Delta t) = s^{(\alpha)}(t) + \Delta t \dot{s}^{(\alpha)}(t) = s^{(\alpha)}(t) + \Delta t \mathbf{W}^{*(\alpha)} s^{(\alpha)}(t) = (\mathbf{I} + \Delta t \mathbf{W}^{*(\alpha)}) s^{(\alpha)}(t) \dots \dots \dots \quad (\text{C.86})$$

となる．時間増分 Δt が無限小であれば問題はないが，数値解析上で Δt を無限小にすることはできないため，図 C.3 のように，必ず $\|s^{(\alpha)}(t + \Delta t)\| \geq \|s^{(\alpha)}(t)\|$ となってしまう．このことは，時間ステップごとに分子鎖基底ベクトルが伸びることを意味しており，分子鎖基底の正規性が保たれなくなる．また， $m^{(\alpha)}$ に関しても同様の更新方法をとるため， $s^{(\alpha)}$ と $m^{(\alpha)}$ が直交しなくなる恐れもある．

C.7 式 (3.94) の導出

ここでは，式 (3.94) の導出を行う．まず， $n = 1$ のとき，式 (3.94) が成り立つことは明らかである．ここで一般に，反対称テンソル $\mathbf{W}^{*(\alpha)}$ とそれに双対な軸性ベクトル $w^{*(\alpha)}$ には次の関係がある．

$$W_{ij}^{*(\alpha)} = -e_{ijk} w_k^{*(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (\text{C.87})$$

式 (C.87) を用いれば，

$$\begin{aligned} W_{ik}^{*(\alpha)} W_{kj}^{*(\alpha)} &= (-e_{ikl} w_l^{*(\alpha)}) (-e_{kjm} w_m^{*(\alpha)}) \\ &= e_{kli} e_{kjm} w_l^{*(\alpha)} w_m^{*(\alpha)} \\ &= (\delta_{lj} \delta_{im} - \delta_{lm} \delta_{ij}) w_l^{*(\alpha)} w_m^{*(\alpha)} \\ &= w_i^{*(\alpha)} w_j^{*(\alpha)} - \|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|^2 \delta_{ij} \dots \dots \dots \quad (\text{C.88}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} W_{ik}^{*(\alpha)} W_{kl}^{*(\alpha)} W_{lj}^{*(\alpha)} &= (w_i^{*(\alpha)} w_l^{*(\alpha)} - \|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|^2 \delta_{il}) (-e_{ljm} w_m^{*(\alpha)}) \\ &= -e_{jml} w_m^{*(\alpha)} w_l^{*(\alpha)} w_i^{*(\alpha)} + \|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|^2 e_{ijm} w_m^{*(\alpha)} \\ &= -\|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|^2 W_{ij}^{*(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (\text{C.89}) \end{aligned}$$

となる．ただし，交代記号に関する次の公式を用いている．

$$e_{ijk} e_{ilm} = \delta_{jl} \delta_{km} - \delta_{jm} \delta_{kl} \dots \dots \dots \quad (\text{C.90})$$

式 (C.89) は $n = 2$ のときの式 (3.94)₁ となっていることがわかる．また，式 (C.89) より

$$W_{ij}^{*(\alpha)4} = -\|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|^2 W_{ik}^{*(\alpha)} W_{kj}^{*(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (\text{C.91})$$

であり, これは $n = 2$ のときの式 (3.94)₂ である. さらに, 式 (C.91) へ式 (C.88) を代入すれば

$$W_{ij}^{*(\alpha)4} = -\|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|^2 (w_i^{*(\alpha)} w_j^{*(\alpha)} - \|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|^2 \delta_{ij}) \dots \dots \dots (C.92)$$

となるから,

$$\begin{aligned} W_{ij}^{*(\alpha)5} &= -\|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|^2 (w_i^{*(\alpha)} w_k^{*(\alpha)} - \|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|^2 \delta_{ik}) (-e_{kjl} w_l^{*(\alpha)}) \\ &= \|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|^2 e_{jlk} w_l^{*(\alpha)} w_k^{*(\alpha)} w_i^{*(\alpha)} - \|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|^4 e_{ijl} w_l^{*(\alpha)} \\ &= \|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|^4 W_{ij}^{*(\alpha)} \dots \dots \dots (C.93) \end{aligned}$$

であり, 式 (C.93) は $n = 3$ のときの式 (3.94)₁ となっていることがわかる. また, 式 (C.93) より

$$W_{ij}^{*(\alpha)6} = \|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\|^4 W_{ik}^{*(\alpha)} W_{kj}^{*(\alpha)} \dots \dots \dots (C.94)$$

であり, これは $n = 3$ のときの式 (3.94)₂ である. 以上を繰り返していくと, 一般的な n の値に対しても式 (3.94) が成り立つことがわかる.

補足 D

第 4 章の補足

D.1 内力のなす仮想仕事率に関する変形

ここでは，式 (4.12) の計算過程を示す．

式 (4.11) における変形速度の仮想量 \check{D} は，速度こう配 L の対称部分の仮想量であるから，次のように置き換えることができる．

$$\check{D} = \check{L} - \check{W} \dots\dots\dots (D.1)$$

ただし， \check{W} は，速度こう配 L の反対称部分 W の仮想量である．また，速度こう配 L およびその反対称テンソル W の仮想量は次のように表せる．

$$\left. \begin{aligned} \check{L} &= \text{grad } \check{v} \\ \check{W} &= \mathbf{I} \times \check{w} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (D.2)$$

式 (D.1)，式 (D.2) を式 (4.11) に代入すると次式のようなになる．

$$\begin{aligned} \check{P} &= \mathbf{T} \cdot \check{D} \\ &= \mathbf{T} \cdot (\check{L} - \check{W}) \\ &= \mathbf{T} \cdot (\text{grad } \check{v} - \mathbf{I} \times \check{w}) \dots\dots\dots (D.3) \end{aligned}$$

ここで，次の指標表示から得る，2 つの関係式を利用する．

$$\begin{aligned} \mathbf{T} \cdot \text{grad } \check{v} &\rightarrow T_{ij} \check{v}_{i,j} = (T_{ij} \check{v}_i)_{,j} - T_{i,j} \check{v}_i \\ &\rightarrow \text{div}(\mathbf{T}^T \check{v}) - (\text{div } \mathbf{T}) \cdot \check{v} \dots\dots\dots (D.4) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{T} \cdot (\mathbf{I} \times \check{w}) &\rightarrow T_{ij} e_{jkl} \delta_{ik} \check{w}_l = e_{jkl} T_{ij} \delta_{ik} \check{w}_l \\ &= e_{ljk} \delta_{ki} T_{ij} \check{w}_l \\ &= e_{ljk} T_{kj} \check{w}_l \\ &\rightarrow (\mathbf{e} \cdot \cdot \mathbf{T}) \cdot \check{w} \dots\dots\dots (D.5) \end{aligned}$$

式 (D.4)，式 (D.5) を式 (D.3) に代入して式 (4.12) を得る．

D.2 式 (4.13) の導出

ここでは、式 (4.13) の導出過程を Gauss の発散定理を用いて詳細に示す。式 (4.9)、式 (4.10) および式 (4.12) を仮想仕事率の原理の式 (4.8) に代入して次式を得る。

$$\int_{\mathcal{V}} \{ \rho(\mathbf{f} - \dot{\mathbf{v}}) \cdot \dot{\mathbf{v}} + (\text{div } \mathbf{T}) \cdot \dot{\mathbf{v}} + (\mathbf{e} \cdot \mathbf{T}) \cdot \dot{\mathbf{w}} - \text{div}(\mathbf{T}^T \dot{\mathbf{v}}) \} dv + \oint_S \overset{(n)}{\mathbf{t}} \cdot \dot{\mathbf{v}} da = 0 \dots\dots\dots (D.6)$$

ここで、下線部の項の体積分に Gauss の発散定理を用いると次式のようになる。

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}} \text{div}(\mathbf{T}^T \dot{\mathbf{v}}) dv &\rightarrow \int_{\mathcal{V}} (T_{ji} \dot{v}_j)_{,i} dv = \oint_S T_{ji} \dot{v}_j n_i da \\ &= \oint_S T_{ji} n_i \dot{v}_j da \\ &\rightarrow \oint_S (\mathbf{T}\mathbf{n}) \cdot \dot{\mathbf{v}} da \dots\dots\dots (D.7) \end{aligned}$$

式 (D.7) を式 (D.6) に代入して、式 (4.13) を得る。

D.3 式 (4.24) の導出

式 (4.23) の左辺は、次のように書ける。

$$\int_{\mathcal{V}} \mathbf{T} \cdot \check{\mathbf{D}} dv = \int_{\mathcal{V}} \mathbf{T} \cdot \check{\mathbf{L}} dv \dots\dots\dots (D.8)$$

ここで、 $\mathbf{T} = J^{-1} \mathbf{H} \mathbf{F}^T$ 、 $\check{\mathbf{L}} = \text{grad } \check{\mathbf{v}} \rightarrow \frac{\partial \check{v}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial \check{v}_i}{\partial x_{(I)k}} \frac{\partial \check{x}_{(I)k}}{\partial x_j} \rightarrow (\text{Grad } \check{\mathbf{v}}) \mathbf{F}^{-1}$ および $dv = J dv_0$ という関係を用いれば

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}} \mathbf{T} \cdot \check{\mathbf{L}} dv &= \int_{\mathcal{V}_0} (J^{-1} \mathbf{H} \mathbf{F}^T) \cdot [(\text{Grad } \check{\mathbf{v}}) \mathbf{F}^{-1}] J dv_0 \\ &\rightarrow \int_{\mathcal{V}_0} \Pi_{ik} F_{jk} \frac{\partial \check{v}_i}{\partial x_{(I)l}} F_{lj}^{-1} dv_0 \\ &= \int_{\mathcal{V}_0} \Pi_{ik} \frac{\partial \check{v}_i}{\partial x_{(I)k}} dv_0 \\ &\rightarrow \int_{\mathcal{V}_0} \mathbf{H} \cdot \text{Grad } \check{\mathbf{v}} dv_0 \dots\dots\dots (D.9) \end{aligned}$$

