

学位論文 博士（工学）

分子鎖塑性論を用いた延性ポリマの  
大変形挙動および微視的損傷進展のモデル化  
とマルチスケールFEM解析

2015年度

慶應義塾大学大学院理工学研究科

原 英之

## 主 論 文 要 旨

報告番号	甲 第 号	氏 名	原 英之
<p>主 論 文 題 目 :</p> <p style="text-align: center;">分子鎖塑性論を用いた延性ポリマの大変形挙動 および微視的損傷進展のモデル化とマルチスケール FEM 解析</p>			
<p>(内容の要旨)</p> <p>延性ポリマは構造材料としての過酷な力学的環境下での利用が急速に拡大しており、その大変形および破壊挙動を正確に予測可能な構成モデルの構築に期待が寄せられている。近年、様々な材料のマクロな力学特性を精度よく予測するため、材料組織の不均一性の影響を陽に考慮することが重要視されている。一方、ポリマの引張試験では変形の集中領域ではなく、くびれ進行端部から延性破壊が生じる。これはポリマ特有の微視的損傷であるクレーズの集積に起因する。しかしながら、ポリマの微視的不均一性に加え、損傷進展までを考慮した構成モデルは現在までに提案されていない。そこで、本研究ではポリマの非弾性変形を分子鎖塑性論および結晶塑性論によって記述し、微視的損傷の発展式を新たに構築するとともに、得られたモデルに均質化法を適用して延性ポリマのマルチスケール FEM 解析を実施することで、ポリマの大変形・破壊挙動を数値解析的に予測する。</p> <p>第 1 章は緒言であり、本研究の背景と先行研究を紹介し、本論文の目的と構成を述べている。</p> <p>第 2 章ではまず、変形を記述するために必要となる配置の概念を導入している。また、分子鎖塑性論および結晶塑性論における各すべり系で定義される量を用いて容易に非弾性変形速度および非弾性スピンが得られることを示すとともに非晶相の分子鎖基底ベクトルおよび結晶相の結晶基底ベクトルの更新方法の相違についても言及している。</p> <p>第 3 章では、弱形式の釣合い方程式である Updated Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理を有限変形理論の範疇で定式化している。</p> <p>第 4 章では、損傷依存弾性構成式と 2 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ている。さらに、ポリマの各相の特徴をより適切に表現するために、非晶相には多絡み点モデルを適用し、結晶相には分子鎖方向の非延伸拘束を導入している。</p> <p>第 5 章では、弾粘塑性構成式の非弾性特性を決定する材料応答則について述べている。非晶相にはポリマ内部の自由体積変化に基づく非弾性応答則を採用するとともにポリマ特有の除荷時の非線形ひずみ回復ならびに降伏応力の静水圧応力依存性を表せるよう非弾性応答則を拡張している。結晶相については Eyring の反応速度論に基づく材料応答則を採用し、さらに、従来の Pan-Rice 形硬化則で用いられていた材料定数から反応速度論の材料定数を決定する手法を提案している。</p> <p>第 6 章では、ポリマ特有の損傷であるクレーズの発生および成長を表す発展式を反応速度論の観点から新たに構築しており、クレーズ進展に要する活性化エネルギーを自由体積の変化と関連づけることで、クレーズ発展式にひずみ速度依存性を導入している。</p> <p>第 7 章では、3 章で得た釣合い方程式に 4 章で構築した構成式を代入することによって得られる支配方程式を、漸近展開法に基づく均質化理論を用いてマイクロ構造およびマクロ構造の支配方程式に分離している。</p> <p>第 8 章では、7 章で得た支配方程式を有限要素法によって離散化するとともに上述のモデルに基づく延性ポリマのマイクロ-マクロ連成解析スキームについて述べている。</p> <p>第 9 章では、非晶性ポリマであるメタクリル酸メチル平板および結晶性ポリマであるポリプロピレン平板に対する大変形 FEM 解析を平面ひずみ条件下で実施し、ポリマの単軸引張試験の特徴、すなわち、マクロ試験片における引張方向へのくびれおよびクレーズ集中領域の伝ばならびに分子鎖配向を再現するとともにユニットセルの応答との相関について議論している。また、非線形ひずみ回復や降伏応力のひずみ速度依存性、静水圧応力依存性などが本モデルによって再現されることを示すと同時にフィブリル強度およびクレーズ密度に基づく破断予測条件を構築することでひずみ速度に依存したポリマの延性の変化を予測している。最後に、本モデルの三次元 FEM 解析における妥当性についても検討している。</p> <p>第 10 章は結言であり、本研究で行ったモデル化と FEM 解析から得られた知見を要約している。</p>			

