

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、損傷依存形弾性構成式と 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ミ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ミクロ-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
<p>Title</p> <p>Modeling and Multiscale FE Simulation for Large Deformation and Microscopic Damage Evolution of Ductile Polymers Using Molecular Chain Plasticity Theory</p>		
<p>Abstract</p> <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>		

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

目 次

第 1 章	緒 言	1
1.1	本研究の背景	1
1.1.1	ポリマの分類と階層構造	1
1.1.2	ポリマの工学的実用性	4
1.2	ポリマの力学的特性	5
1.2.1	ポリマの単軸引張応答	5
1.2.2	延性破壊とクレーズ	7
1.2.3	応力-ひずみ曲線の特性	8
1.3	ポリマの材料モデルに関する従来の研究と問題点	11
1.3.1	巨視的塑性論	11
1.3.2	分子鎖網目理論	11
1.3.3	結晶塑性論	13
1.3.4	結晶塑性論的分子鎖塑性論	14
1.3.5	結晶性ポリマへの応用と均質化法	15
1.3.6	連続体力学における損傷の表現	16
1.3.7	Eyring の反応速度論	17
1.4	本研究の目的	19
1.4.1	延性ポリマの材料モデルの構築	19
1.4.2	FEM 解析によるポリマの大変形挙動の再現	20
1.5	本論文の構成	21
1.6	本論文で用いる記号	24
第 2 章	運動学	25
2.1	配置の概念と変形こう配	25
2.2	中間配置の導入	27
2.2.1	配置の弾・非弾性分解	27
2.2.2	第 2 中間配置の導入	28
2.3	4 配置構成における運動学	31
2.3.1	ひずみの弾・非弾性分解	31
2.3.2	変形速度の弾・非弾性分解	32
2.3.3	ひずみ速度と変形速度	33
2.3.4	微小弾性変形の仮定	33
2.3.5	構成式の参照配置	34

2.4	損傷配置と擬似無損傷配置	34
2.5	結晶塑性論の運動学	36
2.5.1	基底ベクトルおよびすべり系の定義	36
2.5.2	非弾性変形速度および非弾性スピンの導出	38
2.5.3	基底ベクトルの発展式および更新	40
2.6	運動学的関係式の利用	43
第 3 章	内力の定義と仮想仕事の原理	44
3.1	内力の定義	44
3.2	仮想仕事の原理	45
3.3	仮想仕事率の原理	46
3.4	速度形仮想仕事の原理	47
3.4.1	微小変形理論に対する速度形仮想仕事の原理	47
3.4.2	有限変形理論に対する速度形仮想仕事の原理 (Total Lagrange 形式)	47
3.4.3	有限変形理論に対する速度形仮想仕事の原理 (Updated Lagrange 形式)	48
第 4 章	構成式の導出	51
4.1	構成式の熱力学的制限	51
4.1.1	エントロピー不等式	51
4.1.2	Clausius-Duhem の不等式	52
4.1.3	保存部分の熱力学的制限	53
4.1.4	散逸部分の熱力学的制限	54
4.2	弾性構成式の導出	54
4.2.1	線形等方性弾性構成式の導出	54
4.2.2	損傷依存性速度形弾性構成式の導出	56
4.3	非晶相のモデル化	57
4.3.1	結晶塑性論に基づく速度形弾粘塑性構成式の導出	57
4.3.2	多絡み点モデルへの拡張	58
4.3.3	配向強度・配向方向パラメータの計算	60
4.4	結晶相のモデル化	62
4.4.1	結晶塑性論に基づく速度形弾粘塑性構成式の導出	62
4.4.2	分子鎖方向の非延伸拘束の導入	63
第 5 章	材料応答則	64
5.1	Hasan-Boyce の非弾性応答則	64
5.1.1	非弾性せん断ひずみ速度の定式化	64
5.1.2	分子鎖摩擦エネルギーの発展式	66
5.1.3	除荷時の粘弾性効果の表現	67
5.1.4	静水圧応力依存形への拡張	68
5.1.5	非弾性応答則における積分計算	69
5.2	Pan-Rice 形ひずみ速度硬化則	71
5.2.1	せん断ひずみ速度の定式化	71
5.2.2	ひずみ速度依存性の検討	71

5.2.3	接線係数法の適用 (応力積分の陰解法)	72
5.3	Eyring 形ひずみ速度硬化則	74
5.3.1	せん断ひずみ速度の定式化	74
5.3.2	ひずみ速度依存性の検討	74
5.3.3	Eyring 形硬化則における材料定数の決定手法	76
5.3.4	接線係数法の適用 (応力積分の陰解法)	77
第 6 章	損傷発展式	78
6.1	反応速度論を用いたクレーズ発生およびクレーズ成長の表現	78
6.2	反応速度論に基づくクレーズ発展式の構築	79
6.3	Hasan-Boyce の非弾性応答則に基づくクレーズ発展式の表記	81
6.4	クレーズ発展式の積分計算	82
第 7 章	粘塑性均質化理論	84
7.1	構成式の統一的取扱い	84
7.2	ミクロ構造の定義	85
7.3	漸近展開法による支配方程式の導出	87
7.3.1	材料レベルの支配方程式の導出	87
7.3.2	物質速度の漸近展開	87
7.3.3	マクロ方程式およびミクロ方程式への分離	88
7.3.4	特性関数の導入	88
7.4	マクロ構造の構成式	89
7.5	局所化問題	90
第 8 章	有限要素法による離散定式化	91
8.1	離散化マトリックス	91
8.1.1	変位速度の離散化マトリックス	91
8.1.2	速度こう配の離散化マトリックス	92
8.1.3	変形速度の離散化マトリックス	93
8.1.4	三次元ソリッド要素の形状関数	94
8.1.5	物理座標系における形状関数の微分	95
8.2	支配方程式の離散化	96
8.2.1	構成式のマトリックス表示	96
8.2.2	ミクロ構造の支配方程式の離散化	97
8.2.3	マクロ構造の支配方程式の離散化	99
8.2.4	均質化材料定数の計算式の離散化	100
8.2.5	局所化問題の離散化	101
8.3	領域積分の数値積分手法	102
8.4	内力の計算	104
8.4.1	内力ベクトルの計算方法	104
8.4.2	公称応力の計算	105
8.4.3	残差力の計算	105
8.5	釣合い方程式の陰解法的定式化	105

8.6	平面要素を用いた離散定式化	107
8.6.1	3 節点三角形要素の形状関数	107
8.6.2	平面要素を用いた場合の体積積分	107
8.6.3	離散化マトリックスの縮約	108
8.6.4	平面ひずみ条件の構成式のマトリックス表示	109
8.6.5	応力マトリックスの縮約	109
8.6.6	その他のマトリックスの縮約	110
8.7	解析の流れ	110
8.7.1	均質化法を用いたマイクロ-マクロ連成 FEM 解析の流れ	110
8.7.2	本研究の解析の流れ	111
第 9 章	解析結果および検討	114
9.1	非晶性ポリマのマルチスケール解析	114
9.1.1	非晶性ポリマの解析条件および材料定数	115
9.1.2	非晶性ポリマの単軸引張挙動の再現	117
9.2	結晶性ポリマのマルチスケール解析	121
9.2.1	結晶相単相の解析結果	121
9.2.2	ユニットセル内の結晶相の数についての検討	126
9.2.3	結晶性ポリマの解析条件および材料定数	128
9.2.4	結晶性ポリマの単軸引張挙動の再現	130
9.3	粘弾性効果による除荷時の非線形ひずみ回復現象の再現	135
9.4	静水圧応力依存性による降伏応力変化の再現	138
9.5	広範囲のひずみ速度におけるポリマの破断予測手法	139
9.5.1	複数のひずみ速度および環境温度における解析	139
9.5.2	破断予測条件の構築	141
9.5.3	ひずみ速度に依存したポリマの破断傾向の予測	142
9.6	三次元解析	146
9.6.1	非晶性ポリマのマイクロ試験片に対する三次元解析	147
9.6.2	結晶相単相の三次元解析	149
9.6.3	結晶性ポリマのマルチスケール三次元解析	154
第 10 章	結 言	159
10.1	本論文の結言	159
10.1.1	延性ポリマのモデル化についての結言	159
10.1.2	FEM 解析結果についての結言	159
10.2	残された課題および今後の展望	160
謝 辞		162
参考文献		164
本研究に関する原著論文および口頭発表		172
1. 定期刊行誌掲載論文 (主論文に関連する原著論文)		172

2. 定期刊行誌掲載論文（その他の論文）	172
3. 国際会議論文（査読付きの full-length papers）	172
4. その他の国際会議発表	172
5. 国内学会発表	173
6. その他	174
補足 A 第 1 章の補足	175
A.1 連続体の定義	175
A.2 真応力-真ひずみおよび公称応力-公称ひずみの変換式	176
A.3 ラメラの分離によるクレーズの形成	176
A.4 クレーズ進展の観察	178
A.5 クレーズ進展の異方性	178
A.6 J_2 -流れ理論に基づく弾粘塑性構成式	179
A.7 結晶塑性論を用いた場合の降伏条件	179
A.8 正方向反応のみを考慮した反応速度論の注意点	179
A.9 せん断強度を用いた反応速度論の表記	180
A.10 構成式が満たすべき原理とその役割	180
補足 B 第 2 章の補足	182
B.1 変形こう配を用いた速度こう配の表現	182
B.2 共回転速度の導出	183
B.3 速度こう配の分解	183
B.4 非弾性ひずみ速度および非弾性変形速度の関係	184
B.5 ひずみ尺度と変形尺度	185
B.6 すべり面に垂直な非弾性ひずみ速度の意味	185
B.7 分子鎖基底の配置変換則	185
B.8 結晶基底ベクトルの更新における問題点	188
B.9 分子鎖基底ベクトルの発展式の導出	188
補足 C 第 3 章の補足	192
C.1 全体系と局所系の保存則	192
C.1.1 質量保存則 (連続の式)	192
C.1.2 運動量保存則 (運動方程式)	193
C.1.3 角運動量保存則 (角運動方程式)	193
C.1.4 エネルギー保存則 (エネルギー方程式)	194
C.2 仮想仕事率の原理からの力学的釣合い方程式の導出	194
C.2.1 内力のなす仮想仕事率に関する変形	195
C.2.2 式 (C.16) の導出	196
C.3 第 1 種 Piola-Kirchhoff 応力速度と Cauchy 応力速度の関係式	196
C.4 変形こう配を用いた速度こう配の転置の表現	196
C.5 Jacobian の物質時間微分	197
補足 D 第 4 章の補足	198

D.1	材料応答則の引数の検討	198
D.2	等方性弾性係数の成分	199
D.3	Hill の方法の意味	200
D.4	三次元極座標	201
補足 E	第 5 章の補足	202
E.1	Hasan-Boyce の非弾性応答則の補足	202
E.1.1	自由体積率の定義	202
E.1.2	自由体積率の積分計算	204
E.1.3	自由体積と分子鎖のキンク回転との関係	205
E.1.4	内部変数の発展の意味	206
E.1.5	通常の結晶塑性論における流れ応力の発展との対応	207
E.2	塑性せん断ひずみ速度	207
E.3	Eyring 形硬化則が適用可能なひずみ速度の範囲	208
補足 F	第 6 章の補足	209
F.1	平衡相における混合のエントロピー変化	209
F.2	飽和クレーズ数密度の導出	210
F.3	クレーズの体積分率と面積分率の変換則	210
F.4	クレーズ進展に要する活性化エネルギー	212
補足 G	第 7 章の補足	213
G.1	接線係数法を導入した場合の結晶相の構成則テンソルの具体形	213
G.2	周期性および応力の釣り合いを利用したじょう乱速度こう配項の消去	213
G.3	力学的考察に基づく粘塑性均質化理論の定式化	214
G.3.1	マイクロ方程式およびマクロ構成式の導出	214
G.3.2	マクロ方程式の導出	216
G.3.3	マクロ構造の Updated Lagrange 形式の第 1 種 Piola-Kirchhoff 応力速度	216
補足 H	第 8 章の補足	218
H.1	Euler の陽解法と陰解法	218
H.2	Newton-Rapson 法による釣り合い方程式の収束計算	219
H.3	ヤコビ行列の行列式の計算	221
H.4	一次元の Gauss 積分と多重積分	221
H.5	四角形要素の積分点数と次数低減積分	221
H.6	平面要素を用いた場合の Jaumann 応力速度	223
H.7	平面応力条件の構成式のマトリックス表示	224
H.8	平面要素の種類	226
補足 I	第 9 章の補足	230
I.1	本論文の解析に要する時間	230
I.2	本モデルの材料定数の総数	230
I.3	材料定数の同定手順	231

I.4	クレーズ密度の応力-ひずみ応答への影響	232
I.5	本論文で実施している解析の種類	232
I.6	結晶相のすべり系の平面すべり問題への単純化	235
I.7	くびれの伝ばが開始する引張率	236
I.8	クレーズ進展の異方性を考慮した解析	236
I.8.1	異方性を有する損傷を伴う損傷配置の導入	236
I.8.2	異方性損傷密度に依存した速度形弾性構成式	238
I.8.3	異方性クレーズの発展式	238
I.8.4	異方性クレーズを用いた FEM 解析の例	239

第 1 章

緒 言

1.1 本研究の背景

1.1.1 ポリマの分類と階層構造

固体材料は巨視的に観察すれば、図 1.1(a) のような一様かつ均質な物体であると捉えられるが、ある点の近傍を大きく拡大して観察すれば、図 1.1(b) のような不均一な内部構造を有することが確認できる。さらに、図 1.1(a) および図 1.1(b) のような高次構造における力学特性は、図 1.1(c) に示すような物質特性を失わない最小単位である原子またはその集合である分子の構成により決定される。このような構成原子の違いから工業材料は、大きく金属材料、有機材料および無機材料に分類される。金属材料には鉄鋼、非鉄金属が分類され、無機材料としてはセラミックスやガラス材が挙げられる。本研究で対象とするのは有機材料、すなわち高分子材料である。ここで、高分子 (ポリマ) とは 10000 以上の分子量をもつ巨大分子のことであり、その化合物を高分子化合物と言う。高分子化合物はさらに、元々自然に存在する天然高分子化合物と人工的に合成される合成高分子化合物に分類される。また、高分子化合物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、この小さな構成単位を単量体またはモノマと言う。したがって、モノマ分子の原子構成によってポリマには非常に多くの種類が存在することになり、それらはプラスチック、ゴムおよび繊維に大別される。なお、プラスチックには天然樹脂と合成樹脂が存在するが、プラスチックといえば通常、後者を表わす。さらに、プラスチックはその成形プロセスの違いによって、熱可塑性プラスチック (ポリマ) および熱硬化性プラスチック (ポリマ) に分類される。下記にそれぞれのポリマの特徴を述べる⁽¹⁾⁽²⁾⁽³⁾。

(a) 熱可塑性ポリマ

熱可塑性ポリマは一般的に付加重合によって合成され、高い分子量の線状の高分子となる。したがって、ガラス転移点以上の温度下では軟らかくなる一方、ガラス転移点以下では硬くなる。これらの変化は可逆的に生じるため、目的とする形状に加工した後に冷却することで成形品を得ることができる。これにより、シート、フィルムや繊維状などの多様な成形加工が可能であり、大量生産性およびリサイクル性にも優れる。なお、このように可逆的な変化を生じる理由は、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⁽⁴⁾。また、後述す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る⁽⁵⁾。したがって、本研究ではポリマの中でも熱可塑性ポリマ、特にガラス転移点以上の温度の延性ポリマを研究対象とする。

熱可塑性プラスチックはその製造過程における冷却速度の違いにより、異なる内部構造を形成する。一般に熔融状態から急冷した場合には非晶質になり、徐冷した場合には結晶質となる、すなわち高結晶化度となる傾向を有する。結晶質を含まない非晶質領域のみからなるポリマを非晶性ポリマと言う。ポリスチレン (PS)、ポ

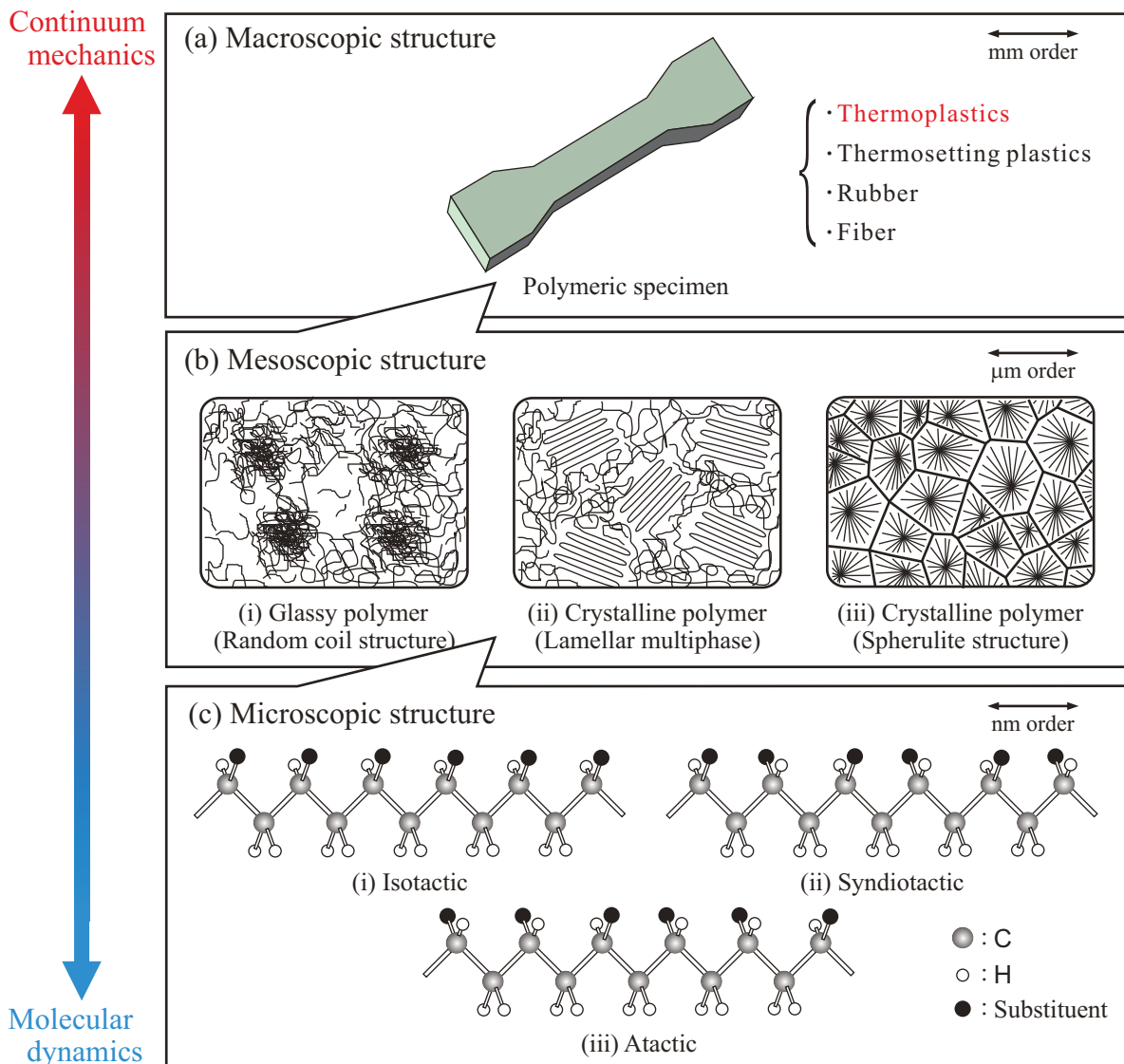


Fig. 1.1 Classification and hierarchical structure of thermoplastic polymers.

リカーボネイト (PC) およびポリメタクリル酸メチル (PMMA) などに代表される非晶性ポリマは図 1.1(b)-(i) に示すように、分子鎖が不規則に絡み合ったランダムコイル構造をなしており、これらは Van der Waals 力によって不規則に凝集している。なお、このようなランダムコイル構造における分子鎖同士の絡み点では分子鎖は物理的に架橋しているのみであり、化学的に結合されているわけではない。一方、結晶性ポリマは図 1.1(b)-(ii) のように分子鎖がランダムコイル状の非晶相 (フィブリル) および規則的に折り畳まれた結晶相 (ラメラ) が混在するラメラ混相構造を有しており、複合材料としての性質を有する。代表的な結晶性ポリマとしてポリエチレン (PE)、ポリプロピレン (PP) およびポリアミド (PA) などが挙げられる。なかでも、汎用プラスチックである PE および PP は 2 大工業用ポリマと呼ばれ、国内の全樹脂材料の生産量のうち 3 割強を占める。また、結晶性ポリマはさらに低い冷却速度においてはラメラ結晶構造が放射状にねじれながら成長することにより、球晶と呼ばれる構造を形成する。このとき、熔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 1.1(b)-(iii) に示すような組織が形成される⁽⁶⁾。このような結晶性ポリマをマトリックスとした複合材料は特に構造材料として多く用いられている。しかしながら、球

晶構造ポリマは前述のように複雑な内部構造を有することに加え、冷却時間の短縮という工業的な要請を考慮した場合にはラメラ混相構造のポリマが多く得られることが予想される。したがって、本研究においては図 1.1(b)-(ii) のような構造を結晶性ポリマの内部構造として想定する。なお、非晶性ポリマのガラス転移温度は室温以上、結晶性ポリマは室温以下であることが多い。そのため、一般に室温において非晶性ポリマは脆性的、結晶性ポリマは延性的となる。また、一般に結晶性ポリマは硬く、高剛性となるのに対して非晶性ポリマは耐衝撃性に優れ、透明性を有する。

さらに、熱可塑性ポリマの結晶化のしやすさには冷却速度以外にも図 1.1(c) のような分子鎖における立体規則性 (タクチシティー) が強く影響する。ここで、タクチシティーとは炭素を主鎖にもつ分子鎖において、置換基が主鎖がつくる平面に対してどちら側に結合しているかを表す分類である。置換基が図 1.1(c)-(i) のようにすべて同じ側に結合している高分子をアイソタクチック、図 1.1(c)-(ii) のように両側に交互に結合した高分子をシンジオタクチック、図 1.1(c)-(iii) のように両側に不規則に結合した高分子をアタクチックと言う。なお、アイソタクチック、シンジオタクチックおよびアタクチックのポリプロピレンはそれぞれ iPP(isotactic polypropylene), sPP(syndiotactic polypropylene) および aPP(atactic polypropylene) のように表記される。タクチシティーは高分子鎖の充填のしやすさを決定するため、前述のように高分子の結晶化度や物性に影響を与える。すなわち、側鎖が規則的な配列をもつアイソタクチックおよびシンジオタクチックポリマは結晶化しやすく、不規則な配列をもつアタクチックポリマは原則として非晶性ポリマとなる。例えば、アイソタクチックポリスチレンは結晶性ポリマとなるが、スチレンとして一般的に用いられるアタクチックポリスチレンは非晶性ポリマとなる。ただし、本研究ではあくまで連続体力学の範疇 [補足 A.1] におけるポリマの力学特性をモデル化するため、上述のような分子構造、すなわち、ポリマの 1 次構造の相違による物性への影響は考慮しない。モデル化に際しては、図 1.1(b) のスケールにおける非晶性および結晶性ポリマの相違についてのみ着目する。したがって、本研究では図 1.1(c) のような分子スケールではなく、図 1.1(b) のようなメゾ構造をポリマの微視的構造と呼ぶものとする。

(b) 熱硬化性ポリマ

熱硬化性ポリマは縮合重合によって合成されるものが多く、合成過程の加熱処理で縮合重合がさらに進み、三次元的な網目状構造が発達して硬くなる。よって、熱硬化性ポリマは熱可塑性ポリマと異なり、加熱すると硬化し、また、溶媒にも溶けなくなる。この変化は非可逆的であり、いったん網状に高分子構造が結合されると冷却後に再び過熱しても硬化したままである。これは加熱によって、分子構造が化学的に変化するために生じる⁽⁴⁾。なお、実際には硬化剤を用いたり、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。代表的な熱硬化性ポリマとして、フェノール樹脂、アミノ樹脂、エポキシ樹脂および不飽和ポリエステル樹脂などが挙げられる。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。さらに、後述する複合材料である CFRP のマトリックスとして多く採用される。

(c) エラストマ (ゴム弾性体)

エラストマ (ゴム弾性体) は、さまざまな形に塑性変形をさせた後の生ゴムに硫黄を 5~8% 加えて約 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 100000 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。しかしながら、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⁽⁷⁾。これが加硫ゴム、すなわちエラストマ(ゴム弾性体)である。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。

(d) 繊維

繊維は天然繊維および合成繊維に大別される。天然繊維はさらにセルロースを主体とする植物繊維およびたんぱく質を主体とする動物繊維に区分される。植物繊維は古くから身の周りの材料として多く利用されており、代表的なものとして綿、麻などが挙げられる。また、動物繊維としては羊毛やカシミアに代表される獣毛繊維および蚕の繭から得られる絹が挙げられる。天然繊維は分子量が大きく、複雑な高次構造を有することから、吸湿性、染色性、風合などに優れ、衣料品として多く利用されている。一方、代表的な合成繊維としてナイロン繊維、ポリエステル繊維(PET)およびアクリル系合成繊維(PAN 繊維)が挙げられる。中でも PAN 繊維を加熱処理によって炭素化した炭素繊維は優れた強度と弾性率を有するため、後述のように複合材料化することにより航空機やロケットなどの軽量化を必要とする構造物に多く用いられる。なお、PET に代表されるように合成繊維は分子構造が同様の合成樹脂が繊維状に加工されたものと見なせる。

1.1.2 ポリマの工学的実用性

前項に述べた各種のポリマは他材料にはない有用な性質を多く有している。そのような性質の代表的な例として軽量性、成形性、透明性、電気絶縁性、吸音性、耐薬品性、大量生産性およびリサイクル性などが挙げられる。加えて、複合材化や分子構造の制御による機能の改善性に優れるという利点も存在する。一方、古くから構造材料として用いられている金属材料と比較すると、耐熱性、強度および剛性という点で劣るため、ポリマの工業的な利用としては日用品や機能性材料への適用が主流であった。機能性材料としては、生体・医療材料ならびに高分子電解質膜や電池用セパレータなどに利用されている。また、日用品としてはペットボトル、CD ケース、レジ袋、包装材、衣服、家電製品など日常生活に不可欠な材料として非常に多く用いられている。機能性材料としての利用においては本研究で対象とするポリマの力学的な性質よりもむしろ材料科学的な性質が重要となる。また、家電製品などの日用品として利用する場合には設計段階において弾性変形の範囲における強度評価を必要とするが、大ひずみが負荷されるほどの過酷な力学的条件下での使用は前提としない場合が多い。ただし、上述のような各製品においてもその塑性加工過程において大きなひずみが加えられる場合がある。

一方、近年では耐熱性および強度に優れるエンジニアリングプラスチックやポリマをマトリックスとした複合材料の開発により、ポリマの構造材料としての利用が急速に拡大している。ここで、エンジニアリングプラスチックとは 100°C 以上の高温下でも強度を失わないプラスチック群の総称であり、さらに 150°C 以上でも強度を失わないものはスーパーエンジニアリングプラスチックと呼ばれる。これらは自動車や電気・電子機器に多く利用される。なお、エンジニアリングプラスチックはその多くが熱可塑性ポリマである。また、ポリマを用いた複合材料の代表として繊維強化プラスチック(FRP)が挙げられる。FRP は繊維を強化材としてポリマに充填した複合材料である。強化材にガラス繊維、アラミド繊維または炭素繊維を用いた FRP はそれぞれ GFRP、AFRP および CFRP と呼ばれる。中でも CFRP はその軽量性および強度の高さから航空・宇宙分野では欠かせない材料となっている。

このようなポリマの構造材料としての利用においてはその軽量性が特に注目されており、金属材料をポリマ

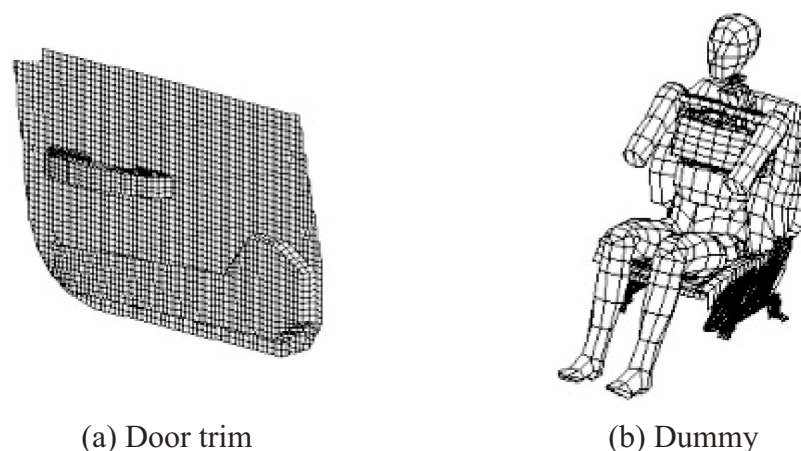


Fig. 1.2 Finite element meshes for side impact simulation (Provided by Nissan Motor Co.,Ltd).

材料で代替することによる構造物の軽量化に期待が寄せられている。したがって、現在では軽量化による燃費向上の点から自動車および航空機などの輸送機器の構造材料として多くのポリマ材料が採用されている。さらに、自動車の場合は CAE(Computer Aided Engineering) を用いた設計段階において、車両の衝突試験などの大変形挙動を有限要素法 (FEM) によってシミュレーションする試みが多く行われている。例として、図 1.2 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人形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、ポリマの大変形挙動および破壊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近年益々重要となっている。一方、FRP の主要な適用例として航空機機体への適用が挙げられる。航空業界では自動車ほどの大量生産を要さない代わりに、機体の軽量化が特に重視されている。したがって、航空機に適用される先進的複合材料 (主に CFRP を指す) の重量割合は益々増加しており、近年では機体の構成材料の約半分を CFRP が占める⁽⁸⁾。なお、現在、CFRP のマトリックスとしては不飽和ポリエステルやエポキシ樹脂をはじめとする熱硬化性ポリマが主流である。しかしながら、これらは生産コストが高く、高価であるため、大量生産を要する乗用車への適用は未だ少ない。近年では生産コストを抑える目的から成形性およびリサイクル性に優れる熱可塑性ポリマをマトリックスとする CFRTP(Carbon Fiber Reinforced ThermoPlastics) の開発も進められており、熱可塑性ポリマの構造材料としてのさらなる利用の拡大が期待される。以上の FRP のような微視的領域で複合化されている材料の力学応答を評価するためには、材料の微視的内部情報を陽に考慮する構成モデルの構築が重要になってくると言える。

1.2 ポリマの力学的特性

1.2.1 ポリマの単軸引張応答

図 1.3 にガラス転移点以上の温度における熱可塑性ポリマの単軸引張応答の模式図を示す。同図においては延性ポリマの典型的な公称応力-公称ひずみ曲線に加え、試験片内のある点における真応力-真ひずみ曲線の例を掲載している。なお、公称応力-公称ひずみ曲線は単軸荷重試験において試験片全体で一つの応答が測定されるのに対し、真応力-真ひずみ曲線は不均一変形を生じた試験片内部の各物質点ごとに定義されることに注意されたい。ただし、試験片が完全に均一な変形をする場合には公称応力-公称ひずみ曲線を対応する真応力-真ひずみ曲線へと変換可能である [補足 A.2]。まず、ポリマは単軸引張を受けると試験片全体でほぼ均一な弾

性変形を生じ、線形的に応力が上昇して硬化する [図 1.3(c)-(i)]. 次に、巨視的降伏を迎える直前まで応力が上昇すると図 1.3 の応力-ひずみ曲線に示したように非線形な応答を示す。これを降伏前の非線形粘弾性応答と呼ぶ。そして、巨視的降伏に至るとひずみの増加に伴い応力が減少し、軟化を生じる。これを巨視的降伏後のひずみ軟化と呼ぶ。このひずみ軟化に対応して、試験片の最も変形が集中しやすい領域 (図 1.3(c) では試験片中心部) でくびれが形成する。また、くびれの形成に伴い、帯状の変形速度の集中領域であるひずみ速度せん断帯が現れる [図 1.3(c)-(ii)]. 同時に、くびれが形成した領域では不規則に絡み合っていた分子鎖がほぐれ、引張方向へと配向する。この分子鎖配向により真応力-真ひずみ曲線上では応力が上昇し、再硬化が生じるため、くびれはひずみ速度せん断帯とともにまだ硬化していない未配向領域へ伝ばしていく [図 1.3(c)-(iii)]. このとき、公称応力-公称ひずみ曲線上ではくびれの安定伝ばに伴い応力値がほぼ一定値のまま推移する。さらに引張を加え、後述する図 1.3(c)-(iv) のような延性破壊を生じなかった場合には試験片全体で分子鎖が引張方向に配向し、公称応力-公称ひずみ曲線上でも再硬化現象を示す。このような場合には、最終的に試験片の応力がフィブリルの強度に達した時点で破断を迎えることになる。なお、以上の単軸引張応答は主にガラス転移点以上の非晶性ポリマの場合に顕著に観察される。一方、結晶性ポリマの場合には結晶相が混在することによって非晶としての性質が弱まる。ただし、小林・岡田⁽⁹⁾によって PP などにおいてもくびれの形成および安定伝ばは報告されており、結晶性ポリマの場合にも延性ポリマとしての定性的な応答に相違はないと言える。

また、上述のようにポリマは延伸すると、分子鎖が引張方向へ配向するため、引張方向の剛性が向上する。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 力が働いた

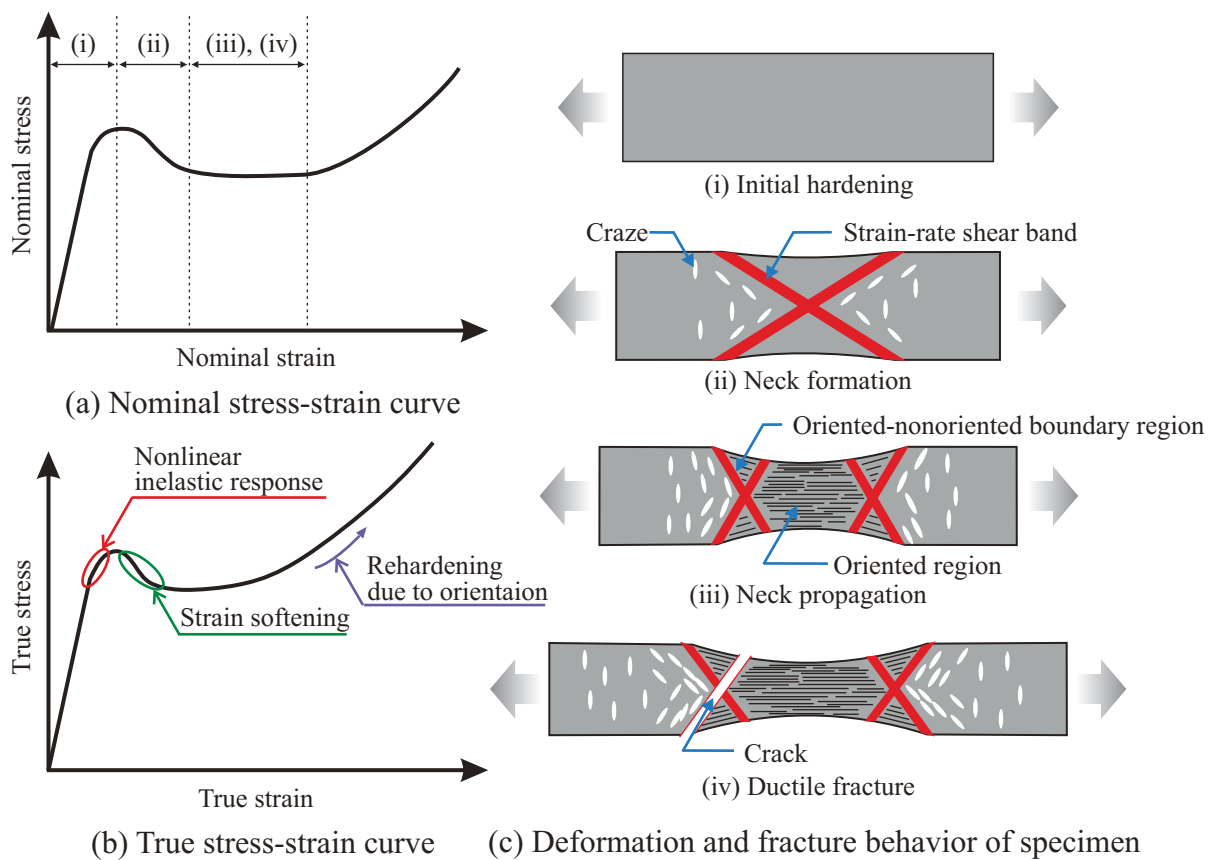


Fig. 1.3 Stress-strain response and corresponding deformation behaviors of ductile polymers under uniaxial tension.

めである。したがって、初期等方性の材料でも変形に伴い異方性をもつことになり、これを変形誘起異方性と呼ぶ。

1.2.2 延性破壊とクレーズ

前項では延性ポリマの破断が再硬化に伴う応力上昇により生じることを述べたが、実際のポリマの引張試験において公称応力-公称ひずみ曲線上で再硬化現象を観察可能なほどに高い延性を呈することは少ない。このようにくびれが完全に試験片端部まで伝ばする前に延性破壊を生じる一因として以下に述べるクレーズが挙げられる。まず、ポリマの破壊は金属と同様に脆性破壊と延性破壊に大別される。ポリマの破壊は温度特性と密接な関係があり、主にガラス転移点以下では脆性破壊、ガラス転移点以上では延性破壊が生じる。ポリマが脆性破壊を生じる際には初期不整に依存して生じる変形の集中領域から破断する。一方、低速変形時に延性破壊を生じる際にはくびれの伝ば後にくびれの進行端部においてひずみ速度せん断帯に沿って破断することが知られている。このような延性破壊のメカニズムはポリマ特有の微視的損傷であるクレーズの進展挙動に起因する。

結晶性ポリマの非晶相では引張りを受けることによってラメラ同士が分離し、ラメラ間をつなぐ分子鎖が配向することでクレーズを形成する [補足 A.3]⁽¹⁰⁾。特にくびれの伝ば時にクレーズは数多く形成する⁽¹¹⁾⁽¹²⁾⁽¹³⁾。形成したクレーズは図 1.4 に示すように配向した分子鎖の束であるフィブリルおよび空隙であるボイドから構成される。したがって、通常なき裂とは異なり [補足 A.4]、フィブリルがボイドの両面を連結して応力を支えているため、クレーズが試験片を完全に横切って形成した場合にもその直後には破断に至らない。クレーズが一定以上集積した領域にフィブリル強度を超える応力が作用すると、フィブリルが切断され、破断に至る。以上の延性破断のメカニズムを図 1.3(c) を用いて説明する。まず、初期硬化段階から巨視的降伏にかけてクレーズは材料全体に発生する。次に、分子鎖配向-未配向境界、すなわちくびれ進行端部でせん断帯に沿ってクレーズの集中領域を形成する [図 1.3(c)-(i),(ii)]。その後、後続再硬化段階におけるくびれ進行に伴ってクレーズ集中領域はその体積分率を増加しながら、引張方向へと伝ばする [図 1.3(c)-(iii)]。このとき、分子鎖配向領域においては加工硬化に伴いクレーズ先端にすべり線状の塑性域が形成されることで、クレーズの成長が停止する⁽¹⁴⁾。さらに、フィブリルの強度を超える応力が作用すると、クレーズの集中領域がクラック化し、くびれ進行端部から破断する [図 1.3(c)-(iv)]。また、クレーズ進展の特徴として、低ひずみ速度ほど成長しやすいというひずみ速度依存性が知られており⁽¹⁰⁾、この性質もクレーズ集中領域の伝ばの一因となる。一方、発生するクレーズの数は高ひずみ速度域ほど増大することが指摘されている⁽¹⁵⁾⁽¹⁶⁾⁽¹⁷⁾。したがって、図 1.5 に示すようにクレーズは高ひずみ速度域では多く発生し、その長さが短くなる一方、低ひずみ速度域では数が減少する代わりに長く成長することになる。

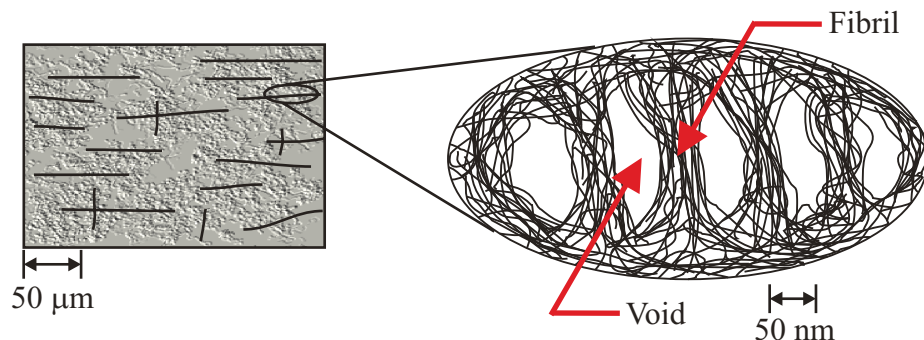


Fig. 1.4 Microscopic structure of craze.

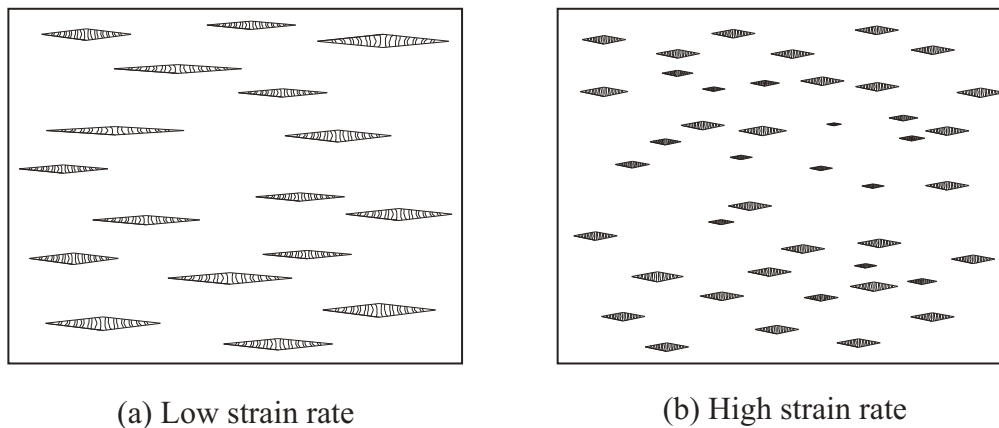


Fig. 1.5 Morphology of craze dependent on strain rate.

なお、クレーズは非晶性ポリマでは主に表面粗さや環境が影響している材料表面、結晶性ポリマでは材料内部、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ことが知られている。すなわち、クレーズは異方性を有している [補足 A.5]⁽¹¹⁾。

また、一般的に引張試験後の試験片はクレーズの形成に伴い、白濁することが知られている。このような白化現象は結晶性ポリマの場合に主として観察され、非晶性ポリマの場合には観察されない。加えて、非晶性ポリマの場合はラメラによる分子鎖の延伸を伴わず、単に分子鎖の引き抜きによって空隙(微視的損傷)が生じる [補足 A.3]。したがって、非晶性ポリマに生じる微視的損傷をクレーズと呼ばない場合もある。しかしながら、非晶性ポリマの場合にも空隙の成長が延性破断の前駆現象となることは結晶性ポリマと変わらないため、本研究では両者に生じる微視的損傷を統一してクレーズと呼ぶものとする。

1.2.3 応力-ひずみ曲線の特性

本項では 1.2.1 項で述べた単軸引張時の応力-ひずみ応答以外の、金属材料には見られないポリマ特有の応力-ひずみ応答の特性について述べる。

(a) ひずみ速度依存性および環境温度依存性

図 1.6 にポリマの降伏応力のひずみ速度依存性および環境温度依存性を示す。同図 (a) 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⁽⁹⁾。同図からわかるようにポリマは室温においてもひずみ速度の増加に伴い、降伏応力を含む塑性変形域での応力値が上昇する。すなわち、ひずみ速度に対して正の硬化特性を有する。なお、このようなひずみ速度依存性は、金属ではひずみ速度 1s^{-1} 程度以上⁽¹⁸⁾ の高速変形時もしくは再結晶温度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。また、ポリマにおいては高ひずみ速度ほど弾性変形領域における応力上昇の傾き、すなわち、縦弾性係数が増加する傾向も確認されているが、本研究では簡単化のため縦弾性係数は一定とする。一方、図 1.6(b) は PP の単軸引張試験から得られた真応力-真ひずみ曲線である [提供元：宇部興産 (株)]。同図からわかるようにポリマは、環境温度の増加に対して顕著に塑性変形域の応力値が減少する。すなわち、環境温度に対して負の硬化特性を有する。加えて、一般的にポリマは高温になるほど延性が増加する。

(b) 静水圧応力依存性

また、図 1.7 は PP の単軸引張および圧縮試験によって得られた応力-ひずみ曲線である⁽¹⁹⁾。同図からわかるようにポリマは圧縮時の降伏応力の方が引張時と比較して大きくなる降伏応力の非対称性を有する。引張時には静水圧応力は正となり、圧縮時には負となるわけであるから降伏応力の非対称性は降伏応力の静水圧応力依存性を表している。また、応力-ひずみ応答以外にも非弾性変形における体積変化を伴う場合には静水圧応力依存性を有することが一般的に知られている。特にポリマの場合、クレーズの形成により体積が必ずしも一定とならないため、クレーズ発展または体積ひずみの計算に、静水圧応力の影響が考慮されることが望ましい。

(c) 除荷時の非線形ひずみ回復

次に、図 1.8 は PP の引張予負荷後に圧縮負荷を与えることで除荷を行った場合の試験結果の応力-ひずみ曲線である。同図 (a) は金子・西山⁽²⁰⁾により得られた試験結果、同図 (b) は Grytten ら⁽²¹⁾によって得られた試

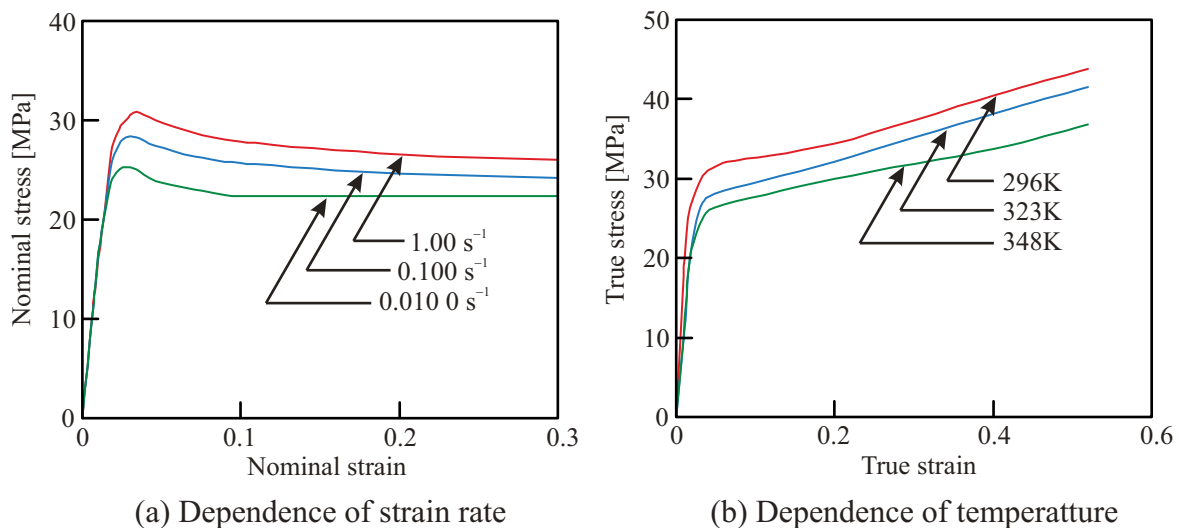


Fig. 1.6 Experimental stress-strain curves dependent on strain rate and temperature.

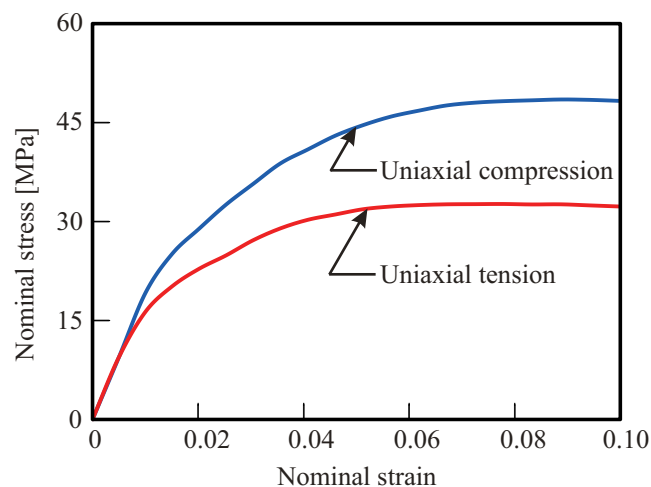


Fig. 1.7 Experimental stress-strain curves dependent on hydrostatic stress.

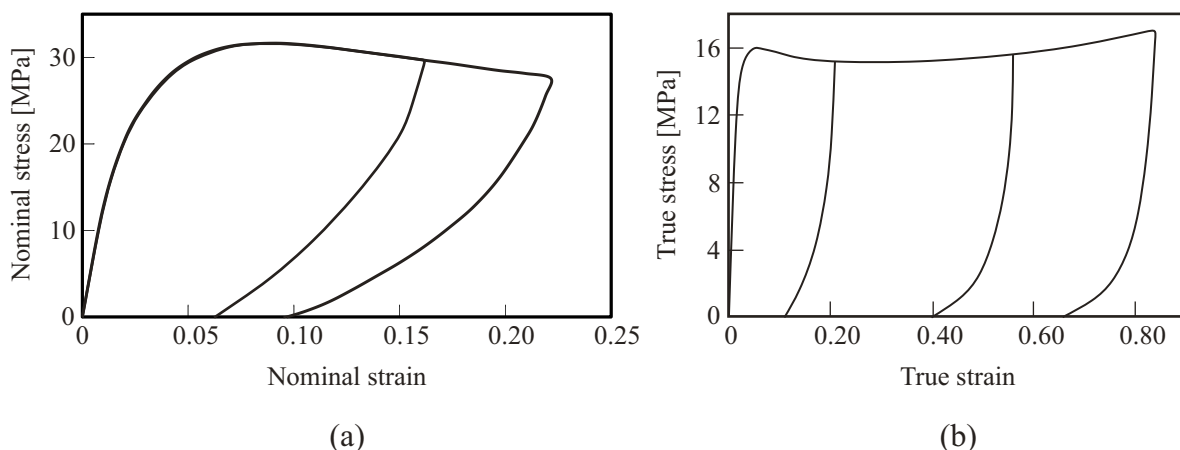
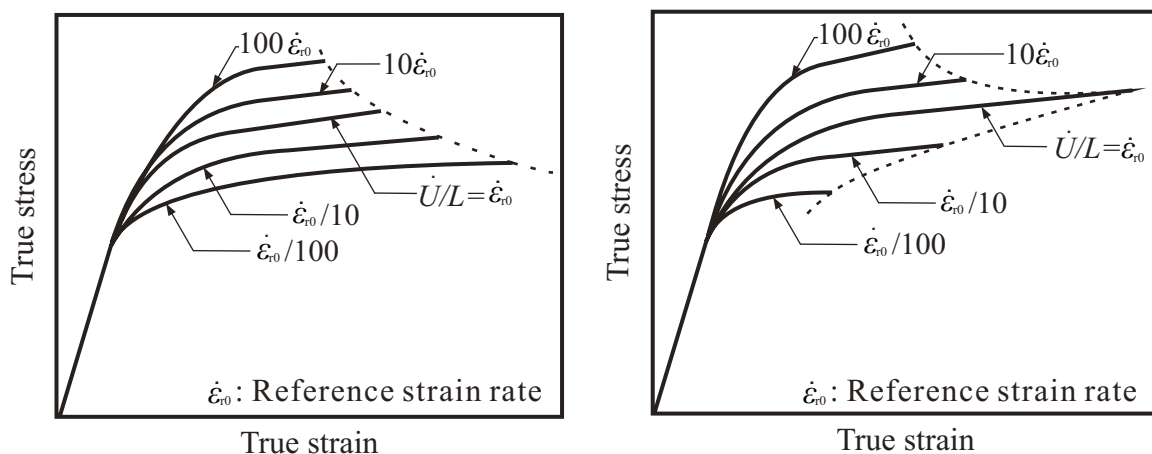


Fig. 1.8 Experimental stress-strain curves under reversal loading condition.



(a) Maximum ductility at lower strain rate (b) Maximum ductility at reference strain rate

Fig. 1.9 Schematic expression of change in fracture strain dependent on strain rate.

験結果である。金属材料が除荷過程において線形的な弾性ひずみ回復を生じる一方、ポリマは図 1.8 に示したように粘弾性効果⁽¹²⁾によってひずみが非線形に回復し、弾性ひずみ分以上にひずみが回復する⁽²²⁾⁽²³⁾⁽²⁴⁾。このため、ポリマは塑性加工後の形状がそのまま保持されにくく、加工精度低下の原因となっている⁽²⁵⁾。上述のような粘弾性効果は分子鎖間の接触すべり摩擦により生じる粘性ひずみ速度により生じていると考えられている。また、予負荷時に不均一変形を生じた場合、ひずみの局所化領域に荷重が集中するため、例え負荷状態であってもひずみ速度せん断帯以外の部位が相対的に除荷状態となる。したがって、図 1.8 のような非線形ひずみ回復現象をモデル化することは全体除荷時のみならず、全体負荷時における挙動を正確に予測する上でも重要となってくる。また、単軸引張特性と同様に、非晶相の性質が担っている現象であるため、一般的に非晶性ポリマのほうがひずみ回復は大きい⁽²⁶⁾。

(d) 延性のひずみ速度依存性

最後に、図 1.9 にポリマのひずみ速度に依存した破断ひずみの変化の模式図を示す。ポリマにおいては同図 (a) に示したように低ひずみ速度になるほど延性が増加する金属材料と同様の傾向を示す場合⁽²⁷⁾ならびに最

大延性を呈する参照ひずみ速度を境にそれより低ひずみ速度域および高ひずみ速度域の双方で延性が低下する特異な脆化現象を示す場合⁽¹⁰⁾⁽²⁸⁾⁽²⁹⁾の2通りの傾向が確認されている。前者はほとんどの結晶性ポリマにおいて観察され、後者は主に非晶性ポリマにおいて観察されることから低ひずみ速度域での脆化現象が非晶相に固有の力学特性に基づくものであることが予想される。しかしながら、図1.9のようなひずみ速度に依存した破断傾向の相違が表れる原因は現在までに明らかになっていない。したがって、ポリマの破断予測モデルはこのようなひずみ速度に依存した延性の変化を柔軟に予測できるモデルであることが望ましい。

1.3 ポリマの材料モデルに関する従来の研究と問題点

1.3.1 巨視的塑性論

前項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⁽³⁰⁾。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⁽³¹⁾⁽³²⁾を用いることにより再現されており、ひずみ速度⁽³³⁾⁽³⁴⁾、非共軸性⁽³⁵⁾⁽³⁶⁾⁽³⁷⁾、熱発生および熱伝導など⁽³⁸⁾⁽³⁹⁾⁽⁴⁰⁾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⁽⁴¹⁾もある。さらに、水野・佐野村⁽⁴²⁾、金子・西山⁽²⁰⁾やDrozdov⁽⁴³⁾によって、除荷時の非線形ひずみ回復応答を再現可能な構成式が、Sanomura⁽¹⁹⁾によって降伏応力の静水圧応力依存性を再現可能な構成式がそれぞれ提案されている。

しかしながら、これらのモデルは全て古典的な現象論的塑性論に基づいており、分子鎖、クレーズ、自由体積など、ポリマ内部の微視構造の力学的挙動が巨視的な変形挙動に及ぼす影響については考慮されていない。したがって、FEM解析によって、ポリマ内部の微視的構造の情報を評価することも不可能である。また、一般的に現象論的塑性論を用いて非線形ひずみ回復やひずみ速度せん断帯などを表現できる精密なモデルを構築しようとするれば、構成式が複雑化するとともに実験的に決定できない材料定数が増加してしまう問題がある。

一方、近年では、様々な材料の微視的不均一性を陽に考慮したモデルを構築することでマクロな力学応答をより正確に記述しようとする試みが盛んである。このような試みはマルチスケールモデリングと呼ばれ、これまで個別に研究がなされていた材料科学の知見を固体力学と接続するモデリング手法である。このマルチスケールモデリングを用いれば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可能である。なお、ポリマの場合には金属におけるBurgersベクトルの大きさのような特性長、すなわち、基準となるスケールが存在せず、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、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用いる。一般的にマルチスケールモデルは巨視的塑性論と比較してより本質的な現象に近づくため、構成式が簡潔となる。一方、材料の微視的不均一性の情報を数値解析に取り込むため、マクロな変形応答を得るための計算コストは増加する傾向にある。

1.3.2 分子鎖網目理論

ポリマに対するマルチスケールモデルの代表的な例として分子鎖網目理論が挙げられる。以下にその概要を述べる⁽³⁾⁽⁴⁴⁾。樹脂材料に対する分子鎖網目理論においては非晶性ポリマの塑性変形の素過程を図1.10に示すような分子鎖の2重キックの発生とその伝ばであると捉えるArgonのモデルを採用している。このキック回転に要する活性化エネルギーを1.3.7項で紹介するEyringの反応速度論に関連づけて提案されたのがArgon

硬化則⁽⁴⁵⁾であり、次式のように表わされる。

$$\dot{\gamma}^p = \dot{\gamma}_{0A} \exp \left[-\frac{A\tilde{s}}{\theta} \left\{ 1 - \left(\frac{\hat{\tau}}{\tilde{s}} \right)^{\frac{5}{6}} \right\} \right] \dots\dots\dots (1.1)$$

ここで、 $\dot{\gamma}^p$ は塑性せん断ひずみ速度、 $\dot{\gamma}_{0A}$ は参照せん断ひずみ速度、 θ は環境温度、 $\hat{\tau}$ は有効せん断応力、 A は材料定数である。また、 $\tilde{s} = s - \alpha_p \sigma_m$ は静水圧応力 σ_m の影響を含むせん断強度であり、 α_p は静水圧応力依存性を決定する材料定数である。さらに、 s は $s = 0.077G/(1 - \nu)$ によって計算されるせん断強度、 G は横弾性係数、 ν はポアソン比である。式 (1.1) の Argon 硬化則を用いた解析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よく説明できることが知られており、次式のせん断強度の発展式⁽⁴⁶⁾を介すことによって、降伏後のひずみ軟化を再現可能である。

$$\dot{s} = h \left(1 - \frac{s}{s_{ss}} \right) \dot{\gamma}^p \dots\dots\dots (1.2)$$

ここで、 h は軟化係数、 s_{ss} はせん断強度の平衡値である。ただし、Argon 硬化則単体では、ひずみ軟化後の配向硬化を表すことができず、また、降伏前の非線形粘弾性応答についても再現することができない。

これに対し、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。このような分子鎖の挙動に関する研究の歴史は古く、Kuhn-Grün⁽⁴⁷⁾ 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⁽⁴⁸⁾⁽⁴⁶⁾、8 鎖⁽⁴⁹⁾、連続鎖分布⁽⁵⁰⁾ モデルなどの分子鎖網目理論⁽⁵¹⁾⁽⁵²⁾⁽⁵³⁾ が提案されている。中でも、Arruda-Boyce⁽⁴⁹⁾ 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ているとする 8 鎖モデルを提案し、次式で計算される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。

$$B_i = \frac{1}{3} C^R \sqrt{N} \frac{V_i^{p2} - \lambda_{ch}^2}{\lambda_{ch}} L^{-1} \left(\frac{\lambda_{ch}}{\sqrt{N}} \right), \quad \lambda_{ch} = \sqrt{(V_1^{p2} + V_2^{p2} + V_3^{p2})/3} \dots\dots\dots (1.3)$$

ここで、 B_i は背応力テンソル B_{ij} の主値、 N は 1 本の分子鎖中の平均的なセグメント数、 V_i^p は左塑性ストレッチテンソル V_{ij}^p の主値、 L^{-1} は Langevin 関数 $L(x) \equiv \coth x - (1/x)$ の逆関数である。また、 $C^R \equiv nk_B \theta$ であり、 n は単位体積あたりの分子鎖の本数、 k_B は Boltzmann 定数である。式 (1.3) で計算される背応力 \mathbf{B} を

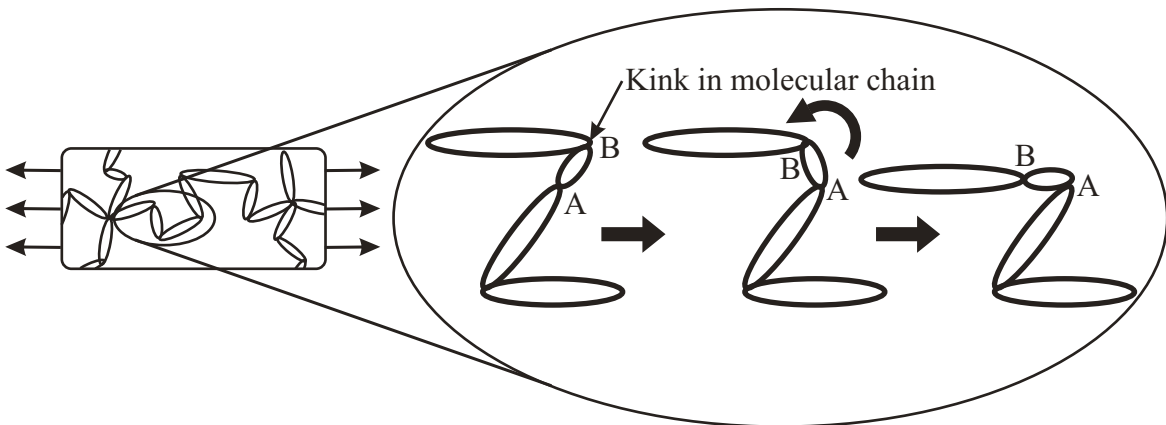


Fig. 1.10 Kink rotation in glassy polymer (Argon’s concept for elementary process of plastic deformation)⁽³⁾.

用いて有効応力 \hat{T} は $\hat{T} = T - B$ のように評価され、さらに式 (1.1) の有効せん断応力 $\hat{\tau}$ は $\hat{\tau} = \sqrt{(\hat{T}' \cdot \hat{T}')}/2$ のように計算される。ここで、 T は Cauchy 応力であり、 T' はその偏差部分である。以上の 8 鎖モデル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⁽⁵⁰⁾ によって指摘されている。田中ら⁽⁵⁴⁾、Tomita-Tanaka⁽⁵⁵⁾ および Tomita ら⁽⁵⁶⁾ 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⁽⁵⁷⁾ 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。

しかしながら、非晶性ポリマに対するいずれのモデルも J_2 -流れ理論 [補足 A.6] または J_2 -変形理論⁽⁵⁸⁾⁽⁵⁹⁾ 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、ひずみ速度せん断帯の形成・伝ば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。

1.3.3 結晶塑性論

結晶塑性論⁽⁶⁰⁾⁽⁶¹⁾⁽⁶²⁾ とは単結晶金属の塑性変形が図 1.11 のようなあるすべり面における特定方向への単純せん断モードで生じると考えることで、塑性速度こう配をこれらのすべりの重ね合わせで得られるとする理論である。このとき、すべり系番号を α 、すべり面の法線方向ベクトルを $m^{(\alpha)}$ 、すべり方向を $s^{(\alpha)}$ で表わす。また、図 1.11 の $\tau^{(\alpha)}$ は分解せん断応力と呼ばれるすべり面上に負荷されるせん断応力であり、 $s^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)}$ を用いて次式のように定義される。

$$\tau^{(\alpha)} \equiv s^{(\alpha)} \cdot (Tm^{(\alpha)}) \dots \dots \dots (1.4)$$

この結晶塑性論は塑性変形の素過程をすべりという解像度を用いて記述することから従来の巨視的な塑性論から金属のメゾスコピックな構造に一步踏み込んだ理論であると言える。また、結晶塑性論においてはすべりの集積として塑性変形速度が得られるため、降伏条件が不要となる [補足 A.7]。したがって、各すべり面で生じるすべり速度の大きさを計算する硬化則のみによって塑性変形挙動を記述でき、理論体系が非常に簡潔となる。さらに、塑性速度こう配の反対称部分から容易に塑性スピンを計算できるため、共回転スピンを下部構造スピンとして特定可能である。結晶塑性論を用いたマルチスケール解析手法の例として、一つの物質点に多数の結晶粒を埋め込むことでマクロスケールの解析を可能とする多結晶体の解析手法⁽⁶³⁾⁽⁶⁴⁾⁽⁶⁵⁾⁽⁶⁶⁾⁽⁶⁷⁾ および金属の微視的転位場の情報を硬化則に取り込んだ転位-結晶塑性論⁽⁶⁸⁾⁽⁶⁹⁾ が挙げられる。

以上の理論体系は原則として明確なすべり面が定義可能な金属結晶に対してのみ適用可能である。ただし、結晶性ポリマの結晶相においては分子鎖が規則的に配列するため、金属の結晶格子と同じく結晶構造をとる。さらに、同構造においては分子鎖の折りたたみ構造が形成する面で生じるすべりが塑性変形の素過程となるため、結晶塑性論がそのまま適用可能となる。結晶塑性論を用いて完全結晶性のポリマに対する力学応答を評価している例として Parks ら⁽⁷⁰⁾⁽⁷¹⁾ の解析が挙げられる。一方、結晶塑性論の利点をそのまま非晶性ポリマに対しても活かす試みとして次項に述べる結晶塑性論的分子鎖塑性論が提案されている。

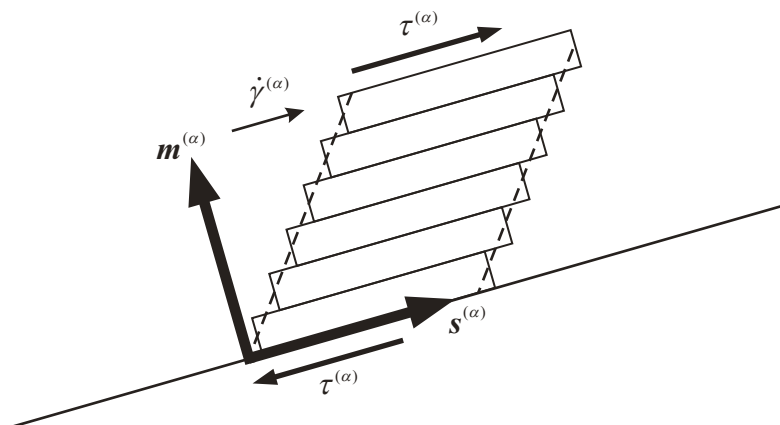


Fig. 1.11 Simple shear deformation in slip system of crystal plasticity theory.

1.3.4 結晶塑性論的分子鎖塑性論

先に述べた分子鎖網目理論における課題を解決するため、灘・志澤⁽⁷²⁾⁽⁷³⁾は非晶性ポリマにおける塑性変形の素過程を分子鎖網目理論と同様に分子鎖のキンク回転と捉える Argon⁽⁴⁵⁾のモデルを採用し、これを金属結晶におけるすべりに相当する現象とみなすことで8鎖モデルに基づく「分子鎖すべり系」の概念⁽⁷⁴⁾を新たに提案している。さらに、提案した分子鎖すべり系に基づき結晶塑性論の体系を利用した非晶性ポリマのモデルとして結晶塑性論的分子鎖塑性論を構築している。結晶塑性論的分子鎖塑性論においては分子鎖の配向を可視化するために、通常の結晶塑性論においては固定されているすべり系間の角度が変化することを許容しており、これによって分子鎖すべり系の独立回転が可能となる [図 1.12]。一方、Hasan-Boyce⁽²²⁾は、非晶性ポリマにおける局所せん断変形が可能な領域(自由体積)の分布を確率密度関数として微視的降伏機構を特定しない Eyring の速度論⁽⁷⁵⁾における活性化エネルギーへ導入することにより、非弾性ひずみ速度を計算する方法を提案している。この自由体積変化に基づく非弾性応答則は Argon の硬化則と異なり、非晶性ポリマの降伏前の非線形粘弾性応答を精度良く再現可能であるため、分子鎖塑性論においては分子鎖網目理論とは異なり、その硬化則に Hasan-Boyce による自由体積変化に基づく非弾性応答則を採用している。また、灘・志澤⁽⁷⁶⁾は同モデルを用いた大変形 FEM 解析を行うことで、非晶性ポリマのひずみ速度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するとともにひずみ速度せん断帯の通過領域における分子鎖配向を可視化している。

さらに、非晶性ポリマ内部の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に、金属の多結晶塑性解析において用いられる拡張 Taylor モデル⁽⁷⁷⁾を同理論に適用している⁽⁷⁸⁾⁽⁷³⁾。すなわち、分子鎖すべり系の初期方位を各積分点においてランダムに設定し、さらに1積分点に多数の絡み点(すべり系方位のセット)を与えている。加えて、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ている。しかしながら、分子鎖塑性論は分子鎖網目理論と同様、非晶性ポリマに対して提案されたモデルであり、そのままの形ではより工学的な実用性が高い結晶性ポリマの解析に適用できないという問題がある。また、上記の解析は全て平面すべり問題を想定して実施されているため、分子鎖塑性論においても非晶性ポリマの内部構造として8鎖モデルを採用することの妥当性については検証されていない。さらに、降伏応力の静水圧応力依存性やクレーズの進展についても考慮されていないという課題が残されている。

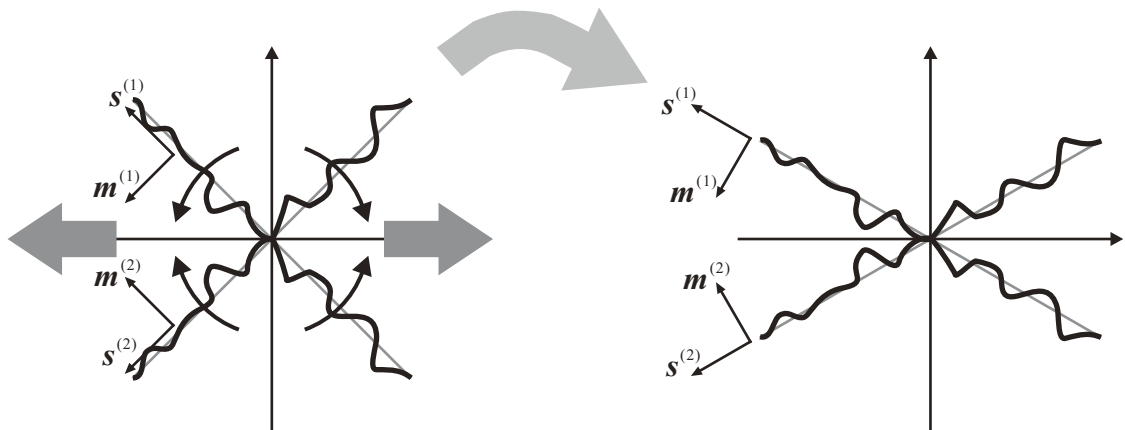


Fig. 1.12 Independent rotation of molecular chain slip systems in molecular chain plasticity theory⁽³⁾.

1.3.5 結晶性ポリマへの応用と均質化法

実際に構造材料として用いられるポリマは結晶性ポリマであることが多いため、工業的には非晶性ポリマだけでなく結晶性ポリマの力学応答が評価できることが望ましい。そこで、分子網目理論を結晶性ポリマの非晶相に、通常結晶塑性論を結晶相に適用することで複合材料としての性質を有する結晶性ポリマをモデル化する試みがなされている⁽⁷⁹⁾⁽⁸⁰⁾⁽⁸¹⁾。その際、分子鎖の並んだ方向である分子鎖方向には非延伸⁽⁷⁰⁾という性質を持つため、結晶相の構成式に対しては分子鎖方向への非延伸拘束を導入している。

しかしながら、非晶相および結晶相の力学特性ならびに両相の相互作用を考慮し、図 1.1(b) に示したような結晶性ポリマの微視構造における変形応答を記述可能になったとしても、それは非常に微小な領域を解析対象としているため、一般的な試験片サイズの実験結果との定量的な比較には用いることができない。したがって、実用的な解析結果を得るためにはより多くの結晶相を含む巨視的な領域を解析対象とすることが望ましいが、そのためには膨大な計算コストが必要となる。このような問題を解決するために、数値解析的に用いられる手法の一つが均質化法⁽⁸²⁾⁽⁸³⁾⁽⁸⁴⁾である。均質化法とは結晶性ポリマのように不均一な組織をもつ材料の微視的不均一場の変形情報および巨視的な変形情報を橋渡しする理論である。すなわち、マクロ構造の物質点の近傍において材料内の非均質性に関する十分な情報を含むマイクロ構造を設定することで非一様に分布する応力・ひずみ状態を陽に記述し、さらに、これらの値のマイクロ構造全体での体積平均量をマクロ構造の代表値とする⁽⁸²⁾。このとき、マイクロ構造の代表体積要素であるユニットセルには周期性を仮定するため、通常のフルスケールモデルに基づく構造全体の解析を実施した場合と比較して低い計算コストで微視的不均一性を陽に考慮した構造全体の解析が実施可能となる。さらに、均質化法のマクロ構造の支配方程式は古典力学体系における支配方程式と一致するため、従来の有限要素法のコードにマイクロ構造の解析コードを付け加えるだけでマイクロマクロ連成解析を実装可能である。なお、通常の均質化理論においてはマイクロ構造の寸法がマクロ構造の寸法と比較して無限小であることを仮定する。したがって、ユニットセルとして想定する実材料のマイクロ領域の寸法はそのマクロ構造と比較して十分小さくなければならない。また、この寸法比に対する仮定から均質化法ではマイクロ構造の寸法が変形応答に与える影響、すなわち、寸法効果を表すことができない。これはマイクロ構造の変形がマクロひずみのみによって駆動するためであり、このような均質化法は 1 次均質化法とよばれる。一方マクロひずみに加え、マクロのひずみこう配をマイクロ構造へ与える均質化法は 2 次均質化法⁽⁸⁵⁾⁽⁸⁶⁾⁽⁸⁷⁾と呼ばれる。この 2 次均質化法を用いれば、マイクロ構造およびマクロ構造の寸法比が具体的に特定され、寸法

効果を表すことが可能となる。ただし、ひずみこう配のような高次の物理量を用いた場合には連続体力学を非局所系の理論として扱う必要があり、理論展開が複雑となる。したがって、本研究では1次均質化法を採用し、局所系の連続体力学の範疇でモデル化を行う。

また、1次均質化法を採用した研究としては次のような例が挙げられる。Ohnoら⁽⁸⁸⁾は歪弾性形構成式に基づく有限変理論の枠組みにおける均質化理論を定式化し、周期材料に対する微視的分岐座屈を検討している。さらに、仲町ら⁽⁸⁹⁾⁽⁶⁷⁾は均質化法を用いて、非均質な微視結晶構造の特性を基に巨視変形特性を記述する結晶塑性均質化FEM解析手法を構築し、マイクロ構造の結晶方位数が巨視的塑性降伏特性に及ぼす影響を考察している。一方、Uchida-Tada⁽⁹⁰⁾はPPの非晶相と結晶相の積層構造を分子鎖網目理論および結晶塑性論によってモデル化し、両相におけるひずみの連続性および界面における応力の釣り合い条件から積層複合体に対する構成式を導出している。さらに、積層構造が放射状に成長したメゾスケールをユニットセルとして均質化法を適用することで、複雑な球晶構造をもつ結晶性ポリマのマルチスケールFEM解析を実施可能としている。しかしながら、Uchida-Tadaのような球晶構造のポリマに対する解析はマイクロ-メゾ-マクロの3階層を橋渡しするため、複雑な計算手順を要し、計算負荷も大きい。また、変形応答のみに焦点が当てられておりクレーズのような微視的損傷の進展は考慮されていない、分子鎖配向状態を直接可視化できないなど、分子鎖網目理論を用いた非晶性ポリマの解析と同様の課題がある。

1.3.6 連続体力学における損傷の表現

き裂の力学的挙動は最近の破壊力学の著しい進歩によって明らかにされつつあるのに対し、き裂が生じるまでに問題となる損傷については、微視的な観察は多くなされているものの、破壊力学に対応できるような連続体力学的アプローチは未だ十分でない。このような背景から微視的な損傷を大域的に捉え、力学的な議論をしようとする損傷理論の試みが近年注目されつつある。特に、ポリマにおいては高ひずみ領域が必ずしも破壊部位とは一致しないため、クレーズの進展挙動を再現し、破壊予測が可能な構成モデルへの期待が高まっている。

Lemaitre⁽⁹¹⁾は材料の断面積から損傷の存在する部分を取り除いた有効断面積によって応力は伝達されるといふGrabacki⁽⁹²⁾やRabonov⁽⁹³⁾による見解を用いて、ひずみ等価配置の仮説を立て、不可逆的熱力学的議論に基づいた構成式を導出した。さらに、小林ら⁽⁹⁴⁾はスカラクレーズ密度を全自由エネルギー⁽⁹⁵⁾に導入することで、クレーズの影響を考慮した弾性構成式および非共軸粘塑性構成式を熱・力学的体系に整合する形で導出している。また、損傷は単軸応力下の単純な負荷経路においてはスカラとみなして十分であるが、多軸応力下の挙動においては方向性をもつテンソルで表現することが望ましい。そこで、村上・大野により損傷テンソルが導入された⁽⁹⁶⁾。

一方、損傷の進展を数値解析で再現するためには、その影響を含んだ構成式に加え、損傷の進展を表現する損傷発展式が必要となる。Gursonはボイドの成長は静水圧応力に依存するとしたボイド発展式⁽⁹⁷⁾を提案し、その発展式をSteenbrinkがポリマに適用して数値解析を行っている⁽⁹⁸⁾。また、井上らは実験的にクレーズ発展式を導出している⁽¹¹⁾が、彼らは材料表面に現れるクレーズを測定しており、その結果から導出された発展式を材料内部のクレーズに適用して数値解析を行えば、分子鎖配向領域においてクレーズが集中的に発生してしまう。すなわち、この発展式を用いた場合はくびれの進行部位における破壊を再現できない。小林らはGursonのボイド発展式を参考にしたクレーズ発展式を、熱・力学的体系に整合する形で導出している⁽⁹⁴⁾。この発展式は、クレーズの生成・成長・消滅を考慮しており、クレーズ集中領域の伝ばが再現可能である。しかしながら、ポリマにおける分子鎖配向領域でのクレーズの消滅は、実験による根拠が乏しく、不確かな現象である。その後、田中ら⁽⁹⁹⁾によってクレーズ進展のひずみ速度依存性と加工硬化による成長を考慮したクレーズ発展式が提案され、ポリマが延性破壊に至る直前までの経緯を数値解析上で再現することが可能になった。さらに、高橋ら⁽¹⁰⁰⁾は、クレーズ進展のひずみ速度依存性をより正確に再現できるよう田中らのクレーズ発展

式を拡張するとともに一般的な市販の汎用構造解析ソルバを用いても解析が行えるように塑性平均垂直ひずみの発展式をモデル化し直した。しかしながら、これらは、ポリマ材料が最も延性を呈するひずみ速度を参照した検討であり、高速域や低速域でのクレーズの特徴的な形態依存性などについても考慮した検討の例は少ないのが現状である⁽¹⁰¹⁾。また、いずれの損傷発展式も現象論的に構築された巨視的なクレーズ発展式を採用しているため、分子鎖塑性モデルのようなポリマの微視的な情報に踏み込んだモデルに対してこれらのクレーズ発展式を導入することは望ましくない。加えて、ひずみ速度依存性を導入するために、クレーズ密度が幾何学量であるひずみ速度によって発展するとしてモデル化されており、応力という力学量によってクレーズ進展が駆動するようになっていないという点も好ましくないと言える。

一方、クレーズに関する実験は古くから数多く行われており⁽¹⁰²⁾⁽¹⁰³⁾⁽¹⁰⁴⁾⁽¹⁴⁾、北川・川越⁽¹⁰⁵⁾はクレーズの発生および成長を Eyring の反応速度論に基づいて定式化することで、クレーズ発生の時間依存性ならびに応力依存性が良く再現可能であることを示している。また、古口・堀⁽¹⁰⁶⁾は反応速度論の体系において、クレーズの加工硬化領域における成長停止現象をクリープひずみの増加による活性化エネルギーの増大として表している。

1.3.7 Eyring の反応速度論

本項では、高分子材料の非弾性現象の統計的記述に多く採用される Eyring らによる反応速度論 (遷移状態理論: Transition State Theory)⁽⁷⁵⁾⁽¹⁰⁷⁾ について説明する。先に述べた Argon 硬化則や Hasan-Boyce の非弾性応答則はいずれも本理論に基づいて提案されている。なお、反応速度論は速度過程論とも呼ばれ、速度過程のことを熱活性化過程という場合もある。また、負方向の反応速度項を無視する場合には単に Arrhenius の式と呼ばれることも多く、必ずしも反応速度論という名称で用いられないということに注意されたい。

図 1.13 は縦軸にエネルギー、横軸に反応座標をとった、原子または分子の反応状態の模式図である。同図 (a) に示すように、一般に物質を構成する原子あるいは分子は平衡点周りで熱振動を行っている。また、同図 (b) に示すように、原子また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エネルギー障壁を越える必要がある。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言う。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

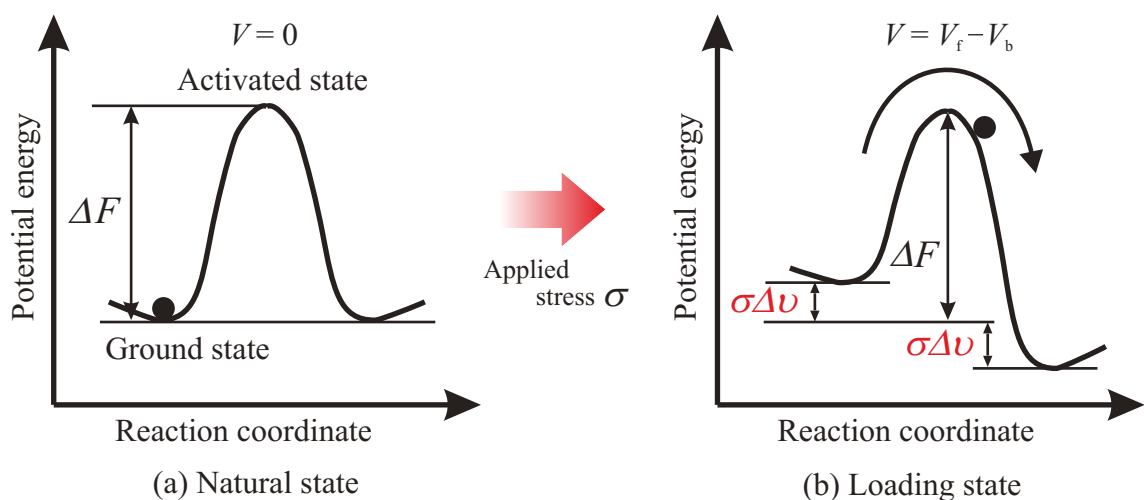


Fig. 1.13 Change in potential energy barrier due to applied stress.