となる。また、式 (4.24) の右辺第 1 項については、 $\mathbf{T} = J^{-1} \mathbf{H} \mathbf{F}^T$ 、 $\mathbf{n} da = J \mathbf{F}^{-T} \mathbf{n}_0 da_0$ 、 $\overset{(n)}{\mathbf{t}} = \mathbf{T}\mathbf{n}$ および $\overset{(0)}{\mathbf{t}} = \mathbf{H}\mathbf{n}_0$ という関係を用いて

$$\begin{aligned}
 \oint_S \mathbf{t}^{(0)} \cdot \check{\mathbf{v}} da &= \oint_S (\mathbf{T}\mathbf{n}) \cdot \check{\mathbf{v}} da \\
 &= \oint_S (\mathbf{T}^T \check{\mathbf{v}}) \cdot \mathbf{n} da \\
 &= \oint_{S_0} (J^{-1} \mathbf{F} \mathbf{\Pi}^T \check{\mathbf{v}}) \cdot (J \mathbf{F}^{-T} \mathbf{n}_0) da_0 \\
 &\rightarrow \oint_{S_0} F_{ij} \Pi_{kj} \check{v}_k F_{li}^{-1} n_{0l} da_0 \\
 &= \oint_{S_0} \Pi_{kj} \check{v}_k n_{0j} da_0 \\
 &\rightarrow \oint_{S_0} (\mathbf{\Pi} \mathbf{n}_0) \cdot \check{\mathbf{v}} da_0 \\
 &= \oint_{S_0} \mathbf{t}^{(0)} \cdot \check{\mathbf{v}} da_0 \dots \dots \dots (D.10)
 \end{aligned}$$

と変形でき，第 2 項については $\rho = J^{-1} \rho_0$ および $dv = J dv_0$ という関係を用いて

$$\begin{aligned}
 \int_V \rho \mathbf{f} \cdot \check{\mathbf{v}} dv &= \int_{V_0} J^{-1} \rho_0 \mathbf{f} \cdot \check{\mathbf{v}} J dv_0 \\
 &= \int_{V_0} \rho_0 \mathbf{f} \cdot \check{\mathbf{v}} dv_0 \dots \dots \dots (D.11)
 \end{aligned}$$

と変形できる．したがって，式 (4.24) が得られる．

D.4 式 (4.27) の導出

式 (4.27) の第 1 辺に $\mathbf{\Pi} = J \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T}$ を代入すれば

$$\begin{aligned}
 \dot{\mathbf{\Pi}} \mathbf{F}^T &= (J \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T}) \mathbf{F}^T \\
 &= J \mathbf{T} + J \dot{\mathbf{T}} + J \mathbf{T} \dot{\mathbf{F}}^{-T} \mathbf{F}^T \dots \dots \dots (D.12)
 \end{aligned}$$

ここで， $\dot{J} = J(\text{tr} L)$ [補足 D.5] および $\dot{\mathbf{F}}^{-T} \mathbf{F}^T = (\mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^T) \cdot - \mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{F}}^T = -(\dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1})^T = -L^T$ という関係を用いれば

$$\begin{aligned}
 J \mathbf{T} + J \dot{\mathbf{T}} + J \mathbf{T} \dot{\mathbf{F}}^{-T} \mathbf{F}^T &= J \left[(\text{tr} L) \mathbf{T} + \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{T} L^T \right] \\
 &= J(\overset{\square}{\mathbf{T}} + L \mathbf{T}) \dots \dots \dots (D.13)
 \end{aligned}$$

となり，式 (4.27) の第 2 辺が得られる．ただし， $\overset{\square}{\mathbf{T}} \equiv \dot{\mathbf{T}} - L \mathbf{T} - \mathbf{T} L^T + (\text{tr} L) \mathbf{T}$ である．さらに，

$$\begin{aligned}
 J(\overset{\square}{\mathbf{T}} + L \mathbf{T}) &= J(\dot{\mathbf{T}} - \mathbf{T} L^T - L \mathbf{T} + (\text{tr} L) \mathbf{T} + L \mathbf{T}) \\
 &= J(\overset{\circ}{\mathbf{T}} - (\mathbf{T} \mathbf{D} + \mathbf{D} \mathbf{T}) + (\text{tr} L) \mathbf{T} + L \mathbf{T}) \\
 &= J(\overset{\circ}{\mathbf{T}} - \mathbf{P} : \mathbf{D} + (\text{tr} L) \mathbf{T} + L \mathbf{T}) \dots \dots \dots (D.14)
 \end{aligned}$$

のように式 (4.27) の第 3 辺が得られる．ただし， $\overset{\circ}{\mathbf{T}} \equiv \dot{\mathbf{T}} + \mathbf{T} \mathbf{W} - \mathbf{W} \mathbf{T}$ および

$$\mathbf{P} : \mathbf{D} \rightarrow (\delta_{il} T_{kj} + T_{ik} \delta_{jl}) D_{kl} = D_{ik} T_{kj} + T_{ik} D_{kj} \rightarrow \mathbf{D} \mathbf{T} + \mathbf{T} \mathbf{D} \dots \dots \dots (D.15)$$

を用いている．また， $J \dot{\mathbf{T}} + J(\text{tr} L) \mathbf{T} = (J \mathbf{T}) \cdot \overset{\circ}{\mathbf{T}}$ より，

$$\begin{aligned}
 J(\dot{\mathbf{T}} - \mathbf{P} : \mathbf{D} + (\text{tr}\mathbf{L})\mathbf{T} + \mathbf{L}\mathbf{T}) &= J\left(J^{-1}\tilde{\mathbf{T}} + \mathbf{T}\mathbf{W} - \mathbf{W}\mathbf{T} - \mathbf{P} : \mathbf{D} + \mathbf{L}\mathbf{T}\right) \\
 &= J\left(J^{-1}(\dot{\tilde{\mathbf{T}}} - \tilde{\mathbf{P}} : \mathbf{D}) + \mathbf{L}\mathbf{T}\right) \dots\dots\dots (D.16)
 \end{aligned}$$

のように式 (4.27) の第 4 辺が得られる .

D.5 Jacobian の物質時間微分

行列式の展開公式

$$(\det\mathbf{A}) e_{ijk} = e_{lmn} A_{il} A_{jm} A_{kn} \dots\dots\dots (D.17)$$

より , 次式が成り立つ .

$$J e_{ijk} = e_{lmn} F_{il} F_{jm} F_{kn} \dots\dots\dots (D.18)$$

式 (D.18) の両辺に e_{ijk} を乗じ , $e_{ijk} e_{ijk} = 6$ を用いれば

$$J = \frac{1}{6} e_{ijk} e_{lmn} F_{il} F_{jm} F_{kn} \dots\dots\dots (D.19)$$

を得る . 式 (D.19) の両辺を物質時間微分し , $\dot{F}_{ij} = \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_{(I)j}} = \frac{\partial v_i}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial x_{(I)j}} = v_{i,k} F_{kj}$ を考慮すれば

$$\begin{aligned}
 \dot{J} &= \frac{1}{6} e_{ijk} e_{lmn} (\dot{F}_{il} F_{jm} F_{kn} + F_{il} \dot{F}_{jm} F_{kn} + F_{il} F_{jm} \dot{F}_{kn}) \\
 &= \frac{1}{6} e_{ijk} e_{lmn} (v_{i,p} F_{pl} F_{jm} F_{kn} + F_{il} v_{j,p} F_{pm} F_{kn} + F_{il} F_{jm} v_{k,p} F_{pn}) \\
 &= \frac{1}{6} (e_{pjk} v_{p,i} + e_{ipk} v_{p,j} + e_{ijp} v_{p,k}) e_{lmn} F_{il} F_{jm} F_{kn} \\
 &= \frac{1}{6} (e_{pjk} v_{p,i} + e_{ipk} v_{p,j} + e_{ijp} v_{p,k}) J e_{ijk} \\
 &= \frac{1}{6} (e_{pjk} e_{ijk} v_{p,i} + e_{ipk} e_{ijk} v_{p,j} + e_{ijp} e_{ijk} v_{p,k}) J \\
 &= \frac{1}{6} (2\delta_{pi} v_{p,i} + 2\delta_{pj} v_{p,j} + 2\delta_{pk} v_{p,k}) J \\
 &= \frac{1}{3} (v_{p,p} + v_{p,p} + v_{p,p}) J \\
 &= J v_{i,i} \\
 &= J(\text{tr}\mathbf{L}) \dots\dots\dots (D.20)
 \end{aligned}$$

が得られる .

D.6 式 (4.30) の導出

式 (4.26) の左辺から式 (4.30) の左辺を導出する .

$$\begin{aligned}
 \int_{\mathcal{V}_0} \dot{\mathbf{H}} \cdot \text{Grad}\check{v} dv_0 &\rightarrow \int_{\mathcal{V}_0} \dot{H}_{ij} \frac{\partial \check{v}_i}{\partial x_{(I)j}} dv_0 = \int_{\mathcal{V}_0} \dot{H}_{ij} \frac{\partial \check{v}_i}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial x_{(I)j}} dv_0 \\
 &\rightarrow \int_{\mathcal{V}_0} (\dot{\mathbf{H}}\mathbf{F}^T) \cdot \check{\mathbf{L}} dv_0 \dots\dots\dots (D.21)
 \end{aligned}$$

ここで，式 (4.27) を代入すれば

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}_0} (\dot{\mathbf{H}}\mathbf{F}^T) \cdot \dot{\mathbf{L}} dv_0 &= \int_{\mathcal{V}_0} J \left[J^{-1}(\overset{\circ}{\mathbf{T}} - \tilde{\mathbf{P}} : \mathbf{D}) + \mathbf{L}\mathbf{T} \right] \cdot \dot{\mathbf{L}} dv_0 \\ &= \int_{\mathcal{V}} \left[J^{-1}(\overset{\circ}{\mathbf{T}} - \tilde{\mathbf{P}} : \mathbf{D}) \cdot \dot{\mathbf{D}} + (\mathbf{L}\mathbf{T}) \cdot \dot{\mathbf{L}} \right] dv \dots\dots\dots (D.22) \end{aligned}$$

となり，式 (4.30) の左辺が得られる．ただし， $(\overset{\circ}{\mathbf{T}} - \tilde{\mathbf{P}} : \mathbf{D})$ の対称性を利用している．

D.7 Kirchhoff 応力の Jaumann 速度に対する仮定

式 (4.30) における Kirchhoff 応力の Jaumann 速度 $\overset{\circ}{\mathbf{T}}$ は次のように表される．

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{\mathbf{T}} &= \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{W}\tilde{\mathbf{T}} + \tilde{\mathbf{T}}\mathbf{W} \\ &= \mathbf{J}\mathbf{T} + \mathbf{J}\dot{\mathbf{T}} - \mathbf{J}\mathbf{W}\mathbf{T} + \mathbf{J}\mathbf{T}\mathbf{W} \\ &= J(\text{tr}\mathbf{L})\mathbf{T} + \mathbf{J}\dot{\mathbf{T}} \dots\dots\dots (D.23) \end{aligned}$$

ここで，updated Lagrange 形式においては現配置が参照配置となるため， $J \rightarrow 1$ を考慮すれば

$$J(\text{tr}\mathbf{L})\mathbf{T} + \mathbf{J}\dot{\mathbf{T}} = (\text{tr}\mathbf{L})\mathbf{T} + \dot{\mathbf{T}} \dots\dots\dots (D.24)$$