**SUMMARY OF Ph.D. DISSERTATION**

School Integrated Design Engineering	Student Identification Number	First name Surname Hideyuki Hara
<b>Title</b> Modeling and Multiscale FE Simulation for Large Deformation and Microscopic Damage Evolution of Ductile Polymers Using Molecular Chain Plasticity Theory		
<b>Abstract</b> <p>Ductile polymers have widely been used as structural materials under severe mechanical conditions, so that it is highly desirable to develop a material model that can precisely express mechanical responses and fracture of polymers. Recently, to describe macroscopic mechanical properties of materials, it is frequently attempted to take a microscopic inhomogeneity into account. Meanwhile, ductile fracture of polymers occurs at the front edge of propagating neck. This characteristic behavior of ductile fracture attributes to the localization of craze, which is microscopic damage peculiar to polymers. However, a material model considering both of the microscopic structure of polymers and the craze evolution has not yet been proposed. In this thesis, inelastic deformation of polymers is expressed using theories of molecular chain plasticity and crystal plasticity with a craze evolution equation developed newly. Multiscale FE simulation using this model is carried out. It is attempted to computationally reproduce the large deformation and fracture behaviors of ductile polymers.</p> <p>Chapter 1 is an introduction relating to backgrounds and aims of this thesis.</p> <p>In Chapter 2, inelastic deformation rate and inelastic spin are kinematically determined. Also, differences between molecular chain plasticity and crystal plasticity theories are clarified.</p> <p>Chapter 3 explains the updated Lagrangian formulation of the principle of virtual work in rate form, which is assuming a role of the balance equation for finite strain theory.</p> <p>In Chapters 4 and 5, an elastoviscoplastic constitutive equation is obtained unifying the damage-dependent elastic constitutive equation and the inelastic deformation rate obtained in Chapter 3. To express the properties of glassy and crystalline phases, poly-entangled model is adopted for the glassy phase and inextensibility in the chain direction is introduced into the crystalline phase. The inelastic response law based on a change in the local free volume is employed for glassy phase. On the other hand, a material response law based on Eyring's chemical kinetics is adopted for the crystalline phase.</p> <p>In Chapter 6, craze evolution is decomposed into nucleation and growth of craze. These evolution equations are newly developed using chemical kinetics with activation energies.</p> <p>In Chapter 7, microscopic and macroscopic governing equations are derived by the homogenization method using the balance equation obtained in Chapter 3 and the constitutive equations in Chapter 4.</p> <p>In Chapter 8, governing equations obtained in Chapter 7 are discretized by finite element method and computational schemes consisting of this model mentioned above are developed.</p> <p>In Chapter 9, FE analyses for polymethylmethacrylate and polypropylene are conducted under plane-strain condition. The characteristic behaviors in uniaxial tension, i.e., propagation of a neck with craze-concentration region and orientation of molecular chains are reproduced in the macroscopic specimen. The relationship on deformation response between the macrostructure and unit cells is investigated. Nonlinear strain recovery in unloading state and dependence of hydrostatic stress, strain rate and temperature are represented. Moreover, using fracture criteria obtained by a fibril strength and craze density, change in ductility of polymers dependent on the strain rate is numerically predicted. In addition, the validity of this model in three-dimensional condition is discussed through three-dimensional FE analyses.</p> <p>Chapter 10 summarizes the conclusions obtained in this study.</p>		