壁を乗り越える速さ(頻度) V は次式で表される.

$$V = \omega_c \exp\left(-\frac{\Delta F}{k_B \theta}\right) \dots\dots\dots (1.5)$$

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(1.5)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 形の関係式とも呼ばれる. 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 Gibbs の活性化自由エネルギーであり, 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 とすれば次式のような関係がある.

$$\Delta F = \Delta H - \theta \Delta S \dots\dots\dots (1.6)$$

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, すなわち反応は結果として生じない. しかしながら, 応力 σ が作用すると, 図 1.13(b) のようにポテンシャル障壁が変化するため, 原子あるいは分子の移動はポテンシャルエネルギーの低い方向へ生じるようになる. このとき, 正方向への速さ V_f および負方向への速さ V_b はそれぞれ次式のように与えられる.

$$V_f = \omega_c \exp\left(-\frac{\Delta F - \sigma \Delta v}{k_B \theta}\right), \quad V_b = \omega_c \exp\left(-\frac{\Delta F + \sigma \Delta v}{k_B \theta}\right) \dots\dots\dots (1.7)$$

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. また, $\sigma \Delta v$ の項は応力による見かけの活性化エネルギー変化を表す. 式(1.7)より, 有効速度 V は次式で表される.

$$V = V_f - V_b = \omega_c \left[\exp\left(-\frac{\Delta F - \sigma \Delta v}{k_B \theta}\right) - \exp\left(-\frac{\Delta F + \sigma \Delta v}{k_B \theta}\right) \right] \dots\dots\dots (1.8)$$

一般には, $\sigma \Delta v \gg k_B \theta$ となることが多く, この場合式(1.8)は次式のように正方向への反応速度のみで表わされる [補足 A.8].

$$V = \omega_c \exp\left(-\frac{\Delta F - \sigma \Delta v}{k_B \theta}\right) \dots\dots\dots (1.9)$$

ただし, 5章で紹介する Hasan-Boyce の非弾性応答則については, 負方向への反応速度まで考慮した式(1.8)に基づいて提案されている. 以上の反応速度論の体系はポリマにおける非弾性現象の時間依存性ならびに温度依存性を良く表わすモデルとして知られている.

さらに, Kocks ら⁽¹⁰⁸⁾ 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(1.9)で表される Eyring の速度式を次のように書き換えている [補足 A.9].

$$\dot{\gamma}^p = \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\frac{\Delta F_f}{k_B \theta}\right) \dots\dots\dots (1.10)$$

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.

$$\Delta F_f = \Delta F_0 \left\{ 1 - \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^p \right\}^q \dots\dots\dots (1.11)$$

ここで, ΔF_0 は無応力状態での活性化エネルギー, τ_0 は参照応力, p および q は材料毎の非弾性変形に固有の定数であり, 例えば高分子材料の場合, $p = 5/6$, $q = 1$ がよく用いられる. また, $p = 1$, $q = 1$ の場合には

$\Delta v_\tau = \Delta F_0/\tau_0$ という関係を用いることで式 (1.10) は負荷応力をせん断応力で表記した場合の反応速度論に一致する [補足 A.9]. ただし, p および q の値の違いによる解析結果のひずみ速度依存性および環境温度依存性への影響はそれほど大きくないということも報告されている⁽²²⁾. 一方, 灘⁽³⁾ は p および q が Pan-Rice 形ひずみ速度硬化則におけるひずみ速度感度指数に相当する変数であるとしてこれらを陽に表記したまま自由体積変化に基づく非弾性応答則を定式化している. しかしながら, 厳密には p および q はひずみ速度感度指数に完全に対応する変数ではない. 加えて, 5.3.3 項で提案する材料定数の同定方法を用いれば, p および q を変化させずに反応速度論のひずみ速度依存性を制御可能である. そこで, 本研究では簡単化のため $p = 1$, $q = 1$ と置き, p および q を変数として陽に表示しないものとする.

一方, Kocks らによって提案された式 (1.11) では活性化エネルギーの変化に対してせん断応力の寄与しか考慮されておらず, 静水圧応力への依存性を表すことができない. 反応速度論の体系に静水圧応力依存性を導入する方法は Duckett ら⁽¹⁰⁹⁾⁽¹¹⁰⁾ によって次式のように提案されている.

$$V = \omega_c \exp\left(-\frac{\Delta F - \tau \Delta v_\tau - \sigma_m \Delta v_m}{k_B \theta}\right) \dots \dots \dots (1.12)$$

ここで, $\sigma_m \equiv (1/3)\text{tr}\mathbf{T}$ は静水圧応力を表し, Δv_τ および Δv_m はそれぞれせん断応力および静水圧応力に対する活性化体積を表す. 式 (1.12) は σ_m が正, すなわち引張時にはポテンシャル障壁が減少し, σ_m が負, すなわち圧縮時にはポテンシャル障壁が増大することを表している. したがって, 式 (1.12) を用いることによって, 引張および圧縮解析における降伏応力の非対称性を導入可能である. 以上より, 5 章では式 (1.10) および式 (1.12) に基づいて材料応答則を定式化する.

1.4 本研究の目的

前節までに述べたポリマの力学特性および従来の研究の問題点を踏まえ, 本研究では大きく次の 2 つのことを目的とする. すなわち, 結晶性ポリマを含む延性ポリマの大変形および破断挙動をより適切に予測可能な材料モデルの構築ならびに構築したモデルを用いたマルチスケール FEM 解析によるポリマの大変形挙動の再現および延性破断の予測である. 以下にそれぞれの目的の詳細を述べる.

1.4.1 延性ポリマの材料モデルの構築

図 1.14 に本研究のモデル化の模式図を示す. まず, 弾性変形についてはポリマの非晶・結晶の両相において微小であるとし, 等方性の線形弾性応答を仮定する. また, 前節までに述べたように, ポリマの非晶相では塑性変形に伴う分子鎖の配向により, 引張方向への剛性が上昇する変形誘起異方性を生じる. 一方, 結晶相では分子鎖が規則的な配列を有するため, 顕著な塑性異方性を示す. 通常の現象論的塑性論では, 多くの場合, 塑性変形に対する等方性を仮定しており, 上述のような分子鎖方位に起因する異方性を再現することはできない. そこで, 本研究では金属結晶の異方性を表すのに適したモデルである結晶塑性論に基づいてポリマの異方性をモデル化する. その際, 非晶相に対しては結晶塑性論的分子鎖塑性モデルを, 結晶相には通常の結晶塑性論を適用する. 一方, 方位に依存しない統計量としての非弾性応答の記述には 1.3.7 項で述べた反応速度論の体系を採用する. 反応速度論の体系を用いれば, 非弾性変形特性のうち, ポリマの降伏応力のひずみ速度依存性, 環境温度依存性および静水圧応力依存性などが自然に導入可能である. 加えて, ポリマの破断予測で重要な役割を果たすクレーズ進展も反応速度論によって記述可能である. 以上の各相におけるモデル化を具体的に述べれば下記のようになる.

- (1) 延性ポリマの非晶相に対しては結晶塑性論的分子鎖塑性論を適用するとともにその材料応答則として反応速度論に基づいて提案された自由体積変化に基づく非弾性応答則を採用する. その際, 降伏応力の静

水圧応力依存性および除荷時の非線形ひずみ回復を表せるよう自由体積変化に基づく非弾性応答則を拡張する。

- (2) 延性ポリマの結晶相には通常の結晶塑性論ならびに反応速度論に基づく材料応答則を適用する。また、べき乗則の材料応答則を用いた場合の結晶相の材料定数から反応速度論における材料定数を決定する手法を新たに提案する。
- (3) ポリマの非晶相に特有の微視的損傷，すなわち，クレーズの発生および成長を表す損傷発展式を新たに反応速度論の観点から構築する。

さらに，本研究では非晶性および結晶性ポリマの微視的内部構造の不均一性を考慮したマクロスケールの解析を実施可能とするために，均質化理論を適用する。これによって，上述のモデル化によって得られた変形場の支配方程式をマイクロおよびマクロスケールの支配方程式へと分離する。また，本理論のように分子鎖塑性論および結晶塑性論をポリマの微視構造に適用し，同領域を均質化して得られるマルチスケールな解析モデルを便宜上，「均質化分子鎖塑性モデル」と呼ぶこととする。

1.4.2 FEM 解析によるポリマの大変形挙動の再現

前項で述べたモデルを用いたマルチスケール FEM 解析を実施することによる目的を下記に列挙する。ただし，本研究では，計算コスト削減の観点から下記の (1)~(3) の検討を平面ひずみ条件による二次元解析で実施する。その後，(4) で述べるように，三次元問題へと拡張した解析を実施することで本モデルの三次元解析における妥当性について言及する。なお，解析対象は非晶性ポリマの場合には PMMA 平板，結晶性ポリマの場合には PP 平板を想定するものとする。

- (1) マクロ構造の単軸引張試験におけるポリマの非弾性変形の特徴，すなわち，ひずみ速度せん断帯を伴うくびれの伝ば，くびれ通過部位における分子鎖の引張方向への配向，クレーズ集中領域の伝ばおよび分

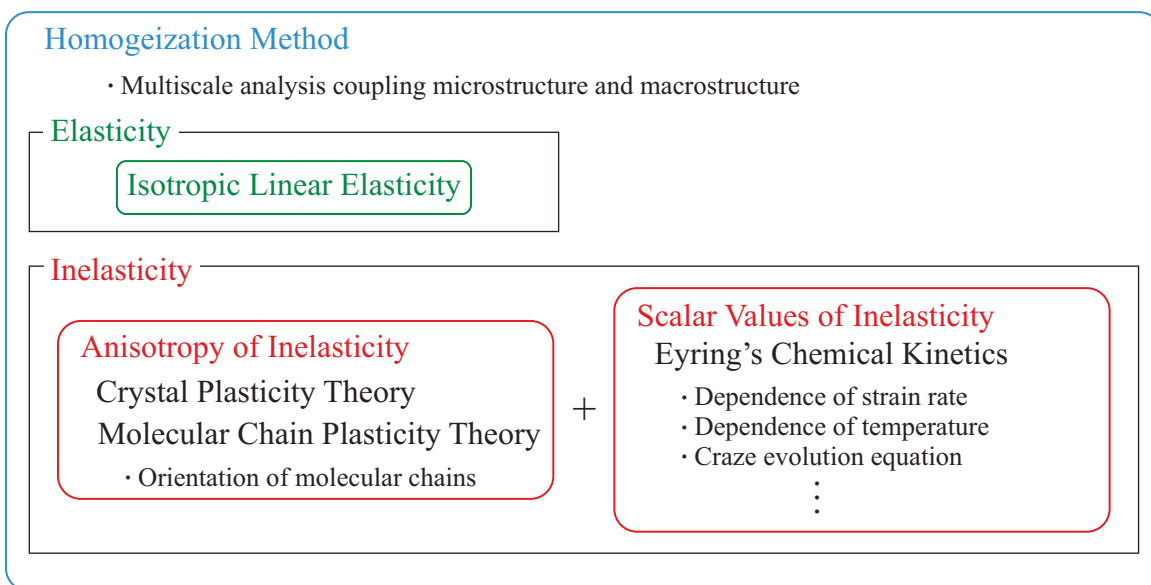


Fig. 1.14 Mechanical models for polymers employed in this study.

子鎖配向領域におけるクレーズ進展停止の再現を試みる。また、マイクロおよびマクロ構造における非晶性ポリマと結晶性ポリマの変形挙動を比較する。

- (2) 複数の単軸負荷解析によって得られた応力-ひずみ応答から、降伏応力のひずみ速度依存性、環境温度依存性および静水圧応力依存性が本モデルによって再現されることを確認する。さらに、自由体積変化に基づく非弾性応答則の粘弾性効果により、除荷時の非線形ひずみ回復が生じることを示す。
- (3) フィブリル強度の評価およびクレーズ密度に基づく PP の破断予測条件を提案する。さらに、提案した破断予測条件を複数の引張速度における PP の解析結果に適用することで、破断ひずみを予測し、ひずみ速度に依存したポリマの延性変化の再現を試みる。同時に、フィブリルに負荷される応力およびクレーズ密度の分布図から試験片の破断部位を予測する。
- (4) 分子鎖塑性論および結晶塑性論におけるすべり系および解析モデルを三次元構造に拡張し、非晶性ポリマおよび結晶性ポリマの単軸引張解析を実施する。得られた解析結果と平面ひずみ条件での解析結果を比較するとともにより実現象に近い解析条件である三次元解析での本モデルの妥当性について言及する。

なお、本研究では反応速度論の体系に基づいた材料応答則を採用することにより、降伏応力の環境温度依存性が自然に導入される。しかしながら、ポリマの塑性変形時に生じる内部発熱およびその熱伝導現象については考慮しない。したがって、ポリマの温度依存性を検討する際には、単に解析領域全体で一定の環境温度の値を解析毎に変化させるものとする。

1.5 本論文の構成

本研究で扱う連続体力学場の支配方程式は、図 1.15 に示すように物質によらない普遍原理である保存則またはエネルギー原理に対して、物質特性を表わす構成式 [補足 A.10] を代入することによって得られる。ここで、保存則とエネルギー原理は互いに等価であり、通常、前者は微分系、すなわち強形式で記述され、流体の差分解析に多く用いられる。一方、後者は積分形、すなわち弱形式で記述され、固体の有限要素解析に多く用いられる。本研究においても固体材料を研究対象とするため、エネルギー原理を用いて支配方程式を導出する。また、構成式は力学量である応力と幾何学量であるひずみの関係式である。本研究で用いる弾粘塑性構成式の場合は応力速度テンソルと変形速度テンソルの関係式に加え、スカラー量の応力および塑性ひずみ速度の関係式を必要とし、後者を特に硬化則または材料応答則と呼ぶ。一方、我々がある力学現象を観察した時に得られる最も基本的な量は変位である。変位の情報を応力とひずみの関係として記述される構成式に関連づけるためには、変位とひずみの関係式が必要となる。変位-ひずみ関係式に代表される幾何学量同士の関係を運動学と言う。さらに、以上の諸関係式から得られた場の支配方程式を用いて実際に力学現象をシミュレートする際には、実施する数値解析手法に応じて支配方程式を離散化する必要がある。ただし、本研究ではポリマのマイクロおよびマクロスケールを連成したマルチスケール解析を実施するため、離散化を施す前に均質化法を用いて場の支配方程式をマイクロ方程式およびマクロ方程式へ分離する。

本論文では、以上の支配方程式の導出の手順に基づいて章を構成し、理論展開していく。そして最後に、得られた支配方程式を用いた FEM 解析結果を示す。以下に各章の概要を述べる。

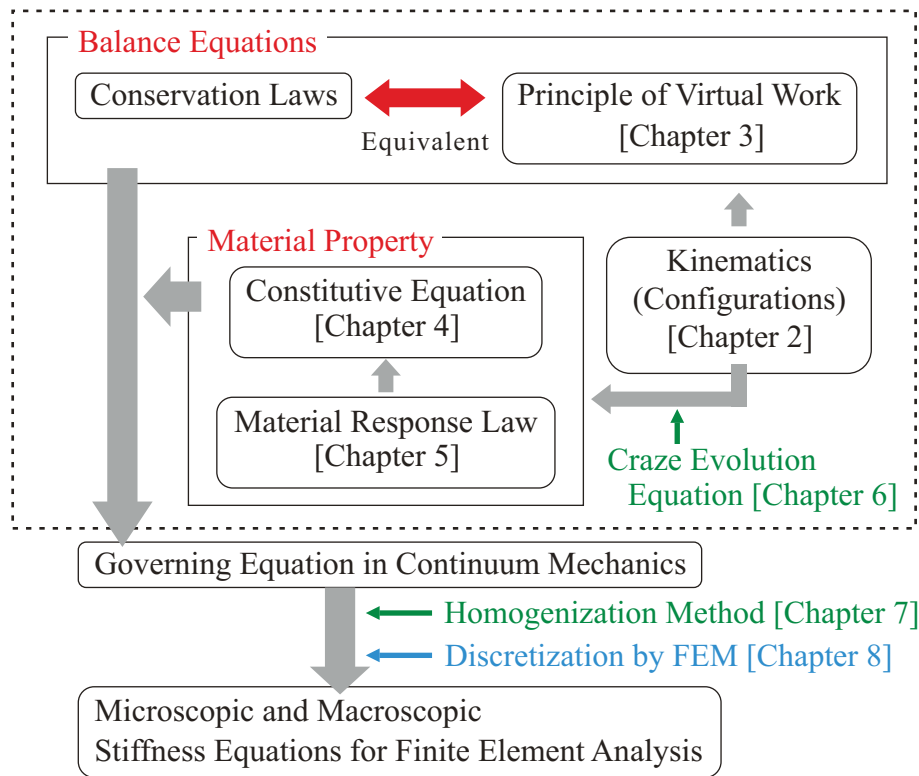


Fig. 1.15 Derivation of governing equation of boundary value problem.

2章：運動学

まず、変形状態を記述するために必要となる配置の概念を導入する。その後、塑性力学および有限変形理論において用いられる仮想的な配置である中間配置を定義し、各配置での運動学的関係式について述べる。さらに、従来の連続体損傷力学の理論に基づき、損傷配置および擬似無損傷配置を導入する。次に、結晶塑性論および分子鎖塑性論に特有の運動学について述べる。初期配置における非弾性速度こう配を結晶基底ベクトルまたは分子鎖基底ベクトルによって表し、非弾性変形速度および非弾性スピンを運動学的に決定可能とする。加えて、結晶基底ベクトルおよび分子鎖基底ベクトルの発展式および更新手法についても述べる。

3章：内力の定義と仮想仕事の原理

まず、熱・力学的体系にひずみ速度依存性およびクレーズ密度を導入する方法について説明する。次に、本研究で用いるエネルギー原理である仮想仕事の原理を紹介する。はじめに通常の仮想仕事の原理および仮想仕事率の原理について述べる。その後、仮想仕事率の原理に基づいて微小変形理論および有限変形理論で用いる速度形仮想仕事の原理を導出する。同時に、それぞれの仮想仕事の原理を用いるのに適した構成式の種類を紹介し、最終的に本研究で採用する速度形仮想仕事の原理を示す。

4章：構成式の導出

ポリマの非晶相および結晶相の材料特性を表すテンソル形の構成式を導出する。まず、Clausius-Duhemの不等式をGreen-Zerna⁽¹¹¹⁾の手法を介して保存部分と散逸部分に分離し、その保存部分から損傷密度の情報を含んだ速度形弾性構成式を導出する。さらに、得られた弾性構成式と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結晶塑性形の弾粘塑性構成式を導出する。そして、非晶相における非晶質状態を表現するために、多絡み点モデル⁽¹¹²⁾を非晶相の構成式に適

用する。一方、結晶相に対しては分子鎖方向に非延伸という拘束をペナルティ法によって導入する⁽⁹⁰⁾。

5章：材料応答則

粘塑性挙動を決定付けるスカラー形の構成式，すなわち材料応答則について説明する。非晶相に対する材料応答則として 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⁽²²⁾を紹介する。また，Hasan-Boyce の非弾性応答則の内部変数の一つである分子鎖摩擦エネルギーによって除荷時の顕著な非線形ひずみ回復現象がもたらされるメカニズムを Eyring の反応速度論に基づいて説明する。さらに，同応答則に新たに静水圧応力依存性を付与する。一方，結晶相に用いる材料応答則として Pan-Rice 形ひずみ速度硬化則⁽¹¹³⁾ならびに反応速度論に基づく Eyring 形⁽¹⁰⁸⁾のひずみ速度硬化則を紹介する。また，活性化エネルギーなどの実験的に同定することが難しい Eyring 形の材料応答則における材料定数を Pan-Rice 形硬化則の材料定数から決定する手法を新たに提案する。さらに，結晶相においては各材料応答則を用いた場合の接線係数法の適用について述べる。

6章：損傷発展式

非晶相に対して導入する微視的損傷，すなわちクレーズの発展式を新たに構築する。まず，従来までに反応速度論に基づいて提案されたクレーズ発生速度およびクレーズ成長速度の計算式を紹介する。さらに，これらを参考に数値解析に適した形でクレーズ発生およびクレーズ成長の発展式を構築する。その際，クレーズの特徴であるひずみ速度依存性がひずみ速度を直接用いずに，活性化エネルギーのモデル化を介して導入できることを示す。また，加工硬化領域におけるクレーズ進展の停止をひずみによる活性化エネルギーの増大としてモデル化する。

7章：粘塑性均質化理論

まず，均質化理論に特有のマイクロ構造を定義し，同構造に適用される仮定について述べる。次に，漸近展開法による均質化理論⁽⁶⁷⁾により，場の支配方程式をマイクロ構造のじょう乱速度を決定するマイクロ方程式およびマクロ構造の等価材料定数によって記述されるマクロ方程式に分離する。さらに，マクロ解析によって得られたマクロ構造の変形情報を用いて，マイクロ構造内部の力学応答を評価する局所化問題について述べる。

8章：有限要素法による離散定式化

マイクロ-マクロ連成 FEM 解析のための離散定式化を行う。まず，運動学的関係式から変位速度，速度こう配および変形速度の離散化マトリックスを構築する。得られた離散化マトリックスを用いてマイクロおよびマクロ構造の支配方程式に加え，マイクロ-マクロ連成に必要な均質化材料定数の計算式ならびに局所化問題を離散化する。次に，数値解析上で領域積分を実施するための数値積分手法について述べる。また，内力の計算方法ならびに内力を用いた釣合い方程式の陰解法的定式化について説明する。さらに，平面ひずみ条件で解析を実施する場合の各マトリックスの縮約について述べる。最後に，実際の数値解析の計算手順についてこれまでに導出した式を交えて解説する。

9章：解析結果および検討

前章までに構築したモデルを用いて，非晶性ポリマおよび結晶性ポリマの大変形 FEM 解析を実施し，得られた結果について考察する。はじめに，非晶性ポリマである PMMA 平板に対して，平面ひずみ条件下で均質化法を適用した単軸引張解析を実施する。次に，結晶性ポリマである PP 平板に対する単軸引張解析を平面ひずみ条件下で実施する。その際，結晶相単相のみが単軸引張負荷を受ける場合の変形挙動に加え，結晶性ポリマのマイクロ構造が初期等方性を満たすために必要な結晶相の個数について検討する。また，除荷時の粘弾性効果による非線形ひずみ回復現象ならびに静水圧応力依存性による引張時および圧縮時の降伏応力の変化の再現を試みる。さらに，ポリマの破断予測条件をクレーズ密度および実応力の評価に基づき構築する。得られた破断予測条件を複数の引張速度における PP の単軸引張解析結果へと適用することで，ひずみ速度に依存したポリマの延性の変化を予測する。最後に，上述の平面

ひずみ条件を仮定して実施した FEM 解析を三次元へと拡張し、非晶性ポリマおよび結晶性ポリマの単軸引張解析を実施する。得られた解析結果を平面ひずみ問題における解析結果と比較することで、三次元問題においても従来と同様にポリマの大変形応答を表すことが可能であることを示す。

10 章：結言

本研究の結言を述べる。さらに、本研究の残された課題ならびに今後の展望について言及する。

1.6 本論文で用いる記号

本論文では原則として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。また、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。

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

そして、微分の関係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	:	∇	,	$_{,i}$
こう配	:	$\text{grad } \mathbf{A}$,	$A_{ij,k}$
発散	:	$\text{div } \mathbf{A}$,	$A_{ij,j}$
回転	:	$\text{curl } \mathbf{A}$,	$e_{jkl}A_{il,k}$

ここで、記号 $(\)_{,i}$ は x_i による微分を表し、記号 e_{ijk} は交代記号を表す。加えて、今まで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。

また、2 章で導入する初期配置、第 1 中間配置、Isoclinic 配置 (第 2 中間配置) および現配置における任意の量 \mathfrak{N} は次のように表記するものとする。

初期配置	:	$\mathfrak{N}^{(I)}$
第 1 中間配置	:	$\mathfrak{N}^{(M)}$
Isoclinic 配置	:	$\mathfrak{N}^{(m)}$
現配置	:	\mathfrak{N}

第 2 章

運動学

本章では幾何学量同士の関係を表わす運動学について論じる。まず、運動学の最も基本となる配置の概念および変形こう配を定義する。同時に、速度こう配および大変形まで記述可能な非線形ひずみを変形こう配を用いて表す。次に、弾塑性論および有限変形理論において用いられる中間配置を導入することで、Shizawa-Zbib⁽⁹⁵⁾に代表される明確な 4 配置構成を構築する。その際、配置分解の順番に応じて得られる 2 種類の共回転スピン、すなわち、材料非依存性スピンおよび材料依存性スピンを紹介する。また、構築した 4 配置構成に基づいて構成式の導出に必要な変形速度およびひずみ速度の関係を求める。これによって、第 2 中間配置が構成式の参照配置とし妥当な配置であることを明らかにする。以上については Shizawa-Zbib⁽⁹⁵⁾による手法に基づいて、理論展開していく。その後、材料内部に損傷が生じた場合の構成式の導出で必要となる損傷配置と擬似無損傷配置を導入する。最後に、結晶塑性論⁽⁶¹⁾に特有の結晶基底ベクトルの運動学について論じる。また、結晶基底ベクトルを用いることで非弾性変形速度および非弾性スピンの従来熱力学的手法に依らず、運動学的に決定できることを述べる。

なお、ポリマの非晶相においては粘弾性変形と塑性変形が同時に生じる一方、結晶相においては金属と同様に塑性変形のみが生じる。そこで、本論文では非晶相と結晶相の双方に関連する議論を統一的に扱えるよう、これらの総称として非弾性変形という用語を用いるものとする。

2.1 配置の概念と変形こう配

本研究の基盤となる固体力学は物質の変形を扱う連続体力学の枠組みとして論じられる。連続体力学では質点系の力学や剛体力学と異なり、物質の変形を記述するため、図 2.1 に示すように物質の状態を変形の前後で区別して考える必要がある。このとき、変形前の状態を初期配置、変形後の状態を現在配置と呼ぶ。また、変

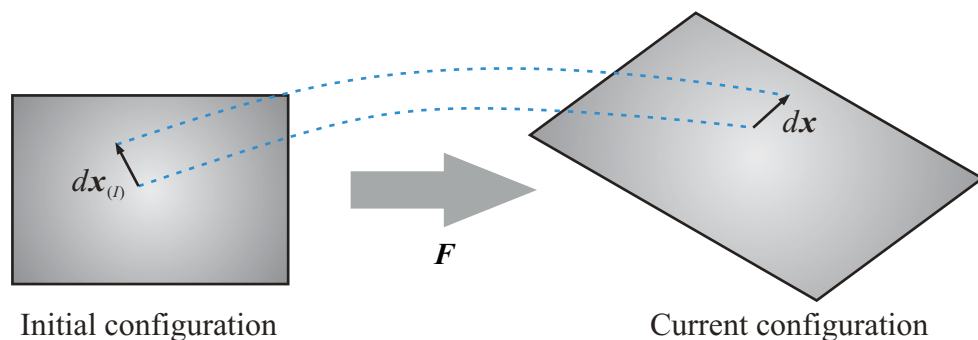


Fig. 2.1 Initial configuration and current configuration.

形前の状態として参照する配置のことを参照配置と呼び、図 2.1 では初期配置が参照配置に対応する。ここで、参照配置とはあくまで今注目している変形に対する基準状態を意味するため、常に初期配置を意味するわけではないことに注意されたい。例えば、3章で述べる Updated Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理では現配置が参照配置となる。いま、変形前後の物質点は必ず 1 体 1 に対応するものとすれば、両配置間の微小線素ベクトルの写像が次式で表わされる。

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}d\mathbf{x}_{(t)} \dots \dots \dots (2.1)$$

ここで、 $d\mathbf{x}$ は現配置の微小線素ベクトル、 $d\mathbf{x}_{(t)}$ は初期配置の微小線素ベクトルである。ただし、 $(\)_{(t)}$ は初期配置の量であることを意味する。また、 \mathbf{F} は変形を記述する最も基本的な単位となる変形こう配テンソルであり、次式で与えられる。

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}_{(t)}} \dots \dots \dots (2.2)$$

一方、ある物質点の速度 \mathbf{v} は、初期配置の位置ベクトル $\mathbf{x}_{(t)}$ を固定し (追跡する物質点を定め)、現配置の位置ベクトル $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\mathbf{x}_{(t)}, t)$ の時間変化を追跡することによって得られる。すなわち、

$$\mathbf{v} \equiv \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \right)_{\mathbf{x}_{(t)}} \dots \dots \dots (2.3)$$

と書ける。式 (2.3) 右辺の微分操作を物質時間微分と呼ぶ。以降では、ある量 \mathbf{S} の物質時間微分を $\dot{\mathbf{S}}$ または $D\mathbf{S}/Dt$ と表記する。さらに、物質速度 \mathbf{v} を用いて、速度こう配 \mathbf{L} が次式のように定義される。

$$\mathbf{L} \equiv \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} \dots \dots \dots (2.4)$$

また、現配置および初期配置の速度こう配は変形こう配 \mathbf{F} を用いてそれぞれ次式のように書ける [補足 B.1].

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} \dots \dots \dots (2.5)$$

$$\mathbf{L}_{(t)} = \mathbf{F}^{-1}\dot{\mathbf{F}} \dots \dots \dots (2.6)$$

よって、現配置と初期配置の速度こう配の配置変換則は次式で与えられる。

$$\mathbf{L} = \mathbf{F}\mathbf{L}_{(t)}\mathbf{F}^{-1} \dots \dots \dots (2.7)$$

ここで、速度こう配 \mathbf{L} を Descartes 分解することによって得られる対称部分が変形速度 \mathbf{D} 、反対称部分が連続体スピン \mathbf{W} となる。すなわち、

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_S + \mathbf{L}_A = \mathbf{D} + \mathbf{W} \dots \dots \dots (2.8)$$

$$D_{ij} \equiv L_{(ij)} = \frac{1}{2}(L_{ij} + L_{ji}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \dots \dots \dots (2.9)$$

$$W_{ij} \equiv L_{[ij]} = \frac{1}{2}(L_{ij} - L_{ji}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \dots \dots \dots (2.10)$$

である。ただし、 $(\)_S$ および $(\)_{(ij)}$ は 2 階のテンソルの対称部分を、 $(\)_A$ および $(\)_{[ij]}$ は 2 階のテンソルの反対称部分を表す。

次に、大変形まで記述可能な非線形ひずみを従来の手法と同様に微小線素の 2 乗の差を用いて定義する。

$$\begin{aligned} d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - d\mathbf{x}_{(t)} \cdot d\mathbf{x}_{(t)} &= \mathbf{F}d\mathbf{x}_{(t)} \cdot \mathbf{F}d\mathbf{x}_{(t)} - d\mathbf{x}_{(t)} \cdot d\mathbf{x}_{(t)} \\ &= (\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I}) \cdot d\mathbf{x}_{(t)} \otimes d\mathbf{x}_{(t)} \end{aligned}$$

$$= 2\mathbf{E}_{(I)} \cdot d\mathbf{x}_{(I)} \otimes d\mathbf{x}_{(I)} \dots\dots\dots (2.11)$$

$$\mathbf{E}_{(I)} \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T \mathbf{F} - \mathbf{I}) \dots\dots\dots (2.12)$$

ここで、 $\mathbf{E}_{(I)}$ は変形を Lagrange 的に記述した場合のひずみであり、Green ひずみと呼ばれる。一方、式 (2.11) は次式のように表わすことも可能である。

$$\begin{aligned} d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - d\mathbf{x}_{(I)} \cdot d\mathbf{x}_{(I)} &= d\mathbf{x} \cdot d\mathbf{x} - \mathbf{F}^{-1} d\mathbf{x} \cdot \mathbf{F}^{-1} d\mathbf{x} \\ &= (\mathbf{I} - \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1}) \cdot d\mathbf{x} \otimes d\mathbf{x} \\ &= 2\mathbf{E} \cdot d\mathbf{x} \otimes d\mathbf{x} \dots\dots\dots (2.13) \end{aligned}$$

$$\mathbf{E} \equiv \frac{1}{2}(\mathbf{I} - \mathbf{F}^{-T} \mathbf{F}^{-1}) \dots\dots\dots (2.14)$$

ここで、 \mathbf{E} は変形を Euler 的に記述した場合のひずみであり、Almansi ひずみと呼ぶ。式 (2.12) および式 (2.14) を比較すれば、現配置のひずみ \mathbf{E} と初期配置のひずみ $\mathbf{E}_{(I)}$ の配置変換則が次式のように得られる。

$$\mathbf{E} = \mathbf{F}^{-T} \mathbf{E}_{(I)} \mathbf{F}^{-1} \dots\dots\dots (2.15)$$

2.2 中間配置の導入

2.2.1 配置の弾・非弾性分解

本研究で対象とする弾塑性問題では図 2.2 のように実配置である初期配置と現配置の間に仮想的な配置を導入することで、エネルギー的に可逆な弾性変形および不可逆な塑性変形を区別して扱う。このことは、式 (2.2) の変形こう配を次式のように乗算分解することに他ならない。

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^* \mathbf{F}^i \dots\dots\dots (2.16)$$

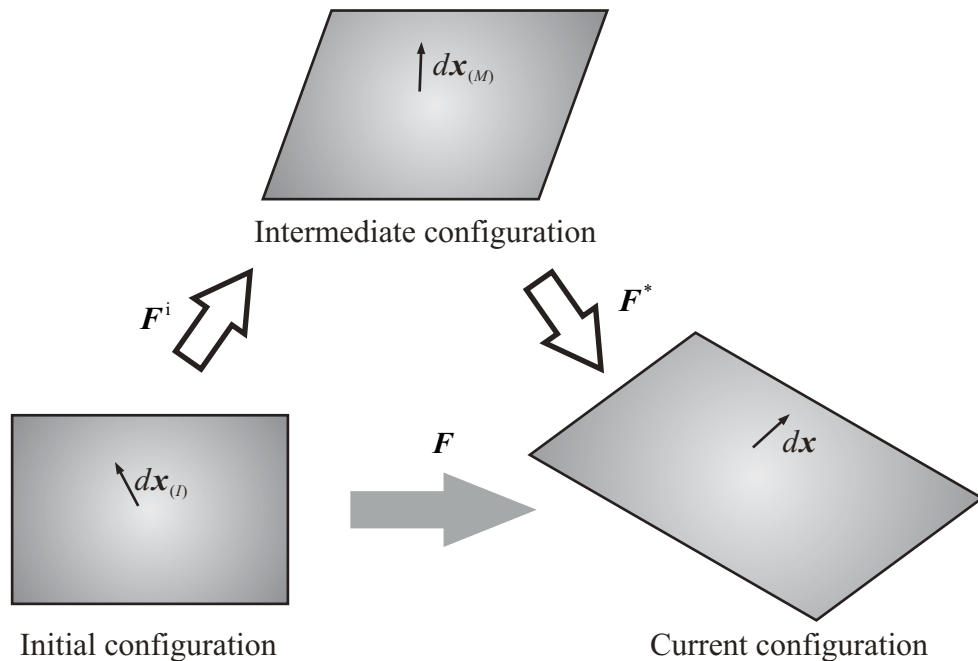


Fig. 2.2 Decomposition of deformation gradient into elastic and inelastic components.

ここで、 \mathbf{F}^* は剛体回転を含む弾性変形こう配、 \mathbf{F}^i は非弾性変形こう配である。式 (2.16) の分解は一般に Lee 分解⁽¹¹⁴⁾ と呼ばれる。式 (2.16) を考慮すれば、各配置での微小線素の変換則が

$$d\mathbf{x} = \mathbf{F}^* d\mathbf{x}_{(M)}, \quad d\mathbf{x}_{(M)} = \mathbf{F}^i d\mathbf{x}_{(I)} \dots \dots \dots (2.17)$$

のように表わされる。ここで、 $(\)_{(M)}$ は中間配置の量であることを表す。なお、実材料の負荷過程においては降伏後の弾性変形および塑性変形は同時に起きているため、塑性変形のみを受けた状態を表す中間配置はあくまで仮想的なものであることに注意されたい。ただし、材料が塑性降伏を迎えた後に弾性除荷を行えば、可逆な変形である弾性変形は取り除かれる。このとき得られるひずみ状態は塑性変形のみを受けた中間配置と対応するため、中間配置は実際に観察可能である。また、弾性除荷によって応力が生じていないことから中間配置は応力解放配置とも呼ばれる。以上のような 3 配置構成の考えは幾何学的非線形を伴わない、すなわち、微小変形理論における弾塑性問題に対して多く採用される。

2.2.2 第 2 中間配置の導入

本研究で扱う有限変形理論では、構成式の客観性を満たすために応力速度を共回転速度で記述する必要がある。その際、前項で示した 3 配置構成では変形こう配 \mathbf{F} に含まれる回転成分のみを取り除いた配置が存在せず、共回転速度を考えるにあたって不便である。そこで、本項では Shizawa-Zbib⁽⁹⁵⁾ に代表される、第 2 中間配置を導入することで明確な 4 配置構成を構築し、本研究で用いる共回転速度を定義する。なお、第 2 中間配置も前項で導入した中間配置と同様に仮想的なものである。ここで、第 2 中間配置は現配置から回転成分のみを取り除いた配置のことであるから、第 2 中間配置の導入は変形こう配を回転成分を含まないストレッチテンソルおよび回転を表す直交テンソルに乗算分解することを意味する。このとき、前項で述べた変形こう配の弾・非弾性分解を回転成分を除く前あるいは後に施すかによって得られる 4 配置構成は異なる結果となる。すなわち、変形こう配をストレッチテンソルと直交テンソルに分解した後、得られたストレッチテンソルを弾・非弾性分解する方法および式 (2.16) の弾・非弾性分解を施した後に得られた弾性変形こう配をストレッチテンソルと直交テンソルに分解する方法の 2 通りが存在する。前者の分解を行った場合の第 2 中間配置から現配置への回転を材料非依存性の回転と呼び、後者の分解を行った場合の回転を材料依存性の回転と呼ぶ。以下にそれぞれの分解を施した場合の 4 配置構成について概説する。

(a) 材料非依存性スピン

材料非依存性の回転を伴う場合の 4 配置構成は図 2.3(a) のようになり、変形こう配の分解は次式で表わされる。

$$\mathbf{F} = \chi \mathbf{U}_\chi = \chi \mathbf{U}_\chi^e \mathbf{U}_\chi^i \dots \dots \dots (2.18)$$

式 (2.18) は変形こう配 \mathbf{F} をまず、変形を表すストレッチテンソル \mathbf{U}_χ および回転を表す直交テンソル χ に乗算分解し、その後、 \mathbf{U}_χ を非弾性ストレッチ \mathbf{U}_χ^i および弾性ストレッチ \mathbf{U}_χ^e に乗算分解したことを表わしている。また、これらの写像テンソルを用いて各配置での微小線素の変換則が次式のように書ける。

$$d\mathbf{x} = \chi d\mathbf{x}_{(m')}, \quad d\mathbf{x}_{(m')} = \mathbf{U}_\chi^e d\mathbf{x}_{(M')}, \quad d\mathbf{x}_{(M')} = \mathbf{U}_\chi^i d\mathbf{x}_{(I)} \dots \dots \dots (2.19)$$

ここで、 $(\)_{(M')}$ および $(\)_{(m')}$ はそれぞれ材料非依存性の回転を伴う分解を行った場合の第 1 中間配置および第 2 中間配置での量を表す。一方、現配置および第 2 中間配置における 2 階のテンソルをそれぞれ \mathbf{N} および $\mathbf{N}_{(m')}$ と置くと、 \mathbf{N} は $\mathbf{N}_{(m')} = \chi^T \mathbf{N} \chi$ のように配置変換される。したがって、 $\mathbf{N}_{(m')}$ の物質時間微分は

$$\dot{\mathbf{N}}_{(m')} = \chi^T \overset{\nabla}{\mathbf{N}} \chi, \quad \overset{\nabla}{\mathbf{N}} \equiv \dot{\mathbf{N}} - \boldsymbol{\Omega}_\chi \mathbf{N} + \mathbf{N} \boldsymbol{\Omega}_\chi \dots \dots \dots (2.20)$$

Table 2.1 Classification of material independent spin.

$\mathbf{F} = \mathbf{U}_\chi \boldsymbol{\chi}$	$\boldsymbol{\Omega}_\chi$	Name of spin	Name of Objective rate
$\mathbf{F} = \mathbf{U} \mathbf{R}$	$\dot{\mathbf{R}} \mathbf{R}^T$	Green–Naghdi spin	Green rate
$\mathbf{F} = \mathbf{U}_Q \mathbf{Q}$	$\dot{\mathbf{Q}} \mathbf{Q}^T$	Euler spin	Hill rate
$\mathbf{F} = \mathbf{U}_W \mathbf{R}_W$	$\dot{\mathbf{R}}_W \mathbf{R}_W^T = \mathbf{W}$	Continuum spin	Jaumann rate

で与えられる．式 (2.20) の $\overset{\vee}{\mathbf{N}}$ は現配置で客観性を有する \mathbf{N} の速度であり，共回転速度 [補足 B.2] と呼ばれる．また， $\boldsymbol{\Omega}_\chi$ は共回転速度の共回転スピンである．特に， $\boldsymbol{\Omega}_\chi$ は材料の全変形のみから算出され，材料の種類に依存した計算を必要としないことから材料非依存性スピンと呼ばれる．ここで，直交テンソル $\boldsymbol{\chi}$ の選び方，すなわち，変形こう配のストレッチおよび回転への乗算分解の方法に応じて材料非依存性スピンには複数の種類が存在する．それぞれの共回転スピンをを用いた場合の共回転速度の名称および変形こう配のストレッチテンソルおよび直交テンソルへの乗算分解を表 2.1 に示す．ここで， \mathbf{U} は \mathbf{F} を極分解することによって得られる右ストレッチテンソル， \mathbf{Q} は左ストレッチテンソルを対角化するための直交テンソル， \mathbf{R}_W は共回転スピンを \mathbf{W} となるように選ばれた直交テンソルである．表 2.1 の中でも，Jaumann rate は共回転スピンである連続体スピン \mathbf{W} が式 (2.10) によって容易に計算できることから現象論的構成式の共回転速度として最も多く採用されている．なお，本論文では Cauchy 応力 \mathbf{T} の Jaumann 速度を $\overset{\vee}{\mathbf{T}}$ の代わりに $\dot{\mathbf{T}}$ を用いて表記する．

(b) 材料依存性スピン

材料依存性の回転を伴う場合の 4 配置構成は図 2.3(b) のようになり，変形こう配の分解は次式で表わされる．

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^* \mathbf{F}^i = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^i \dots \dots \dots (2.21)$$

式 (2.21) は変形こう配 \mathbf{F} をまず，式 (2.16) と同様に弾・非弾性分解し，その後， \mathbf{F}^* を弾性回転を完全に取除いた弾性ストレッチテンソル $\hat{\mathbf{U}}^e$ および弾・剛体回転テンソル \mathbf{R}^* に乗算分解したことを表わしている．なお，このような分解によって得られる図 2.3(b) の第 2 中間配置を特に，Isoclinic 配置⁽¹¹⁵⁾ と呼ぶ．また，これらの写像テンソルを用いて各配置での微小線素の変換則が次式のように書ける．

$$d\mathbf{x} = \mathbf{R}^* d\mathbf{x}_{(m)}, \quad d\mathbf{x}_{(m)} = \hat{\mathbf{U}}^e d\mathbf{x}_{(M)}, \quad d\mathbf{x}_{(M)} = \mathbf{F}^i d\mathbf{x}_{(I)} \dots \dots \dots (2.22)$$

ここで， $(\)_{(M)}$ および $(\)_{(m)}$ はそれぞれ材料依存性の回転を伴う分解を行った場合の第 1 中間配置および第 2 中間配置での量を表す．ただし， $\mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e$ は \mathbf{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， \mathbf{R}^* は $(\dot{\mathbf{F}}^* \mathbf{F}^{*-1})_A \equiv \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T}$ 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，

$$\begin{aligned} (\dot{\mathbf{F}}^* \mathbf{F}^{*-1})_A &= [(\mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e) (\mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e)^{-1}]_A \\ &= \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} + \mathbf{R}^* (\dot{\hat{\mathbf{U}}^e} \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_A \mathbf{R}^{*T} \equiv \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.23) \end{aligned}$$

であるから， $\hat{\mathbf{U}}^e$ は

$$(\dot{\hat{\mathbf{U}}^e} \hat{\mathbf{U}}^{e-1})_A = \mathbf{0} \dots \dots \dots (2.24)$$

を満たすテンソルであり，回転成分が完全に取除かれている．そのため， $\dot{\hat{\mathbf{U}}^e} \hat{\mathbf{U}}^{e-1}$ は対称部分のみを有しており，必ずしも $\hat{\mathbf{U}}^e$ は対称テンソルであるとは限らない．このような第 2 中間配置を導入することによ

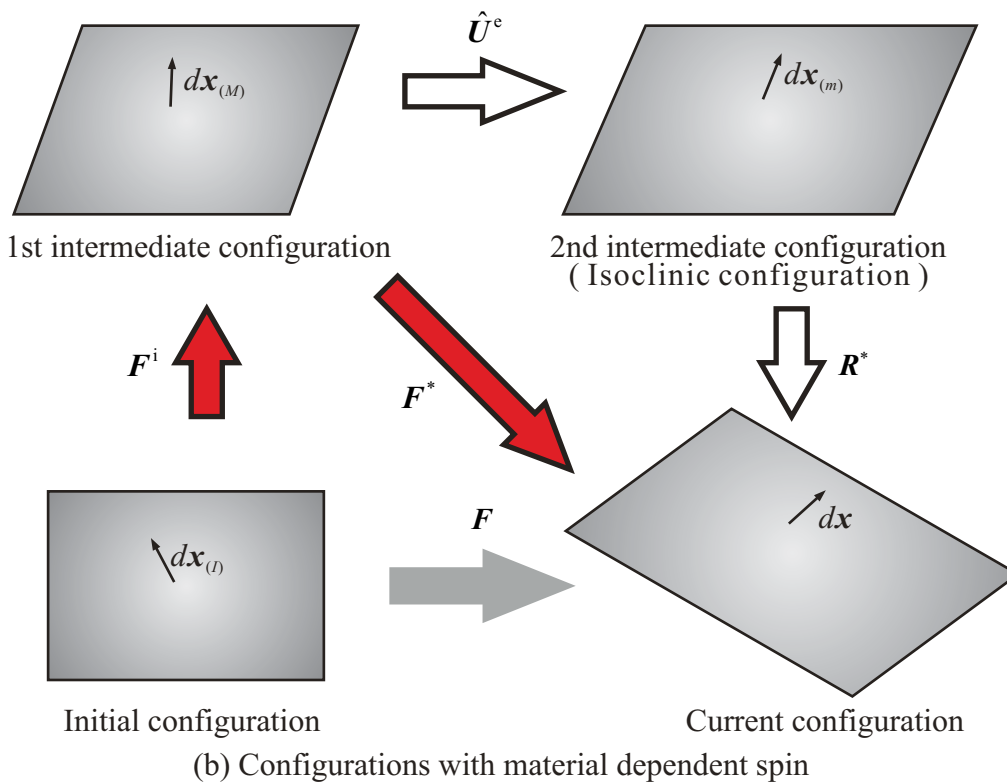
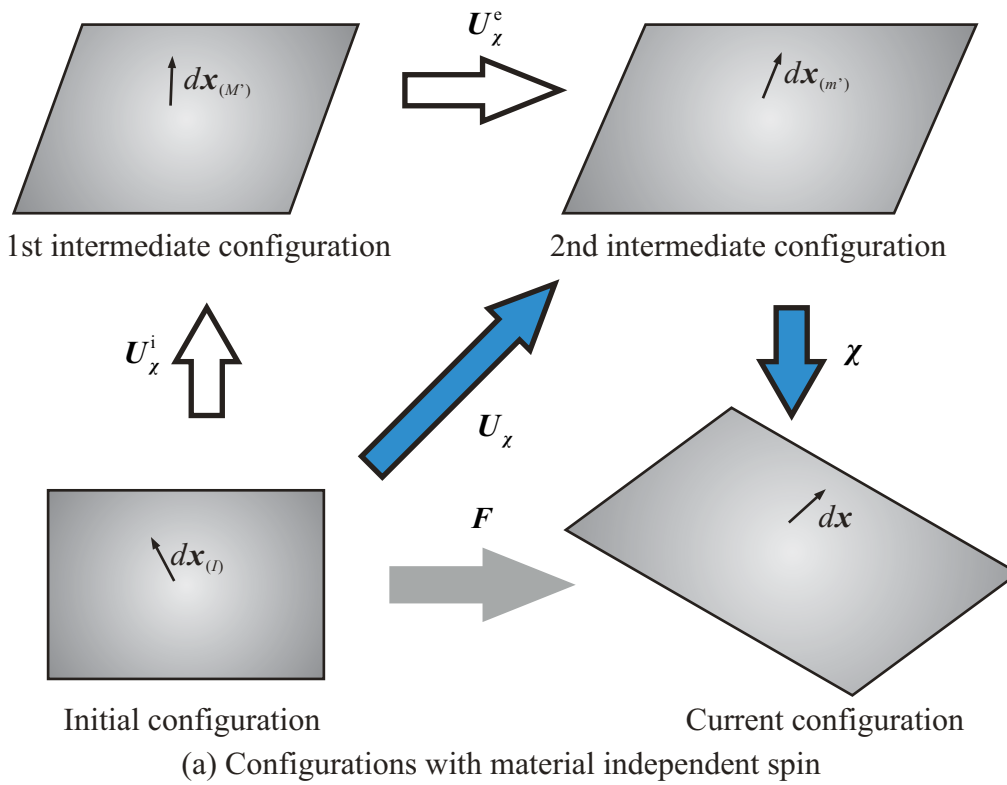


Fig. 2.3 Decomposition of deformation gradient into rotation, elastic and inelastic components with material independent spin or material dependent spin.

て $W^* \equiv W - W^i = \dot{R}^* R^{*T}$ が満足される⁽⁹⁵⁾. ここで, W^* は下部構造スピン (Substructure スピン) と呼ばれる. 一方, 現配置および第 2 中間配置における 2 階のテンソルをそれぞれ \mathbf{N} および $\mathbf{N}_{(m)}$ と置くと, \mathbf{N} は $\mathbf{N}_{(m)} = R^{*T} \mathbf{N} R^*$ のように配置変換される. したがって, $\mathbf{N}_{(m)}$ の物質時間微分は

$$\dot{\mathbf{N}}_{(m)} = R^{*T} \overset{\nabla}{\mathbf{N}} R^*, \quad \overset{\nabla}{\mathbf{N}} \equiv \dot{\mathbf{N}} - W^* \mathbf{N} + \mathbf{N} W^* \dots \dots \dots (2.25)$$

で与えられる. 式 (2.25) で定義される共回転速度 $\overset{\nabla}{\mathbf{N}}$ は Mandel–Kratovichil 速度⁽¹¹⁶⁾⁽¹¹⁷⁾[補足 B.2] と呼ばれる. よって, 構成式の参照配置に第 2 中間配置を選択すれば, 共回転スピンの W^* となる. 下部構造スピン $W^* = W - W^i$ は材料固有の非弾性スピン W^i が求められている場合のみ計算可能であることから材料依存性のスピンと呼ばれる. また, 代表的な材料非依存性スピンである連続体スピン W と下部構造スピン W^* を比較すれば, 材料依存性スピンは共回転スピンから非弾性成分が除かれているということがわかる. したがって, 下部構造スピンを共回転スピンとして用いる場合には非弾性スピン W^i に対する構成式が別途必要となる. このような非弾性スピンの計算には Dafalias⁽¹¹⁸⁾ による方法および転位ドリフト速度理論に基づく志澤・若林⁽¹¹⁹⁾ による方法が提案されている. 一方, 後述のように結晶塑性論の体系に基づけば非弾性スピンは運動学的に容易に決定可能である. そのため, 結晶塑性論に基づく構成式の共回転スピンとして下部構造スピンは多く採用される. 本研究においても結晶塑性論の体系に基づく構成式を用いるため, 以降では本項で示した 4 配置構成, すなわち, 図 2.3(b) の配置に基づいて運動学を論じる.

2.3 4 配置構成における運動学

本節では図 2.3(b) の 4 配置構成に基づいて弾性ひずみ速度および弾性変形速度の運動学的関係を明らかにする. その際, 有限変形理論を対象とすることから微小弾性変形の仮定を設ける. これによって, 第 2 中間配置を構成式の参照配置として選択することが妥当であることを示す. なお, 材料非依存性スピン, すなわち, 図 2.3(a) の 4 配置構成に基づいた運動学的関係式を導く場合には本節の導出において $R^* \rightarrow \chi$, $\hat{U}^e \rightarrow U_\chi^e$, $F^i \rightarrow U_\chi^i$, $(\cdot)_{(M)} \rightarrow (\cdot)_{(M)'}$, $(\cdot)_{(m)} \rightarrow (\cdot)_{(m)'}$ と置き換えることで原則として同様の議論が展開可能である.

2.3.1 ひずみの弾・非弾性分解

式 (2.12) の初期配置および現配置の微小線素の 2 乗の差で定義されたひずみは弾・非弾性変形の区切りである第 1 中間配置の微小線素 $dx_{(M)}$ を用いて次式のように弾・非弾性分解できる.

$$\begin{aligned} 2E_{(l)} \cdot dx_{(l)} \otimes dx_{(l)} &= dx \cdot dx - dx_{(l)} \cdot dx_{(l)} \\ &= (dx \cdot dx - dx_{(M)} \cdot dx_{(M)}) + (dx_{(M)} \cdot dx_{(M)} - dx_{(l)} \cdot dx_{(l)}) \\ &= (F^* dx_{(M)} \cdot F^* dx_{(M)} - dx_{(M)} \cdot dx_{(M)}) + (F^i dx_{(l)} \cdot F^i dx_{(l)} - dx_{(l)} \cdot dx_{(l)}) \\ &= 2E_{(M)}^e \cdot dx_{(M)} \otimes dx_{(M)} + 2E_{(l)}^i \cdot dx_{(l)} \otimes dx_{(l)} \dots \dots \dots (2.26) \end{aligned}$$

ただし,

$$E_{(M)}^e \equiv \frac{1}{2}(F^{*T} F^* - I) = \frac{1}{2}(\hat{U}^{eT} \hat{U}^e - I) \dots \dots \dots (2.27)$$

$$E_{(l)}^i \equiv \frac{1}{2}(F^{iT} F^i - I) \dots \dots \dots (2.28)$$

である. なお, 図 2.3(b) の初期配置から第 1 中間配置の間に生じるひずみが Green ひずみの非弾性部分 $E_{(l)}^i$, 第 1 中間配置から現配置の間に生じるひずみが Green ひずみ弾性の弾性部分 $E_{(M)}^e$ であることを考慮すれば,

式 (2.27) および式 (2.28) の結果は式 (2.12) から容易に予測可能である. さらに, 式 (2.27) および式 (2.28) の両辺にそれぞれ物質時間微分を施せば各ひずみの参照配置でのひずみ速度がそれぞれ次式のように得られる.

$$\dot{\mathbf{E}}_{(M)}^e = \frac{1}{2}(\dot{\hat{\mathbf{U}}^{eT}} \hat{\mathbf{U}}^e + \hat{\mathbf{U}}^{eT} \dot{\hat{\mathbf{U}}^e}) \dots \dots \dots (2.29)$$

$$\dot{\mathbf{E}}_{(I)}^i = \frac{1}{2}(\dot{\hat{\mathbf{F}}^{iT}} \hat{\mathbf{F}}^i + \hat{\mathbf{F}}^{iT} \dot{\hat{\mathbf{F}}^i}) \dots \dots \dots (2.30)$$

一方, 式 (2.15) に式 (2.21) の変形こう配 \mathbf{F} の乗算分解を代入すれば, 各配置でのひずみの配置変換則が次式のように得られる.

$$\mathbf{E} = \mathbf{R}^* \mathbf{E}_{(m)} \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* (\hat{\mathbf{U}}^{e-T} \mathbf{E}_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{e-1}) \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^{e-T} (\mathbf{F}^{i-T} \mathbf{E}_{(I)} \mathbf{F}^{i-1}) \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.31)$$

なお, 式 (2.31) の配置変換則はひずみの弾性部分および非弾性部分についても同様の関係が成り立つ.

2.3.2 変形速度の弾・非弾性分解

(a) 速度こう配の弾・非弾性分解

式 (2.5) の現配置の速度こう配 \mathbf{L} に式 (2.21) の変形こう配 \mathbf{F} の乗算分解を代入すれば次式のようになる.

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} \\ &= (\mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^i) (\mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^i)^{-1} \\ &= \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} + \mathbf{R}^* \dot{\hat{\mathbf{U}}^e} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} + \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \dot{\hat{\mathbf{F}}^i} \mathbf{F}^{i-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.32) \end{aligned}$$

式 (2.32) から, 現配置における速度こう配の弾・剛体回転部分 \mathbf{L}^* , 弾性ストレッチ部分 \mathbf{L}^e および非弾性部分 \mathbf{L}^i はそれぞれ次式のように定義される [補足 B.3].

$$\mathbf{L}^* \equiv \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.33)$$

$$\mathbf{L}^e \equiv \mathbf{R}^* \dot{\hat{\mathbf{U}}^e} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.34)$$

$$\mathbf{L}^i \equiv \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \dot{\hat{\mathbf{F}}^i} \mathbf{F}^{i-1} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.35)$$

一方, 式 (2.7) に式 (2.21) の変形こう配 \mathbf{F} の乗算分解を代入すれば, 各配置での速度こう配の変換則が

$$\mathbf{L} \equiv \mathbf{R}^* \mathbf{L}_{(m)} \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* (\hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{L}_{(M)} \hat{\mathbf{U}}^{e-1}) \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e (\mathbf{F}^i \mathbf{L}_{(I)} \mathbf{F}^{i-1}) \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.36)$$

のように得られる⁽⁹⁵⁾. なお, 式 (2.36) の配置変換則は速度こう配の弾性部分および非弾性部分についても同様の関係が成り立つ.

(b) 各配置における変形速度

式 (2.34) の対称部分を取れば, 現配置における変形速度の弾性部分 \mathbf{D}^e が式 (2.37) のように得られる. また, 第2中間配置における変形速度の弾性部分 $\mathbf{D}_{(m)}^e$ は式 (2.37) および式 (2.36) より, 式 (2.38) のように得られる.

$$\mathbf{D}^e = (\mathbf{L}^e)_S = (\mathbf{R}^* \dot{\hat{\mathbf{U}}^e} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T})_S = \mathbf{R}^* \dot{\hat{\mathbf{U}}^e} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots \dots \dots (2.37)$$

$$\mathbf{D}_{(m)}^e = (\mathbf{L}_{(m)}^e)_S = \dot{\hat{\mathbf{U}}^e} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \dots \dots \dots (2.38)$$

ただし、式 (2.24) で表される $\dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1}$ の対称性を利用している。

一方、式 (2.35) の対称部分を取れば、現配置における変形速度の非弾性部分 \mathbf{D}^i が式 (2.39) のように得られる。さらに、第 2 中間配置および第 1 中間配置における変形速度の非弾性部分 $\mathbf{D}_{(m)}^i$ および $\mathbf{D}_{(M)}^i$ は式 (2.39) および式 (2.36) よりそれぞれ式 (2.40) および式 (2.41) のように得られる。

$$\mathbf{D}^i = (\mathbf{L}^i)_S = (\mathbf{R}^* \hat{U}^e \dot{\hat{F}}^i \mathbf{F}^{i-1} \hat{U}^{e-1} \mathbf{R}^{*T})_S = \mathbf{R}^* (\hat{U}^e \dot{\hat{F}}^i \mathbf{F}^{i-1} \hat{U}^{e-1})_S \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (2.39)$$

$$\mathbf{D}_{(m)}^i = (\mathbf{L}_{(m)}^i)_S = (\hat{U}^e \dot{\hat{F}}^i \mathbf{F}^{i-1} \hat{U}^{e-1})_S \dots\dots\dots (2.40)$$

$$\mathbf{D}_{(M)}^i = (\mathbf{L}_{(M)}^i)_S = (\dot{\hat{F}}^i \mathbf{F}^{i-1})_S \dots\dots\dots (2.41)$$

2.3.3 ひずみ速度と変形速度

本項では 2.3.1 項で得られたひずみ速度，すなわち，ひずみの参照配置での物質時間微分および 2.3.2 項で導出した変形速度の関係を求める。なお，構成式の導出にあたってはエネルギー的に可逆である弾性部分におけるひずみ速度および変形速度の関係が得られていれば十分であるため，以降では弾性部分の関係式のみを論じる [補足 B.4]。まず，第 2 中間配置の弾性変形速度および第 1 中間配置の弾性ひずみ速度について式 (2.29) および式 (2.38) から次式の関係が得られる。

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{(m)}^e &= \dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1} \\ &= \frac{1}{2} (\hat{U}^{e-T} \dot{\hat{U}}^{eT} + \dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1}) \\ &= \frac{1}{2} (\hat{U}^{e-T} \dot{\hat{U}}^{eT} \hat{U}^e \hat{U}^{e-1} + \hat{U}^{e-T} \dot{\hat{U}}^{eT} \dot{\hat{U}}^e \hat{U}^{e-1}) \\ &= \frac{1}{2} \hat{U}^{e-T} (\dot{\hat{U}}^{eT} \hat{U}^e + \hat{U}^{eT} \dot{\hat{U}}^e) \hat{U}^{e-1} \\ &= \hat{U}^{e-T} \dot{\hat{E}}_{(M)}^e \hat{U}^{e-1} \dots\dots\dots (2.42) \end{aligned}$$

したがって，式 (2.37)，(2.38) および式 (2.42) より各配置における弾性変形速度および参照配置での弾性ひずみの物質時間微分の関係が

$$\mathbf{D}^e = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(m)}^e \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* \hat{U}^{e-T} \dot{\hat{E}}_{(M)}^e \hat{U}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (2.43)$$

のように得られる。

2.3.4 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い。そこで，ポリマを研究対象とする本理論におい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{U}^e の 2 次に関する項においては $\hat{U}^e = \mathbf{I}$ とみなす。ただし，本仮定はあくまで非弾性変形と比較して弾性変形が相対的に微小であることを仮定している。よって， \hat{U}^e 以外の写像が含まれない関係式には $\hat{U}^e = \mathbf{I}$ を適用しないことに注意されたい。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。以上より，式 (2.31) から第 2 中間配置におけるひずみ $\mathbf{E}_{(m)}$ およびひずみ速度 $\dot{\mathbf{E}}_{(m)}$ を第 1 中間配置におけるひずみ $\mathbf{E}_{(M)}$ およびひずみ速度 $\dot{\mathbf{E}}_{(M)}$ を用いて式 (2.44) のように近似できる。同様に，式 (2.36) から第 2 中間配置における速度こう配 $\mathbf{L}_{(m)}$ および変形速度 $\mathbf{D}_{(m)}$ についても第 1 中間配置における速度こう配 $\mathbf{L}_{(M)}$ および変形速度 $\mathbf{D}_{(M)}$ を用いて式 (2.45) のように近似される。

$$\mathbf{E}_{(m)} = \hat{U}^{e-T} \mathbf{E}_{(M)} \hat{U}^{e-1} \approx \mathbf{E}_{(M)}, \quad \dot{\mathbf{E}}_{(m)} = (\hat{U}^{e-T} \mathbf{E}_{(M)} \hat{U}^{e-1}) \cdot \approx \dot{\mathbf{E}}_{(M)} \dots\dots\dots (2.44)$$

$$L_{(m)} = \hat{U}^e L_{(M)} \hat{U}^{e-1} \approx L_{(M)}, \quad D_{(m)} = (\hat{U}^e L_{(M)} \hat{U}^{e-1})_S \approx D_{(M)} \dots \dots \dots (2.45)$$

なお、式 (2.44) および式 (2.45) の関係はそれぞれの弾性部分および非弾性部分についても同様の関係が成り立つ。

2.3.5 構成式の参照配置

2.3.4 項の微小弾性変形の仮定を用いれば、式 (2.43) は式 (2.46) のように書き改められる。

$$D^e = R^* D_{(m)}^e R^{*T} \approx R^* \dot{E}_{(M)}^e R^{*T} \approx R^* \dot{E}_{(m)}^e R^{*T} \dots \dots \dots (2.46)$$

式 (2.46) より各配置での弾性変形速度および弾性ひずみ速度の関係がそれぞれ次式のように得られる。

$$D^e \approx \overset{\nabla}{E}^e, \quad D_{(m)}^e \approx \dot{E}_{(m)}^e \dots \dots \dots (2.47)$$

ここで、 $\overset{\nabla}{E}^e$ は弾性ひずみ E^e の Mandel–Kratochvil 速度であり次式で定義される。

$$\overset{\nabla}{E}^e \equiv \dot{E}^e - W^* E^e + E^e W^* \dots \dots \dots (2.48)$$

式 (2.47) より第 2 中間配置で構成式を導出すれば、現配置の弾性ひずみ速度を応力と同様に Mandel–Kratochvil 速度で記述可能である。加えて、第 2 中間配置では弾性ひずみの物質時間微分と弾性変形速度が一致するため、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 [補足 B.5]。したがって、現配置から弾・剛体回転を取り除いた第 2 中間配置で定義された量は客観性を有するため、構成式を導出する配置として第 2 中間配置を参照するのが妥当であると言える。

2.4 損傷配置と擬似無損傷配置

本研究では変形と同時にポリマの特徴的な微視的損傷であるクレーズの進展を予測する。その際、微視的損傷の変形場への影響を評価するために連続体損傷力学⁽¹²⁰⁾の理論に基づいて損傷密度を陽に考慮した配置を導入する必要がある。いま、クレーズ等の損傷が存在するにもかかわらず、損傷による観察面積の変化を考慮しない仮想的な配置を擬似無損傷配置、損傷による面積変化を考慮した実配置を損傷配置と呼ぶ。単軸引張試験に代表される通常の試験は、損傷による観察面積の変化を考慮することなく行われる。したがって、実験から得られる応力は擬似無損傷配置における仮想的な応力であり、損傷の影響は縦弾性係数に反映される。一方、損傷配置では損傷による観察面積変化を考慮してあるため応力は実際の応力であり、このとき縦弾性係数は損傷の影響を受けることなく常に一定の値となる。図 2.4 に損傷配置および擬似無損傷配置についての概略図を示す。擬似無損傷配置における応力を σ 、弾性ひずみを ε^e 、損傷配置における応力を σ^* 、弾性ひずみを ε^{e*} とする。 ω は損傷率であり、単位面積あたりに存在する損傷の割合を表す。擬似無損傷配置における観察面積を S とすれば、損傷配置の観察面積 S^* との間には以下の様な関係が成り立つ。

$$S^* = (1 - \omega)S \dots \dots \dots (2.49)$$

損傷が存在する観察面に F という力をかけるとすれば、損傷配置における応力は次式のように表現できる。

$$\sigma^* = \frac{F}{S^*} = \frac{F}{(1 - \omega)S} = \frac{\sigma}{(1 - \omega)} \dots \dots \dots (2.50)$$

式 (2.50) から、損傷による面積変化を考慮することにより、損傷配置における応力 σ^* の値は、擬似無損傷配置における応力より大きくなるのがわかる。この σ^* は一般に実応力⁽⁹¹⁾と呼ばれる。

一方、損傷配置における弾性ひずみ ε^{e^*} および擬似無損傷配置における弾性ひずみ ε^e はそれぞれ次式のように書ける.

$$\varepsilon^{e^*} = \frac{\sigma^*}{E_0} = \frac{\sigma}{(1-\omega)E_0} \dots\dots\dots (2.51)$$

$$\varepsilon^e = \frac{\sigma}{E} \dots\dots\dots (2.52)$$

ここで、 E_0 は損傷の影響を受けず初期値で一定の損傷配置における縦弾性係数を、 E は損傷の影響が反映される擬似無損傷配置における縦弾性係数を表す. 擬似無損傷配置の弾性ひずみと損傷配置の弾性ひずみとは等しいという、Lemaitre のひずみ等価配置の概念⁽⁹¹⁾に基づけば、式 (2.51) および (2.52) は等しくなり、以下の関係が成り立つ.

$$\frac{\sigma}{E} = \frac{\sigma}{(1-\omega)E_0} \dots\dots\dots (2.53)$$

式 (2.53) より、

$$E = (1-\omega)E_0 \dots\dots\dots (2.54)$$

という関係が得られる. すなわち、擬似無損傷配置における縦弾性係数 E は、損傷配置における縦弾性係数 E_0 の $(1-\omega)$ 倍になる. よって、損傷配置の縦弾性係数は常に一定値であるのに対し、擬似無損傷配置の縦弾性係数は損傷率の増加に伴い減少する. なお、実際にはクレーズは主応力方向に対して垂直に成長する異方性を有していることが知られている [補足 A.5]⁽⁴¹⁾. しかしながら、本研究では簡単化のため、クレーズの等方性を仮定し、クレーズ密度を異方性を表現可能なテンソルではなく、スカラー量として定義している. 以上のように、ひずみ等価配置の考えを前提にした場合は損傷配置または擬似無損傷配置のいずれの配置で考えても導出された構成式の物理的意味は変わらない. しかしながら、実験では損傷による面積変化を考慮していないため、実験結果より同定された材料応答則を用いて数値解析を実施する場合には、構成式は擬似無損傷配置で記述されていなくてはならない. したがって、本論文では、擬似無損傷配置で損傷依存形構成式を導出する. なお、2.3.5 項で述べたように構成式を導出する配置としては第 2 中間配置を参照するため、上述の議論は 4 配置構成の各配置のうち、第 2 中間配置においてのみ考慮されれば十分である. すなわち、図 2.4 に示したように、これまでに導入した 4 配置構成の各配置を擬似無損傷配置とみなし、そのうち、第 2 中間配置についてのみ対応する損傷配置を導入する.

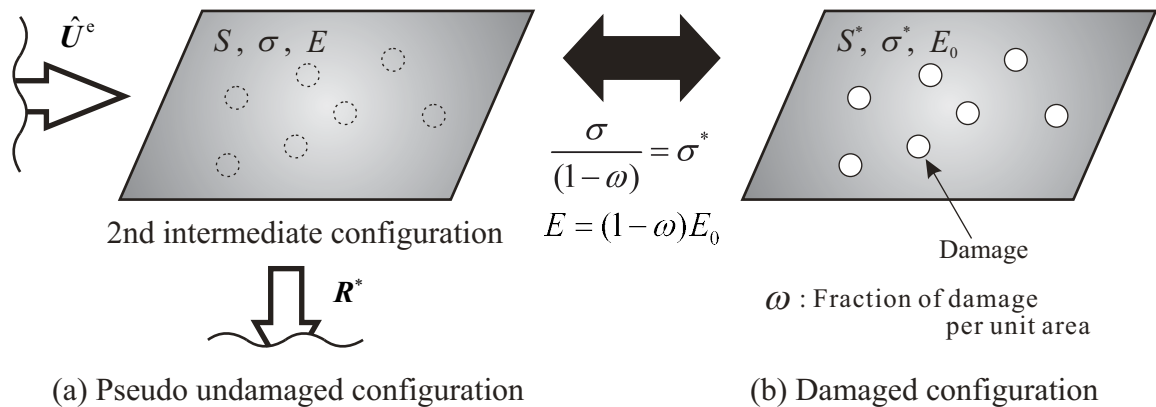


Fig. 2.4 Configurations with damage.

2.5 結晶塑性論の運動学

本節では、結晶塑性論⁽⁶¹⁾に特有の基底ベクトルの運動学について、前節までに導入した材料依存性スピンを伴う4配置構成に基づいて論じる。ここで、非晶相に対して適用する結晶塑性論的分子鎖塑性モデルはその名のとおり、結晶塑性論を非晶性ポリマ用に拡張したモデルである。そこで、以下の各項では、はじめに結晶塑性論の場合の運動学を述べる。その後、分子鎖塑性論の運動学について述べることで両者の相違を明確にする。また、本研究では結晶塑性論のすべり系を表す単位基底ベクトルを結晶基底ベクトル、分子鎖塑性論のすべり系を表す単位基底ベクトルを分子鎖基底ベクトルと呼ぶ。なお、分子鎖塑性論の運動学は灘⁽³⁾によって論じられたものと同様である。

2.5.1 基底ベクトルおよびすべり系の定義

(a) 結晶相の結晶基底ベクトル

結晶塑性論ではすべりを塑性変形の素過程とみなし、ある物質点における塑性変形速度をその点に埋め込まれた各すべり系のすべり速度の重ね合わせとして表す。このとき、すべり系番号 α のすべりが生じる面の法線方向を表す単位ベクトルを $m^{(\alpha)}$ 、すべり方向を表す単位ベクトルを $s^{(\alpha)}$ と表わし、これらを結晶基底ベクトル

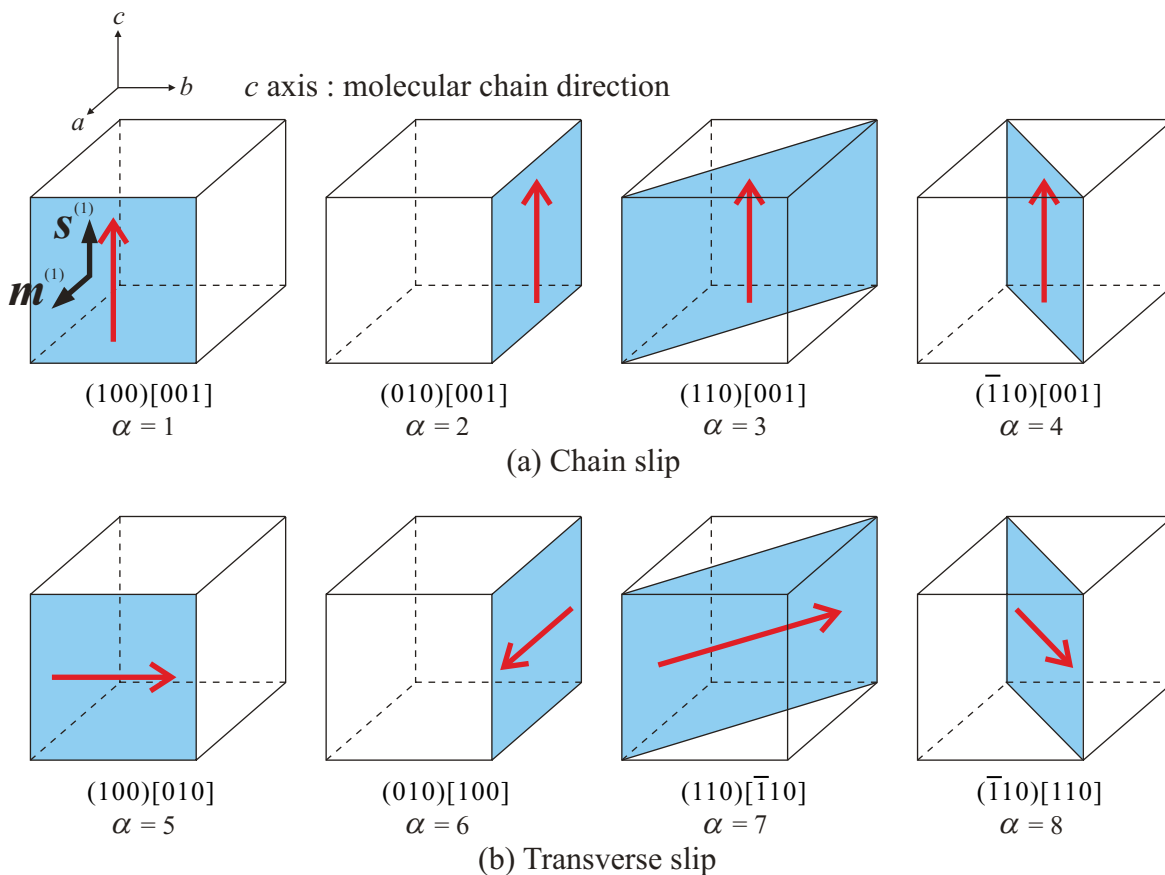


Fig. 2.5 Slip planes and slip systems in crystalline phase.

と呼ぶ。ここで、 $()^{(\alpha)}$ はすべり系 α の量であることを意味する。結晶性ポリマの結晶相は「分子鎖の折り畳み構造が形成する面およびその垂直方向で生じるすべり」を塑性変形の素過程とする。加えて、結晶相の内部構造は分子鎖の配列方向を c 軸方向にもつ単位ブロックとしてモデル化できる。この場合、結晶相のすべり系は図 2.5 に示すように分子鎖方向の 4 すべり系 (Chain slip) およびその垂直方向の 4 すべり系 (Transverse slip) の計 8 すべり系から構成される⁽⁷⁹⁾⁽⁹⁰⁾。なお、実際には、結晶性ポリマの結晶相はその種類によって異なる結晶構造を有する。代表的な例として、HDPE は斜方晶構造、PP は単斜晶構造をそれぞれ有する⁽⁷¹⁾。本論文では結晶性ポリマの解析対象として PP を想定するが、簡単化のため、PP も HDPE と同様に図 2.5 のような斜方晶構造を有するものとして扱う。さらに、結晶基底ベクトル $m^{(\alpha)}$ および $s^{(\alpha)}$ を用いることで各すべり系における結晶基底テンソルを次式のように定義できる。

$$P^{(\alpha)} \equiv s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.55)$$

この結晶基底テンソルを用いれば、式 (1.4) の分解せん断応力は次式のように表記できる。

$$\tau^{(\alpha)} \equiv s^{(\alpha)} \cdot (Tm^{(\alpha)}) = T \cdot (s^{(\alpha)} \otimes m^{(\alpha)})_S = T \cdot P_S^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.56)$$

ただし、式 (2.56) では Cauchy 応力 T の対称性 [補足 C.1.3] および対称テンソルと反対称テンソルの積が零となる性質を用いている。

(b) 非晶相の分子鎖基底ベクトル

結晶性ポリマの非晶相または非晶性ポリマの塑性変形の素過程は結晶相とは異なり、「1 本の分子鎖におけるキック数の減少による応力方向への配向」として説明されるキック回転であるとされている⁽⁴⁵⁾。このようなキック回転の概念を非晶相の塑性変形の素過程として採用し、さらに、結晶塑性論の体系に関連づけることで提案された理論が結晶塑性論的分子鎖塑性論である⁽³⁾。

灘⁽³⁾ は高松・志澤⁽⁷⁴⁾ により提案された分子鎖すべり系の概念を次のように説明している。まず、非晶性ポリマの内部は分子鎖の絡み点を架橋点と見なした分子鎖網目構造をなしており、その単位構造は分子鎖網目理論における 8 鎖モデルと類似の 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 [図 2.6(a)]。さらに、同図 (b) のように絡み点を挟む 4 本の分子鎖が同一平面内に含まれており、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ものとする。これによって、単位構造あたりすべり面が 4 個規定され、それぞれの面に 1 個ずつすべり方向があることとなる。したがって、8 鎖モデルの場合、合計 4 つのすべり系が存在す

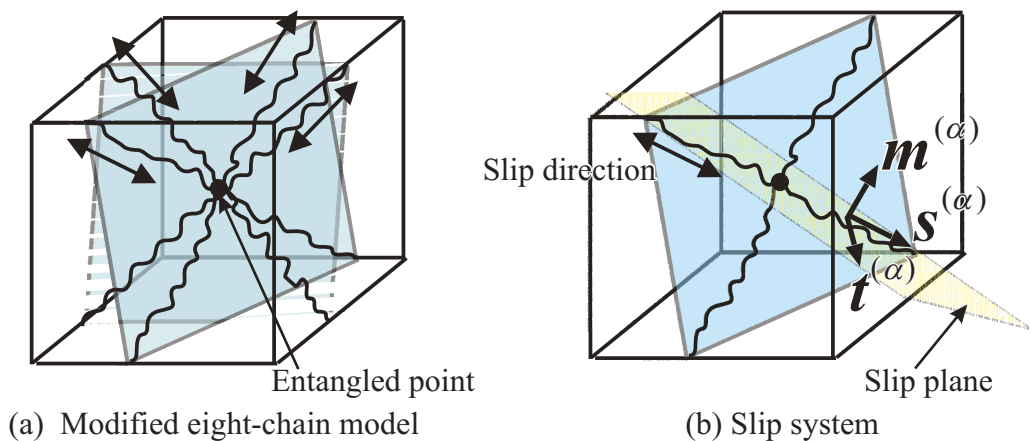


Fig. 2.6 Model of internal structure around entanglement in glassy phase⁽³⁾.

ることになる．なお，本来分子鎖は三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．加えて，ここでいう「すべり」とは，結晶相と異なり，2本の分子鎖間の実際のすべりを意味するものではなくあくまでキンク回転により生じる非弾性ひずみを対応させたものであることに注意されたい．また，後述のように分子鎖塑性論では各分子鎖が独立して回転することが許容されているため，図2.6の8鎖モデルは分子鎖端が立方体頂点に固定されておらず，分子鎖網目理論における8鎖モデルとは若干異なる．以上のようなモデルを想定すれば，分子鎖基底テンソル $\mathbf{P}^{(\alpha)}$ および $\mathbf{Q}^{(\alpha)}$ がそれぞれ次式のように定義できる．

$$\mathbf{P}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.57)$$

$$\mathbf{Q}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)} + \mathbf{m}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} + \mathbf{t}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.58)$$

ここで，通常の結晶塑性論において用いられる $\mathbf{P}^{(\alpha)}$ に加えて，分子鎖塑性論では，ポリマに特有の現象である塑性変形中の体積変化を表現するために新たな分子鎖基底テンソル $\mathbf{Q}^{(\alpha)}$ が導入されている．また， $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ および $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ はそれぞれ結晶塑性論における結晶基底ベクトルに対応するすべり方向およびすべり面の法線方向を表す単位基底ベクトルであり， $\mathbf{t}^{(\alpha)}$ は $\mathbf{t}^{(\alpha)} = \mathbf{s}^{(\alpha)} \times \mathbf{m}^{(\alpha)}$ で与えられる単位基底ベクトルである．分子鎖塑性論ではこれらをまとめて分子鎖基底ベクトルと呼ぶ．さらに，分子鎖基底テンソル $\mathbf{P}^{(\alpha)}$ を用いれば，結晶塑性論と同様に分解せん断応力を次式のように表記できる．

$$\boldsymbol{\tau}^{(\alpha)} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.59)$$

2.5.2 非弾性変形速度および非弾性スピンの導出

(a) 結晶塑性論の非弾性変形速度および非弾性スピン

まず，結晶塑性論の体系によれば，初期配置の非弾性速度こう配 $\mathbf{L}_{(l)}^i$ は各すべり系の非弾性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ の総和をとり，次式で表わすことができる．

$$\mathbf{L}_{(l)}^i \equiv \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(l)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.60)$$

式(2.36)および式(2.60)から，各配置における非弾性速度こう配は次式のように表される．

$$\mathbf{L}_{(M)}^i = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{F}^i \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{i-1} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(M)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.61)$$

$$\mathbf{L}_{(m)}^i = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \hat{\mathbf{U}}^{e-1} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.62)$$

$$\mathbf{L}^i = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{R}^* \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} \mathbf{R}^{*T} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.63)$$

したがって，結晶基底ベクトルの配置変換則はそれぞれ次式で与えられる．

$$\mathbf{s}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^i \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.64)$$

$$\mathbf{m}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^{e-T} \mathbf{F}^{i-T} \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.65)$$

ただし，実際には，結晶基底ベクトルは非弾性変形こう配 \mathbf{F}^i による変換を受けないことならびに微小弾性変形の仮定から，式(2.64)および式(2.65)は次式のように書き換えられる．

$$\mathbf{s}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} \approx \mathbf{R}^* \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} \dots\dots\dots (2.66)$$

$$\mathbf{m}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} \approx \mathbf{R}^* \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.67)$$

式 (2.66) および式 (2.67) を用いれば、結晶基底ベクトルはあらゆる変形に対して方位変換のみを受けることになり、常に単位ベクトルとなる。なお、本来であれば 2.3.4 項で述べたように微小弾性変形の仮定は $\hat{\mathbf{U}}^e$ の 2 次に関する項においてのみ適用される。式 (2.66) および式 (2.67) においては結晶基底ベクトルの正規性を満たすためにあえて $\hat{\mathbf{U}}^e$ の 1 次項に対して、 $\hat{\mathbf{U}}^e = \mathbf{I}$ の関係を適用している。一方、微小弾性変形の仮定を適用せずに、 $\mathbf{s}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)} = \mathbf{F}^* \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}$ という変換を受けるという考え方も存在する⁽⁶¹⁾⁽⁷⁷⁾。そのような変換を行う場合には結晶基底ベクトルの正規性は満足されない。また、一般的に $\mathbf{s}^{(\alpha)} = \mathbf{F}^* \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}$ による変換および式 (2.66) による変換を行った場合に得られる数値解析結果の差は非常に小さい。したがって、本研究では結晶基底ベクトルを常に単位ベクトルとして扱うことができる式 (2.66) および式 (2.67) を結晶基底ベクトルの変換則として採用する。

ここで、現配置の非弾性変形速度 \mathbf{D}^i および非弾性スピン \mathbf{W}^i は、現配置の非弾性速度こう配 \mathbf{L}^i の対称部分と反対称部分である。よって、結晶塑性論を用いた場合の \mathbf{D}^i および \mathbf{W}^i はそれぞれ

$$\mathbf{D}^i = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.68)$$

$$\mathbf{W}^i = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_A^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.69)$$

のように得られる。ただし、 $\mathbf{P}_S^{(\alpha)}$ および $\mathbf{P}_A^{(\alpha)}$ はそれぞれ次式のように表される。

$$\mathbf{P}_S^{(\alpha)} = \frac{1}{2} (\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} + \mathbf{m}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)}) \dots \dots \dots (2.70)$$

$$\mathbf{P}_A^{(\alpha)} = \frac{1}{2} (\mathbf{s}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}^{(\alpha)} - \mathbf{m}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}^{(\alpha)}) \dots \dots \dots (2.71)$$

なお、 $\mathbf{P}_S^{(\alpha)}$ は Schmid テンソルである。結晶塑性論の体系では式 (2.68) および式 (2.69) に示した運動学的関係式ならびに非弾性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ を決定する材料応答則のみから非弾性変形速度および非弾性スピンを計算できるため、従来の現象論的塑性論と比較して理論体系が簡潔になるという利点を有する。なお、 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ の計算手法については 5 章で述べる。

(b) 分子鎖塑性論の非弾性変形速度および非弾性スピン

結晶塑性論的分子鎖塑性論の体系によれば、初期配置の非弾性速度こう配 $\mathbf{L}_{(I)}^i$ は各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、次式で表わすことができる [補足 B.6].