となる．さらに，弾性変形は微小であり，非弾性変形中は体積不変である ($\text{tr}\mathbf{L} \approx \text{tr}\mathbf{L}^i = \text{tr}\mathbf{D}^i = 0$) と仮定すれば

$$(\text{tr}\mathbf{L})\mathbf{T} + \dot{\mathbf{T}} \approx \dot{\mathbf{T}} \dots\dots\dots (D.25)$$

となる．

補足 E

第 5 章の補足

E.1 弾性構成式における応力速度と弾性変形速度の逆変換

ここでは、式 (5.33) における応力速度と弾性変形速度の逆変換の過程について述べる。まず、式 (5.33) を、次のようにまとめておく。

$$D_{(m)ij}^e = \left(\frac{1+\nu}{E} \dot{T}_{(m)ij} - \frac{\nu}{E} \dot{T}_{(m)kk} \delta_{ij} \right) + \Lambda_{(m)ij}^e \dot{\theta} \dots \dots \dots \quad (\text{E.1})$$

ここで、

$$\Lambda_{(m)ij}^e \equiv \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{1+\nu}{E} \right) \delta_{ik} \delta_{jl} - \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\frac{\nu}{E} \right) \delta_{ij} \delta_{kl} \right\} T_{(m)kl} + \left\{ \alpha_h + \frac{\partial \alpha_h}{\partial \theta} (\theta - \theta_0) \right\} \delta_{ij} \dots \dots \dots \quad (\text{E.2})$$

である。式 (E.1) において両辺のトレースをとれば、

$$D_{(m)kk}^e = \left(\frac{1-2\nu}{E} \right) \dot{T}_{(m)kk} + \Lambda_{(m)kk}^e \dot{\theta} \dots \dots \dots \quad (\text{E.3})$$

となり、上式 (E.3) を $\dot{T}_{(m)kk}$ について解けば、

$$\dot{T}_{(m)kk} = \frac{E}{1-2\nu} (D_{(m)kk}^e - \Lambda_{(m)kk}^e \dot{\theta}) \dots \dots \dots \quad (\text{E.4})$$

となる。この式 (E.4) を式 (E.1) に代入すると、次式を得る。

$$D_{(m)ij}^e = \left\{ \frac{1+\nu}{E} \dot{T}_{(m)ij} - \frac{\nu}{1-2\nu} (D_{(m)kk}^e - \Lambda_{(m)kk}^e \dot{\theta}) \delta_{ij} \right\} + \Lambda_{(m)ij}^e \dot{\theta} \dots \dots \dots \quad (\text{E.5})$$

さらに、上式 (E.5) を応力速度 $\dot{T}_{(m)ij}$ について解けば、

$$\begin{aligned} \dot{T}_{(m)ij} = & \frac{E}{1+\nu} D_{(m)ij}^e + \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \underbrace{D_{(m)kk}^e \delta_{ij}}_{(a)} \\ & - \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \Lambda_{(m)kk}^e \delta_{ij} \dot{\theta} - \frac{E}{1+\nu} \underbrace{\Lambda_{(m)ij}^e \dot{\theta}}_{(b)} \dots \dots \dots \quad (\text{E.6}) \end{aligned}$$

と求まる。ここで、上式 (E.6) 中の下線部 (a) については、Lamé 定数 λ および μ を用いて

$$2\mu D_{(m)ij}^e + \lambda D_{(m)kk}^e \delta_{ij} = (\lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + 2\mu \delta_{ik} \delta_{jl}) D_{(m)kl}^e \dots \dots \dots \quad (\text{E.7})$$

のように書き換えられる。ただし、次のような関係式を用いている。

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}, \quad 2\mu = \frac{E}{1+\nu} \dots \dots \dots \quad (\text{E.8})$$

また、上式 (E.8) の関係を用いれば、式 (E.6) 中の下線部 (b) についても

$$-\left\{ \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)} \delta_{ij} \delta_{kl} + \frac{E}{1+\nu} \delta_{ik} \delta_{jl} \right\} \Lambda_{(m)kl}^e \dot{\theta} = -(\lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + 2\mu \delta_{ik} \delta_{jl}) \Lambda_{(m)kl}^e \dot{\theta} \dots \dots \dots (E.9)$$

と書き換えられる。

よって、式 (E.8) と式 (E.9) を式 (E.6) に戻せば、第 2 中間配置における弾性構成式が、応力速度について解いた形で求まり、それは次式のようなになる。

$$\begin{aligned} \dot{T}_{(m)ij} &= (\lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + 2\mu \delta_{ik} \delta_{jl}) D_{(m)kl}^e - (\lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + 2\mu \delta_{ik} \delta_{jl}) \Lambda_{(m)kl}^e \dot{\theta} \\ &= (\lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + 2\mu \delta_{ik} \delta_{jl}) (D_{(m)kl}^e - \Lambda_{(m)kl}^e \dot{\theta}) \dots \dots \dots (E.10) \end{aligned}$$

最後に、上式 (E.10) を現配置へ回転し、直接表示すれば、式 (5.34) が得られる。

E.2 等方性弾性係数の成分

弾性変形速度テンソル D^e の対称性を考慮した場合、等方性弾性係数は式 (5.38) に示されるように、その対称性から 21 成分に制限される。(6 × 6) のマトリックス表示にすると、次のようになる。

$$[C^e] = \begin{bmatrix} C_{1111}^e & C_{1122}^e & C_{1133}^e & C_{1112}^e & C_{1123}^e & C_{1131}^e \\ & C_{2222}^e & C_{2233}^e & C_{2212}^e & C_{2223}^e & C_{2231}^e \\ & & C_{3333}^e & C_{3312}^e & C_{3323}^e & C_{3331}^e \\ & & & C_{1212}^e & C_{1223}^e & C_{1231}^e \\ & \text{Sym.} & & & C_{2323}^e & C_{2331}^e \\ & & & & & C_{3131}^e \end{bmatrix} \dots \dots \dots (E.11)$$

さらに、式 (5.37) を代入すれば

$$[C^e] = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ & & & \mu & 0 & 0 \\ & \text{Sym.} & & & \mu & 0 \\ & & & & & \mu \end{bmatrix} \dots \dots \dots (E.12)$$

のように、独立な 3 成分 $\lambda + 2\mu$ 、 λ および μ のみで決定される。

E.3 異方性係数テンソル

本文中では 5.10 節で定義している異方性変数テンソル H を式 (5.47) へそのまま代入することで異方性弾性構成式に反映させているが、このモデルを用いて FEM 解析を行うと、図 7.31 の解析結果に見られるように軸方向の弾性率の増加分と幅方向の弾性率の減少分がほぼ等しいという結果が得られる。しかしながら、PMMA フィルムに対する実験結果によれば、配向に対して垂直方向の弾性率の減少分よりも配向方向の増加分の方が大きいことがわかっている [補足 G.3]。このような軸方向と幅方向に現れる変形誘起異方性の度合の違いを表現するためには、本モデルを次のように拡張すればよいと考えられる。

異方性変数テンソル \mathbf{H} が 2 階のテンソル χ による写像を受け、次式のように $\hat{\mathbf{H}}$ に変換されることを考える。

$$\hat{\mathbf{H}} \equiv \chi \mathbf{H} \dots \dots \dots \quad (\text{E.13})$$

ここで、 χ は分子鎖配向状態を表すテンソル \mathbf{H} を弾性異方性状態を表すテンソル $\hat{\mathbf{H}}$ へ変換するための材料定数としての役割をもつテンソルであり、すべり系の配向方向が x'_1 軸に一致するような x'_i 系でその成分を行列表示すれば、次のように対角行列 $[\chi^d]$ となる。

$$[\chi^d] = \begin{bmatrix} \chi_{11}^d & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{22}^d & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{33}^d \end{bmatrix} \dots \dots \dots \quad (\text{E.14})$$

よって、式 (E.13) を x'_i 系において行列表示すれば

$$[\hat{\mathbf{H}}^d] \equiv [\chi^d][\mathbf{H}^d]$$

$$= \begin{bmatrix} \chi_{11}^d & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{22}^d & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{33}^d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} H_{11}^d & 0 & 0 \\ 0 & H_{22}^d & 0 \\ 0 & 0 & H_{33}^d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \chi_{11}^d H_{11}^d & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{22}^d H_{22}^d & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{33}^d H_{33}^d \end{bmatrix} \dots \dots \dots \quad (\text{E.15})$$

となる。このように $\hat{\mathbf{H}}$ を定義し、 $\hat{\mathbf{H}}$ を \mathbf{H} の代わりに式 (5.47) へ導入し、それを式 (5.46) に代入すれば、式 (5.39) で定義した弾性異方性を表す 4 階のテンソル $\bar{\mathbf{C}}$ が $\hat{\mathbf{H}}$ によって

$$\bar{\mathbf{C}} = \bar{\mathbf{C}}(\hat{\mathbf{H}}) \dots \dots \dots \quad (\text{E.16})$$

と表されることになる。式 (E.15) における異方性係数テンソル χ の 3 つの成分 χ_{11}^d 、 χ_{22}^d および χ_{33}^d の値を実験から同定することにより、軸方向と幅方向に現れる変形誘起異方性の度合の違いを表現することができると考えられる。

E.4 4 階のテンソルの Mandel-Kratochvil 速度の導出

補足 C.1 では、2 階のテンソルの Mandel-Kratochvil 速度を導出したが、ここでは任意の 4 階のテンソル \mathbf{A} の Mandel-Kratochvil 速度を導出する。4 階のテンソル \mathbf{A} に関する $A_{(m)ijkl} = R_{mi}^* R_{nj}^* R_{pk}^* R_{ql}^* A_{mnpq}$ の変換から、第 2 中間配置 $\beta_{(m)}$ における $A_{(m)}$ の共回転速度は次式ようになる。

$$\begin{aligned} \dot{A}_{(m)ijkl} &= \dot{R}_{mi}^* R_{nj}^* R_{pk}^* R_{ql}^* A_{mnpq} + R_{mi}^* \dot{R}_{nj}^* R_{pk}^* R_{ql}^* A_{mnpq} \\ &\quad + R_{mi}^* R_{nj}^* \dot{R}_{pk}^* R_{ql}^* A_{mnpq} + R_{mi}^* R_{nj}^* R_{pk}^* \dot{R}_{ql}^* A_{mnpq} + R_{mi}^* R_{nj}^* R_{pk}^* R_{ql}^* \dot{A}_{mnpq} \\ &= R_{mi}^* R_{nj}^* R_{pk}^* R_{ql}^* (\dot{R}_{mr}^* \dot{R}_{sr}^* A_{snpq} + \dot{R}_{nr}^* \dot{R}_{sr}^* A_{mspq} + \dot{R}_{pr}^* \dot{R}_{sr}^* A_{mnsq} + \dot{R}_{qr}^* \dot{R}_{sr}^* A_{mnpq} + \dot{A}_{mnpq}) \\ &= R_{mi}^* R_{nj}^* R_{pk}^* R_{ql}^* (W_{sm}^* A_{snpq} + W_{sn}^* A_{mspq} + W_{sp}^* A_{mnsq} + W_{sq}^* A_{mnpq} + \dot{A}_{mnpq}) \\ &= R_{mi}^* R_{nj}^* R_{pk}^* R_{ql}^* \overset{\nabla}{A}_{mnpq} \dots \dots \dots \quad (\text{E.17}) \end{aligned}$$