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_{(I)}^i &\equiv \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} (\mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)}) \right] \\ &= \sum_{\alpha} \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(I)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(I)}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (2.72) \end{aligned}$$

いま、 $\mathbf{Q}_{(I)}^{(\alpha)}$ が等方テンソル \mathbf{I} と一致すること [補足 B.7] を考慮すれば、 $\mathbf{Q}_{(I)}^{(\alpha)}$ はあらゆる配置変換について不変である。したがって、式 (2.36) および式 (2.61)~(2.63) を考慮して、各配置における非弾性速度こう配は次のように表される。

$$\mathbf{L}_{(M)}^i = \sum_{\alpha} \mathbf{F}^i \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(I)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(I)}^{(\alpha)} \right) \mathbf{F}^{i-1} = \sum_{\alpha} \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(M)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (2.73)$$

$$\mathbf{L}_{(m)}^i = \sum_{\alpha} \hat{\mathbf{U}}^e \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(M)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \hat{\mathbf{U}}^{e-1} = \sum_{\alpha} \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(m)}^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (2.74)$$

$$L^i = \sum_{\alpha} R^* (\dot{\gamma}^{(\alpha)} P_{(m)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} Q_{(m)}^{(\alpha)}) R^{*T} = \sum_{\alpha} (\dot{\gamma}^{(\alpha)} P^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} Q^{(\alpha)}) \dots (2.75)$$

上式より、分子鎖基底ベクトルの配置変換則も結晶塑性論の場合と同様に式 (2.64) および式 (2.65) のように得られる。ただし、分子鎖基底ベクトルの場合には結晶基底ベクトルと異なり、自身のすべり系以外によって生じる非弾性変形こう配の回転成分 $\bar{R}^{i(\alpha)} = \prod_{\beta \neq \alpha} \hat{R}^{i(\beta)}$ による方位変換を受けるものとする。また、2.5.2 項 (a) と同様の理由により微小弾性弾性変形の仮定を適用すれば、分子鎖基底ベクトルの配置変換則は次式のように書き換えられる。

$$s^{(\alpha)} = R^* s_{(m)}^{(\alpha)} \approx R^* s_{(M)}^{(\alpha)} = R^* \bar{R}^{i(\alpha)} s_{(I)}^{(\alpha)} \dots (2.76)$$

$$m^{(\alpha)} = R^* m_{(m)}^{(\alpha)} \approx R^* m_{(M)}^{(\alpha)} = R^* \bar{R}^{i(\alpha)} m_{(I)}^{(\alpha)} \dots (2.77)$$

式 (2.76) および式 (2.77) によって 2.5.3 項で述べるように分子鎖基底ベクトルの独立回転が再現される。また、式 (2.76) および式 (2.77) においても各基底ベクトルは回転による方位変換のみを受けるため [補足 B.7]、分子鎖基底ベクトルは常に単位ベクトルとなる。

さらに、分子鎖塑性論を用いた場合の現配置の非弾性変形速度 D^i および非弾性スピン W^i は、式 (2.75) の右辺を対称部分と反対称部分に分解することにより、それぞれ次式のように表される。

$$D^i = \sum_{\alpha} (\dot{\gamma}^{(\alpha)} P_S^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} Q^{(\alpha)}) \dots (2.78)$$

$$W^i = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_A^{(\alpha)} \dots (2.79)$$

ここで、式 (2.78) および式 (2.79) を結晶塑性論を用いた場合に与えられる非弾性変形速度 [式 (2.68)] および非弾性スピン [式 (2.69)] と比較すれば、分子鎖塑性論を用いた場合には非弾性変形速度に $\sum_{\alpha} \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} Q^{(\alpha)}$ の項が追加されているということがわかる。ただし、本研究では塑性変形による体積変化を生じないものとし、 $\dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)}$ を零として扱うため、実際には非晶および結晶相の両相において非弾性変形速度の計算に式 (2.68) が適用される。

2.5.3 基底ベクトルの発展式および更新

(a) 結晶基底ベクトルの発展式および更新

通常の結晶塑性論では式 (2.66) および式 (2.67) または図 2.7(a) に示したように、結晶基底ベクトルは非弾性変形こう配 F^i によっては方位が変化せず、第 2 中間配置から現配置への弾・剛体回転 R^* のみによって方位が変化する。このとき、第 1 中間配置から第 2 中間配置への弾性ストレッチ変形においては回転成分が完全に除かれているため、結晶基底ベクトルも回転しない。したがって、結晶基底ベクトル $s^{(\alpha)}$ および $m^{(\alpha)}$ の発展式は下部構造スピン $W^* = W - W^i$ を用いて次式のように表される。

$$\dot{s}^{(\alpha)} = W^* s^{(\alpha)} \dots (2.80)$$

$$\dot{m}^{(\alpha)} = W^* m^{(\alpha)} \dots (2.81)$$

しかしながら、実際に式 (2.80) および式 (2.81) をそのまま数値解析に適用し、時間増分を求めて結晶基底を更新した場合には結晶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 B.8]。そこで、本研究では Taylor 展開を利用して結晶基底ベクトルを更新する⁽¹²¹⁾。まず W^* に対する軸性ベクトルを $w^* \equiv \text{dual}W^*$

とする．そして角速度ベクトル \mathbf{w}^* が一定であるとして，時間 Δt 経過後に結晶基底ベクトル $\mathbf{s}^{(\alpha)}(t)$ が回転して $\mathbf{s}^{(\alpha)}(t + \Delta t)$ になったとすれば，この間の回転を表す直交テンソルを $\Delta \mathbf{R}^*$ として次のように表せる．

$$\mathbf{s}^{(\alpha)}(t + \Delta t) = \Delta \mathbf{R}^* \mathbf{s}^{(\alpha)}(t) \dots \dots \dots (2.82)$$

$$\mathbf{m}^{(\alpha)}(t + \Delta t) = \Delta \mathbf{R}^* \mathbf{m}^{(\alpha)}(t) \dots \dots \dots (2.83)$$

ただし， $\Delta \mathbf{R}^*$ は次のようになる．

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{R}^* &= \mathbf{I} + \frac{\sin \|\mathbf{w}^*\| \Delta t}{\|\mathbf{w}^*\| \Delta t} \mathbf{W}^* \Delta t + \frac{1}{2} \left\{ \frac{\sin(\|\mathbf{w}^*\| \Delta t / 2)}{\|\mathbf{w}^*\| \Delta t / 2} \right\}^2 (\mathbf{W}^* \Delta t)^2 \\ &= \mathbf{I} + \frac{\sin \varphi}{\varphi} \mathbf{W}^* \Delta t + \frac{1 - \cos \varphi}{\varphi^2} (\mathbf{W}^* \Delta t)^2 \dots \dots \dots (2.84) \end{aligned}$$

$$\varphi \equiv \|\mathbf{w}^*\| \Delta t = \sqrt{\frac{-\text{tr}\{(\mathbf{W}^* \Delta t)^2\}}{2}} \dots \dots \dots (2.85)$$

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⁽¹²²⁾．

(b) 分子鎖基底ベクトルの発展式および更新

前述のように結晶塑性論では，結晶基底ベクトル $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ および $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ 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．これに対して分子鎖塑性論では，式 (2.76) および式 (2.77) または図 2.7(b) に示したように初期配置から第1中間配置の間の非弾性変形によってすべり系1のみが活動した場合，すべり系1以外のすべり系で回転が生じる．このとき，すべり系1は自身の活動による回転を生じない．その後，通常の結晶塑性論と同様に第2中間配置から現配置への弾・剛体回転によって各すべり系は等しく回転を受ける．したがって，分子鎖基底ベクトルの発展式は

$$\dot{\mathbf{s}}^{(\alpha)} = (\mathbf{W} - \mathbf{W}^{i(\alpha)}) \mathbf{s}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.86)$$

$$\dot{\mathbf{m}}^{(\alpha)} = (\mathbf{W} - \mathbf{W}^{i(\alpha)}) \mathbf{m}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (2.87)$$

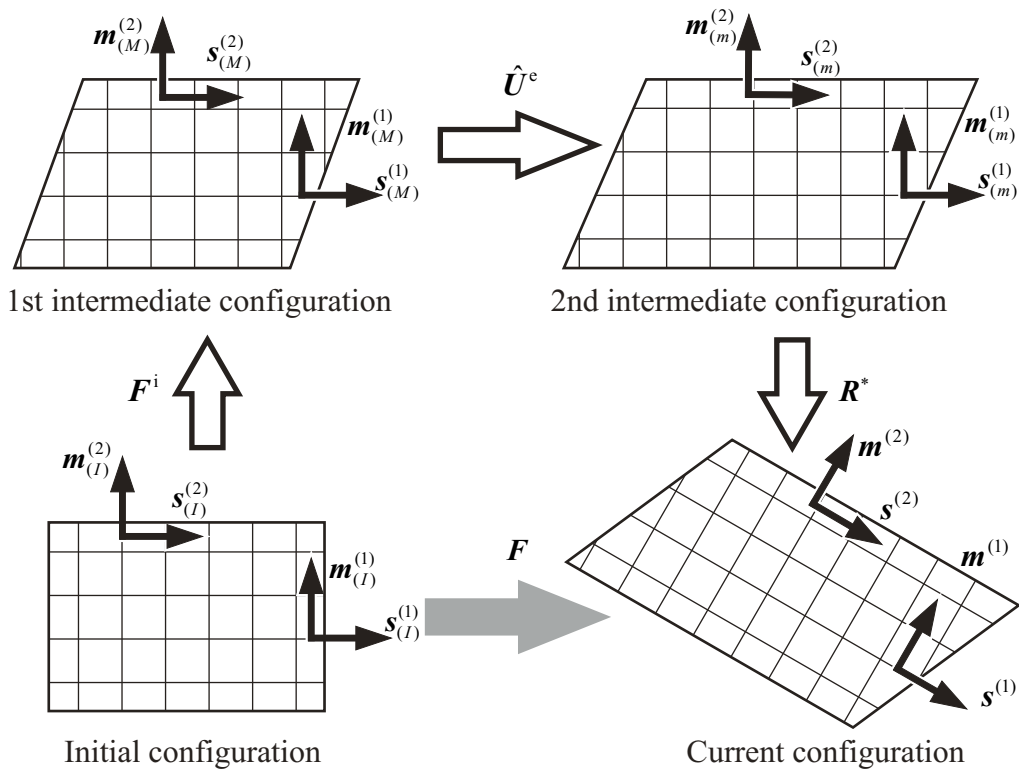
のように表わされる [補足 B.9]．式 (2.86) および式 (2.87) では各すべり系がすべり系毎に異なるスピン $(\mathbf{W} - \mathbf{W}^{i(\alpha)})$ によってそれぞれ独立に回転するため，すべり系ごとの分子鎖の配向方向を直接表現可能である．この点が通常の結晶塑性論とは一線を画する点である⁽⁷²⁾．ただし，結晶基底ベクトルの更新と同様に実際の数値解析においては Taylor 展開を利用した以下の式を用いて分子鎖基底ベクトルを更新する．

$$\mathbf{s}^{(\alpha)}(t + \Delta t) = \Delta \mathbf{R}^{(\alpha)} \mathbf{s}^{(\alpha)}(t) \dots \dots \dots (2.88)$$

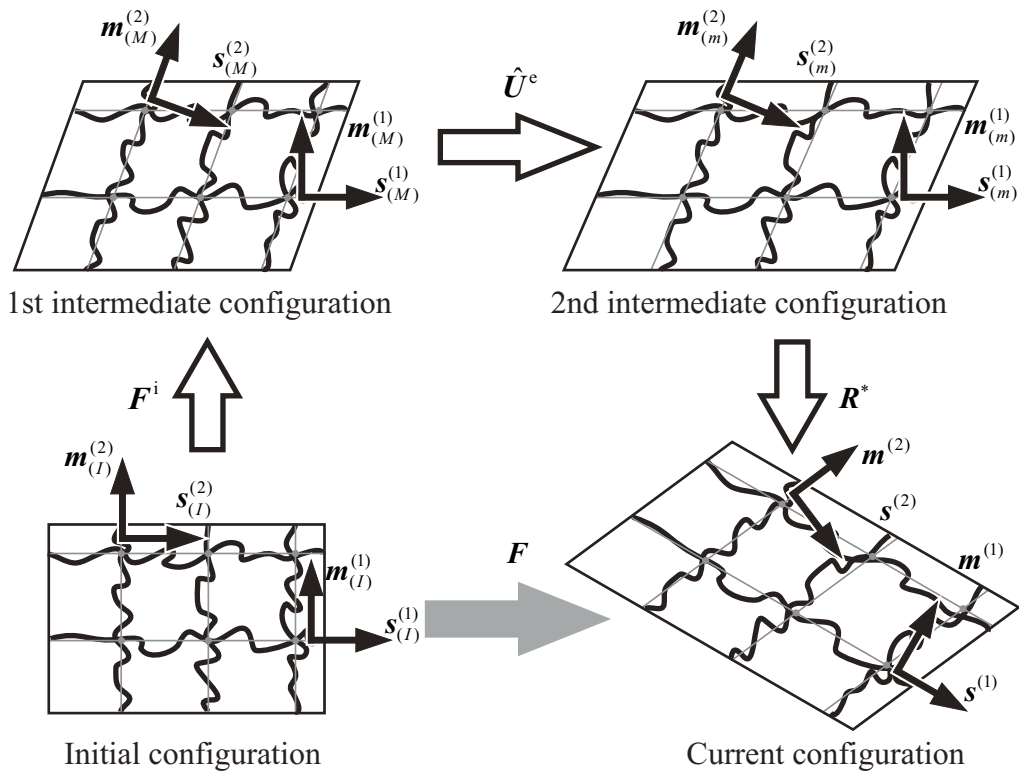
$$\mathbf{m}^{(\alpha)}(t + \Delta t) = \Delta \mathbf{R}^{(\alpha)} \mathbf{m}^{(\alpha)}(t) \dots \dots \dots (2.89)$$

$$\Delta \mathbf{R}^{(\alpha)} = \mathbf{I} + \frac{\sin \varphi^{(\alpha)}}{\varphi^{(\alpha)}} \mathbf{W}^{*(\alpha)} \Delta t + \frac{1 - \cos \varphi^{(\alpha)}}{\varphi^{(\alpha)^2} (\mathbf{W}^{*(\alpha)} \Delta t)^2} \dots \dots \dots (2.90)$$

$$\varphi^{(\alpha)} \equiv \|\mathbf{w}^{*(\alpha)}\| \Delta t = \sqrt{\frac{-\text{tr}\{(\mathbf{W}^{*(\alpha)} \Delta t)^2\}}{2}} \dots \dots \dots (2.91)$$



(a) Crystal plasticity theory



(b) Molecular chain plasticity theory

Fig. 2.7 Rotation of base vectors in crystal plasticity theory and molecular chain plasticity theory.

2.6 運動学的関係式の利用

最後に、本章で導出された運動学的関係式のうち、以降の章で主に用いる関係式を下記に列挙する.

- 弾性変形速度および弾性ひずみ速度の関係式 [式 (2.47)] ならびに損傷による見かけの縦弾性係数の変化 [式 (2.54)] → 4 章：損傷依存性速度形弾性構成式の導出.
- 結晶塑性論に基づく非弾性変形速度および非弾性スピンの計算式 [式 (2.68) および式 (2.69)] → 4 章：結晶塑性形の弾粘塑性構成式の導出.
- 速度こう配および変形速度の定義 [式 (2.4) および式 (2.9)] → 8 章：有限要素解析のための離散化マトリックスの構築.
- 連続体スピンの定義 [式 (2.10)] ならびに結晶基底ベクトルおよび分子鎖基底ベクトルの更新 [式 (2.82), (2.83), (2.88) および式 (2.89)] → 実際の数値解析で利用 (図 8.6 参照).

以上に加え、2.4 節で述べたように 4 章では構成式を第 2 中間配置かつ擬似無損傷配置で導出することに留意されたい.

第 3 章

内力の定義と仮想仕事の原理

本章では、力学的保存則と等価原理であるエネルギー原理について述べる。なお、エネルギー原理には仮想仕事の原理および変分原理が存在するが、後者はポテンシャルを定義できる可逆現象に適用が限定されるため、非可逆現象である塑性変形を扱う本研究では仮想仕事の原理を用いる。

まず、村上ら⁽³⁵⁾⁽³⁶⁾の手法に基づいて、保存エネルギーである自由エネルギーに加え、散逸エネルギーをも考慮した全自由エネルギーの引数を決定し、内力を定義する。その際、内部変数として非弾性変形尺度の速度およびスカラクレーズ密度を導入し、各引数に共役な熱力学的力を定義する。

次に、得られた内力の定義から仮想仕事の原理を導く。仮想仕事の原理は通常の形式に加え、仮想仕事率の原理および速度形仮想仕事の原理の 3 種類に大別される。本章では各種の仮想仕事の原理について説明を加えると同時に、最終的に本研究で採用する速度形仮想仕事の原理を導出する。なお、仮想仕事の原理は運動方程式、角運動方程式および力学的境界条件を内包しているため [補足 C.2]、本章ではそれぞれの保存則について具体的には言及しない。エネルギー保存則を含む各保存則の詳細は補足 C.1 を参照されたい。ただし、エントロピー不等式については構成式の導出に必要となるため、4 章に記載している。

3.1 内力の定義

本節では、全自由エネルギーの引数を考え内力を定義する。自由エネルギーの引数は巨視的変数および内部変数に分類することができ、それぞれの引数は構成式の参照配置である第 2 中間配置 $\beta_{(m)}$ の量として記述される。すなわち、

$$\bar{\Psi} = \bar{\Psi}(\bar{\mathcal{E}}_{(m)}^{\text{mac}[i]}; \bar{\mathcal{E}}_{(m)}^{\text{mic}[j]}). \dots \dots \dots (3.1)$$

となる。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 は初期配置での密度である。また、 $\bar{\mathcal{E}}_{(m)}^{\text{mac}[i]}$ ($i = 1, 2, \dots$) は巨視的変数、 $\bar{\mathcal{E}}_{(m)}^{\text{mic}[j]}$ ($i = 1, 2, \dots$) は内部変数を表す。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。通常、Helmholtz の自由エネルギーに対する巨視的変数としてはひずみおよび温度に加え、温度こう配または熱量の 3 つが用いられる。一方、内部変数とは巨視的自由エネルギーには陽に表れない変数群のことであり、巨視的変数だけでは表現できない材料の微視的内部状態を表現するために用いられる。したがって、巨視的変数とは異なり、どのような内部変数を陽に記述するかは任意である。本研究では、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⁽³⁷⁾、さらに損傷の影響を評価するためにクレーズ密度⁽¹²³⁾を内部変数として全自由エネルギーの引数に導入する。なお、灘⁽³⁾は背応力を用いるために非弾性変形尺度を引数に導入しているが、本研究で用いる分子鎖塑性モデルでは背応力を用いずとも非晶性ポリマの後続再硬化現象が再現可能なため⁽³⁾、非弾性変形尺度を内部変数に導入しない。以上

より式 (3.1) は次式のように書き改められる.

$$\bar{\Psi} = \bar{\Psi}(\theta, \bar{\mathbf{E}}_{(m)}, \bar{\mathbf{p}}_{(m)}; \dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)}^i, \omega) \dots\dots\dots (3.2)$$

ここで, θ は温度, $\bar{\mathbf{E}}_{(m)}$ は変形尺度を含む全ひずみである. また, $\dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)}^i$ 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 $\mathbf{q}_{(m)}$ の時間積分で次式のように定義される.

$$\bar{\mathbf{p}}_{(m)} \equiv \int_{\mathcal{T}} \mathbf{q}_{(m)} dt \quad \text{or} \quad \dot{\bar{\mathbf{p}}}_{(m)} \equiv \mathbf{q}_{(m)} \dots\dots\dots (3.3)$$

ここで, $\mathbf{q}_{(m)}$ は熱流束である.

次に, 式 (3.2) における全自由エネルギー $\bar{\Psi}$ の物質時間微分は微分の鎖則を用いて次式のようになる.

$$\begin{aligned} & \dot{\bar{\Psi}}(\theta, \bar{\mathbf{E}}_{(m)}, \bar{\mathbf{p}}_{(m)}; \dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)}^i, \omega) \\ &= \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \theta} \dot{\theta} + \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \bar{\mathbf{E}}_{(m)}} \cdot \dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)} + \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \bar{\mathbf{p}}_{(m)}} \cdot \dot{\bar{\mathbf{p}}}_{(m)} + \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)}^i} \cdot \dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)}^i + \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \omega} \dot{\omega} \\ &= -H\dot{\theta} + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)} - \tilde{\mathbf{g}}_{(m)} \cdot \mathbf{q}_{(m)} + \tilde{\mathbf{M}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i + \tilde{Y}\dot{\omega} \dots\dots\dots (3.4) \end{aligned}$$

上式 (3.4) より各内力を熱力学的力として次式のように定義する.

$$\left. \begin{aligned} -H &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \theta}, & \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \bar{\mathbf{E}}_{(m)}}, & -\tilde{\mathbf{g}}_{(m)} &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \bar{\mathbf{p}}_{(m)}} \\ \tilde{\mathbf{M}}_{(m)} &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \dot{\bar{\mathbf{E}}}_{(m)}^i}, & \tilde{Y} &\equiv \frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial \omega} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (3.5)$$

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, $\tilde{\mathbf{M}}_{(m)}$ は非弾性変形速度に共役な J 倍された内力⁽³⁷⁾, \tilde{Y} はクレーズに共役な J 倍された内力⁽¹²³⁾ とする.

最後に, 式 (3.4) の両辺に J^{-1} をかけ, 現配置へ戻せば次式が得られる.

$$\rho \dot{\bar{\Psi}} = -J^{-1}H\dot{\theta} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{q} + \mathbf{M} \cdot \dot{\mathbf{D}}^i + Y\dot{\omega} \dots\dots\dots (3.6)$$

3.2 仮想仕事の原理

仮想仕事の原理とは静的釣合い状態にある物体に, 図 3.1 に示すような運動学的に可容な仮想変位を与えた場合にも釣合い状態が保たれることを表す. すなわち, 外力のする仮想仕事の総和と内力のする仮想仕事の釣り合いを表す. ここで, 外力のなす仮想仕事を表面力によるものと物体力によるものに分けて考えれば, 仮想仕事の原理を次式のように定式化できる.

$$\oint_{\mathcal{A}} \check{P}'_s da + \int_{\mathcal{V}} \check{P}'_b dv = \int_{\mathcal{V}} \check{P}' dv \dots\dots\dots (3.7)$$

ここで, $(\check{\cdot})$ は仮想量を表し, \mathcal{A} は体積 \mathcal{V} を囲む物質検査面, da は微小面積要素, dv は微小体積要素を表す. また, \check{P}'_s , \check{P}'_b , \check{P}' は, それぞれ表面力のなす仮想仕事, 物体力のなす仮想仕事および内力のなす仮想仕事であり, これらは次のように表現できる.

$$\check{P}'_s = {}^{(m)}\mathbf{t} \cdot \check{\mathbf{u}} \dots\dots\dots (3.8)$$

$$\check{P}'_b = \rho \mathbf{f} \cdot \check{\mathbf{u}} \dots\dots\dots (3.9)$$

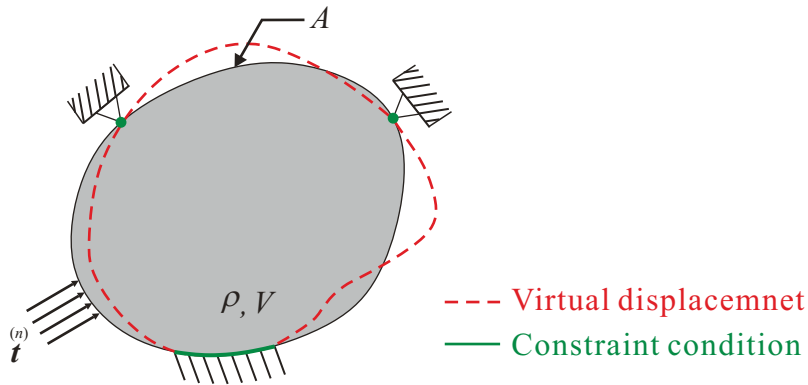


Fig. 3.1 Virtual displacement and boundary condition.

$$\dot{P}' = \rho \dot{\tilde{\psi}} = \mathbf{T} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{E}}} \dots \dots \dots (3.10)$$

ここで、 $\mathbf{t}^{(n)}$ は表面力、 $\tilde{\mathbf{u}}$ は仮想変位である。なお、式(3.8)~(3.10)は、次節で述べる仮想仕事率の原理における仮想速度 $\tilde{\mathbf{v}}$ を仮想変位 $\tilde{\mathbf{u}}$ に置き換えることによって得られる。

式(3.8)~(3.10)を式(3.7)に代入し、左辺と右辺を入れ替えれば

$$\int_V \mathbf{T} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{E}}} dv = \oint_A \mathbf{t}^{(n)} \cdot \tilde{\mathbf{u}} da + \int_V \rho \mathbf{f} \cdot \tilde{\mathbf{u}} dv \dots \dots \dots (3.11)$$

を得る。式(3.11)の仮想仕事の原理式は左辺の応力およびひずみのいずれも速度次元を有さないことから、線形弾性構成式を用いた静的構造物の応力解析によく用いられる。

3.3 仮想仕事率の原理

仮想仕事率の原理は一般に、「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、次式のように定式化できる。

$$\oint_A \dot{P}_s da + \int_V \dot{P}_B dv = \int_V \dot{P} dv \dots \dots \dots (3.12)$$

ここで、 \dot{P}_s 、 \dot{P}_B 、 \dot{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り、次式のように表現できる。

$$\dot{P}_s = \mathbf{t}^{(n)} \cdot \tilde{\mathbf{v}} \dots \dots \dots (3.13)$$

$$\dot{P}_B = \dot{P}_b - \dot{P}_1 = \rho \mathbf{f} \cdot \tilde{\mathbf{v}} - \rho \dot{\mathbf{v}} \cdot \tilde{\mathbf{v}} \dots \dots \dots (3.14)$$

$$\dot{P} = \rho \dot{\tilde{\psi}}|_{\theta, \bar{\mathbf{E}}_{(m)}^{\text{mic}[i]}} = \mathbf{T} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{D}}} \dots \dots \dots (3.15)$$

ここで、 $\tilde{\mathbf{v}}$ は仮想速度、 \dot{P}_b は純粋な物体力 $\rho \mathbf{f}$ のなす仮想仕事率、 \dot{P}_1 は慣性力 $\rho \dot{\mathbf{v}}$ のなす仮想仕事率である。 \dot{P} については、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 θ 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 $\bar{\mathbf{E}}_{(m)}^{\text{mic}[i]}$ も一定としている。したがって、式(3.6)より式(3.15)が得られる。

式(3.13)~(3.15)を式(3.12)に代入し、左辺と右辺を入れ替えれば

$$\int_V \mathbf{T} \cdot \dot{\tilde{\mathbf{D}}} dv = \oint_A \mathbf{t}^{(n)} \cdot \tilde{\mathbf{v}} da + \int_V \rho \mathbf{f} \cdot \tilde{\mathbf{v}} dv \dots \dots \dots (3.16)$$

を得る。ただし、準静的な場を考え、 $\dot{\mathbf{v}} \approx \mathbf{0}$ としている。式 (3.16) の仮想仕事率の原理式は Cauchy 応力 \mathbf{T} に対する共役量に変形速度 \mathbf{D} で記述されていることから、剛塑性体や粘性流体の解析に用いられる。

3.4 速度形仮想仕事の原理

仮想仕事率の原理式 [式 (3.16)] 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、本節では仮想仕事率の原理に物質時間微分を施すことで応力項を応力速度の形で表記する速度形仮想仕事の原理を、微小変形理論に適用されるものと有限変形理論に適用されるものに分類して紹介する。

3.4.1 微小変形理論に対する速度形仮想仕事の原理

式 (3.16) のように積分領域が現在配置の量として表記されている場合、この積分領域自体が微分操作の影響を受けてしまうため式 (3.16) に微分を施すことが困難である。そこで、微小変形の仮定から、現配置を参照配置 ($\mathbf{F} \approx \mathbf{I}$, $\mathbf{J} \approx 1$) とすれば、式 (3.16) を容易に初期配置における積分として表記できる。すなわち、

$$\int_{\mathcal{V}_0} \mathbf{T} \cdot \dot{\mathbf{D}} dv_0 = \oint_{\mathcal{A}_0} \overset{(0)}{\mathbf{t}} \cdot \dot{\mathbf{v}} da_0 + \int_{\mathcal{V}_0} \rho_0 \mathbf{f} \cdot \dot{\mathbf{v}} dv_0 \dots \dots \dots (3.17)$$

と書ける。ただし、 $(\)_0$ は初期配置における量を表している。初期配置の積分領域は時間により変化しないため、式 (3.17) の被積分関数に容易に微分操作を施せる。さらに、仮想量は任意であることから $\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{0}$ の条件下式 (3.17) の両辺に物質時間微分を施し、再び現配置表示に戻せば、

$$\int_{\mathcal{V}} \dot{\mathbf{T}} \cdot \dot{\mathbf{D}} dv = \oint_{\mathcal{A}} \overset{(0)}{\dot{\mathbf{t}}} \cdot \dot{\mathbf{v}} da + \int_{\mathcal{V}} \rho \dot{\mathbf{f}} \cdot \dot{\mathbf{v}} dv \dots \dots \dots (3.18)$$

となり、式 (3.16) の力学量のみ物質時間微分が施された形となる。式 (3.18) が微小変形理論における速度形仮想仕事の原理であり、幾何学的非線形性を伴わない場合の弾塑性または弾粘塑性解析などに適用される。

3.4.2 有限変形理論に対する速度形仮想仕事の原理 (Total Lagrange 形式)

本研究で扱う有限変形理論で用いられる速度形仮想仕事の原理は初期配置を参照する Total Lagrange 形式および現配置を参照する Updated Lagrange 形式の 2 通りの形式が存在する。本項ではまず、初期配置を参照する Total Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理を紹介する。

式 (3.16) を初期配置表示に戻せば次式のようなになる。

$$\int_{\mathcal{V}_0} \mathbf{\Pi} \cdot \text{Grad } \dot{\mathbf{v}} dv_0 = \oint_{\mathcal{A}_0} \overset{(0)}{\mathbf{t}} \cdot \dot{\mathbf{v}} da_0 + \int_{\mathcal{V}_0} \rho_0 \mathbf{f} \cdot \dot{\mathbf{v}} dv_0 \dots \dots \dots (3.19)$$

ただし、 $\text{Grad } \mathbf{S} \equiv \partial \mathbf{S} / \partial \mathbf{x}_{(I)}$ である。また、式 (3.19) では以下のような変換法則が用いられている。

$$\mathbf{n} da = \mathbf{J} \mathbf{F}^{-T} \mathbf{n}_0 da_0 \quad , \quad dv = J dv_0 \quad , \quad \rho_0 = J \rho \quad , \quad \mathbf{T} = \mathbf{J}^{-1} \mathbf{\Pi} \mathbf{F}^T \quad , \quad \overset{(0)}{\mathbf{t}} = \mathbf{T} \mathbf{n} \quad , \quad \overset{(0)}{\dot{\mathbf{t}}} = \mathbf{\Pi} \mathbf{n}_0 \dots \dots (3.20)$$

ただし、 $\mathbf{\Pi}$ は第 1 種 Piola-Kirchhoff 応力 (公称応力) である。さらに、 $\dot{\mathbf{v}} = \mathbf{0}$ の条件下式 (3.19) の両辺を物質時間微分すると次式を得る。

$$\int_{\mathcal{V}_0} \dot{\mathbf{\Pi}} \cdot \text{Grad } \dot{\mathbf{v}} dv_0 = \oint_{\mathcal{A}_0} \overset{(0)}{\dot{\mathbf{t}}} \cdot \dot{\mathbf{v}} da_0 + \int_{\mathcal{V}_0} \rho_0 \dot{\mathbf{f}} \cdot \dot{\mathbf{v}} dv_0 \dots \dots \dots (3.21)$$

この式は速度形仮想仕事の原理の Total Lagrange 形式と呼ばれ、初期配置の量によって記述されることから超弾性体の解析に多く用いられる。

3.4.3 有限変形理論に対する速度形仮想仕事の原理 (Updated Lagrange 形式)

式 (3.21) の Total Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理にはすでに物質時間微分が施されているため、ここでは、式 (3.21) を現配置表示にすることを考える。まず、式 (3.21) の左辺の被積分関数は

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{H}} \cdot \text{Grad} \dot{\mathbf{v}} &= \dot{\mathbf{H}} \mathbf{F}^T \cdot \text{grad} \dot{\mathbf{v}} \\ &= \dot{\mathbf{H}} \mathbf{F}^T \cdot \dot{\mathbf{L}} \\ &= J(\dot{\mathbf{T}} - \mathbf{T}\mathbf{L}^T + \mathbf{T}\text{tr}\mathbf{L}) \cdot \dot{\mathbf{L}} \dots \dots \dots (3.22)\end{aligned}$$

のように書ける。なお、 $\dot{\mathbf{H}} \mathbf{F}^T = J(\dot{\mathbf{T}} - \mathbf{T}\mathbf{L}^T + \mathbf{T}\text{tr}\mathbf{L})$ という関係を用いている [補足 C.3]。ここで、次式のような現配置の応力速度を定義しておく。

$$\dot{\boldsymbol{\pi}} \equiv \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{T}\mathbf{L}^T + \mathbf{T}\text{tr}\mathbf{L} \dots \dots \dots (3.23)$$

さらに、 $\overline{\mathbf{t}} da \equiv \overset{(0)}{\mathbf{t}} da_0$ と置き、式 (3.22) および式 (3.23) を用いれば、式 (3.21) を次式のように現配置表示することができる。

$$\int_{\mathcal{V}} \dot{\boldsymbol{\pi}} \cdot \dot{\mathbf{L}} dv = \oint_{\mathcal{A}} \overline{\mathbf{t}} \cdot \dot{\mathbf{v}} da + \int_{\mathcal{V}} \rho \dot{\mathbf{f}} \cdot \dot{\mathbf{v}} dv \dots \dots \dots (3.24)$$

式 (3.24) を見ると、右辺に $\overline{\mathbf{t}}$ という未知の量が残っている。そこで、速度形仮想仕事の原理は微小時間変化の下に成り立ち、微小な変形の蓄積によって変形状態を追跡することから、Updated Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理では参照配置を常に現配置に更新して用いるものとする。これにより、 $\overset{(0)}{\mathbf{t}} \rightarrow \overline{\mathbf{t}}$ および $J \rightarrow 1$ となり、式 (3.24) を

$$\int_{\mathcal{V}} \dot{\boldsymbol{\pi}} \cdot \dot{\mathbf{L}} dv = \oint_{\mathcal{A}} \overline{\mathbf{t}} \cdot \dot{\mathbf{v}} da + \int_{\mathcal{V}} \rho \dot{\mathbf{f}} \cdot \dot{\mathbf{v}} dv \dots \dots \dots (3.25)$$

のように完全に現配置の量のみによって表すことができる。したがって、式 (3.25) が Updated Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理であり、 $\dot{\boldsymbol{\pi}}$ は現配置の仮想速度こう配 $\dot{\mathbf{L}}$ とエネルギー共役の関係をなすことから Updated Lagrange 形式の第 1 種 Piola-Kirchhoff 応力速度とよばれる⁽⁸⁸⁾。ただし、式 (3.25) の $\dot{\boldsymbol{\pi}}$ に式 (3.23) の定義をそのまま適用しても応力速度項が物質時間微分となっており、Cauchy 応力の客観応力速度で表記された構成式を適用することができない。そこで、Cauchy 応力の Jaumann 速度 $\overset{\circ}{\mathbf{T}} = \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{W}\mathbf{T} + \mathbf{T}\mathbf{W}$ を用いて $\dot{\boldsymbol{\pi}}$ を表記すれば、

$$\begin{aligned}\dot{\boldsymbol{\pi}} &= \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{T}\mathbf{L}^T + \mathbf{T}\text{tr}\mathbf{L} \\ &= \overset{\circ}{\mathbf{T}} + \mathbf{W}\mathbf{T} - \mathbf{T}\mathbf{W} - \mathbf{T}(\mathbf{D} + \mathbf{W})^T + \mathbf{T}\text{tr}\mathbf{L} \\ &= \overset{\circ}{\mathbf{T}} + (\mathbf{L} - \mathbf{D})\mathbf{T} - \mathbf{T}\mathbf{W} - \mathbf{T}\mathbf{D} + \mathbf{T}\mathbf{W} + \mathbf{T}\text{tr}\mathbf{L} \\ &= \overset{\circ}{\mathbf{T}} - \mathbf{D}\mathbf{T} - \mathbf{T}\mathbf{D} + \mathbf{L}\mathbf{T} + \mathbf{T}\text{tr}\mathbf{L} \\ &= \overset{\circ}{\mathbf{T}} - \mathbf{P} : \mathbf{D} + \mathbf{L}\mathbf{T} + \mathbf{T}\text{tr}\mathbf{L} \dots \dots \dots (3.26)\end{aligned}$$

となる。ここで、

$$P_{ijkl} \equiv \delta_{il} T_{kj} + T_{ik} \delta_{jl} \quad (3.27)$$

である．式 (3.26) を式 (3.25) に代入するとともに，弾性変形は微小であり，非弾性変形中は体積不変である ($\text{tr} \mathbf{L} \approx 0$) と仮定すれば，

$$\int_{\mathcal{V}} \left[(\dot{\mathbf{T}} - \mathbf{P} : \mathbf{D}) \cdot \dot{\mathbf{D}} + (\mathbf{L}\mathbf{T}) \cdot \dot{\mathbf{L}} \right] dv = \oint_{\mathcal{A}} \overset{(i)}{\mathbf{t}} \cdot \dot{\mathbf{v}} da + \int_{\mathcal{V}} \rho \dot{\mathbf{f}} \cdot \dot{\mathbf{v}} dv \dots \dots \dots (3.28)$$

を得る．Updated Lanrange 形式の速度形仮想仕事の原理は式 (3.18) の微小変形理論に対する速度形仮想仕事の原理とは異なり，物質時間微分を施した後に参照配置を現配置としたため [図 3.2]，式 (3.28) を用いて変形状態を蓄積させることで大ひずみ域までの解析が実行可能である．加えて，式 (3.28) では応力速度項が Cauchy 応力の客観応力速度で記述されていることから，有限変形理論における弾塑性体や弾粘塑性体の解析に多く用いられる．本研究ではポリマを弾粘塑性体としてモデル化するため，式 (3.28) を本研究で用いる弱形式の釣合い方程式として採用する．

なお，Total Lagrange 形式および Updated Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理は図 3.2 に示したように基本的に等価な原理であり，応力変換等に伴う数値誤差を考慮しなければいずれの形式を用いた場合にも同様の解析結果を得ることが可能である⁽¹²⁴⁾．ただし，実際には各構成式の応力速度に適した形式の仮想仕事の原理を選択した方が解析プログラムの作成上の効率が優れるため，通常は各項で述べた構成式に対する解析にそれぞれの速度形仮想仕事の原理を適用する．

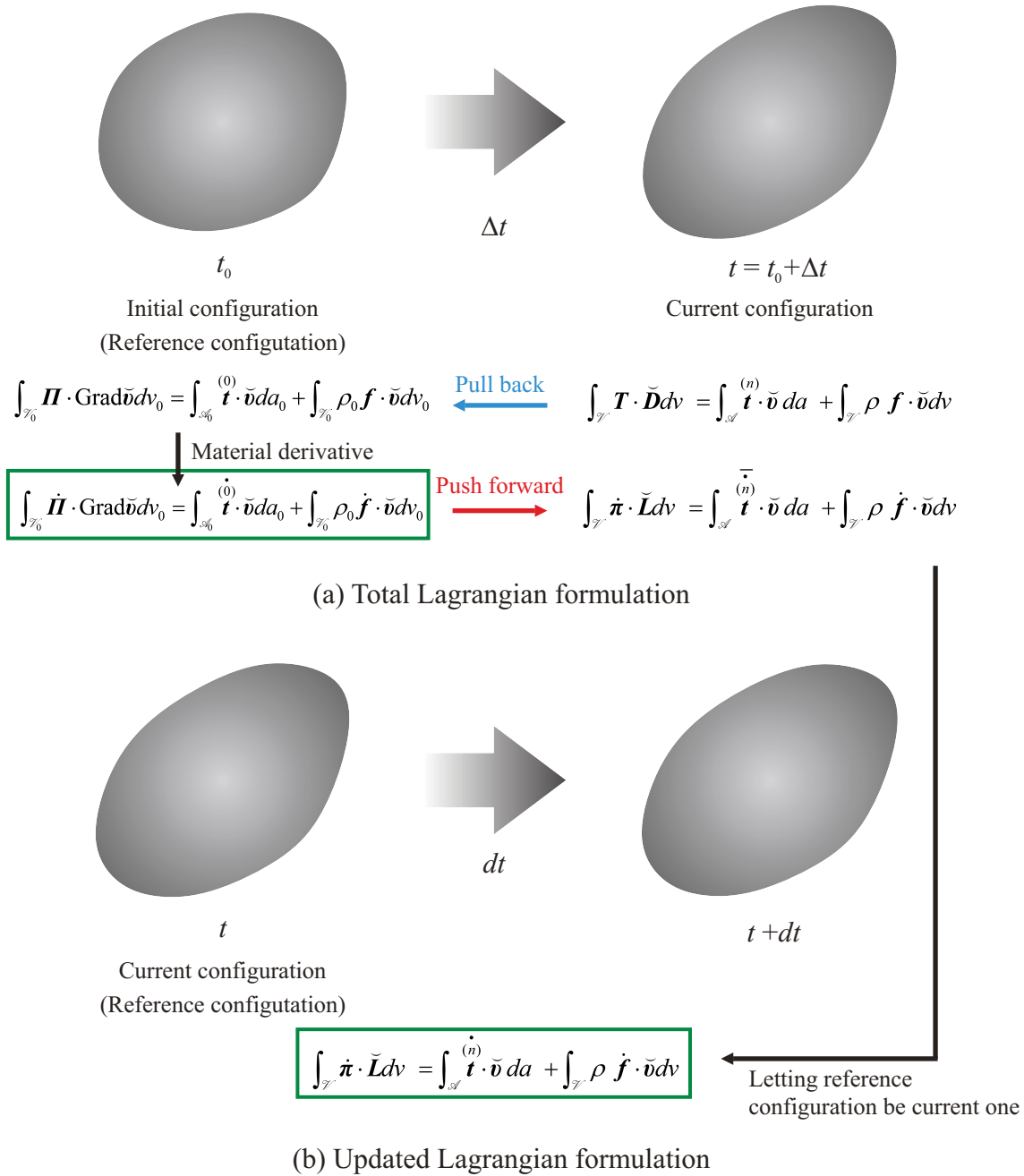


Fig. 3.2 Two-type Lagrangian formulation of principle of virtual work.

第4章

構成式の導出

本章では、まず、構成式が満たす熱力学的要件を定めるエントロピー不等式について述べる。次に、エントロピー不等式から外部供給熱の項を消去し、物体内部のみのエントロピー状態を記述する Clausius-Duhem の不等式を得る。さらに、村上ら⁽³⁵⁾⁽³⁶⁾による手法に従って、Clausius-Duhem の不等式を Green-Zerna⁽¹¹¹⁾の手法を介して保存部分と散逸部分に分離し、両者の熱力学的制限について論じる。その後、Clausius-Duhem の不等式の保存部分から本研究で用いる速度形弾性構成式を導出する。

次に、非晶相には分子鎖塑性モデルを、結晶相には結晶塑性論を適用することで両相の弾粘塑性構成式を導出する。その際、速度形弾性構成式における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2章で得た運動学的関係式によって書き表すことで、各相に対する結晶塑性形の弾粘塑性構成式を導出する。ただし、非晶相については損傷密度の影響を陽に考慮し、結晶相については損傷密度が零となるものとする。加えて、非晶相には多絡み点モデル⁽⁷⁸⁾モデルを適用し、結晶相にはペナルティ法⁽⁸¹⁾による鎖方向への非延伸拘束を導入することで、非晶・結晶の各相がもつ性質をより適切に表現可能なように拡張する。なお、損傷密度依存形に修正されている点を除けば、非晶相の分子鎖塑性モデルの定式化は灘⁽³⁾によって示された手法と同様である。ただし、三次元問題にも対応可能な分子鎖配向状態の可視化方法については本研究独自の手法である。一方、結晶塑性論を用いた結晶相のモデル化の手法については内田⁽⁸¹⁾と同様の手法を採用している。

また、非晶相単相からなる非晶性ポリマに対する解析を行う際には、本章で非晶相に対して構築したモデルをそのまま用いることができる。一方、結晶性ポリマの解析を行う際には、本章で構築したモデルが適用された非晶相および結晶相が混在した複合領域を解析対象として扱う必要がある。

4.1 構成式の熱力学的制限

4.1.1 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、次式のように定式化できる。

$$\int_V \rho \dot{\gamma}^{[i]} dv = \frac{D}{Dt} \int_V \rho \eta dv - \left\{ \oint_{\mathcal{A}} \frac{\mathbf{q}}{\theta} \cdot (-\mathbf{n}) da + \int_V \frac{\rho r}{\theta} dv \right\} \geq 0 \dots \dots \dots (4.1)$$

ここで、 $\dot{\gamma}^{[i]}$ 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(4.1)を局所化すると次式のようなエントロピー不等式を得る。

$$\rho \dot{\gamma}^{[i]} = \rho \dot{\eta} - \frac{\mathbf{g} \cdot \mathbf{q}}{\theta} + \frac{\text{div } \mathbf{q} - \rho r}{\theta} \geq 0 \dots \dots \dots (4.2)$$

4.1.2 Clausius-Duhem の不等式

エネルギー方程式 [式 (C.14)] を用いて式 (4.2) における供給熱の部分消去し、両辺に温度 ($\theta \geq 0$) を乗ずれば、次式のような Clausius-Duhem の不等式を得る.

$$\Phi = \rho \theta \dot{\eta} - \rho \dot{\hat{\varepsilon}} + \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - \mathbf{g} \cdot \mathbf{q} \geq 0 \dots\dots\dots (4.3)$$

ただし、 $\Phi \equiv \rho \theta \dot{\gamma}^{[d]}$ は散逸関数である. 式 (4.3) を J 倍して第2中間配置へ戻せば、次式のようなになる.

$$\tilde{\Phi} = \theta \dot{H} - \dot{\hat{U}} + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)} - \tilde{\mathbf{g}}_{(m)} \cdot \mathbf{q}_{(m)} \geq 0 \dots\dots\dots (4.4)$$

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} は内部変数の影響を含む内部エネルギー $\hat{U} \equiv \rho_0 \hat{\varepsilon}$ である.

ここで、熱力学的ポテンシャルを Helmholtz の自由エネルギーとし、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.

$$\hat{\Psi} = \hat{U} - \theta H \dots\dots\dots (4.5)$$

式 (4.5) を式 (4.4) に代入すれば、

$$\tilde{\Phi} = -(\dot{\hat{\Psi}} + H \dot{\theta}) + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)} - \tilde{\mathbf{g}}_{(m)} \cdot \mathbf{q}_{(m)} \geq 0 \dots\dots\dots (4.6)$$

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.

$$\bar{\Psi}^d \equiv \int_{\tau} \tilde{\Phi} dt \dots\dots\dots (4.7)$$

式 (4.7) より散逸関数は次式のように書ける.

$$\tilde{\Phi} = \dot{\bar{\Psi}} - \dot{\Psi} \equiv \dot{\bar{\Psi}}^d \geq 0 \dots\dots\dots (4.8)$$

式 (4.8) において、全自由エネルギー速度 $\dot{\bar{\Psi}}$ に式 (3.4) を代入したものと式 (4.6) を比較すれば次式のような関係式を得る.

$$\dot{\hat{\Psi}} = \dot{\Psi} - \tilde{\mathbf{M}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i - \tilde{Y} \dot{\omega} \dots\dots\dots (4.9)$$

上式 (4.9) は左辺が内部変数の陰表示、右辺が内部変数を陽表示した自由エネルギーである. 式 (4.9) を用いることによってこれまで陰表示となっていた内部変数を陽に表わすことが可能となる..

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 (4.9) を式 (4.6) に適用して次式を得る.

$$\tilde{\Phi} = -(\dot{\hat{\Psi}} + H \dot{\theta}) + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)} - \tilde{\mathbf{g}}_{(m)} \cdot \mathbf{q}_{(m)} + \tilde{\mathbf{M}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i + \tilde{Y} \dot{\omega} \geq 0 \dots\dots\dots (4.10)$$

さて、本研究で対象とするような粘塑性体あるいは弾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. したがって、応力が構成量、ひずみが引数のままであると式 (4.10) の $\mathbf{D}_{(m)}$ を弾塑性分解した際に、1つの応力が弾性ひずみおよび塑性ひずみの2つの独立変数によって決定するという矛盾が生じる. ゆえに、ひずみやひずみ速度を構成量に、応力や応

力速度をその引数とする必要がある．そこで，式 (4.10) の $\mathbf{D}_{(m)}$ を弾塑性分解するとともに，状態量としての Gibbs 関数 G を Legendre 変換

$$G \equiv \Psi - \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \mathbf{E}_{(m)}^e \dots \dots \dots (4.11)$$

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 (4.10) は次式のようになる．

$$\tilde{\Phi} = -(\dot{G} + H\dot{\theta}) - \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i - \tilde{\mathbf{g}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{q}}_{(m)} + \tilde{\mathbf{M}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i + \tilde{Y}\dot{\omega} \geq 0 \dots \dots \dots (4.12)$$

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，以下では $\mathbf{q}_{(m)}$ の項を無視する．

4.1.3 保存部分の熱力学的制限

式 (4.12) において，可逆部分で力と速度の関係を逆転させたため，非可逆部分である $\tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i$ および $\tilde{\mathbf{M}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i$ についても力と速度の関係を逆転させ，引数がそれぞれ $\tilde{\mathbf{T}}_{(m)}$ および $\tilde{\mathbf{M}}_{(m)}$ であると考えれば，式 (4.12) より G の引数となる可能性のあるものは次式のようになる．

$$G = G(\theta, \dot{\theta}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \omega, \dot{\omega}) \dots \dots \dots (4.13)$$

等存在の公理⁽¹²⁵⁾より，各構成量の引数も熱力学的ポテンシャル G とまったく同様に以下のように選ぶ．

$$\left. \begin{aligned} H &= H(\theta, \dot{\theta}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \omega, \dot{\omega}) \\ \mathbf{E}_{(m)}^e &= \mathbf{E}_{(m)}^e(\theta, \dot{\theta}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \omega, \dot{\omega}) \\ \mathbf{D}_{(m)}^i &= \mathbf{D}_{(m)}^i(\theta, \dot{\theta}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \omega, \dot{\omega}) \\ \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i &= \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i(\theta, \dot{\theta}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \omega, \dot{\omega}) \\ \tilde{Y} &= \tilde{Y}(\theta, \dot{\theta}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \omega, \dot{\omega}) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (4.14)$$

本研究では，熱力学に反することなく散逸部分の引数として温度 θ およびクレーズ密度 ω が導入されるよう，式 (4.14) の H および \tilde{Y} をその保存部分と散逸部分にそれぞれ次式のように分解する．

$$H(\theta, \dot{\theta}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \omega, \dot{\omega}) = H^c + H^d \quad (4.15)$$

$$\tilde{Y}(\theta, \dot{\theta}, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}, \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}, \omega, \dot{\omega}) = \tilde{Y}^c + \tilde{Y}^d \quad (4.16)$$

ここで， $()^c$ は保存部分を， $()^d$ は散逸部分を表す．なお，散逸部分の引数は元の量の引数と同様となるが，保存部分の引数については現時点で確定できず，後述のように Gibbs 関数の引数と同様に制限されることとなる．式 (4.15) および式 (4.16) を考慮に入れ，式 (4.13) に微分の鎖則を適用して式 (4.12) に代入することで次式を得る．

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi} &= - \left(H^c + \frac{\partial G}{\partial \theta} \right) \dot{\theta} - \left(\mathbf{E}_{(m)}^e + \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}} \right) \cdot \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)} + \left(\tilde{Y}^c - \frac{\partial G}{\partial \omega} \right) \cdot \dot{\omega} \\ &\quad - \left(\frac{\partial G}{\partial \dot{\theta}} \ddot{\theta} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)}} \cdot \ddot{\tilde{\mathbf{T}}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\tilde{\mathbf{M}}}_{(m)}} \cdot \ddot{\tilde{\mathbf{M}}}_{(m)} + \frac{\partial G}{\partial \dot{\omega}} \cdot \ddot{\omega} \right) \\ &\quad - H^d \dot{\theta} + \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i + \tilde{\mathbf{M}}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i + \tilde{Y}^d \cdot \dot{\omega} \geq 0 \dots \dots \dots (4.17) \end{aligned}$$

式(4.13)を考慮すれば、式(4.17)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(4.17)が常に成立するためには

$$\frac{\partial G}{\partial \theta} = 0, \quad \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{M}}_{(m)}} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial G}{\partial \dot{\omega}} = \mathbf{0} \dots \dots \dots (4.18)$$

でなければならない。したがって G の引数を

$$G = G(\theta, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \omega) \dots \dots \dots (4.19)$$

のように制限できる。このように本研究では Gibbs 関数の引数に通常の温度および応力に加え、損傷密度が導入されており、後に導出する弾性構成式が損傷密度に依存することが熱・力学的整合性をもって示されている。式(4.19)の結果を考慮すれば、保存量である H^c , $\mathbf{E}_{(m)}^c$ および \tilde{Y}^c の引数も以下のように制限される。

$$H^c = H^c(\theta, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \omega), \quad \mathbf{E}_{(m)}^c = \mathbf{E}_{(m)}^c(\theta, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \omega), \quad \tilde{Y}^c = \tilde{Y}^c(\theta, \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \omega) \dots \dots \dots (4.20)$$

したがって、式(4.17)の右辺第1項、第2項および第3項は各速度について線形となり、不等式(4.17)を満たすために次のような熱力学的関係式が得られる。

$$H^c = -\frac{\partial G}{\partial \theta}, \quad \mathbf{E}_{(m)}^c = -\frac{\partial G}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}}, \quad \tilde{Y}^c = \frac{\partial G}{\partial \omega} \dots \dots \dots (4.21)$$

4.1.4 散逸部分の熱力学的制限

式(4.18)および式(4.21)を考慮して保存部分を取り除けば、式(4.17)は次式のように散逸仕事率のみで表わされる。

$$\Phi = -J^{-1} H^d \dot{\theta} + \mathbf{T}_{(m)} \cdot \mathbf{D}_{(m)}^i + \mathbf{M}_{(m)} \cdot \dot{\mathbf{D}}_{(m)}^i + Y^d \dot{\omega} \geq 0 \dots \dots \dots (4.22)$$

なお、不等式(4.22)の両辺には J^{-1} が乗じられている。このように、散逸関数を表す式に $\dot{\theta}$ の項が残ることは、熱・力学的整合性をもって材料応答則の引数に温度を導入するにあたり重要な役割をなす [補足 D.1].

4.2 弾性構成式の導出

4.2.1 線形等方性弾性構成式の導出

本項では線形性を仮定した等方性弾性構成式を導出する。なお、本項における導出は全て擬似無損傷配置で行っていること、ならびに擬似無損傷配置での弾性構成式の等方性はクレーズ密度の等方性および損傷配置での弾性変形の等方性の双方の仮定の下に成り立つ点に注意されたい。まず、弾性ひずみの構成式を式(4.21)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⁽¹²⁶⁾より次の3個となる。

$$I_{T1} \equiv \text{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}, \quad I_{T2} \equiv \text{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}^2, \quad I_{T3} \equiv \text{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}^3 \dots \dots \dots (4.23)$$

ここで、ポリマ材料においても、金属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、弾性構成式は線形でなければならず、式(4.23)において I_{T3} は不要となる。この結果、式(4.19)の G の引数は次式のように不変量で置きかえることができる。

$$G = G(\theta, I_{T1}, I_{T2}, \omega) \dots \dots \dots (4.24)$$

式 (4.24) を式 (4.21)₂ に代入すれば

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{(m)}^e &= -\frac{\partial G}{\partial I_{T1}} \frac{\partial I_{T1}}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}} - \frac{\partial G}{\partial I_{T2}} \frac{\partial I_{T2}}{\partial \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}} \\ &= a_1 \mathbf{I} + 2a_2 \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \dots \dots \dots (4.25) \end{aligned}$$

となる. ここで係数 a_1 および a_2 は

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= a_1(\theta, I_{T1}, I_{T2}, \omega) \equiv -\frac{\partial G}{\partial I_{T1}} \\ a_2 &= a_2(\theta, I_{T1}, I_{T2}, \omega) \equiv -\frac{\partial G}{\partial I_{T2}} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (4.26)$$

である. 式 (4.26) 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 (4.25) は線形にならない. そこで, $\theta = \theta_0$, $\tilde{\mathbf{T}}_{(m)} = \mathbf{0}$ を弾性ひずみが零の基準状態とし, 式 (4.26) をこの基準状態の近傍で展開すると次式のようになる.

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= a_{10} + a_{11}(\theta - \theta_0) + a_{12} \operatorname{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} + a_{13} \operatorname{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}^2 \\ a_2 &= a_{20} + a_{21}(\theta - \theta_0) + a_{22} \operatorname{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} + a_{23} \operatorname{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}^2 \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (4.27)$$

ここで, a_{10} および a_{20} は定数である. また, 基準状態をクレーズ密度が零の状態としていないことに注意されたい. 式 (4.27) を式 (4.25) 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, 基準状態のときに $\mathbf{E}_{(m)}^e = \mathbf{0}$ とならねばならないことを考慮すれば, 式 (4.27) 中の各係数は

$$a_{10} = a_{13} = 0, \quad a_{21} = a_{22} = a_{23} = 0 \dots \dots \dots (4.28)$$

のようになる. 式 (4.28) を式 (4.27) に代入した結果を式 (4.25) に適用すれば次式を得る.

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{(m)}^e &= a_{11}(\theta - \theta_0) \mathbf{I} + a_{12}(\operatorname{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}) \mathbf{I} + 2a_{20} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \\ &= \alpha_h(\theta - \theta_0) \mathbf{I} - \frac{\nu}{E} (\operatorname{tr} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)}) \mathbf{I} + \frac{1 + \nu}{E} \tilde{\mathbf{T}}_{(m)} \dots \dots \dots (4.29) \end{aligned}$$

ここで, α_h は熱膨張係数, E および ν はそれぞれ擬似無損傷配置での縦弾性係数およびポアソン比である. さらに, $\tilde{\mathbf{T}}_{(m)} = \mathbf{J} \mathbf{T}_{(m)}$ を考慮すれば式 (4.29) はまだ非線形であることがわかる. そこで, 微小弾性変形の仮定および非弾性変形による体積変化を生じないという仮定から $\mathbf{J} = \det \mathbf{F} \approx 1$ とすることで式 (4.29) を完全に線形化できる. すなわち, 式 (4.29) における Kirchhoff 応力を Cauchy 応力に置きかえることができ,

$$\mathbf{E}_{(m)}^e = \alpha_h(\theta - \theta_0) \mathbf{I} - \frac{\nu}{E} (\operatorname{tr} \mathbf{T}_{(m)}) \mathbf{I} + \frac{1 + \nu}{E} \mathbf{T}_{(m)} \dots \dots \dots (4.30)$$

となり, 通常の熱弾性構成式が得られる. さらに, 弱形式の釣合い方程式に代入する際に便利なよう, 式 (4.30) を Cauchy 応力について解けば,

$$\begin{aligned} \mathbf{T}_{(m)} &= -\beta_h(\theta - \theta_0) \mathbf{I} + \lambda (\operatorname{tr} \mathbf{E}_{(m)}^e) \mathbf{I} + 2\mu \mathbf{E}_{(m)}^e \\ &= -\beta_h(\theta - \theta_0) \mathbf{I} + \mathbf{C}^e : \mathbf{E}_{(m)}^e \dots \dots \dots (4.31) \end{aligned}$$

が得られる. ここで, λ および μ は Lamé 定数, \mathbf{C}^e は 4 階の等方性弾性係数テンソルであり, その具体形および β_h は, 縦弾性係数 E , ポアソン比 ν および体積弾性係数 K を用いてそれぞれ次式のように与えられる.

$$\lambda = \frac{\nu E}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)}, \quad \mu = \frac{E}{2(1 + \nu)} \dots \dots \dots (4.32)$$

$$K = \lambda + \frac{2}{3}\mu, \quad \beta_h = 3K\alpha_h \dots \dots \dots (4.33)$$

$$C_{ijkl}^e \equiv \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + 2\mu \delta_{ik} \delta_{jl} \dots \dots \dots (4.34)$$

また、弾性変形速度 D^e の対称性を考慮すれば、式 (4.34) は次式のように書き換えられる。

$$C_{ijkl}^e \equiv \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu (\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}) \dots \dots \dots (4.35)$$

加えて、 C^e は次式のような対称性を有するため、その成分は 21 成分に制限される [補足 D.2].

$$C_{ijkl}^e = C_{jikl}^e = C_{ijlk}^e = C_{klij}^e \dots \dots \dots (4.36)$$

最後に、本研究では温度変化による熱変形を考慮しないため、式 (4.31) における温度依存項を無視すれば、

$$T_{(m)} = C^e : E_{(m)}^e \dots \dots \dots (4.37)$$

となり、第 2 中間配置における通常の弾性構成式が得られる。

4.2.2 損傷依存性速度形弾性構成式の導出

4.2.1 項で導出した等方性弾性弾性構成式は損傷密度の影響が陰表示となっており、縦弾性係数 E の値が一定とならない。しかしながら、実際の数値解析に構成式を適用する際には値の入手が可能である一定の縦弾性係数 E_0 を用いる方が都合が良い。また、非線形解析の弱形式の釣り合い方程式に代入する際には構成式の左辺を応力速度の形にする必要がある。そこで、本項では式 (4.37) に基づいて、損傷密度の影響を陽に記述した速度形の弾性構成式を導出する。まず、2.4 節で述べた擬似無損傷配置の縦弾性係数 E および損傷配置の縦弾性係数 E_0 の関係式 [式 (2.54)] を考慮すれば、式 (4.37) の擬似無損傷配置の弾性係数テンソル C^e についても損傷密度 ω を用いて次式のように表わすことができる。

$$C^e = (1 - \omega)C_0^e \dots \dots \dots (4.38)$$

ここで、 C_0^e は損傷配置における 4 階の等方性弾性係数テンソルであり、損傷配置の Lamé 定数 λ_0 および μ_0 を用いて、

$$C_{(0)ijkl}^e \equiv \lambda_0 \delta_{ij} \delta_{kl} + 2\mu_0 \delta_{ik} \delta_{jl} \dots \dots \dots (4.39)$$

のように定義される。式 (4.38) を式 (4.37) に代入することで、損傷密度の影響を陽に表記した弾性構成式が次式のように得られる。

$$T_{(m)} = (1 - \omega)C_0^e : E_{(m)}^e \dots \dots \dots (4.40)$$

ここで、式 (4.40) は擬似無損傷配置において損傷の影響を陽に記述した式であり、構成式の参照配置が損傷配置となったわけではないことに注意されたい。また、式 (4.40) に物質時間微分を施せば、

$$\begin{aligned} \dot{T}_{(m)} &= (1 - \omega)C_0^e : \dot{E}_{(m)}^e + (1 - \omega)C_0^e : E_{(m)}^e \\ &= (1 - \omega)C_0^e : \dot{E}_{(m)}^e - \dot{\omega}C_0^e : E_{(m)}^e \\ &= (1 - \omega)C_0^e : \dot{E}_{(m)}^e - \frac{\dot{\omega}}{1 - \omega}T_{(m)} \dots \dots \dots (4.41) \end{aligned}$$

を得る。さらに、式 (2.47) を考慮して式 (4.41) を現配置へと回転させれば、

$$\begin{aligned} \overset{\vee}{T} &= (1 - \omega)C_0^e : D^e - \frac{\dot{\omega}}{1 - \omega}T \\ &= C^e : D^e - \frac{\dot{\omega}}{1 - \omega}T \dots \dots \dots (4.42) \end{aligned}$$

となり、左辺が共回転速度で表記された現配置における損傷依存性速度形弾性構成式が得られる。

4.3 非晶相のモデル化

本節では、分子鎖塑性モデルに基づき非晶相の弾粘塑性構成式を導出する。その際、ポリマ内部の非晶質状態を表現するために、灘⁽⁷⁸⁾の手法に基づき多結晶体に対する拡張 Taylor モデル⁽⁷⁷⁾を本モデルに適用し、多絡み点モデルへ拡張する。さらに、多絡み点モデルに拡張した際の分子鎖配向状態を三次元解析においても可視化する手法を新たに提案する。なお、2.5.3 項で述べた分子鎖基底の発展式を用いて分子鎖基底ベクトルを更新することで非晶相における分子鎖塑性モデルでは通常の結晶塑性論と異なり、分子鎖すべり系の独立回転が許容されることになる。

4.3.1 結晶塑性論に基づく速度形弾粘塑性構成式の導出

損傷発展式を導入する非晶相においては損傷による応力への影響を評価するために、式(4.42)の損傷密度依存性速度形弾性構成式に基づいて弾粘塑性構成式を導出する。Hillの方法[補足D.3]に基づき、弾性構成式[式(4.42)]の弾性変形速度 D^e を非弾性変形速度 D^i を用いて次式のように書き換える。

$$\begin{aligned}\overset{\vee}{T} &= C^e : D^e - \frac{\dot{\omega}}{1-\omega} T \\ &= C^e : (D - D^i) - \frac{\dot{\omega}}{1-\omega} T \\ &= C^e : D - C^e : D^i - \frac{\dot{\omega}}{1-\omega} T \dots\dots\dots (4.43)\end{aligned}$$

さらに、2.5.2 項で得られた非弾性変形速度 D^i に関する運動学的関係式[式(2.78)]において、多くの実験事実からよく知られているように、 $\dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \ll \dot{\gamma}^{(\alpha)}$ であることを考慮して $\dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)}$ を無視したものを式(4.43)へ代入すれば次式のような弾粘塑性構成式が得られる。

$$\overset{\vee}{T} = C^e : D - C^e : \left(\sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_S^{(\alpha)} \right) - \frac{\dot{\omega}}{1-\omega} T \dots\dots\dots (4.44)$$

ただし、応力速度 $\overset{\vee}{T}$ は

$$\overset{\vee}{T} \equiv \dot{T} - W^* T + T W^* \dots\dots\dots (4.45)$$

にて定義される Mandel-Kratovichil 速度であり、またスピン W^* は式(2.79)より

$$\begin{aligned}W^* &= W - W^i \\ &= W - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_A^{(\alpha)} \dots\dots\dots (4.46)\end{aligned}$$

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

次に、Upatated Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理[式(3.28)]の応力速度へ代入可能とするために弾粘塑性構成式[式(4.44)]左辺における Cauchy 応力の Mandel-Kratovichil 速度 $\overset{\vee}{T}$ が Jaumann 速度 $\overset{\circ}{T}$ となるよう変形を行う。まず、Jaumann 速度 $\overset{\circ}{T}$ はその共回転スピンである連続体スピン W を用いて次式のように書ける。

$$\overset{\circ}{T} = \dot{T} - WT + TW \dots\dots\dots (4.47)$$

したがって、Mandel-Kratovich 速度 $\overset{\nabla}{T}$ および Jaumann 速度 $\overset{\circ}{T}$ の関係は非弾性スピン W^i を用いて次式のように表わすことができる。

$$\begin{aligned}\overset{\nabla}{T} &= \overset{\circ}{T} - W^* T + T W^* \\ &= \overset{\circ}{T} - (W - W^i) T + T (W - W^i) \\ &= \overset{\circ}{T} + (W^i T - T W^i) \dots \dots \dots (4.48)\end{aligned}$$

また、式 (4.48) における右辺の第 2 項、第 3 項は、非弾性スピンの式 (2.79) 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式のように示される。

$$W^i T - T W^i = \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \beta^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.49)$$

ただし、 $\beta^{(\alpha)}$ は次式で定義される。

$$\beta^{(\alpha)} \equiv P_A^{(\alpha)} T - T P_A^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.50)$$

式 (4.49) を式 (4.48) に用いると次式を得る。

$$\overset{\nabla}{T} = \overset{\circ}{T} + \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \beta^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.51)$$

式 (4.51) を式 (4.43) 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。

$$\begin{aligned}\overset{\circ}{T} &= C^e : D - C^e : \left(\sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_S^{(\alpha)} \right) - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \beta^{(\alpha)} - \frac{\dot{\omega}}{1-\omega} T \\ &= C^e : D - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} Q^{(\alpha)} - \frac{\dot{\omega}}{1-\omega} T \dots \dots \dots (4.52)\end{aligned}$$

ただし、 $Q^{(\alpha)}$ は次式で定義される。

$$Q^{(\alpha)} \equiv C^e : P_S^{(\alpha)} + \beta^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.53)$$

式 (4.52) 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 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ 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 (4.52) は Mandel-Kratovich 速度を共回転速度に選んだ式 (4.44) と等価な式である。以上のように、本理論の構成式は結晶塑性論に基づいているため、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用いる必要がない。本理論に用いる式は式 (4.52) の弾粘塑性構成式および $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ を計算する材料応答則のみであり、体系が非常に簡潔である。なお、非晶相に対する材料応答則としては 5 章で述べる Hasan-Boyce の非弾性応答則を採用する。

4.3.2 多絡み点モデルへの拡張

分子鎖塑性モデルにおける 8 鎖モデルの単位ブロックあたりの分子鎖の本数は 4 本であるため、同モデルをそのまま解析に適用した際には解析領域が極めて小さい場合を除き、各物質点における非晶性ポリマのランダムコイル構造を十分に近似できない。これを解決するためには 1 物質点に対して複数の 8 鎖モデル (絡み点) を配置することが必要となる。そこで、灘は金属の多結晶体における各結晶粒を非晶性ポリマの 8 鎖モデルの単位ブロックに相当させることで [図 4.1]、多結晶体の解析手法に基づいて次のような多絡み点モデルを提案している。結晶塑性論において 1 物質点に多数の結晶粒を配置した解析を実施する手法には、各結晶粒のひず

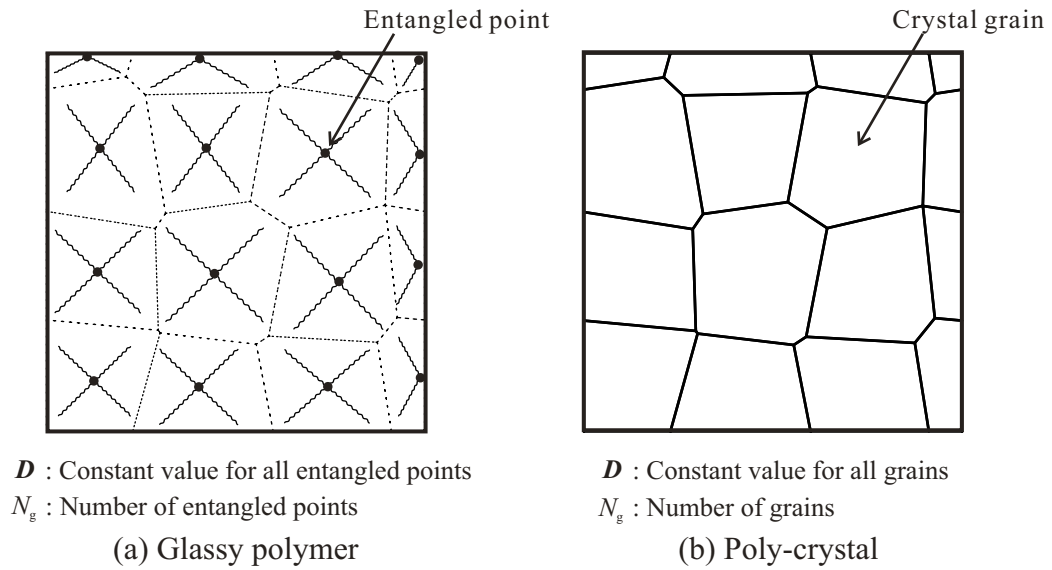


Fig. 4.1 Correspondence of poly-entangled point model and extended Taylor model.

みを一定とする仮定を設ける Taylor モデル⁽⁶³⁾, 応力を一定とする Sachs モデル⁽⁶⁴⁾ やセルフコンシステントモデル⁽⁶⁵⁾ が挙げられる. 灘はこれらのうち, Asaro-Needleman⁽⁷⁷⁾ によって, ひずみ速度依存の弾粘塑性仮定へと拡張された Taylor モデル⁽¹²²⁾ をそのまま非晶性ポリマの解析へ適用し, これを「多絡み点モデル」と名付けている.

多絡み点モデルにおいては, 巨視的な変形速度を \mathbf{D} , 各絡み点の変形速度を $\mathbf{D}^{[k]}$ とすると, ひずみ一定の仮定により $\mathbf{D} = \mathbf{D}^{[k]}$ が成り立つ. ここで, $()^{[k]}$ は第 k 番目の絡み点における量を表す. 一方, 応力は絡み点毎に異なっているため, 全ての 8 鎖モデルの単位ブロックの体積が等しいと仮定すると物質点の応力が単純に絡み点数についての平均値で次式のように与えられる.

$$\widehat{\mathbf{T}} = \frac{1}{N_g} \sum_{k=1}^{N_g} \mathbf{T}^{[k]} \dots\dots\dots (4.54)$$

ここで, $\widehat{\mathbf{T}}$ は A の絡み点数についての平均値を表し, N_g は 1 物質点あたりの絡み点数である. また, 物質点の Jaumann 応力速度 $\overset{\circ}{\widehat{\mathbf{T}}}$ も応力と同様に絡み点数についての平均値として次式で表される.

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{\widehat{\mathbf{T}}} &= \frac{1}{N_g} \sum_{k=1}^{N_g} \overset{\circ}{\mathbf{T}}^{[k]} \\ &= \overset{\circ}{\widehat{\mathbf{T}}} - \mathbf{W}\widehat{\mathbf{T}} + \widehat{\mathbf{T}}\mathbf{W} \dots\dots\dots (4.55) \end{aligned}$$

以上の考えに基づけば, 式 (4.52) で表される弾粘塑性構成式は第 k 番目の絡み点における構成式として次式のように表記の変更を受ける.

$$\overset{\circ}{\mathbf{T}}^{[k]} = \mathbf{C}^{e[k]} : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)[k]} \mathbf{Q}^{(\alpha)[k]} - \frac{\dot{\omega}^{[k]}}{1 - \omega^{[k]}} \mathbf{T}^{[k]} \dots\dots\dots (4.56)$$

$$\mathbf{C}^{e[k]} = (1 - \omega^{[k]}) \mathbf{C}_0^e \dots\dots\dots (4.57)$$

ここで, 前述のように全変形速度 \mathbf{D} は各絡み点において同値であり, また, 損傷配置における弾性係数も絡み点に依らないものとしている. 式 (4.56) 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の各物

質点における構成式が次式のように得られる。

$$\overset{\circ}{\mathbf{T}} = \left(\frac{1}{N_g} \sum_{k=1}^{N_g} \mathbf{C}^{e[k]} \right) : \mathbf{D} - \frac{1}{N_g} \sum_{k=1}^{N_g} \left(\sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)[k]} \boldsymbol{\Omega}^{(\alpha)[k]} + \frac{\dot{\omega}^{[k]}}{1 - \omega^{[k]}} \mathbf{T}^{[k]} \right) \dots \dots \dots (4.58)$$

なお、拡張 Taylor モデルは異方性の強い材料の平均化には適さないということが指摘されている。分子鎖塑性モデルにおいてもすべり系の独立回転により大変形時に強い異方性が発現するが、本モデルで生じる異方性は主応力方向への一方向異方性のみである。多結晶金属材料の各粒が同じ結晶方位を持っている場合には、実質単結晶の解析と同じとなるように配向後の本モデルに対する拡張 Taylor モデルの適用も大きな問題はないと考えられる。ただし、配向前の分子鎖塑性モデルの単位ブロックあたりの異方性の強さについては詳細な議論がなされておらず、その初期方位の与え方によっては比較的応力を高めに評価してしまう可能性がある。

4.3.3 配向強度・配向方向パラメータの計算

本項では、分子鎖配向状態の可視化方法について述べる。なお、平面すべり問題に対する分子鎖配向状態の可視化方法はすでに灘⁽³⁾によって提案されており、さらに、同手法を用いることによって、平面すべり問題を対象とした非晶性ポリマの解析における分子鎖配向の再現がなされている。しかしながら、灘によって提案された配向状態の可視化手法は分子鎖方位の一般角を用いているため、8鎖モデルのような三次元構造を有するすべり系に適用できない。本研究では、二次元解析のみではなく、三次元解析も実施するため分子鎖配向状態の可視化方法についても三次元問題に対応可能なよう拡張する。

単純に各物質点における全てのすべり系の分子鎖方位を FEM 解析結果に描画することは図が煩雑になるため、合理的な手法とは言えない。そこで、配向の強さを表すパラメータ θ および配向の方向を表すパラメータ $\bar{\mathbf{s}}$ の2つのパラメータを各物質点において求め、これらによって配向状態を表わす。本研究ではまず配向方向 $\bar{\mathbf{s}}$ を全ての分子鎖方位の平均方向として次式で表わす。

$$\bar{\mathbf{s}} = \frac{\sum_k \sum_{\alpha} \mathbf{s}^{(\alpha)[k]}}{\left\| \sum_k \sum_{\alpha} \mathbf{s}^{(\alpha)[k]} \right\|} \dots \dots \dots (4.59)$$

さらに、本研究では三次元問題における配向状態の可視化にも対応できるよう分子鎖方位の一般角ではなく、各分子鎖基底ベクトル $\mathbf{s}^{(\alpha)[k]}$ の平均方向 $\bar{\mathbf{s}}$ への射影の平均値、すなわち、

$$\hat{s} = \frac{1}{N_s N_g} \sum_k \sum_{\alpha} \bar{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{s}^{(\alpha)[k]} \dots \dots \dots (4.60)$$

を用いて配向強度パラメータ θ を定義する。ここで、 N_s は1絡み点あたりの分子鎖すべり系の個数である。式(4.60)の \hat{s} は全ての分子鎖が同じ方位を有する場合は1、最も等方的に配置された場合は最小値 \hat{s}_{\min} となる。したがって、配向強度パラメータを

$$\theta = \frac{\hat{s} - \hat{s}_{\min}}{1 - \hat{s}_{\min}} \dots \dots \dots (4.61)$$

のように定義すれば、最も異方性が強い場合には1、最も等方的な場合には零となるパラメータとして分子鎖の異方性の強さを表わすことが可能となる。

次に、式(4.61)に用いる \hat{s}_{\min} の計算方法について述べる。まず、分子鎖基底ベクトル $\mathbf{s}^{(\alpha)[k]}$ はその方位を反転させても元の方位と等価であることから、配向状態を計算する際には図4.2に示したような3つの半球、すなわち、(a) x_1 座標値が常に正の値の半球、(b) x_2 座標値が常に正の値の半球、(c) x_3 座標値が常に正の値の半球の内部に全ての分子鎖基底ベクトルが存在する場合に場合分けして考える必要がある。さらに、三次元空間に

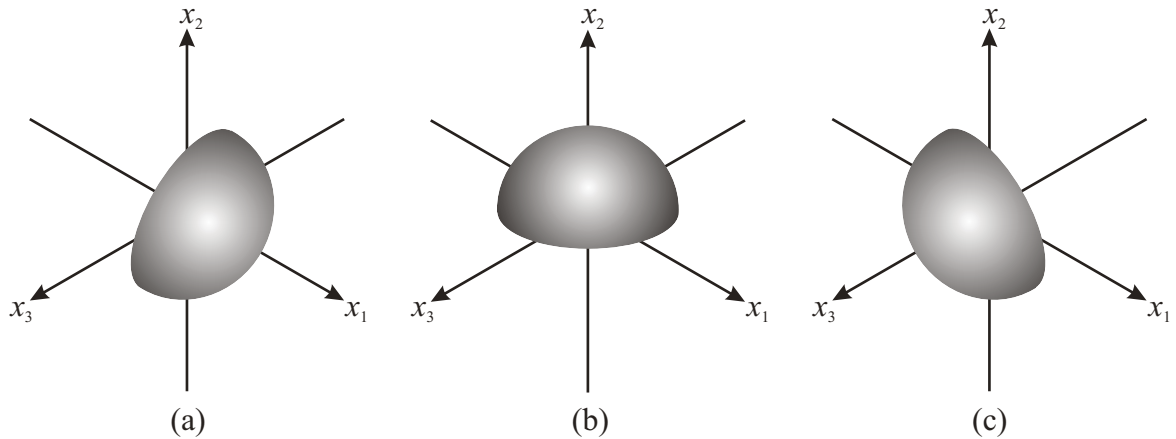


Fig. 4.2 Most isotropic state of base vectors in three-dimensional space.