ここで、 $\mathbf{W}^* \equiv \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T}$ である。したがって、4 階のテンソル \mathbf{A} の共回転速度 (Mandel-Kratochvil 速度) は次のように定義される。

$$\overset{\nabla}{A}_{ijkl} \equiv \dot{A}_{ijkl} + A_{mjkl} W_{mi}^* + A_{imkl} W_{mj}^* + A_{ijml} W_{mk}^* + A_{ijkm} W_{ml}^* \dots \dots \dots \quad (\text{E.18})$$

E.5 分子鎖網目理論における背応力の構成式

ここでは、ポリマ特有のひずみ軟化後の後続再硬化現象を再現するために分子鎖網目理論に基づいて Arruda-Boyce⁽³⁵⁾ により提案された背応力の構成式を紹介する。また、背応力の構成式を本分子鎖塑性モデルに適用する際の手法についても述べる。さらに、せん断変形時の大変形域における分子鎖の絡み点数変化を許容した田中ら⁽¹⁶⁾、Tomita-Tanaka⁽³⁹⁾ および Tomita ら⁽⁴⁰⁾ による非アフィンモデルを紹介する。

E.5.1 背応力の構成式

非晶性ポリマは引張変形を加えると著しい変形誘起異方性を示す。すなわち、初期降伏後くびれが形成され、伝ばすると、くびれが伝ばした部分は他の部分に比べて引張方向の強度が著しく増加するという現象が見られる。このくびれの伝ば現象は、現象論的には真応力-真ひずみ曲線におけるひずみ軟化後の後続再硬化として説明され、Hutchinson-Neale⁽²¹⁾ の現象論的構成式を用いたくびれ現象の研究以来数多くの研究がなされている。しかしながら、このようなポリマに特異な現象は、微視的には、高分子鎖の延伸方向への配向による分子鎖網目構造の変化、すなわち配向硬化が原因となっており、これを再現するために分子鎖の回転や配向などの微視的な内部構造変化を反映できる構成式の定式化が必要不可欠となる。これに対し分子鎖の挙動を対象とした研究の歴史は古く、Kuhn-Grün⁽³²⁾ の Langevin 関数を用いた 1 本の分子鎖の変形挙動のモデル化までさかのぼることができる。その後、アフィンモデルを用いた 3 次元、3 鎖⁽³³⁾⁽³⁴⁾、8 鎖⁽³⁵⁾ モデルなどの分子鎖網目理論が提案され、現在では単軸引張りおよび圧縮、等二軸引張り、純粋せん断における変形応答を正確に再現できる 8 鎖モデルが最もよく用いられる。そこで本項では、分子鎖網目理論および Arruda-Boyce⁽³⁵⁾ によって提案された 8 鎖モデルについてその概要を以下に紹介し、背応力の構成式の定式化について説明する。

分子鎖網目理論では、ポリマの微視的構造を考慮するにあたり、通常図 2.2 に示すような簡単化した分子鎖網目モデルが用いられる。すなわち、図 2.2(a) のポリマは同図 (b) に示すような多数の分子鎖で構成され、同図 (c) のように分子鎖の絡み点を架橋点とみなした分子鎖網目構造をなしているものとする。1 本の分子鎖は同図 (c) における 2 つの絡み点によって定義され、この分子鎖は同図 (d) に示すようないくつかのモノマからなる複数のセグメントによって構成される。Haward-Thackray⁽⁹⁵⁾ は、このようなポリマが非弾性的に変形するためには、2 つの変形抵抗に打ち勝つ外力が与えられなくてはならないことを示している。つまり、ポリマが降伏する前に、分子鎖の回転に対する抵抗を上回る力が負荷されなくてはならないこと、ならびにさらなる変形に対して、分子鎖の配向に伴う形態エントロピーの低下がもたらす内部抵抗の増加、すなわち配向抵抗を上回る外力が加わらなくてはならないことを示している。そして特に後者に関し、Kuhn-Grün により 1 本の分子鎖に対して導出された、分子鎖に加わる応力 σ_{ch} と伸び λ_S の関係式

$$\sigma_{ch} = k_B \theta \sqrt{N} \lambda_S L^{-1} \left(\frac{\lambda_S}{\sqrt{N}} \right) \dots \dots \dots (E.19)$$

を背応力として用いることを提案している。ここで、 N は 1 本の分子鎖中の平均的なセグメント数、 k_B は Boltzmann 定数である。また、関数 $L^{-1}(x)$ は次式で定義される Langevin 関数の逆関数である。

$$L(x) = \coth x - \frac{1}{x} \dots \dots \dots (E.20)$$

さらに、図 2.2(c) に示す分子鎖網目構造は通常、図 2.3 に示すような、3 鎖あるいは 8 鎖モデルに置き換えて解析が行われており、単位体積あたり相互干渉がない n 本の分子鎖を含むポリマに対して式 (E.19) を適用することにより、3 鎖モデルにおける応力テンソルの主値 $\sigma_i^{(3ch)}$ および 8 鎖モデルにおける応力テンソルの主

値 $\sigma_i^{(8ch)}$ はそれぞれ次のように表される．

$$\sigma_i^{(3ch)} = \frac{1}{3} C^R \sqrt{N} \lambda_i L^{-1} \left(\frac{\lambda_i}{\sqrt{N}} \right) - \sigma_m \dots \dots \dots (E.21)$$

$$\sigma_i^{(8ch)} = \frac{1}{3} C^R \sqrt{N} \frac{\lambda_i}{\lambda_m} L^{-1} \left(\frac{\lambda_i}{\sqrt{N}} \right) - \sigma_m \dots \dots \dots (E.22)$$

ここで， λ_i は主ストレッチ， $\lambda_m \equiv \sqrt{(\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \lambda_3^2)/3}$ ， $C^R \equiv nk_B\theta$ ， σ_m は静水圧応力である．さらに Arruda-Boyce⁽³⁵⁾ は，分子鎖同士の絡み点数は変形中も変化しないとするアフィン変形を仮定し，分子鎖網目の配向に対する抵抗は塑性流れを駆動しない背応力として作用すると考え，式 (E.22) で表される 8 鎖モデルにおいて主ストレッチ λ_i を左非弾性ストレッチテンソル V^i の主値 V_i^i で置き換え，背応力テンソル $B_{(M)}$ の主値 $B_{(M)i}$ を次式で評価している．

$$B_{(M)i} = \frac{1}{3} C^R \sqrt{N} \frac{V_i^{i^2} - \lambda_{ch}^2}{\lambda_{ch}} L^{-1} \left(\frac{\lambda_{ch}}{\sqrt{N}} \right) \dots \dots \dots (E.23)$$

ここで， λ_{ch} は $\lambda_{ch} \equiv \sqrt{(V_1^2 + V_2^2 + V_3^2)/3}$ と表される．また，逆 Langevin 関数は引数が 1 に近づくとき急激に増大する関数であるから，式 (E.23) において λ_{ch} が分子鎖の限界ストレッチ \sqrt{N} に近づくとき，背応力 $B_{(M)}$ の主値は急激に増加する．これにより配向硬化が表現される．

なお，式 (E.23) における逆 Langevin 関数 $L^{-1}(x)$ の近似計算については，補足 E.5.4 を参照されたい．

E.5.2 背応力に対する分解せん断応力

式 (E.23) で表される 8 鎖モデルにおける背応力の構成式を用いた引張・圧縮変形に関する数値シミュレーションは，実験結果をよく再現することが知られている．本理論では，有効分解せん断応力 $\hat{\tau}^{(\alpha)} = \tau^{(\alpha)} - \tau_b^{(\alpha)}$ を求める際に必要となる分解せん断背応力 $\tau_b^{(\alpha)}$ の構成式として，Arruda-Boyce により 8 鎖モデルに対して定式化された式 (E.23) を適用している．すなわち，式 (E.23) をすべり系ごとに記述すると，

$$B_{(M)i}^{(\alpha)} = \frac{1}{3} C^R \sqrt{N} \frac{V_i^{i(\alpha)^2} - \lambda_{ch}^{(\alpha)^2}}{\lambda_{ch}^{(\alpha)}} L^{-1} \left(\frac{\lambda_{ch}^{(\alpha)}}{\sqrt{N}} \right) \dots \dots \dots (E.24)$$

となる．ここで，背応力の主方向 $\mathbf{b}_{(M)i}^{(\alpha)}$ は，近似的に左非弾性ストレッチの主方向 $\mathbf{v}_i^{i(\alpha)}$ に一致すると仮定すると，背応力 $B_{(M)}$ は以下のような固有値と固有ベクトルの関係⁽⁹⁶⁾ から得られる．

$$\begin{aligned} [B_{(M)}^{(\alpha)}] &= [\{\mathbf{b}_{(M)1}^{(\alpha)}\}\{\mathbf{b}_{(M)2}^{(\alpha)}\}\{\mathbf{b}_{(M)3}^{(\alpha)}\}] \text{diag}[B_{(M)i}^{(\alpha)}] [\{\mathbf{b}_{(M)1}^{(\alpha)}\}\{\mathbf{b}_{(M)2}^{(\alpha)}\}\{\mathbf{b}_{(M)3}^{(\alpha)}\}]^T \\ &= [\{\mathbf{v}_1^{i(\alpha)}\}\{\mathbf{v}_2^{i(\alpha)}\}\{\mathbf{v}_3^{i(\alpha)}\}] \text{diag}[B_{(M)i}^{(\alpha)}] [\{\mathbf{v}_1^{i(\alpha)}\}\{\mathbf{v}_2^{i(\alpha)}\}\{\mathbf{v}_3^{i(\alpha)}\}]^T \dots \dots \dots (E.25) \end{aligned}$$

したがって，現配置における背応力は微小弾性変形の仮定を用いて $B^{(\alpha)} \approx \mathbf{R}^* B_{(M)}^{(\alpha)} \mathbf{R}^{*T}$ により求められ，背応力に対する分解せん断成分 $\tau_b^{(\alpha)}$ は以下のように計算される．

$$\tau_b^{(\alpha)} = \mathbf{B}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \dots \dots \dots (E.26)$$