において最も等方的な状態は球状に分子鎖が連続的に充填されている状態である。したがって、図 4.2 の各半球はそれぞれの場合の分子鎖基底ベクトルの最も等方的な配置を表わしている。いま、三次元極座標 [補足 D.4] を用いて図 4.2(b) について平均方向 \bar{s} を計算すれば、

$$\left\{ \bar{s} \right\} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (4.62)$$

が得られる。なお、式 (4.62) の結果は図 4.2(b) の半球が x_2 軸対称であることを考慮すれば計算を行わずとも容易に予測可能である。さらに、式 (4.62) の結果を用いて、分子鎖基底ベクトルの平均方向への射影の平均値を計算すると、

$$\hat{s} = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi \bar{s} \cdot \mathbf{s}(\phi_1, \phi_2) d\phi_2 d\phi_1 = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi (\sin \phi_1 \sin \phi_2) d\phi_2 d\phi_1 = \frac{4}{\pi^2} \dots\dots\dots (4.63)$$

となる。有限の個数の分子鎖基底ベクトルを三次元空間中に等方的に配置することは困難であるため、本研究ではあらゆる分子鎖数の場合において式 (4.63) で計算された \hat{s} を最も等方的な場合の \hat{s} 、すなわち \hat{s}_{\min} として採用する。以上より、実際の数値計算における配向強度パラメータ θ および配向方向パラメータ \bar{s} の計算アルゴリズムは下記のようなになる。

- (1) 計算対象の物質点における全ての $\mathbf{s}^{(\alpha)[k]}$ の値を一時保存する。
- (2) 一時保存してある全ての基底ベクトル $\mathbf{s}^{(\alpha)[k]}$ について x_1 成分の値を調べ、値が負であればその基底ベクトルの向きを反転させる、すなわち、 $\mathbf{s}^{(\alpha)[k]} \rightarrow -\mathbf{s}^{(\alpha)[k]}$ とする。
- (3) 式 (4.59) により配向方向 \bar{s} を計算する。
- (4) 式 (4.60) および式 (4.61) を用いて配向強度パラメータ θ を計算する。その際、 \hat{s}_{\min} には式 (4.63) で計算された値を用いる。
- (5) 計算した \bar{s} および θ をそれぞれ \bar{s}^{x_1} および θ^{x_1} として保存する。
- (6) (2)~(5) の作業を他の 2 つの半球領域についても実施する。すなわち、(2) および (5) の x_1 を x_2 および x_3 に置き換えて再度計算する。
- (7) 計算された θ^{x_i} のうち、最大のものを配向強度パラメータ θ として採用する。同時に、その時の \bar{s}^{x_i} を配向方向パラメータ \bar{s} として採用する。

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計算し、FEM 解析結果において配向強度の値に対応した長さおよび色を有する線素として表示すれば分子鎖配向状態が可視化される。

4.4 結晶相のモデル化

本節では、結晶塑性論に基づき結晶相の弾粘塑性構成式を導出する。また、結晶相は図 4.3 のように分子鎖が規則的に配列した構造をしており、分子鎖が配列した方向である分子鎖方向には非延伸という性質を有している。そこで、ペナルティ法を用いて分子鎖方向への非延伸性を近似的に導入する。以上の結晶相のモデル化については内田⁽⁸¹⁾と同様の手法を用いている。なお、結晶相は非晶相とは異なり、「分子鎖の折りたたみ構造が形成する面およびその垂直方向で生じるすべり」を塑性変形の素過程とするため、2.5.3 項で述べたように、すべり系間の角度を保つように基底ベクトルを更新する。

4.4.1 結晶塑性論に基づく速度形弾粘塑性構成式の導出

結晶相においては損傷が生じないため、4.2.2 項で導出した損傷密度依存性速度形弾性構成式 [式 (4.42)] において $\omega = 0$ とし、4.3.1 項と同様の手順により弾粘塑性構成式を導出する。すなわち、

$$\begin{aligned} \overset{\nabla}{T} &= C_0^e : D^e \\ &= C_0^e : D - C_0^e : D^i \\ &= C_0^e : D - C_0^e : \left(\sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_S^{(\alpha)} \right) \dots \dots \dots (4.64) \end{aligned}$$

となる。

さらに、4.3.1 項と同様に共回転速度を Mandel-Kratochvil 速度 $\overset{\nabla}{T}$ から Jaumann 速度 $\overset{\circ}{T}$ に置き換えて表せば、

$$\begin{aligned} \overset{\circ}{T} &= C_0^e : D - C_0^e : \left(\sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} P_S^{(\alpha)} \right) - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \beta^{(\alpha)} \\ &= C_0^e : D - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \Omega_0^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.65) \end{aligned}$$

となる。ただし、

$$\Omega_0^{(\alpha)} \equiv C_0^e : P_S^{(\alpha)} + \beta^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.66)$$

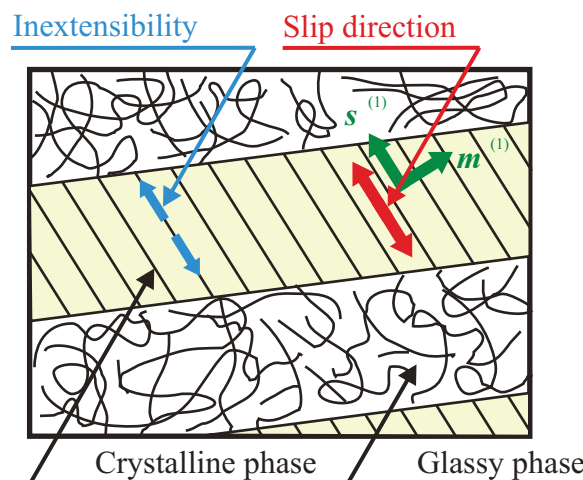


Fig. 4.3 Schematic diagram of inextensibility and chain slip in crystalline phase.

である．なお，本項では損傷密度を零とした弾性構成式に Hill の方法を適用することで弾粘塑性構成式を導出したが，非晶相の弾粘塑性構成式 [式 (4.52)] において $\omega = 0$ とすることによっても式 (4.65) と同様の結果が得られる．

4.4.2 分子鎖方向の非延伸拘束の導入

本項では，結晶相の分子鎖方向に非延伸という性質を表すために，分子鎖方向の変形速度 D_c を零とする拘束を弾粘塑性構成式 [式 (4.66)] に導入する．まず，分子鎖方向の変形速度 D_c を具体的に示すと次式のようになる．

$$\begin{aligned}
 D_c &= \frac{\partial \dot{u}_c}{\partial x_c} \\
 &= \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial x_c} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\dot{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{s}^{(1)}) \\
 &= \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial x_c} \cdot \left(\frac{\partial \dot{\mathbf{u}}}{\partial \mathbf{x}} \right) \mathbf{s}^{(1)} \\
 &= \mathbf{s}^{(1)} \cdot \mathbf{L} \mathbf{s}^{(1)} \\
 &= (\mathbf{s}^{(1)} \otimes \mathbf{s}^{(1)}) \cdot (\mathbf{D} + \mathbf{W}) \\
 &= \mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{D} \dots \dots \dots (4.67)
 \end{aligned}$$

ここで，図 4.4 のように， \dot{u}_c は $\dot{u}_c = \dot{\mathbf{u}} \cdot \mathbf{s}^{(1)}$ で与えられる分子鎖方向の変位速度， x_c は分子鎖方向の座標， $\mathbf{S}^{(1)}$ は分子鎖方向の基底ベクトル $\mathbf{s}^{(1)}$ 同士のテンソル積で表わされる 2 階のテンソルである．この拘束条件 $\mathbf{S}^{(1)} \cdot \mathbf{D} = 0$ を近似的に満足するようにペナルティ法を用いて導入すると，弾粘塑性構成式 [式 (4.65)] が結晶相を表す構成式として次式のように拡張される⁽⁸¹⁾．

$$\dot{\mathbf{T}} = (\mathbf{C}_0^e + \psi_0 \mathbf{S}^{(1)} \otimes \mathbf{S}^{(1)}) : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{\Omega}_0^{(\alpha)} \dots \dots \dots (4.68)$$

ここで， ψ_0 はペナルティ定数である．式 (4.68) では弾性係数 \mathbf{C}^e に分子鎖方向 $\mathbf{S}^{(1)} \otimes \mathbf{S}^{(1)}$ の剛性を上げ，分子鎖方向に非延伸という性質を近似的に表している．したがって，通常ペナルティ定数 ψ_0 には極めて大きな正の値を与える．さらに，非弾性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ は 5 章で紹介する金属に対する通常の結晶塑性論と同様の Pan-Rice 形のひずみ速度硬化則または Eyring 形のひずみ速度硬化則により求める．

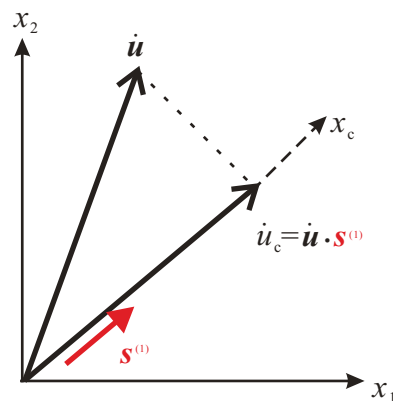


Fig. 4.4 Displacement rate of molecular chain direction in crystalline phase.

第 5 章

材料応答則

本章では、材料の粘塑性挙動を決定する各種の材料応答則について述べる。ここで、材料応答則とは材料固有の塑性ひずみ速度および応力の関係を記述したものであり、4章で導出した応力速度の式がテンソル形の構成式であったのに対し、材料応答則はスカラー形の塑性構成式であると見なすことができる。なお、本章の材料応答則は全て結晶塑性論に適する形、すなわち、非弾性せん断ひずみ速度および分解せん断応力の関係として記述しており、通常の巨視的塑性論で用いられる相当塑性ひずみ速度および相当応力の関係の表記とはなっていないことに注意されたい。本研究では、非晶性ポリマまたは結晶性ポリマの非晶相に対しては Hasan-Boyce による自由体積変化に基づく非弾性応答則⁽²²⁾を、結晶性ポリマの結晶相に対しては Pan-Rice 形ひずみ速度硬化則⁽¹¹³⁾または Eyring の反応速度論⁽⁷⁵⁾に基づくひずみ速度硬化則を用いる。Hasan-Boyce の非弾性応答則については、灘⁽³⁾が非晶性ポリマの解析において適用した式を部分的に拡張して用いる。一方、Pan-Rice 形硬化則ならびに Eyring 形硬化則については、それぞれの非弾性ひずみ速度の定式化に加え、その硬化則によってもたらされるひずみ速度依存性について言及する。その後、ひずみ速度依存性に加え、環境温度依存性も再現可能となる Eyring 形硬化則において Pan-Rice 形硬化則とほぼ同様の流れ応力およびひずみ速度依存性を再現するための材料定数の決定手法を数理的に導出する。さらに、非晶相と比較して、低いひずみ速度感度を有する結晶相において数値計算を安定に実行するために、各材料応答則を用いた際の、接線係数法の適用について述べる。

5.1 Hasan-Boyce の非弾性応答則

本節では、まず、灘によって分子鎖塑性すべり系の概念が導入された Hasan-Boyce の自由体積変化に基づく非弾性応答則⁽²²⁾を紹介する。次に、同応答則において非線形ひずみ回復をもたらす内部変数の発展式を拡張するとともに除荷時の非線形ひずみ回復のメカニズムについての説明を加える。さらに、引張りおよび圧縮解析における降伏応力の非対称性を再現可能とするため、非弾性応答則に新たに静水圧応力依存性を付与する。

5.1.1 非弾性せん断ひずみ速度の定式化

ポリマの非晶領域は分子鎖によって占められる領域および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る。Hasan-Boyce は非晶性ポリマの特徴である降伏前の非線形粘弾性挙動および降伏前のひずみ軟化を自由体積の変化から次のように説明している。まず、変形の初期では、高自由体積領域においてのみせん断変形が生じ、応力-ひずみ曲線は線形な弾性応答を示す [図 5.1(a)]。次に、自由体積領域が弾性ひずみの増加に伴い、急激に減少することで、低自由体積領域でしか変形が生じなくなり、非線形粘弾性挙動が発現する [図 5.1(b)]。さらに、変形が進行し、弾性ひずみエネルギーを蓄積できる領域が使い尽く

されると [図 5.1(c)], 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, 巨視的な降伏が生じる [図 5.1(d)]. その後, 非弾性変形の進行に伴い, 高自由体積領域がさらに増加することで応力-ひずみ曲線は軟化応答を示す [図 5.1(e)]. 以上の考えに基づき, 式 (1.8) の負方向反応まで考慮した Eyring の反応速度論へポリマ内部における局所せん断変形が可能な高自由体積領域の分布を活性化エネルギー ΔF_0 の確率密度関数 $\varphi^{(\alpha)}$ として導入することで, 非弾性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ が次式のように表わされる.

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_{0H} \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \int_0^\infty \varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) \left[\exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 - |\tau^{(\alpha)}/\tau_{0H}|\}}{k_B \theta}\right) - \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 + |\tau^{(\alpha)}/\tau_{0H}|\} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right] d\Delta F_0 \dots \dots \dots (5.1)$$

ここで, $\dot{\gamma}_{0H}$ は参照ひずみ速度, ΔF_0 はせん断変形に必要な活性化エネルギー, $\tau^{(\alpha)}$ は分解せん断応力, τ_{0H} はせん断応力の限界強度である. また, 式 (5.1) における $S^{(\alpha)}$ は分子鎖の接触摩擦を表す分子鎖摩擦エネルギーであり, 除荷時のひずみ回復現象に影響を及ぼす. その物理的な解釈ならびに発展式的具体形については 5.1.2 項において述べる. また, $\varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0)$ は活性化エネルギーの確率密度関数 [補足 E.1.1] であり, 次式で与えられる.

$$\varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) = \begin{cases} \frac{1}{2A_1^{(\alpha)}} \exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) & \left(a^{(\alpha)} \leq \Delta F_0 \leq a^{(\alpha)} + \frac{3\pi\alpha^{(\alpha)}}{4}\right) \\ \frac{1}{2A_2^{(\alpha)}} \exp\left(-\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) & \left(a^{(\alpha)} + \frac{3\pi\alpha^{(\alpha)}}{4} \leq \Delta F_0 \leq a^{(\alpha)} + \frac{3\pi\alpha^{(\alpha)}}{2}\right) \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases} \dots \dots \dots (5.2)$$

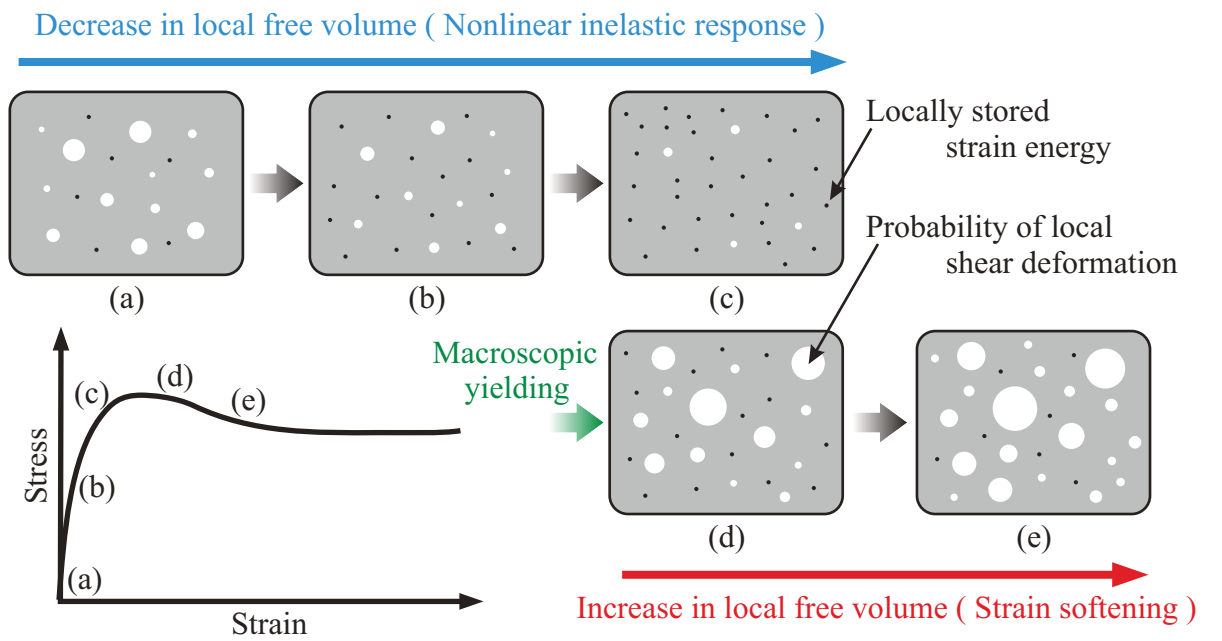


Fig. 5.1 Schematic diagram of stress-strain response corresponding to change in local shear deformation sites⁽³⁾.

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 [補足 E.1.4], その発展式は次式のように与えられる.

$$\dot{a}^{(\alpha)} = -(a^{(\alpha)} - a_{\text{eq}}) \exp[-\zeta \exp(-\zeta \gamma_a)] \sum_{\beta} \varpi^{(\beta)} \dots \dots \dots (5.3)$$

$$\dot{\alpha}^{(\alpha)} = -(\alpha^{(\alpha)} - \alpha_{\text{eq}}) \sum_{\beta} \varpi^{(\beta)} \dots \dots \dots (5.4)$$

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、 ζ は材料定数、 $\gamma_a = \sum_{\alpha} \gamma^{(\alpha)}$ であり、 $\varpi^{(\alpha)}$ は頻度因子 ϖ_0 を用いて次式のように表される.

$$\varpi^{(\alpha)} = \varpi_0 \int_0^{\infty} \varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) \left| \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 - |\tau^{(\alpha)}/\tau_{0H}|\}}{k_B \theta}\right) - \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 + |\tau^{(\alpha)}/\tau_{0H}|\} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right| d\Delta F_0 \dots \dots \dots (5.5)$$

式 (5.1) と式 (5.5) を比較すれば、次式の関係が得られる.

$$\varpi^{(\alpha)} = \frac{\varpi_0}{\dot{\gamma}_{0H}} |\dot{\gamma}^{(\alpha)}| \dots \dots \dots (5.6)$$

また、式 (5.2) における $A_1^{(\alpha)}$ 、 $A_2^{(\alpha)}$ および $a^{(\alpha)}$ はそれぞれ次式のように表される.

$$A_1^{(\alpha)} = \frac{\alpha^{(\alpha)}}{2} \left[1 + \sqrt{2} \exp\left\{\frac{3\pi}{4}\right\} \right] = e^{\pi} A_2^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.7)$$

$$a^{(\alpha)} = a^{(\alpha)} + \frac{\pi \alpha^{(\alpha)}}{2} \dots \dots \dots (5.8)$$

なお、Hasan ら⁽¹²⁷⁾ による陽電子消滅寿命測定法 (Position Annihilation Lifetime Spectroscopy) 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⁽²²⁾ 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本項のようなモデルを提案している.

5.1.2 分子鎖摩擦エネルギーの発展式

まず、Hasan-Boyce⁽²²⁾ によって提案された S の発展式を以下に示す.

$$\dot{S} = \beta_1 [1 + \beta_2 \exp(-\beta_3 \gamma^p)] \tau \dot{\gamma}^p - S \varpi \dots \dots \dots (5.9)$$

ここで、 β_1 、 β_2 、 β_3 は材料定数、 τ はせん断応力、 γ^p は本研究における $\gamma^{(\alpha)}$ に対応する非弾性ひずみ、 ϖ は式 (5.6) の $\varpi^{(\alpha)}$ に対応する反応が起きる頻度である. Hasan-Boyce によれば式 (5.9) における右辺第 1 項のせん断応力 τ および非弾性ひずみ速度 $\dot{\gamma}^p$ の積が非弾性仕事の増分を表しており、右辺第 2 項がその緩和を表している. 加えて、Hasan-Boyce は \dot{S} の蓄積量である S を局所貯蔵変形エネルギー (locally stored transformation energy) と名付けている. しかしながら、「貯蔵」という表現は弾性ひずみエネルギーのような保存量に対して用いられるのが一般的であり、非弾性仕事のように非可逆的な量に対する呼称には適さない. また、式 (5.9) は単にある局所領域における S の発展を表わしており、すべり系の概念が導入されていないため、そのままの形で分子鎖塑性モデルに適用することはできない. また、Hasan-Boyce により提案された (5.9) においても後述するメカニズムにより、除荷時の非線形ひずみ回復を再現すること自体は可能である. しかしながら、式 (5.9) を用いた解析では、大きいひずみ回復量を再現する際に負荷時において分子鎖摩擦エネルギーが過剰に発展してしまう可能性がある.

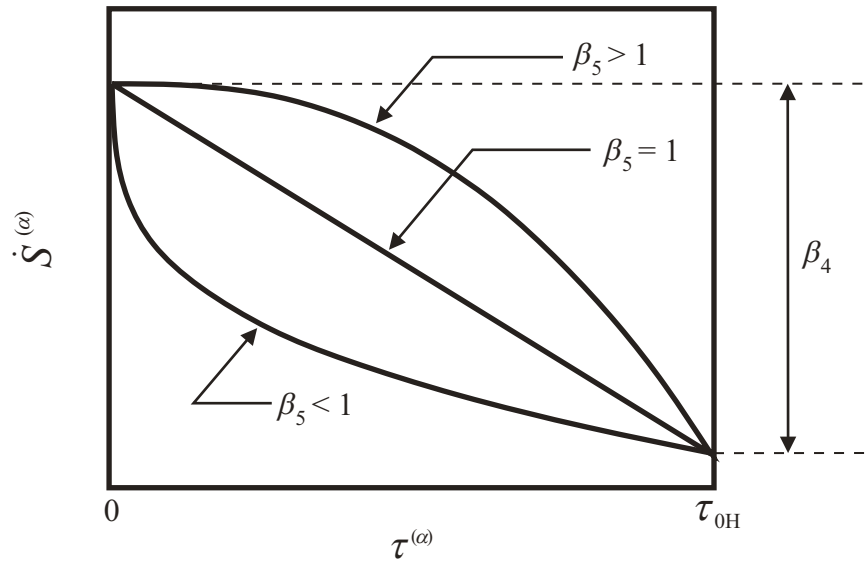


Fig. 5.2 Dependence of evolution of molecular-chain friction energy on resolved shear stress.

そこで、本研究では新たに、 $S^{(\alpha)}$ を分子鎖同士の接触摩擦により発生する散逸熱と解釈し、「分子鎖摩擦エネルギー」と呼ぶこととする。また、式 (5.9) をすべり系毎の量として表記し直す。さらに、右辺第 2 項に対してべき乗則を用いて応力依存性を新たに付与することで分子鎖摩擦エネルギーが負荷時の高応力下では発展しにくく、除荷時の低応力下では発展しやすいよう拡張する。以上より、本研究で新たに提案する分子鎖摩擦エネルギー $S^{(\alpha)}$ の発展式は次式のようになる。

$$\dot{S}^{(\alpha)} = \beta_1 [1 + \beta_2 \exp(-\beta_3 \gamma_a)] \sum_{\beta} |\tau^{(\beta)} \dot{\gamma}^{(\beta)}| - \beta_4 |\tau^{(\alpha)} / \tau_{OH}|^{\beta_5} S^{(\alpha)} \sum_{\beta} \varpi^{(\beta)} \dots \dots \dots (5.10)$$

ここで、 $\beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4$ および β_5 は材料定数である。式 (5.10) の右辺第 2 項における応力依存性の模式図を図 5.2 に示す。同図を見るとわかるように β_5 の値を変化させることにより、 $\dot{S}^{(\alpha)}$ の応力依存性が非線形的に変化する。これによって、除荷時の非線形ひずみ回復における応力経路をある程度制御可能になることが予想される。なお、 $\beta_4 = 1, \beta_5 = 0$ の時、 $\beta_4 |\tau^{(\alpha)} / \tau_{OH}|^{\beta_5} = 1$ となり、従来の応力依存性を有さないモデルに帰着する。

5.1.3 除荷時の粘弾性効果の表現

ポリマは金属材料と異なり除荷時に単純な弾性除荷ではなく粘弾性効果による非線形性を有する顕著なひずみ回復現象を生じる。本項では、式 (5.1) の分子鎖摩擦エネルギー $S^{(\alpha)}$ による除荷時の粘弾性効果の表現を図 5.3 を用いて説明する。なお、同図においては縦軸がポテンシャルエネルギーを、横軸が反応状態を表す。

非弾性応答則 [式 (5.1)] は 1.3.7 項で述べた Eyring の反応速度論に立脚しており、そのメカニズムはポテンシャル障壁の変化を用いて説明できる。まず、無負荷時には平衡状態にあり反応、すなわち変形が生じない [図 5.3(a)]. 次に、応力 $\tau^{(\alpha)}$ が加わると $\Delta F_0 \tau^{(\alpha)} / \tau_{OH}$ の分だけ反応に対するエネルギー障壁が正方向では減少し、負方向では増加するため、(i) から (ii) の変形がおきる [同図 (b)]. また、式 (5.1) 右辺第 2 項に $S^{(\alpha)}$ が存在することから逆方向のエネルギー障壁が点線から実線に分だけ増加していることに注意されたい。すなわち、 $S^{(\alpha)}$ は正方向の変形の障壁になる。この効果は負荷時には応力の影響が大きいので、図 5.2 に示した応力依存性も加わり、ほとんど発現しない。一方、除荷を開始すると応力の影響が徐々に減少するため $S^{(\alpha)}$ の効果が発現し、あるところで $\Delta F_0 \tau^{(\alpha)} / \tau_{OH}$ と $S^{(\alpha)}$ の影響が打ち消しあい変形が起こらなくなる [同図 (c)]. さらに

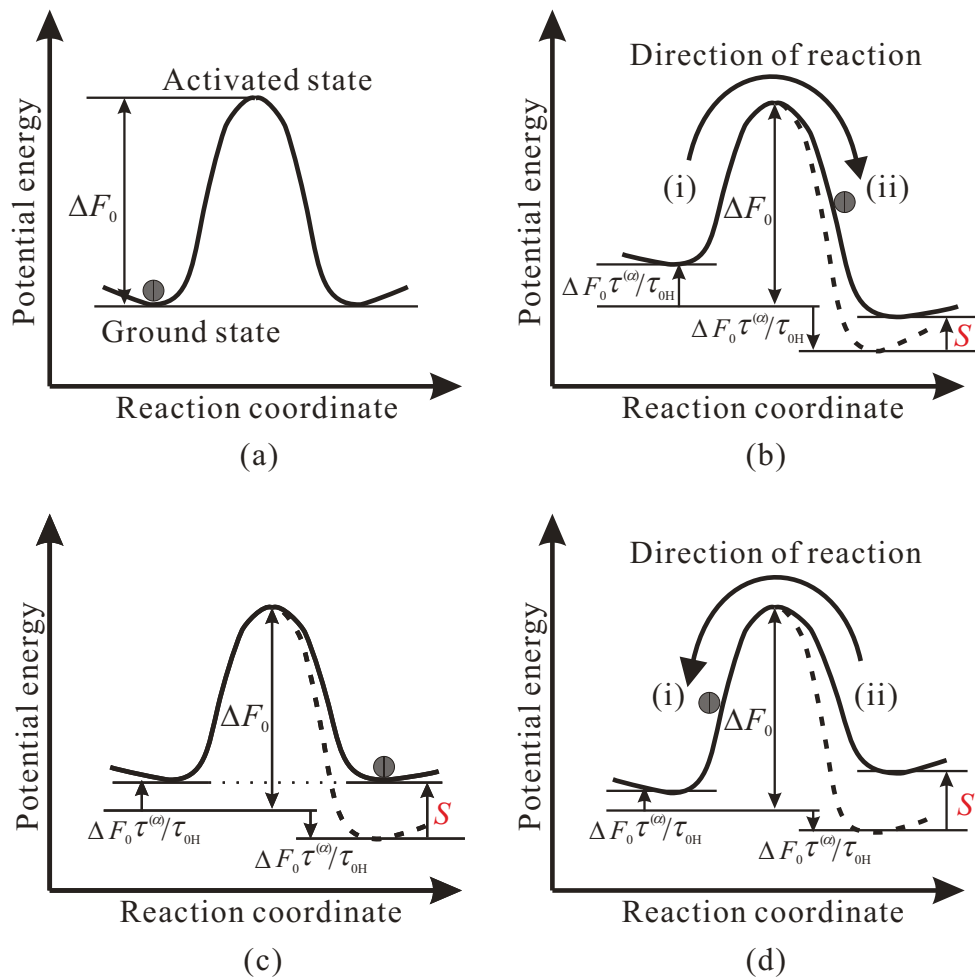


Fig. 5.3 Mechanism of nonlinear strain recovery due to change in potential energy barrier.

除荷を進めると応力の影響と比べて $S^{(\alpha)}$ の影響の方が大きくなり負方向の反応である (ii) から (i) の変形が起こる [同図 (d)]. このように除荷時には負荷時と逆符号の非弾性せん断ひずみ速度が生じることにより弾性的な線形ひずみ回復から非線形ひずみ回復への変化がもたらされる.

5.1.4 静水圧応力依存形への拡張

金属材料がほとんど静水圧応力による影響を受けず、その塑性変形が偏差応力のみによって駆動される一方、ポリマは顕著な静水圧応力依存性を有する。そこで、本項では図 1.7 に示したようなポリマの引張りおよび圧縮変形における降伏応力の非対称性を再現可能とするために、式 (5.1) の非弾性応答則を静水圧応力依存形へと拡張する。式 (1.12) に示した静水圧応力による影響を陽に考慮した Eyring の反応速度論に基づけば、せん断応力による影響と同様に、 $\sigma_{0H} = \Delta F_0 / \Delta v_m$ とおくことで非弾性応答則に静水圧応力依存性が次式のように導入される。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_{0H} \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \int_0^\infty \varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) \left[\exp\left(\frac{-\Delta F_0 \{1 - (|\tau^{(\alpha)}|/\tau_{0H}) + \sigma_m/\sigma_{0H}\}}{k_B \theta}\right) - \exp\left(\frac{-\Delta F_0 \{1 + (|\tau^{(\alpha)}|/\tau_{0H}) + \sigma_m/\sigma_{0H}\} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right] d\Delta F_0 \dots \quad (5.11)$$

ここで、 σ_m は静水圧応力、 σ_{0H} は静水圧応力の限界強度である。なお、分解せん断応力による影響を表す $(\tau^{(\alpha)}/\tau_{0H})$ と異なり、静水圧応力依存項 (σ_m/σ_{0H}) については引張りおよび圧縮変形時の寄与を逆転させるために絶対値を取らない。加えて、実際には式 (5.6) の関係を満たすために、非弾性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ だけでなく式 (5.5) についても式 (5.11) と同様に静水圧応力依存形に拡張していることに注意されたい。

式 (5.11) においては σ_{0H} の値が小さい場合に静水圧応力依存性が強くなり、大きい場合に静水圧応力依存性が弱まる。このように材料定数の値の大きさと静水圧応力依存性の強さが逆の関係となっていることに加え、静水圧応力依存性を無効とし、従来モデルに帰着させる場合には σ_{0H} に無限大の値を与える必要があるため、実際の数値解析に用いる際に式 (5.11) の形のままでは少々不便である。そこで、本研究では静水圧応力依存性を制御する係数として新たに $\alpha_p \equiv 1/\sigma_{0H}$ を導入することで、式 (5.11) を次式のように表記し直す。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_{0H} \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \int_0^\infty \varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) \left[\exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 - (|\tau^{(\alpha)}/\tau_{0H}| + \alpha_p\sigma_m)\}}{k_B \theta}\right) - \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 + (|\tau^{(\alpha)}/\tau_{0H}| + \alpha_p\sigma_m)\} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right] d\Delta F_0 \dots \dots \dots (5.12)$$

式 (5.12) においては α_p の値を大きくすれば静水圧応力依存性が強くなる一方、零とした場合には静水圧応力依存性を有さなくなり、式 (5.1) と一致する。したがって、本研究では式 (5.12) を最終的な非弾性応答則の形として採用する。

5.1.5 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 (5.12) には ΔF_0 に関する積分が含まれているため、そのまま解析コードに適用する場合には数値積分が必要となりコーディングが複雑化する。そこで、本項では積分記号を部分積分法によって外す作業を行う⁽³⁾。

式 (5.12) 右辺積分記号内第 1 項は次式のようになる。

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty \varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 - (|\tau^{(\alpha)}/\tau_{0H}| + \alpha_p\sigma_m)\}}{k_B \theta}\right) d\Delta F_0 \\ &= \frac{1}{2A_1^{(\alpha)}} \int_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 - (|\tau^{(\alpha)}/\tau_{0H}| + \alpha_p\sigma_m)\}}{k_B \theta}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \\ & \quad + \frac{1}{2A_2^{(\alpha)}} \int_{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/2} \exp\left(-\frac{\Delta F_0 - a'^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 - (|\tau^{(\alpha)}/\tau_{0H}| + \alpha_p\sigma_m)\}}{k_B \theta}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a'^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \\ &= \frac{I_1^{(\alpha)}}{2A_1^{(\alpha)}} + \frac{I_2^{(\alpha)}}{2A_2^{(\alpha)}} \dots \dots \dots (5.13) \end{aligned}$$

ただし、以下のようにおいた。

$$I_1^{(\alpha)} \equiv \int_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 - (|\tau^{(\alpha)}/\tau_{0H}| + \alpha_p\sigma_m)\}}{k_B \theta}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \quad (5.14)$$

$$I_2^{(\alpha)} \equiv \int_{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/2} \exp\left(-\frac{\Delta F_0 - a'^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 - (|\tau^{(\alpha)}/\tau_{0H}| + \alpha_p\sigma_m)\}}{k_B \theta}\right) \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a'^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \quad (5.15)$$

次に、 $\{1 - (|\tau^{(\alpha)}/\tau_{0H}| + \alpha_p\sigma_m)\} \equiv I_1^{(\alpha)}$ とおいて、 $I_1^{(\alpha)}$ 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,

$$\begin{aligned}
I_1^{(\alpha)} &= \left[\exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0 l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) (-\alpha^{(\alpha)}) \cos\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \right]_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \\
&\quad - \int_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \left(\frac{1}{\alpha^{(\alpha)}} - \frac{l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0 l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) (-\alpha^{(\alpha)}) \cos\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \\
&= -\alpha^{(\alpha)} \left[\exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0 l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \cos\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \right]_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \\
&\quad + \left(1 - \frac{l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \left[\exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0 l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \alpha^{(\alpha)} \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \right]_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \\
&\quad - \left(1 - \frac{l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right)^2 I_1^{(\alpha)} \dots\dots\dots (5.16)
\end{aligned}$$

式(5.16) 右辺の $I_1^{(\alpha)}$ の項を左辺へ移項し, 整理すると

$$\begin{aligned}
I_1^{(\alpha)} &= \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + \left[1 - l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)} / (k_B \theta) \right]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 - \frac{l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \exp\left(\frac{3\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4\} l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right. \\
&\quad \left. + \exp\left(\frac{-a^{(\alpha)} l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right] \dots\dots\dots (5.17)
\end{aligned}$$

同様に $I_2^{(\alpha)}$ についても計算すると

$$\begin{aligned}
I_2^{(\alpha)} &= \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + \left[1 + l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)} / (k_B \theta) \right]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 + \frac{l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \exp\left(-\frac{\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4\} l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right. \\
&\quad \left. + \exp(-\pi) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/2\} l_1^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right] \dots\dots\dots (5.18)
\end{aligned}$$

式(5.12) 右辺積分記号内第2項についても, 第1項と同様に,

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty \varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) \exp\left(\frac{-\Delta F_0 \{1 + (|\tau^{(\alpha)}|/\tau_{0H} + \alpha_p \sigma_m)\} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) d\Delta F_0 \\
&= \frac{I_3^{(\alpha)}}{2A_1^{(\alpha)}} + \frac{I_4^{(\alpha)}}{2A_2^{(\alpha)}} \dots\dots\dots (5.19)
\end{aligned}$$

次に, $\{1 + (|\tau^{(\alpha)}|/\tau_{0H} + \alpha_p \sigma_m)\} \equiv l_2^{(\alpha)}$ とおいて $I_3^{(\alpha)}$ および $I_4^{(\alpha)}$ を計算すると,

$$\begin{aligned}
I_3^{(\alpha)} &= \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + \left[1 - l_2^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)} / (k_B \theta) \right]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 - \frac{l_2^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \exp\left(\frac{3\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4\} l_2^{(\alpha)} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right. \\
&\quad \left. + \exp\left(\frac{-a^{(\alpha)} l_2^{(\alpha)} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right] \dots\dots\dots (5.20)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_4^{(\alpha)} &= \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + \left[1 + l_2^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)} / (k_B \theta) \right]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 + \frac{l_2^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \exp\left(-\frac{\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4\} l_2^{(\alpha)} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right. \\
&\quad \left. + \exp(-\pi) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/2\} l_2^{(\alpha)} + S^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right] \dots\dots\dots (5.21)
\end{aligned}$$

以上より, 式(5.12) は次式のように表される.

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_{0H} \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \left(\frac{I_1^{(\alpha)}}{2A_1^{(\alpha)}} + \frac{I_2^{(\alpha)}}{2A_2^{(\alpha)}} - \frac{I_3^{(\alpha)}}{2A_1^{(\alpha)}} - \frac{I_4^{(\alpha)}}{2A_2^{(\alpha)}} \right) \dots\dots\dots (5.22)$$

5.2 Pan-Rice 形ひずみ速度硬化則

5.2.1 せん断ひずみ速度の定式化

Pan-Rice 形ひずみ速度硬化則⁽¹¹³⁾においては次式のようなべき乗則で非弾性せん断ひずみ速度が算出される。

$$\begin{aligned}\dot{\gamma}^{(\alpha)} &= \dot{\gamma}_{0P} \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{\frac{1}{m}-1} \\ &= \dot{\gamma}_{0P} \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{\frac{1}{m}} \dots\dots\dots (5.23)\end{aligned}$$

ここで、 $\dot{\gamma}_{0P}$ は参照ひずみ速度、 $\tau^{(\alpha)}$ は分解せん断応力、 $g^{(\alpha)}$ は流れ応力、 m はひずみ速度感度指数である。

また、本研究では結晶相の流れ応力 $g^{(\alpha)}$ はすべり系ごとに異なる定数として与えるため、発展式は存在しない。すなわち、

$$\dot{g}^{(\alpha)} = 0 \dots\dots\dots (5.24)$$

とする。この点が通常の金属結晶に結晶塑性論を用いた場合との大きな相違点である。

5.2.2 ひずみ速度依存性の検討

本項では Pan-Rice 形ひずみ速度硬化則によってもたらされる応力-ひずみ応答のひずみ速度依存性について説明する。なお、本項における検討では簡単化のため、分解せん断応力は常に正の値を取り、単すべり問題を想定することですべり系番号を表記しないものとする。すなわち、式 (5.23) を次式のように表記する。

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_{0P} \left(\frac{\tau}{g} \right)^{\frac{1}{m}} \dots\dots\dots (5.25)$$

式 (5.25) を分解せん断応力について解けば、

$$\tau = g \left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_{0P}} \right)^m \dots\dots\dots (5.26)$$

となる。さらに、縦軸に分解せん断応力、横軸にせん断ひずみ速度をとり、式 (5.26) を用いて両者の関係を図示すれば図 5.4 のようになる。なお、同図においては $\dot{\gamma}_{0P} = 1.00 \text{ s}^{-1}$ 、 $g = 10.0 \text{ MPa}$ としている。図 5.4(a) から Pan-Rice 形硬化則を用いた場合にはひずみ速度の対数的な増加に対して応力が非線形に増加することがわかる。すなわち、ひずみ速度を対数的に増加させた場合に応力-ひずみ曲線における流れ応力の増加幅が一定とならないことが予測される。ただし、 m が小さい場合には、比較的線形に近い挙動となっており、応力の増加幅は大きく変化しないものと予想される。一方、図 5.4(b) を見ると、ひずみ速度の対数的な増加に対して応力の対数目盛上での変化は線形となることが確認できる。このような片対数線図および両対数線図上での応力挙動の相違はそれぞれ、 $\partial\tau/\partial\ln\dot{\gamma}$ および $\partial\ln\tau/\partial\ln\dot{\gamma}$ を計算することによって説明可能である。すなわち、

$$\frac{\partial\tau}{\partial\ln\dot{\gamma}} = \frac{\partial\dot{\gamma}}{\partial\ln\dot{\gamma}} \frac{\partial\tau}{\partial\dot{\gamma}} = \dot{\gamma} \frac{\partial}{\partial\dot{\gamma}} \left[g \left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_{0P}} \right)^m \right] = m\tau \dots\dots\dots (5.27)$$

$$\frac{\partial\ln\tau}{\partial\ln\dot{\gamma}} = \frac{\partial\tau}{\partial\ln\dot{\gamma}} \frac{\partial\ln\tau}{\partial\tau} = m\tau \frac{1}{\tau} = m \dots\dots\dots (5.28)$$

であり、図 5.4(a) での接線こう配に相当する式 (5.27) の計算結果は τ という変数を含むため、応力は非線形に増加する。一方、同図 (b) での傾きに相当する式 (5.28) の計算結果は定数 m となるため、応力は線形増加となる。なお、通常、材料のひずみ速度感度は $\partial\ln\tau/\partial\ln\dot{\gamma}$ によって定義されるため、Pan-Rice 形硬化則においてはひずみ速度感度が単一の定数である m によって与えられると言える。

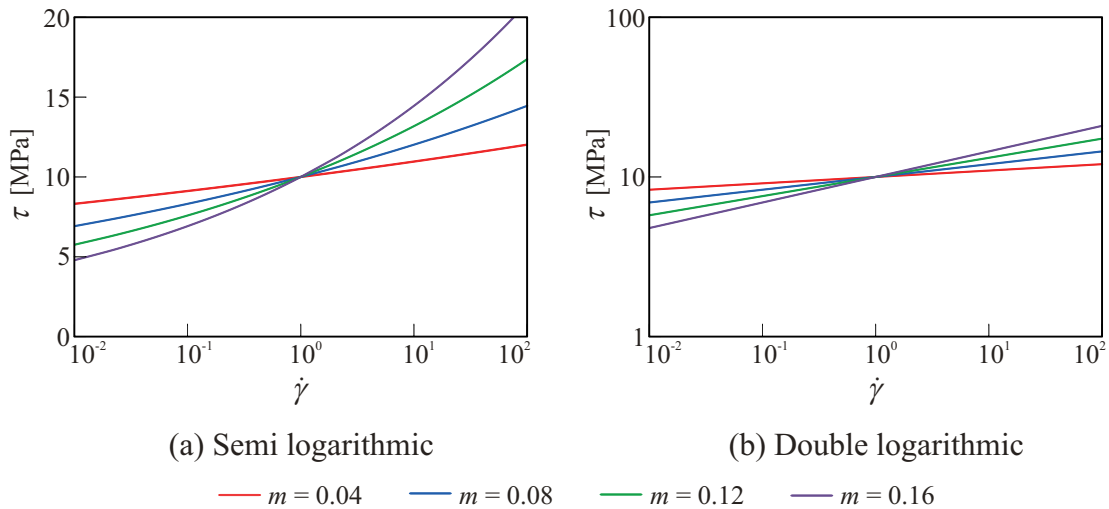


Fig. 5.4 Change in resolved shear stress with respect to increasing in inelastic shear strain rate obtained by Pan-Rice strain rate hardening law.

5.2.3 接線係数法の適用 (応力積分の陰解法)

速度形弾粘塑性構成式 [式 (4.68)] を速度形仮想仕事の原理 [式 (3.28)] に代入することにより場の支配方程式が導出される。しかしながら、式 (4.68) の構成式をそのまま用いた場合には応力積分が完全に陽的に行われるため、時間増分の取り方によっては計算が不安定化する恐れがある。したがって、本項では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⁽¹²⁸⁾による補間を行う。

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。

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = \gamma^{(\alpha)}(t + \Delta t) - \gamma^{(\alpha)}(t) \dots\dots\dots (5.29)$$

ここで、 Δt は時間増分を示す。式 (5.29) を Δt 間の線形補間を用いて次式のように近似する⁽¹²⁸⁾。

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = \Delta t [(1 - \vartheta)\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \vartheta\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t + \Delta t)] \dots\dots\dots (5.30)$$

ここで、 ϑ は $0 \leq \vartheta \leq 1$ の係数であり、 $\vartheta = 0$ のとき Euler 陽解法、 $\vartheta = 1/2$ のとき Crank-Nickolson 法、 $\vartheta = 1$ のとき完全に陰的な積分法になる。なお、9 章で実施する解析においては全て $\vartheta = 1$ として用いる。時刻 $t + \Delta t$ におけるせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t + \Delta t)$ を時刻 t において Taylor 展開し、1 次の項まで表記すれば

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t + \Delta t) &= \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}}\right)_t \Delta\tau^{(\alpha)} + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial g^{(\alpha)}}\right)_t \Delta g^{(\alpha)} \\ &= \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}}\right)_t \dot{\tau}^{(\alpha)} \Delta t + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial g^{(\alpha)}}\right)_t \dot{g}^{(\alpha)} \Delta t \dots\dots\dots (5.31) \end{aligned}$$

となる。ここで、 $\Delta\tau^{(\alpha)} = \dot{\tau}^{(\alpha)} \Delta t$ および $\Delta g^{(\alpha)} = \dot{g}^{(\alpha)} \Delta t$ という関係を用いている。式 (5.31) を式 (5.30) に代入することにより、

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = \Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \Delta t \vartheta \left[\left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}}\right)_t \dot{\tau}^{(\alpha)} \Delta t + \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial g^{(\alpha)}}\right)_t \dot{g}^{(\alpha)} \Delta t \right] \dots\dots\dots (5.32)$$

を得る. ここで, $\tau^{(\alpha)} = \mathbf{T} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)}$ の両辺を物質時間微分して, 結晶相の弾粘塑性構成式 (4.64) を代入すると

$$\begin{aligned}\dot{\tau}^{(\alpha)} &= \overset{\circ}{\mathbf{T}} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \\ &= \left\{ \mathbf{C}_0^e : \mathbf{D} - \mathbf{C}_0^e : \mathbf{D}^i \right\} \cdot \mathbf{P}_S^{(\alpha)} \\ &= \mathbf{Y}^{(\alpha)} \cdot \left(\mathbf{D} - \sum_{\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \mathbf{P}_S^{(\beta)} \right) \dots \dots \dots (5.33)\end{aligned}$$

ただし, $\mathbf{Y}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{C}_0^e : \mathbf{P}_S^{(\alpha)}$, $\mathbf{D}^i = \sum_{\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \mathbf{P}_S^{(\beta)}$ である. そして式 (5.33) および式 (5.24) を式 (5.32) に代入すれば以下のような式が得られる.

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = \Delta t \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \Delta t \vartheta \left[\left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t \mathbf{Y}^{(\alpha)} \cdot \left(\mathbf{D} - \sum_{\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)} \mathbf{P}_S^{(\beta)} \right) \Delta t \right] \dots \dots \dots (5.34)$$

ここで, $\dot{\gamma}^{(\alpha)} \Delta t = \Delta\gamma^{(\alpha)}$ および $\Delta\gamma^{(\alpha)} = \sum_{\beta} \delta_{\alpha\beta} \Delta\gamma^{(\beta)}$ を考慮して, $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ に関する項 (ここでは式 (5.34) 右辺第 3 項) を左辺へ移項すると,

$$\sum_{\beta} N_{\alpha\beta} \Delta\gamma^{(\beta)} = \Delta t \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t) + \mathbf{Z}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{D} \right] \dots \dots \dots (5.35)$$

となる. ただし,

$$N_{\alpha\beta} \equiv \delta_{\alpha\beta} + \Delta t \vartheta \left[\left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t \mathbf{Y}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{P}_S^{(\beta)} \right] \dots \dots \dots (5.36)$$

$$\mathbf{Z}^{(\alpha)} \equiv \Delta t \vartheta \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t \mathbf{Y}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.37)$$

とおいた.

次に, 式 (5.35) 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,

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} \equiv \sum_{\beta} M_{\alpha\beta} \dot{\gamma}^{(\beta)}(t) \dots \dots \dots (5.38)$$

$$\mathbf{Y}^{(\alpha)} \equiv \sum_{\beta} M_{\alpha\beta} \mathbf{Z}^{(\beta)} \dots \dots \dots (5.39)$$

とおくと, 式 (5.35) は以下のように表すことができる.

$$\Delta\gamma^{(\alpha)} = \Delta t (\dot{\gamma}^{(\alpha)} + \mathbf{Y}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{D}) \dots \dots \dots (5.40)$$

式 (5.40) の両辺を時間増分 Δt で除して $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ を求め, 結晶相に対する弾粘塑性構成式 (4.65) に代入すれば, 次式のような接線係数表示の構成式が得られる.

$$\begin{aligned}\overset{\circ}{\mathbf{T}} &= \mathbf{C}_0^e : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\Omega}_0^{(\alpha)} \\ &= \mathbf{C}_0^e : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\Omega}_0^{(\alpha)} - \sum_{\alpha} (\mathbf{Y}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{D}) \boldsymbol{\Omega}_0^{(\alpha)} \\ &= \mathbf{C}_0^e : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\Omega}_0^{(\alpha)} - \sum_{\alpha} (\boldsymbol{\Omega}_0^{(\alpha)} \otimes \mathbf{Y}^{(\alpha)}) : \mathbf{D} \\ &= \mathbf{C}^{\text{tan}} : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\Omega}_0^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.41)\end{aligned}$$

ここで、係数 \mathbf{C}^{tan} は次式で表される.

$$\mathbf{C}^{\text{tan}} \equiv \mathbf{C}_0^{\text{c}} - \sum_{\alpha} (\boldsymbol{\Omega}_0^{(\alpha)} \otimes \boldsymbol{\Upsilon}^{(\alpha)}) \dots \dots \dots (5.42)$$

以上の処理により、元々の構成式が有していた強い非線形性ができるかぎり \mathbf{D} で括られ、式 (5.41) の右辺第 1 項に含まれる形となった. これにより、実際の有限要素法を解く際の見かけの外力が減少し、通常より時間ステップを大きめにとっても安定的に計算を実行することが可能となる. なお、 $\boldsymbol{\Omega}_0^{(\alpha)}$ および $\boldsymbol{\Upsilon}^{(\alpha)}$ はそれぞれ対称テンソルであるが、 $\boldsymbol{\Omega}_0^{(\alpha)} \neq \boldsymbol{\Upsilon}^{(\alpha)}$ であるため接線係数法を適用した \mathbf{C}^{tan} は対称性を失う. すなわち、 $\mathbf{C}_{ijkl}^{\text{tan}} = \mathbf{C}_{jikl}^{\text{tan}} \neq \mathbf{C}_{klij}^{\text{tan}}$ となる. したがって、接線係数法を適用した FEM 解析を実施する場合には、剛性マトリックスが非対称となるため、非対称ソルバーを用いる必要がある.

最後に 4.4.2 項のペナルティ法により、分子鎖方向への非延伸拘束を式 (5.41) に導入すれば、結晶相に対する接線係数表示の弾粘塑性構成式が次式のように得られる.

$$\overset{\circ}{\mathbf{T}} = (\mathbf{C}^{\text{tan}} + \psi_0 \mathbf{S}^{(1)} \otimes \mathbf{S}^{(1)}) : \mathbf{D} - \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\Omega}_0^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.43)$$

ただし、式 (5.43) はペナルティ法導入後の弾粘塑性構成式 (4.68) に対して接線係数法を適用したものとは等価な式ではないことに注意されたい.

なお、式 (5.36) および式 (5.37) の偏微分の計算は次式のようになる.

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t &= \text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \frac{\dot{\gamma}_{0P}}{m\tau^{(\alpha)}} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{g^{(\alpha)}} \right|^{\frac{1}{m}} \\ &= \frac{\dot{\gamma}^{(\alpha)}(t)}{m\tau^{(\alpha)}} \dots \dots \dots (5.44) \end{aligned}$$

5.3 Eyring 形ひずみ速度硬化則

5.3.1 せん断ひずみ速度の定式化

正方向反応のみを考慮した Eyring の反応速度論⁽⁷⁵⁾ に基づいて非弾性せん断ひずみ速度を記述すれば、

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}_{0E} \text{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \exp\left(\frac{-\Delta F_0 \{1 - |\tau^{(\alpha)} / \tau_{0E}^{(\alpha)}|\}}{k_B \theta}\right) \dots \dots \dots (5.45)$$

となる. ここで、 $\dot{\gamma}_{0E}$ は参照ひずみ速度、 $\tau_{0E}^{(\alpha)}$ はせん断強度、 ΔF_0 はせん断変形に必要な活性化エネルギーである. なお、式 (5.12) の Hasan-Boyce の非弾性応答則と異なり、ここではせん断強度 $\tau_{0E}^{(\alpha)}$ をすべり系毎の量として定義していることに加え、金属結晶に近い変形特性を有する結晶相への適用を前提とすることから静水圧応力依存性を導入していないことに注意されたい. 本研究では $\tau_{0E}^{(\alpha)}$ を式 (5.23) の Pan-Rice 形ひずみ速度硬化則における流れ応力 $g^{(\alpha)}$ を用いて次式のように表わす.

$$\tau_{0E}^{(\alpha)} = \kappa g^{(\alpha)} \dots \dots \dots (5.46)$$

ここで、 κ は Pan-Rice 形硬化則における流れ応力 $g^{(\alpha)}$ および Eyring 形の硬化則におけるせん断強度 $\tau_{0E}^{(\alpha)}$ の関係を表す定数であり、その具体的な値の決定手法については 5.3.3 項で述べる.

5.3.2 ひずみ速度依存性の検討

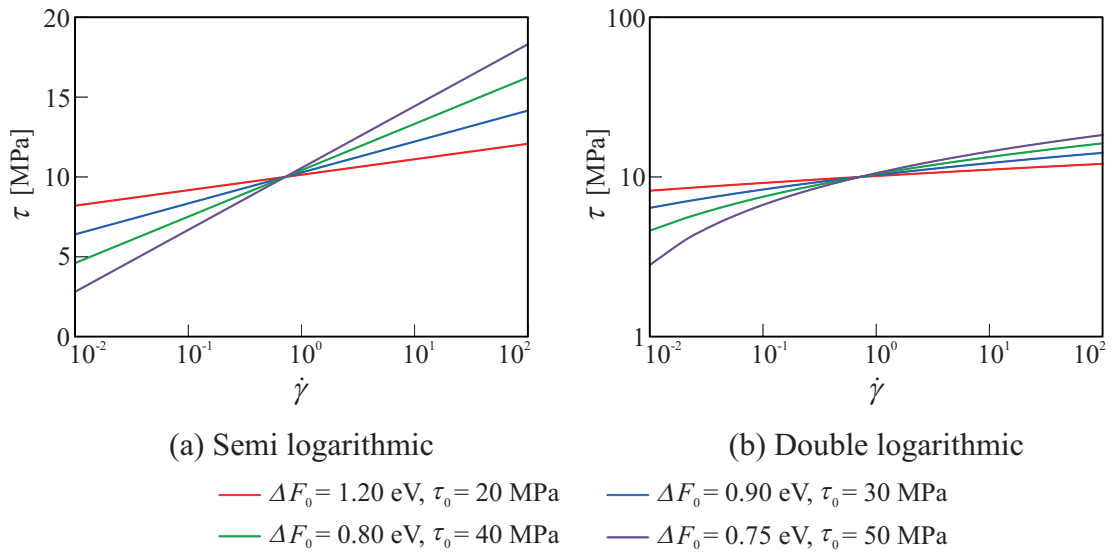


Fig. 5.5 Change in resolved shear stress with respect to increasing in inelastic shear strain rate obtained by Eyring strain rate hardening law.

5.2.2 項と同様に分解せん断応力は常に正の値を取り，単すべり問題を想定することですべり系番号を表記しないものとすれば，式 (5.45) は次式のようなになる．

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_{0E} \exp\left(\frac{-\Delta F_0\{1 - \tau/\tau_{0E}\}}{k_B\theta}\right) \quad (5.47)$$

さらに，式 (5.47) を分解せん断応力について解けば，

$$\tau = \tau_{0E} \left[1 + \frac{k_B\theta}{\Delta F_0} \ln\left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_{0E}}\right) \right] \dots\dots\dots (5.48)$$

となる．式 (5.48) において，縦軸に分解せん断応力，横軸にせん断ひずみ速度をとり，両者の関係を図示すれば図 5.5 のようになる．なお，同図においては $\dot{\gamma}_{0E} = 15.0 \text{ ns}^{-1}$ ， $\theta = 293 \text{ K}$ としている．図 5.5(a) を見ると Eyring 形硬化則を用いた場合にはひずみ速度の対数的な増加に対して応力が線形に増加することがわかる [補足 E.3]．したがって，応力-ひずみ曲線においてひずみ速度を対数的に増加させた際の，流れ応力の上昇量が一定となることが予測される．次に，図 5.5(b) を見ると，ひずみ速度の対数的な増加に対して，応力の対数目盛上での変化は非線形であることがわかる．すなわち，Pan-Rice 形硬化則と異なり，Eyring 形硬化則のひずみ速度感度は一定にならないと言える．以上のことは 5.2.2 項と同様に $\partial\tau/\partial \ln \dot{\gamma}$ および $\partial \ln \tau / \partial \ln \dot{\gamma}$ を計算することによっても確かめることが可能である．すなわち，

$$\frac{\partial \tau}{\partial \ln \dot{\gamma}} = \frac{\partial}{\partial \ln \dot{\gamma}} \left[\tau_{0E} + \frac{k_B\theta\tau_{0E}}{\Delta F_0} (\ln \dot{\gamma} - \ln \dot{\gamma}_{0E}) \right] = \frac{k_B\theta\tau_{0E}}{\Delta F_0} \dots\dots\dots (5.49)$$

$$\frac{\partial \ln \tau}{\partial \ln \dot{\gamma}} = \frac{\partial \tau}{\partial \ln \dot{\gamma}} \frac{\partial \ln \tau}{\partial \tau} = \frac{k_B\theta\tau_{0E}}{\Delta F_0\tau} \dots\dots\dots (5.50)$$

となる．図 5.5(a) の傾きに相当する式 (5.49) の計算結果は温度 θ 以外が全て定数であるため，解析中に温度が変化しない限り，応力は線形に増加する．一方，同図 (b) での接線こう配に相当する式 (5.50) の計算結果は τ という変数を含んでいるため，応力挙動は非線形となる．以上の検討を 5.2.2 項の検討と比較すれば，Pan-Rice 形硬化則は応力およびひずみ速度が両対数線図上で線形関係となるのに対し，Eyring 形硬化則の場合は応力およびひずみ速度がひずみ速度の片対数線図上で線形関係となり，両硬化則には本質的なひずみ速度依存性の相違が存在することがわかる．

5.3.3 Eyring 形硬化則における材料定数の決定手法

式 (5.50) に示したように、Eyring 形のひずみ速度硬化則はひずみ速度感度への温度 θ の影響を自然に内包しており、前項で言及したひずみ速度依存性に加え、温度の変化による降伏応力の変化が再現可能となることが容易に予測できる。しかしながら、多くのひずみ速度依存の材料の材料定数は Pan-Rice 形硬化則のようなべき乗則に基づいて測定されており、Eyring 形の硬化則を用いる場合の材料定数、すなわち ΔF_0 および τ_{0E} など不明な場合が多い。そこで、本項では Pan-Rice 形硬化則の材料定数である $\dot{\gamma}_{0P}$ 、 $g^{(a)}$ および m を用いて Eyring 形硬化則に用いる材料定数を決定する手法を新たに提案する。その際、元の Pan-Rice 形硬化則の材料定数によって表される応力状態およびひずみ速度依存性が Eyring 形硬化則においても同様に再現可能となるよう材料定数の決定手法を定める。ただし、5.3.2 項で言及したように両者の間には本質的なひずみ速度依存性の相違があるため、完全に同様のひずみ速度依存性を再現することはできないという点に注意されたい。なお、本項においても 5.3.2 項と同様に、簡単化のため分解せん断応力は常に正の値を取り、単すべり問題を想定することですべり系番号を表記しないものとする。まず、いずれの硬化則を用いた場合にもひずみ速度感度 $\partial \ln \tau / \partial \ln \dot{\gamma}$ が等しくなるという仮定より、式 (5.28) および式 (5.50) から次式が成り立つ。

$$\Delta F_0 = \frac{k_B \theta \tau_{0E}}{m \tau} \dots \dots \dots (5.51)$$

式 (5.51) を式 (5.48) に代入することで次式が得られる。

$$\tau_{0E} = \tau \left[1 - m \ln \left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_{0E}} \right) \right] \dots \dots \dots (5.52)$$

さらに、式 (5.52) および式 (5.51) に式 (5.26) を代入すれば、それぞれ式 (5.53) および式 (5.54) のように書ける。

$$\tau_{0E} = g \left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_{0P}} \right)^m \left[1 - m \ln \left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_{0E}} \right) \right] \dots \dots \dots (5.53)$$

$$\Delta F_0 = \frac{k_B \theta \tau_{0E}}{m g} \left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_{0P}} \right)^{-m} \dots \dots \dots (5.54)$$

最後に、式 (5.46) の関係を用いて、式 (5.53) および式 (5.54) を κ を用いて表記し直せば以下の関係が得られる。

$$\kappa = \left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_{0P}} \right)^m \left[1 - m \ln \left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_{0E}} \right) \right] \dots \dots \dots (5.55)$$

$$\Delta F_0 = \kappa \frac{k_B \theta}{m} \left(\frac{\dot{\gamma}}{\dot{\gamma}_{0P}} \right)^{-m} \dots \dots \dots (5.56)$$

式 (5.55) および式 (5.56) に Pan-Rice 形硬化則の材料定数 $\dot{\gamma}_{0P}$ および m を代入することで、代入した値に対応する Eyring 形硬化則の材料定数 κ および ΔF_0 を得ることができる。ただし、 θ にはひずみ速度感度指数 m を実験的に測定した際の温度の値を用い、 $\dot{\gamma}$ には $\dot{\gamma}_{0P}$ と同様の値を与えるものとする。したがって、式 (5.55) および式 (5.56) において $\dot{\gamma}_{0E}$ のみが任意定数となる。そこで、本研究では原則として $\dot{\gamma}_{0E} = 15.0 \text{ ns}^{-1}$ として用いるものとする。

なお、Eyring 形硬化則においてはひずみ速度依存性および環境温度依存性、すなわち、ひずみ速度感度および環境温度感度を単独で制御可能なパラメータは存在しない。したがって、上述の手法などを用いて、ひずみ速度に依存した降伏応力変化が実験値と一致するよう Eyring 形硬化則の材料定数を全て決定すれば、環境温度に対する依存性も自然に決定すると考えられる。

5.3.4 接線係数法の適用 (応力積分の陰解法)

本項では、5.2.3 項と同様に Eyring 形硬化則を用いた場合の結晶相に対する接線係数法の適用方法について述べる。ただし、テンソル形の構成式は結晶相の構成式のままであることに加え、Eyring 形硬化則の内部変数も Pan-Rice 形硬化則を用いた場合と相違ないことから式 (5.29)～式 (5.43) までの式の導出は 5.2.3 項と同様である。異なるのは式 (5.36) および式 (5.37) に適用する偏微分の項の計算結果のみであるため、その計算結果を以下に示す。

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \dot{\gamma}^{(\alpha)}}{\partial \tau^{(\alpha)}} \right)_t &= \frac{\Delta F_0}{k_B \theta \tau^{(\alpha)}} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\tau_{0E}} \right| \dot{\gamma}_{0E} \operatorname{sgn}(\tau^{(\alpha)}) \exp \left(\frac{-\Delta F_0 \{1 - |\tau^{(\alpha)} / \tau_{0E}^{(\alpha)}|\}}{k_B \theta} \right) \\ &= \frac{\Delta F_0 \dot{\gamma}^{(\alpha)}(t)}{k_B \theta \tau^{(\alpha)}} \left| \frac{\tau^{(\alpha)}}{\tau_{0E}} \right| \dots \dots \dots (5.57) \end{aligned}$$

式 (5.57) および式 (5.43) を用いることによって、Eyring 形硬化則を用いた場合においても非弾性せん断ひずみ速度がもつ強い非線形性を緩和した有限要素解析が実施可能となる。

第 6 章

損傷発展式

本章ではポリマの非晶相に対して導入するクレーズ発展式の構築を行う。まず、6.1 節では先行研究で反応速度論に基づいて提案されたクレーズ発生速度および成長速度を表すモデルを紹介する。次に、6.2 節では、6.1 節で示した式を参考に反応速度論に基づき、クレーズ発展式を構築する。その際、クレーズ進展の特徴的な現象である高ひずみ速度域におけるクレーズ発展量の減少および配向硬化領域におけるクレーズ進展の停止を活性化エネルギーのモデルとして導入する。さらに、6.3 節では、実際に本研究で用いるクレーズ発展式を分子鎖塑性モデルおよび Hasan-Boyce の非弾性応答則に適した形で提案する。最後に、実際の数値解析に適用可能とするために 6.4 節で Hasan-Boyce の非弾性応答則に適した形に書き換えられたクレーズ発展式の積分記号を外す作業を行う。

6.1 反応速度論を用いたクレーズ発生およびクレーズ成長の表現

クレーズはポリマの塑性流動により形成されるため、その統計的振る舞いはせん断ひずみ速度と同様に Eyring の反応速度論⁽⁷⁵⁾ によって表すことができる。従来から、クレーズの発生および成長を反応速度論に基づいて記述する試みが多く行われている⁽¹⁰³⁾⁽¹⁰⁵⁾⁽¹⁰⁶⁾。北川・川越⁽¹⁰⁵⁾ は、クレーズ発生速度は単一クレーズの発生速度 n およびクレーズ発生可能箇所の残存数 $(\rho_0 - \rho)$ に比例するものとしてクレーズ発生速度に対する次のような式を提案している。

$$\frac{d\rho}{dt} = n(\rho_0 - \rho) \dots \dots \dots (6.1)$$

$$n = A \frac{k_B \theta}{h} \exp\left(-\frac{\Delta G_{10} - \sigma \Delta v_1}{k_B \theta}\right) \dots \dots \dots (6.2)$$

ここで、 ρ は時刻 t におけるクレーズ数密度、 ρ_0 はクレーズ数密度の飽和値、 A は 1.0 に近い定数、 h は Planck 定数、 ΔG_{10} は無応力状態におけるクレーズ発生の活性化自由エネルギー、 Δv_1 はクレーズ発生の活性化体積、 σ は負荷応力であり、 $(-\sigma \Delta v_1)$ の項は負荷応力による活性化エネルギー変化を表す。また、北川・川越は飽和クレーズ数密度 ρ_0 を次のように定式化している。いま、系に単位体積当たり ρ_0 個のクレーズの芽が形成されたとすれば、芽の発生による系の自由エネルギー変化 ΔF は

$$\Delta F = \rho_0 \Delta G_{10} - \theta \Delta S \dots \dots \dots (6.3)$$

で与えられる。ここで、 ΔS はエントロピー変化である。単位体積当たりのクレーズが発生可能である箇所の総数を ρ^* とすれば、 $\rho^* \gg \rho_0$ と考えられるので、 ΔS (混合のエントロピー) は $\Delta S = k_B \rho_0 [1 - \ln(\rho_0/\rho^*)]$ で与えられる [補足 F.1]。したがって、安定な状態は ΔF が極値をとる条件より、最終的に次式にて与えられる [補足

F.2].

$$\rho_0 = \rho^* \exp\left(-\frac{\Delta G_{10} - \sigma \Delta v_1}{k_B \theta}\right) \dots \dots \dots (6.4)$$

北川・川越は式 (6.1), (6.2) および式 (6.4) を用いることで, ポリマの静的引張試験下におけるクレーズ発生
の応力依存性および時間依存性が十分に説明可能であることを示している.

一方, 単一クレーズの成長に対する式として古口・堀⁽¹⁰⁶⁾ によって次式が提案されている.

$$\frac{dl}{dt} = \delta \theta \exp\left(-\frac{\Delta G_{20} - \sigma \Delta v_2}{k_B \theta}\right) \dots \dots \dots (6.5)$$

ここで, l は時刻 t におけるクレーズ長さ, δ は定数, ΔG_{20} は無応力状態におけるクレーズ成長の活性化エ
ネルギー, Δv_2 はクレーズ成長の活性化体積である. さらに, 古口・堀はクレーズの特徴的な性質である分子鎖
配向領域におけるクレーズ成長の停止を加工効果に伴う活性化エネルギーの増大として考え, ΔG_{20} を次式
のように表している.

$$\Delta G_{20} = \Delta G_{c1} + \omega_{c1} \varepsilon_c \dots \dots \dots (6.6)$$

$$\Delta G_{20} = \Delta G_{c2} + \omega_{c2} \ln \varepsilon_c \dots \dots \dots (6.7)$$

ここで, ε_c はクリープひずみ, ΔG_{c1} , ΔG_{c2} , ω_{c1} および ω_{c2} は定数である. 古口・堀はクリープひずみが小
さい場合には ΔG_{20} は式 (6.6) に従い, クリープひずみが増加し, 定常クリープに移行した後, ΔG_{20} は式 (6.7)
に従うとしている.

6.2 反応速度論に基づくクレーズ発展式の構築

ポリマにおける損傷の増大は 6.1 節に示したようにクレーズ発生およびクレーズ成長の 2 つの過程に支配さ
れる. したがって, 本研究ではクレーズ密度の速度 $\dot{\omega}$ を次式のようにクレーズ発生による損傷速度 $\dot{\omega}_n$ およ
びクレーズ成長による損傷速度 $\dot{\omega}_g$ の和として表す.

$$\dot{\omega} = \dot{\omega}_n + \dot{\omega}_g \dots \dots \dots (6.8)$$

なお, 本研究ではクレーズ発生速度 $\dot{\omega}_n$ およびクレーズ成長速度 $\dot{\omega}_g$ を各過程によって生じる損傷率として定
義しており, これらはクレーズの数および長さを表す量ではないことに注意されたい. また, 本研究では 2.4
節で述べたように ω を損傷の面積分率として定義しており, これを体積分率に変換する際には想定する損傷
の形状によって変換則が異なることに注意されたい [補足 F.3]. さらに, クレーズ発生速度およびクレーズ成
長速度はそれぞれ反応速度論により次式のように表す.

$$\dot{\omega}_n = \dot{\omega}_{0n} \exp\left(-\frac{\Delta G_1}{k_B \theta}\right) \dots \dots \dots (6.9)$$

$$\dot{\omega}_g = \dot{\omega}_{0g} \exp\left(-\frac{\Delta G_2}{k_B \theta}\right) \dots \dots \dots (6.10)$$

ここで, ΔG_1 はクレーズ発生に要する活性化エネルギー, ΔG_2 はクレーズ成長に要する活性化エネルギーであ
る. また, クレーズ発生速度は北川・川越と同様に飽和クレーズ発生量 ω_{ns} と現在のクレーズ発生量 ω_n の差
で与えられる残りのクレーズ発生可能量に比例するものとし, クレーズ成長速度は現在のクレーズ発生量 ω_n
に比例するものとすれば (図 6.1), 参照クレーズ発生速度 $\dot{\omega}_{0n}$ および参照クレーズ成長速度 $\dot{\omega}_{0g}$ はそれぞれ次
式のように表現できる.

$$\dot{\omega}_{0n} = n_r (\omega_{ns} - \omega_n) \dots \dots \dots (6.11)$$

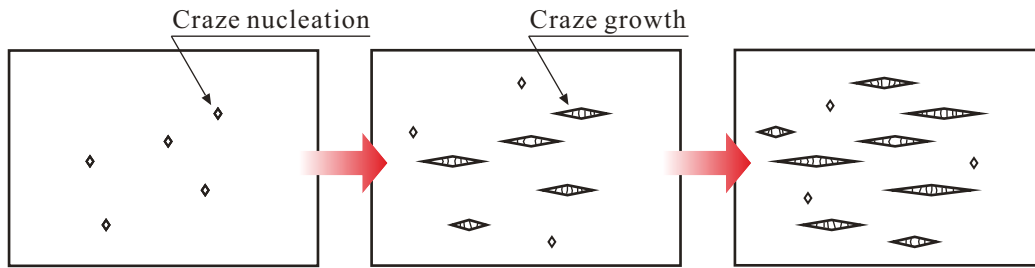


Fig. 6.1 Schematic expression of craze evolution process.

$$\dot{\omega}_{0g} = g_r \omega_n \dots \dots \dots (6.12)$$

ここで、 n_r および g_r はそれぞれ速度次元をもつ材料定数である。また、 $\langle \rangle$ は Macaulay の括弧であり、 $(\omega_{ns} - \omega_n)$ の値が負となる場合には $\langle \omega_{ns} - \omega_n \rangle$ が零となる。したがって、式 (6.9) より $\dot{\omega}_n$ も零となる。これは、本研究ではクレーズが永久変形であり、一度クレーズ化した領域は除荷時においても元に戻らないことを想定しているためである。一方、飽和クレーズ発生量 ω_{ns} は式 (6.4) を参考に次式のように表わす。

$$\omega_{ns} = \omega^* \exp\left(-\frac{\Delta G_1}{k_B \theta}\right) \dots \dots \dots (6.13)$$

ここで、 ω^* は単位面積当たりの全クレーズ発生可能量である。 ΔG_1 に応力による活性化エネルギー変化が含まれていることを考慮すれば、式 (6.13) は飽和クレーズ発生量が応力に依存して与えられることを表している。加えて、式 (6.12) よりクレーズ発生量が零の時はクレーズ成長による損傷が進展しないため、式 (6.13) によって応力に依存した損傷の発生条件が与えられるといえる。

次に、活性化エネルギーをモデル化する。クレーズは分子鎖の流動により形成されることから、 ΔG_1 および ΔG_2 を同じく分子鎖の流動現象であるせん断変形に必要な活性化エネルギー ΔF_0 の関数として与えれば、活性化エネルギーはひずみ速度に対する依存性を見かけ上有するようになる。さらに、古口・堀と同様に分子鎖配向領域におけるクレーズ進展の停止を加工硬化に伴う活性化エネルギーの増大として考え、活性化エネルギーに対してひずみ依存の項をべき乗則として付与すれば、 ΔG_1 および ΔG_2 は次式のように与えられる。

$$\Delta G_i = f_i(\dot{\gamma}, \gamma) = C_i \Delta F_0(\dot{\gamma}) - \tau \Delta v_i + D_i (\gamma / \gamma_c)^{p_i} \dots \dots \dots (6.14)$$

ここで、 D_i および p_i ($i = 1-2$) は材料定数、 γ_c は配向硬化ひずみである。 C_i はせん断変形に必要な活性化エネルギーからの相対的な比を与える活性化エネルギー比であり、原則として1以下の値を与える。また、後述のように C_i がクレーズ進展のひずみ速度依存性を制御するパラメータとなる。さらに、 $(-\tau \Delta v_i)$ の項は応力による活性化エネルギー変化を、 $D_i (\gamma / \gamma_c)^{p_i}$ の項はひずみによる活性化エネルギー変化を表す。式 (6.14) の表記では活性化エネルギーが有するひずみ速度依存性およびひずみ依存性がクレーズ進展に与える影響がわかりにくいため、これらを明らかにするために以下のように式変形を行う。まず、せん断ひずみ速度を応力による活性化エネルギー変化を考慮した、最も簡単化された反応速度論の形式で次式のように表記する。

$$\dot{\gamma} = \dot{\gamma}_r \exp\left(-\frac{\Delta F_0 - \tau \Delta v}{k_B \theta}\right) \dots \dots \dots (6.15)$$

ここで、 $\dot{\gamma}_r$ は参照せん断ひずみ速度、 Δv はせん断変形の活性化体積である。式 (6.15) は式 (5.1) において確率密度関数 $\varphi^{(a)}$ による活性化エネルギーの局所分布ならびに負方向の反応速度項を無視したものと対応している。式 (6.15) を活性化エネルギー $(\Delta F_0 - \tau \Delta v)$ について解くことで次式が得られる。

$$\Delta F_0 - \tau \Delta v = -k_B \theta \ln(\dot{\gamma} / \dot{\gamma}_r) \dots \dots \dots (6.16)$$

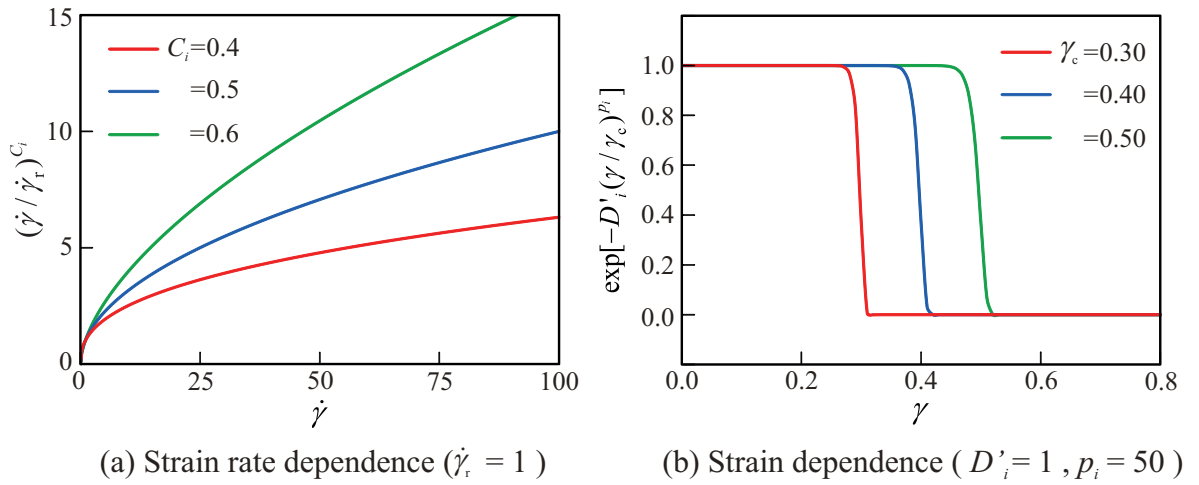


Fig. 6.2 Dependence of craze evolution on strain rate and strain.