これより，分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ については弾粘塑性構成式から得られる応力 \mathbf{T} を用いて $\tau^{(\alpha)} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)}$ のように計算し，一方，分解せん断背応力 $\tau_b^{(\alpha)}$ については式 (E.26) を用いて計算することにより，それらの差 $\hat{\tau}^{(\alpha)} = \tau^{(\alpha)} - \tau_b^{(\alpha)}$ から有効分解せん断応力 $\hat{\tau}^{(\alpha)}$ を求めることが可能となる．

E.5.3 非アフィンモデルと絡み点数変化の関係式

補足 E.5.1 で述べたアフィンモデルは、単軸変形および純粋せん断変形における応答を正確に再現することができる。しかし、単純せん断問題において、大変形時に応力値を実験値よりも大きく評価してしまうことが Wu-Van der Giessen⁽³⁶⁾ によって指摘されている。このような実験結果とシミュレーション結果との不一致の要因として、アフィンモデルでは絡み点数を一定と仮定している点が挙げられる。事実、分子鎖の絡み点数が変形ならびに温度によって変化することが Raha-Bowden⁽⁹⁷⁾ や Botto ら⁽⁹⁸⁾ によって実験的に確認されている。すなわち、絡み点数の減少が 1 本の分子鎖に含まれるセグメント数を増加させ、その結果限界ストレッチが増加し配向硬化の発生が抑制される。すると、くびれやせん断帯の伝ば挙動が大きく変化することになる。そこで田中ら⁽¹⁶⁾、Tomita-Tanaka⁽³⁹⁾ および Tomita ら⁽⁴⁰⁾ は、先に述べたようなシミュレーション上の問題点を解決して実験結果をより精密に再現するために、絡み点数の変化を許容した非アフィンモデルを提案しており、その詳細は以下のようなものである。

図 E.1 は分子鎖網目理論における 8 鎖ブロックが 1 辺に b 個並んだ立方体であり、これによりポリマの微小要素を表している。図 E.1 より、立方体中の分子鎖数 n および絡み点数 m はそれぞれ $n = 8b^3$ 、 $m = (b+1)^3 + b^3$ と求められ、 b が十分大きいときには m と n の関係は次式のように表される。

$$m = \frac{n}{4} \dots\dots\dots (E.27)$$

次に、立方体中の分子鎖のセグメント総数 N_A は変化しないとの仮定をすれば、1 本の分子鎖中の平均的なセグメント数 N と分子鎖数 n を用いて

$$N_A = nN \dots\dots\dots (E.28)$$

と表すことができる。したがって、式 (E.27) および式 (E.28) を考慮すれば、1 本の分子鎖中のセグメント数は

$$N = \frac{N_A}{n} = \frac{N_A}{4m} \dots\dots\dots (E.29)$$

と表され、また分子鎖の限界ストレッチ \sqrt{N} が 1 以下になり得ないことから、 $N > 1$ より次式が成り立つ。

$$m < \frac{N_A}{4} = m_{ult} \dots\dots\dots (E.30)$$

ここで、 m_{ult} は絡み点数の極限值を表す。式 (E.29) より絡み点数の増加は分子鎖 1 本あたりのセグメント数 N を減少させ、伸長可能性の低下と材料の剛性の相対的な増加を誘発する。一方、絡み点数の減少は伸長可能性の増加と剛性の低下となって現れる。

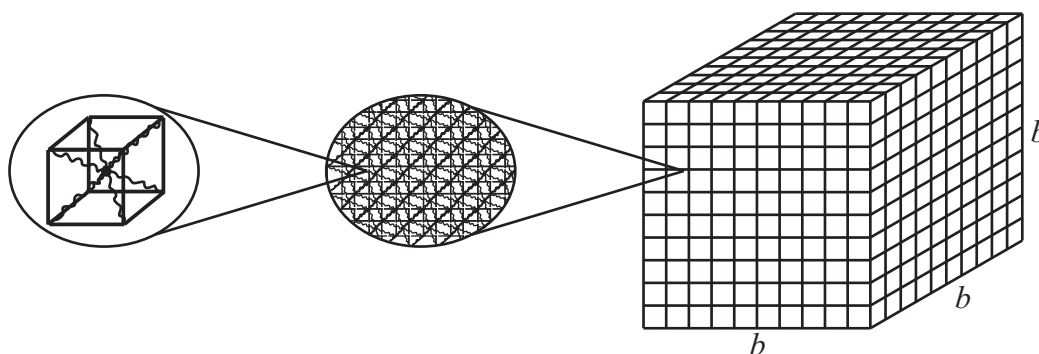


Fig. E.1 Minute element of glassy polymer⁽⁴¹⁾

田中ら⁽¹⁶⁾、Tomita-Tanaka⁽³⁹⁾ および Tomita ら⁽⁴⁰⁾ は、変形および温度変化によって絡み点数が変化すること、ならびに主ストレッチ方向が大きく回転する変形に対してアフィンモデルによるシミュレーション結果と実験結果との対応がよいことから、絡み点数 m が温度 θ ならびにポリマの局所的な変形状態 ξ によって変化すると考え、絡み点数を次式のように表している。

$$m(\xi, \theta) = m_0 f_\theta(\theta) f_\xi(\xi) \dots \dots \dots (E.31)$$

ここで、 ξ は任意の変形量を表す測度、 m_0 は初期の温度 $\theta = \theta_0$ 、変形状態 $\xi = 1$ の場合の絡み点数を表し、関数 $f_\theta(\theta)$ および $f_\xi(\xi)$ はそれぞれ温度ならびに局所的な変形が絡み点数の変化に及ぼす影響を表した関数である。

アフィンモデルを用いた場合の単純せん断問題における大変形時の応力値を過大評価してしまう問題を解決するために、田中らは引張りや圧縮などの単軸変形と単純せん断変形とで大きく異なる値となる測度を選んでいる。すなわち、材料内に埋め込まれた直交枠の直交性からのゆがみ量を ξ に選び、次式のように表している。

$$\xi = \left(\frac{\mathbf{G}_1}{\|\mathbf{G}_1\|} \times \frac{\mathbf{G}_2}{\|\mathbf{G}_2\|} \right) \cdot \frac{\mathbf{G}_3}{\|\mathbf{G}_3\|} \dots \dots \dots (E.32)$$

ここで、 \mathbf{G}_i は $\mathbf{G}_i \equiv \mathbf{F} \mathbf{g}_i$ と表され、 \mathbf{F} は変形こう配であり、FEM 解析では各節点において求められる変位こう配 $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}_{(i)}}$ を用いて次式のように計算することができる。

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}_{(i)}} \dots \dots \dots (E.33)$$

また、 \mathbf{g}_i は非弾性変形開始時に材料の主ストレッチ方向に埋め込んだ基底ベクトルである。このゆがみ量 ξ は、主ストレッチ方向が大きく変化しない変形ではほぼ 1 となり、単純せん断変形では変形の増加とともに 1 から減少していき、変形が大きくなるとその値の変化が緩やかになる。田中らは、ゆがみ量 ξ が小さくなると絡み点数 m が減少し、材料の剛性が低下するものと仮定して式 (E.31) における $f_\xi(\xi)$ を次式のように表している。

$$f_\xi(\xi) = \exp[-c(1 - \xi)] \dots \dots \dots (E.34)$$

ここで、 c は定数である。

一方、ポリマは、温度上昇に伴い分子鎖の運動が活性化されると分子鎖の移動やすり抜けが起りやすくなり、その結果絡み点数が減少し、材料の伸長可能性の向上と剛性の低下を誘発する。Raha-Bowden⁽⁹⁷⁾ は、分子鎖の絡み点数の熱解離エネルギーは Boltzmann 分布に従うと仮定し、複屈折を用いた実験結果に基づき分子鎖数 n と温度の関係を次式で表現している。

$$n = d' + e'' \left[1 - \exp \left\{ -\frac{q_a}{R\theta} \right\} \right] \dots \dots \dots (E.35)$$

ここで、 d' は熱の影響を受けない絡み点数に関連した分子鎖数、 e'' は定数、 q_a は絡み点の熱解離エネルギー、 R は気体定数である。田中らは、式 (E.27) で表される分子鎖数と絡み点数との関係を考慮し、式 (E.31) における温度の関数 $f_\theta(\theta)$ を $\theta = \theta_0$ のとき $f_\theta(\theta) = 1$ となるよう次式のように表している。

$$f_\theta(\theta) = 1 + d \left[\exp \left\{ -\frac{q_a}{R\theta_0} \right\} - \exp \left\{ -\frac{q_a}{R\theta} \right\} \right] \dots \dots \dots (E.36)$$

ここで、 d は定数である。

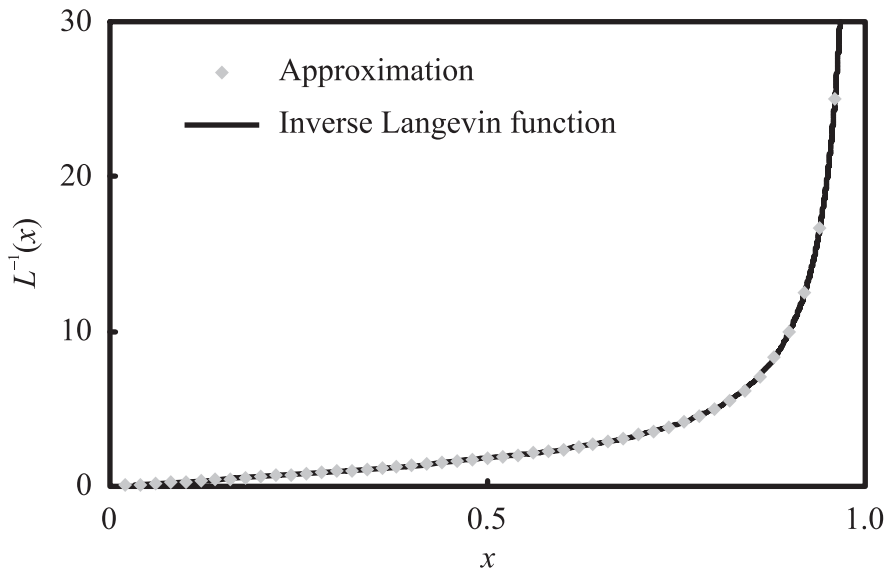


Fig. E.2 Approximation of inverse Langevin function

E.5.4 逆 Langevin 関数の近似計算

ここでは、背応力の構成式に用いられている逆 Langevin 関数の近似計算について述べる．
 逆 Langevin 関数は、Langevin 関数 $L(x)$ の逆関数である．ここに再度 Langevin 関数を示す．

$$L(x) = \coth x - \frac{1}{x} \dots\dots\dots (E.37)$$

この逆関数を具体的に数式で書き表すことはできない．そこで、Langevin 関数を表す曲線から独立変数と従属変数を逆転させてプロットすることで逆 Langevin 関数を表す曲線の理論解を求め、それに対して次式のように近似を行った．

$$L^{-1}(x) = \left\{ \begin{array}{ll} \begin{array}{l} 20.61x^6 - 26.39x^5 + 16.02x^4 - 2.753x^3 \\ \quad + 0.6480x^2 + 2.959x + 0.0009000 \end{array} & (0 < x \leq 0.6) \\ \begin{array}{l} 27.020x^6 - 114.800x^5 + 203.500x^4 - 192.400x^3 \\ \quad + 102.300x^2 - 28.990x + 3.421 \end{array} & (0.6 < x \leq 0.875) \\ \frac{1.000}{1.000 - x} & (0.875 < x < 1.0) \end{array} \right\} \dots\dots\dots (E.38)$$