さらに、活性化体積について $\Delta v_i = C_i \Delta v$ を仮定し、式 (6.16) を式 (6.14) に代入すれば次式のようなになる。

$$\Delta G_i = C_i(\Delta F_0 - \tau \Delta v) + D_i(\gamma/\gamma_c)^{p_i} = -k_B \theta \ln(\dot{\gamma}/\dot{\gamma}_r)^{C_i} + D_i(\gamma/\gamma_c)^{p_i} \dots \dots \dots (6.17)$$

式 (6.17) を式 (6.9) および式 (6.10) に代入すれば、クレーズ発生速度およびクレーズ成長速度が次式のように書き換えられる。

$$\dot{\omega}_n = \dot{\omega}_{0n}(\dot{\gamma}/\dot{\gamma}_r)^{C_1} \exp[-D'_1(\gamma/\gamma_c)^{p_1}] \dots \dots \dots (6.18)$$

$$\dot{\omega}_g = \dot{\omega}_{0g}(\dot{\gamma}/\dot{\gamma}_r)^{C_2} \exp[-D'_2(\gamma/\gamma_c)^{p_2}] \dots \dots \dots (6.19)$$

ここで、 $D'_i \equiv D_i/(k_B \theta)$ である。式 (6.18) および式 (6.19) の $(\dot{\gamma}/\dot{\gamma}_r)^{C_i}$ および $\exp[-D'_i(\gamma/\gamma_c)^{p_i}]$ の値をそれぞれ $\dot{\gamma}$ および γ を独立変数として図示すると、図 6.2 のようになる。図 6.2(a) を見るとわかるように、クレーズの発展はひずみ速度の増加に対して単調増加となる一方、 C_i が 1 より小さい値をもつ場合には高ひずみ速度域において接線こう配が減少する。これは単位時間あたりのクレーズ蓄積量は高ひずみ速度で変形した場合の方が大きい、任意の変形量に達するまでのクレーズ密度の蓄積量は小さくなることを意味する。したがって、反応速度論の体系ではクレーズ進展に必要な活性化エネルギーがせん断変形に必要な活性化エネルギーより小さい場合に、高ひずみ速度ほど損傷が少なくなるというクレーズ進展のひずみ速度依存性が導入される。また、図 6.2(b) は配向硬化ひずみに達した時にクレーズの発展量が零になることを表している。これは指数 p_i に大きな値を与えることで、配向硬化ひずみに達した時に急激に活性化エネルギーを増大させているためである。以上のクレーズ発展におけるひずみ速度依存性およびひずみ依存性の 2 つの効果により、クレーズ密度集中領域の伝ばというクレーズ進展挙動の特徴が再現可能となることが予測される。クレーズ進展挙動の再現は 9 章にて実施する。なお、式 (6.18) および式 (6.19) は説明のためにクレーズのひずみ速度依存性およびひずみ依存性を簡易に示したものであり、実際に数値解析で用いる発展式とは異なることに注意されたい。

6.3 Hasan-Boyce の非弾性応答則に基づくクレーズ発展式の表記

式 (6.14) の ΔF_0 は反応速度論に立脚した材料応答則から同定される値である。しかしながら、本研究で用いる Hasan-Boyce の非弾性応答則では ΔF_0 は確率密度関数 $\varphi^{(a)}$ によって与えられるため、式 (6.8)~式 (6.14) をそのまま数値解析に適用することはできない。加えて、分子鎖塑性モデルでは ΔF_0 はすべり系毎の量として与

えられるが、前節ではクレーズ密度に対して分子鎖すべり系の概念が導入されていない。そこで、実際の数値解析においてクレーズ密度が計算可能となるよう非晶相に対して用いる分子鎖塑性モデルおよび Hasan-Boyce の非弾性応答則に適した形でクレーズ発展式を表記し直すと以下ようになる。

$$\dot{\omega}^{(\alpha)} = \dot{\omega}_n^{(\alpha)} + \dot{\omega}_g^{(\alpha)} \dots\dots\dots (6.20)$$

$$\dot{\omega}_n^{(\alpha)} = \dot{\omega}_{0n}^{(\alpha)} \int_0^\infty \varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) \exp\left(-\frac{\Delta G_1(\Delta F_0)}{k_B\theta}\right) d\Delta F_0 \dots\dots\dots (6.21)$$

$$\dot{\omega}_g^{(\alpha)} = \dot{\omega}_{0g}^{(\alpha)} \int_0^\infty \varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) \exp\left(-\frac{\Delta G_2(\Delta F_0)}{k_B\theta}\right) d\Delta F_0 \dots\dots\dots (6.22)$$

$$\dot{\omega}_{0n}^{(\alpha)} = n_r \left\langle \omega_{ns}^{(\alpha)} - \omega_n^{(\alpha)} \right\rangle \dots\dots\dots (6.23)$$

$$\dot{\omega}_{0g}^{(\alpha)} = g_r \omega_n^{(\alpha)} \dots\dots\dots (6.24)$$

$$\omega_{ns}^{(\alpha)} = \omega^* \int_0^\infty \varphi^{(\alpha)}(\Delta F_0) \exp\left(-\frac{\Delta G_1(\Delta F_0)}{k_B\theta}\right) d\Delta F_0 \dots\dots\dots (6.25)$$

$$\Delta G_i(\Delta F_0) = C_i \Delta F_0 \{1 - |\tau^{(\alpha)} / \tau_{0H}|\} + D_i (\gamma_a / \gamma_c)^{P_i} \dots\dots\dots (6.26)$$

式 (6.20)～式 (6.26) における式 (6.8)～式 (6.14) との主な相違点として以下の点が挙げられる。

- 分子鎖塑性モデルの体系に整合するよう各損傷量をすべり系 α 毎の量として定義している。
- 活性化エネルギー ΔF_0 の局所分布を確率密度関数 $\varphi^{(\alpha)}$ の積分形として導入している。
- $\Delta v = \Delta F_0 / \tau_{0H}$ の関係を用いて、応力による活性化エネルギー変化を $|\tau^{(\alpha)} / \tau_{0H}|$ で表現している。

また、Hasan-Boyce の非弾性応答則はポリマ内部の自由体積変化に立脚しているため、本節の定式化によって自由体積およびクレーズ進展の挙動が有為に関連づけられたと言える [補足 F.4]。なお、前述のように本研究では除荷過程においてクレーズ密度が変化しないものとするため、式 (6.21) および式 (6.22) において分子鎖摩擦エネルギー $S^{(\alpha)}$ の効果を加味しない。したがって、負方向反応の反応速度項は不要となるため、式 (6.21) および式 (6.22) では正方向反応のみを表記している。また、式 (6.14) および式 (6.15) に示したように、活性化エネルギーへの応力の寄与を与える活性化体積はせん断変形、クレーズ発生およびクレーズ成長の場合で異なる。すなわち、式 (6.26) の τ_{0H} もクレーズ発生およびクレーズ成長で固有の値をもつはずである。加えて、ボイドの形成を伴うクレーズの進展は静水圧応力依存性を有することが一般的に知られている。本クレーズ発展式に対しても 5.1.4 項と同様の手法で静水圧応力依存性を導入可能である。しかしながら、上述のような活性化体積の相違および静水圧応力依存性を導入すれば、材料定数が増加し、クレーズ発展式の意味の同定が困難となる。したがって、本研究では簡単化のため、せん断応力のみがクレーズ進展に寄与するものとし、 τ_{0H} の値の違いも考慮しないものとする。最後に、多絡み点モデルが適用された非晶相の各物質点におけるクレーズ密度は次式のようにその物質点の全すべり系の平均値によって評価する。

$$\omega \equiv \frac{1}{N_s N_g} \sum_k \sum_\alpha \omega^{(\alpha)[k]} \dots\dots\dots (6.27)$$

6.4 クレーズ発展式の積分計算

式 (6.21), (6.22) および式 (6.25) には ΔF_0 についての積分が含まれているため、そのままの形で数値解析コードに適用することは困難である。そこで、5.1.5 項と同様の手順で積分記号を外すことにより以下の式が得られる。

$$\dot{\omega}_n^{(\alpha)} = \dot{\omega}_{0n}^{(\alpha)} \left(\frac{K_{11}^{(\alpha)}}{2A_1^{(\alpha)}} + \frac{K_{12}^{(\alpha)}}{2A_2^{(\alpha)}} \right) \dots\dots\dots (6.28)$$

$$\dot{\omega}_{\text{g}}^{(\alpha)} = \dot{\omega}_{0\text{g}}^{(\alpha)} \left(\frac{K_{21}^{(\alpha)}}{2A_1^{(\alpha)}} + \frac{K_{22}^{(\alpha)}}{2A_2^{(\alpha)}} \right) \dots\dots\dots (6.29)$$

$$\omega_{\text{ns}}^{(\alpha)} = \omega^* \left(\frac{K_{11}^{(\alpha)}}{2A_1^{(\alpha)}} + \frac{K_{12}^{(\alpha)}}{2A_2^{(\alpha)}} \right) \dots\dots\dots (6.30)$$

$$K_{11}^{(\alpha)} = \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + [1 - C_1 l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)} / (k_{\text{B}} \theta)]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 - \frac{C_1 l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_{\text{B}} \theta} \right) \exp\left(\frac{3\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4\} C_1 l_1^{(\alpha)} - D_1(\gamma_a/\gamma_c)^{p_1}}{k_{\text{B}} \theta}\right)} \right. \\ \left. + \exp\left(\frac{-a^{(\alpha)} C_1 l_1^{(\alpha)} - D_1(\gamma_a/\gamma_c)^{p_1}}{k_{\text{B}} \theta}\right) \right] \dots\dots\dots (6.31)$$

$$K_{12}^{(\alpha)} = \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + [1 + C_1 l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)} / (k_{\text{B}} \theta)]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 + \frac{C_1 l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_{\text{B}} \theta} \right) \exp\left(-\frac{\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4\} C_1 l_1^{(\alpha)} - D_1(\gamma_a/\gamma_c)^{p_1}}{k_{\text{B}} \theta}\right)} \right. \\ \left. + \exp(-\pi) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/2\} C_1 l_1^{(\alpha)} - D_1(\gamma_a/\gamma_c)^{p_1}}{k_{\text{B}} \theta}\right) \right] \dots\dots\dots (6.32)$$

$$K_{21}^{(\alpha)} = \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + [1 - C_2 l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)} / (k_{\text{B}} \theta)]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 - \frac{C_2 l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_{\text{B}} \theta} \right) \exp\left(\frac{3\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4\} C_2 l_1^{(\alpha)} - D_2(\gamma_a/\gamma_c)^{p_2}}{k_{\text{B}} \theta}\right)} \right. \\ \left. + \exp\left(\frac{-a^{(\alpha)} C_2 l_1^{(\alpha)} - D_2(\gamma_a/\gamma_c)^{p_2}}{k_{\text{B}} \theta}\right) \right] \dots\dots\dots (6.33)$$

$$K_{22}^{(\alpha)} = \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + [1 + C_2 l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)} / (k_{\text{B}} \theta)]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 + \frac{C_2 l_1^{(\alpha)} \alpha^{(\alpha)}}{k_{\text{B}} \theta} \right) \exp\left(-\frac{\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4\} C_2 l_1^{(\alpha)} - D_2(\gamma_a/\gamma_c)^{p_2}}{k_{\text{B}} \theta}\right)} \right. \\ \left. + \exp(-\pi) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/2\} C_2 l_1^{(\alpha)} - D_2(\gamma_a/\gamma_c)^{p_2}}{k_{\text{B}} \theta}\right) \right] \dots\dots\dots (6.34)$$

ただし、 $l_1^{(\alpha)} \equiv \{1 - |\tau^{(\alpha)} / \tau_{0\text{H}}|\}$ とおいた．式 (6.20)，(6.23)，(6.24) および式 (6.28)～(6.34) を実際の数値解析におけるクレーズ発展式として採用する．

第 7 章

粘塑性均質化理論

本研究で解析対象とする結晶性ポリマのように μm オーダーのスケールで異なる相が混在する材料に対して、その微視的不均一性を陽に考慮した実用的マクロスケールの数値解析を実施するためには極めて細かい解像度が必要となり、莫大な計算負荷がかかることが予想される。そこで、本章では比較的現実的な計算コストでラメラ結晶スケールおよびマクロスケールを橋渡しする解析を実施可能とする均質化理論について述べる。Ohno ら⁽⁸⁸⁾ は周期性を仮定したミクロスケールおよびマクロスケールの力学的な関係に基づき、有限変形の枠組みにおける歪弾性形の均質化理論を提案している。一方、Namamachi ら⁽⁶⁷⁾ は、金属の多結晶体を対象とし、2つの空間スケールを用いた漸近展開法によりマクロ構造の均質化結晶塑性構成式を導出している。その際、粘塑性形構成式の1種である結晶塑性構成式を扱うために均質化理論を粘塑性形へと拡張している。また、漸近展開法による均質化理論ではミクロおよびマクロスケールの支配方程式を数理的考察のみに基づいて導出可能であることが知られている。本研究では粘塑性体であるポリマを解析対象とすることから、Namamachi らの手法に基づいて粘塑性均質理論を適用する。

まず、これまでに構築した非晶相および結晶相の構成式を統一に取り扱うために粘塑性構成式の一般表記を行う。次に、均質化理論に特有のミクロ構造を定義し、同構造に設けられる仮定について述べる。さらに、漸近展開法に基づいてマクロ構造およびミクロ構造の支配方程式を導出する。その際、ミクロ構造の不均一性に起因するじょう乱速度を特性速度によって表すことで2スケールの支配方程式を満たす解を比較的容易に計算可能とする。最後に、マクロ解析によって得られたマクロ構造の変形情報を用いて、ミクロ構造内部の力学応答を評価する局所化問題について述べる。

7.1 構成式の統一的取扱い

結晶相および非晶相が混在したラメラ結晶構造に対して均質化法を適用する際に、全ての式の導出を各相について場合分けして表記することは合理的ではない。そこで、本節では両相の構成式を一つの構成式形で統一的に表現するため、構成式の一般表記を行う。非晶相の構成式[式(4.58)]および結晶相の構成式[式(4.68)]のような弾粘塑性構成式は次式の形によって統一的に表わすことができる。

$$\dot{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^L : \mathbf{D} - \mathbf{R}^L \dots\dots\dots (7.1)$$

ここで、 $\dot{\mathbf{T}}$ は各相の Jaumann 応力速度である。また、 \mathbf{C}^L は構成式の右辺のうち、変形速度 \mathbf{D} で括ることができる係数をまとめたテンソルであり、構成則テンソルと呼ばれる。一方、 \mathbf{R}^L は \mathbf{D} で括れないはみ出し項をまとめたテンソルであり、左辺に移項すれば、見かけ上応力速度の役割をなすことから見かけの応力速度項と

呼ぶ。これらの具体形は非晶相では式 (4.58) と比較することで、次式のように書ける。

$$\mathbf{C}^L \equiv \frac{1}{N_g} \sum_{k=1}^{N_g} \mathbf{C}^{e[k]}, \quad \mathbf{R}^L \equiv \frac{1}{N_g} \sum_{k=1}^{N_g} \left(\sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)[k]} \boldsymbol{\Omega}^{(\alpha)[k]} + \frac{\dot{\omega}^{[k]}}{1 - \omega^{[k]}} \mathbf{T}^{[k]} \right) \dots\dots\dots (7.2)$$

一方、結晶相については式 (4.68) と比較することで、

$$\mathbf{C}^L \equiv \mathbf{C}_0^e + \psi_0 \mathbf{S}^{(1)} \otimes \mathbf{S}^{(1)}, \quad \mathbf{R}^L \equiv \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \boldsymbol{\Omega}_0^{(\alpha)} \dots\dots\dots (7.3)$$

となる。ただし、非晶相の $\dot{\mathbf{T}}$ には式 (4.55) で表わされる絡み点数について平均化された Jaumann 応力速度が適用されることに注意されたい。また、 $\mathbf{R}^L = \mathbf{0}$ とすることで、式 (7.1) は共回転応力速度に Jaumann 速度を用いた歪弾性形構成式に帰着する。したがって、式 (7.1) は粘塑性構成式だけでなく、線形弾性構成式および弾塑性構成式についても一般化された表記となっている。

なお、式 (7.3) は接線係数法が適用される前の構成式形で表記している。したがって、5 章の接線係数法を適用した際には、結晶相の \mathbf{C}^L および \mathbf{R}^L はそれぞれ式 (5.43) と比較することによって得られる形へと変更を受けることに注意されたい [補足 G.1].

7.2 ミクロ構造の定義

いま、図 7.1 のように、 \mathbf{x} という直交座標系を有するマクロ構造の検査体積において、ある一点を大きく拡大したときに得られる領域をミクロ構造とする。また、ミクロ構造に対して \mathbf{y} という直交座標系を設定する。このとき、その拡大倍率の逆数、すなわち、マクロ構造およびミクロ構造のスケール比 ε は次式のように表わされる。

$$\mathbf{y} = \frac{\mathbf{x}}{\varepsilon} \dots\dots\dots (7.4)$$

さらに、式 (7.4) および微分の鎖則を用いれば \mathbf{x} 座標についての微分が次式のようにになる。

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}} \dots\dots\dots (7.5)$$

また、均質化するということはいま注目しているマクロ構造のある点近傍のどの領域を取り出しても一様であるということを仮定している。このことはミクロ構造がある単位構造 (ユニットセル) について周期的に連

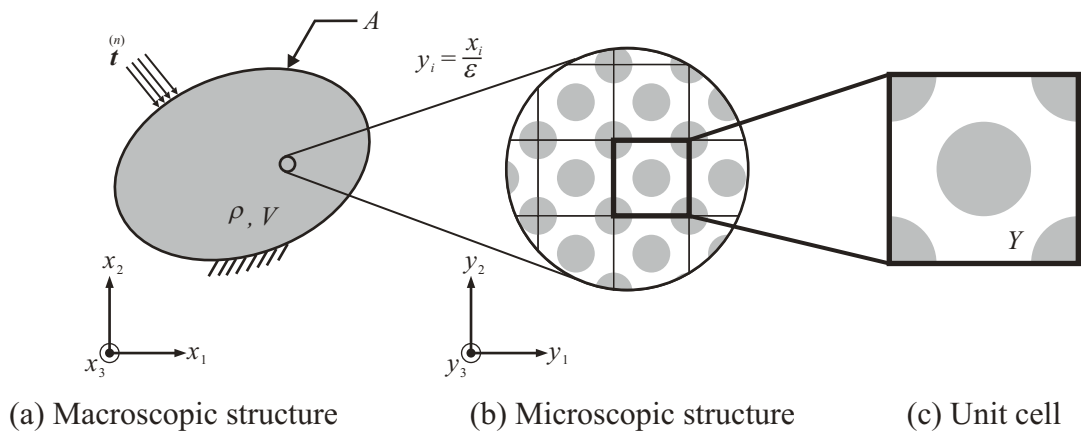


Fig. 7.1 Macroscopic structure with periodical microscopic structure.

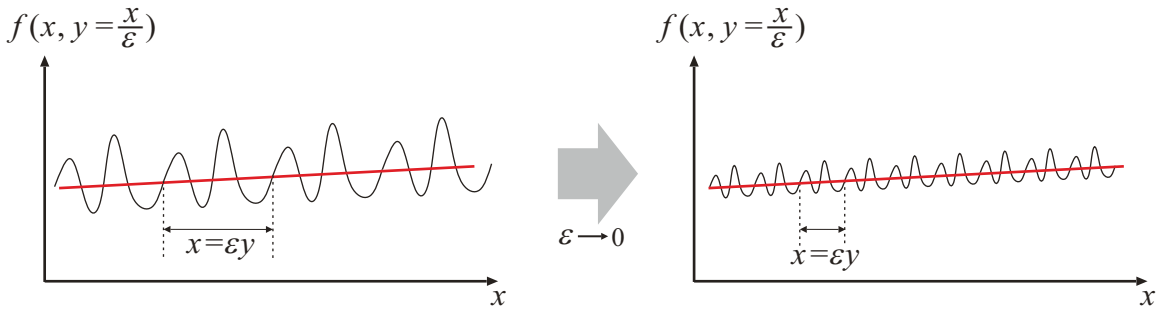


Fig. 7.2 Schematic image of averaging principle.

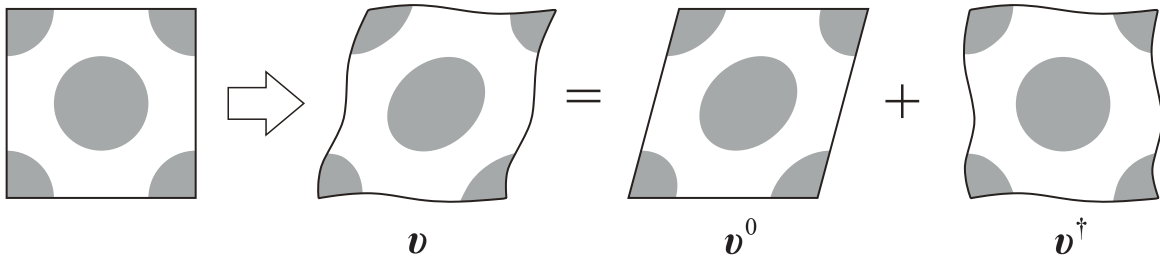


Fig. 7.3 Deformation in unit cell due to macroscopic strain and microscopic disturbance.

なって存在するという仮定を設けることに他ならない. このようなマイクロ構造についての周期性のことを均質化理論では Y -周期性とよぶ. なお, 周期性の仮定は上述のようにマクロな物理量を定義する点の近傍のみにおいて成り立っていればよく, マクロ構造の他の点の近傍では異なるユニットセルが定義されていてもよい. すなわち, マクロ構造における大域的な周期性が仮定されずとも, 局所的な周期性のみが仮定されていれば均質化可能である. したがって, マクロ構造が複数の相から構成されている場合にも均質化理論を用いることができる.

さらに, 通常の均質化理論ではマクロ構造の大きさに対してマイクロ構造の大きさが無限小であると考えられる. すなわち, スケール比 ϵ は均質化理論の定式化において $\epsilon \rightarrow 0$ の極限をとって用いられる. よって, ミクロ構造の座標系は無次元量となり, ミクロ構造の大きさの違いによるマクロ変形応答への影響が表れないということも均質化法の特徴である. ただし, ユニットセルの内部構造または形状が異なれば当然得られるマクロな変形応答は異なる. すなわち, 均質化法においてはマイクロ構造の幾何学的特性についてのみ評価可能である. また, Y -周期性および $\epsilon \rightarrow 0$ の仮定を用いることにより次式のような平均化の公理が適用可能となる.

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{\mathcal{V}} f\left(\mathbf{x}, \frac{\mathbf{x}}{\epsilon}\right) dv = \int_{\mathcal{V}} \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} f(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dy dv \dots\dots\dots (7.6)$$

ここで, Y はユニットセルの体積である. 式 (7.6) はある周期関数の領域積分の極限がその関数のユニットセルでの体積平均の領域積分と等価であることを表している [図 7.2].

次に, ミクロ構造の物質速度 \mathbf{v} は図 7.3 に示すようにマイクロ構造内で一様なマクロひずみによって生じる成分 \mathbf{v}^0 およびマイクロ構造の不均一性に起因するじょう乱成分 \mathbf{v}^\dagger の重ね合わせで表わされるものとする. すなわち,

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}^0 + \mathbf{v}^\dagger \dots\dots\dots (7.7)$$

とする．ここで， $()^0$ および $()^\dagger$ はそれぞれマクロ成分およびそれからのずれであるじょう乱成分を表す．なお，上述のユニットセルの Y -周期性により，じょう乱成分 \mathbf{v}^\dagger は周期性を有する．同様に，速度こう配，変形速度および連続体スピンをマクロ成分とじょう乱成分に分解し，次式のように表す．

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}^0 + \mathbf{L}^\dagger \dots\dots\dots (7.8)$$

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^0 + \mathbf{D}^\dagger \dots\dots\dots (7.9)$$

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}^0 + \mathbf{W}^\dagger \dots\dots\dots (7.10)$$

最後に，均質化理論においては一般的にミクロ構造に物体力が負荷されないものとする．したがって，運動方程式 [式 (C.6)] の物体力項を無視することでユニットセルの運動方程式が次式のように得られる．

$$\operatorname{div} \mathbf{T} = \mathbf{0} \dots\dots\dots (7.11)$$

式 (7.11) はユニットセル内の応力の自己釣り合いを表している．

7.3 漸近展開法による支配方程式の導出

7.3.1 材料レベルの支配方程式の導出

まず，構成式を弱形式の釣り合い方程式に代入することで，材料レベルの支配方程式を導出する．ここで，材料レベルの支配方程式というのは対象とするスケールを特定しない材料そのものに定義されている支配方程式を意味し，均質化理論を適用しない場合の通常の支配方程式に相当する．式 (7.1) を式 (3.28) の Updated Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理に代入することで次式を得る．

$$\int_{\mathcal{V}} \left[\{ (C_{ijkl}^L - P_{ijkl}) D_{kl} - R_{ij}^L \} \check{D}_{ij} + (L_{ik} T_{kj}) \check{L}_{ij} \right] dv = \oint_{\mathcal{A}} \overset{(\dot{)}}{t}_i \check{v}_i da + \int_{\mathcal{V}} \rho f_i \check{v}_i dv \dots\dots\dots (7.12)$$

7.3.2 物質速度の漸近展開

いま，マクロ変数およびミクロ変数への分離対称である物質速度 v_i についてスケール比 ε を用いて漸近展開すれば，

$$v_i = v_i^0(x_i) + \varepsilon^1 v_i^1(x_i, y_i) + \varepsilon^2 v_i^2(x_i, y_i) + \dots\dots\dots (7.13)$$

となる．同様に v_i の関数である速度こう配 L_{ij} および変形速度 D_{ij} についても式 (7.5) および式 (7.13) を用いて次式のように漸近展開しておく．

$$\begin{aligned} L_{ij} &= \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} \\ &= (L_{ij}^0 + l_{ij}^1) + \varepsilon^1 (L_{ij}^1 + l_{ij}^2) + \varepsilon^2 (L_{ij}^2 + l_{ij}^3) + \dots\dots\dots \end{aligned} \quad (7.14)$$

$$\begin{aligned} D_{ij} &= \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} \right) + \left(\frac{\partial v_j}{\partial x_i} + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial v_j}{\partial y_i} \right) \right] \\ &= (D_{ij}^0 + d_{ij}^1) + \varepsilon^1 (D_{ij}^1 + d_{ij}^2) + \varepsilon^2 (D_{ij}^2 + d_{ij}^3) + \dots\dots\dots \end{aligned} \quad (7.15)$$

ただし，式 (7.14) および式 (7.15) の右辺の各項はそれぞれ次式のように定義される．

$$l_{ij}^k \equiv \frac{\partial v_i^k}{\partial y_j}, \quad L_{ij}^k \equiv \frac{\partial v_i^k}{\partial x_j}, \quad d_{ij}^k \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i^k}{\partial y_j} + \frac{\partial v_j^k}{\partial y_i} \right), \quad D_{ij}^k \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i^k}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j^k}{\partial x_i} \right) \dots\dots\dots (7.16)$$

7.3.3 マクロ方程式およびミクロ方程式への分離

式 (7.13), (7.14) および式 (7.15) を仮想量についても同様の関係が成り立つとして式 (7.12) に代入するとともに, $\varepsilon \rightarrow 0$ の極限をとることで式 (7.6) の平均化の公理を適用すれば, 材料の微視構造を考慮した全体の釣合い方程式が次式のように得られる.

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} \left[\left\{ (C_{ijkl}^L - P_{ijkl})(D_{kl}^0 + D_{kl}^\dagger) - R_{ij}^L \right\} (\dot{D}_{ij}^0 + \dot{D}_{ij}^\dagger) + \left\{ (L_{ik}^0 + L_{ik}^\dagger) T_{kj} \right\} (\check{L}_{ij}^0 + \check{L}_{ij}^\dagger) \right] dy dv \\ = \oint_{\mathcal{A}} \check{t}_i \check{v}_i^0 da + \int_{\mathcal{V}} \rho \check{f}_i \check{v}_i^0 dv \dots \quad (7.17)$$

なお, 平均化の公理を適用したことにより, 式 (7.14) および式 (7.15) の l_{ij}^l および d_{ij}^l は 7.2 節で定義したミクロ構造のじょう乱速度こう配およびじょう乱変形速度に相当する量となったため, 式 (7.17) はミクロ構造のじょう乱成分を用いて表記している. すなわち, $L_{ij}^\dagger \equiv l_{ij}^l$, $D_{ij}^\dagger \equiv d_{ij}^l$ と置いた. さらに, マクロ構造およびミクロ構造に対する仮想変位速度がそれぞれ独立して作用すること, すなわち, \check{v}^0 および \check{v}^\dagger がそれぞれ任意の量であることを考慮すれば, 式 (7.17) は次の 2 つの方程式に分離できる.

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} \left[\left\{ (C_{ijkl}^L - P_{ijkl})(D_{kl}^0 + D_{kl}^\dagger) - R_{ij}^L \right\} \dot{D}_{ij}^0 + (L_{ik}^0 T_{kj}) \check{L}_{ij}^0 \right] dy dv = \oint_{\mathcal{A}} \check{t}_i \check{v}_i^0 da + \int_{\mathcal{V}} \rho \check{f}_i \check{v}_i^0 dv \dots \quad (7.18)$$

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} \left[\left\{ (C_{ijkl}^L - P_{ijkl})(D_{kl}^0 + D_{kl}^\dagger) - R_{ij}^L \right\} \dot{D}_{ij}^\dagger + (L_{ik}^\dagger T_{kj}) \check{L}_{ij}^\dagger \right] dy dv = 0 \dots \quad (7.19)$$

式 (7.18) は $\check{v}_i^\dagger = 0$ ($\check{L}_{ij}^\dagger = 0$, $\dot{D}_{ij}^\dagger = 0$) とした場合に得られる方程式であり, マクロ構造の支配方程式に対応している. 一方, 式 (7.19) は $\check{v}_i^0 = 0$ ($\check{L}_{ij}^0 = 0$, $\dot{D}_{ij}^0 = 0$) とした場合に得られる方程式であり, ミクロ構造の支配方程式に対応している. ただし, 式 (7.18) および式 (7.19) においてはミクロ構造の Y -周期性および応力の釣り合い [式 (7.11)] を考慮することで, L_{ik}^\dagger および L_{ik}^0 の項をそれぞれ消去している⁽⁸⁸⁾[補足 G.2]. また, 式 (7.18) および式 (7.19) を比較すれば, マクロ構造では内力と外力の釣り合い方程式を解くのに対し, ミクロ構造では周期境界条件下でユニットセルの内力の自己釣り合い問題を解くことがわかる. 最後に, 式 (7.19) のマクロ構造についての積分を外し, じょう乱速度 v_i^\dagger 以外の項を右辺へ移項すれば,

$$\int_{\mathcal{Y}} \left[\left\{ (C_{ijkl}^L - P_{ijkl}) D_{kl}^\dagger \right\} \dot{D}_{ij}^\dagger + (L_{ik}^\dagger T_{kj}) \check{L}_{ij}^\dagger \right] dy = - \int_{\mathcal{Y}} \dot{D}_{ij}^\dagger (C_{ijkl}^L - P_{ijkl}) dy D_{kl}^0 + \int_{\mathcal{Y}} R_{ij}^L \dot{D}_{ij}^\dagger dy \dots \quad (7.20)$$

となり, ミクロ構造のじょう乱速度成分 v_i^\dagger を決定するための積分方程式が得られる.

7.3.4 特性関数の導入

式 (7.18) によってマクロ構造の未知数 v_i^0 を求める境界値問題が, 式 (7.20) によってミクロ構造の未知数 v_i^\dagger を求める境界値問題が与えられていることから, これらの式を連立して解くことによって, マクロ-ミクロの両スケールにおける整合性を満たす変形場の解を得ることが可能である. しかしながら, 式 (7.18) および式 (7.20) をそのまま用い, 両式を数値解析的に連立して解くことは極めて困難である. そこで, 本研究においても均質化理論で一般的に用いられる手法に倣い, 特性関数⁽⁸²⁾⁽⁶⁷⁾⁽⁸⁵⁾を導入することで変形場の解を求める. いま, 式 (7.20) のミクロ方程式からミクロ構造におけるじょう乱速度が次式で表わされると仮定する.

$$v_i^\dagger = -\chi_i^{kl} D_{kl}^0 + \phi_i \dots \quad (7.21)$$

ここで, χ_i^{kl} および ϕ_i は特性速度である. 特に, ϕ_i は構成式 [式 (7.1)] の見かけの応力速度項に起因する粘塑性均質化理論に特有の特性速度であり, 歪弾性形構成式を用いた場合には現れないことに注意されたい. ま

た、特性速度は物理的には単位マクロ変形速度を与えた際に得られるマイクロ構造内のじょう乱速度として解釈され、じょう乱速度と同様に Y -周期性を有する。加えて、 χ_i^{kl} および ϕ_i は y_i 座標系についての関数であり、 x_i 座標系には依存しないものとする。式 (7.21) を用いれば、マイクロ構造のじょう乱変形速度が次式のように書ける。

$$D_{ij}^{\dagger} = -\chi_{(i,j)}^{kl} D_{kl}^0 + \phi_{(i,j)} \dots \dots \dots (7.22)$$

ただし、式 (7.22) における $(\cdot)_{,i}$ は \mathbf{y} 座標による微分を表す。式 (7.22) を式 (7.18) に代入するとともにマクロ速度 v_i^0 以外の項を右辺へ移項すれば、

$$\int_{\mathcal{A}} \left[\{ (C_{ijkl}^H - P_{ijkl}^H) D_{kl}^0 \} \check{D}_{ij} + (L_{ik}^0 T_{kj}^H) \check{L}_{ij}^0 \right] dv = \oint_{\mathcal{A}} \check{t}_i \check{v}_i^0 da + \int_{\mathcal{V}} \rho \check{f}_i \check{v}_i^0 dv + \int_{\mathcal{V}} R_{ij}^H \check{D}_{ij}^0 dv \dots \dots \dots (7.23)$$

となり、マクロ構造の物質速度 v_i^0 を求めるための積分方程式がマクロ構造の等価材料定数を用いた形で得られる。ここで、マクロ構造の等価材料定数とは均質化された構成則テンソル C_{ijkl}^H および均質化された見かけの応力速度項 R_{ij}^H を意味し、それらの具体形ならびに T_{ij}^H , P_{ijkl}^H はそれぞれ次式のように与えられる。

$$C_{ijkl}^H \equiv \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} C_{ijkl}^L - (C_{ijmn}^L - P_{ijmn}) \chi_{(m,n)}^{kl} dy \dots \dots \dots (7.24)$$

$$R_{ij}^H \equiv \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} R_{ij}^L - (C_{ijkl}^L - P_{ijkl}) \phi_{(k,l)} dy \dots \dots \dots (7.25)$$

$$T_{ij}^H \equiv \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} T_{ij} dy \dots \dots \dots (7.26)$$

$$P_{ijkl}^H \equiv \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} P_{ijkl} dy = \delta_{il} T_{kj}^H + T_{ik}^H \delta_{jl} \dots \dots \dots (7.27)$$

ただし、 P_{ijkl} は式 (3.27) のように定義される。式 (7.23)~(7.27) を用いて得られるマクロ構造の変形情報をマイクロ構造の境界値問題 [式 (7.20)] に対して与えることで、マイクロマクロの両スケールにおける整合性を満たすマイクロ構造の変形場の解が得られる。

7.4 マクロ構造の構成式

式 (7.12) および式 (7.23) を比較すれば、マクロ構造の構成式に相当する役割をもつ式がマクロな等価材料定数を用いて次式のように書ける。

$$\overset{\circ}{T}^H = C^H : D^0 - R^H \dots \dots \dots (7.28)$$

ここで、 $\overset{\circ}{T}^H \equiv \dot{T}^H - W^0 T^H + T^H W^0$ はマクロ構造の Cauchy 応力の Jaumann 速度である。前節までの漸近展開法による支配方程式の導出を行った場合には、式 (7.28) のマクロ構造の構成式は導出されない。加えて、均質化理論におけるマクロ構造の応力は通常、式 (7.28) ではなく式 (7.26) によってマイクロ応力を平均化することで更新する。したがって、実際の数値解析においてマクロ構造の構成式は不要である。漸近展開法ではなく、力学的考察に基づく均質化理論の定式化⁽⁸⁸⁾⁽¹²⁹⁾[補足 G.3] を行った場合には式 (7.28) のマクロ構成式が陽に得られ、マクロ構造の支配方程式を導出する役割を果たす。

7.5 局所化問題

7.3.4 項において、式 (7.23) で得られた変形場の解を式 (7.20) に適用することで、マイクロ構造のじょう乱速度 v_i^\dagger が得られ、最終的に式 (7.7) からマイクロ物質速度 v_i を求められることを述べた。この操作のことを局所化と呼ぶ。なお、ここで述べている局所化とは、固体力学一般におけるひずみの局所化や、連続体力学における積分形の保存則から微分形の釣合い方程式への局所化操作とは異なることに注意されたい。しかしながら、実際の数値解析では上述のような手順による局所化操作は不要である。なぜならば、式 (7.23) のマクロ構造の支配方程式を解く時点で χ_i^{kl} および ϕ_i は明らかになっており、マクロな境界値問題を解いて得られる D_{ij}^0 を用いれば式 (7.21) および式 (7.7) からマイクロ構造の物質速度 v^\dagger が計算できるためである。計算手順の詳細は 8 章に委ねるが、マイクロ構造の支配方程式 [式 (7.20)] は特性速度 χ_i^{kl} および ϕ_i を求める際に用いられることとなる。したがって、局所化操作は次式によって実行可能である。

$$v_i = v_i^0 + v_i^\dagger = D_{ij}^0 y_j - \chi_i^{kl} D_{kl}^0 + \phi_i \dots \dots \dots (7.29)$$

ここで、 y_i はユニットセルにおける座標値を表している。

さらに、対象としているマクロな点の近傍が回転している場合には、その点に対応するマイクロ構造 (ユニットセル) も回転すると考えられる。しかしながら、式 (7.29) を用いてユニットセル内の座標を更新する場合には、マクロな回転の情報が反映されない。そこで、2.5.3 項と同様の考え方により、マクロな連続体スピン \mathbf{W}^0 を用いて次式のようにマクロな回転によるユニットセルの回転を表現する。

$$\mathbf{y}_{t+\Delta t} = \Delta \mathbf{R}^0 (\mathbf{y}_t + \mathbf{v} \Delta t) \dots \dots \dots (7.30)$$

$$\Delta \mathbf{R}^0 = \mathbf{I} + \frac{\sin \varphi^0}{\varphi^0} \mathbf{W}^0 \Delta t + \frac{1 - \cos \varphi^0}{\varphi^{0^2}} (\mathbf{W}^0 \Delta t)^2 \dots \dots \dots (7.31)$$

$$\varphi^0 \equiv \sqrt{-\frac{\text{tr}\{(\mathbf{W}^0 \Delta t)^2\}}{2}} \dots \dots \dots (7.32)$$

第 8 章

有限要素法による離散定式化

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。このとき、要素内の任意の位置における物理量は要素を構成する各節点における量の内挿で表される。この任意点での物理量を節点上の値の内挿として表わす定式化を離散化とよぶ。また、内挿に用いる要素種類毎に固有の座標の関数を形状関数と言う。

本章では、前章までに構築した支配方程式を FEM 解析に適用するための離散定式化を行う。まず、要素内の任意点での物理量を内挿するための離散化マトリックスを用意する。次に、得られた離散化マトリックスを用いてマイクロ構造およびマクロ構造の支配方程式を離散化する。加えて、本研究では均質化法を用いているため、マイクロマクロ連成解析に必要となる均質化材料定数の計算および局所化問題についても数値解析に用いる形に定式化する。離散化にあたっては、数値解析の計算コスト軽減と使用メモリ節約の観点から、各テンソルの非零かつ独立な成分を並べてマトリックスまたは列ベクトルとして表記するマトリックス表示を用いて定式化を行う。したがって、本章では物理量 \mathbf{S} のマトリックス表示を $[\mathbf{S}]$ 、列ベクトル表示を $\{\mathbf{S}\}$ で表す。また、本研究では平面ひずみ条件による解析および三次元解析の双方を扱う。平面ひずみ条件においてはその拘束条件からマトリックスの大きさが三次元問題の場合から縮約される。そこで、本章ではまず、最も一般性がある三次元問題に対する離散定式化を実施し、その後平面ひずみ条件を用いた場合の離散化について述べる。最後に、これまでに得られた式を計算する順番を述べ、全体の解析の流れをまとめる。なお、本章においても構成式の違いによる定式化の煩雑さを回避するために、式 (7.1) の弾粘塑性構成式の一般表記をユニットセルにおける構成式として用いる。また、マクロ構造 V に対して直行座標系 x_i 、ユニットセル Y に対して直行座標系 y_i を設ける。

8.1 離散化マトリックス

8.1.1 変位速度の離散化マトリックス

分割された要素内の任意点における物理量は、節点上のその量の値に任意座標での重みを表す形状関数を乗じ、節点数について足し合わせることで得られる。よって、マクロ構造の要素内の任意点におけるマクロ変位速度 \mathbf{v}^0 およびマイクロ構造の要素内の任意点におけるじょう乱変位速度 \mathbf{v}^\dagger はそれぞれ次式のようになる。

$$v_i^0 = \sum_I N^{0I}(\mathbf{x})v_i^{0I}, \quad v_i^\dagger = \sum_I N^I(\mathbf{y})v_i^{\dagger I} \dots\dots\dots (8.1)$$

ここで、 $(\)^I$ は離散化された量を表し、 I は要素節点番号を表している。また、 N^{0I} および N^I はそれぞれマクロ構造およびユニットセルにおける形状関数であり、その具体形は 8.1.4 項で述べる。また、マクロ構造では $I = 1, 2, \dots, n$ 、マイクロ構造では $I = 1, 2, \dots, m$ であり、 n および m はそれぞれマクロ構造およびマイクロ構造の

要素を構成する節点の数を表す. 式 (8.1) をマトリックス表示にすれば次式のように書ける.

$$\begin{Bmatrix} v_1^0 \\ v_2^0 \\ v_3^0 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} N^{0^1} & 0 & 0 & \cdots & N^{0^n} & 0 & 0 \\ 0 & N^{0^1} & 0 & \cdots & 0 & N^{0^n} & 0 \\ 0 & 0 & N^{0^1} & \cdots & 0 & 0 & N^{0^n} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} v_1^{0^1} \\ v_2^{0^1} \\ v_3^{0^1} \\ \vdots \\ v_1^{0^n} \\ v_2^{0^n} \\ v_3^{0^n} \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (8.2)$$

$$\begin{Bmatrix} v_1^\dagger \\ v_2^\dagger \\ v_3^\dagger \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} N^1 & 0 & 0 & \cdots & N^m & 0 & 0 \\ 0 & N^1 & 0 & \cdots & 0 & N^m & 0 \\ 0 & 0 & N^1 & \cdots & 0 & 0 & N^m \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} v_1^{\dagger 1} \\ v_2^{\dagger 1} \\ v_3^{\dagger 1} \\ \vdots \\ v_1^{\dagger m} \\ v_2^{\dagger m} \\ v_3^{\dagger m} \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (8.3)$$

また, これらをまとめて次式のように表記する.

$$\{v^0\} = [N^0]\{v^{0^l}\} \dots\dots\dots (8.4)$$

$$\{v^\dagger\} = [N]\{v^{\dagger l}\} \dots\dots\dots (8.5)$$

ここで, $[N^0]$ および $[N]$ は要素節点変位速度と要素内変位速度を関連づけるマトリックスである. 式 (8.4) および式 (8.5) を用いてそれぞれマクロ変位速度およびじょう乱変位速度を離散化する. なお, 式 (8.4) および式 (8.5) のような離散化は仮想量についても同様の関係が成り立つものとする.

8.1.2 速度こう配の離散化マトリックス

いま, 式 (8.1) の節点における変位速度は座標に依存せず, 形状関数のみが座標の関数であることを考慮すれば, マクロ構造の要素内の任意点におけるマクロ速度こう配 L^0 およびマイクロ構造の要素内の任意点におけるじょう乱速度こう配 L^\dagger はそれぞれ次式のように書ける.

$$L_{ij}^0 = \frac{\partial v_i^0}{\partial x_j} = \sum_l \frac{\partial N^{0^l}(\mathbf{x})}{\partial x_j} v_i^{0^l}, \quad L_{ij}^\dagger = \frac{\partial v_i^\dagger}{\partial y_j} = \sum_l \frac{\partial N^l(\mathbf{y})}{\partial y_j} v_i^{\dagger l} \dots\dots\dots (8.6)$$

式 (8.6) をマトリックス表示にすれば次式のように書ける.

$$\begin{Bmatrix} L_{11}^0 \\ L_{21}^0 \\ L_{31}^0 \\ L_{12}^0 \\ L_{22}^0 \\ L_{32}^0 \\ L_{13}^0 \\ L_{23}^0 \\ L_{33}^0 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N^{0^1}}{\partial x_1} & 0 & 0 & \cdots & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^{0^1}}{\partial x_1} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_1} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N^{0^1}}{\partial x_1} & \cdots & 0 & 0 & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_1} \\ \frac{\partial N^{0^1}}{\partial x_2} & 0 & 0 & \cdots & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^{0^1}}{\partial x_2} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N^{0^1}}{\partial x_2} & \cdots & 0 & 0 & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_2} \\ \frac{\partial N^{0^1}}{\partial x_3} & 0 & 0 & \cdots & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^{0^1}}{\partial x_3} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N^{0^1}}{\partial x_3} & \cdots & 0 & 0 & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_3} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} v_1^{0^1} \\ v_2^{0^1} \\ v_3^{0^1} \\ \vdots \\ v_1^{0^n} \\ v_2^{0^n} \\ v_3^{0^n} \end{Bmatrix} \quad (8.7)$$

$$\begin{Bmatrix} L_{11}^\dagger \\ L_{21}^\dagger \\ L_{31}^\dagger \\ L_{12}^\dagger \\ L_{22}^\dagger \\ L_{32}^\dagger \\ L_{13}^\dagger \\ L_{23}^\dagger \\ L_{33}^\dagger \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial N^1}{\partial y_1} & 0 & 0 & \cdots & \frac{\partial N^m}{\partial y_1} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial y_1} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial N^m}{\partial y_1} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N^1}{\partial y_1} & \cdots & 0 & 0 & \frac{\partial N^m}{\partial y_1} \\ \frac{\partial N^1}{\partial y_2} & 0 & 0 & \cdots & \frac{\partial N^m}{\partial y_2} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial y_2} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial N^m}{\partial y_2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N^1}{\partial y_2} & \cdots & 0 & 0 & \frac{\partial N^m}{\partial y_2} \\ \frac{\partial N^1}{\partial y_3} & 0 & 0 & \cdots & \frac{\partial N^m}{\partial y_3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial y_3} & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial N^m}{\partial y_3} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\partial N^1}{\partial y_3} & \cdots & 0 & 0 & \frac{\partial N^m}{\partial y_3} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} v_1^{\dagger 1} \\ v_2^{\dagger 1} \\ v_3^{\dagger 1} \\ \vdots \\ v_1^{\dagger m} \\ v_2^{\dagger m} \\ v_3^{\dagger m} \end{Bmatrix} \quad (8.8)$$

また, これらを次式のようにまとめて表記する.

$$\{\mathbf{L}^0\} = [\mathbf{B}_L^0]\{\mathbf{v}^{0^i}\} \quad (8.9)$$

$$\{\mathbf{L}^\dagger\} = [\mathbf{B}_L]\{\mathbf{v}^{\dagger i}\} \quad (8.10)$$

ここで, $[\mathbf{B}_L^0]$ および $[\mathbf{B}_L]$ は要素節点変位速度と要素内速度こう配を関連づけるマトリックスである. 式 (8.9) および式 (8.10) を用いてそれぞれマクロ速度こう配およびじょう乱速度こう配を離散化する. なお, 式 (8.9) および式 (8.10) のような離散化は仮想量についても同様の関係が成り立つものとする.

8.1.3 変形速度の離散化マトリックス

いま, 変形速度の独立な 6 成分は速度こう配を用いて, それぞれ,

$$\begin{aligned} D_{11}^0 &= L_{11}^0, & D_{22}^0 &= L_{22}^0, & D_{33}^0 &= L_{33}^0, \\ 2D_{12}^0 &= L_{12}^0 + L_{21}^0, & 2D_{23}^0 &= L_{23}^0 + L_{32}^0, & 2D_{31}^0 &= L_{31}^0 + L_{13}^0 \end{aligned} \quad (8.11)$$

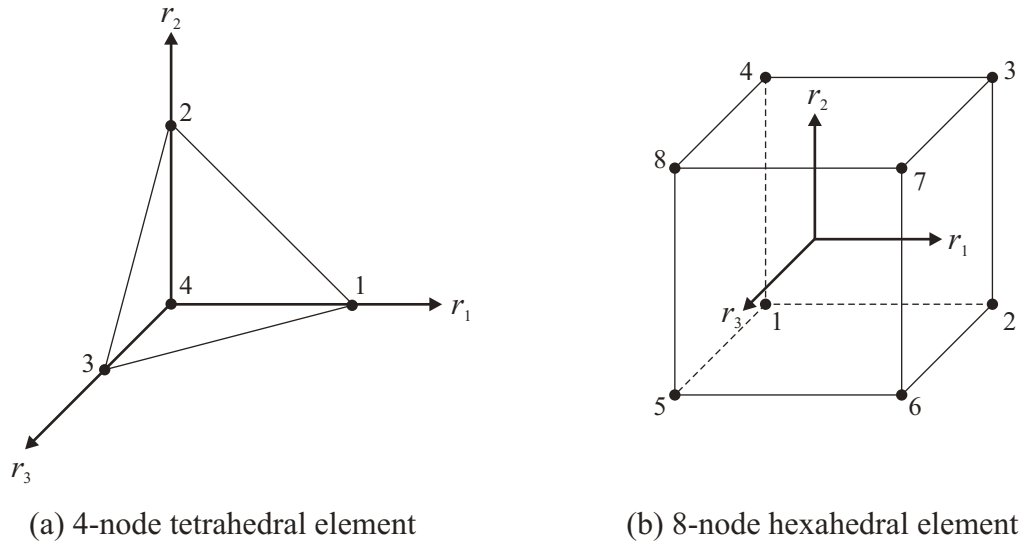


Fig. 8.1 Three-dimensional solid elements.

すれば、その節点での形状関数の値のみが1となり、他の節点の形状関数の値は零となる。以上の性質を満たす関数を構築する際の利便性および後述する数値積分への適用性という観点から、一般的に形状関数は実際に有限要素が作成されている物理座標系ではなく、自然座標系と呼ばれる正規化座標系で定義される。このとき、物理座標系における要素内の任意の点は1対1に対応する自然座標系のある点へと写像されることになる。なお、正規化座標系への写像については8.3節で述べる。

本研究では図8.1に示すような4節点四面体要素および8節点六面体要素を三次元解析に用いる。4節点四面体要素の形状関数は自然座標系 r_i を用いて次式のように定義される⁽¹³⁰⁾。

$$\left. \begin{aligned} N^{01} &= r_1 \\ N^{02} &= r_2 \\ N^{03} &= r_3 \\ N^{04} &= 1 - r_1 - r_2 - r_3 \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (8.17)$$

一方、8節点六面体の形状関数は次式で与えられる。

$$\left. \begin{aligned} N^{01} &= \frac{1}{8}(1 - r_1)(1 - r_2)(1 - r_3) & N^{05} &= \frac{1}{8}(1 - r_1)(1 - r_2)(1 + r_3) \\ N^{02} &= \frac{1}{8}(1 + r_1)(1 - r_2)(1 - r_3) & N^{06} &= \frac{1}{8}(1 + r_1)(1 - r_2)(1 + r_3) \\ N^{03} &= \frac{1}{8}(1 - r_1)(1 + r_2)(1 - r_3) & N^{07} &= \frac{1}{8}(1 + r_1)(1 + r_2)(1 + r_3) \\ N^{04} &= \frac{1}{8}(1 - r_1)(1 + r_2)(1 - r_3) & N^{08} &= \frac{1}{8}(1 - r_1)(1 + r_2)(1 + r_3) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (8.18)$$

ただし、マイクロ構造の要素として用いる場合には式(8.17)および式(8.18)の N^{0l} を N^l に置き換えるものとする。

8.1.5 物理座標系における形状関数の微分

式(8.7), (8.8), (8.13) および式(8.14)の離散化マトリックスを構築するには形状関数の物理座標系での微分値が必要となる。しかしながら、8.1.4項で自然座標系 r_i を用いて形状関数を定義したため、形状関数の物

要素座標系での微分を直接実行することはできない。一方、形状関数の自然座標系での微分は容易に実行できるため、これを利用して形状関数の物理座標系での微分を計算する方法を考える。なお、以下ではマクロ座標系での微分を例に計算手法を記述する。ミクロ座標系での微分を計算する場合には以下の式の N^{0l} を N^l に、 x_i を y_i に置き換えて考える。まず、微分の鎖則を用いれば、形状関数の自然座標系での微分が次式のように表記できる。

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_1} \\ \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_2} \\ \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_3} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial r_1} & \frac{\partial x_2}{\partial r_1} & \frac{\partial x_3}{\partial r_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial r_2} & \frac{\partial x_2}{\partial r_2} & \frac{\partial x_3}{\partial r_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial r_3} & \frac{\partial x_2}{\partial r_3} & \frac{\partial x_3}{\partial r_3} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial N^{0l}}{\partial x_1} \\ \frac{\partial N^{0l}}{\partial x_2} \\ \frac{\partial N^{0l}}{\partial x_3} \end{pmatrix} \dots \dots \dots (8.19)$$

要素内の任意点での座標が形状関数を用いて $x_i = \sum_I N^{0l} x_i^l$ のように書けることを考慮すれば、式 (8.19) より形状関数の物理座標系での微分は次式のように計算できる [補足 H.3].

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \frac{\partial N^{0l}}{\partial x_1} \\ \frac{\partial N^{0l}}{\partial x_2} \\ \frac{\partial N^{0l}}{\partial x_3} \end{pmatrix} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial r_1} & \frac{\partial x_2}{\partial r_1} & \frac{\partial x_3}{\partial r_1} \\ \frac{\partial x_1}{\partial r_2} & \frac{\partial x_2}{\partial r_2} & \frac{\partial x_3}{\partial r_2} \\ \frac{\partial x_1}{\partial r_3} & \frac{\partial x_2}{\partial r_3} & \frac{\partial x_3}{\partial r_3} \end{bmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_1} \\ \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_2} \\ \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_3} \end{pmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \sum_I \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_1} x_1^l & \sum_I \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_1} x_2^l & \sum_I \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_1} x_3^l \\ \sum_I \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_2} x_1^l & \sum_I \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_2} x_2^l & \sum_I \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_2} x_3^l \\ \sum_I \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_3} x_1^l & \sum_I \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_3} x_2^l & \sum_I \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_3} x_3^l \end{bmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_1} \\ \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_2} \\ \frac{\partial N^{0l}}{\partial r_3} \end{pmatrix} \dots \dots \dots (8.20) \end{aligned}$$

式 (8.20) によって算出された形状関数の微分値を式 (8.7) および式 (8.13) に適用すれば、微分操作を含む離散化マトリックスを作成することができる。

8.2 支配方程式の離散化

8.2.1 構成式のマトリックス表示

支配方程式を直接マトリックス表示にする前に、まず構成式をマトリックス表示する。Cauchy 応力の Jaumann 速度 $\overset{\circ}{\mathbf{T}}$ および変形速度 \mathbf{D} の対称性を考慮すれば、式 (7.1) のミクロ構造の構成式は次式のようにマトリックス表記することができる。

$$\begin{pmatrix} \overset{\circ}{T}_{11} \\ \overset{\circ}{T}_{22} \\ \overset{\circ}{T}_{33} \\ \overset{\circ}{T}_{12} \\ \overset{\circ}{T}_{23} \\ \overset{\circ}{T}_{31} \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111}^L & C_{1122}^L & C_{1133}^L & C_{1112}^L & C_{1123}^L & C_{1131}^L \\ C_{2211}^L & C_{2222}^L & C_{2233}^L & C_{2212}^L & C_{2223}^L & C_{2231}^L \\ C_{3311}^L & C_{3322}^L & C_{3333}^L & C_{3312}^L & C_{3323}^L & C_{3331}^L \\ C_{1211}^L & C_{1222}^L & C_{1233}^L & C_{1212}^L & C_{1223}^L & C_{1231}^L \\ C_{2311}^L & C_{2322}^L & C_{2333}^L & C_{2312}^L & C_{2323}^L & C_{2331}^L \\ C_{3111}^L & C_{3122}^L & C_{3133}^L & C_{3112}^L & C_{3123}^L & C_{3131}^L \end{bmatrix} \begin{pmatrix} D_{11} \\ D_{22} \\ D_{33} \\ 2D_{12} \\ 2D_{23} \\ 2D_{31} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} R_{11}^L \\ R_{22}^L \\ R_{33}^L \\ R_{12}^L \\ R_{23}^L \\ R_{31}^L \end{pmatrix} \dots \dots \dots (8.21)$$

式 (8.21) をまとめて表わせば,

$$\{\dot{T}\} = [C^L]\{D\} - \{R^L\} \dots\dots\dots (8.22)$$

となる. ここで, 変形速度ベクトル $\{D\}$ のせん断成分についてはテンソル成分の 2 倍の値, すなわち工学せん断ひずみとなっていることに注意されたい. また, 構成則マトリックス $[C^L]$ は構成則テンソルに $C^L_{ijkl} = C^L_{klij}$ という対称性が成り立つ場合には対称マトリックスとなる.

8.2.2 ミクロ構造の支配方程式の離散化

いま, ミクロ構造のじょう乱変位速度を決定する支配方程式 [式 (7.20)] をもとの方程式と等価になるようにマトリックス表示すれば次式が得られる.

$$\int_y [\{\dot{D}^\dagger\}^T ([C^L] - [T_D]) \{D^\dagger\} + \{\dot{L}^\dagger\}^T [T_L] \{L^\dagger\}] dy = - \int_y \{\dot{D}^\dagger\}^T ([C^L] - [T_D]) dy \{D^0\} + \int_y \{\dot{D}^\dagger\}^T \{R^L\} dy \dots\dots\dots (8.23)$$

ただし, 本来の手順に則れば式 (8.23) のようなマトリックス表示された支配方程式は, マトリックス表示された速度形仮想仕事の原理に対して式 (8.21) のようなマトリックス表示の構成式を代入することで得られることに注意されたい. なお, その場合には, 7 章の定式化を全てマトリックス表示で行う必要がある. また, 式 (8.23) の幾何学非線形問題に特有の応力マトリックス $[T_D]$ および $[T_L]$ はそれぞれ次式のように表わされる.

$$[T_D] \equiv \begin{bmatrix} 2T_{11} & 0 & 0 & T_{12} & 0 & T_{31} \\ 0 & 2T_{22} & 0 & T_{12} & T_{23} & 0 \\ 0 & 0 & 2T_{33} & 0 & T_{23} & T_{31} \\ T_{12} & T_{12} & 0 & \frac{1}{2}(T_{11} + T_{22}) & \frac{1}{2}T_{31} & \frac{1}{2}T_{23} \\ 0 & T_{23} & T_{23} & \frac{1}{2}T_{31} & \frac{1}{2}(T_{22} + T_{33}) & \frac{1}{2}T_{12} \\ T_{31} & 0 & T_{31} & \frac{1}{2}T_{23} & \frac{1}{2}T_{12} & \frac{1}{2}(T_{33} + T_{11}) \end{bmatrix} \dots\dots\dots (8.24)$$

$$[T_L] \equiv \begin{bmatrix} T_{11} & 0 & 0 & T_{12} & 0 & 0 & T_{31} & 0 & 0 \\ 0 & T_{11} & 0 & 0 & T_{12} & 0 & 0 & T_{31} & 0 \\ 0 & 0 & T_{11} & 0 & 0 & T_{12} & 0 & 0 & T_{31} \\ T_{12} & 0 & 0 & T_{22} & 0 & 0 & T_{23} & 0 & 0 \\ 0 & T_{12} & 0 & 0 & T_{22} & 0 & 0 & T_{23} & 0 \\ 0 & 0 & T_{12} & 0 & 0 & T_{22} & 0 & 0 & T_{23} \\ T_{31} & 0 & 0 & T_{23} & 0 & 0 & T_{33} & 0 & 0 \\ 0 & T_{31} & 0 & 0 & T_{23} & 0 & 0 & T_{33} & 0 \\ 0 & 0 & T_{31} & 0 & 0 & T_{23} & 0 & 0 & T_{33} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (8.25)$$

ここで, $[T_D]$ および $[T_L]$ はそれぞれ対称マトリックスである.

次に、式 (8.5), (8.10) および式 (8.16) を用いて式 (8.23) の幾何学量および仮想量を離散化すれば、ユニットセルの有限要素法の支配方程式である要素剛性方程式が次式のように得られる。

$$\int_{y^e} \left[[\mathbf{B}_D]^T ([\mathbf{C}^L] - [\mathbf{T}_D]) [\mathbf{B}_D] + [\mathbf{B}_L]^T [\mathbf{T}_L] [\mathbf{B}_L] \right] dy \{v^\dagger\} = - \int_{y^e} [\mathbf{B}_D]^T ([\mathbf{C}^L] - [\mathbf{T}_D]) dy \{D^0\} + \int_{y^e} [\mathbf{B}_D]^T \{R^L\} dy \dots \dots \dots (8.26)$$

また、離散化処理を行ったことにより、式 (8.23) の検査体積 \mathcal{V} を式 (8.26) では要素の体積 \mathcal{Y}^e に対応させている。さらに、式 (8.26) を次式のようにまとめて表記する。

$$[k_e] \{v^\dagger\} = -[p] \{D^0\} + \{q\} \dots \dots \dots (8.27)$$

ここで、 $[k_e]$ はマイクロ構造の要素剛性マトリックスであり、 $[p]$ はマクロ変形速度によって生じるユニットセル内節点力の係数マトリックス、 $\{q\}$ はマクロ変形速度に依存しないユニットセル内の節点力速度を表す。また、これらは次式のように表わされる。

$$[k_e] \equiv \int_{y^e} \left[[\mathbf{B}_D]^T ([\mathbf{C}^L] - [\mathbf{T}_D]) [\mathbf{B}_D] + [\mathbf{B}_L]^T [\mathbf{T}_L] [\mathbf{B}_L] \right] dy \dots \dots \dots (8.28)$$

$$[p] \equiv \int_{y^e} [\mathbf{B}_D]^T ([\mathbf{C}^L] - [\mathbf{T}_D]) dy \dots \dots \dots (8.29)$$

$$\{q\} \equiv \int_{y^e} [\mathbf{B}_D]^T \{R^L\} dy \dots \dots \dots (8.30)$$

一方、式 (7.21) のように特性速度を用いた形で表わされるじょう乱速度 v^\dagger をマトリックス表示にすることを考える。その際、要素内の任意点でのじょう乱速度ではなく、離散化された節点 I のじょう乱速度についてマトリックス表示するものとすれば、式 (7.21) が次式のように書き改められる。

$$\{v^\dagger\} = -[\chi^I] \{D^0\} + \{\phi^I\} \dots \dots \dots (8.31)$$

$$[\chi^I] \equiv \begin{bmatrix} \chi_1^{11} & \chi_1^{22} & \chi_1^{33} & \chi_1^{12} & \chi_1^{23} & \chi_1^{31} \\ \chi_2^{11} & \chi_2^{22} & \chi_2^{33} & \chi_2^{12} & \chi_2^{23} & \chi_2^{31} \\ \chi_3^{11} & \chi_3^{22} & \chi_3^{33} & \chi_3^{12} & \chi_3^{23} & \chi_3^{31} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \chi_1^{1m} & \chi_1^{2m} & \chi_1^{3m} & \chi_1^{12m} & \chi_1^{23m} & \chi_1^{31m} \\ \chi_2^{1m} & \chi_2^{2m} & \chi_2^{3m} & \chi_2^{12m} & \chi_2^{23m} & \chi_2^{31m} \\ \chi_3^{1m} & \chi_3^{2m} & \chi_3^{3m} & \chi_3^{12m} & \chi_3^{23m} & \chi_3^{31m} \end{bmatrix}, \quad \{\phi^I\} \equiv \begin{Bmatrix} \phi_1^1 \\ \phi_2^1 \\ \phi_3^1 \\ \vdots \\ \phi_1^m \\ \phi_2^m \\ \phi_3^m \end{Bmatrix} \dots \dots \dots (8.32)$$

式 (8.31) を式 (8.27) に代入するとともに時間についての離散化に Euler 陽解法 [補足 H.1] を適用して増分表記にすれば、

$$-[k_e][\chi^I] \{D^0 \Delta t\} + [k_e] \{\phi^I \Delta t\} = -[p] \{D^0 \Delta t\} + \{q \Delta t\} \dots \dots \dots (8.33)$$

を得る。式 (8.33) から特性速度マトリックスを求めるための要素剛性方程式がそれぞれ、

$$[k_e][\chi^I] = [p], \quad [k_e] \{\phi^I \Delta t\} = \{q \Delta t\} \dots \dots \dots (8.34)$$

のように得られる。最後に、式 (8.34) をユニットセル全体の要素について重ね合わせれば、全ての節点についての特性速度を決定するためのユニットセルの全体剛性方程式が次式のように得られる。

$$[\mathbf{K}_V][\mathbf{X}^I] = [\mathbf{P}], \quad [\mathbf{K}_V]\{\Phi^I \Delta t\} = \{\mathbf{Q} \Delta t\} \dots \dots \dots (8.35)$$

ここで、 $[\mathbf{K}_V]$ はユニットセルの全体接線剛性マトリクスである。また、 $[\mathbf{X}^I]$ および $\{\Phi^I\}$ はユニットセルの全節点に関する特性速度であり、全体節点番号について 1 からユニットセル全体の節点数 M まで各特性速度を並べた形式となっている。 $[\mathbf{P}]$ および $\{\mathbf{Q}\}$ はユニットセルの全要素について重ね合わせた $[\mathbf{p}]$ および $\{\mathbf{q}\}$ である。式 (8.35) を周期境界条件の下で解くことによって、ユニットセルの各節点の特性速度 $[\mathbf{X}^I]$ および $\{\Phi^I\}$ が得られる。

8.2.3 マクロ構造の支配方程式の離散化

まず、マクロ構造の支配方程式 [式 (7.23)] を元の方程式と等価になるようマトリクス表示にすれば次式が得られる。

$$\int_V [\{\check{\mathbf{D}}^0\}^T ([\mathbf{C}^H] - [\mathbf{T}_D^H]) \{\mathbf{D}^0\} + \{\check{\mathbf{L}}^0\}^T [\mathbf{T}_L^H] \{\mathbf{L}^0\}] dv \\ = \oint_{\mathcal{A}} \{\check{\mathbf{v}}^0\}^T \{\dot{\mathbf{t}}\} da + \int_V \{\check{\mathbf{v}}^0\}^T \{\mathbf{f}\} \rho dv + \int_V \{\check{\mathbf{D}}^0\}^T \{\mathbf{R}^H\} dv \dots \dots \dots (8.36)$$

ここで、幾何学的非線形問題に特有の応力マトリクス $[\mathbf{T}_D^H]$ および $[\mathbf{T}_L^H]$ はそれぞれ次式のように表わされる。

$$[\mathbf{T}_D^H] \equiv \begin{bmatrix} 2T_{11}^H & 0 & 0 & T_{12}^H & 0 & T_{31}^H \\ 0 & 2T_{22}^H & 0 & T_{12}^H & T_{23}^H & 0 \\ 0 & 0 & 2T_{33}^H & 0 & T_{23}^H & T_{31}^H \\ T_{12}^H & T_{12}^H & 0 & \frac{1}{2}(T_{11}^H + T_{22}^H) & \frac{1}{2}T_{31}^H & \frac{1}{2}T_{23}^H \\ 0 & T_{23}^H & T_{23}^H & \frac{1}{2}T_{31}^H & \frac{1}{2}(T_{22}^H + T_{33}^H) & \frac{1}{2}T_{12}^H \\ T_{31}^H & 0 & T_{31}^H & \frac{1}{2}T_{23}^H & \frac{1}{2}T_{12}^H & \frac{1}{2}(T_{33}^H + T_{11}^H) \end{bmatrix} \dots \dots \dots (8.37)$$

$$[\mathbf{T}_L^H] \equiv \begin{bmatrix} T_{11}^H & 0 & 0 & T_{12}^H & 0 & 0 & T_{31}^H & 0 & 0 \\ 0 & T_{11}^H & 0 & 0 & T_{12}^H & 0 & 0 & T_{31}^H & 0 \\ 0 & 0 & T_{11}^H & 0 & 0 & T_{12}^H & 0 & 0 & T_{31}^H \\ T_{12}^H & 0 & 0 & T_{22}^H & 0 & 0 & T_{23}^H & 0 & 0 \\ 0 & T_{12}^H & 0 & 0 & T_{22}^H & 0 & 0 & T_{23}^H & 0 \\ 0 & 0 & T_{12}^H & 0 & 0 & T_{22}^H & 0 & 0 & T_{23}^H \\ T_{31}^H & 0 & 0 & T_{23}^H & 0 & 0 & T_{33}^H & 0 & 0 \\ 0 & T_{31}^H & 0 & 0 & T_{23}^H & 0 & 0 & T_{33}^H & 0 \\ 0 & 0 & T_{31}^H & 0 & 0 & T_{23}^H & 0 & 0 & T_{33}^H \end{bmatrix} \dots \dots \dots (8.38)$$

ここで、 $[\mathbf{T}_D^H]$ および $[\mathbf{T}_L^H]$ はそれぞれ対称マトリクスである。また、 $[\mathbf{C}^H]$ および $\{\mathbf{R}^H\}$ の成分の具体形およびその計算方法については 8.2.4 項で述べる。

次に、式 (8.4), (8.9) および式 (8.15) を用いて式 (8.36) の幾何学量および仮想量を離散化するとともに Euler 陽解法によってそれぞれの速度を増分表記すれば、マクロ構造の有限要素法の支配方程式である要素剛性方程式が次式のように得られる。

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{V}^E} \left[[\mathbf{B}_D^0]^T ([\mathbf{C}^H] - [\mathbf{T}_D^H]) [\mathbf{B}_D^0] + [\mathbf{B}_L^0]^T [\mathbf{T}_L^H] [\mathbf{B}_L^0] \right] dv \{ \Delta \mathbf{u}^{0l} \} \\ = \oint_{\mathcal{A}^E} [\mathbf{N}^0]^T \{ \Delta \mathbf{t}^{(n)} \} da + \int_{\mathcal{V}^E} [\mathbf{N}^0]^T \{ \Delta \mathbf{f} \} \rho dv + \int_{\mathcal{V}^E} [\mathbf{B}_D^0]^T \{ \mathbf{R}^H \Delta t \} dv \dots \end{aligned} \quad (8.39)$$

ここで、 $\{ \Delta \mathbf{u}^{0l} \} = \{ \mathbf{v}^{0l} \Delta t \}$, $\{ \Delta \mathbf{t}^{(n)} \} = \{ \dot{\mathbf{t}}^{(n)} \Delta t \}$ および $\{ \Delta \mathbf{f} \} = \{ \dot{\mathbf{f}} \Delta t \}$ である。また、離散化処理を行ったことにより、式 (8.36) の検査体積 \mathcal{V} およびその表面積 \mathcal{A} を式 (8.39) では要素の体積 \mathcal{V}^E およびその表面積 \mathcal{A}^E に対応させている。さらに、一般的に有限要素法においては式 (8.39) を次式のようにまとめて表記する。

$$[\mathbf{k}_E] \{ \Delta \mathbf{u}^{0l} \} = \{ \Delta \bar{\mathbf{f}} \} \dots \dots \dots \quad (8.40)$$

ここで、 $[\mathbf{k}_E]$ はマクロ構造の要素剛性マトリックス、 $\{ \Delta \bar{\mathbf{f}} \}$ は節点力増分ベクトルであり、それぞれ次式のように定義される。

$$[\mathbf{k}_E] \equiv \int_{\mathcal{V}^E} \left[[\mathbf{B}_D^0]^T ([\mathbf{C}^H] - [\mathbf{T}_D^H]) [\mathbf{B}_D^0] + [\mathbf{B}_L^0]^T [\mathbf{T}_L^H] [\mathbf{B}_L^0] \right] dv \dots \dots \dots \quad (8.41)$$

$$\{ \Delta \bar{\mathbf{f}} \} \equiv \{ \Delta \bar{\mathbf{f}}^{\text{ext}} \} + \{ \Delta \bar{\mathbf{f}}^{\text{app}} \} \dots \dots \dots \quad (8.42)$$

$$\{ \Delta \bar{\mathbf{f}}^{\text{ext}} \} \equiv \oint_{\mathcal{A}^E} [\mathbf{N}^0]^T \{ \Delta \mathbf{t}^{(n)} \} da + \int_{\mathcal{V}^E} [\mathbf{N}^0]^T \{ \Delta \mathbf{f} \} \rho dv \dots \dots \dots \quad (8.43)$$

$$\{ \Delta \bar{\mathbf{f}}^{\text{app}} \} \equiv \int_{\mathcal{V}^E} [\mathbf{B}_D^0]^T \{ \mathbf{R}^H \Delta t \} dv \dots \dots \dots \quad (8.44)$$

ここで、 $\{ \Delta \bar{\mathbf{f}}^{\text{ext}} \}$ および $\{ \Delta \bar{\mathbf{f}}^{\text{app}} \}$ はそれぞれ外力による節点力増分および内力に起因する見かけの節点外力の増分を表している。なお、本研究では物体力を無視し、さらに、マクロ構造における境界条件を変位制御で与えるため、実際の数値解析において $\{ \Delta \bar{\mathbf{f}}^{\text{ext}} \}$ は計算しない。最後に、式 (8.40) をマクロ構造全体の要素について重ね合わせれば、次式のような陽解法におけるマクロ構造の全体剛性方程式が得られる。

$$[\mathbf{K}_V] \{ \Delta \mathbf{U}^{0l} \} = \{ \Delta \bar{\mathbf{F}} \} \dots \dots \dots \quad (8.45)$$

ここで、 $[\mathbf{K}_V]$ はマクロ構造全体の接線剛性マトリックスであり、 $\{ \Delta \mathbf{U}^{0l} \}$ および $\{ \Delta \bar{\mathbf{F}} \}$ はそれぞれマクロ構造の全節点の変位増分ベクトルおよび節点力増分ベクトルである。マクロ構造における等価材料定数である $[\mathbf{C}^H]$ および $\{ \mathbf{R}^H \}$ の各成分が既知であれば、式 (8.45) を定められた変位または外力の境界条件下で解くことによって、マクロ構造の節点変位増分を得ることができる。

8.2.4 均質化材料定数の計算式の離散化

前項までにマイクロ剛性方程式からは特性速度マトリックスが、マクロ剛性方程式からはマクロ変位増分が得られることを述べた。しかしながら、実際にマクロ方程式 (8.45) を構築する際にはマクロ構造における等価材料定数、すなわち、均質化材料定数が必要である。したがって、事前にマイクロ構造の材料定数マトリックス [式 (8.21)] およびマイクロ剛性方程式によって得られる特性速度マトリックス [式 (8.32)] を用いて均質化材料定数マトリックス $[\mathbf{C}^H]$ および $\{ \mathbf{R}^H \}$ を計算しておく必要がある。この処理が均質化理論を用いたマイクロ-マクロ連成解析におけるマイクロからマクロへの情報の橋渡しに相当する。いま、均質化材料定数の計算式である式

(7.24) および式 (7.25) をマトリックス表示にするとともに離散化マトリックス $[B_D]$ を用いて特性速度を離散化すればそれぞれ次式のように書ける.

$$[C^H] = \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} [C^L] - ([C^L] - [T_D])[B_D][X^L] dy \dots\dots\dots (8.46)$$

$$\{R^H \Delta t\} = \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} \{R^L \Delta t\} - ([C^L] - [T_D])[B_D]\{\phi^L \Delta t\} dy \dots\dots\dots (8.47)$$

$$[C^H] \equiv \begin{bmatrix} C_{1111}^H & C_{1122}^H & C_{1133}^H & C_{1112}^H & C_{1123}^H & C_{1131}^H \\ C_{2211}^H & C_{2222}^H & C_{2233}^H & C_{2212}^H & C_{2223}^H & C_{2231}^H \\ C_{3311}^H & C_{3322}^H & C_{3333}^H & C_{3312}^H & C_{3323}^H & C_{3331}^H \\ C_{1211}^H & C_{1222}^H & C_{1233}^H & C_{1212}^H & C_{1223}^H & C_{1231}^H \\ C_{2311}^H & C_{2322}^H & C_{2333}^H & C_{2312}^H & C_{2323}^H & C_{2331}^H \\ C_{3111}^H & C_{3122}^H & C_{3133}^H & C_{3112}^H & C_{3123}^H & C_{3131}^H \end{bmatrix}, \quad \{R^H\} \equiv \begin{Bmatrix} R_{11}^H \\ R_{22}^H \\ R_{33}^H \\ R_{12}^H \\ R_{23}^H \\ R_{31}^H \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (8.48)$$

ただし, 式 (8.46) および式 (8.47) の積分領域はマイクロ要素の体積 \mathcal{Y}^e ではなく, ユニットセルの全領域 \mathcal{Y} であることに注意されたい. また, 数値解析上見かけの応力速度項は増分量として保持する方が便利のため, 式 (8.47) についても増分表記としている.

8.2.5 局所化問題の離散化

マクロ剛性方程式を解いて得られたマクロ変位増分からマクロ変形速度が算出される. 得られたマクロ変形速度を局所化問題に適用すれば, ユニットセル内の変形状態が更新され, さらに, ミクロ構成式を用いてミクロ応力を更新できる. このユニットセルの変形状態の更新, すなわち, 局所化処理がミクロ-マクロ連成解析におけるマクロからミクロへの情報の橋渡しに相当する. いま, 式 (7.29) を要素内の任意点での値ではなく, 離散化された節点 I での値としてマトリックス表記にするとともに増分表記すれば,

$$\{\Delta U^I\} = [Y]\{D^0 \Delta t\} - [X^I]\{D^0 \Delta t\} + \{\Phi^I \Delta t\} \\ = ([Y] - [X^I])\{D^0 \Delta t\} + \{\Phi^I \Delta t\} \dots\dots\dots (8.49)$$

$$\{\Delta U^I\} \equiv \begin{Bmatrix} \Delta u_1^I \\ \Delta u_2^I \\ \Delta u_3^I \\ \vdots \\ \Delta u_1^M \\ \Delta u_2^M \\ \Delta u_3^M \end{Bmatrix}, \quad [Y] \equiv \begin{bmatrix} y_1^I & 0 & 0 & \frac{1}{2}y_2^I & 0 & \frac{1}{2}y_3^I \\ 0 & y_2^I & 0 & \frac{1}{2}y_1^I & \frac{1}{2}y_3^I & 0 \\ 0 & 0 & y_3^I & 0 & \frac{1}{2}y_2^I & \frac{1}{2}y_1^I \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ y_1^M & 0 & 0 & \frac{1}{2}y_2^M & 0 & \frac{1}{2}y_3^M \\ 0 & y_2^M & 0 & \frac{1}{2}y_1^M & \frac{1}{2}y_3^M & 0 \\ 0 & 0 & y_3^M & 0 & \frac{1}{2}y_2^M & \frac{1}{2}y_1^M \end{bmatrix} \dots\dots\dots (8.50)$$

が得られる. ここで, M はユニットセル内の全節点数である. また, $\Delta u_i^I = v_i^I \Delta t$ である. 式 (8.49) によって算出された $\{\Delta U^I\}$ を式 (7.30) に適用すれば, マクロ構造の評価点近傍の回転に伴うユニットセルの回転も考慮したユニットセル内の新しい節点座標が得られる.

8.3 領域積分の数値積分手法

実際の数値解析では要素剛性方程式 [式 (8.26) および式 (8.39)] や均質化材料定数の計算式 [式 (8.46) および式 (8.47)] に含まれるような定積分を直接実行できない。そこで、一般的に数値解析の積分計算には、近似計算手法である数値積分が用いられる。ここで、数値積分を実行するという事は被積分関数のある評価点における関数値にその点での重みを乗じた値を全ての評価点について足し合わせることに他ならない。すなわち、次式のように書ける。

$$\int_{x_A}^{x_B} f(x)dx = \sum_{i=1}^{n_{int}} w^i f(x^i) \dots\dots\dots (8.51)$$

このときの評価点の数 n_{int} 、座標 x^i および重み w^i は採用する数値積分手法によって決定される。そのような数値積分手法の代表的な例として評価点の座標が等間隔に配置される Newton-Cotes 積分⁽¹³¹⁾ が挙げられるが、有限要素法の領域積分に対しては、通常、不等間隔の評価点をもつ Gauss 積分 [補足 H.4] が採用される。Gauss 積分は Newton-Cotes 積分と比較して同程度の積分精度を得るために必要な積分点の数が少なく、計算負荷を軽減できるという利点がある。ただし、Gauss 積分では積分点座標が要素内部に固定されているため、要素表面や節点上の値を評価したい場合には積分点座標を任意に設定できる Newton-Cotes 積分がしばしば用いられる。

一方、図 8.2 は 4 節点四角形要素を例に物理座標系から自然座標系への積分領域の写像を表わしたものである。図 8.2 のように積分領域を自然座標系のような正規化された座標系に写像すれば、要素の大きさや変形状態に依らず、評価点の座標および重みが常に一定値となり、数値積分の画一的な取り扱いが可能である。加えて、8.1.4 項で述べたように形状関数が自然座標系で定義されていることから有限要素法の数値積分は自然座標系に写像したうえで実行される。以上の操作を領域積分についてまとめると次式のように書ける。

$$\int_{V^E} f(\mathbf{x})dv = \int_{V^r} f(\mathbf{r}) \det \mathbf{J} dv^r = \sum_{i=1}^{n_V} w_V^i f(\mathbf{r}^i) \det \mathbf{J} \dots\dots\dots (8.52)$$

$$\int_{A^E} f(\mathbf{x})da = \int_{A^r} f(\mathbf{r}) \det \mathbf{J} da^r = \sum_{i=1}^{n_A} w_A^i f(\mathbf{r}^i) \det \mathbf{J} \dots\dots\dots (8.53)$$

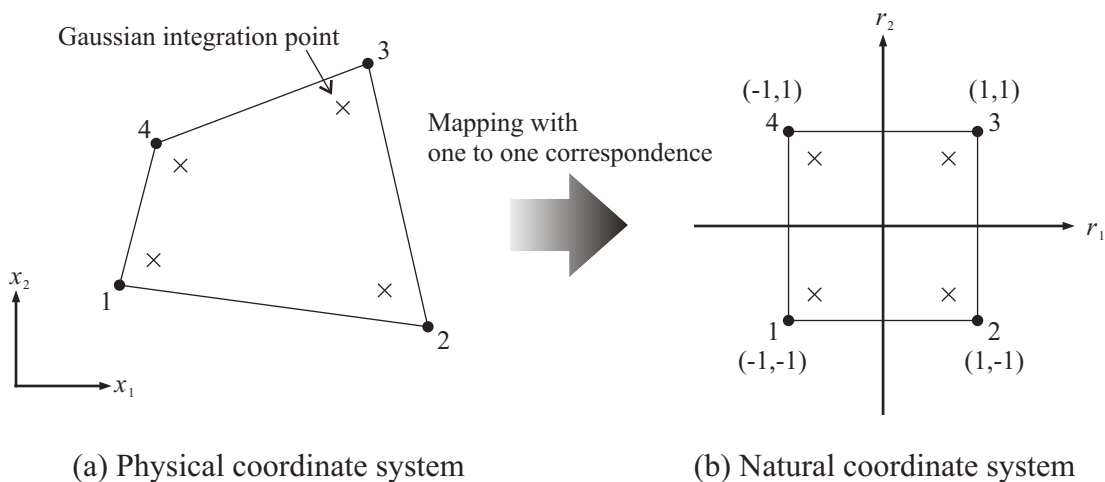


Fig. 8.2 Mapping between physical coordinate system and natural coordinate system.

Table 8.1 Coordinates and weights at sampling points of gaussian integration for three-dimensional solid elements.

(a) 4-node tetrahedral element ($n_V = 1$)				
Sampling point i	Coordinates			Weight
	r_1^i	r_2^i	r_3^i	w_V^i
1	0.25000 00000 00000	0.25000 00000 00000	0.25000 00000 00000	0.16666 66666 66667

(b) 8-node hexahedral element ($n_V = 8$)				
Sampling point i	Coordinates			Weight
	r_1^i	r_2^i	r_3^i	w_V^i
1	-0.57735 02691 89626	-0.57735 02691 89626	-0.57735 02691 89626	1.00000 00000 00000
2	0.57735 02691 89626	-0.57735 02691 89626	-0.57735 02691 89626	1.00000 00000 00000
3	-0.57735 02691 89626	0.57735 02691 89626	-0.57735 02691 89626	1.00000 00000 00000
4	0.57735 02691 89626	0.57735 02691 89626	-0.57735 02691 89626	1.00000 00000 00000
5	-0.57735 02691 89626	-0.57735 02691 89626	0.57735 02691 89626	1.00000 00000 00000
6	0.57735 02691 89626	-0.57735 02691 89626	0.57735 02691 89626	1.00000 00000 00000
7	-0.57735 02691 89626	0.57735 02691 89626	0.57735 02691 89626	1.00000 00000 00000
8	0.57735 02691 89626	0.57735 02691 89626	0.57735 02691 89626	1.00000 00000 00000

ここで、 V^r 、 n_V および w_V^i はそれぞれ自然座標系における要素の体積、体積積分の評価点数および重み係数である。同様に、 A^r 、 n_A および w_A^i はそれぞれ自然座標系における要素の面積、面積積分の評価点数および重み係数である。また、 \mathbf{J} はヤコビ行列であり、三次元問題の場合は次式のように計算できる [補足 H.3].

$$[\mathbf{J}] \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial r_1} & \frac{\partial x_1}{\partial r_2} & \frac{\partial x_1}{\partial r_3} \\ \frac{\partial x_2}{\partial r_1} & \frac{\partial x_2}{\partial r_2} & \frac{\partial x_2}{\partial r_3} \\ \frac{\partial x_3}{\partial r_1} & \frac{\partial x_3}{\partial r_2} & \frac{\partial x_3}{\partial r_3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_I \frac{\partial N^{0I}}{\partial r_1} x_1^I & \sum_I \frac{\partial N^{0I}}{\partial r_2} x_1^I & \sum_I \frac{\partial N^{0I}}{\partial r_3} x_1^I \\ \sum_I \frac{\partial N^{0I}}{\partial r_1} x_2^I & \sum_I \frac{\partial N^{0I}}{\partial r_2} x_2^I & \sum_I \frac{\partial N^{0I}}{\partial r_3} x_2^I \\ \sum_I \frac{\partial N^{0I}}{\partial r_1} x_3^I & \sum_I \frac{\partial N^{0I}}{\partial r_2} x_3^I & \sum_I \frac{\partial N^{0I}}{\partial r_3} x_3^I \end{bmatrix} \dots \dots \dots (8.54)$$

最後に、本研究で用いる 4 節点四面体要素および 8 節点六面体要素の体積積分における Gauss 積分の評価点の座標および重みを表 8.1 に示す [補足 H.4]. なお、本研究では変位制御を用いるため、式 (8.43) の表面力ベクトルの計算は行わず、面積積分を必要としない。式 (8.52) における被積分関数 $f(\mathbf{x})$ を積分対象とする関数に置き換えて用いれば、要素剛性マトリックスなどの数値計算が実行可能になる。また、本節ではマクロ構造の場合について数値積分手法を述べたが、ミクロ構造を対象とする場合にも $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}$ 、 $N^{0I} \rightarrow N^I$ 、 $\mathcal{V}^E \rightarrow \mathcal{Y}^e$ と置き換えることによって同様の議論が可能である。

8.4 内力の計算

8.4.1 内力ベクトルの計算方法

有限要素法によって変形状態を解析することは内力と外力の釣り合いを解くことと等価である。したがって、解析対象に生じる内力は理論上は負荷外力と同値となる。しかしながら、実際には全体剛性方程式 [式 (8.45)] を Euler 陽解法によって解くため、有限の時間増分を設定する数値解析上は内力と外力の釣り合いが厳密に満たされない。よって、変形状態、すなわち、変位 $\Delta \mathbf{u}^0$ に依存した真の内力を得るには剛性方程式の求解後に個別に計算を実施する必要がある。内力には次の 2 つの計算方法がある。まず、式 (8.40) および式 (8.42) を考慮してマクロ構造の全体剛性方程式、すなわち内力と外力の釣り合い式を再度記述すれば、

$$[\mathbf{K}_V]\{\Delta \mathbf{U}^0\} = \{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{ext}}\} + \{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{app}}\} \dots \dots \dots (8.55)$$

のように書ける。見かけの全体外力増分ベクトル $\{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{app}}\}$ は本来内力に寄与するため、 $\{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{app}}\}$ を左辺に移項すれば、

$$[\mathbf{K}_V]\{\Delta \mathbf{U}^0\} - \{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{app}}\} = \{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{ext}}\} \dots \dots \dots (8.56)$$

となり、式 (8.56) の左辺が内力増分ベクトルに相当する。加えて、変形場の解を得た後であれば、 $[\mathbf{K}_V]$ および $\{\Delta \mathbf{U}^0\}$ はいずれも既知であるため、構造全体の内力増分ベクトル $\{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{int}}\}$ が次式のように計算できる。

$$\{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{int}}\} = [\mathbf{K}_V]\{\Delta \mathbf{U}^0\} - \{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{app}}\} \dots \dots \dots (8.57)$$

ただし、実際には全体剛性マトリックス $[\mathbf{K}_V]$ が全自由度の二乗という非常に大規模なマトリックスであるため、使用メモリの節約という観点から式 (8.57) による内力の計算は採用されないことが多い。

そこで、本研究では以下に紹介する応力を用いた内力の計算方法を採用する。まず、ある物質点の内力を $\bar{\mathbf{f}}^{\text{int}}$ とおけば、内力がなす仮想仕事率が $\bar{\mathbf{f}}^{\text{int}} \cdot \dot{\mathbf{v}}^0$ のように書ける。一方、内力のなす仮想仕事率は式 (3.15) によって定義されているため、これらを領域積分することで次式のように書ける。

$$\int_V \bar{\mathbf{f}}^{\text{int}} \cdot \dot{\mathbf{v}}^0 dv = \int_V \mathbf{T}^H \cdot \dot{\mathbf{D}}^0 dv \dots \dots \dots (8.58)$$

ただし、式 (8.58) はマクロ構造の内力がなす仮想仕事率として表記している。さらに、式 (8.58) の左辺を節点量で書き換え、右辺をマトリックス表示にするとともに式 (8.15) を用いて仮想量を離散化すれば、

$$\{\bar{\mathbf{f}}^{\text{int}}\} = \int_{V^E} \{\mathbf{B}_D^0\}^T \{\mathbf{T}^H\} dv \dots \dots \dots (8.59)$$

を得る。ここで、

$$\{\bar{\mathbf{f}}^{\text{int}}\} \equiv \left\{ \bar{\mathbf{f}}_1^{\text{int}^1} \bar{\mathbf{f}}_2^{\text{int}^1} \bar{\mathbf{f}}_3^{\text{int}^1} \cdots \bar{\mathbf{f}}_1^{\text{int}^n} \bar{\mathbf{f}}_2^{\text{int}^n} \bar{\mathbf{f}}_3^{\text{int}^n} \right\}^T \dots \dots \dots (8.60)$$

$$\{\mathbf{T}^H\} \equiv \left\{ T_{11}^H \ T_{22}^H \ T_{33}^H \ T_{12}^H \ T_{23}^H \ T_{31}^H \right\}^T \dots \dots \dots (8.61)$$

である。式 (8.59) によって計算された $\{\bar{\mathbf{f}}^{\text{int}}\}$ を構造全体について重ね合わせれば、構造全体の節点内力ベクトル $\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{int}}\}$ が得られる。以上のようにして計算された内力ベクトルは主に公称応力の計算ならびに残差力の計算に用いられる。なお、ミクロ構造の内力についても式 (8.59) のマクロ量をミクロ量に置き換えることで計算可能である。ただし、本研究ではミクロ構造の内力は特に数値解析に利用しないため、ミクロ内力の計算も行っていない。

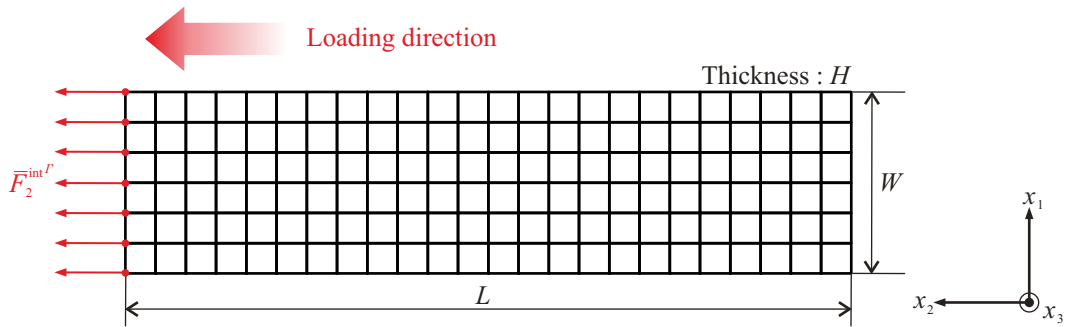


Fig. 8.3 Calculation of nominal stress using internal force at edge of specimen.