このような近似式で表される逆 Langevin 関数の近似解と、Langevin 関数から独立変数と従属変数を逆転させることで得た逆 Langevin 関数の理論解をプロットして得たものが図 E.2 である．これを見ると、2 つの曲線はよく一致しており、逆 Langevin 関数として近似式 (E.38) を用いることができるといえる．

E.6 異方性変数テンソルを用いた配向強度パラメータの定義

本解析では、5.9 節で定義した配向強度パラメータ θ を用いてポリマ内部の配向状態を可視化した．一方、5.10 節で定義した異方性変数テンソル H を用いても配向強度パラメータを定義することが可能である．ここでは、異方性変数テンソル H を用いた配向強度パラメータの定義方法について触れる．

分子鎖すべり系が全て等しい方位をもち、最も配向が強くなっている場合、式 (5.87) および式 (5.88) で表された分子鎖基底の配向方向およびその垂直方向への射影の平均値はそれぞれ $\bar{\sigma}_1 = 1$ および $\bar{\sigma}_2 = 0$ となる。これらを式 (5.90) へ代入すると

$$[\mathbf{H}^d] = \begin{bmatrix} \frac{\pi}{2} - 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \dots\dots\dots (E.39)$$

となる。ここで、 $[\mathbf{H}^d]$ の大きさを求めれば最も配向が強い場合の異方性変数テンソルの大きさを求めることができ、これを $\|\mathbf{H}_{\max}\|$ とおくと

$$\|\mathbf{H}_{\max}\| = \sqrt{\left(\frac{\pi}{2} - 1\right)^2 + (-1)^2} \dots\dots\dots (E.40)$$

となる。分子鎖すべり系が等間隔に配置され、最も等方的となっている場合には $\|\mathbf{H}\| = 0$ となることから、配向強度パラメータ θ^H を

$$\theta^H \equiv \frac{\|\mathbf{H}\|}{\|\mathbf{H}_{\max}\|} \dots\dots\dots (E.41)$$

と定義すれば、全てのすべり系が同じ方位をもつ場合は $\theta^H = 1$ 、等方的に配置された場合は $\theta^H = 0$ となり、 θ^H を用いても θ を用いた場合と同様に配向の強さを表すことができる。

補足 F

第 6 章の補足

F.1 非弾性応答則における内部変数の検討

式 (6.4) における内部変数 a の発展式を Hasan-Boyce⁽⁶⁴⁾ は次式のように与えている .

$$\dot{a} = (a - a_{\text{eq}}) \exp[-\zeta \exp(-\zeta \gamma^p)] \varpi \dots \dots \dots \quad (\text{F.1})$$

しかし, a は時間進展に対する減少量であるため, その発展式 \dot{a} は負の値をとらなければならない . そこで, 指数関数の値は常に正であることを考えれば, 必ず $(a - a_{\text{eq}}) < 0$ とならなくてはならない . それに対し, a の初期値 $a(0)$ は $a(0) = 1.06 \text{ eV}$, また平衡値 a_{eq} は $a_{\text{eq}} = 0.945 \text{ eV}$ である . したがって, $(a - a_{\text{eq}}) > 0$ となり, これに矛盾する . そこで, 本件に関しては参照論文中のミスタイピングであると判断し, 本研究では求める \dot{a} の値に負の符号を付して常に負となるよう修正している .

F.2 Argon による硬化則への接線係数法の適用

ここでは, Argon 硬化則を用いる場合について, 6.5 節と同様, 接線係数法による補間を行う . また, ここでも有効分解せん断応力 $\hat{\tau}^{(\alpha)}$ を分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ に置き換えて式展開を行う .

まず, 第 2 章で示した Argon 硬化則 (2.3) をすべり系ごとに記述すれば, 次のようになる .

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_0 \text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \exp \left[-\frac{A \tilde{s}^{(\alpha)}}{\theta} \left\{ 1 - \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\tilde{s}^{(\alpha)}} \right|^{\frac{5}{6}} \right\} \right] \dots \dots \dots \quad (\text{F.2})$$

ここで, $\tilde{s}^{(\alpha)}$ は流れ応力に相当する量であり, 静水圧応力の影響を考慮して $\tilde{s}^{(\alpha)} \equiv s^{(\alpha)} - \alpha_p (\text{tr} \mathbf{T})/3$ で表され, $s^{(\alpha)}$ はせん断強度, α_p は圧力係数である . また, せん断強度 $s^{(\alpha)}$ の発展式は

$$\dot{s}^{(\alpha)} = h \left(1 - \frac{s^{(\alpha)}}{s_{ss}} \right) \sum_{\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \dots \dots \dots \quad (\text{F.3})$$

で与えられる⁽³⁴⁾ . ただし, h は正の定数, s_{ss} は $s^{(\alpha)}$ の平衡値である . さらに, 弾粘塑性構成式 (5.69) を用いれば,

$$\text{tr} \dot{\mathbf{T}} = \text{tr} \overset{\vee}{\mathbf{T}} = \mathbf{I} \cdot \left\{ \mathbf{C}^{eA} : \left(\mathbf{D} - \sum_{\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \mathbf{P}_S^{(\beta)} \right) + \chi \mathbf{\Gamma} : \mathbf{T} \right\} \dots \dots \dots \quad (\text{F.4})$$

と表せることより, 次式を得る .

$$\dot{s}^{(\alpha)} = h \left(1 - \frac{s^{(\alpha)}}{s_{ss}} \right) \sum_{\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| - \frac{1}{3} \alpha_p \mathbf{I} \cdot \left\{ \mathbf{C}^{eA} : \left(\mathbf{D} - \sum_{\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \mathbf{P}_S^{(\beta)} \right) + \chi \mathbf{\Gamma} : \mathbf{T} \right\} \dots \dots \dots \quad (\text{F.5})$$

ただし, 環境温度を一定として $\Lambda^{eA} \dot{\theta}$ の項は無視している.

時刻 $t + \Delta t$ における非弾性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t + \Delta t)$ を時刻 t において Taylor 展開すると

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t + \Delta t) = \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t \Delta \tau^{(\alpha)} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \bar{s}^{(\alpha)}} \right)_t \Delta \bar{s}^{(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (\text{F.6})$$

となる. 式 (F.6) における偏微分の項を計算すると,

$$\left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t = \text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \frac{5}{6} \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) A}{\theta} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\bar{s}^{(\alpha)}} \right|^{-\frac{1}{6}} \dots \dots \dots \quad (\text{F.7})$$

$$\left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \bar{s}^{(\alpha)}} \right)_t = \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) A}{\theta} \left(-1 + \frac{1}{6} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\bar{s}^{(\alpha)}} \right|^{\frac{5}{6}} \right) \dots \dots \dots \quad (\text{F.8})$$

となる.

次に式 (F.7) および式 (F.8) を式 (F.6) に代入し, 式 (6.25) に導入することにより

$$\begin{aligned} \Delta \gamma^{(\alpha)} &= \Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \Delta t \vartheta \left[\left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t \Delta \tau^{(\alpha)} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \bar{s}^{(\alpha)}} \right)_t \Delta \bar{s}^{(\alpha)} \right] \\ &= \Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \Delta t \vartheta \left[\text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \frac{5}{6} \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) A}{\theta} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\bar{s}^{(\alpha)}} \right|^{-\frac{1}{6}} \Delta \tau^{(\alpha)} + \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) A}{\theta} \left(-1 + \frac{1}{6} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\bar{s}^{(\alpha)}} \right|^{\frac{5}{6}} \right) \Delta \bar{s}^{(\alpha)} \right] \dots \dots \dots \quad (\text{F.9}) \end{aligned}$$

ここで, $\Delta \tau^{(\alpha)} = \dot{\tau}^{(\alpha)} \Delta t$ および $\Delta \bar{s}^{(\alpha)} = \dot{\bar{s}}^{(\alpha)} \Delta t$ という関係を用いれば以下のように表せる.

$$\Delta \gamma^{(\alpha)} = \Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \Delta t \vartheta \left[\text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \frac{5}{6} \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) A}{\theta} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\bar{s}^{(\alpha)}} \right|^{-\frac{1}{6}} \dot{\tau}^{(\alpha)} \Delta t + \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) A}{\theta} \left(-1 + \frac{1}{6} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\bar{s}^{(\alpha)}} \right|^{\frac{5}{6}} \right) \dot{\bar{s}}^{(\alpha)} \Delta t \right] \dots \dots \dots \quad (\text{F.10})$$

式 (6.29) および式 (F.5) を式 (F.10) に代入すれば以下のような式が得られる.

$$\begin{aligned} \Delta \gamma^{(\alpha)} &= \Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \Delta t \vartheta \left[\text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \frac{5}{6} \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) A}{\theta} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\bar{s}^{(\alpha)}} \right|^{-\frac{1}{6}} \left\{ \mathbf{Y}^{(\alpha)} \cdot \left(\mathbf{D} - \sum_{\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \mathbf{P}_S^{(\beta)} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (\chi \boldsymbol{\Gamma} : \mathbf{T}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} - \left(\sum_{\beta \neq \alpha} \dot{\gamma}^{(\beta)} \boldsymbol{\beta}^{(\beta)} \right) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \right\} \Delta t \right. \\ &\quad \left. + \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) A}{\theta} \left(-1 + \frac{1}{6} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\bar{s}^{(\alpha)}} \right|^{\frac{5}{6}} \right) \left\{ h \left(1 - \frac{s^{(\alpha)}}{s_{ss}} \right) \sum_{\beta} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{1}{3} \alpha_p \left[(\mathbf{C}^{eA} : \mathbf{I}) \cdot \mathbf{D} - \sum_{\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} (\text{tr } \mathbf{Y}^{(\beta)}) + \chi \mathbf{I} \cdot (\boldsymbol{\Gamma} : \mathbf{T}) \right] \right\} \Delta t \right] \dots \dots \dots \quad (\text{F.11}) \end{aligned}$$