8.4.2 公称応力の計算

試験片の単軸負荷試験における公称応力は端面に生じている引張方向への反力を面積分し、これを初期断面積で除することによって得られる。いま、図 8.3 のように有限要素に分割された試験片が x_2 軸方向へ単軸引張負荷を受けている場合には、公称応力 σ_n が内力ベクトル $\{\bar{\mathbf{F}}^{int}\}$ を用いて次式で計算される。

$$\sigma_n = \frac{1}{WH} \sum_{I'} \bar{F}_2^{int'} \dots\dots\dots (8.62)$$

ただし、 I' は試験片端面、すなわち、 $x_2 = L$ の節点の番号を表す。また、 W は試験片の初期横幅、 H は試験片の初期板厚である。式 (8.62) で計算される各時刻の公称応力を公称ひずみに対してプロットすることによって公称応力-公称ひずみ曲線が作成できる。

8.4.3 残差力の計算

8.4.1 項の冒頭で述べたように、陽解法に基づく数値解析では内力と外力が厳密に釣り合いを満たさない。このときの内力と外力の差を残差力または不釣り合い力と呼び、各節点における残差力ベクトルは次式で計算される。

$$\{\bar{\mathbf{F}}^{res}\} = \{\bar{\mathbf{F}}^{ext}\} - \{\bar{\mathbf{F}}^{int}\} \dots\dots\dots (8.63)$$

残差力ベクトル $\{\bar{\mathbf{F}}^{res}\}$ をスカラ化することで釣り合いの厳密性、すなわち、陽解法において用いる時間増分の妥当性を評価できる。また、残差力は非線形有限要素法の解を陰解法的に求める際にも用いられる。

8.5 釣り合い方程式の陰解法的定式化

本節では陽解法に基づく数値解析を実施した際に生じるマクロ構造の内力と外力の不釣り合いを少しでも解消し、陰解法に近づく手法について述べる。まず、陰解法の仮定に基づいて剛性方程式を時刻 $t + \Delta t$ における釣り合い式として表記する。式 (8.56) の剛性方程式の左辺および右辺はそれぞれある時刻 t から $t + \Delta t$ の間の内力増分および外力増分を表している。したがって、時刻 $t + \Delta t$ における内力ベクトルおよび外力ベクトルはそれぞれ、

$${}^{t+\Delta t}\{\bar{\mathbf{F}}^{int}\} = {}^t [K_V] \{\Delta U^{0'}\} - \{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{app}\} + {}^t \{\bar{\mathbf{F}}^{int}\} \dots\dots\dots (8.64)$$

$${}^{t+\Delta t}\{\bar{\mathbf{F}}^{ext}\} = \{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{ext}\} + {}^t \{\bar{\mathbf{F}}^{ext}\} \dots\dots\dots (8.65)$$

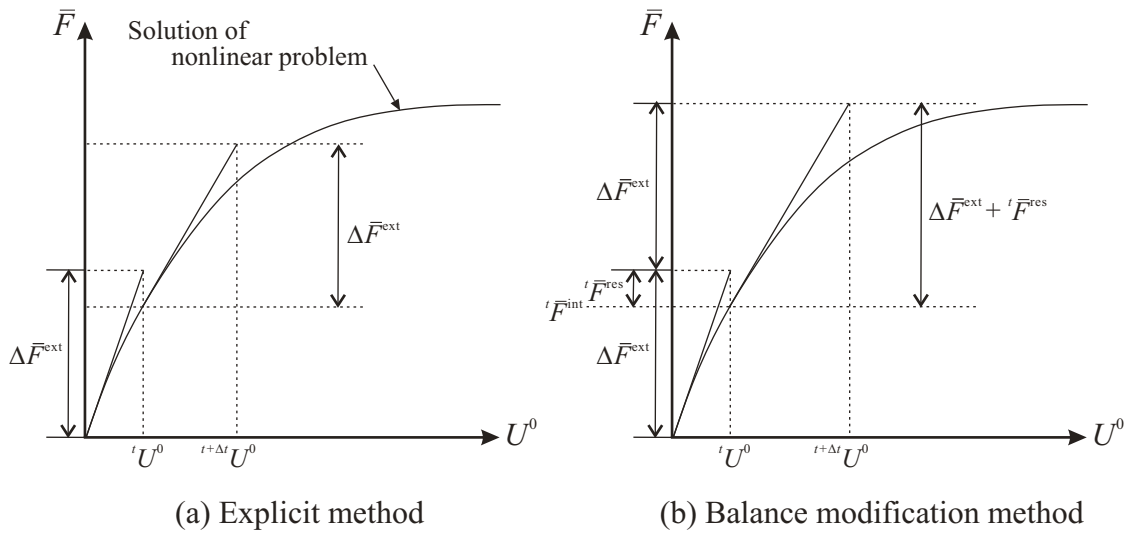


Fig. 8.4 Difference of numerically obtained displacement between explicit method and balance modification method.

となる。ただし、本節では ${}^t(\cdot)$ が時刻 t における量を、 ${}^{t+\Delta t}(\cdot)$ が時刻 $t + \Delta t$ における量を表すものとする。よって、時刻 $t + \Delta t$ における釣合方程式は

$${}^t[\mathbf{K}_V]\{\Delta \mathbf{U}^{0'}\} - \{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{app}}\} + {}^t\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{int}}\} = \{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{ext}}\} + {}^t\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{ext}}\} \dots \dots \dots (8.66)$$

のように書ける。なお、現時刻 t における内力と外力の釣り合いが満たされているという陽解法の仮定に基づけば、 ${}^t\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{int}}\} = {}^t\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{ext}}\}$ が成り立ち、式 (8.66) は増分量同士の釣合方程式 [式 (8.56)] に帰着する。さらに、式 (8.63) の残差力を用いて式 (8.66) を表記するとともに $\{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{app}}\}$ を右辺へ移項すれば次式のように書ける。

$${}^t[\mathbf{K}_V]\{\Delta \mathbf{U}^{0'}\} = \{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{ext}}\} + \{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{app}}\} + {}^t\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{res}}\} \dots \dots \dots (8.67)$$

式 (8.67) は陽解法で用いていた剛性方程式 [式 (8.45) または式 (8.55)] の右辺に残差力ベクトル ${}^t\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{res}}\}$ による補正が付加された形となっている。ここで、一変数問題を例に陽解法および式 (8.67) を用いた場合に得られる解の違いを図 8.4 に示す。同図から式 (8.67) を用いることによって、現時刻 t までに生じた残差力を考慮に入れた時刻 $t + \Delta t$ の変位ベクトルが得られることがわかる。また、このような有限要素法の半陰解法的解法を釣合い修正法と呼ぶ。本解法は陽解法を用いて解析する場合と比較して計算コストおよび使用メモリが残差力ベクトル ${}^t\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{res}}\}$ による補正分しか増加しないため、本研究のように均質化法を用いる大規模解析において有効な解法である。なお、図 8.4(b) からわかるように釣合い修正法を用いた場合でも内力と外力の釣り合いを完全に満たすことはできない。時刻 $t + \Delta t$ での釣り合いをさらに厳密に満たし、完全に陰解法とするには Newton-Rapson 法 [H.2] などを用いて収束計算を実行する必要がある。最後に、本研究で実施する変位制御の場合には外力が零となるため、式 (8.67) は次式のように書き換えられる。

$${}^t[\mathbf{K}_V]\{\Delta \mathbf{U}^{0'}\} = \{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{app}}\} - {}^t\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{int}}\} \dots \dots \dots (8.68)$$

式 (8.68) を実際の数値解析におけるマクロ構造の支配方程式として用いる。

8.6 平面要素を用いた離散定式化

有限要素法において三次元ソリッド要素ではなく，平面要素を用いた場合には大きく分けて平面ひずみ条件，平面応力条件および軸対称条件の3種類の解析を実施可能である．本節では $y_1 \sim y_3$ 方向の全ての方向に周期性を仮定する通常の均質化法に対して適合する平面ひずみ条件での各マトリックスの縮約について述べる．ただし，本節ではマイクロおよびマクロ構造がともに平面ひずみ条件の場合について定式化を行う．マイクロ構造が三次元構造であれば，マクロ構造のみを平面ひずみ条件または平面応力条件 [補足 H.7] とした解析を実施することも可能である．なお，以下の平面要素を用いた定式化では面外スピンのみが零，すなわち， $W_{23} = W_{31} = 0$ であるとする [補足 H.6].

8.6.1 3 節点三角形要素の形状関数

本研究では平面ひずみ条件における解析に原則として3節点三角形要素を用いる [補足 H.8]. 3節点三角形要素の物理座標系における形状関数 N^{0I} は次式で与えられる．

$$\left. \begin{aligned} N^{01} &= \frac{1}{2S^0} \left[(x_1^2 x_2^3 - x_1^3 x_2^2) + (x_2^2 - x_2^3)x_1 + (x_1^3 - x_1^2)x_2 \right] \\ N^{02} &= \frac{1}{2S^0} \left[(x_1^3 x_2^1 - x_1^1 x_2^3) + (x_2^3 - x_2^1)x_1 + (x_1^1 - x_1^3)x_2 \right] \\ N^{03} &= \frac{1}{2S^0} \left[(x_1^1 x_2^2 - x_1^2 x_2^1) + (x_2^1 - x_2^2)x_1 + (x_1^2 - x_1^1)x_2 \right] \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (8.69)$$

ここで， S^0 は三角形要素の面積を表し，次式で表される．

$$2S^0 = x_1^1 x_2^2 - x_1^2 x_2^1 + x_1^2 x_2^3 - x_1^3 x_2^2 + x_1^3 x_2^1 - x_1^1 x_2^3 - x_1^2 x_2^1 - x_1^3 x_2^2 \dots\dots\dots (8.70)$$

なお，式 (8.69) からわかるように，3節点三角形要素の形状関数は各座標成分に対して1次の関数であり，各座標での微分値が定数となる．したがって，3節点三角形要素を用いて内挿されたひずみは要素内のどの点においても一定値となる．このような性質から3節点三角形要素は三角形定ひずみ要素とも呼ばれる．定ひずみ要素を用いた場合には剛性方程式などの計算で必要となる領域積分は8.3節に示した Gauss 積分を用いずとも，その要素の体積または面積を被積分関数に乗じるだけで実行可能である．そのため，3節点三角形要素を用いる場合は物理座標系から自然座標系の写像を行わず，また，形状関数も式 (8.69) に示したように物理座標系で定義している．なお，3節点三角形要素をマイクロ構造の要素として用いる場合は，式 (8.69) および式 (8.70) において $N^{0I} \rightarrow N^I$ ， $x_i \rightarrow y_i$ ， $S^0 \rightarrow S$ と置き換えればよい．また，三角形要素は格子状の要素分割が可能な場合には図 8.5 に示すような四角形領域を対角線で4つの三角形に分割した Crossed Trinagles(CT) 形式で多く用いられる．本研究においてもマクロ構造の二次元要素分割としては CT 形式を採用する．

8.6.2 平面要素を用いた場合の体積積分

平面要素を用いた場合は，式 (8.52) に示した体積積分を直接実行することはできない．ただし，平面ひずみ条件または平面応力条件を用いた場合，数値解析上は各要素について有限の幅の初期板厚を設定することになる．したがって，簡単化のため，各要素の板厚 H^E が要素内で均一であると仮定すれば，平面要素を用いた場合の体積積分を

$$\int_{V^E} f(\mathbf{x}) dv = H^E \int_{A^E} f(\mathbf{x}) da \dots\dots\dots (8.71)$$

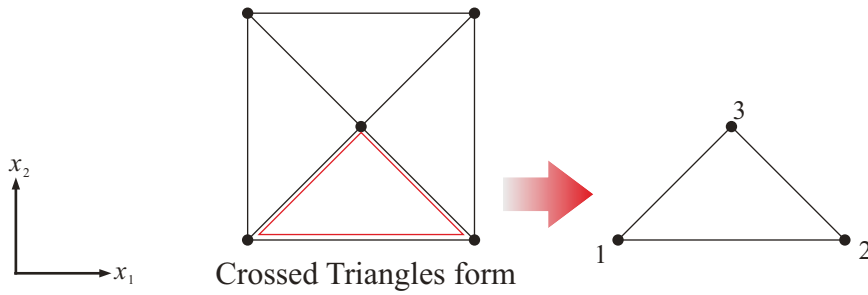


Fig. 8.5 Crossed Trinagles form by 3-node triangular elements.

のように容易に実行できる．ここで，平面要素の面積積分は式 (8.53) の Gauss 積分で求める．ただし，8.6.1 項で述べたように定ひずみ要素の場合には要素面積の乗算で面積積分を実行可能である．なお，平面ひずみ条件の場合には面外ひずみが生じないため，各要素の板厚は初期板厚のまま不変である．一方，平面応力条件を用いた場合は面外ひずみが非零なため，時間増分毎に計算された面外変形速度を用いて各要素の板厚を更新するのを忘れないように注意されたい．

8.6.3 離散化マトリックスの縮約

面内の 2 方向に対する変位自由度のみを有する平面要素を用いた場合には面外方向への変位成分を計算できない．したがって，マクロ変位速度ベクトルおよびじょう乱変位速度ベクトルはそれぞれ次式のように縮約される．

$$\{\mathbf{v}^0\} = \{v_1^0 \ v_2^0\}^T, \quad \{\mathbf{v}^\dagger\} = \{v_1^\dagger \ v_2^\dagger\}^T \dots\dots\dots (8.72)$$

$$\{\mathbf{v}^{0j}\} = \{v_1^{0j} \ v_2^{0j} \ \dots \ v_1^{0n} \ v_2^{0n}\}^T, \quad \{\mathbf{v}^{\dagger j}\} = \{v_1^{\dagger j} \ v_2^{\dagger j} \ \dots \ v_1^{\dagger m} \ v_2^{\dagger m}\}^T \dots\dots\dots (8.73)$$

さらに，上記の変位速度成分のみを用いて計算可能な速度こう配および変形速度の独立な成分はそれぞれ次式のようになる．

$$\{\mathbf{L}^0\} = \{L_{11}^0 \ L_{22}^0 \ L_{12}^0 \ L_{21}^0\}^T, \quad \{\mathbf{L}^\dagger\} = \{L_{11}^\dagger \ L_{22}^\dagger \ L_{12}^\dagger \ L_{21}^\dagger\}^T \dots\dots\dots (8.74)$$

$$\{\mathbf{D}^0\} = \{D_{11}^0 \ D_{22}^0 \ 2D_{12}^0\}^T, \quad \{\mathbf{D}^\dagger\} = \{D_{11}^\dagger \ D_{22}^\dagger \ 2D_{12}^\dagger\}^T \dots\dots\dots (8.75)$$

このとき，各離散化マトリックスはそれぞれ次式のように縮約される．

$$[\mathbf{N}^0] = \begin{bmatrix} N^{01} & 0 & \dots & N^{0n} & 0 \\ 0 & N^{01} & \dots & 0 & N^{0n} \end{bmatrix}, \quad [\mathbf{N}] = \begin{bmatrix} N^1 & 0 & \dots & N^m & 0 \\ 0 & N^1 & \dots & 0 & N^m \end{bmatrix} \dots\dots\dots (8.76)$$

$$[\mathbf{B}_L^0] = \begin{bmatrix} \frac{\partial N^{01}}{\partial x_1} & 0 & \dots & \frac{\partial N^{0n}}{\partial x_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^{01}}{\partial x_2} & \dots & 0 & \frac{\partial N^{0n}}{\partial x_2} \\ \frac{\partial N^{01}}{\partial x_2} & 0 & \dots & \frac{\partial N^{0n}}{\partial x_2} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^{01}}{\partial x_1} & \dots & 0 & \frac{\partial N^{0n}}{\partial x_1} \end{bmatrix}, \quad [\mathbf{B}_L] = \begin{bmatrix} \frac{\partial N^1}{\partial y_1} & 0 & \dots & \frac{\partial N^m}{\partial y_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial y_2} & \dots & 0 & \frac{\partial N^m}{\partial y_2} \\ \frac{\partial N^1}{\partial y_2} & 0 & \dots & \frac{\partial N^m}{\partial y_2} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial y_1} & \dots & 0 & \frac{\partial N^m}{\partial y_1} \end{bmatrix} \dots\dots (8.77)$$

$$[B_D^0] = \begin{bmatrix} \frac{\partial N^{0^1}}{\partial x_1} & 0 & \dots & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^{0^1}}{\partial x_2} & \dots & 0 & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_2} \\ \frac{\partial N^{0^1}}{\partial x_2} & \frac{\partial N^{0^1}}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_2} & \frac{\partial N^{0^n}}{\partial x_1} \end{bmatrix}, [B_D] = \begin{bmatrix} \frac{\partial N^1}{\partial y_1} & 0 & \dots & \frac{\partial N^m}{\partial y_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N^1}{\partial y_2} & \dots & 0 & \frac{\partial N^m}{\partial y_2} \\ \frac{\partial N^1}{\partial y_2} & \frac{\partial N^1}{\partial y_1} & \dots & \frac{\partial N^m}{\partial y_2} & \frac{\partial N^m}{\partial y_1} \end{bmatrix}. \quad (8.78)$$

8.6.4 平面ひずみ条件の構成式のマトリックス表示

平面ひずみ条件では板厚方向に一様な非常に厚い構造物を想定することから、近似的に面外ひずみが零、すなわち、 $D_{33} = D_{31} = D_{13} = 0$ という条件が適用される。このとき、変形速度 \mathbf{D} は D_{11} 、 D_{22} および D_{12} のみ为非零かつ独立な成分となる。また、応力速度については内力のなす仮想仕事率に寄与する成分のみを表記するとすれば、式 (8.21) の構成式のマトリックス表記は次式のように縮約される。

$$\begin{Bmatrix} \dot{T}_{11} \\ \dot{T}_{22} \\ \dot{T}_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111}^L & C_{1122}^L & C_{1112}^L \\ C_{2211}^L & C_{2222}^L & C_{2212}^L \\ C_{1211}^L & C_{1222}^L & C_{1212}^L \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_{11} \\ D_{22} \\ 2D_{12} \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} R_{11}^L \\ R_{22}^L \\ R_{12}^L \end{Bmatrix} \dots \dots \dots (8.79)$$

また、式 (8.79) をまとめて表わしたものを

$$\{\dot{T}\} = [C^L]\{D\} - \{R^L\} \dots \dots \dots (8.80)$$

と置く。ただし、平面ひずみ条件の場合は式 (8.79) に記述していない応力速度の面外成分も非零であり、次式で計算されることに注意されたい。

$$\begin{Bmatrix} \dot{T}_{33} \\ \dot{T}_{23} \\ \dot{T}_{31} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{3311}^L & C_{3322}^L & C_{3312}^L \\ C_{2311}^L & C_{2322}^L & C_{2312}^L \\ C_{3111}^L & C_{3122}^L & C_{3112}^L \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_{11} \\ D_{22} \\ 2D_{12} \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} R_{33}^L \\ R_{23}^L \\ R_{31}^L \end{Bmatrix} \dots \dots \dots (8.81)$$

また、式 (8.79) の構成式のマトリックス表示の縮約ならびに式 (8.81) の面外応力の計算式はマクロ構造の構成式についても同様の関係が成り立つものとする。

8.6.5 応力マトリックスの縮約

式 (8.26) および式 (8.39) に現れる幾何学的非線形問題に特有の応力マトリックスについても内力のなす仮想仕事率に寄与する成分のみを考慮すれば、それぞれ次式のように縮約される。

$$[T_D] = \begin{bmatrix} 2T_{11} & 0 & T_{12} \\ 0 & 2T_{22} & T_{12} \\ T_{12} & T_{12} & \frac{1}{2}(T_{11} + T_{22}) \end{bmatrix}, [T_L] = \begin{bmatrix} T_{11} & 0 & T_{12} & 0 \\ 0 & T_{22} & 0 & T_{12} \\ T_{12} & 0 & T_{22} & 0 \\ 0 & T_{12} & 0 & T_{11} \end{bmatrix} \dots \dots \dots (8.82)$$

$$[\mathbf{T}_D^H] = \begin{bmatrix} 2T_{11}^H & 0 & T_{12}^H \\ 0 & 2T_{22}^H & T_{12}^H \\ T_{12}^H & T_{12}^H & \frac{1}{2}(T_{11}^H + T_{22}^H) \end{bmatrix}, \quad [\mathbf{T}_L] = \begin{bmatrix} T_{11}^H & 0 & T_{12}^H & 0 \\ 0 & T_{22}^H & 0 & T_{12}^H \\ T_{12}^H & 0 & T_{22}^H & 0 \\ 0 & T_{12}^H & 0 & T_{11}^H \end{bmatrix} \dots \quad (8.83)$$

ここで、 $[\mathbf{T}_D]$ 、 $[\mathbf{T}_L]$ 、 $[\mathbf{T}_D^H]$ および $[\mathbf{T}_L^H]$ はそれぞれ対称マトリックスである。

8.6.6 その他のマトリックスの縮約

平面要素を用いた場合は変位成分が 2 自由度のみであることならびにマクロ構造に対しても平面ひずみ条件が適用されることを考慮すれば、式 (8.32) の特性速度マトリックスは次式のように縮約される。

$$[\chi^J] \equiv \begin{bmatrix} \chi_1^{11^1} & \chi_1^{22^1} & \chi_1^{12^1} \\ \chi_2^{11^1} & \chi_2^{22^1} & \chi_2^{12^1} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \chi_1^{11^m} & \chi_1^{22^m} & \chi_1^{12^m} \\ \chi_2^{11^m} & \chi_2^{22^m} & \chi_2^{12^m} \end{bmatrix}, \quad \{\phi^J\} \equiv \begin{bmatrix} \phi_1^1 \\ \phi_2^1 \\ \vdots \\ \phi_1^m \\ \phi_2^m \end{bmatrix} \dots \quad (8.84)$$

同様に、局所化問題 [式 (8.49)] における変位増分マトリックス $\{\Delta U^J\}$ および y_i 座標マトリックス $[\mathbf{Y}]$ も次式のように縮約される。

$$\{\Delta U^J\} \equiv \begin{bmatrix} \Delta u_1^1 \\ \Delta u_2^1 \\ \vdots \\ \Delta u_1^M \\ \Delta u_2^M \end{bmatrix}, \quad [\mathbf{Y}] \equiv \begin{bmatrix} y_1^1 & 0 & \frac{1}{2}y_2^1 \\ 0 & y_2^1 & \frac{1}{2}y_1^1 \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ y_1^M & 0 & \frac{1}{2}y_2^M \\ 0 & y_2^M & \frac{1}{2}y_1^M \end{bmatrix} \dots \quad (8.85)$$

さらに、ヤコビ行列 \mathbf{J} は二次元問題の場合は次式のように表わされる。

$$[\mathbf{J}] \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial x_1}{\partial r_1} & \frac{\partial x_1}{\partial r_2} \\ \frac{\partial x_2}{\partial r_1} & \frac{\partial x_2}{\partial r_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_I \frac{\partial N^{0I}}{\partial r_1} x_1^I & \sum_I \frac{\partial N^{0I}}{\partial r_2} x_1^I \\ \sum_I \frac{\partial N^{0I}}{\partial r_1} x_2^I & \sum_I \frac{\partial N^{0I}}{\partial r_2} x_2^I \end{bmatrix} \dots \quad (8.86)$$

8.7 解析の流れ

8.7.1 均質化法を用いたミクロ-マクロ連成 FEM 解析の流れ

均質化法を用いた場合には、ミクロ構造の解析が加わるため、通常の有限要素法と比較して特殊な計算手順となる。そこで、まずは本研究で用いる材料モデルを考慮せずに粘塑性均質化理論を適用した場合の有限要素法の一般的な解析の流れを以下に簡単にまとめる。

- (1) 要素データや材料定数・数値パラメータなどを入力ファイルから読み込む。また、各変数を初期化する。

- (2) ミクロ構造の $[C^L]$ および $\{R^L \Delta t\}$ からミクロ構造の全体剛性方程式 [式 (8.35)] を構築する. さらに, 同方程式を解くことで特性速度 $[\chi^L]$ および $\{\phi^L \Delta t\}$ を得る.
- (3) $[\chi^L]$ および $\{\phi^L \Delta t\}$ を均質化材料定数の計算式 [式 (8.46) および式 (8.47)] に適用し, マクロ構造の均質化材料定数 $[C^H]$ および $\{R^H \Delta t\}$ を算出する.
- (4) $[C^H]$ および $\{R^H \Delta t\}$ からマクロ構造の全体剛性方程式 [式 (8.45)] を構築する. さらに, 同方程式を解くことでマクロ変位増分 $\{\Delta u^{0l}\}$ を得る.
- (5) 局所化問題 [式 (8.49) および式 (7.30)] にマクロ変位増分 $\{\Delta u^{0l}\}$ を適用し, ミクロ構造の座標を更新するとともにミクロ変位増分 $\{\Delta u^l\}$ を得る. 同時に, $\{\Delta u^l\}$ およびミクロ構成式 [式 (8.22)] を用いてミクロ構造の諸量および Cauchy 応力 \mathbf{T} を更新する.
- (6) 得られたミクロ応力 $\{\mathbf{T}\}$ を式 (7.26) によって平均化し, マクロ応力 $\{\mathbf{T}^H\}$ を更新する.
- (7) マクロ構造の変形量が指定の変形率に達していなければ, (2) に戻る.
- (8) 解析終了.

8.7.2 本研究の解析の流れ

前項では, 均質化法を適用した場合の有限要素法の部分のみの解析手順を示した. 本項では, 材料モデルである構成式の計算まで考慮した実際の解析手順をより詳細に述べる. なお, 下記では結晶性ポリマの場合の解析を想定しているが, 非晶性ポリマの解析を実施する場合は結晶相の計算を省略する.

また, 本研究の解析に用いる解析コードは連立一次方程式の解を求めるマトリックスソルバーを除き, 全て私個人が自身の手で作成した.

- (1) 要素データや材料定数・数値パラメータなどを入力ファイルから読み込む. また, 各変数を初期化する.
- (2) 非晶相では Hasan-Boyce の非弾性応答則 [式 (5.22)], 結晶相では Eyring 形硬化則 [式 (5.45)] を用いて各すべり系におけるせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ を算出する.
- (3) 非晶相におけるクレーズ密度速度 $\dot{\omega}^{(\alpha)}$ を式 (6.20), (6.28) および式 (6.29) により算出する.
- (4) 得られたせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$, クレーズ密度速度 $\dot{\omega}^{(\alpha)}$ ならびに式 (7.2) および式 (7.3) を用いてミクロ構造の各積分点における $[C^L]$ および $\{R^L \Delta t\}$ を算出する.
- (5) $[C^L]$, $\{R^L \Delta t\}$ および $\{\mathbf{T}\}$ を式 (8.28)~(8.30) に適用し, ミクロ構造の要素剛性方程式 [式 (8.34)] を作成する. さらに, ミクロ構造の全体剛性方程式へと重ね合わせを行う.
- (6) ミクロ構造の全体剛性方程式 [式 (8.35)] を周期境界条件下で解き, 特性速度 $[\chi^L]$ および $\{\phi^L \Delta t\}$ を得る.
- (7) $[\chi^L]$ および $\{\phi^L \Delta t\}$ を均質化材料定数の計算式 [式 (8.46) および式 (8.47)] に適用し, マクロ構造の各積分点における均質化材料定数 $[C^H]$ および $\{R^H \Delta t\}$ を計算する.
- (8) $[C^H]$, $\{R^H \Delta t\}$ および $\{\mathbf{T}^H\}$ を式 (8.41)~(8.44) に適用し, マクロ構造の要素剛性方程式 [式 (8.40)] を作成する. さらに, マクロ構造の全体剛性方程式へと重ね合わせを行う.
- (9) マクロ構造の全体剛性方程式 [式 (8.68)] を所定の境界条件下で解き, マクロ変位増分 $\{\Delta u^{0l}\}$ を得る.
- (10) $\{\Delta u^{0l}\}$ を形状関数で内挿し, マクロ構造の各積分点における変形速度増分 $\{\mathbf{D}^0 \Delta t\}$ および連続体スピン増分 $\{\mathbf{W}^0 \Delta t\}$ を求める.
- (11) 局所化問題 [式 (8.49)] にマクロ変形速度増分を適用し, ミクロ変位増分 $\{\Delta u^l\}$ を得る.
- (12) $\{\Delta u^l\}$ を形状関数で内挿し, ミクロ構造の各積分点における変形速度増分 $\{\mathbf{D} \Delta t\}$ および連続体スピン増分 $\{\mathbf{W} \Delta t\}$ を求める.
- (13) 式 (5.3), (5.4) および式 (5.10) から Hasan-Boyce の非弾性応答則の各内部変数を更新する. 同時に, せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ からせん断ひずみ $\gamma^{(\alpha)}$ を, クレーズ密度速度 $\dot{\omega}^{(\alpha)}$ からクレーズ密度 $\omega^{(\alpha)}$ を更新す

る。さらに、式 (2.88) および式 (2.89) から分子鎖基底ベクトル $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ および $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ を、式 (2.82) および式 (2.83) から結晶基底ベクトル $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ および $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ を更新する。

- (14) 非晶相の絡み点毎の構成式 [式 (4.56)] から各絡み点の応力 $\mathbf{T}^{[k]}$ を更新する。各絡み点における応力を平均化し、非晶相のマイクロ積分点における応力 \mathbf{T} を求める。また、結晶相の構成式 [式 (4.68) または式 (5.43)] を用いて結晶相のマイクロ積分点における応力 \mathbf{T} を更新する。
- (15) 4.3.3 項で示した手順により、マイクロ積分点における配向方向 $\bar{\mathbf{s}}$ および配高強度パラメータ θ を算出する。
- (16) ミクロ応力 $\{\mathbf{T}\}$ を式 (7.26) によって均質化し、マクロ構造の各積分点のマクロ応力 $\{\mathbf{T}^H\}$ を求める。
- (17) ミクロ節点座標を $\{\Delta \mathbf{u}^l\}$ および式 (7.30) により更新する。さらに、マクロ節点座標を $\{\Delta \mathbf{u}^0\}$ により更新する。
- (18) 所定のステップで、節点座標や応力値など解析結果の評価に必要な値を出力。
- (19) マクロ構造の変形量が指定の変形率に達していなければ、(2) に戻る。
- (20) 解析終了。

最後に、上記の解析の流れの模式図を図 8.6 に示す。同図から 7.4 節で述べたように、マクロ構造の構成式 [式 (7.28)] は実際の数値解析には使用されないことがわかる。しかしながら、入力されたひずみに対する応力の計算ならびに弱形式の釣合い方程式に代入して場の支配方程式を導くという構成式がもつ二つの役割 [補足 A.10] に照らし合わせて考えれば、図 8.6 におけるマイクロ構造の解析全体 (点線より上の計算) がマクロ構造の構成式に相当する役割を果たしていると言える。

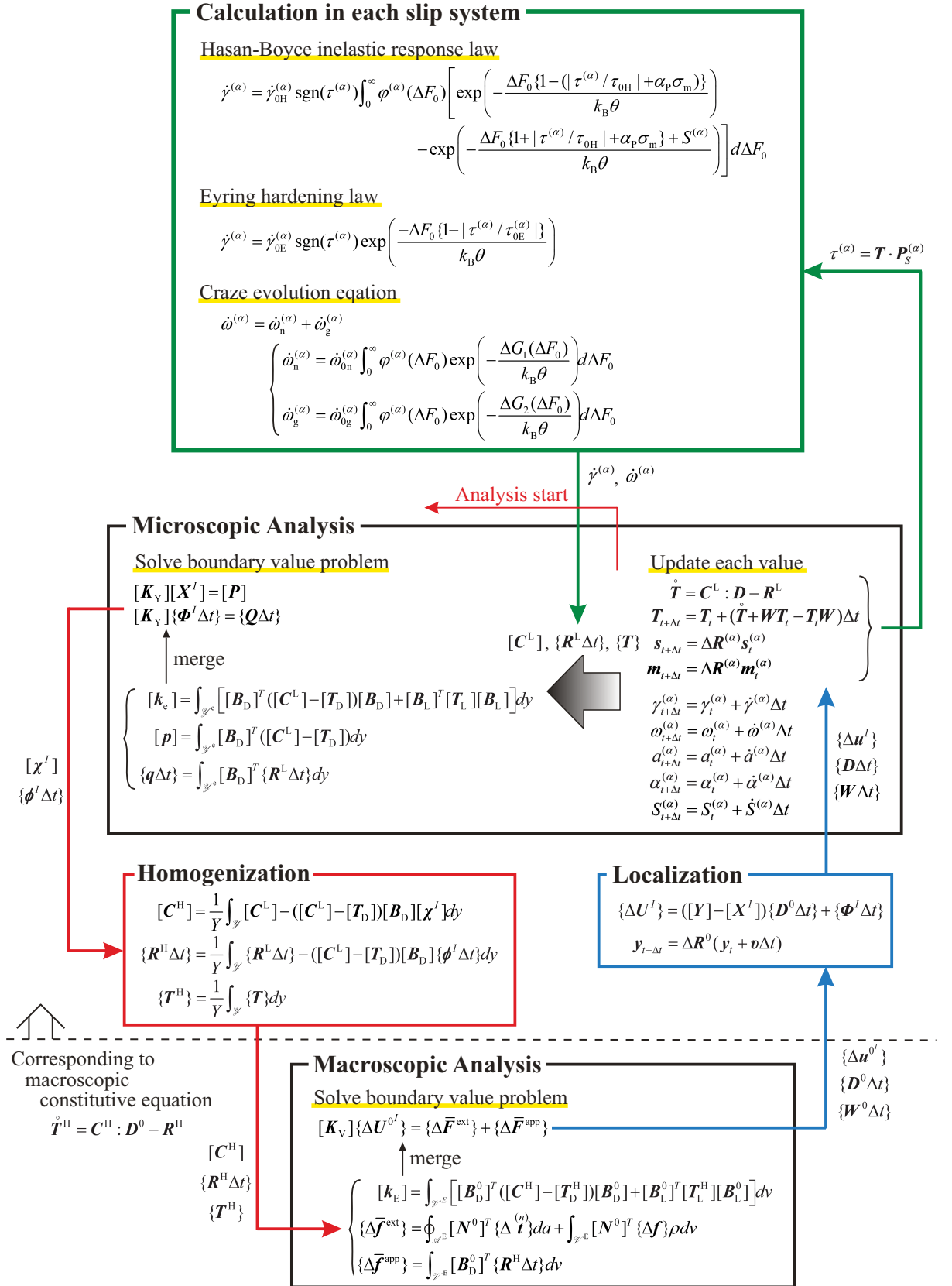


Fig. 8.6 Flow chart of numerical analysis with macroscopic scale, microscopic scale and calculation in each slip system.

第9章

解析結果および検討

本章では、前章までに述べた理論に基づき、非晶性ポリマおよび結晶性ポリマの大変形 FEM 解析を実施し、ポリマの大変形挙動の特徴を再現する。はじめに、非晶性ポリマである PMMA 平板に対して、平面ひずみ条件下で均質化法を適用した単軸引張解析を実施することで、マクロ構造におけるくびれおよびひずみ速度せん断帯の形成・伝ばを再現する。同時に、マクロ構造およびマイクロ構造の双方における分子鎖の配向を可視化する。次に、結晶性ポリマである PP 平板に対する単軸引張解析を平面ひずみ条件下で実施する。その際、結晶相単相のみが単軸引張荷重を受ける場合の変形挙動に加え、結晶性ポリマのマイクロ構造が初期等方性を満たすために必要な結晶相の個数について検討する。得られた PP の解析結果を PMMA の解析結果と比較することで非晶性ポリマおよび結晶性ポリマの変形挙動の相違点について論じるとともに提案したクレーズ発展式によってクレーズ密度集中領域の伝ばならびに分子鎖配向領域におけるクレーズ進展の停止が再現されることを示す。また、ポリマの応力-ひずみ応答において実験的に観察されている除荷時の粘弾性効果による非線形ひずみ回復現象ならびに静水圧応力依存性による引張時および圧縮時の降伏応力の変化が本研究で拡張した非弾性応答則によって数値解析的に再現可能となることを示す。さらに、ポリマの破断予測条件をクレーズ密度および実応力の評価に基づいて構築し、その破断予測条件を複数の変形速度における PP の単軸引張解析結果へと適用することで、ひずみ速度に依存したポリマの破断傾向を予測する。加えて、ひずみ速度の違いによる応力-ひずみ応答の変化と同様の傾向を環境温度の変化によって再現可能となることを示す。最後に、計算コスト削減の観点 [補足 I.1] から平面ひずみ条件を仮定して実施していた FEM 解析を三次元問題へと拡張し、非晶性ポリマおよび結晶性ポリマの単軸引張解析を実施する。その際、分子鎖塑性モデルおよび結晶塑性モデルにおけるすべり系を三次元構造へ拡張するとともにその初期方位の決定方法について述べる。得られた解析結果を平面ひずみ問題における解析結果と比較することで、三次元問題においても従来と同様にポリマの大変形応答を表すことが可能であることを示す。

なお、本章において解析結果を実験結果の応力-ひずみ応答と一致させる際には、原則としてその実験と同様の端面強制ひずみ速度、環境温度および試験片のアスペクト比を解析条件として採用している。その他の本研究独自の各材料定数 [補足 I.2] については数値解析的に同定した値を用いており、それらの具体的な値は解析毎に表に示すものとする。

9.1 非晶性ポリマのマルチスケール解析

分子鎖塑性モデルを用いた非晶性ポリマの大変形解析はすでに灘⁽³⁾によって実施されており、同モデルがくびれの形成・伝ばおよび分子鎖の配向といった非晶性ポリマの大変形応答の特徴を再現できることが示されている。しかしながら、灘によって実施された解析では非晶性ポリマの微視的な不均一状態を再現するために多絡み点モデルを採用しており、その絡み点数も 5~80 程度であったため、分子鎖が持つ nm オーダーの微視

的なスケールと解析対象の試験片の mm オーダーの巨視的なスケールとのスケールギャップを十分に埋められていたとは言い難い。そこで、本節では、灘によって提案された分子鎖塑性モデルならびに 7 章に述べた均質化法を用いて非晶性ポリマを対象としたマルチスケール大変形 FEM 解析を実施することで、マクロ構造においては灘による従来の解析結果と同様の結果が再現可能であることを確認するとともに、ミクロ構造における変形および分子鎖配向の様子を可視化する。同時に、4.3.3 項で新たに定義した配向強度パラメータを用いた場合でも従来と同様に分子鎖の配向状態を表現できることを確認する。

9.1.1 非晶性ポリマの解析条件および材料定数

マクロな解析対象として図 9.1(a) に示すようなダンベル形状の PMMA 試験片の平行部のみを想定する。また、試験片の平行部の大きさは長さ $2L = 80 \text{ mm}$ 、幅 $2(W + \Delta W)$ 、アスペクト比 $L/W = 4$ とする。ここで、 $2W$ は初期平均幅、 $2\Delta W$ は試験片の表面の加工粗さによる幾何学的不均一性を表す形状初期不整であり、本研

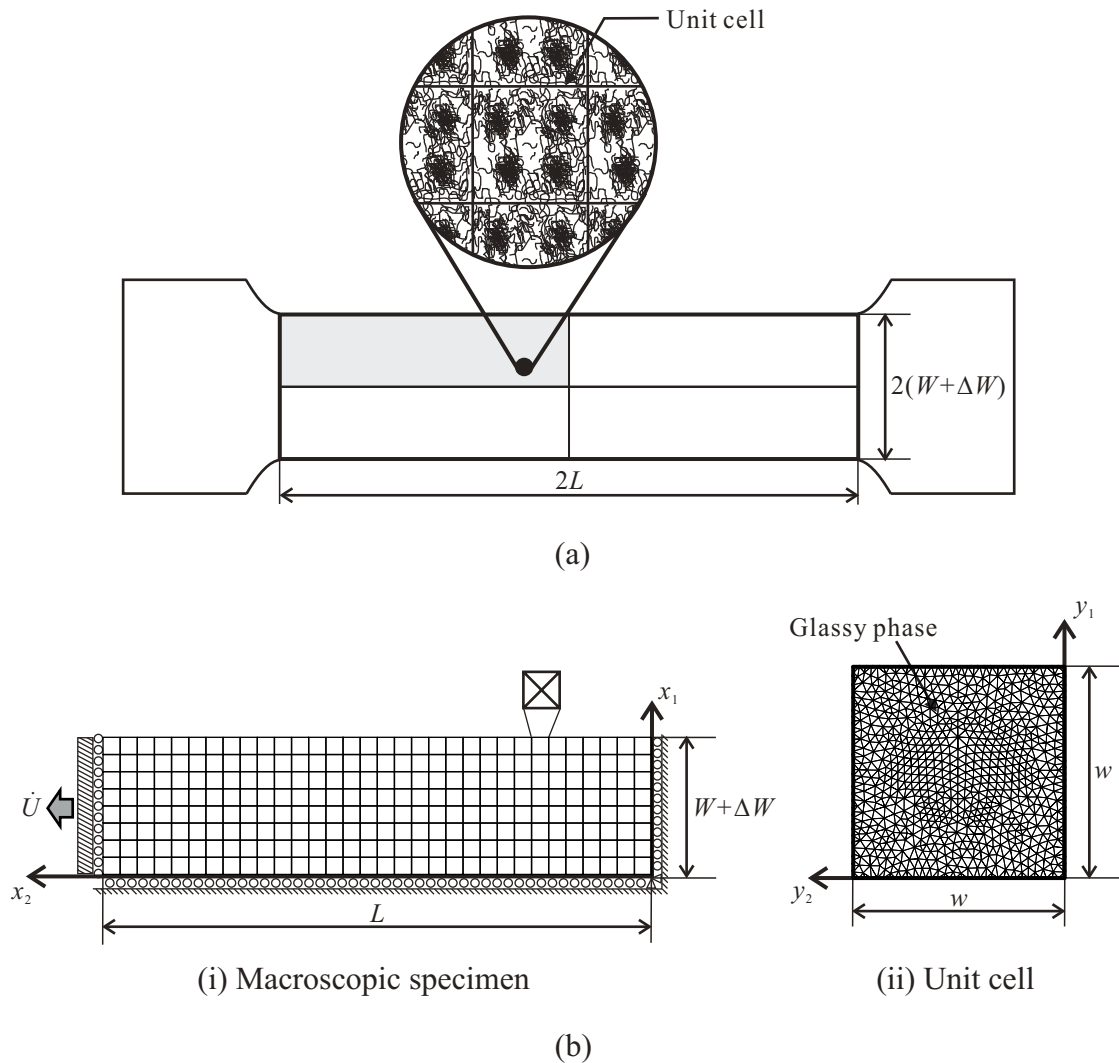


Fig. 9.1 Computational model of glassy polymer, (a) Schematic image of computational model, (b) Finite element and boundary condition of quarter model of specimen and finite element of unit cell.

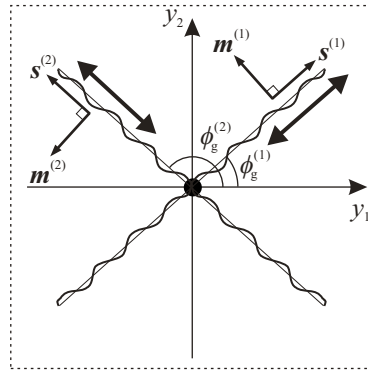


Fig. 9.2 Initial direction of molecular chain base vectors in glassy phase under plane slip condition.

Table 9.1 Material constants and numerical parameters for multiscale analysis of glassy polymer.

Elastic parameters	$E_0 = 600 \text{ MPa}$, $\nu_0 = 0.350$
Inelastic response law of Hasan and Boyce	$\gamma_{0H} = 15.0 \text{ ns}^{-1}$, $\tau_{0H} = 57.0 \text{ MPa}$, $\alpha_p = 0 \text{ GPa}^{-1}$, $\varpi_0 = 1.00 \text{ ps}^{-1}$, $\zeta = 5.00$ $a_0 = 1.06 \text{ eV}$, $a_{eq} = 0.905 \text{ eV}$, $\alpha_0 = 0.0435 \text{ eV}$, $\alpha_{eq} = 1.00 \text{ eV}$, $S_0 = 0 \text{ eV}$ $\beta_1 = 1.44 \text{ nm}^3$, $\beta_2 = 4.00$, $\beta_3 = 15.0$, $\beta_4 = 1.00$, $\beta_5 = 0$

究では Tvergaard⁽¹³²⁾ により提案された次式を用いて与える。

$$\Delta W = W \left[-W_1 \cos\left(\frac{\pi x_2}{L}\right) + W_2 \cos\left(\frac{m_w \pi x_2}{L}\right) \right] \dots \dots \dots (9.1)$$

ここで、不整振幅を $W_1 = 0.00375$ および $W_2 = 0.00150$ 、波数を $m_w = 4.00$ とする。さらに、計算コスト削減のため、変形の対称性を仮定し、モデルの 1/4 のみを解析する。板厚は無限であると仮定することで、 x_3 （紙面に対して垂直）方向のひずみを拘束する平面ひずみ条件を適用する。なお、通常、薄板平板の解析を実施する場合には x_3 方向の応力を零とする平面応力条件が用いられるが、平面応力問題では非共軸性を有さない構成式を用いた場合においてもせん断帯が形成する場合がある。加えて、薄板形状を仮定する平面応力問題ではマイクロ構造の面外方向にも周期性を仮定する均質化法の仮定とも不整合が生じてしまうという問題もあるため、本解析ではひずみ速度せん断帯の形成が材料モデルの非共軸性に起因するものであることを確認するためにも平面ひずみ問題を採用する。試験片の有限要素解析モデルは図 9.1(b)-(i) にて与える。すなわち、解析領域を幅方向に 8 分割、長手方向に 32 分割して得られる正方形要素をさらにその対角線で分割して得られる 1024 個の Crossed Triangles 形式の 3 節点三角形要素に分割するとともに、一定速度 \dot{U} で端面に強制変位を与える。また、公称ひずみが 100% に達するまでの時間ステップ数を 20000 とする。

さらに、本解析では均質化法を用いることによってマイクロ構造であるユニットセルとの連成解析を実施する。本節では解析対象として非晶性ポリマを想定することから、マイクロ構造は図 9.1(a) に示すように周期性を有する非晶領域のみから成るものとする。その有限要素解析モデルであるユニットセルは図 9.1(b)-(ii) に示すように一辺の長さが $w = 1.00 \mu\text{m}$ の正方形平板とし、マクロ構造と同様に平面ひずみ条件を適用する。用いる要素は Delaunay 三角形分割によって生成した 1396 個の 3 節点三角形要素とする。さらに、前述のマイクロ構造の周期性を満たすために、ユニットセル境界上の節点において変位に関する周期境界条件を与える。すなわ

ち、節点 A に周期的な節点を B とし、これらの節点変位ベクトルをそれぞれ \mathbf{u}^A , \mathbf{u}^B とすると剛性方程式には

$$\mathbf{u}^A = \mathbf{u}^B \dots\dots\dots (9.2)$$

で表わされる拘束条件を与える。

非晶相に対して用いる分子鎖塑性モデルでは図 2.6 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おり、合計で 4 つのすべり系が存在する。本解析では、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 つを想定し、非晶相のすべり系を平面 2 すべり系へと単純化することで平面ひずみ問題へと適用する。さらに、分子鎖すべり系の初期方位は灘⁽³⁾による検討を参考に次のように与える。まず、図 9.2 に示す y_1 軸方向からのすべり系 1 の分子鎖方位の一般角 $\phi_g^{(1)}$ に $30 \sim 60^\circ$ の範囲で一様に分布する擬似乱数を発生させて与える。さらに、すべり系 2 の方位がすべり系 1 の方位と y_2 軸に対して対称になるように $\phi_g^{(2)}$ を決定する。以上の手法を用いてユニットセル内の各積分点の各絡み点のすべり系方位を決定することで、マイクロ構造が初期不均一状態となるようにする。

最後に、本解析で用いる材料定数および数値パラメータを表 9.1 に示す。ここで、 a_0 , α_0 および S_0 はそれぞれ Hasan-Boyce の非弾性応答則中の内部変数 $a^{(\alpha)}$, $\alpha^{(\alpha)}$ および $S^{(\alpha)}$ の初期値を表わす。なお、クレーズ発展式を用いたクレーズ進展の再現については 9.2 節の結晶性ポリマの解析において検討するため、本解析では非晶性ポリマの変形応答のみに焦点を当てる。したがって、6 章で述べたクレーズ発展式は本解析に導入しない。また、解析中の端面強制ひずみ速度 \dot{U}/L および環境温度 θ は表 9.1 の材料定数の同定に用いた井上・山本⁽¹¹⁾による PMMA 平板の引張試験と同様の値を選ぶ。すなわち、 $\dot{U}/L = 0.550 \text{ ks}^{-1}$, $\theta = 338 \text{ K}$ とする。なお、本解析のように均質化法を用いてマイクロ構造との連成解析を実施する場合には、非晶性ポリマの分子鎖が不規則に絡み合った微視的な不均質状態を十分に表わすことが可能なため、本節では 4.3.2 項に示した多絡み点モデルを適用せずに単絡み点モデルとして解析を行う。

9.1.2 非晶性ポリマの単軸引張挙動の再現

図 9.3 に解析結果の公称応力-公称ひずみ曲線および井上・山本⁽¹¹⁾による PMMA の単軸引張試験結果を示す。本解析のように均質化法によって微視的な不均一性を考慮し、マクロな応力-ひずみ応答を得た場合

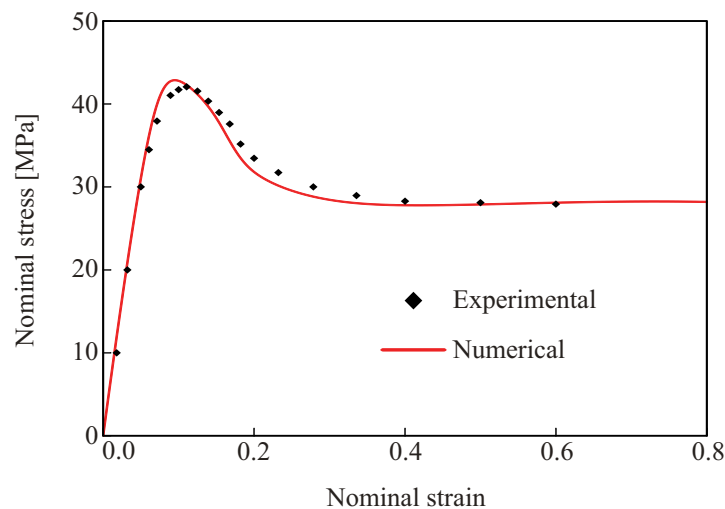


Fig. 9.3 Numerically obtained nominal stress-strain curve with experimental plots of uniaxial tensile test of polymethyl methacrylate.

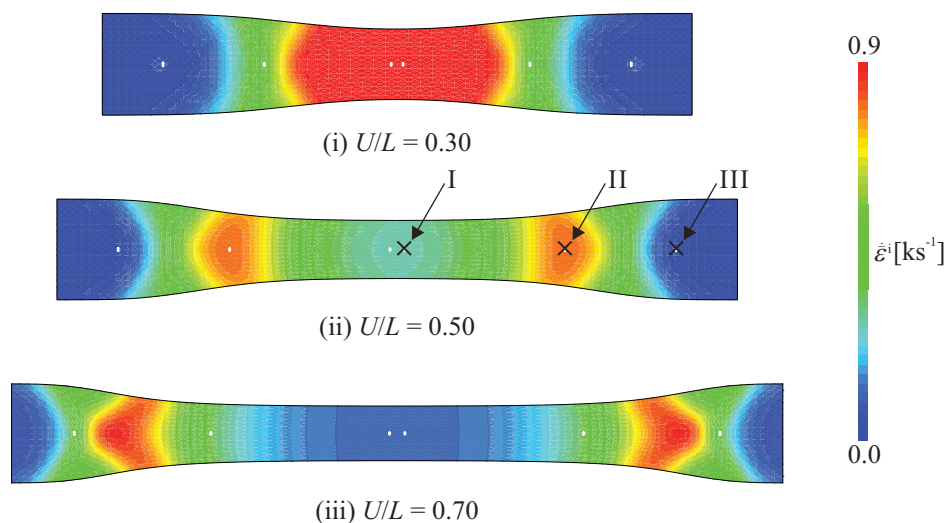


Fig. 9.4 Distributions of equivalent inelastic strain rate of polymethyl methacrylate in macroscopic specimen.

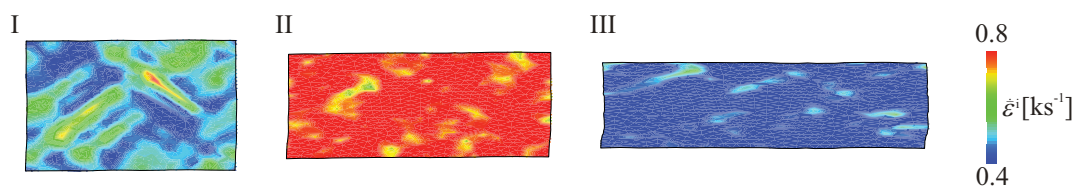


Fig. 9.5 Distributions of equivalent inelastic strain rate of polymethyl methacrylate in unit cells at sampling points I, II and III (at 50% elongation).

にも灘⁽³⁾による解析と同様に非晶性ポリマの実験結果を精度よく再現することが可能となっている。特に、Hasan-Boyceの非弾性応答則を用いたことにより、降伏前の非線形粘弾性応答および降伏後のひずみ軟化が実験値とよく一致する形で再現されている。図9.4は図9.3の応力-ひずみ曲線に対応する解析結果のマクロ試験片における相当非弾性ひずみ速度分布である。なお、同図においては試験片の1/4モデルの解析結果を鏡像コピーすることによって、解析結果を試験片全体のモデルとして表示している。1/4モデルの解析結果については原則として以降も同様の処置を行っている。図9.4の伸び率30%から応力-ひずみ応答のひずみ軟化に対応するくびれの形成が確認できる。本解析では均質化法を用い、マクロ構造を初期一様均質としていることに加え、式(9.1)によってあらかじめ試験片中心部に微小なくびれを与えているため、くびれが試験片中心部から形成したと言える。さらに、伸び率50%および70%では応力-ひずみ曲線の公称応力が一定値で推移するのに対応して、形成したくびれがひずみ速度の集中領域であるひずみ速度せん断帯を伴って引張方向へ伝ばする様子が再現されている。このようなくびれの伝ばは、後述のようなくびれが形成した領域において引張方向への配向硬化が生じ、より変形しやすい領域である未配向領域に非弾性変形が集中するために生じる。次に、図9.5に図9.4の伸び率50%における評価点I, II, およびIIIに配置されたユニットセル内の相当非弾性ひずみ速度分布を示す。ユニットセルおよびマクロ試験片の伸び率50%での相当非弾性ひずみ速度分布を比較すると、ひずみ速度せん断帯通過後の領域である評価点Iおよび通過前の領域である評価点IIIに配置されたユニットセル内では比較的小さい非弾性ひずみ速度が生じているのに対し、ひずみ速度せん断帯上に配置された評価点IIにおけるユニットセル内部では非常に大きいひずみ速度が発生していることがわかる。このように、

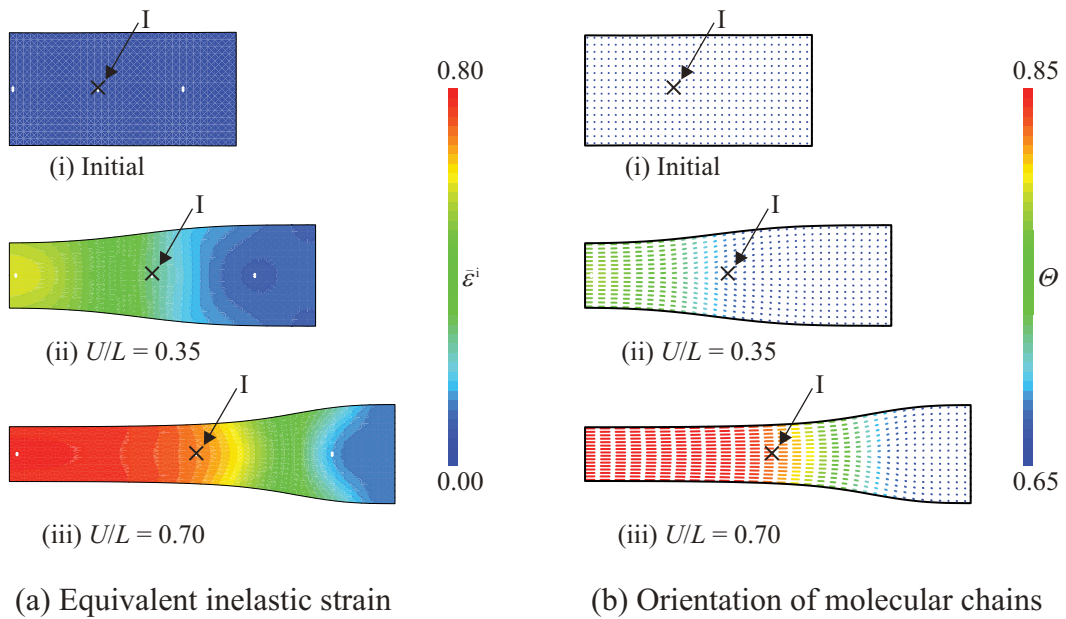


Fig. 9.6 Correspondence of distributions of equivalent inelastic strain and orientation of molecular chains in macroscopic specimen.

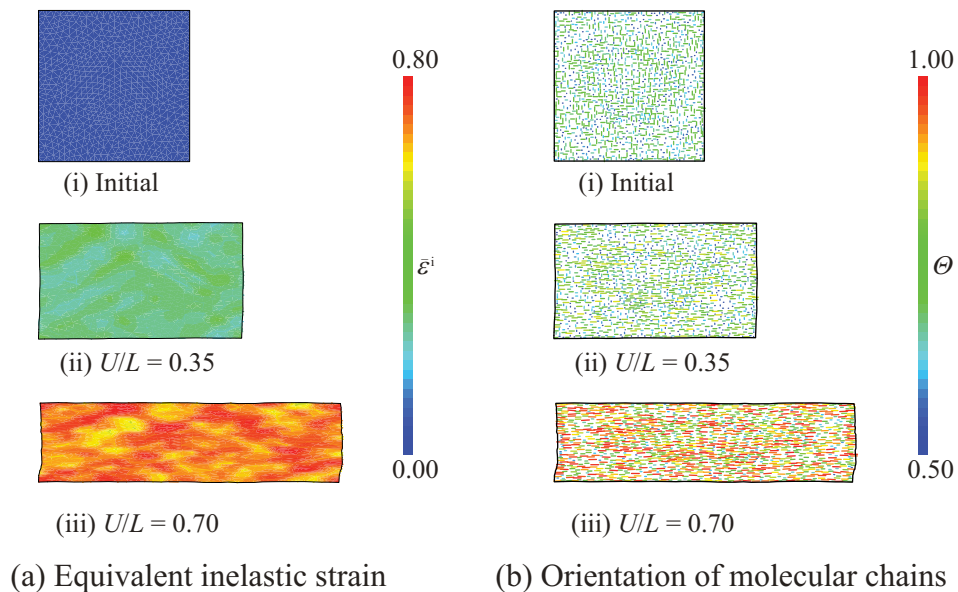


Fig. 9.7 Correspondence of distributions of equivalent inelastic strain and orientation of molecular chains in unit cells at sampling point I.

マクロおよびミクロ構造における変形応答の対応が確認できる。さらに、評価点 I におけるユニットセルにおいて特に顕著であるが、ミクロ構造内に非弾性ひずみ速度の値が高い領域がバンド上に発生するマイクロシアバンドが形成していることが確認できる。これはユニットセル内の各評価点における分子鎖初期方位にそれぞれ異なる方位を与えたため、各評価点に負荷される分解せん断応力の大きさも不均一になったためである。分子鎖塑性モデルを用いた試験片スケールにおけるマイクロシアバンドの形成は難によってすでに再現されてい

るが、通常、マイクロシアバンドは試験片よりもさらに小さいスケールにおいて形成すべきである。本解析では均質化法を用い、試験片を想定したマクロ構造に加え、その内部構造であるマイクロ構造の変形解析を同時に実行しているため、マクロ構造におけるひずみ速度せん断帯の形成・伝ばならびにマイクロ構造内におけるマイクロシアバンドの形成を同時に再現することが可能となっている。

次に、図 9.6 に解析結果のマクロ試験片における相当非弾性ひずみ分布および分子鎖配向図を示す。なお、図 9.6(b) の分子鎖配向図においては各線素の向きが配向方向 \bar{s} を、各線素の色および長さが配向強度パラメータ Θ を表す。相当非弾性ひずみ分布および分子鎖配向図を比較すると、まず、変形が生じていない初期状態では分子鎖の配向強度は弱く、等方性を有している。次に、伸び率 35% および伸び率 70% ではくびれの生じた領域において非弾性ひずみが大きくなるとともに配向強度が強くなり、配向方向も引張方向へと向いている。したがって、非弾性変形領域において分子鎖が引張方向へ配向する変形誘起異方性が再現されていることがわかる。さらに、図 9.7 に図 9.6 の評価点 I に配置されたユニットセルの相当非弾性ひずみ分布および分子鎖配向図を示す。同図 (a) および (b) を比較すると、まず、変形が生じていない初期状態では、マクロ試験片の場合と同様に分子鎖の配向強度は比較的弱く、等方性に近い状態となっている。ただし、マクロ試験片の場合とは異なり、ユニットセル内では初期状態で既に分子鎖が若干配向している領域が存在する。これは、9.1.1 項に述べたように初期分子鎖方位を一様分布乱数によって与えているため、乱数によっては最初から分子鎖がある程度配向した状態になるためである。次に、伸び率 35% および 70% においてもユニットセル全体としてはマクロ試験片と同様に非弾性変形の進行に伴って分子鎖が引張方向へ配向する変形誘起異方性が再現されている。しかしながら、マクロ試験片の場合とは異なり、必ずしもマイクロ構造内の分子鎖配向が強い領域と非弾性ひずみの大きい領域は対応していない。これは、始めから配向強度が高かった領域では比較的少ない非弾性ひずみでも強く配向し、逆に初期状態の配向強度が弱かった領域では強い配向強度となるのに大きな非弾性ひずみが必要となるためであると考えられる。以上のように、マクロ構造においては非弾性ひずみおよび分子鎖の配向強度の間に明確な対応が表れるが、マイクロ構造においては微視的な不均一性により、必ずしも双方の間に明確な対応は表れない。このような傾向も前述のマイクロシアバンドの形成と同様に均質化法によって、マクロ・マイクロ連成解析を実施した場合に特有の現象であると言える。最後に、図 9.7(b)-(iii) の分子鎖配向図の拡大図およびその拡大図内の配向強度が最も弱い要素および最も強い要素における分子鎖の方位を図 9.8 に示す。同図において、分子鎖間の角度が大きく開いている場合には配向強度の値が 0.50 程度となっている一方、2 つの分子鎖が近い方位を向いている場合には配向強度が最大値の 1.00 近くとなっている。したがって、本研究で新たに定義した三次元すべり系にも対応可能な配向方向パラメータ \bar{s} および配向強度パラメータ Θ を用いた

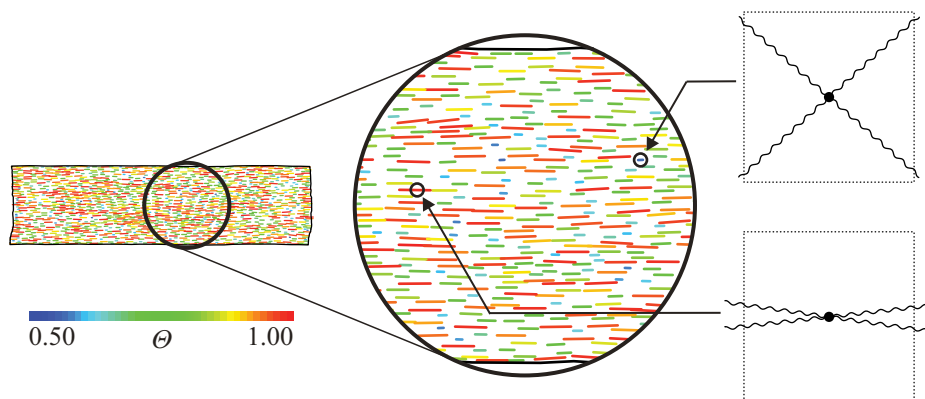


Fig. 9.8 Direction of each molecular chain at sampling points with minimum and maximum orientation intensity in unit cell (at 70% elongation).

場合でも平面すべり問題の分子鎖配向状態が再現できていると言える。なお、図 9.8 においては配向強度パラメータの値が最小でも 0.50 と比較的大きい値となっている。これは、平面すべり問題では常に分子鎖が面内にそろっている状態であるため、たとえ面内で分子鎖方位がばらついていても三次元すべり系の配向状態も表現可能な配向強度パラメータを用いた場合には、比較的高く配向強度を評価してしまうためである。

9.2 結晶性ポリマのマルチスケール解析

本節では、結晶性ポリマの非晶相に対しては非晶性ポリマに対する分子鎖塑性モデルを、結晶相に対しては結晶塑性モデルを適用することで、結晶性ポリマの大変形解析を実施する。はじめに、結晶相単相の大変形解析を実施する。同時に、結晶相に対して本研究で適用した Eyring 形のひずみ速度硬化則およびペナルティ法による影響を確認する。次に、周期性を仮定する結晶性ポリマのマイクロ構造に対して、その変形応答が結晶相の初期方位に強く依存しないために必要となる結晶相の個数を検討する。最後に、クレーズ発展式を導入した非晶相ならびに結晶相が混在したマイクロ構造に対して、均質化法を適用して結晶性ポリマのマルチスケール大変形 FEM 解析を実施することで、9.1 節の非晶性ポリマの変形応答との共通点ならびに相違点について言及するとともに、ポリマのクレーズ進展挙動の特徴を再現する。

9.2.1 結晶相単相の解析結果

結晶性ポリマの非晶相および結晶相が混在した構造の解析を実施する前に、本項では結晶相のみに単軸引張荷重が加わった際の力学応答について検討する。解析対象として図 9.9 に示すような単軸引張を受ける結晶性ポリマのラメラ混相構造における 1 つの結晶相を想定し、解析領域の境界に周期境界条件を適用したユニットセル解析 [補足 I.5] を実施する。また、4 つの 4 節点四角形要素を用いて正方形領域を 2×2 に分割する。さらに、図 2.5 に示した結晶構造における b 軸方向が紙面垂直方向と一致することを仮定し、結晶相のすべり系を Chain slip のみの平面単すべり系へと単純化する [補足 I.6] とともに平面ひずみ条件を適用する。なお、本項の全ての解析において弾性変形の材料定数は弾性係数 $E_0 = 4.00$ GPa, ポアソン比 $\nu_0 = 0.330$ を用いる。はじめに、材料応答則として式 (5.23) の Pan-Rice 形ひずみ速度硬化則を採用した解析および式 (5.45) の Eyring 形のひずみ速度硬化則を採用した解析をそれぞれ実施する。その際、Eyring 形ひずみ速度硬化則の材料定数は式 (5.55) および式 (5.56) によって決定する。得られた解析結果からいずれの硬化則を用いた場合でもほぼ同様のひずみ速度依存性を再現可能であることを示す。同時に、Eyring 形のひずみ速度硬化則を用いた場合に

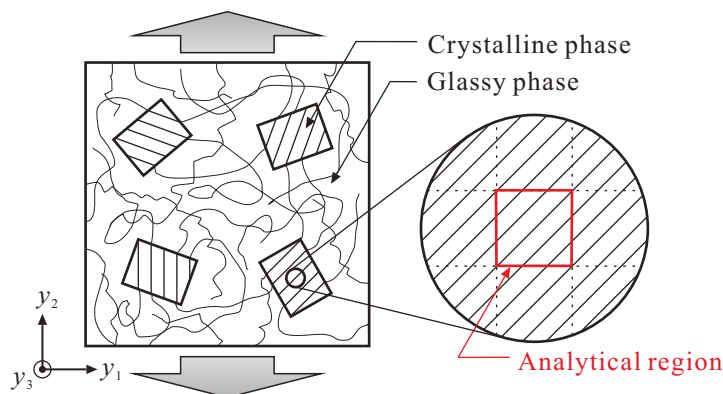


Fig. 9.9 Schematic diagram of analytical model for crystalline phase (mixed lamellar structure and microscopic region in crystalline phase).

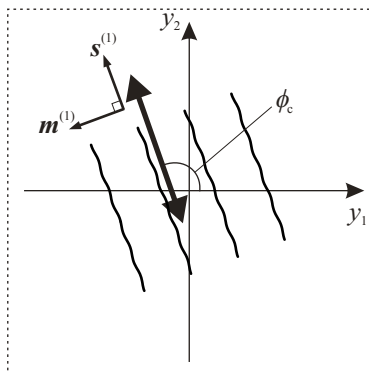


Fig. 9.10 Initial direction of crystal base vectors in crystalline phase under plane slip condition.

Table 9.2 Inelastic parameters for crystalline phase used in analyses of Fig.9.11.

	$\dot{\gamma}_{0P}$ [s ⁻¹]	$g^{(1)}$ [MPa]	m	$\dot{\gamma}_{0E}$ [ns ⁻¹]	κ	ΔF_0 [eV]
Case 1	1.00	8.00	0.04	15.0	1.94	1.22
Case 2	1.00	8.00	0.08	15.0	2.87	0.91

は、Pan-Rice 形のひずみ速度硬化則とは異なり、環境温度への依存性も自然に表すことが可能となることを示す。次に、結晶相の初期方位の違いならびに分子鎖方向への非延伸性を表わすために導入したペナルティ定数の値の違いによる応力-ひずみ応答への影響を確認する。

表 9.2 に示した材料定数を用いて複数の変形速度において結晶相単相の単軸引張解析を実施した際の応力-ひずみ曲線を図 9.11 に示す。ここで、表 9.2 の各 Case における κ および ΔF_0 はそれぞれ式 (5.55) および式 (5.56) を用いて算出した値である。また、解析時の環境温度 $\theta = 293$ K、ペナルティ定数 $\psi_0 = 100$ GPa とし、図 9.10 に示す結晶基底ベクトル $s^{(1)}$ の初期方位 $\phi_c = 135^\circ$ とした。まず、Case 1 について Pan-Rice 形ひずみ速度硬化則を用いた場合と Eyring 形硬化則を用いた場合の解析結果を比較すると、高ひずみ速度域において 1MPa 程度の差はあるものの、ほぼ同様の降伏応力のひずみ速度依存性が表わされていることが確認できる。次に、Case 2 についての解析結果を比較すると Case 1 の時より、高ひずみ速度 ($D_{22}^0 = 100$ s⁻¹) および低ひずみ速度 ($D_{22}^0 = 0.01$ s⁻¹) における応力値の差が大きくなっている一方で、中ひずみ速度域 ($D_{22}^0 = 10 \sim 0.1$ s⁻¹) における応力値はいずれの硬化則を用いた場合でもほぼ同様の値となっていることが確認できる。以上のように、5.3.3 項で提案した式を用いて Eyring 形硬化則の材料定数を求めることによって、Pan-Rice 形硬化則で再現されるひずみ速度依存性とほぼ同様のひずみ速度依存性を Eyring 形硬化則によって再現することが可能となる。なお、前述のように Pan-Rice 形硬化則におけるひずみ速度感度指数が大きくなるほど本手法による Eyring 形硬化則への置き換えは精度が悪くなることが予想される。これは、5.3.2 項で述べたように Pan-Rice 形硬化則の場合にはひずみ速度の対数的な増加に対して応力の上がり幅が大きくなるのに対して、Eyring 形硬化則の場合にはひずみ速度の指数的な増加に対して応力の上がり幅は常に一定であるという両者の持つ本質的なひずみ速度依存性の違いによるものである。

次に、表 9.2 の Case 1 の材料定数を用いて、複数の環境温度下で実施した解析の応力-ひずみ曲線を図 9.12 に示す。なお、変形速度は $D_{22}^0 = 1$ s⁻¹ とし、その他の解析条件は図 9.11 の解析と同様とした。図 9.12 を見るとわかるように Pan-Rice 形硬化則を用いた場合には、環境温度の変化に対して降伏応力が全く変化しない一方、Eyring 形硬化則を用いた場合には環境温度の上昇に伴い、降伏応力が減少するという環境温度依存性が

再現されている．このことは式 (5.23) に変数 θ が含まれていないのに対し，式 (5.45) には θ が含まれていることから自明の結果である．このように，Eyring 形の硬化則を用いれば，Pan-Rice 形硬化則を用いた場合とほぼ同様のひずみ速度依存性を表しつつ，環境温度への依存性も再現することが可能なため，本論文における以降の解析では Eyring 形硬化則を結晶相の材料応答則として採用することとする．また，本研究では結晶相のみならず，非晶相における材料応答則および損傷発展式も Eyring の反応速度論の体系に基づいて表現しているため，結晶性ポリマに対する全てのモデルがひずみ速度依存性および環境温度依存性を陽に記述したモデルになったと言える．なお，解析モデル全体のひずみ速度依存性および環境温度依存性については 9.5.1 項で改めて確認を行う．

次に，結晶相の分子鎖初期方位による応力-ひずみ応答への影響を検討する．図 9.11 は結晶基底ベクトル $\mathbf{s}^{(1)}$ の初期方位 ϕ_c を $105 \sim 165^\circ$ に変化させて解析を行った際の応力-ひずみ曲線である．なお，解析時の環境

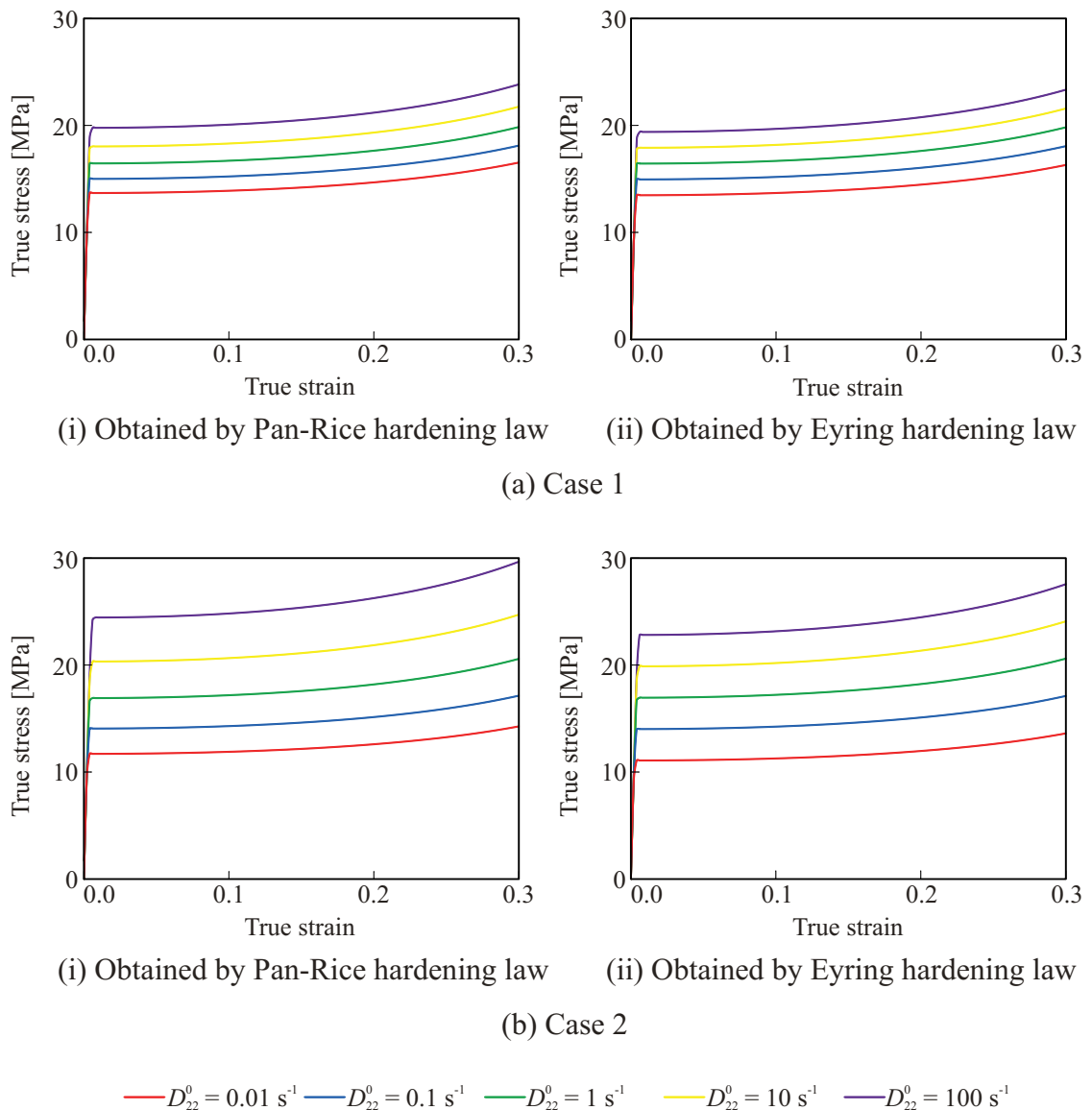


Fig. 9.11 Stress-strain curves obtained by analyses with various deformation rate and two types of hardening laws ($\theta = 293 \text{ K}$).

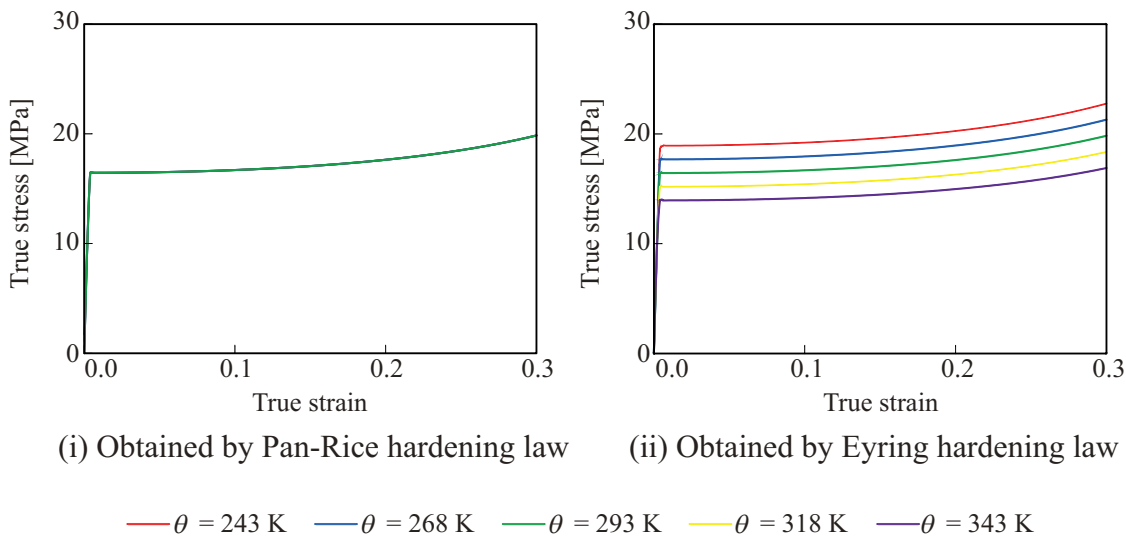


Fig. 9.12 Stress-strain curves obtained by analyses with various ambient temperature and two types of hardening laws ($D_{22}^0 = 1 \text{ s}^{-1}$).

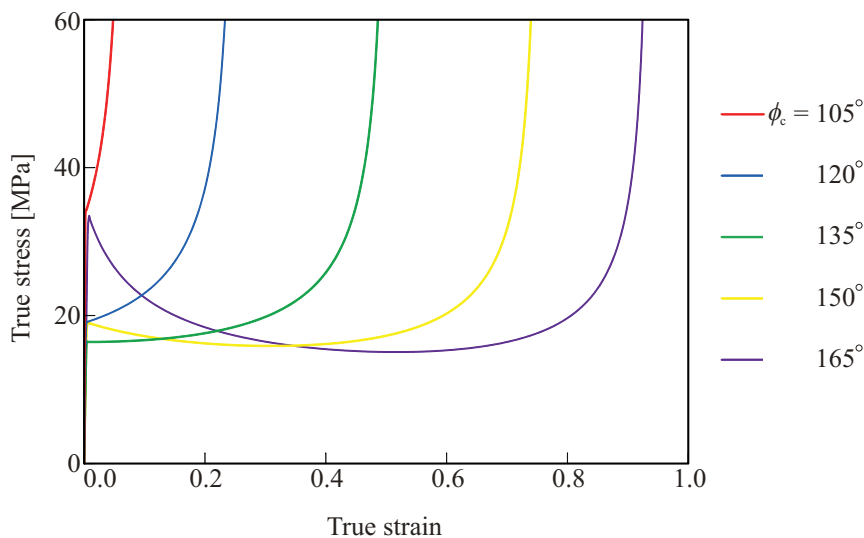


Fig. 9.13 Influence of initial direction of molecular chains in crystalline phase on stress-strain curve.

温度 $\theta = 293$ K, ペナルティ定数 $\psi_0 = 100$ GPa とした。初期方位の角度を増加させるほど、すなわち、分子鎖の初期方位が引張方向から遠ざかるほど、急激な応力の増加が生じるひずみが大きくなることを確認できる。これは、結晶相単相の単軸引張解析を行った際の応力の急激な上昇が分子鎖の引張方向への配向ならびにペナルティ法による分子鎖方向への非延伸拘束の導入により生じているためである。さらに、図 9.13 においては分子鎖初期方位 ϕ_c の値により、降伏応力の値にも違いが生じている。これは、分子鎖初期位によってすべり系に負荷される分解せん断応力の値が異なり、より分解せん断応力がかかりやすいすべり系ほど応力-ひずみ曲線上では低い応力で降伏することになるためである。したがって、初期方位が最大分解せん断応力方向である $\phi_c = 135^\circ$ の場合に最も降伏応力が低くなり、 135° から 15° だけ離れた 120° および 150° の場合に次に低

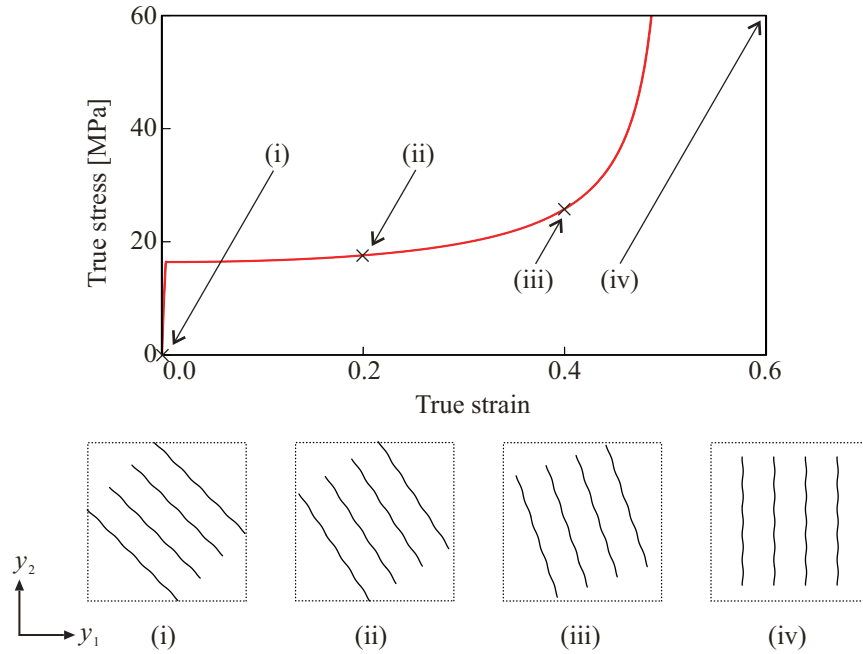


Fig. 9.14 Orientation state of molecular chains in crystalline phase corresponding to stress-strain response under plane slip condition ($\phi_c = 135^\circ$).

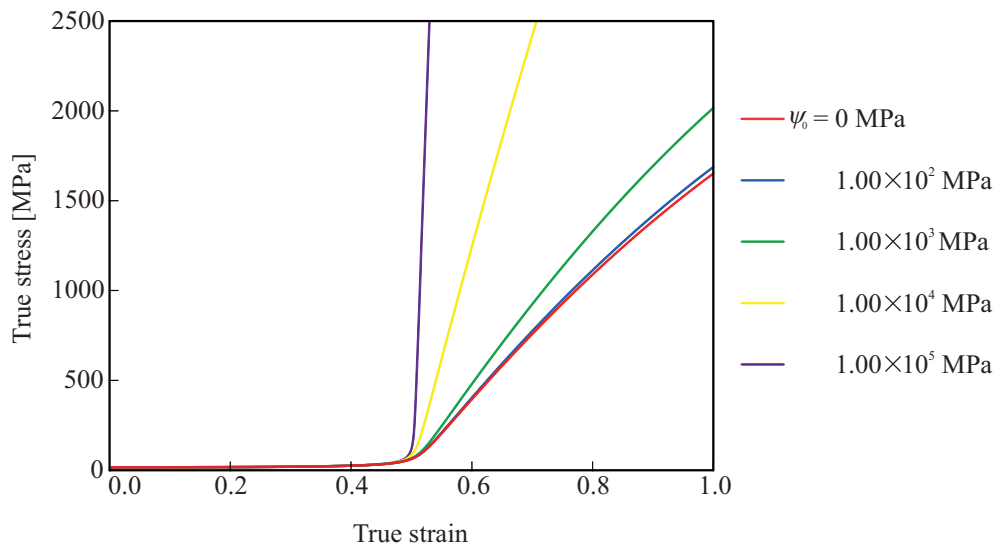


Fig. 9.15 Influence of penalty constant on stress-strain curve.

い降伏応力、 135° から 30° 離れた 105° および 165° の場合に最も高い降伏応力となっている。また、図 9.14 は分子鎖初期方位 ϕ_c を 135° とし、解析を行った際の、応力-ひずみ応答および分子鎖の方位を比較したものである。初期状態では引張方向である y_2 方向から傾いていた分子鎖が徐々に引張方向へと配向していき、応力の急激な上昇が始まる (iii) から (iv) の間に分子鎖が完全に引張方向へと揃っていることから、結晶相の単軸引張解析における硬化現象が分子鎖の配向によるものであることが確認できる。最後に、分子鎖初期方位 ϕ_c を 135° に固定し、ペナルティ定数の値を変化させた際の解析結果を図 9.15 に示す。ペナルティ定数が零、すなわち、分子鎖方向への非延伸拘束を導入しない場合にも、前述の配向硬化現象は生じるが、応力上昇の傾きは元々の縦弾性係数のみによって上昇し、比較的小さい。次に、ペナルティ定数が $10^2 \sim 10^3$ MPa の場合にも応力の上昇量はペナルティ定数が零の場合と比べて、大きく増大しないため、非延伸拘束を満たすには不十分であると言える。一方、ペナルティ定数が 10^5 MPa の場合には、応力上昇時の傾きがほぼ垂直に近づいており、十分非延伸性を満たすことができると考えられる。理論上はペナルティ定数は大きい値であるほど応力上昇時の傾きがより垂直に近づき、非延伸性をより厳密に満たすことが可能である。しかしながら、特定の方向のみに極端に大きい剛性を与えると実際の数値解析において計算の不安定性が増大するため、安定的に計算を行うためにも、本研究ではペナルティ定数を 10^5 MPa として用いることとする。

9.2.2 ユニットセル内の結晶相の数についての検討

本解析のように、微視構造であるユニットセルに対するミクロ解析と均質化された結晶塑性構成式を用いたマクロ解析を連成することで巨視的な試験片を解析する際には、ユニットセルの変形応答が結晶基底ベクトル

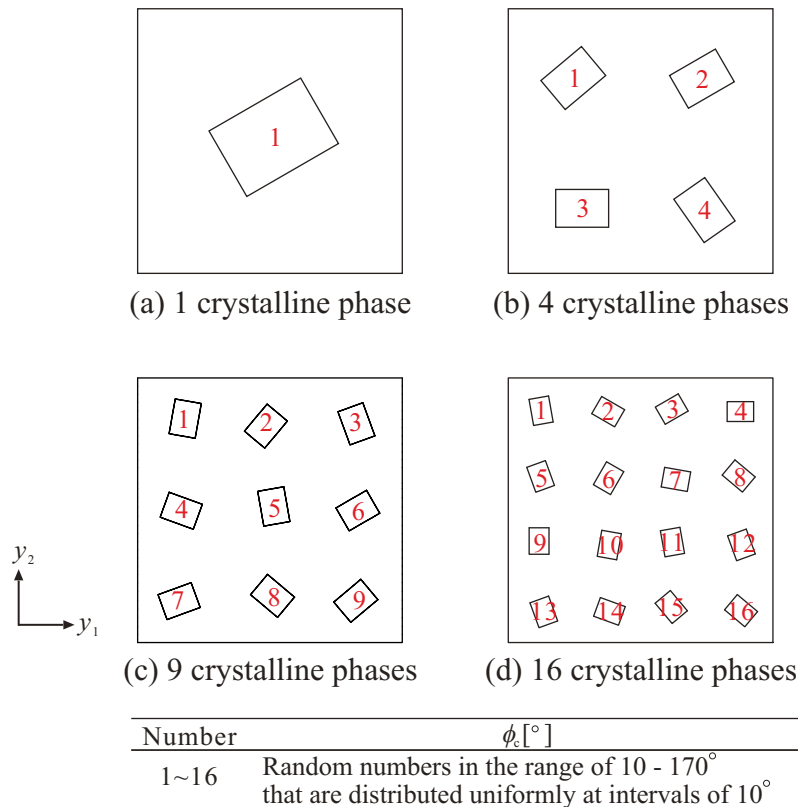


Fig. 9.16 Initial orientation of molecular chain of crystalline phase in unit cell with 1, 4, 9 and 16 crystalline phases.

の初期方位に強く依存することが予想される．そこで本項では，与える初期方位に依存せずユニットセルが初期等方性を有するために必要な結晶相の個数について検討する．なお，本項では，結晶相数の変化に対する応力-ひずみ曲線の収束性を確認することが目的であるため，材料定数および数値パラメータには前項までの解析で用いた値を参考に適等を選んでものを用いる．また，本解析においては 9.2.1 項と同様にマクロ変形は一樣とし，平面ひずみ条件下で非晶相と結晶相の混相構造を有するユニットセルのみの解析を行う．

まず，図 9.16 に示すようにユニットセル内の結晶相数 1, 4, 9 および 16 個の場合について，結晶相のすべり系 1，すなわち，分子鎖方向の初期方位 ϕ_c に 90° を除いた $10\sim 170^\circ$ の範囲で 10° 毎に一樣に分布する乱数を発生させて与える．この条件における解析を異なる乱数を用いてそれぞれの結晶相数の場合について 15 通り，計 60 通り実施した．なお， 10° ， 90° および 180° の初期方位を与えていない理由は，引張方向およびその水平方向に近い初期方位を与えてしまうと分解せん断応力が極端に低くなるため，結晶相が変形しにくくなり，計算が不安定化しやすくなるためである．また，いずれの結晶相数の解析においても結晶相の体積分率は 12% とし，解析中に体積分率が変化しないものとしている．

図 9.17 にユニットセル内の結晶相の数がそれぞれ 1, 4, 9 および 16 個の場合の公称応力-公称ひずみ曲線を示す．同図を見ると，ユニットセル内部の結晶相が 1 個の場合には伸び率 50% での公称応力値が広い範囲にばらついている．一方，結晶相の数の増加に伴い，公称応力値が徐々に一定値に収束しており，結晶相の数が 9 個および 16 個の場合には結晶相の初期方位に対する依存性がかなり緩和されることがわかる．これは，結晶相が 1 個の場合ではユニットセル全体に結晶相のすべり系初期方位が強く影響を及ぼすのに対して，結晶相の数が増加することで 1 個の結晶相のすべり系初期方位がユニットセルに及ぼす影響が小さくなることならびに結晶相の変形が互いに影響を及ぼし合うことで非晶相における変形の集中領域が減少し，全体として均一

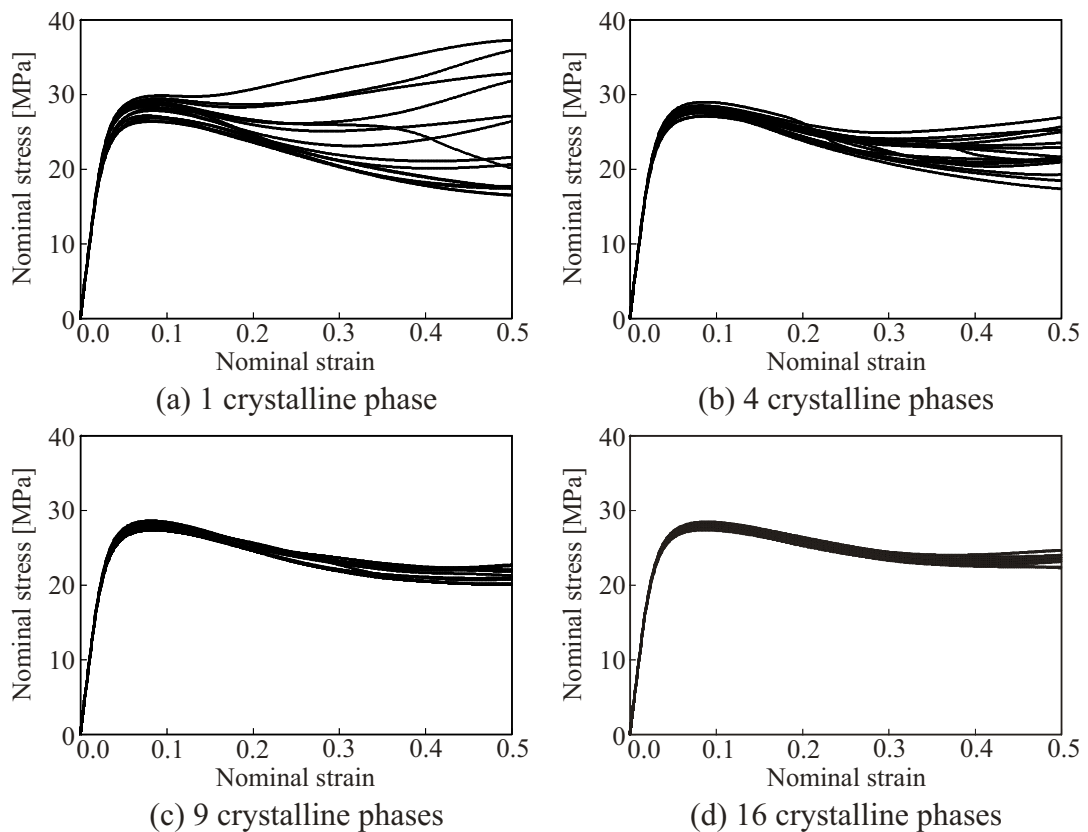


Fig. 9.17 Influence of number of crystalline phases on nominal stress-strain curves.

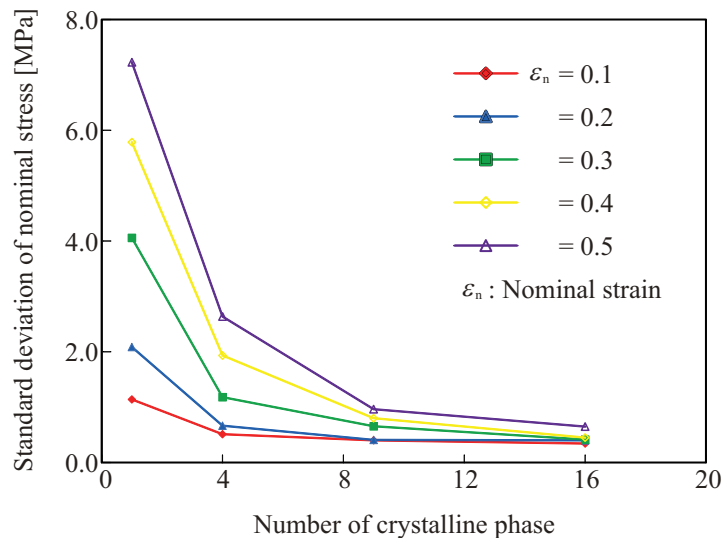


Fig. 9.18 Standard deviation of nominal stress with respect to number of crystalline phase.

な変形をすることに起因すると考えられる。

公称ひずみが10~50%までの10%毎の各公称ひずみ値における図9.17の応力値のばらつき標準偏差を図で表わしたものが図9.18である。同図をみると、結晶相の数が1個から4個に増加したときに標準偏差が大きく減少しており、4個から9個へと結晶相の数を増やしたときにも緩やかであるが標準偏差は減少している。また、9個から16個ではわずかであるが標準偏差は減少しており、一定の値に漸近していることが確認できる。すなわち、ユニットセル内部に含まれる結晶相の数を増やすことで、ユニットセルは初期等方の状態に近づき、全体として均一な変形を生じると考えられる。

マクロな試験片を解析する際にユニットセルを初期等方とするには、標準偏差の値が十分に一定値に達している必要があるため、ユニットセル内部に結晶相が16個程度は必要であると考えられる。しかしながら、本解析においてユニットセルに多くの結晶相を与えるにはユニットセルの要素分割を増加させる必要があるため、計算時間も増加してしまう。さらに、実際に巨視的なマクロ試験片の解析を行うには、マイクロ構造であるユニットセルの計算時間がマクロな解析対象の要素分割数倍されるため膨大な計算時間を要する。したがって、現実的な計算時間を考慮して巨視的な試験片およびユニットセルの連成解析を行う場合には、ユニットセル内の結晶相の個数は応力の標準偏差の値が16個の場合に近い値となっている9個とするのが妥当であると考えられる。以上より、以下の解析ではユニットセル内の結晶相の個数を9個として解析を行うこととする。

9.2.3 結晶性ポリマの解析条件および材料定数

マクロな解析対象として図9.19(a)に示すようなダンベル形状のPP試験片の平行部のみを想定する。試験片の平行部の大きさは長さ $2L = 60\text{ mm}$ 、幅 $2(W + \Delta W)$ 、アスペクト比 $L/W = 3$ とする。また、形状初期不整 $2\Delta W$ は非晶性ポリマの場合と同様に式(9.1)で与える。ここで、不整振幅を $W_1 = 0.00375$ および $W_2 = 0.00150$ 、波数を $m_w = 4.00$ とする。さらに、計算コスト削減のため、変形の対称性を仮定し、モデルの1/4のみを解析する。板厚は無限であると仮定することで、 x_3 (紙面に対して垂直)方向のひずみを拘束する平面ひずみ条件を適用する。試験片の有限要素解析モデルは図9.19(b)-(i)のように解析領域を768個のCrossed Triangles形式の3節点三角形要素に分割するとともに、一定速度 \dot{U} で端面に強制変位を与えるものとする。なお、公称ひずみが100%に達するまでの時間ステップ数を20000とする。

本節では解析対象として結晶性ポリマを想定するため、マイクロ構造は図 9.19(a) に示すように非晶領域に複数の結晶相が混在した構造が周期的に存在するものと仮定する. その有限要素解析モデルであるユニットセルは図 9.19(b)-(ii) に示すように一辺の長さが $w = 1.00 \mu\text{m}$ の正方形平板とする. さらに, Voronoi 分割法によって正方形領域の内部に結晶相および非晶相の界面を生成し, その後各領域を Delaunay 三角形によって分割することで生成した合計 1472 個の 3 節点三角形要素をユニットセルの要素として用いる. また, ユニットセルに含まれる結晶相の数は 9.2.2 項での検討結果から 9 個とし, 結晶相全体のユニットセルに占める体積分率は 12% とする. さらに, 前述のマイクロ構造の周期性を満たすために, ユニットセル境界上の節点には 9.1.1 項で述べた変位に関する周期境界条件を与える.

非晶相においてはすべり系を平面 2 すべり系へと簡単化し, その初期方位は 9.1.1 項に示した方法と同様の方法で与える. 一方, 結晶相のすべり系についても 9.2.1 項と同様に平面単すべり系へと簡単化する. このときの各結晶相における分子鎖初期方位 ϕ_c は図 9.20 のように与える.

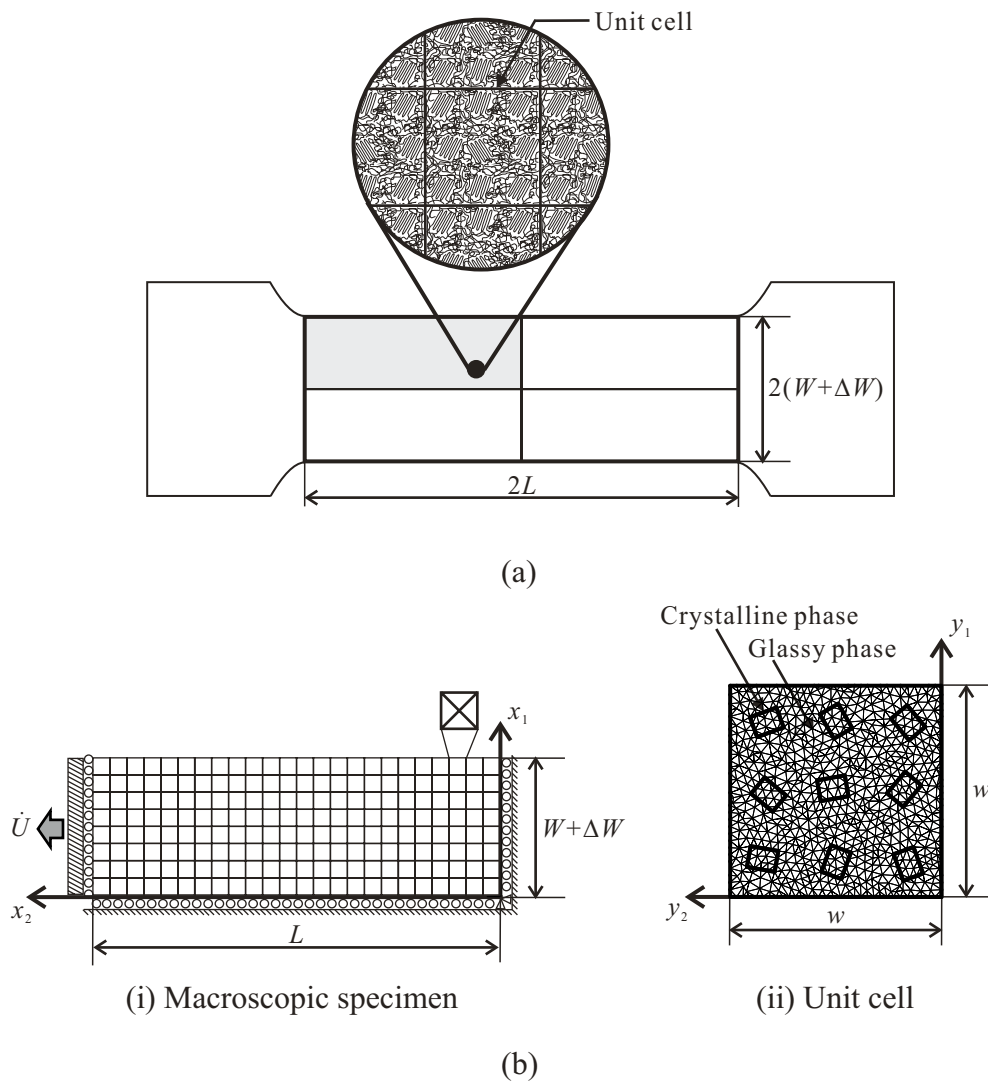


Fig. 9.19 Computational model of crystalline polymer, (a) Schematic image of computational model, (b) Finite element and boundary condition of quarter model of specimen and finite element of unit cell.

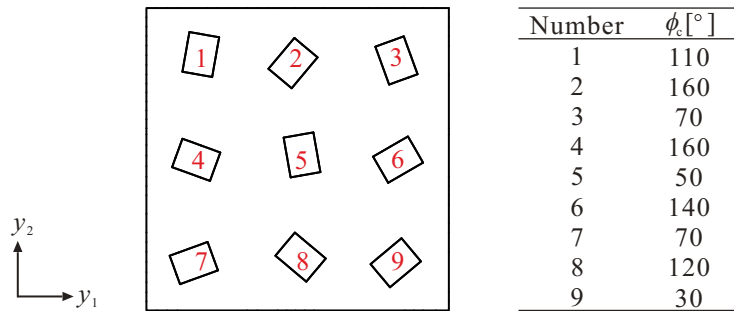


Fig. 9.20 Initial orientation of molecular chain of crystalline phase.

Table 9.3 Material constants and numerical parameters for multiscale analysis of crystalline polymer.

Elastic parameters	$E_0 = 1400 \text{ MPa}$, $\tilde{E}_0 = 4000 \text{ MPa}$, $\nu_0 = \tilde{\nu}_0 = 0.330$, $\psi_0 = 100 \text{ GPa}$
Inelastic response law of Hasan and Boyce	$\gamma_{0H} = 15.0 \text{ ns}^{-1}$, $\tau_{0H} = 24.0 \text{ MPa}$, $\alpha_p = 0 \text{ GPa}^{-1}$, $\varpi_0 = 1.00 \text{ ps}^{-1}$, $\zeta = 45.0$ $a_0 = 1.06 \text{ eV}$, $a_{eq} = 0.880 \text{ eV}$, $\alpha_0 = 0.0435 \text{ eV}$, $\alpha_{eq} = 1.00 \text{ eV}$, $S_0 = 0 \text{ eV}$ $\beta_1 = 1.44 \text{ nm}^3$, $\beta_2 = 4.00$, $\beta_3 = 15.0$, $\beta_4 = 1.00$, $\beta_5 = 0$
Eyring hardening law	$\gamma_{0E} = 15.0 \text{ ns}^{-1}$, $\Delta F_0 = 1.22 \text{ eV}$, $\kappa = 1.94$, $g^{(1)} = 8.00 \text{ MPa}$
Craze evolution equation	$n_r = 10.0 \text{ ns}^{-1}$, $g_r = 1.00 \text{ ps}^{-1}$, $\gamma_c = 0.350$, $\omega^* = 1.00$ $C_1 = C_2 = 0.500$, $D_1 = D_2 = 0.0252 \text{ eV}$, $p_1 = p_2 = 50.0$

さらに、本解析で用いる材料定数および数値パラメータを表 9.3 に示す。ただし、非晶相および結晶相で同じ記号を用いている材料定数については結晶相の量を $(\tilde{\quad})$ のように表記することで非晶相の量と区別している。解析中の端面強制ひずみ速度 \dot{U}/L および環境温度 θ はそれぞれ、 $\dot{U}/L = 1.00 \text{ s}^{-1}$ 、 $\theta = 293 \text{ K}$ とする。また、本解析では非晶相の多絡み点モデルにおける絡み点数 N_g を 5 とし解析を行う。

9.2.4 結晶性ポリマの単軸引張挙動の再現

図 9.21(a) に解析結果の応力-ひずみ曲線および日産自動車(株)の協力の下、実施した PP の単軸引張試験結果のプロットを示す。同図 (a) から本モデルによって、実験結果とよく一致する応力-ひずみ応答を得ることができる。また、このときの相当非弾性ひずみ速度分布を図 9.21(b) に示す。本解析結果を図 9.4 と比較すると非晶性ポリマである PMMA の場合ではくびれ幅が大きく、ひずみ速度せん断帯が明瞭に表れているのに比べ、結晶性ポリマの PP の場合にはくびれ幅が小さくなっており、ひずみ速度せん断帯も不明瞭になっていることが確認できる。これは、結晶性ポリマの場合にはマイクロ構造であるユニットセルに降伏後にひずみ軟化を生じない結晶相が混在したため、マクロな変形が局所化しにくくなったためであると言える。マイクロ構造の違いによる影響は応力-ひずみ応答にも表れており、図 9.21(a) においては図 9.3 と比較して、巨視的降伏後のひずみ軟化が弱まっている。このように降伏後のひずみ軟化の強さおよびそれに伴い形成するくびれの大きさは対応していることがわかる。実験的にもポリマは潜在的には X 形のせん断帯を形成するが⁽¹³³⁾、結晶性ポリマの場合には非晶性ポリマと比較してせん断帯は明瞭に観察出来ないことが知られており、そのような点において本解析結果は実現象とよく整合した結果であると言える。しかしながら、ひずみ速度せん断帯の形成が不明瞭であれば、ポリマの破壊現象と密接に関係するクレーズ集中領域の形成も不明瞭になってしまう

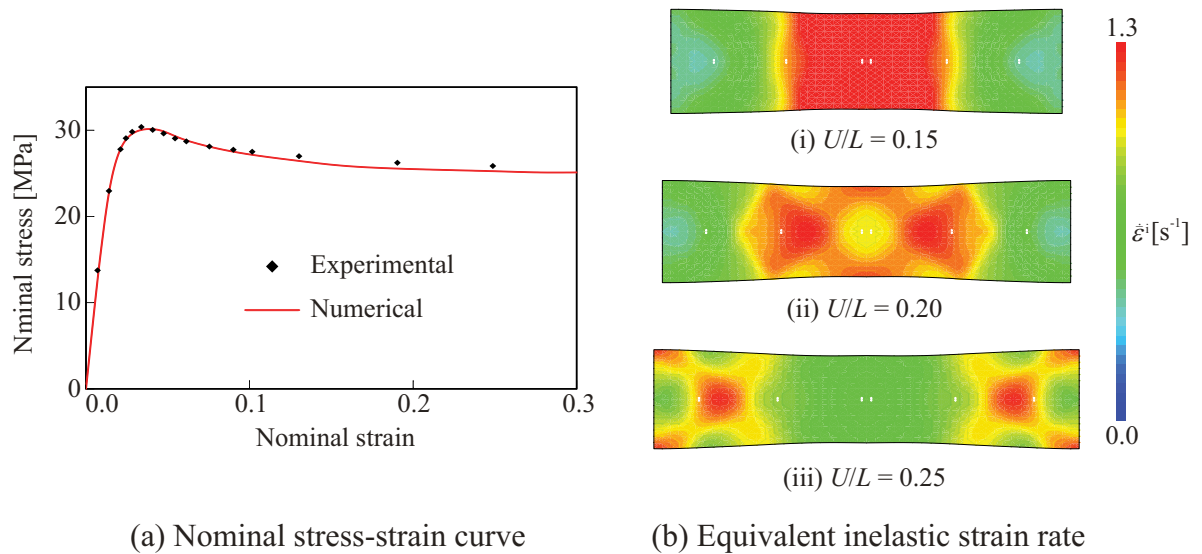


Fig. 9.21 Numerically obtained nominal stress-strain curve with experimental plots of polypropylene and corresponding numerical distributions of equivalent inelastic strain rate.

い、本材料モデルが持つ定性的傾向を確認することが困難となる。そこで、以降の解析では表 9.3 に示した材料定数を $\tau_{0H} = 24.0 \text{ MPa} \rightarrow 28.5 \text{ MPa}$, $a_{eq} = 0.880 \text{ eV} \rightarrow 0.680 \text{ eV}$ のように変更して解析を実施することで降伏後の軟化を強め、ひずみ速度せん断帯を明瞭に可視化できるようにする。ただし、その他の材料定数は変更せずにそのまま用いることとする。

図 9.22 は修正した材料定数を用いた解析によって得られたマクロ試験片の相当非弾性ひずみ速度分布、分子鎖配向図、クレーズ密度分布およびクレーズ密度速度分布である。さらに、同図の評価点 I および II に配置されたユニットセルにおける各分布図を図 9.23 に示す。ただし、ユニットセルの分子鎖配向図においては配向強度パラメータを定義していない結晶相の配向強度を零として表示している。まず、図 9.22(a) および図 9.23(a) の相当非弾性ひずみ速度分布を見ると、伸び率 2% においてはまだ弾性変形領域であるため、マクロ試験片およびユニットセルの双方においてほぼ均一な変形が生じていることが確認できる。ただし、ユニットセルの結晶相においては比較的大きい相当非弾性ひずみ速度が生じており、結晶相は非晶相より先に降伏を迎えていることが確認できる。これは結晶相では $g^{(1)}$ に 8 MPa と比較的小さい流れ応力を与えたためであると言える。次に、伸び率 11% になるとマクロ試験片中心部にくびれとともにひずみ速度の集中領域であるひずみ速度せん断帯が生じていることが確認できる。このとき、ひずみ速度せん断帯形成領域である評価点 I に配置されたユニットセルでは大きい相当非弾性ひずみ速度が生じている一方、マクロな相当非弾性ひずみ速度が比較的小さい領域である評価点 II のユニットセルでは大きな相当非弾性ひずみ速度は生じていない。さらに、伸び率 18% および 25% になるとマクロ構造においてはくびれとともにひずみ速度せん断帯が引張方向へ伝ばしていく様子が確認できる。このとき、マクロなひずみ速度せん断帯が通過した評価点 I のユニットセルでは伸び率 11% の時と比較して、相当非弾性ひずみ速度が小さくなっているのに対し、マクロなひずみ速度せん断帯が到達した評価点 II のユニットセルでは相当非弾性ひずみ速度が大きくなっている。以上のように、結晶性ポリマの場合においても非晶性ポリマの場合と同様にマクロおよびマイクロ構造における変形挙動が対応していることが確認できる。同様に図 9.22(b) および図 9.23(b) の分子鎖配向図を見ると、初期状態に近い、伸び率 2% ではマクロおよびマイクロ構造の双方で分子鎖が等方性を有している。その後、マクロ構造においては

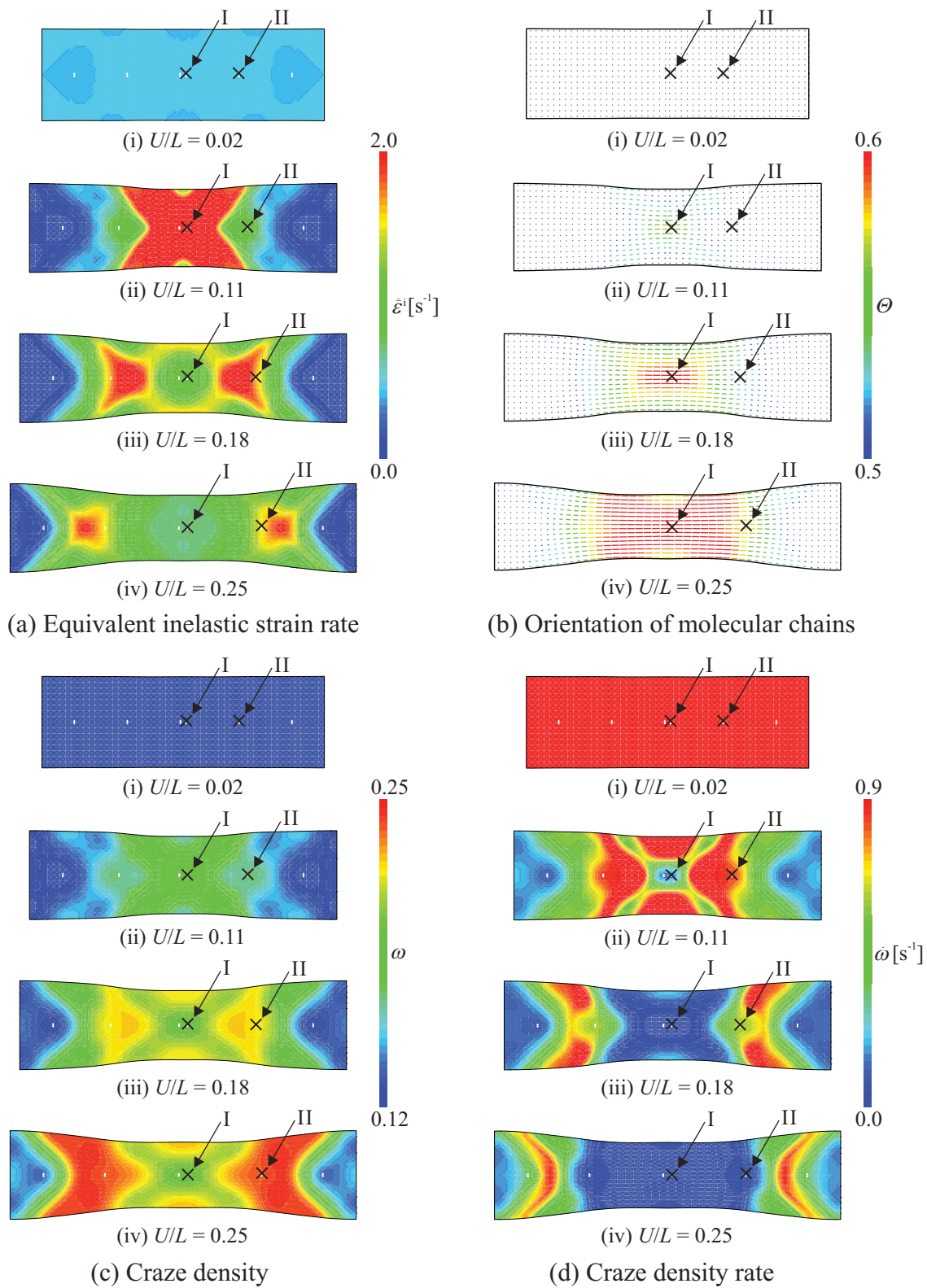


Fig. 9.22 Distributions of various quantities of polypropylene with modified numerical parameters in macroscopic specimen.

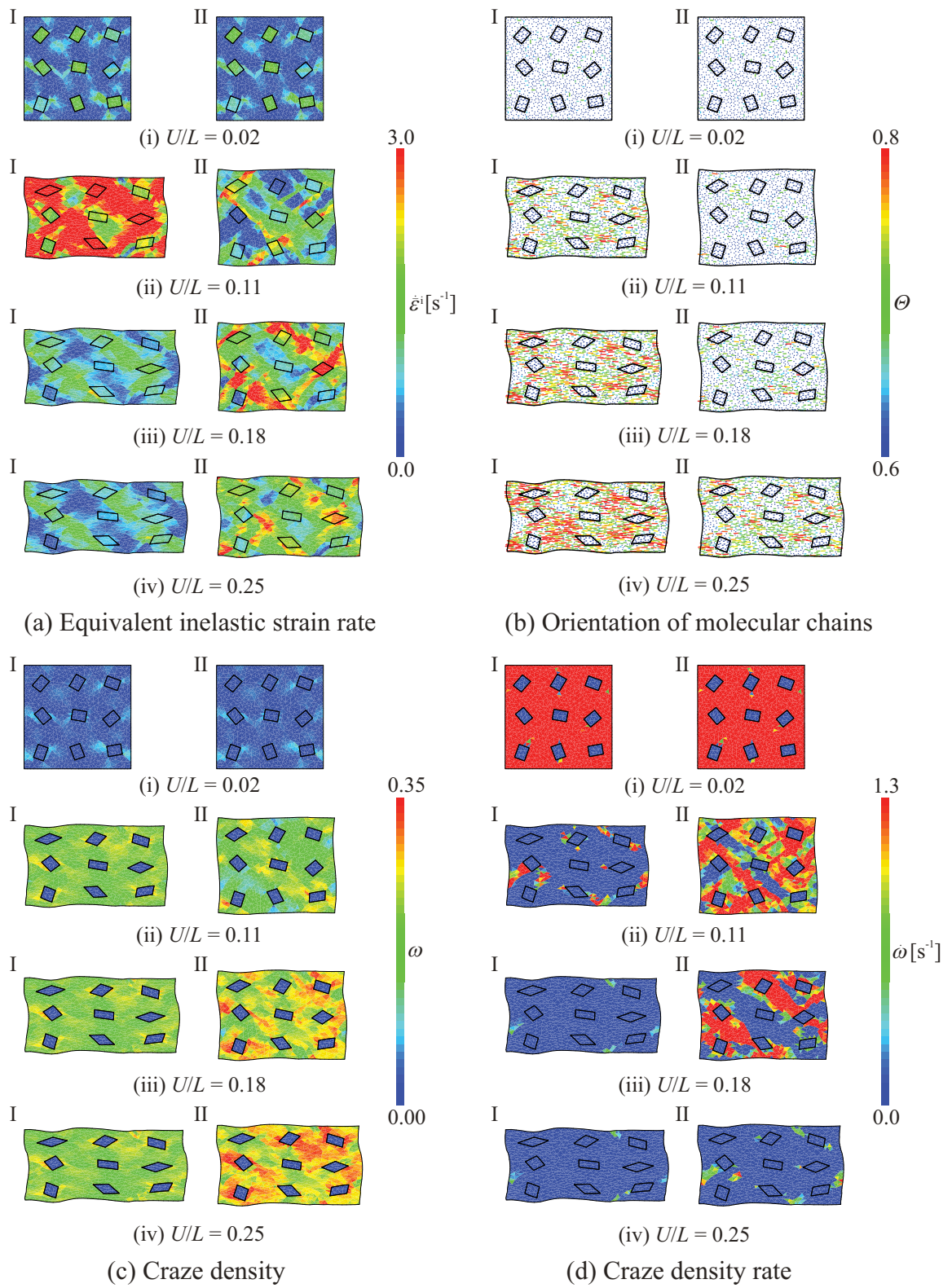


Fig. 9.23 Distributions of various quantities of polypropylene with modified numerical parameters in unit cells at sampling points I and II.

伸び率 11% から伸び率 25% にかけてくびれの形成・伝ばに伴い、くびれ領域において分子鎖が引張方向へ配向していることが確認できる。同時にユニットセルにおいてもマクロな配向強度が強い領域に配置された評価点 I のユニットセル内では全体的に配向強度が強くなっており、マクロおよびマイクロ構造の双方において変形誘起異方性が再現されていることが確認できる。ただし、マクロ試験片ではくびれ部位における分子鎖方位が全て引張方向を向くのにに対し、ユニットセル内では全ての分子鎖方位がそろっていない。加えて、必ずしも配向強度が強くない領域が明確に存在する。このようにマイクロに見ると局所的には分子鎖が配向しにくい領域が存在することは図 9.7 に示した非晶性ポリマの場合でも同様であったが、図 9.23(b)-(iv) の I のユニットセルを見る限り結晶性ポリマの場合の方がその傾向が顕著に表れる。これは図 9.23(a) からわかるようにユニットセル内部に異方性の強い結晶相が混在したことによって、マイクロ構造内における変形の分布が非晶性ポリマの場合よりさらに顕著に表れるようになったためであると考えられる。以上より、非晶性ポリマと比べて、結晶性ポリマの方がマイクロな変形は局所化しやすく、マクロ構造の変形は局所化しにくくなっていると言える。

次に、図 9.22(c) を見ると、降伏後の伸び率 11% におけるからくびれ進行部位にクレーズ密度の集中領域が形成始め、その後、くびれの伝ばとともに値を上げながらクレーズ密度集中領域が伝ばしていく様子が確認できる。さらに、図 9.22(a) および図 9.22(c) を比較すると、ひずみ速度せん断帯およびクレーズ密度集中領域の位置がほぼ対応していることがわかる。同様に、図 9.22(b) を見ると、高クレーズ密度速度領域の位置もひずみ速度せん断帯の伝ばとほぼ対応していることが確認できる。このようにクレーズ密度の速度だけではなく、蓄積量であるクレーズ密度も集中領域がくびれの進行に伴い、引張方向へ伝ばするというクレーズ進展に特徴的な傾向が再現できていると言える。この現象の数理的機構は次のように考えられる。まず、図 6.2 に示したクレーズ進展のひずみ速度依存性およびひずみ依存性によって、高ひずみ速度で変形した領域ほど配向硬化ひずみに達するまでに蓄積するクレーズ密度の値は小さくなる。したがって、非常に高いひずみ速度で変形する試験片中心部においてはクレーズ密度が増大しにくい。一方、試験片のくびれ進行部位においてはひずみ速度せん断帯が伝ばするがその相当非弾性ひずみ速度は徐々に小さくなっていくため、クレーズ密度はくびれ進行部位において増大しやすい。これらの効果により、マクロ試験片においては常にくびれ進行部位のクレーズ密度が最大値となり、クレーズ集中領域の伝ばが再現される。以上のように、本モデルによってクレーズの進展に基づく、ポリマのくびれ進行端部からの破断傾向が予測可能になると言える。なお、クレーズ集積に基づく破断の予測は 9.5 節にて実施する。また、図 9.23(a) および 9.23(c) を比較すると、ユニットセル内においては高ひずみ速度域および高クレーズ密度域との間に明確な対応は見られず、高ひずみ速度域の伝ばと対応してクレーズ密度が増大する傾向はマクロ試験片に特有の現象であることがわかる。さらに、図 9.22(b) において、分子鎖の配向がある程度強い配向強度 θ が 0.58 以上の領域においてクレーズ密度速度がほぼ零 [図 9.22(d)] となっており、分子鎖配向領域におけるクレーズ進展の停止が再現できていると言える。一方、図 9.22(c) および図 9.23(c) ならびに図 9.22(d) および図 9.23(d) をそれぞれ比較すれば、前述の相当非弾性ひずみ速度の場合と同様に、マクロ構造およびマイクロ構造におけるクレーズ挙動にもマクロな値が大きい領域のユニットセル内部では値が大きくなるという対応関係があることがわかる。なお、ユニットセル内の結晶相においてはクレーズ発展式が導入されていないため、クレーズ密度およびクレーズ密度速度ともに零となっている。また、図 9.23(a)-(ii),(iii) および図 9.23(d)-(ii),(iii) を比較すれば、評価点 II に配置されたユニットセルにおいては相当非弾性ひずみ速度分布およびクレーズ密度速度分布の間にある程度対応関係があることがわかる。これは、図 6.2(a) に示したように非弾性ひずみ速度の増加に対して、クレーズ密度速度は単調増加となるためである。同じ伸び率の評価点 I に配置されたユニットセルならびに伸び率 25% で明瞭な対応関係が見られないのは、図 6.2(a) に示したひずみ速度依存性ではなく、図 6.2(b) に示したクレーズ進展のひずみ依存性、すなわち、配向硬化によるクレーズ進展の停止がクレーズ発展式において支配的となっているためである。同様に、伸び率 2% のユニットセルにおける相当非弾性ひずみ速度分布ならびにクレーズ密度速度分布を比較すると弾性変形領域であるため、どちらも結晶相を除いて均一に近い分布となっているが、その値は大きく異なっている。す

なわち、相当非弾性ひずみ速度分布は値が小さいため、塑性降伏に至っていないと見なせるが、クレーズ密度速度分布においては値が非常に大きくすでにクレーズが発生し始めていることがわかる。このようにクレーズの形成はポリマの非弾性現象に分類される一方、実際には巨視的な塑性降伏を迎えるより前に初期硬化段階において生じる。本クレーズ発展式においては式 (6.25) の飽和クレーズ発生量 $\omega_{ss}^{(a)}$ が一定以上の値をもつことによって、クレーズが生じたと見なせる。本解析では表 9.3 に示したように $C_1 = 0.500$ としており、式 (6.25) のクレーズ発生に必要な活性化エネルギーがせん断変形に必要な活性化エネルギー ΔF_0 より小さくなる。したがって、クレーズ発生に必要な応力値はマクロな降伏に至る応力値よりも小さくなるため、前述のような初期硬化段階におけるクレーズ発生が再現される。

9.3 粘弾性効果による除荷時の非線形ひずみ回復現象の再現

本節では、5.1.2 項に示した分子鎖摩擦エネルギーの効果をより顕著に発現させた解析を実施することで、ポリマに特有の現象である除荷時の非線形ひずみ回復現象の再現を試みる。基本的な解析条件は 9.2.3 項の結晶性ポリマの解析条件と同様とし、材料定数および数値パラメータは金子・西山⁽²⁰⁾ の行った PP の除荷実験に公称応力-公称ひずみ曲線が一致するよう同定した表 9.4 の値を用いる。なお、本解析では除荷過程のひずみ回復現象の再現に焦点を当てるため、クレーズ発展式は用いず、常にクレーズ密度を零として扱う。また、環境温度 $\theta = 293$ K、端面強制ひずみ速度 $\dot{U}/L = 0.001$ ks⁻¹ とする。ただし、本解析では予負荷後の除荷状態を再現するために、伸び率 16% または 22% まで引張りを行った後、 \dot{U} の値を反転させ、公称応力値が零にな

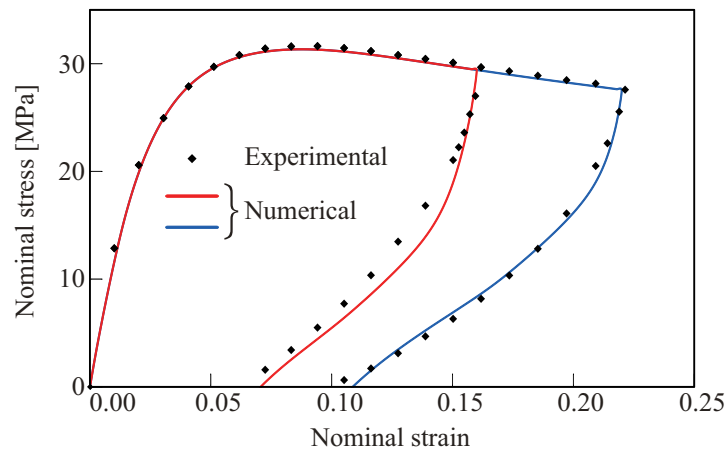


Fig. 9.24 Numerically obtained nominal stress-strain curves with experimental plots under reversal loading condition at 16% and 22% elongation.

Table 9.4 Material constants and numerical parameters for unloading analysis.

Elastic parameters	$E_0 = 1050$ MPa, $\tilde{E}_0 = 3150$ MPa, $\nu_0 = \tilde{\nu}_0 = 0.330$, $\psi_0 = 100$ GPa
Inelastic response law of Hasan and Boyce	$\gamma_{0H} = 5.00$ ns ⁻¹ , $\tau_{0H} = 54.0$ MPa, $\alpha_p = 0$ GPa ⁻¹ , $\varpi_0 = 75.0$ ns ⁻¹ , $\zeta = 5.00$ $a_0 = 0.720$ eV, $a_{eq} = 0.650$ eV, $\alpha_0 = 0.0435$ eV, $\alpha_{eq} = 1.00$ eV, $S_0 = 0$ eV $\beta_1 = 25.5$ nm ³ , $\beta_2 = 1.00$, $\beta_3 = 15.0$, $\beta_4 = 0.750$, $\beta_5 = 0.300$
Eyring hardening law	$\gamma_{0E} = 15.0$ ns ⁻¹ , $\Delta F_0 = 1.22$ eV, $\kappa = 1.94$, $g^{(1)} = 16.0$ MPa

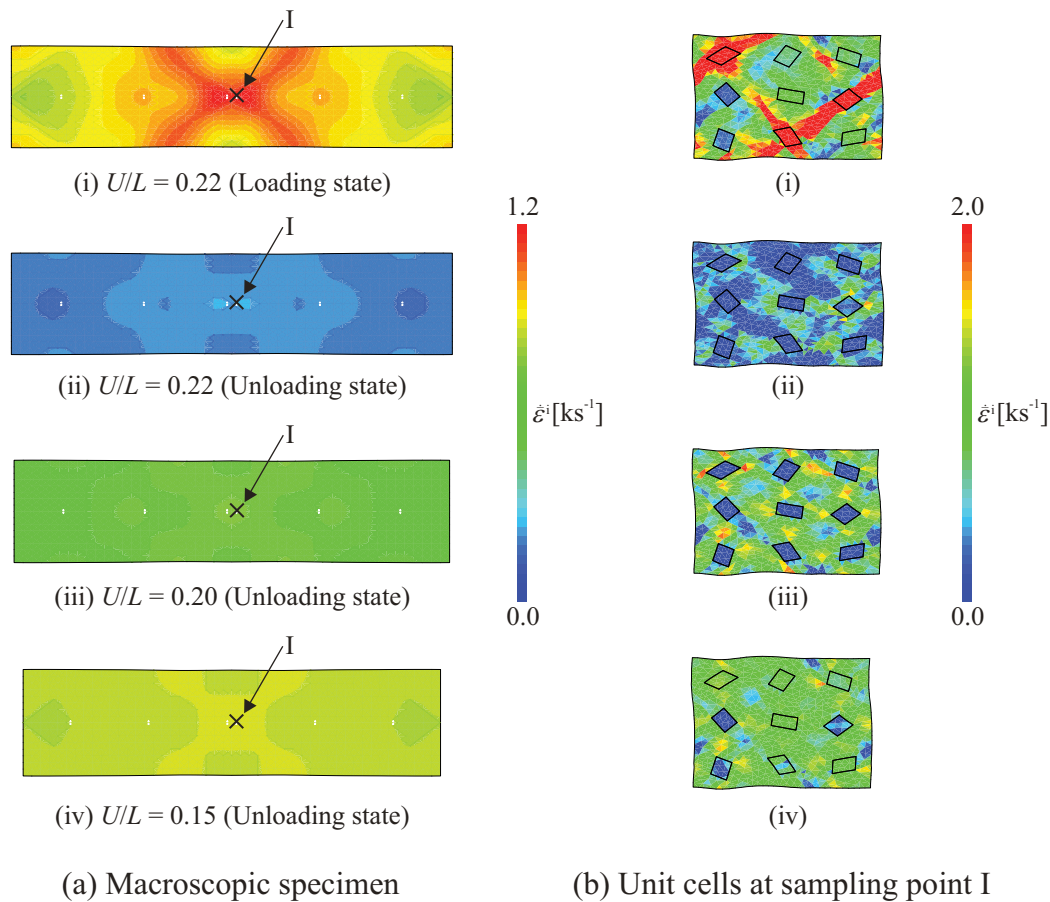
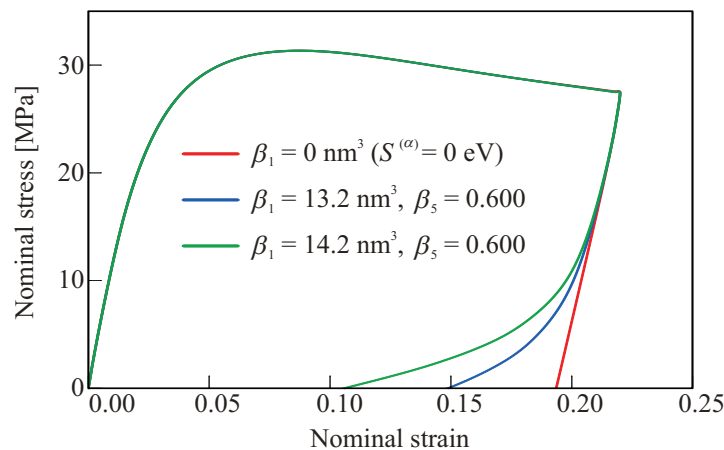


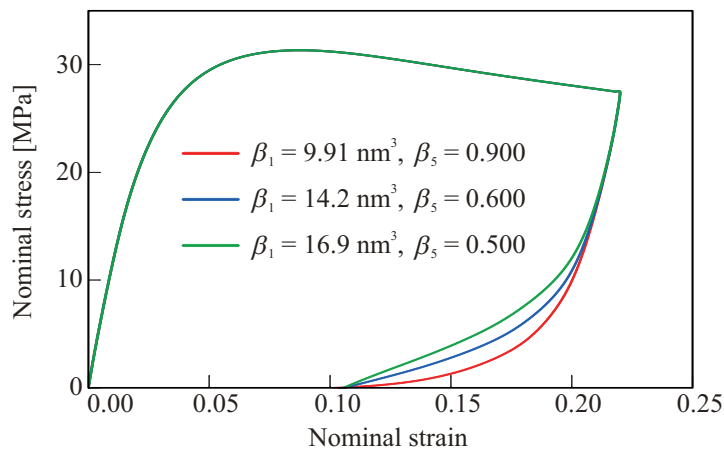
Fig. 9.25 Macroscopic and microscopic distributions of equivalent inelastic strain rate corresponding to numerical result of Fig.9.24 in which unloading starts from 22% elongation.

るまで圧縮解析を行う。

図 9.24 は解析結果の公称応力-公称ひずみ曲線および金子・西山の行った除荷実験の結果である。実線は数値解析結果、プロットは実験値を表す。なお、伸び率 16% および 22% で除荷を開始した場合の材料定数および数値パラメータは同じ値であり、強制除荷開始の伸び率のみを変更している。図 9.24 を見ると、伸び率 16% または 22% から除荷を開始した双方の解析結果において比較的高い精度で実験結果と同程度のひずみ回復を再現できている。また、除荷開始直後は線形ひずみ回復が生じているが、公称応力値 20 MPa 程度から徐々に粘弾性効果によってひずみが非線形的に回復する様子が再現できている。次に、図 9.24 の伸び率 22% から除荷を開始した場合の解析結果におけるマクロ試験片およびユニットセルにおける相当非弾性ひずみ速度分布を図 9.25 に示す。まず、図 9.25(a)-(i) および図 9.25(b)-(i) を見ると、くびれおよびひずみ速度せん断帯の形成が顕著には表れていない。これは、図 9.24 を見るとわかるように巨視的降伏は迎えているがひずみ軟化領域に達する前に強制除荷を開始しているため、ひずみ軟化と対応するくびれの発生に至っていないためである。次に、除荷開始直後である図 9.25(a)-(ii) および図 9.25(b)-(ii) を見ると、線形除荷回復領域であるため、直前までの負荷状態と比較して、マクロ試験片およびユニットセルともに瞬時にひずみ速度値が零に近い値になっている。一方、非線形ひずみ回復を生じている図 9.25(a)-(iii),(iv) および図 9.25(b)-(iii),(iv) ではマクロ試験片およびユニットセルの双方においてひずみ速度値が零にはならず、粘弾性効果の表現ができてい



(a) Change in amount of strain recovery



(b) Change in starting point of nonlinear strain recovery

Fig. 9.26 Nominal stress-strain curves obtained from reversal loading analysis using different values for β_1 and β_5 .

と言える。ここで、わずかではあるがマクロ試験片の中心部に近い領域において粘弾性効果が大きくなっていることが確認できる。これは図 9.25(a) に示したように負荷過程において試験片中心部から少なからずくびれが形成し、変形が集中したため、試験片中心部により多くの分子鎖摩擦エネルギーが蓄積したためである。また、図 9.25(b)-(iii) を見ると分子鎖摩擦エネルギーの発展式が導入されていない結晶相においてはひずみ速度値が零のままであり、粘弾性効果は生じていないことが確認できる。ただし、図 9.25(b)-(iv) を見ると粘弾性効果が生じないはずの結晶相においても相当非弾性ひずみ速度が生じている。これは、マクロな圧縮率が大きくなったことによって結晶相においても圧縮ひずみが生じたためであると考えられる。以上のようにマクロ試験片およびユニットセルのいずれにおいても除荷時の粘弾性効果が表れており、この影響により実験結果と同様の非線形ひずみ回復現象の再現が可能になっていると言える。

次に、分子鎖摩擦エネルギー $S^{(\alpha)}$ の発展式 [式 (5.10)] 中の材料定数について検討を行う。図 9.26(a) に、 $S^{(\alpha)}$ の発展式 (5.10) における材料定数 β_1 の値を変化させた公称応力-公称ひずみ曲線を示す。なお、 β_5 は $\beta_5=0.600$ で統一し、伸び率 22% から強制除荷を開始している。 $\beta_1 = 0 \text{ nm}^3$ 、すなわち、分子鎖摩擦エネル

ギー $S^{(a)}$ が常に零である解析結果を見ると線形的な弾性除荷が発生しており、ひずみ回復現象が表現できていない。一方、 $S^{(a)}$ の効果が発現する $\beta_1 = 13.2 \text{ nm}^3$ および $\beta_1 = 14.2 \text{ nm}^3$ では、 $\beta_1 = 0 \text{ nm}^3$ の場合に比べて公称応力の値が 15MPa あたりから非線形な曲線になり、公称ひずみが徐々に回復していることが確認できる。また、 β_1 の値を大きくすると、ひずみの回復量が増加し、非線形除荷の開始点もわずかに上昇していることがわかる。これは、 β_1 には $S^{(a)}$ の発展を変化させる効果があり、それにより図 5.3 における逆方向のエネルギー障壁が変化し、逆方向反応が起きる頻度および平衡状態に達するタイミングが変化するためである。また、図 9.26(b) に β_1 および β_5 を同時に変化させた場合の公称応力-公称ひずみ曲線を示す。 β_5 を変化させることにより、図 5.2 に示したように $S^{(a)}$ の応力に対する発展の仕方が非線形に変化するため、非線形ひずみ回復時の応力-ひずみ曲線の曲率が変化することになる。したがってひずみ回復量を制御する β_1 と同時に変化させることで、図 9.26(b) のように非線形除荷の開始点のみを変化させ、最終的なひずみ回復量を同程度にすることも可能である。以上のように、本モデルは材料定数によって多様な非線形ひずみ回復のパターンを再現することが可能であり、異なる物性を示すポリマに対しても適用可能な汎用性があると言える。

9.4 静水圧応力依存性による降伏応力変化の再現

本節では Hasan-Boyce の非弾性応答則に新たに導入した静水圧応力依存係数 α_p の効果を発現させ、単軸引張解析および単軸圧縮解析を実施することで、引張時および圧縮時の降伏応力変化の再現を試みる。基本的な解析条件は 9.2.3 項の結晶性ポリマの解析条件と同様とし、材料定数および数値パラメータは Sanomura⁽¹⁹⁾ の行った PP の引張・圧縮試験に公称応力-公称ひずみ曲線が一致するよう同定した表 9.5 の値を用いる。なお、本解析においても 9.3 節と同様にクレーズ発展式は用いず、常にクレーズ密度を零として解析を実施する。また、環境温度 $\theta = 293 \text{ K}$ とし、端面強制ひずみ速度は引張解析の場合は $\dot{U}/L = 0.001 \text{ ks}^{-1}$ 、圧縮解析の場合には $\dot{U}/L = -0.001 \text{ ks}^{-1}$ として用いる。なお、本節の公称応力-公称ひずみ曲線では引張りおよび圧縮の解析結果を比較しやすくするために、圧縮時の公称応力および公称ひずみの値を反転させて解析結果を示す。

図 9.27(a) に静水圧応力依存性を考慮していない従来モデルを用いた場合、すなわち、 $\alpha_p = 0 \text{ GPa}^{-1}$ とした際の引張りおよび圧縮時の解析結果を示す。本解析では引張時の応力-ひずみ応答に解析結果が一致するよう材料定数を同定しているため、引張解析においては実験結果と良い対応が得られているが、圧縮時には非弾性領域における応力値が実験値と一致しないことがわかる。また、静水圧応力依存性を考慮しない場合でも圧縮解析時の方が引張解析時よりも若干高い応力となる。これは、材料モデルに依存した引張りおよび圧縮変形の非対称性が生じているわけではなく、単に幾何学的な剛性の違いにより、圧縮時の方が試験片が硬くなるためである。次に、図 9.27(b) に静水圧応力依存係数 $\alpha_p = 2.00 \text{ GPa}^{-1}$ とした場合の解析結果を示す。なお、 α_p の値が大きくなると非弾性領域での応力値に変化が生じるため、図 9.27(a) の場合から τ_0 の値を修正することで、引張解析の結果と実験結果が一致するよう調整を行っている。図 9.27(b) を見ると、引張時のみではなく、

Table 9.5 Material constants and numerical parameters for uniaxial tensile and compressive analysis using model with dependence of hydrostatic stress.

Elastic parameters	$E_0 = 1500 \text{ MPa}$, $\tilde{E}_0 = 4500 \text{ MPa}$, $\nu_0 = \tilde{\nu}_0 = 0.330$, $\psi_0 = 100 \text{ GPa}$
Inelastic reponse law of Hasan and Boyce	$\gamma_{0H} = 5.00 \text{ ns}^{-1}$, $\tau_{0H} = 64.0 \text{ MPa}$, $\alpha_p = 2.00 \text{ GPa}^{-1}$, $\varpi_0 = 75.0 \text{ ns}^{-1}$, $\zeta = 5.00$ $a_0 = 0.720 \text{ eV}$, $a_{\text{eq}} = 0.650 \text{ eV}$, $\alpha_0 = 0.0435 \text{ eV}$, $\alpha_{\text{eq}} = 1.00 \text{ eV}$, $S_0 = 0 \text{ eV}$ $\beta_1 = 1.44 \text{ nm}^3$, $\beta_2 = 4.00$, $\beta_3 = 15.0$, $\beta_4 = 1.00$, $\beta_5 = 0$
Eyring hardening law	$\gamma_{0E} = 15.0 \text{ ns}^{-1}$, $\Delta F_0 = 1.22 \text{ eV}$, $\kappa = 1.94$, $g^{(1)} = 16.0 \text{ MPa}$

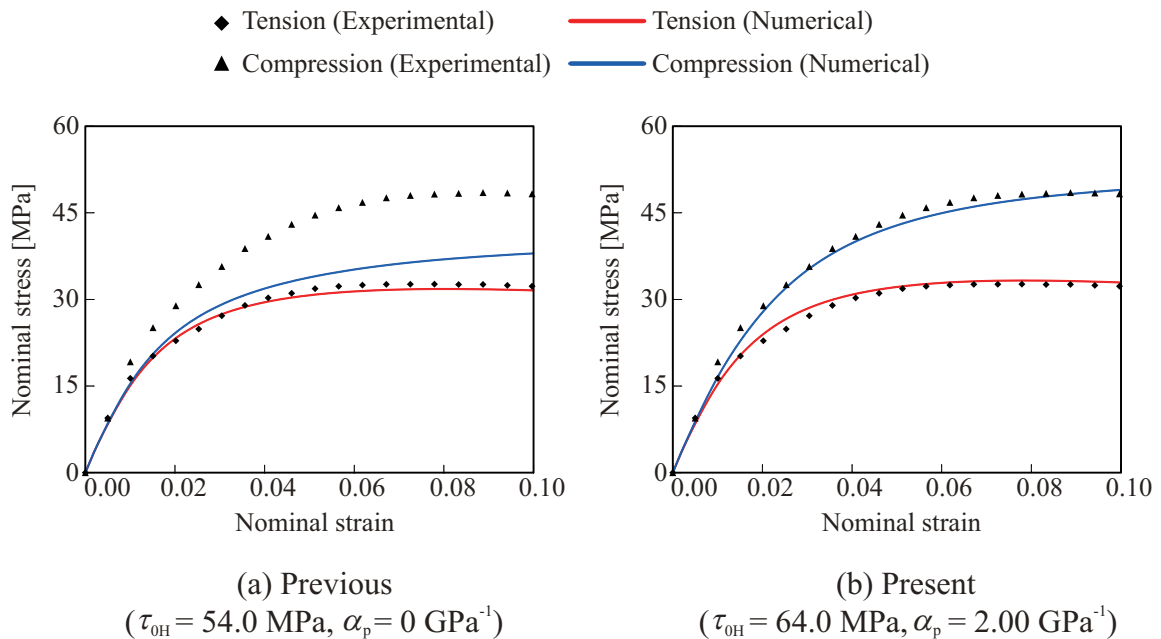


Fig. 9.27 Numerically obtained nominal stress-strain curves with experimental plots under uniaxial tension and compression conditions of polypropylene.

圧縮時においても実験結果とよく一致する応力-ひずみ応答が得られており，本モデルによってポリマに特有の現象である静水圧応力の依存性が再現できていると言える。

9.5 広範囲のひずみ速度におけるポリマの破断予測手法

本節では，異なる引張速度でポリマが変形した際の，ポリマの破断傾向を予測する手法を提案する．まず，複数のひずみ速度における結晶性ポリマの大変形 FEM 解析を実施することで，本モデルによってひずみ速度に依存したポリマの降伏応力の変化が表れることを確認する．同時に，環境温度変化に依存したポリマの降伏応力の変化ならびにクレーズ発生および成長のひずみ速度依存性が定性的に再現されることを示す．次に，応力およびクレーズ密度の評価に基づく破断予測条件を新たに構築する．構築した破断予測条件を複数のひずみ速度条件下で実施した FEM 解析結果に適用することで，ひずみ速度に依存したポリマの延性の変化を再現する．

9.5.1 複数のひずみ速度および環境温度における解析

解析対象は結晶性ポリマである PP とし，基本的な解析条件および材料定数は 9.2.3 項に示した結晶性ポリマの解析条件と同様とする．ただし，クレーズ発展式中のパラメータのみを表 9.6 のように修正して用いる．また，ひずみ速度依存性について検討する際には，環境温度 $\theta = 293$ K で固定し，端面強制ひずみ速度 \dot{U}/L をそれぞれ 100, 10, 1, 0.1 および 0.01 s^{-1} として解析を実施した．一方，環境温度依存性について検討する際には，端面強制ひずみ速度 $\dot{U}/L = 1 \text{ s}^{-1}$ で固定し，環境温度 θ をそれぞれ 213, 253, 293, 333 および 373 K として解析を実施した．図 9.28(a) にその解析結果における公称応力-公称ひずみ曲線を，図 9.28(b) に各解析における降伏応力を与えた端面強制ひずみ速度または環境温度についてプロットした図を示す．図 9.28(a) を見ると，ひずみ速度の増加または環境温度の低下に伴い，降伏応力および非弾性変形中の流れ応力が増大する

Table 9.6 Material constants and numerical parameters for fracture prediction.

Craze evolution equation	$n_r = 4.00 \text{ ns}^{-1}$, $g_r = 100 \text{ ns}^{-1}$, $\gamma_c = 0.350$, $\omega^* = 1.00$
	$C_1 = 0.650$, $C_2 = 0.230$, $D_1 = D_2 = 0.0252 \text{ eV}$, $p_1 = p_2 = 50.0$

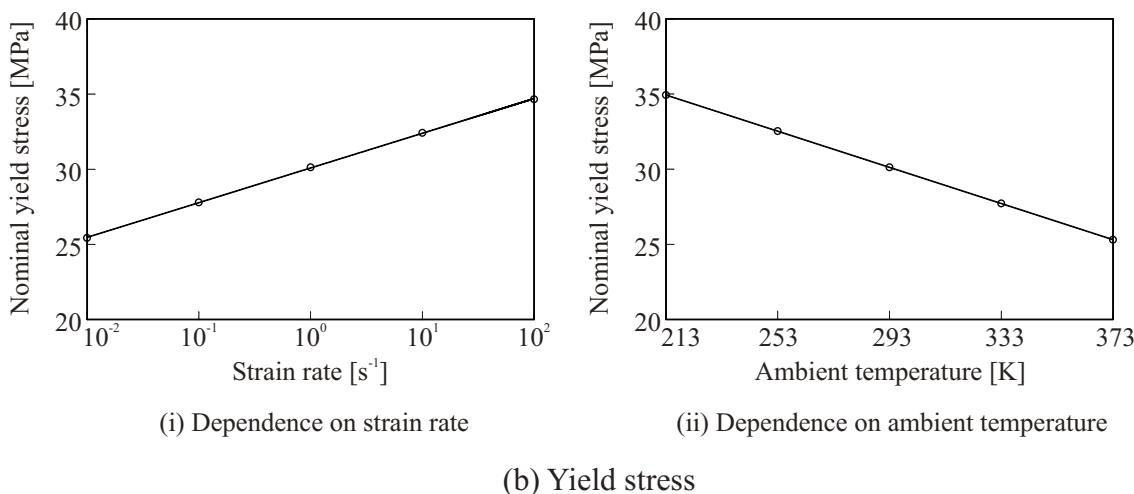
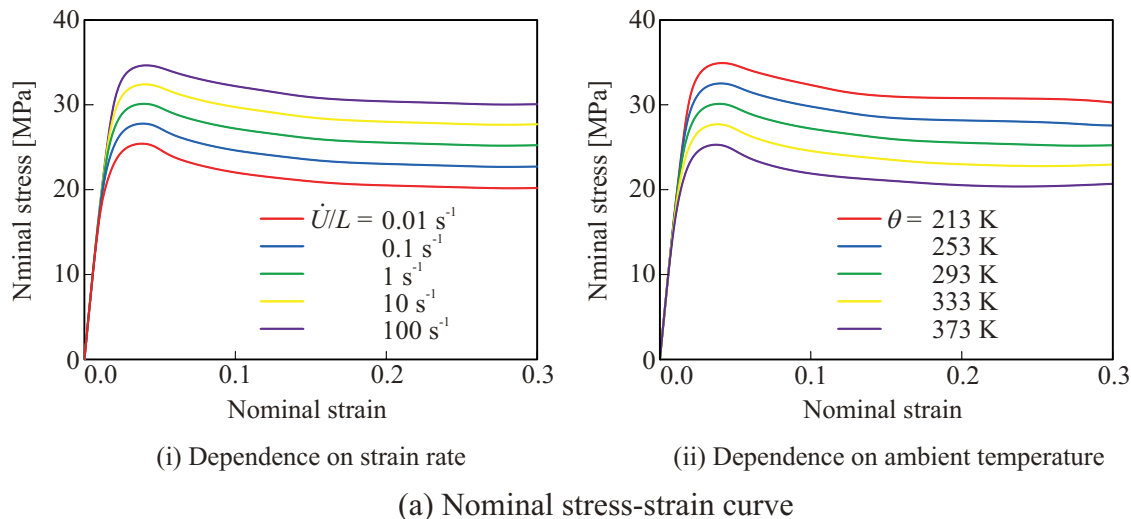


Fig. 9.28 Dependence of stress-strain curve and yield stress on strain rate and temperature.

という実現象と定性的に対応する現象が再現できていることが確認できる。このように、結晶性ポリマ全体の力学応答において、ひずみ速度に加え、環境温度に対する依存性が再現可能となっている。また、図 9.28(b)からは本モデルにおいてはひずみ速度の対数的な増加に対して降伏応力の増加が線形となることが確認できる。一方、環境温度の増加に対しては降伏応力は線形に減少している。このことは、図 9.28(a)において、各系列の応力値の変化幅がほぼ均等になっていることと対応している。以上のように、材料の微視構造の各相(本解析では非晶相および結晶相)に反応速度論形材料の応答則を採用した場合には、巨視的変形応答におけるひずみ速度依存性および環境温度依存性も反応速度論の体系に従うことがわかる。また、反応速度論の体系においてはひずみ速度の対数的な増加および環境温度の線形的な減少が等価な現象になると言える。

次に、環境温度を固定し、ひずみ速度を変化させた解析結果のうち、伸び率 25% におけるマクロ試験片内

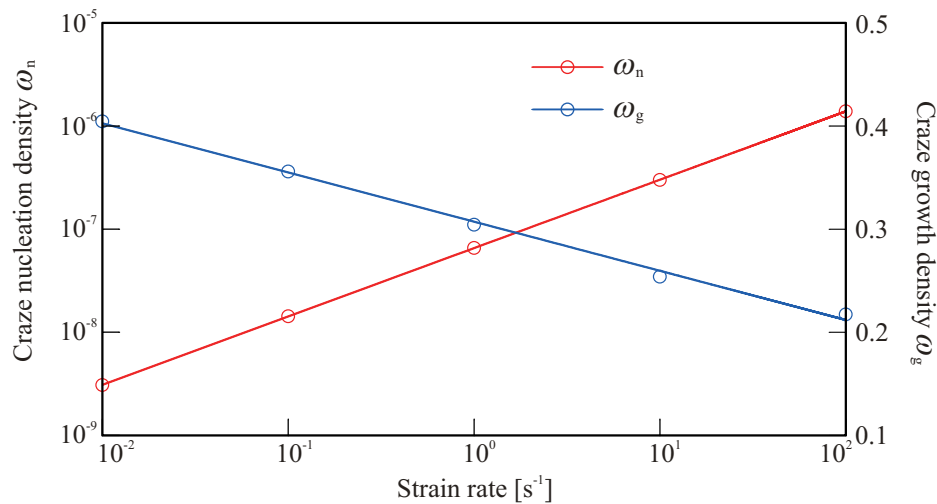


Fig. 9.29 Dependence of craze nucleation density and craze growth density on strain rate.

でのクレーズ発生密度 ω_n の最大値およびクレーズ成長密度 ω_g の最大値をひずみ速度に対してプロットした図を図 9.29 に示す. 同図を見ると, クレーズ発生密度は高ひずみ速度域ほど増加している一方, クレーズ成長密度は高ひずみ速度域ほど減少しており, 高ひずみ速度で変形した場合ほど小さいクレーズが大量に発生するという実現象におけるクレーズ形態のひずみ速度依存性が本研究で提案したクレーズ発展式によって, 定性的に再現できていると言える. このようにクレーズ発生密度およびクレーズ成長密度が真逆のひずみ速度依存性を示す理由は次のように考えられる. まず, クレーズ発生密度についてはその発展式が式 (6.21) の反応速度論の形で与えられる一方, その最大値は式 (6.25) の飽和クレーズ発生量 ω_{ns} に強く律速される. 式 (6.25) においては高い応力が負荷されるほど, ω_{ns} が大きな値となるため, 非弾性変形中の応力値が高い高ひずみ速度域の方がクレーズ発生密度の飽和値が大きくなる. よって, クレーズ発生密度そのものも高ひずみ速度域において増加する. 一方, クレーズ成長密度はその最大値が特定のモデルによって与えられているわけではなく, 式 (6.22) の反応速度論の形で発展量が決定される. したがって, 図 6.2(a) に示したクレーズ発展のひずみ速度依存性により高ひずみ速度域ほど蓄積するクレーズ成長密度の値は小さくなる. ただし, クレーズ成長密度の発展量は式 (6.24) に示したようにクレーズ発生密度にも依存するため, クレーズ発展式中の材料定数を変更することによって, クレーズ成長密度のひずみ速度依存性は図 9.29 と大きく異なるものにもすることも可能である. これによって, 様々なポリマが持つクレーズ進展のひずみ速度依存性に柔軟に対応することが可能になると考えられる. 最後に, 図 9.29 からクレーズ発生密度の値は $10^{-6} \sim 10^{-9}$ 程度とクレーズ成長密度の値と比較して非常に小さいことが確認できる. したがって, クレーズ密度 ω に占める割合はほとんどがクレーズ成長密度 ω_g であると言える. ただし, 上述のようにクレーズ成長密度の発展量はクレーズ発生密度に依存するため, クレーズ発生密度がクレーズ密度に対してほとんど影響を与えないわけではないことに注意されたい.

9.5.2 破断予測条件の構築

本研究ではポリマの内部の微視的損傷の進展をクレーズ発展式によって表現しており, ポリマ特有のくびれ進行部位へのクレーズの集積を可視化した. これにより, 応力による材料強度の評価に基づく破断部位の予測に加え, 試験片の破断部位をクレーズ密度の最大値を有する領域として予測することが可能となったと言える. 一方, ポリマはひずみ速度に依存して降伏応力のみならず, 破断ひずみが増加する特性を有する. 加えて, 対象とするポリマの種類または実験条件によって, 図 1.9 に示したように低ひずみ速度域ほど延性が増大

Table 9.7 Fracture criteria for polypropylene based on effective stress and craze density.

Name	Criteria
Criterion A	$\sigma^* \geq 44 \text{ MPa}$ or $\omega \geq 0.20$
Criterion B	$\sigma^* \geq 41 \text{ MPa}$ or $\omega \geq 0.30$
Criterion C	$\sigma^* \geq 38 \text{ MPa}$ or $\omega \geq 0.40$

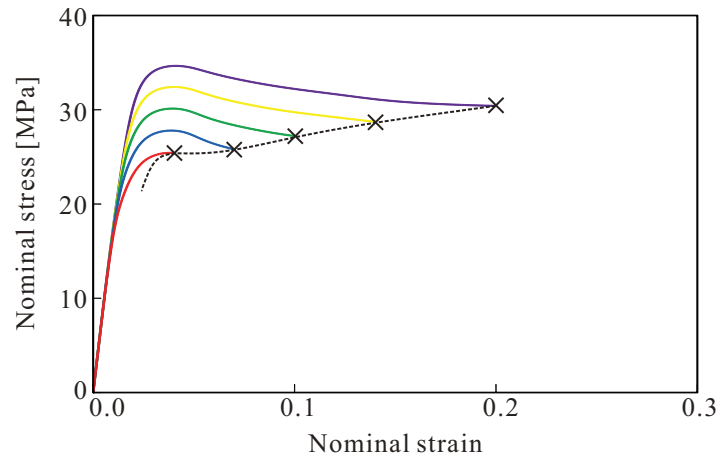
する傾向ならびに最大延性を呈する参照ひずみ速度を境にそれより高ひずみ速度域および低ひずみ速度域の双方で延性が低下する傾向の2通りが実験的に確認されている。このようなポリマの破断ひずみのひずみ速度依存性の相違が生じる原因は現在までに明らかになっていない。そこで、本項では試験片の破断部位に加え、上述のようなひずみ速度に依存したポリマの延性の変化を柔軟に予測可能とするため、マクロな応力およびクレーズ密度を用いて破断予測条件を新たに提案する。なお、本研究のように損傷配置を導入し、損傷の影響を陰的に考慮した場合は実際に材料に負荷される応力は真応力 σ ではなく、実応力 σ^* であるため、破断の閾値も σ^* について定める必要があることに注意されたい。

まず、PPのフィブリル強度は38~44 MPa程度であることが実験的に求められている⁽¹³⁴⁾⁽¹³⁵⁾。ポリマの場合、フィブリルに負荷される応力は実応力に相当することから、試験片のいずれかの部位において実応力がフィブリル強度を上回った際に、破断が生じることが予測できる。一方、くびれの形成のようなマクロな変形の局所化を伴う場合には応力は常に最初にくびれが形成した領域に集中するため、実応力のみに基づいた破断予測では1.2.2項で言及したようなくびれ進行部位からの破断挙動は生じないことが予測される。そこで、本研究ではクレーズ密度が一定以上大きくなった領域では急減に応力集中が生じ、解析上得られる実応力よりも高い応力がフィブリルに作用することでフィブリルが切断すると仮定する。この仮定に基づけば、クレーズ密度がある閾値を上回った領域ではクレーズがクラック化し、延性破断を生じることとなる。また、高橋ら⁽¹⁰¹⁾⁽¹²³⁾は鋼材のき裂がボイド率約0.15で生じること⁽¹³⁶⁾ならびにクレーズはボイドおよびフィブリルからなり、フィブリルのクレーズに対する体積分率が約0.5であること⁽¹⁴⁾を考慮し、PPにき裂が生じるクレーズ密度を0.30前後であると仮定している。以上より、本研究ではPPの実応力の破断の閾値を38~45 MPa程度、クレーズ密度の破断の閾値を0.2~0.4程度と考え、いずれか一方の値が破断の閾値を超えた際に破断が生じるものとする。さらに、次項では単一の破断予測条件ではなく、表9.7に示す3通りの破断予測条件を適用することで、破断予測条件の違いによる破断ひずみへの影響について検討する。

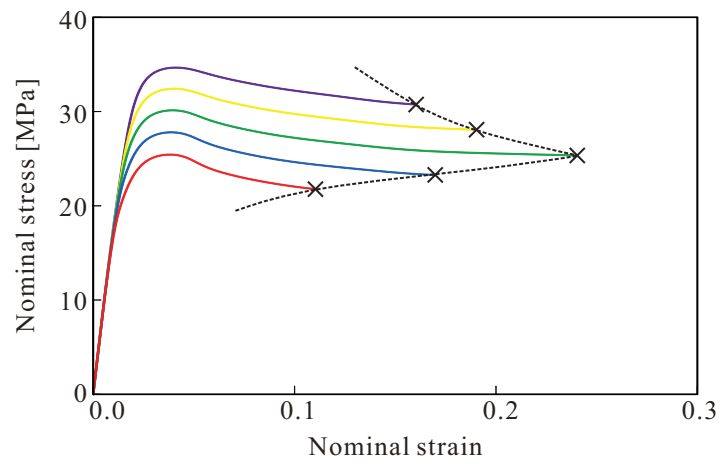
9.5.3 ひずみ速度に依存したポリマの破断傾向の予測

9.5.1項で得られた複数のひずみ速度下での解析結果に表9.7の破断予測条件を適用し、破断予測を行った結果を図9.30に示す。まず、Criterion Aを適用した場合には、図9.30(a)の予測破断曲線に示したように低ひずみ速度域ほど延性が低下する傾向が表れることが確認できる。次に、Criterion Bを適用した場合には、図9.30(b)の予測破断曲線のように最大延性を呈するひずみ速度である $\dot{U}/L = 1 \text{ s}^{-1}$ を基準にそれより低ひずみ速度域および高ひずみ速度域の双方において延性が低下する現象が表れている。さらに、Criterion Cを適用した場合には、図9.30(c)の予測破断曲線に示すように高ひずみ速度域ほど延性が低下するCriterion Aと逆の傾向が表れることが確認できる。以上のように、適用する破断予測条件によって異なる破断ひずみのひずみ速度依存性が再現されていることがわかる。

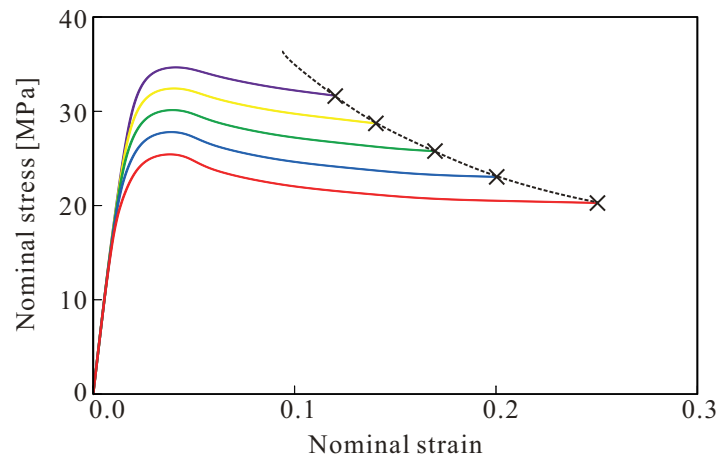
ここで、図9.30の破断予測において実応力およびクレーズ密度のどちらの量によって破断したかをまとめたものが表9.8である。なお、表9.8における実応力およびクレーズ密度の値は破断ひずみに達した際のマク



(a) Predicted by criterion A



(b) Predicted by criterion B



(c) Predicted by criterion C

× Predicted fracture point ····· Predicted fracture line
 — $\dot{U}/L = 0.01 \text{ s}^{-1}$ — $\dot{U}/L = 0.1 \text{ s}^{-1}$ — $\dot{U}/L = 1 \text{ s}^{-1}$ — $\dot{U}/L = 10 \text{ s}^{-1}$ — $\dot{U}/L = 100 \text{ s}^{-1}$

Fig. 9.30 Nominal stress-strain curves and predicted fracture points obtained by three types of fracture criteria.