ここで, $\dot{\gamma}^{(\alpha)} \Delta t = \Delta \gamma^{(\alpha)}$ を考慮して, $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ に関する項を左辺へ移項すると,

$$\begin{aligned} \sum_{\beta} N_{\alpha\beta} \Delta \gamma^{(\beta)} &= \Delta t \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \mathbf{Z}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{D} + \Delta t \vartheta \text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \frac{5}{6} \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) A}{\theta} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\bar{s}^{(\alpha)}} \right|^{-\frac{1}{6}} (\chi \boldsymbol{\Gamma} : \mathbf{T}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \right. \\ &\quad \left. - \Delta t \vartheta \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) A}{\theta} \left(-1 + \frac{1}{6} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\bar{s}^{(\alpha)}} \right|^{\frac{5}{6}} \right) \frac{1}{3} \alpha_p \chi \mathbf{I} \cdot (\boldsymbol{\Gamma} : \mathbf{T}) \right] \dots \dots \dots \quad (\text{F.12}) \end{aligned}$$

ただし,

$$N_{\alpha\beta} \equiv \delta_{\alpha\beta} + \Delta t \vartheta \left[\operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \frac{5}{6} \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) A}{\theta} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\bar{s}^{(\alpha)}} \right|^{-\frac{1}{6}} \left\{ (\mathbf{Y}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{P}_S^{(\beta)}) + (1 - \delta_{\alpha\beta}) \mathbf{B}^{(\beta)} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \right\} \right. \\ \left. - \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) A}{\theta} \left(-1 + \frac{1}{6} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\bar{s}^{(\alpha)}} \right|^{\frac{5}{6}} \right) \left\{ \operatorname{sgn}(\tau^{(\beta)}) h \left(1 - \frac{s^{(\alpha)}}{s_{ss}} \right) + \frac{1}{3} \alpha_p (\operatorname{tr} \mathbf{Y}^{(\beta)}) \right\} \right] \dots \dots \dots \quad (\text{F.13})$$

$$\mathbf{Z}^{(\alpha)} \equiv \Delta t \vartheta \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \frac{5}{6} \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) A}{\theta} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\bar{s}^{(\alpha)}} \right|^{-\frac{1}{6}} \mathbf{Y}^{(\alpha)} - \Delta t \vartheta \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) A}{\theta} \left(-1 + \frac{1}{6} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\bar{s}^{(\alpha)}} \right|^{\frac{5}{6}} \right) \frac{1}{3} \alpha_p (\mathbf{C}^{eA} : \mathbf{I}) \dots \dots \dots \quad (\text{F.14})$$

とおいた .

次に , 式 (F.12) を $\Delta\gamma^{(\alpha)}$ について解くために , $N_{\alpha\beta}$ の逆行列を $M_{\alpha\beta}$ として ,

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} \equiv \sum_{\beta} M_{\alpha\beta} \left[\dot{\gamma}^{(\beta)}(t) + \Delta t \vartheta \operatorname{sgn}(\tau^{(\beta)}) \frac{5}{6} \frac{\dot{\gamma}^{(\beta)}(t) A}{\theta} \left| \frac{\tau^{(\beta)}}{\bar{s}^{(\beta)}} \right|^{-\frac{1}{6}} (\chi \mathbf{\Gamma} : \mathbf{T}) \cdot \mathbf{P}_S^{(\beta)} \right. \\ \left. - \Delta t \vartheta \frac{\dot{\gamma}^{(\beta)}(t) A}{\theta} \left(-1 + \frac{1}{6} \left| \frac{\tau^{(\beta)}}{\bar{s}^{(\beta)}} \right|^{\frac{5}{6}} \right) \frac{1}{3} \alpha_p \chi \mathbf{I} : (\mathbf{\Gamma} : \mathbf{T}) \right] \dots \dots \dots \quad (\text{F.15})$$

$$\mathbf{Y}^{(\alpha)} \equiv \sum_{\beta} M_{\alpha\beta} \mathbf{Z}^{(\beta)} \dots \dots \dots \quad (\text{F.16})$$

とおくと , 式 (F.12) は以下のように表すことができる .

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = \Delta t (\dot{\gamma}^{(\alpha)} + \mathbf{Y}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{D}) \dots \dots \dots \quad (\text{F.17})$$

式 (F.17) の両辺を無限小の時間増分 Δt で割り $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ を求め , 弾粘塑性構成式 (5.77) に代入し , $\Lambda^{eA} \dot{\theta}$ の項を無視すれば , 次式のような接線係数表示の構成式が得られる .

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{\mathbf{T}} &= \mathbf{C}^{eA} : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{Q}^{(\alpha)} + \chi \mathbf{\Gamma} : \mathbf{T} \\ &= \mathbf{C}^{eA} : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{Q}^{(\alpha)} - \sum_{\alpha} (\mathbf{Y}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{D}) \mathbf{Q}^{(\alpha)} + \chi \mathbf{\Gamma} : \mathbf{T} \\ &= \mathbf{C}^{eA} : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{Q}^{(\alpha)} - \sum_{\alpha} (\mathbf{Q}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{Y}^{(\alpha)}) : \mathbf{D} + \chi \mathbf{\Gamma} : \mathbf{T} \\ &= \mathbf{C}^{tan} : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{Q}^{(\alpha)} + \chi \mathbf{\Gamma} : \mathbf{T} \dots \dots \dots \quad (\text{F.18}) \end{aligned}$$

また , 係数 \mathbf{C}^{tan} は次式で表される .

$$\mathbf{C}^{tan} \equiv \mathbf{C}^{eA} - \sum_{\alpha} (\mathbf{Q}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{Y}^{(\alpha)}) \dots \dots \dots \quad (\text{F.19})$$

F.3 分解せん断応力速度の導出

分解せん断応力はスカラー量であることを考慮すれば , $\tau^{(\alpha)} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)}$ の関係は第 2 中間配置における物理量を用いて

$$\tau^{(\alpha)} = \mathbf{T}_{(m)} \cdot \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)} = \mathbf{T}_{(m)} \cdot \mathbf{P}_{(m)}^{(\alpha)} = s_{(m)}^{(\alpha)} \cdot (\mathbf{T}_{(m)} \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)}) \dots \dots \dots \quad (\text{F.20})$$

のように書き直せる．式 (F.20) に物質時間微分を施せば

$$\dot{\tau}^{(\alpha)} = \dot{s}_{(m)}^{(\alpha)} \cdot (\mathbf{T}_{(m)} \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)}) + s_{(m)}^{(\alpha)} \cdot (\dot{\mathbf{T}}_{(m)} \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)}) + s_{(m)}^{(\alpha)} \cdot (\mathbf{T}_{(m)} \dot{\mathbf{m}}_{(m)}^{(\alpha)}) \dots \dots \dots \quad (\text{F.21})$$

となる．ここで，分子鎖基底ベクトルの配置変換則を表す式 (3.82) および式 (3.83) を物質時間微分すれば

$$\begin{aligned} \dot{s}_{(m)}^{(\alpha)} &= \dot{\hat{\mathbf{R}}}^{i(\alpha)} s_{(l)}^{(\alpha)} \\ &= \dot{\hat{\mathbf{R}}}^{i(\alpha)} \bar{\mathbf{R}}^{i(\alpha)T} s_{(m)}^{(\alpha)} \\ &= \left(\sum_{\beta \neq \alpha} \mathbf{W}_{(m)}^{i(\beta)} \right) s_{(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (\text{F.22}) \end{aligned}$$

$$\dot{\mathbf{m}}_{(m)}^{(\alpha)} = \left(\sum_{\beta \neq \alpha} \mathbf{W}_{(m)}^{i(\beta)} \right) \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (\text{F.23})$$

が得られる．ただし， $s_{(l)}^{(\alpha)} = \dot{\mathbf{m}}_{(l)}^{(\alpha)} = \mathbf{0}$ となることを考慮している．式 (F.22) および式 (F.23) を式 (F.21) に代入すると

$$\begin{aligned} \dot{\tau}^{(\alpha)} &= -s_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \left[\left(\sum_{\beta \neq \alpha} \mathbf{W}_{(m)}^{i(\beta)} \right) \mathbf{T}_{(m)} \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} \right] + s_{(m)}^{(\alpha)} \cdot (\dot{\mathbf{T}}_{(m)} \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)}) + s_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \left[\mathbf{T}_{(m)} \left(\sum_{\beta \neq \alpha} \mathbf{W}_{(m)}^{i(\beta)} \right) \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} \right] \\ &= s_{(m)}^{(\alpha)} \cdot \left[- \left(\sum_{\beta \neq \alpha} \mathbf{W}_{(m)}^{i(\beta)} \right) \mathbf{T}_{(m)} + \dot{\mathbf{T}}_{(m)} + \mathbf{T}_{(m)} \left(\sum_{\beta \neq \alpha} \mathbf{W}_{(m)}^{i(\beta)} \right) \right] \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} \\ &= \left[\dot{\mathbf{T}}_{(m)} - \left(\sum_{\beta \neq \alpha} \mathbf{W}_{(m)}^{i(\beta)} \right) \mathbf{T}_{(m)} + \mathbf{T}_{(m)} \left(\sum_{\beta \neq \alpha} \mathbf{W}_{(m)}^{i(\beta)} \right) \right] \cdot \mathbf{P}_{(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (\text{F.24}) \end{aligned}$$

となる．ここで，式 (F.24) の各量を現配置の量として記述すれば

$$\begin{aligned} \dot{\tau}^{(\alpha)} &= \left[\overset{\nabla}{\mathbf{T}} - \left(\sum_{\beta \neq \alpha} \mathbf{W}^{i(\beta)} \right) \mathbf{T} + \mathbf{T} \left(\sum_{\beta \neq \alpha} \mathbf{W}^{i(\beta)} \right) \right] \cdot \mathbf{P}^{(\alpha)} \\ &= \left(\overset{\nabla}{\mathbf{T}} - \sum_{\beta \neq \alpha} \dot{\gamma}^{(\beta)} \boldsymbol{\beta}^{(\beta)} \right) \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (\text{F.25}) \end{aligned}$$

のように分解せん断応力速度が求まる．

F.4 接線係数法を適用した弾性係数テンソルの非対称性

4 階の等方性弾性係数テンソル C^e は前後 2 つずつの指標を入れ替えることが可能であり， $C_{ijkl}^e = C_{klij}^e$ という対称性をもつ．一方，異方性弾性係数テンソル C^{eA} は式 (5.52) を見てもわかるように， $C_{ijkl}^{eA} \neq C_{klij}^{eA}$ であり，非対称テンソルである．さらに，式 (6.41) を見ると， $\Omega^{(\alpha)} \neq \Upsilon^{(\alpha)}$ であるため，接線係数法を適用した C^{tan} は等方性弾性構成式を用いた場合でもその対称性を失い， $C_{ijkl}^{tan} \neq C_{klij}^{tan}$ となる．そのため，式 (7.2) における右辺第 1 項のマトリックスは非対称になってしまう．したがって，接線係数法を適用した FEM 解析を行う場合には非対称ソルバを用いる必要がある．

補足 G

第 7 章の補足

G.1 連立 1 次方程式の解法

FEM 解析は最終的には大規模な連立 1 次方程式を解くことに帰着される。FEM における方程式の特徴は、非零成分が対角付近に集まる疎行列で記述されることである。解の精度を上げるためにより細かく多数の要素分割を用いるほどマトリクスのサイズが大きくなるため、実際の解析ではある限られたコンピュータ性能のもとでいかに大規模疎行列を解くかということが重要な課題となる。

従来から様々な連立 1 次方程式の解法が提案され使用されている。解法には大きく分けて、直接法と反復法があるが、本数値解析では、直接法の 1 つであるスカイライン法を導入している。スカイライン法はガウスの消去法を改良したものであり、比較的記憶要領を消費しないというメリットがある。

G.2 要素形状および要素数の選定根拠

本解析では分子鎖網目理論に基づく解析⁽¹⁶⁾と同様の要素分割 (crossed triangles 要素, $16 \times 40 \times 4 = 2560$ 個の要素) を行っている。参照した文献⁽¹⁶⁾における解析結果ではせん断帯の形成やくびれの伝ばが再現されているため、本モデルの妥当性の検証にあたり、要素形状および要素数に問題はないと考えられる。

アイソパラメトリック四辺形要素を用いた場合、完全積分により剛性を過大評価するロッキングと呼ばれる現象が起こることがある。また、ロッキングを回避するために次数低減積分を用いると、剛体モード以外のゼロエネルギーモードが生じ、虚偽の解が得られる場合がある⁽⁸¹⁾。一方、選択型次数低減積分を用いれば、2次元解析において体積ひずみに関する項のみに低減積分を行う場合は剛体モード以外のゼロエネルギーモードは発生しないことが知られており、ゼロエネルギーモード回避のために選択型次数低減積分が用いられることが多い。本解析では、上記の四辺形要素よりも定式化や数値積分が簡単に行えるという利点をもつ三角形定ひずみ要素の中でも、crossed triangles 要素 (解析対象を正方形あるいは長方形に分割し、さらにその対角線で 4 つの三角形に分割してできる要素) を用いている。Crossed triangles 要素以外の三角形定ひずみ要素を用いた場合には一般にロッキングを起こしやすいという難点があるが、crossed triangles 要素を用いれば、本解析で行うようなせん断帯やくびれが生じる問題に対してロッキングやゼロエネルギーモードを起こさず、比較的良好な解を与えることが経験的に知られており⁽¹³⁾、従来から構造解析においてよく用いられている。

また、要素数に関して検討を行った結果を図 G.1 および図 G.2 に示す。図 G.1 は 5 通りの要素数に対する公称応力-公称ひずみ線図、図 G.2 は伸び率 70% の非弾性せん断ひずみ速度分布である。図 G.1 から、640 要素以上の解析では応力-ひずみ曲線がほぼ収束していることがわかる。また、図 G.2 から 640 要素以上の解析ではせん断帯の形成が見られるが、ひずみ速度の分布は収束しているとは言い難いので、さらに要素数を増加させ、2560 個以上にするとそれ以上要素数を増やしてもほぼ同様の分布が得られていることがわかる。こ

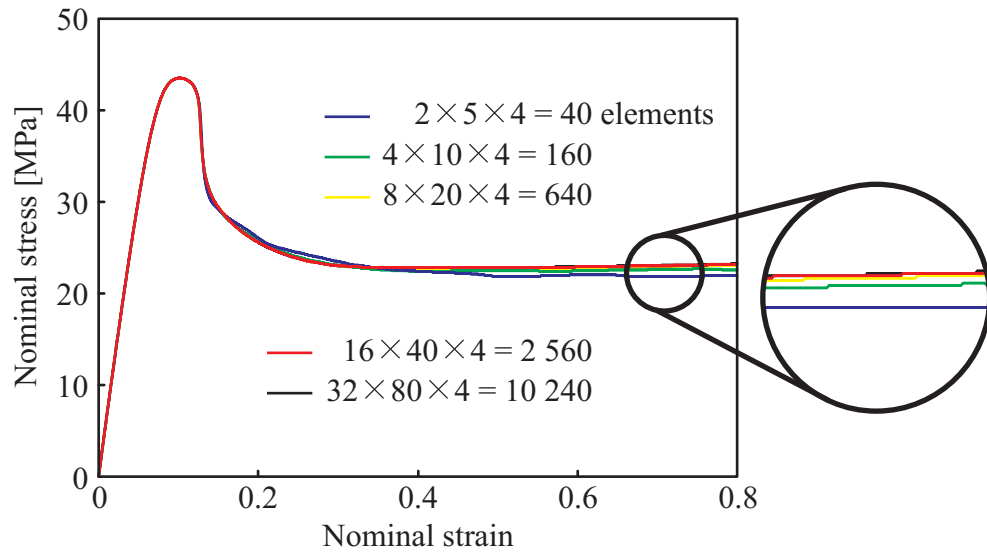


Fig. G.1 Dependence of nominal stress-strain curve for number of elements

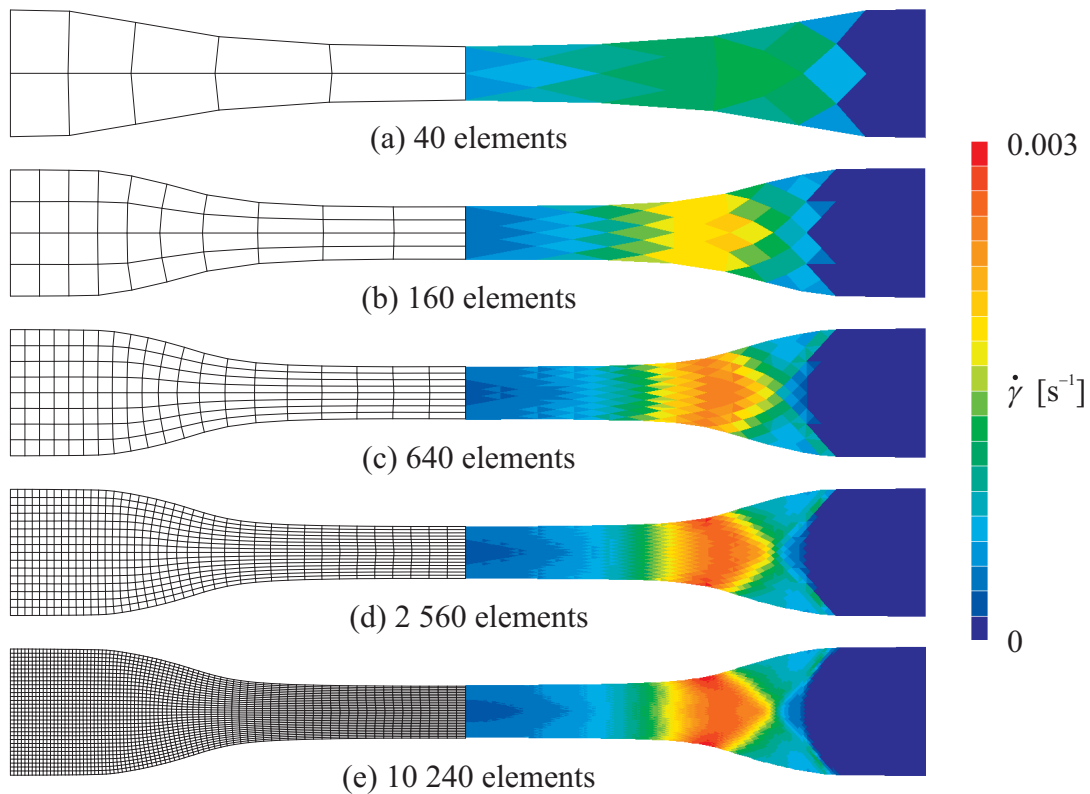


Fig. G.2 Dependence of distribution of inelastic shear strain rate for number of elements

のことから、本解析で用いている要素数 (2 560 個) は妥当であるといえる。

G.3 分子鎖配向による弾性率の変化に関する実験結果との比較

7.4.3 項において分子鎖配向により誘起される弾性異方性を考慮した解析を行ったが、ここでは、分子鎖配向による弾性率の変化に関して本解析結果と実験結果との比較を行う。なお、比較する実験データは慶應義塾大学理工学部機械工学科 堀田篤専任講師の御提供によるものである。

実験の概要は次のとおりである。まず、ペレット状の PMMA を熱プレス機を用いて厚さ 0.2~0.4 mm のフィルムに加工する。作成したフィルムを環境温度 130°C、ひずみ速度 0.00556 s^{-1} で引張り、333% のひずみを与えて配向させる。次に、配向させた試料を JIS 規格の試験片 (JIS K6251-5) に切り取る。その際、配向方向および配向に対して垂直方向に切り出し、2 種類の試験片を作成する。また、配向させる前のフィルムからも同じ規格の試験片を切り取る。これらの 3 種類の試験片に対して、環境温度 110°C、ひずみ速度 0.01010 s^{-1} で破断するまで再度引張り、それぞれの弾性率を測定する。ただし、引張試験はそれぞれの試験片について 3 回ずつ行い、測定した弾性率の平均値をとる。

以上のように実験を行った結果、配向方向の弾性率は 4 532 MPa、配向に対して垂直方向の弾性率は 3 050 MPa、配向させる前の弾性率は 3 302 MPa という結果が得られた。それぞれの方向の弾性率を配向前と比較すれば、配向方向は 37.25% 増、配向に対して垂直方向は 7.632% 減となる。一方、7.4.3 項で示した本解析結果では、配向方向は 11.58% 増、配向に対して垂直方向は 11.09% 減であった。分子鎖配向による弾性率の変化分については、異方性を表す項の係数 χ (本解析では $\chi = 100.0\text{ MPa}$ としている) の値を操作することで調整可能であると考えられる。しかしながら、実験結果では軸方向 (引張方向) の弾性率増加分の方が幅方向 (配向に対して垂直方向) の弾性率減少分よりも大きいのに対し、本解析結果では両者がほぼ等しくなっており、この点については χ の値を調整しても実験結果を再現することは不可能であると思われる。これは、本モデルでは分子鎖が全て同一平面上に配置されていると仮定しており、2 次元的な配向しか考慮していないことや、フィルムを対象とした実験は平面応力問題のような状態となっているにもかかわらず平面ひずみ問題を解析した結果と比較していることなどが原因であると考えられる。また、補足 E.3 で検討したように、異方性係数テンソル χ を導入することによっても改善可能であると考えられるが、この点に関する詳細な検討については今後の課題としたい。