Table 9.8 Effective stress and craze density at fracture strain predicted by three types of fracture criteria.

(a) Criterion A				
Strain rate	Fracture strain	Effective stress	Craze density	Cause of fracture
\dot{U}/L [s ⁻¹]	U/L	σ^* [MPa]	ω	
100	0.20	44	0.20	σ^* or ω
10	0.14	38	0.21	ω
1	0.10	34	0.21	ω
0.1	0.07	31	0.21	ω
0.01	0.04	29	0.20	ω

(b) Criterion B				
Strain rate	Fracture strain	Effective stress	Craze density	Cause of fracture
\dot{U}/L [s ⁻¹]	U/L	σ^* [MPa]	ω	
100	0.16	42	0.19	σ^*
10	0.19	41	0.23	σ^*
1	0.24	41	0.30	σ^* or ω
0.1	0.17	37	0.30	ω
0.01	0.11	32	0.31	ω

(c) Criterion C				
Strain rate	Fracture strain	Effective stress	Craze density	Cause of fracture
\dot{U}/L [s ⁻¹]	U/L	σ^* [MPa]	ω	
100	0.12	39	0.16	σ^*
10	0.14	38	0.21	σ^*
1	0.17	38	0.26	σ^*
0.1	0.20	38	0.35	σ^*
0.01	0.25	38	0.40	σ^* or ω

口試験片内における最大値を有効数字 2 桁で表している。表 9.8 を見ると、いずれの破断予測条件を用いた場合でも、最大延性を呈するひずみ速度において実応力およびクレーズ密度の破断予測条件をほぼ同時に満たしており、それより高ひずみ速度域では実応力に依存した破断が、低ひずみ速度域ではクレーズ密度が原因となる破断が生じていることが確認できる。これは、9.5.1 項に示したように、高ひずみ速度域ほど非弾性変形中の応力値が高くなることならびに低ひずみ速度域ほどクレーズ密度の値が大きくなるため、それぞれの破断予測条件をより満たしやすくなるためである。すなわち、高ひずみ速度域における脆化現象は応力のひずみ速度依存性に、低ひずみ速度域における脆化現象はクレーズ密度のひずみ速度依存性にそれぞれ起因していると言える。なお、このような理由から、図 9.30(a) および図 9.30(c) においてはさらに高ひずみ速度域または低ひずみ速度域における解析をそれぞれ実施することで、図 9.30(b) のように最大延性を呈するひずみ速度より高速側および低速側の双方で脆化する傾向が表れることが予測される。以上のように、最大延性を呈するひずみ速度において実応力およびクレーズ密度の破断予測条件をほぼ同時に満たすという考えに基づけば、任意の実験的に観察される破断ひずみのひずみ速度依存性を柔軟に予測することが可能になる。

なお、本項では複数の破断予測条件を用いることによって図 9.30 に示したような複数の破断ひずみのひずみ速度依存性を仮想的に予測したが、破断予測に用いるフィブリル強度などは材料に固有の値であり、より実用的な破断予測を実施する際には破断予測条件は一意に定まっていることが望ましい。したがって、破断予測条件および広範囲のひずみ速度条件下における破断ひずみの値が実験的に得られている場合には、その破断傾向を再現可能なようにクレーズ発展式中の材料定数を調整する必要がある。これによって、はじめてその材料固有のクレーズ進展のパラメータが同定されると言える。特に、応力と異なり実験中の試験片のクレーズ密度を計測することは困難であり、そのような計測を行った例も現在までに報告されていないため、本項で述べたように破断予測に基づいてクレーズ進展の材料定数を決定することが現時点で最も妥当な手法であると言える。

最後に、ひずみ速度 100 s^{-1} 、 1 s^{-1} および 0.01 s^{-1} の解析結果のうち、Criterion B を適用した際の破断ひずみにおける実応力分布およびクレーズ密度分布を図 9.31 に示す。同図の実応力分布を見ると、いずれの引張速度においても試験片中心部に最も実応力が高い領域が形成しており、実応力の破断予測条件を満たす場合、すなわち、ひずみ速度 100 s^{-1} の場合には試験片中心部から破断を生じることが予測される。一方、図 9.31 のクレーズ密度分布を見ると、ひずみ速度 100 s^{-1} および 0.01 s^{-1} の場合は、クレーズ密度の集中領域が試験片中心部に形成する一方、ひずみ速度 1 s^{-1} の場合には、クレーズ密度集中領域が試験片端部に形成している。したがって、 1 s^{-1} の解析においてクレーズ密度の破断予測条件を実応力の破断予測条件より先に満たす場合はポリマ特有の破断現象であるくびれ進行端部からの破断が生じることが予測できる。一方、ひずみ速度 0.01 s^{-1} の場合にはクレーズによる破断を引き起こすが、高クレーズ密度領域が引張方向へ伝ばする前に破断が生じてしまうため、その破断部位は試験片中心部となることが予測される。以上のように、実応力によって破断する場合には試験片中心部から破断することが、クレーズ密度によって破断する場合には比較的延性が高い場合のみくびれ進行端部から、延性が低い場合には試験片中心部から破断することが予測される。このような図 9.31 から得られる知見および表 9.8 の破断ひずみおよび破断原因の情報を統合すれば、図 9.30 の各解析結果における試験片の破断部位を十分予測可能である。すなわち、表 9.8 において破断原因が実応力 σ^* となっている解析および破断ひずみが比較的小さい解析は試験片中心部から破断したことが予測される。また、その他の破断原因がクレーズ密度 ω であり、かつ比較的高い延性を示す解析 [補足 I.7] はくびれ進行端部から破断することが予測できる。

なお、本解析においては式 (9.1) によって、事前に試験片中心部にわずかなくびれを生じさせているため、試験片中心部に初期くびれが形成する。しかしながら、実際の試験においては、試験片毎の形状や内部構造などの個体差によって初期くびれの形成位置は変化することが予測される。そのような場合には、上述の実応力の集中領域およびクレーズの初期集中領域は必ずしも試験片中心部とならず、破断部位も異なる位置になると

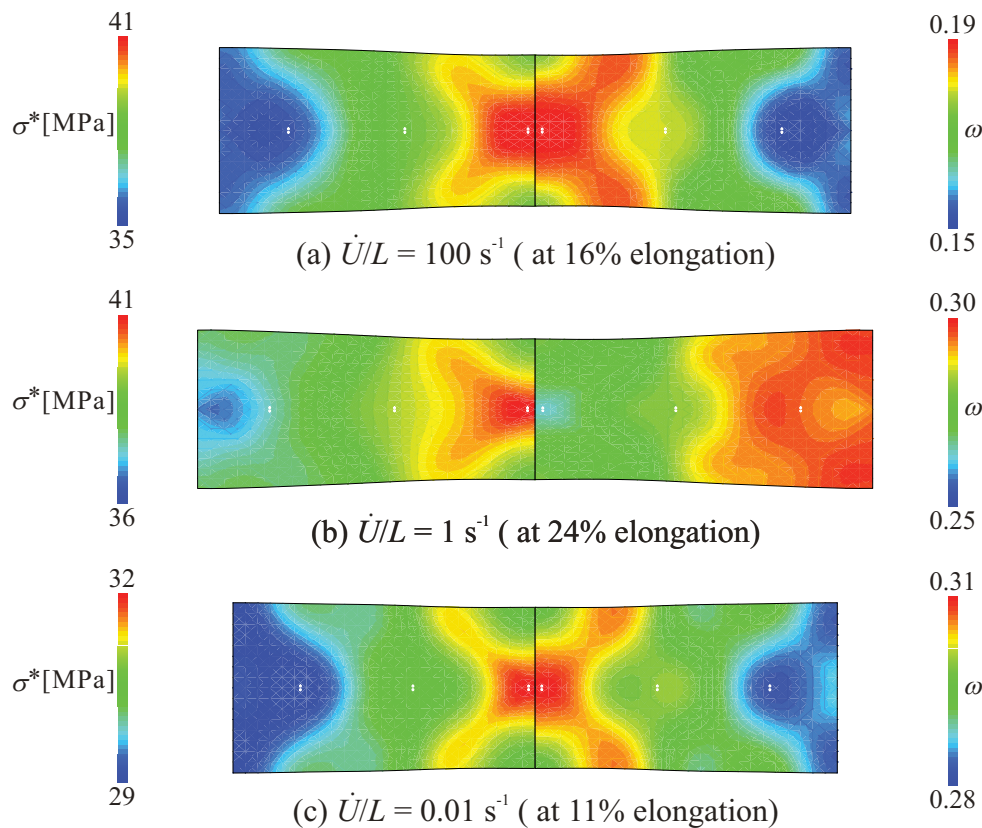


Fig. 9.31 Distributions of effective stress (left) and craze density (right) at fracture starin predicted by criterion B.

言える。また、本論文では解析領域全体の初期クレーズ密度を零として解析を実施しているため、最大クレーズ密度領域が図 9.31 に示したように常にくびれ進行端部に形成し、くびれ進行端部からの破断が予測可能となる。しかしながら、実際の試験片では作成段階で既にクレーズまたは自由体積がある程度大きくなっている領域が存在する可能性がある。そのような場合には必ずしもくびれ進行端部にクレーズが集中せず、その他の部位からクレーズによる破断を生じることが予測される。以上のように本研究で予測した破断傾向は常に同様の初期条件下で解析的に得られる傾向であり、試験片毎に初期不整にばらつきがある実際の試験の結果と必ずしも破断部位が一致しないことに注意されたい。

9.6 三次元解析

本節では、前節までに行ってきた平面ひずみ条件下における FEM 解析を三次元問題へと拡張する。まず、分子鎖塑性モデルを用いて非晶性ポリマである PMMA のミクロな試験片を対象とした解析 [補足 I.5] を実施する。その際、三次元問題における分子鎖基底ベクトルの初期方位の決定方法について述べる。次に、三次元構造に拡張したすべり系を有する結晶塑性モデルを用いて結晶相単相の単軸引張解析を実施することで、平面ひずみ条件下における解析と同様の分子鎖配向に加え、三次元問題固有の配向モードが表れることを示す。最後に、非晶相および結晶相が混在した三次元構造を有するユニットセルに対して均質化法を適用することで結晶性ポリマのマクロ試験片における大変形 FEM 解析を実施する。以上の解析結果から、三次元問題においてもくびれの伝ばをはじめとするポリマの大変形応答の特徴が平面ひずみ条件下における解析と同様に再現可能

となることを示す.

9.6.1 非晶性ポリマのマイクロ試験片に対する三次元解析

解析対象として図 9.32(a) に示すようなダンベル形試験片の平行部のみを想定し, その長さ $L = 80.0 \mu\text{m}$, 幅 $W + \Delta W$, 厚さ H , アスペクト比 $L/W = 4$, $H/W = 0.1$ とする. また, 形状初期不整 ΔW は平面ひずみ条件の解析と同様に式 (9.1) で与える. ここで, 不整振幅を $W_1 = 0.00375$ および $W_2 = 0.00150$, 波数を $m_w = 4.00$ とする. 用いる要素は図 9.32(b) に示すように解析領域を幅方向に 16 分割, 長手方向に 64 分割, 厚さ方向に 2 分割して得られる計 2048 個の 8 節点六面体要素とする. 解析領域の境界条件は変位 \mathbf{u}^0 および節点外力 $\overline{\mathbf{F}}^{\text{ext}}$ を用いて次式のように規定する.

$$\left. \begin{aligned} u_1^0 = u_2^0 = u_3^0 = 0 & \quad \text{at } x_1 = x_2 = x_3 = 0 \\ u_2^0 = 0, \quad \overline{F}_3^{\text{ext}} = \overline{F}_1^{\text{ext}} = 0 & \quad \text{at } x_2 = 0, x_1 \neq 0 \\ & \quad \text{or } x_2 = 0, x_3 \neq 0 \\ u_2^0 = U, \quad \overline{F}_3^{\text{ext}} = \overline{F}_1^{\text{ext}} = 0 & \quad \text{at } x_2 = L \\ \overline{F}_1^{\text{ext}} = \overline{F}_2^{\text{ext}} = \overline{F}_3^{\text{ext}} = 0 & \quad \text{at other nodes} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (9.3)$$

また, 解析中の端面強制ひずみ速度 $\dot{U}/L = 0.550 \text{ ks}^{-1}$, 環境温度 $\theta = 338 \text{ K}$ とし, 公称ひずみが 100% に達するまでの時間ステップ数を 20000 とする. 本解析においては非晶性ポリマの μm オーダーのスケールの解析を想定することから, 均質化法を用いず, 代わりに多絡み点モデルによって各積分点に 40 個の絡み点を埋め込む.

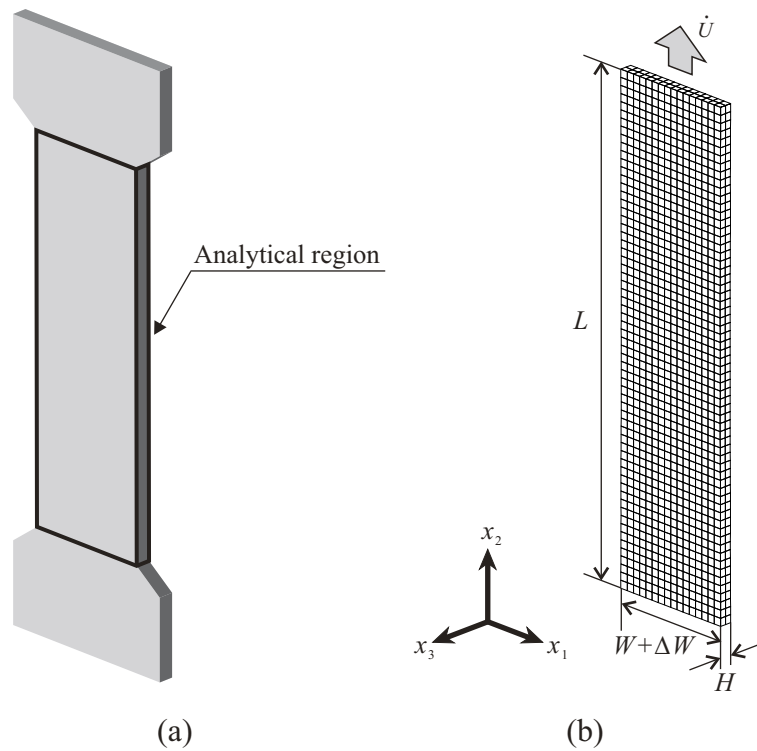


Fig. 9.32 Computational model of glassy polymer for three-dimensional analysis, (a) Schematic image of analytical region, (b) Finite elements of micro-specimen model of glassy polymer.

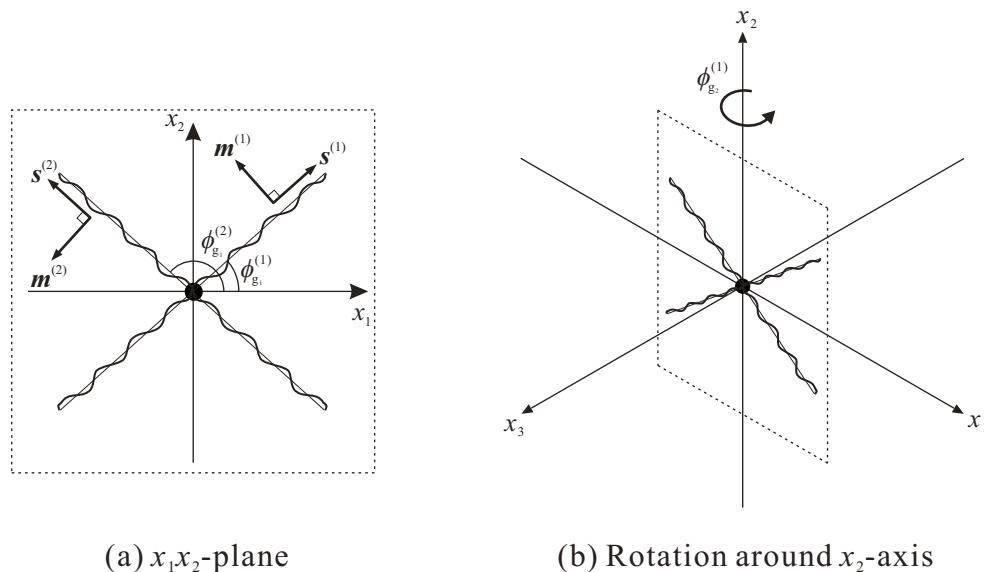


Fig. 9.33 Determination process of initial direction of molecular chain base vectors in glassy phase for three-dimensional analysis.

Table 9.9 Material constants and numerical parameters for three-dimensional analysis of glassy polymer.

Elastic parameters	$E_0 = 700 \text{ MPa}$, $\nu_0 = 0.350$
Inelastic reponse law of Hasan and Boyce	$\gamma_{0H} = 15.0 \text{ ns}^{-1}$, $\tau_{0H} = 42.5 \text{ MPa}$, $\alpha_p = 0 \text{ GPa}^{-1}$, $\varpi_0 = 600 \text{ ns}^{-1}$, $\zeta = 5.00$ $a_0 = 1.06 \text{ eV}$, $a_{eq} = 1.00 \text{ eV}$, $\alpha_0 = 0.0435 \text{ eV}$, $\alpha_{eq} = 1.00 \text{ eV}$, $S_0 = 0 \text{ eV}$ $\beta_1 = 1.44 \text{ nm}^3$, $\beta_2 = 4.00$, $\beta_3 = 15.0$, $\beta_4 = 1.00$, $\beta_5 = 0$
Craze evolution equation	$n_r = 10.0 \text{ ns}^{-1}$, $g_r = 1.00 \text{ ps}^{-1}$, $\gamma_c = 0.800$, $\omega^* = 1.00$ $C_1 = C_2 = 0.500$, $D_1 = D_2 = 0.0252 \text{ eV}$, $p_1 = p_2 = 50.0$

さらに、各絡み点における分子鎖初期方位は以下の手順で決定する。まず、図 9.33(a) に示す x_1x_2 平面上ですべり系 1 がすべり系 2 と x_2 軸対称となるように $\phi_{g_1}^{(1)}$ および $\phi_{g_1}^{(2)}$ を与える。その後、図 9.33(b) のように各すべり系を x_2 軸回りに $\phi_{g_2}^{(\alpha)}$ だけ回転させる。このとき、 $\phi_{g_2}^{(1)}$ および $\phi_{g_2}^{(2)}$ には同様の角度を与えることで 2 つのすべり系の組が同一平面内に存在するようにする。また、すべり系 3 およびすべり系 4 についてもすべり系 1 およびすべり系 2 と同様の手法で初期方位を決定する。本解析では各絡み点における $\phi_{g_1}^{(1)}$ および $\phi_{g_1}^{(3)}$ を $10 \sim 70^\circ$ の範囲で一様分布する乱数で、 $\phi_{g_2}^{(1)}$ を $0 \sim 90^\circ$ の範囲で一様分布する乱数で与える。また、 $\phi_{g_2}^{(3)} = \phi_{g_2}^{(1)} + 90^\circ$ とする。さらに、本解析では各積分点において同様のすべり系初期方位の組み合わせを与えることで試験片を初期均一状態とする。すなわち、9.1 節に示したマイクロシアバンドを生じない初期条件下で解析を実施する。

図 9.34 は井上・山本⁽¹¹⁾による PMMA の単軸引張試験結果と応力-ひずみ応答が一致するよう材料定数を同定し、解析を行った結果である。このとき同定された材料定数を表 9.9 に示す。図 9.34 では、解析結果および実験結果の応力-ひずみ応答が良く一致しており、本解析の妥当性が確認できる。次に、解析結果の伸び率 30、50 および 70% における相当非弾性ひずみ速度分布、クレーズ密度分布、分子鎖配向図および評価点 I および II に配置された 8 鎖モデルにおける分子鎖方位図を図 9.35 に示す。ただし、図 9.35 においては解析

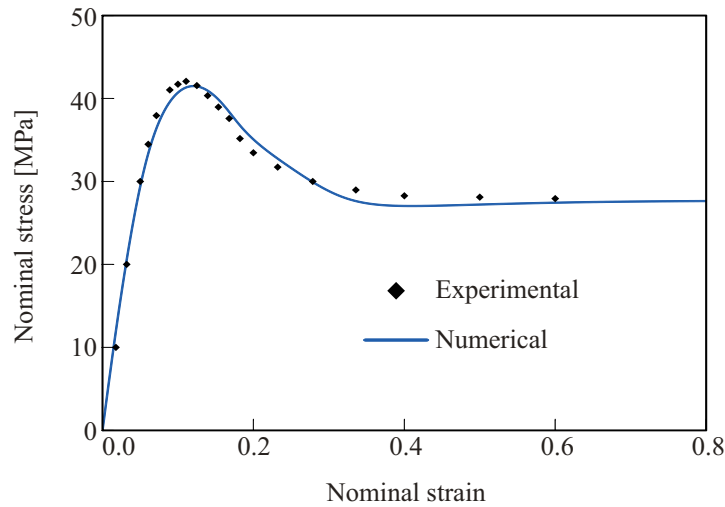


Fig. 9.34 Nominal stress-strain curve obtained by three-dimensional FE analysis with experimental plots of uniaxial tensile test of polymethyl methacrylate.

結果の定性的な傾向をより確認しやすくするために、表 9.9 に示した材料定数を $\omega_0 = 600 \text{ ns}^{-1} \rightarrow 1.20 \text{ ps}^{-1}$, $a_{\text{eq}} = 1.00 \text{ eV} \rightarrow 0.860 \text{ eV}$ のように変更して解析を実施することで、ひずみ速度せん断帯がより明瞭に表れるようにしている。また、図 9.35(d) においては各評価点に埋め込まれた 40 個の絡み点について平均化した分子鎖の方位を表示している。まず、図 9.35(a) を見ると、伸び率 30% から試験片中心部においてくびれが形成し、その後ひずみ速度せん断帯とともに引張方向へ伝ばしている様子が確認できる。同様に図 9.35(b) を見ると、伸び率 30% においてくびれ形成部にクレーズ密度の集中領域が形成し、その後クレーズ密度値の増加を伴い、引張方向へクレーズ密度集中領域が伝ばしていく様子が確認できる。次に、図 9.35(c) および図 9.35(d) を比較すると、分子鎖配向図の配向強度パラメータ θ の値が高くなっている評価点 I に配置された 8 鎖モデルにおいては各分子鎖の方位が引張方向に近づいている。一方、配向強度が弱い評価点 II の 8 鎖モデルでは各分子鎖の方位が離れていることから、本研究で新たに提案した式 (4.61) の配向強度パラメータによって、三次元問題における分子鎖の配向状態が再現できていると言える。以上のように、ポリマの大変形応答の特徴であるひずみ速度せん断帯およびクレーズ密度集中領域の伝ばならびにくびれ領域における分子鎖の引張方向への配向が三次元問題においても平面ひずみ問題における解析と同様に再現できおり、より実現に近い解析における分子鎖塑性モデルの妥当性が示されたと言える。

9.6.2 結晶相単相の三次元解析

本項では、9.2.1 項と同様に図 9.9 のような単軸引張負荷を受ける結晶相単相のユニットセル解析を三次元構造を有するすべり系を用いて実施する。解析領域は単一の結晶相から成る立方体形状とし、これを $2 \times 2 \times 2$ の計 8 個の 8 節点六面体要素に分割する。また、解析領域の境界に周期境界条件を適用するとともに解析領域に一定のマクロ変形速度 $D_{22}^0 = 1.00 \text{ s}^{-1}$ を与える。環境温度 θ は室温を想定し、293 K とする。さらに、三次元すべり系を有する結晶相の結晶基底ベクトルの初期方位は次式のように Euler 角を用いて与える。

$$\mathbf{s}^{(\alpha)} = \mathbf{R}_{y_1} \mathbf{R}_{y_2} \mathbf{R}_{y_3} \mathbf{s}_0^{(\alpha)} \dots \dots \dots (9.4)$$

$$\mathbf{m}^{(\alpha)} = \mathbf{R}_{y_1} \mathbf{R}_{y_2} \mathbf{R}_{y_3} \mathbf{m}_0^{(\alpha)} \dots \dots \dots (9.5)$$

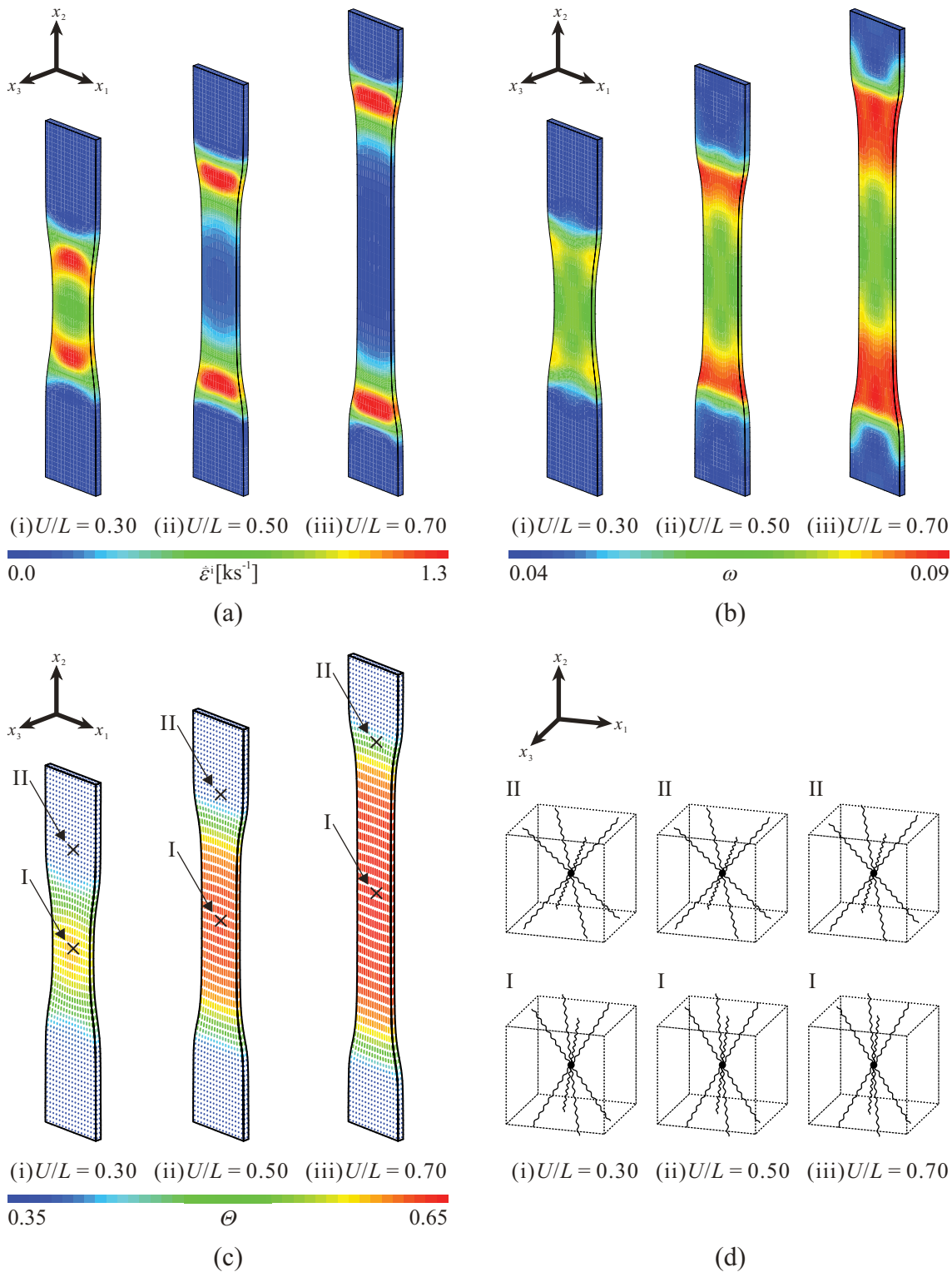


Fig. 9.35 Computational results for polymethyl methacrylate obtained by FE analysis with modified parameters, (a) Distributions of equivalent inelastic strain rate, (b) Distributions of craze density, (c) Orientation of molecular chains, (d) Direction of molecular chains in eight-chain model at sampling points I and II.

ここで、 $s_0^{(\alpha)}$ および $m_0^{(\alpha)}$ は図 2.5 に示した結晶構造の a , b および c 軸がそれぞれマイクロ構造の座標系 y_1 , y_2 および y_3 軸と一致する状態における結晶基底ベクトルを表す。また、 R_{y_i} は y_i 軸周りの回転行列であり、その成分は各軸回りの回転角 ϕ_{y_i} を用いてそれぞれ次式のように表わされる。

$$[R_{y_1}] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi_{y_1} & -\sin \phi_{y_1} \\ 0 & \sin \phi_{y_1} & \cos \phi_{y_1} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (9.6)$$

$$[R_{y_2}] = \begin{bmatrix} \cos \phi_{y_2} & 0 & \sin \phi_{y_2} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \phi_{y_2} & 0 & \cos \phi_{y_2} \end{bmatrix} \dots\dots\dots (9.7)$$

$$[R_{y_3}] = \begin{bmatrix} \cos \phi_{y_3} & -\sin \phi_{y_3} & 0 \\ \sin \phi_{y_3} & \cos \phi_{y_3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \dots\dots\dots (9.8)$$

また、結晶相の三次元解析における材料定数は表 9.10 の値を用いる。ここで、Eyring 形ひずみ速度硬化則の材料定数 ΔF_0 および κ は、Pan-Rice 形ひずみ速度硬化則の材料定数 $\dot{\gamma}_{0P} = 1.00 \text{ s}^{-1}$, $m = 0.09$ および環境温度 $\theta = 343 \text{ K}$ を式 (5.55) および式 (5.56) に代入することでそれぞれ算出した値である。代入した材料定数ならびに流れ応力 $g^{(\alpha)}$ は G'Sell ら⁽¹³⁷⁾ の PP に対する解析を参考に決定した。

図 9.36 に式 (9.4) および式 (9.5) において各軸周りに結晶基底ベクトルを回転させ、解析を実施した際の応力-ひずみ応答を示す。まず、 y_1 軸周りにのみ基底ベクトルを回転させ解析を行った図 9.36(a) では、いずれの解析においても降伏後のひずみの増加に伴い、応力値が急激に上昇していることが確認できる。一方、 y_3 軸周りにのみ基底ベクトルを回転させ解析を行った図 9.36(c) を見ると、いずれの解析結果においてもひずみ硬化後に一定の応力値となることがわかる。さらに、 y_2 軸周りにのみ回転を行った解析結果である図 9.36(b) においては y_2 軸周りの回転角 ϕ_{y_2} に依存せず、降伏直後から応力値が一定値となっている。このような結晶基底ベクトルの初期方位の違いによる応力-ひずみ応答への影響を明らかにするために、結晶相の分子鎖挙動が観察しやすい初期方位を選択し、さらに 2 通りの解析を実施した。図 9.37(a) は $(\phi_{y_1}, \phi_{y_2}, \phi_{y_3}) = (90^\circ, 135^\circ, 0^\circ)$ の初期方位を与えた際の解析結果の応力-ひずみ曲線および各ひずみ値における分子鎖方位を可視化した図である。同様に、図 9.37(b) に $(\phi_{y_1}, \phi_{y_2}, \phi_{y_3}) = (0^\circ, 90^\circ, 60^\circ)$ の初期方位を与えた際の解析結果を示す。図 9.37(a) を見ると、応力-ひずみ曲線における急激な応力の上昇が引張方向である y_2 方向への分子鎖の配向と対応していることがわかる。これは、表 9.10 に示したように Chain Slip ($\alpha = 1 \sim 4$) の中で最も低い流れ応力を与えたすべり系 2 が最も活動しやすく、同すべり系が引張方向へ配向するために生じる。また、この配向現象は平面すべり問題における解析結果の図 9.14 と対応した現象であり、分子鎖が引張方向を向くことによっていずれのすべり系にも分解せん断応力がほぼ負荷されなくなることならびにペナルティ法による分子鎖方向への非延伸拘束が応力の急激な上昇を招いていると言える。一方、図 9.37(b) においてはひずみの増加に伴い、

Table 9.10 Material constants and numerical parameters for crystalline phase in three-dimensional analysis.

Elastic parameters	$E_0 = 4.00 \text{ GPa}$, $\nu_0 = 0.330$, $\psi_0 = 100 \text{ GPa}$
	$\dot{\gamma}_{0E} = 15.0 \text{ ns}^{-1}$, $\Delta F_0 = 1.02 \text{ eV}$, $\kappa = 3.10$
Eyring hardening law	$g^{(1)} = 12.8 \text{ MPa}$, $g^{(2)} = 4.00 \text{ MPa}$, $g^{(3)} = 13.4 \text{ MPa}$, $g^{(4)} = 13.4 \text{ MPa}$
	$g^{(5)} = 12.8 \text{ MPa}$, $g^{(6)} = 4.00 \text{ MPa}$, $g^{(7)} = 13.4 \text{ MPa}$, $g^{(8)} = 13.4 \text{ MPa}$

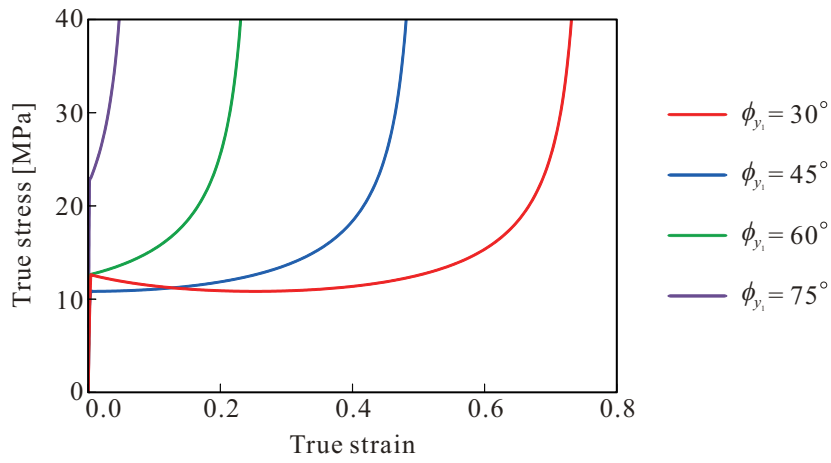
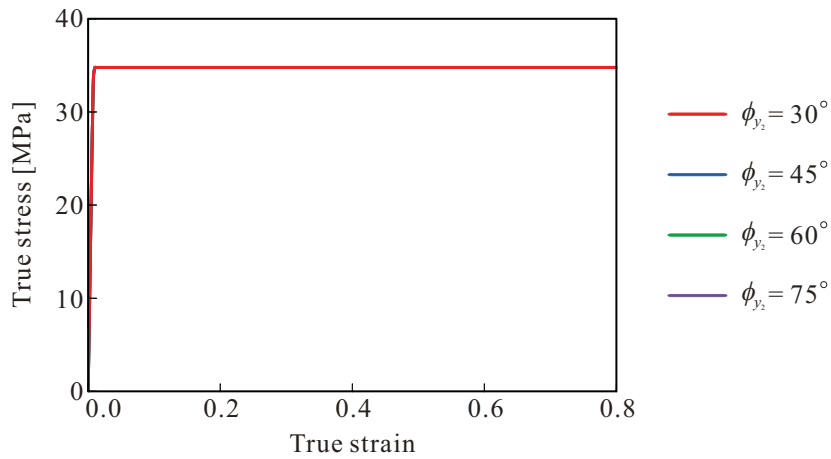
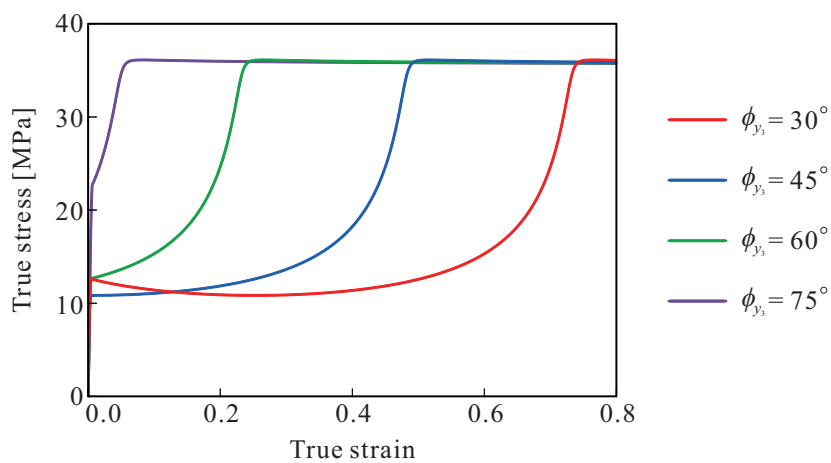
(a) Rotated around y_1 -axis ($\phi_{y_2} = \phi_{y_3} = 0^\circ$)(b) Rotated around y_2 -axis ($\phi_{y_1} = \phi_{y_3} = 0^\circ$)(c) Rotated around y_3 -axis ($\phi_{y_1} = \phi_{y_2} = 0^\circ$)

Fig. 9.36 Influence of initial direction of molecular chains in crystalline phase with three-dimensional slip systems on stress-strain curve.

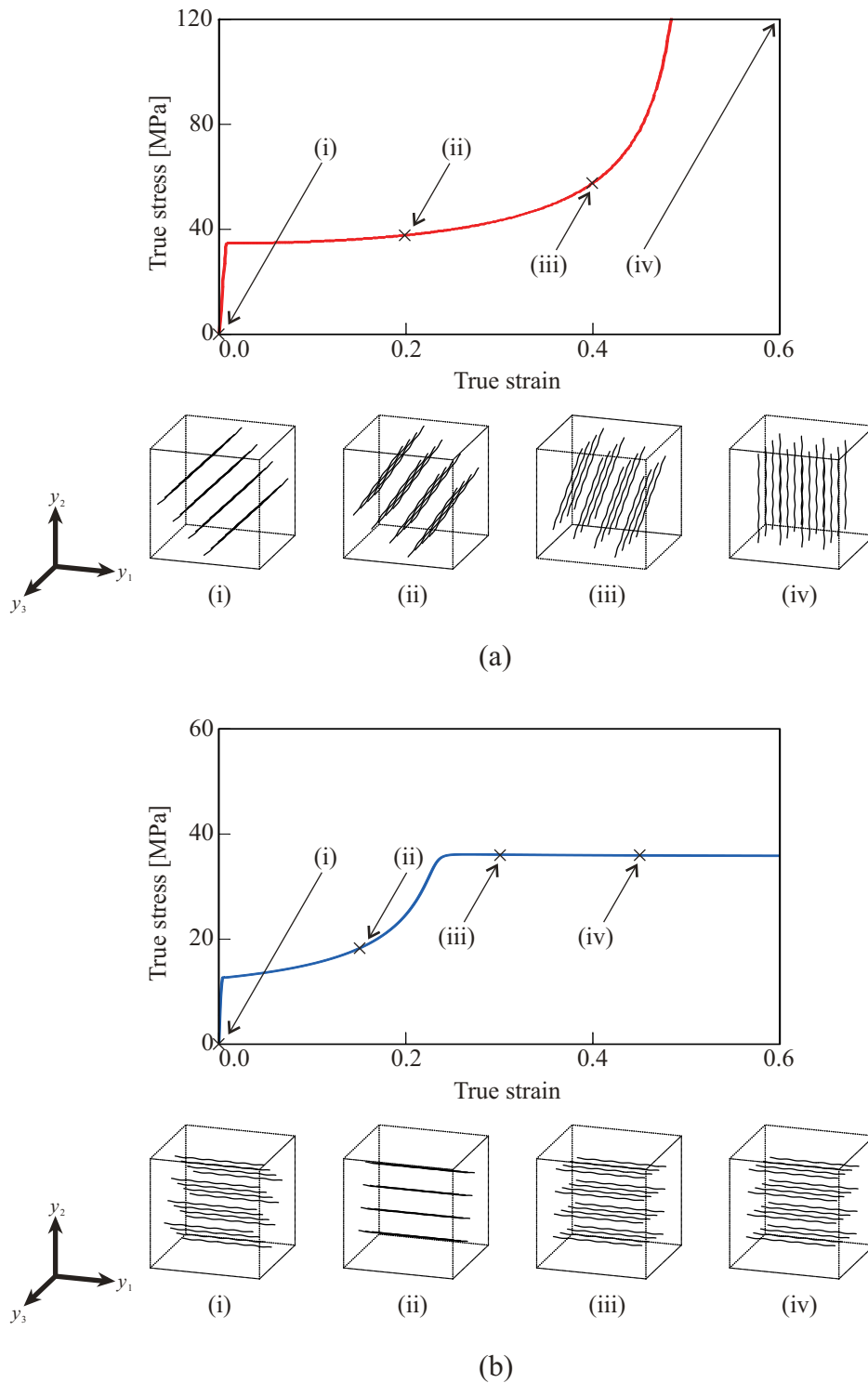


Fig. 9.37 Typical orientation modes of crystalline phase with three-dimensional slip system under uniaxial tension, (a) Mode 1: primary slip system of chain slip is oriented in tensile direction ($\phi_{y_1} = 90^\circ$, $\phi_{y_2} = 135^\circ$, $\phi_{y_3} = 0^\circ$), (b) Mode 2: primary slip system of transverse slip is oriented in tensile direction ($\phi_{y_1} = 0^\circ$, $\phi_{y_2} = 90^\circ$, $\phi_{y_3} = 60^\circ$).

分子鎖が配列した方向，すなわち， y_1 軸方向周りに各分子鎖が回転している [図 9.37(b)-(i)~(iii)]。その後，一定の応力値となつてからは分子鎖の回転は生じていない [図 9.37(b)-(iii),(iv)]。図 9.37(b)-(i)~(iii) の現象は Transverse Slip の中で，最も活動しやすいすべり系であるすべり系 6 が引張方向へ配向することによって生じる。さらに，図 9.37(b)-(iii) の状態に達してからはすべり系 6 に分解せん断応力が負荷されなくなる代わりに，引張方向に対して対称に配置されたすべり系 7 およびすべり系 8 において一定の非弾性せん断ひずみが生じ続けるため，新たな分子鎖の回転は生じず，応力値が一定値で推移することとなる。以上のように，斜方晶系の結晶構造をもつポリマの結晶相の単軸引張負荷においてはその初期方位に依存して，主すべり系が Chain Slip となる Mode 1 または Transverse Slip となる Mode 2 の 2 種類の配向モードが生じる。特に，Mode 2 の配向現象は 9.2.1 項に示した平面すべり問題を仮定した場合には生じない配向モードであり，三次元すべり系に特有の現象であると言える。最後に，図 9.36 および図 9.37 を比較すれば，図 9.36(a) は Mode 1 の分子鎖配向によって，図 9.36(c) は Mode 2 の分子鎖の回転によって生じたことがわかる。図 9.36(b) においては結晶基底ベクトルが y_2 軸周りにしか回転していないため， ϕ_{y_2} の角度に関係なく，図 9.37(b)-(iii),(iv) のように分子鎖の配列した方向が最初から引張方向と垂直となる。よって，図 9.37(b)-(i),(ii) のようなひずみ硬化段階を生じず，降伏直後から応力値が一定値となる。

9.6.3 結晶性ポリマのマルチスケール三次元解析

マクロ構造の解析対象は変形の対称性を仮定することで，図 9.38(a) に示すような PP 平板の 1/8 モデルとする。試験片の大きさは長さ $2L = 60 \text{ mm}$ ，幅 $2(W + \Delta W)$ ，厚さ $2H$ ，アスペクト比 $L/W = 3$ ， $H/W = 0.1$ とする。また，形状初期不整 ΔW は平面ひずみ条件の解析と同様に式 (9.1) で与える。ここで，不整振幅を $W_1 = 0.00375$ および $W_2 = 0.00150$ ，波数を $m_w = 4.00$ とする。用いる要素は図 9.38(a) に示すように解析領

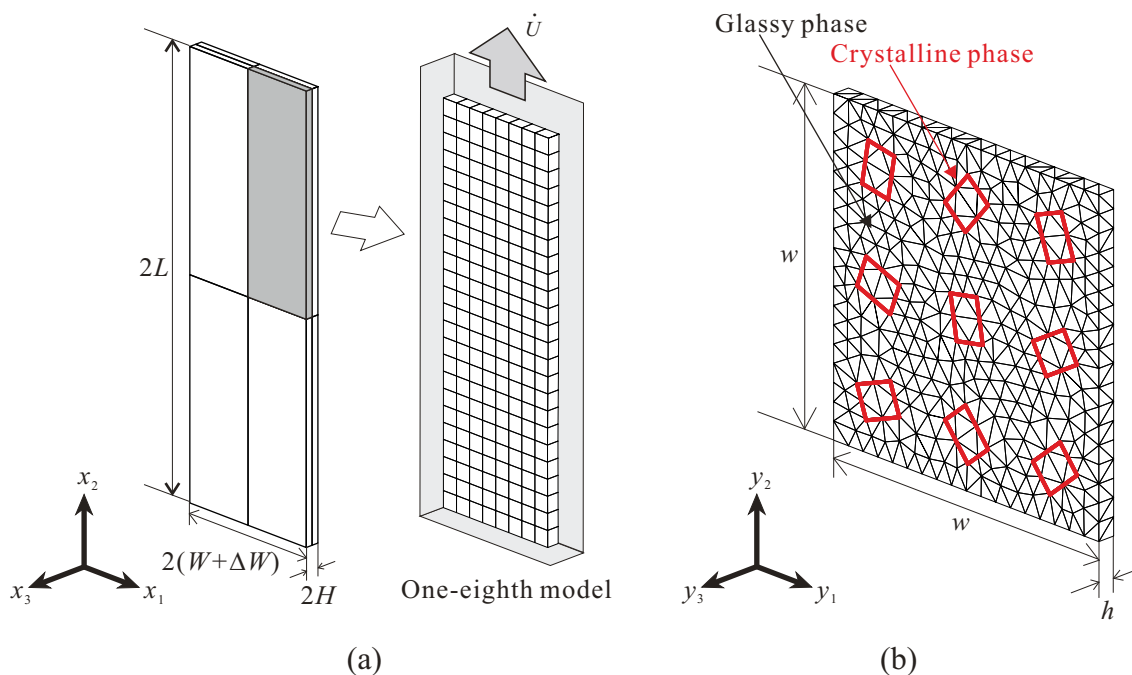


Fig. 9.38 Three-dimensional computational model of crystalline polymer, (a) Computational model and finite elements of macroscopic specimen, (b) Finite elements of unit cell.

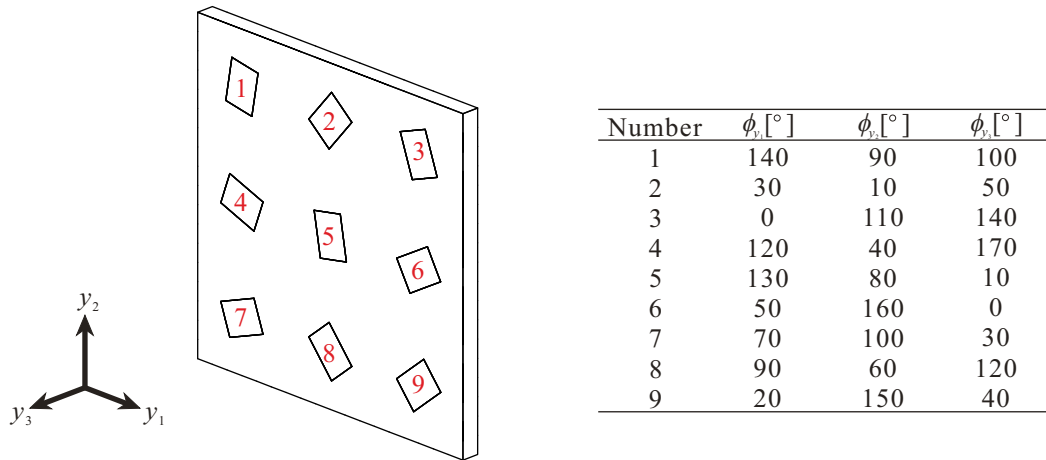


Fig. 9.39 Initial orientation of crystalline phases in three-dimensional analysis.

Table 9.11 Material constants and numerical parameters for glassy phase in three-dimensional analysis.

Elastic parameters	$E_0 = 1.80 \text{ GPa}$, $\nu_0 = 0.330$
Inelastic reponse law of Hasan and Boyce	$\gamma_{0H} = 15.0 \text{ ns}^{-1}$, $\tau_{0H} = 19.0 \text{ MPa}$, $\alpha_p = 0 \text{ GPa}^{-1}$, $\varpi_0 = 1.00 \text{ ps}^{-1}$, $\zeta = 45.0$ $a_0 = 1.06 \text{ eV}$, $a_{eq} = 0.900 \text{ eV}$, $\alpha_0 = 0.0435 \text{ eV}$, $\alpha_{eq} = 1.00 \text{ eV}$, $S_0 = 0 \text{ eV}$ $\beta_1 = 1.44 \text{ nm}^3$, $\beta_2 = 4.00$, $\beta_3 = 15.0$, $\beta_4 = 1.00$, $\beta_5 = 0$
Craze evolution equation	$n_r = 10.0 \text{ ns}^{-1}$, $g_r = 1.00 \text{ ps}^{-1}$, $\gamma_c = 0.700$, $\omega^* = 1.00$ $C_1 = C_2 = 0.500$, $D_1 = D_2 = 0.0252 \text{ eV}$, $p_1 = p_2 = 50.0$

域を幅方向に 8 分割，長手方向に 24 分割，厚さ方向に 1 分割して得られる計 192 個の 8 節点六面体要素とする。解析領域の変位 \mathbf{u}^0 および節点外力 $\overline{\mathbf{F}}^{\text{ext}}$ に対する境界条件は 1/8 モデルの仮定を満たすよう次式にて規定する。

$$\left. \begin{array}{l} u_1^0 = 0 \quad \text{at } x_1 = 0 \\ u_2^0 = 0 \quad \text{at } x_2 = 0 \\ u_3^0 = 0 \quad \text{at } x_3 = 0 \\ u_2^0 = U \quad \text{at } x_2 = L \\ \overline{F}_1^{\text{ext}} = 0 \quad \text{at } x_1 \neq 0 \\ \overline{F}_2^{\text{ext}} = 0 \quad \text{at } x_2 \neq 0, x_2 \neq L \\ \overline{F}_3^{\text{ext}} = 0 \quad \text{at } x_3 \neq 0 \end{array} \right\} \dots \dots \dots (9.9)$$

また，解析中の端面強制ひずみ速度 $\dot{U}/L = 1.00 \text{ s}^{-1}$ ，環境温度 $\theta = 293 \text{ K}$ とし，公称ひずみが 100% に達するまでの時間ステップ数を 20000 とする。

一方，マイクロ構造であるユニットセルは図 9.38(b) に示すように一辺の長さ $w = 0.900 \mu\text{m}$ ，厚さ $h = 0.0500 \mu\text{m}$ の正方形平板とする。結晶性ポリマの解析を想定することから，ユニットセルは非晶領域に 9 個の結晶相を含むものとし，その体積分率は 12% で解析中も変化しないものとする。用いる要素は 2096 個の 4 節点四面体要素であり，ユニットセルの境界上の節点に対して変位に関する周期境界条件を適用する。また，各積分点における絡み点数は 1 とする。非晶相における分子鎖基底ベクトルの初期方位は 9.6.1 項で述べた手

法と同様の手法で決定する。ただし、本解析では $\phi_{g1}^{(1)}$ および $\phi_{g1}^{(3)}$ を $10\sim 75^\circ$ の範囲で一様分布する乱数で与える。結晶相の結晶基底ベクトルの初期方位は 9.6.2 項と同様に、式 (9.4) および式 (9.5) を用いて与える。その際、各結晶相の Euler 角 ϕ_{y_i} は図 9.39 に示す値を用いる。非晶相の材料定数および数値パラメータは表 9.11 に示した値を用いる。一方、結晶相の材料定数および数値パラメータは 9.6.2 項と同様の値とし、表 9.10 に示した値を用いる。

図 9.40 に解析結果の公称応力-公称ひずみ曲線および図 9.21(a) と同様の PP の実験結果のプロットを示す。本解析においても平面ひずみ問題と同様に PP の単軸引張時の応力-ひずみ応答が精度よく再現できていることが確認できる。図 9.41 に図 9.40 の解析結果におけるマクロ試験片の相当非弾性ひずみ速度分布およびクレーズ密度分布を示す。なお、同図においては 1/8 モデルの解析結果を鏡像コピーすることによって、試験片全体の解析結果として表示している。図 9.41(a) の相当非弾性ひずみ速度分布を見ると、伸び率 15% から試験片中心部において高ひずみ速度領域が形成し、その後、引張方向へ徐々にひずみ速度の値を下げながら伝播している様子が確認できる。ただし、図 9.35 と比較すると、ひずみ速度せん断帯を明瞭に観察できず、くびれもわずかにしか形成しない。これは、平面ひずみ条件を対象とした非晶性および結晶性ポリマの解析と同様に、結晶性ポリマにおいては降伏後にひずみ軟化するモデルが導入されていない結晶相がマイクロ構造内に混在し、マクロ構造において変形が局所化しにくくなったためであると言える。このような相違は図 9.34 に示した応力-ひずみ曲線では降伏後の応力降下が 15 MPa 程度と大きいものに対して、図 9.40 では降伏後の応力降下が 5 MPa 程度と比較的小さくなっていることにも表れている。一方、図 9.41(b) からは高クレーズ密度領域がひずみ速度集中領域と対応する位置に表れており、本モデルによって、三次元解析においてもくびれ進行部からの破断傾向を予測できると言える。ただし、本解析においては上述のように、ひずみ速度せん断帯の形成が不明瞭であるため、クレーズ密度の値も試験片全体で大きく分布していない。次に、図 9.35 のマクロ試験片の評価点 I に配置されたユニットセルにおける相当非弾性ひずみ速度分布およびクレーズ密度分布を図 9.42 に示す。図 9.42(a) を見ると、マクロ構造のユニットセル配置領域に変形速度が集中する伸び率 15% においてユニットセル全体で高い非弾性ひずみ速度が生じている。その後、マクロ構造における変形速度集中領域の引張方向への伝ばに伴って、ユニットセル内の非弾性ひずみ速度も緩和されており、マクロ構造およびマイクロ構造の変形挙動の対応が確認できる。さらに、図 9.23(a) および図 9.42(a) を比較すると、三次元解析の場合にはユニットセル内における非弾性ひずみ速度が強く分布していないことがわかる。この理由は次のように考えられ

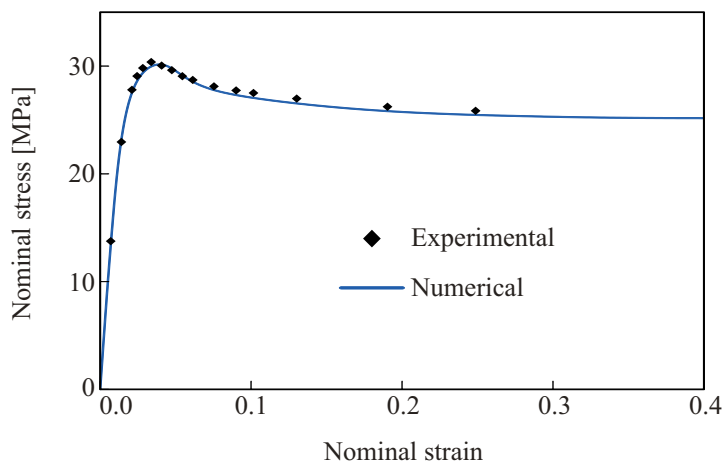


Fig. 9.40 Nominal stress-strain curve obtained by three-dimensional FE analysis and experimental plots of polypropylene.

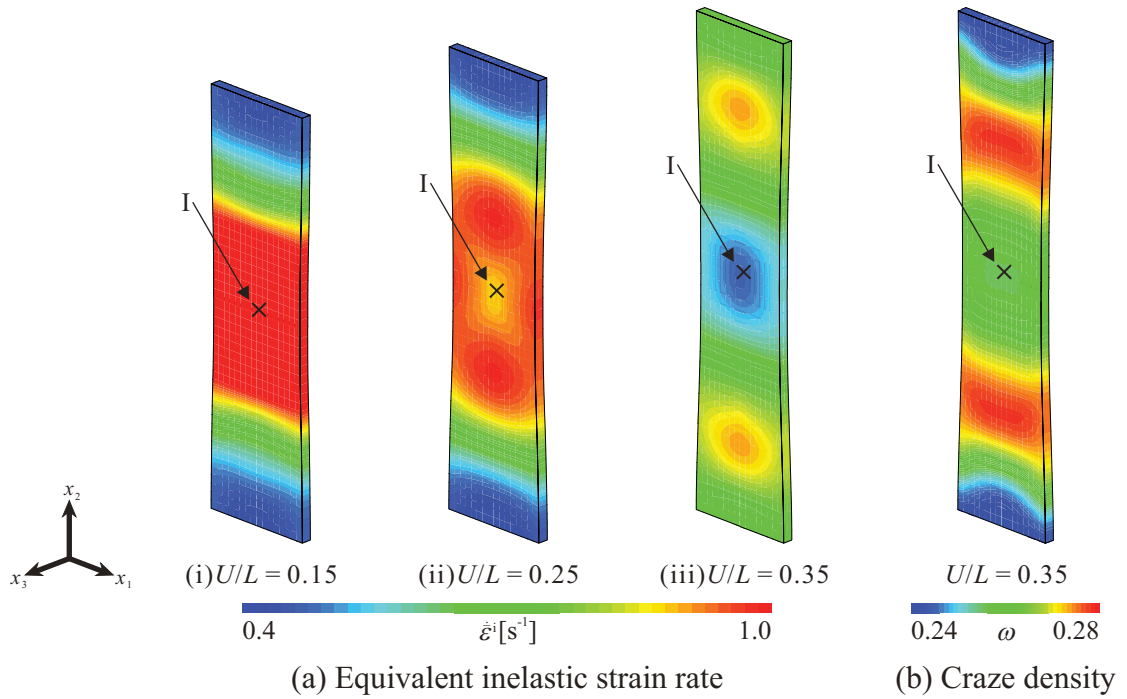


Fig. 9.41 Distributions of equivalent inelastic strain rate and craze density of polypropylene in macroscopic specimen obtained by three-dimensional FE analysis.

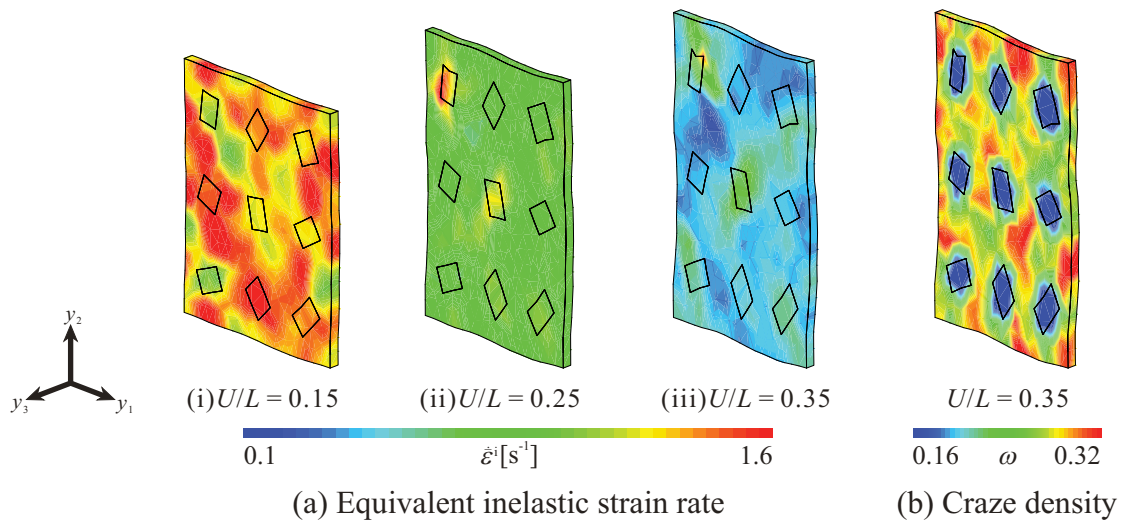


Fig. 9.42 Distributions of equivalent inelastic strain rate and craze density of polypropylene in unit cells at sampling point I obtained by three-dimensional FE analysis.

る。三次元解析においては、有限要素法の解析モデルだけでなく、非晶相および結晶相の両相のすべり系も三次元構造へと拡張しており、そのすべり系の数は平面すべり問題を仮定した場合から、非晶相では $2 \rightarrow 4$ に、結晶相では $1 \rightarrow 8$ に増加している。また、9.2.4 項で言及したように結晶性ポリマのマイクロ構造の変形の局所化は結晶相の異方性の強さが主因となっている。三次元解析においては、特に結晶相においてすべり系の数が増加し、異方性が弱くなったためユニットセル内の変形が均一化したと考えられる。さらに、図 9.23(b) のクレーズ密度分布を見ると、クレーズ発展式が導入されていない結晶相の間を縫うようにして高クレーズ密度領域が形成していることが確認できる。実際の結晶性ポリマの微視構造の観察においても、クレーズは結晶相を避けて進展することが知られており、本解析結果が微視構造におけるクレーズ進展の様子を良く表していると言える。以上のように三次元問題においても結晶性ポリマにおける大変形挙動の再現が平面ひずみ問題と同様にできており、分子鎖塑性モデルに限らず、本研究で提案した材料モデル全体の妥当性が示されたと言える。

第 10 章

結 言

10.1 本論文の結言

10.1.1 延性ポリマのモデル化についての結言

本研究では延性ポリマ，すなわち，ガラス転移点以上の温度における熱可塑性ポリマを対象とし，その大変形挙動ならびにポリマ特有の微視的損傷であるクレーズの進展をモデル化した．その際，延性ポリマの非晶相に対しては分子鎖の不規則な絡まりおよび分子鎖配向を表すために結晶塑性論的分子鎖塑性論を，結晶相には規則的に配列した分子鎖による非弾性変形の異方性を表現するために通常の結晶塑性論をそれぞれ適用することで非晶性ポリマおよび結晶性ポリマ双方の大変形挙動を結晶塑性論の体系で扱うことを可能とした．そして，両相のせん断ひずみ速度を求める材料応答則を反応速度論に基づいて記述した．ただし，非晶相の材料応答則には反応速度論の体系から構築された自由体積変化に基づく非弾性応答則を採用した．また，非晶相におけるクレーズ発生および成長の発展式についても新たに反応速度論に基づいて定式化した．以上のモデル化により，延性ポリマの非弾性挙動を結晶塑性論および反応速度論の体系で統一的に扱うモデルを構築した．さらに，非晶性ポリマおよび結晶性ポリマの微視的內部構造の違いを考慮したマクロ構造の解析を実施可能とするために均質化理論を用い，上述のモデルから得られる支配方程式をミクروسケールおよびマクروسケールにおける支配方程式へと分離した．

ここで，上述のモデル化において本研究で特に独創的な手法を用いた点を以下に列挙する．

- (1) 非晶相の材料応答則である自由体積変化に基づく非弾性応答則を，降伏応力の静水圧応力依存性および除荷時の顕著な非線形ひずみ回復現象が表せるよう拡張した．
- (2) 結晶相の反応速度論に基づく材料応答則における材料定数を，先行研究の材料応答則として採用されていたべき乗則の材料定数から同定可能とする方法を提案した．
- (3) クレーズ発展式におけるクレーズ進展に要する活性化エネルギーを自由体積挙動と関連づけることで，クレーズ発展式の引数に直接ひずみ速度を用いずにひずみ速度依存性を導入した．

10.1.2 FEM 解析結果についての結言

構築したモデルから得られた支配方程式およびクレーズ発展式を用いて，非晶性ポリマの場合には PMMA 平板を，結晶性ポリマの場合には PP 平板を例としてそれぞれ大変形 FEM 解析を実施した結果，以下のような結言を得た．

- (1) 非晶相に適用した分子鎖塑性論により、単軸引張試験のマクロ試験片におけるポリマの非弾性変形の特徴、すなわち、ひずみ速度せん断帯を伴うくびれの形成・伝ばおよびくびれ通過部位における分子鎖の引張方向への配向が再現された。同時に、本研究で構築したクレーズ発展式により、マクロ試験片におけるくびれの伝ばに伴う高クレーズ密度領域の伝ばならびに分子鎖配向領域におけるクレーズ進展の停止が再現がされた。また、ユニットセル内では異方性の強い結晶相の混在によって結晶性ポリマの方が変形が局所化しやすくなる一方、マクロ構造においては降伏後の応力降下が大きい非晶性ポリマの方が変形が局所化しやすく、くびれおよびひずみ速度せん断帯の形成がより明瞭に観察された。
- (2) 反応速度論に基づく材料応答則を用いたことによって、ポリマの降伏応力のひずみ速度依存性および環境温度依存性が表現可能となった。また、本研究で拡張した自由体積変化に基づく非弾性応答則により、PP 平板の除荷解析において実験結果と同程度の非線形ひずみ回復が、引張りおよび圧縮解析において実験結果と同様の降伏応力の非対称性がそれぞれ再現された。
- (3) フィブリル強度の評価およびクレーズ密度に基づいて提案した複数の PP の破断予測条件を解析結果に適用することで、3通りのひずみ速度に依存したポリマの延性の変化、すなわち、高ひずみ速度域、中ひずみ速度域および低ひずみ速度域のそれぞれで最大延性を呈する傾向を予測した。また、比較的高い延性を示す解析においてクレーズ密度が原因で破断する場合には変形の集中領域ではなく、くびれの進行端部から破断を生じることを予測した。さらに、複数の引張速度での解析におけるクレーズ発生密度および成長密度から、低ひずみ速度域で数が少なくなり、より長く成長するというクレーズ形態のひずみ速度依存性が本研究で構築したクレーズ発展式によって定性的に再現可能となることを確認した。
- (4) 平面ひずみ条件で実施していた上記の解析を三次元問題へ拡張し、大変形 FEM 解析を実施することで、ポリマの単軸引張試験における非弾性変形の特徴が三次元解析においても同様に表れることを確認した。これにより、本モデルのより実現象に即した問題への適用性が示された。

10.2 残された課題および今後の展望

本研究では分子鎖挙動に基づくマルチスケールモデリングを実施したことにより、ポリマの多くの力学現象を統一的に取り扱うことが可能となった。しかしながら、本モデルによってポリマの全ての力学現象が説明できるわけではない。本節では、そのような本研究に残された課題に加え、本研究の発展性および今後の展望について述べる。

(a) 単軸引張試験以外の試験における検証

一般的に完全に等方性の材料であれば、その大変形特性は単軸引張試験のみによって十分検証可能である。一方、異方性を有する材料の場合、多軸試験および単純せん断試験に加え、ねじりや曲げ試験など単軸引張以外の変形モードにおける力学特性の検証が重要となる。特に、本論文の分子鎖塑性論を用いた三次元解析では非晶相の内部構造として分子鎖網目理論とのアナロジーから提案された 8 鎖モデルを採用している。しかしながら、このような非晶性ポリマの内部構造のモデルはマクロ変形の異方性の発現に強く影響するため、上述のような試験との整合性に基づいてその構造の妥当性が検証されることが望ましい。

(b) ポリマの内部構造 (ユニットセル構造) の厳密化

本研究では、9.6.3 項の三次元解析においてユニットセル形状を平板としてモデル化した。しかしながら、 y_1 , y_2 および y_3 の 3 方向全てに周期境界条件が適用される均質化理論を用いた場合は、3 方向全てに対して十分な周期性が認められるようにユニットセル領域を選択しなければならない。よって、本来であれば、本研究の三次元解析におけるユニットセル形状は立方体にする必要がある。なお、板厚方向への周期性を仮定せず、面内周期性のみを仮定する均質化法⁽¹³⁸⁾を用いる場合にはユニットセルを平板形状として取り扱うことも可能である。一方、結晶性ポリマの非晶相中の結晶相の配置、結晶相の体積分率および形状といった内部構造も SEM などによる実際の観察結果から与えられることが望ましい。特に、本研究で結晶性ポリマの解析対象としている PP はラメラが非晶相中に混在した構造ではなく球晶構造を形成することが多いため、解析モデルの球晶構造への拡張は、今後より厳密にマイクロ変形挙動を評価するうえで重要な課題である。

(c) 内部発熱および熱伝導現象との連成

本研究では、反応速度論に基づく材料応答則を採用したことにより、非晶相および結晶相の両相の変形応答に対して環境温度 θ に対する依存性が導入されている。また、本解析では試験片全体の温度は均一であるとし、単一の環境温度を与えて各解析を実施した。しかしながら、実際のポリマの単軸引張試験では塑性変形中に主にくびれ形成部位において顕著な塑性発熱を生じることが知られている。このような塑性発熱はポリマの延性の向上にも密接に関わっていると考えられるため、本研究で構築したポリマの変形場に対するモデルを熱伝導方程式と連成することで、ポリマの内部発熱および熱伝達による解析中の試験片内部の温度変化を考慮した解析を実施することが必要である。その際、本研究では弾粘塑性体として扱ったポリマの構成則および均質化理論を温度変化によって生じる熱ひずみまで考慮した熱弾粘塑性体へと拡張する⁽¹³⁹⁾ことがより望ましい。

(d) 体積変化およびクレーズ進展の静水圧応力依存性を考慮した解析

本研究では自由体積変化に基づく非弾性応答則、すなわち、非弾性せん断ひずみ速度の計算式に対して静水圧応力依存性を付与することで、引張りおよび圧縮荷重における降伏応力の相違を再現した。一方、クレーズ発現式の活性化エネルギー [式 (6.26)] に対しては静水圧応力の影響を導入していない。加えて、分子鎖塑性論の式 (2.78) で表わされるすべり面に垂直な非弾性ひずみ速度 $\dot{\epsilon}_m^{(a)}$ の項を無視しているため、非弾性変形中の体積変化についても考慮されていない。一般に、ボイドの形成を伴うクレーズの進展は引張荷重時にのみ生じるため、クレーズ発生には静水圧応力依存性が必要である。また、ポリマは金属材料と異なり、塑性変形中に材料内部にボイドや自由体積が形成するため、本来体積変化を無視することはできない。したがって、 $\dot{\epsilon}_m^{(a)}$ に対する材料応答則を新たに構築し、体積変化の影響を考慮した解析を実施することも今後必要であると言える。

(e) 本モデルの工業的問題への応用

現在の商用 FEM ソルバには金属材料と大きく異なるポリマの特徴的な力学応答に十分対応できる材料モデルが未だ実装されておらず、商用 FEM ソルバの機能をそのまま用いて自動車のバンパーフェースなどの衝突解析を実施すれば、その破壊挙動や試験後のひずみ値などを正しく予測できないという問題が生じる。このような問題に対する解決策として任意の構成則をユーザーサブルーチンとして FEM ソルバに追加する機能がベンダーから提供されている。ユーザーサブルーチンを介して本研究で提案したモデルを商用 FEM ソルバに導入すれば、上述のようなポリマ材料の力学問題の予測をより正確に実施可能となる。一方、本研究ではモデル化に際し、マルチスケールモデリングを採用しているため、ポリマの大変形時の内部構造変化の予測にも応用可能である。例えば、高分子多孔質膜の延伸加工時の孔の形成⁽¹⁴⁰⁾や FRP の繊維のデボンディング (剥離) を予測し、材料の設計・加工を数値解析的に支援することが期待される。

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ディシプリナリ・デザイン科学専修 志澤一之教授の御指導の下で行ったものであり、学部で研究室に配属されてから現在に至るまでの6年間の長きに渡る研究室生活において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。また、未熟であった筆者が今日まで研究を行い、博士課程を修了するまでの成果を残すことができたことは同教授による親身なご指導によるものであると感じております。さらに、研究面だけでなく、投稿論文の審査や就職活動などが順調でなかった時に多くの励ましの言葉を頂いたことに深く感謝しております。これまでの研究生活を通して得られたかけがえの経験を今後の人生における糧として成長していきたいと考えます。

本論文の作成に当たり、御査読頂き、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大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻マルチディシプリナリ・デザイン科学専修 大宮正毅准教授、宮田昌悟准教授ならびに開放環境科学専攻環境エネルギー科学専修 堀田篤教授に深謝いたします。特に、本年度の機械工学科就職担当を務めていらっしゃる堀田篤教授には就職活動の折に大変お世話になりました。重ねて御礼申し上げます。

同じく主に就職活動の関連で個人的にご相談に伺わせて頂きました本塾大学院理工学研究科開放環境科学専攻環境エネルギー科学専修 植田利久教授に厚く御礼申し上げます。研究以外の面で度々お話をさせて頂ける機会を設けて頂いたことは著者にとって大変幸いであったと感じております。

有限要素法の理論や解析コードの構築などにあたって大変有益な御助言を多く賜りました佐賀大学大学院工学系研究科機械システム工学専攻機械システム工学講座所属の只野裕一准教授に深く御礼申し上げます。同准教授には国内・国外の学会発表にも多くご一緒させて頂き、大変お世話になりました。また、同じ研究分野の先駆者として学会発表などで大変貴重な御助言を賜りました大阪市立大学大学院工学研究科機会物理系専攻所属の内田真講師に深く感謝申し上げます。

旭化成株式会社生産技術本部生産技術センター CAE 技術部 高橋順一氏ならびに灘裕統氏には共同研究という形で実際に企業で行われている研究テーマに携わらせて頂いたことに深く感謝いたします。大学の研究と企業の研究との違いや汎用 FEM ソルバの仕様など多くの面で勉強させて頂きました。特に、当研究室の OB であり、本研究の基礎となる分子鎖塑性論を築き上げられた灘裕統氏にはそのご尽力に敬意を表すとともに深く感謝いたします。同氏が作成された学位論文やプログラムマニュアルなどは研究室に配属されてから初めて勉強を進めるうえで非常に参考となりました。

著者が学部生の頃から常に親身に研究および研究室生活にご助言をして頂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 黒澤瑛介氏、村松眞由氏および近藤瑠歩氏には厚く御礼申し上げます。黒澤氏には1年という短い間でしたが公私共々研究室生活において大変お世話になりました。同氏が残された均質化 FEM の解析コードは本研究を遂行するうえで大変参考となりました。村松氏には学会発表や原稿作成の方法など研究者として基本となるスキルを多く教えて頂きました。また、幾つかの学会にはご同行頂き、学会発表ではより充実した時間を過ごすことができました。さらに、近藤氏には著者が研究室に配属されてからの5年間

に渡って共に研究室生活を過ごさせて頂き、研究の理論や計算機の知識、プログラミングなど非常に多くのことを学ばせて頂きました。近藤氏の研究に対する真摯な姿勢には大変尊敬すべき点が多く、同氏の研究している姿に感化され、博士課程への進学を決意するに至ったと感じております。

著者が初めて研究を行うにあたり、研究に必要な知識や技術を親切に教えて頂いた、当時本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻 水澤文彦氏に心より感謝いたします。また、同じ研究チームとして、研究資料やメッシュデータの作成などにご協力頂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 中村亮介氏および本塾大学院理工学研究科総合デザイン工学専攻 佐々木文章氏に感謝を申し上げます。さらに、本研究チームに関連するポリマの引張試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2年の遠藤冬玲氏に厚く感謝申し上げます。

同期として、共に研究室生活を過ごした上田亮氏、長津輝氏および能條和成氏とは互いに切磋琢磨する中で成長することができました。厚く御礼申し上げます。特に、上田氏とは共に博士課程に進学し、6年間の長きにわたり、苦楽を共にし、研究についての有意義な議論を交わさせて頂きました。

また、これまでに共に研究室生活を過ごしました鈴木航氏、中重齊氏、小野貴裕氏、佐藤慎一氏、三根啓吾氏、Maël Stephan氏、石樽達也氏、林英輝氏、壁谷卓未氏、横山晃彦氏、石垣文彦氏、梶谷聡氏、田尻聡太郎氏、御園生大介氏、丸田祐介氏、茂木俊和氏、小紫知慧氏、谷本遼氏、古屋貴大氏、河合俊洋氏、鯨井翔氏、池田恵子氏、菅原崇人氏、知場啓志氏、丸山康太氏、宇塚友亮氏、小笠原鵬人氏、木村祐一氏および萩原康仁氏に感謝いたします。

末筆ながら、本日まで著者を養い、いつも温かい励ましを送り続けてくれた両親、家族に心から感謝いたします。

2015年10月

矢上台の研究室にて

著者

原, 英之

参考文献

- (1) 伊澤楨一, 高分子材料の基礎と応用, (2008), 内田老鶴圃.
- (2) 高原淳, 高分子材料, (2000), 岩波書店.
- (3) 灘裕統, “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”, 博士論文, 慶應義塾大学大学院, (2007).
- (4) 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.
- (5) 井上俊英 他, エンジニアリングプラスチック, (2004), 共立出版.
- (6) Callister, W. D., Jr., *Materials Science and Engineering: An Introduction, 7th Edition*, (2007), John Wiley & Sons, Inc.
- (7) 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.
- (8) 日本機械学会, JSME テキストシリーズ 機械材料学, (2008), 丸善出版.
- (9) 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.
- (10) 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.
- (11) 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 A 編, Vol. 48, No. 426 (1982), pp. 221–229.
- (12) 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.
- (13) (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.
- (14) 古口日出男・堀幸夫, “高分子材料のクレイズの発生・成長に関する研究 (第 3 報, クレイズ成長の停止について)”, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 53, No. 491 (1987), pp. 1151–1156.
- (15) Imai, Y. and Brown, N., “The Effect of Strain Rate on Craze Yielding, Shear Yielding, and Brittle Fracture of Polymers at 77° K”, *Journal of Polymer science B Polymer Physics*, Vol. 14, (1976), pp. 723–739.
- (16) Brown, N. and Fiscer, S., “Nucleation and Growth of Crazes in Amorphous Polychlorotrifluoroethylene in Liquid Nitrogen”, *Journal of Polymer science B Polymer Physics*, Vol. 13, (1975), pp. 1315–1331.
- (17) Stephen B. Clay and Ronald G. Kander, “Measurement of the Residual Mechanical Properties of Crazed Polycarbonate. I: Qualitative Analysis”, *Polymer Engineering and Science*, Vol. 42, No. 1 (2002), pp. 182–190.
- (18) 野田直剛・中村保, 基礎塑性力学, (1991), 日新出版.
- (19) Sanomura, Y., “Constitutive Equation for Plastic Behavior of Hydrostatic-pressure-dependent Polymers”, *Materials Science Research International*, Vol. 9, No. 4 (2003), pp. 243–247.
- (20) 金子堅司・西山隆, “ポリプロピレンの引張予負荷後の逆負荷時における非弾性変形速度”, 日本機械学会材料力学部門講演会講演論文集, (2002), pp. 129–130.
- (21) Grytten, F., Daiyan, H., Polance-Loria, M. and Dumoulin, S., “Use of Digital Image Correlation to Measure

- Large-strain Tensile Properties of Ductile Thermoplastics”, *Polymer Testing*, Vol. 28, (2009), pp. 653–660.
- (22) 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.
- (23) Prisacariu, C., Buckley, C.P. and Caraculacu, A.A., “Mechanical Response of Dibenzy-based Polyurethanes with Diol Chain Extension”, *Polymer*, Vol. 46, (2005), pp. 3884–3894.
- (24) 水野衛・肥田政彦, “基礎的負荷条件に対するエポキシの非弾性変形と非弾性構成式の適用”, *材料*, Vol. 52, No. 3 (2003), pp. 281–287.
- (25) 町田輝史, “プラスチック塑性加工の現状と将来”, *鉄と鋼*, Vol. 12, (1989), pp. 2146–2158.
- (26) 牧野内昭武, “プラスチックの冷間塑性加工”, *高分子*, Vol. 26, (1977), pp. 183–202.
- (27) Sahin, S. and Yayla, P., “Effects of Testing Parameters on the Mechanical Properties of Polypropylene Random Copolymer”, *Polymer Testing*, Vol. 24, (2005), pp. 613–619.
- (28) Smith, T.L., “Ultimate Tensile Properties of Elastomers. I. Characterization by a Time and Temperature Independent Failure Envelope”, *Journal of Polymer Science: Part A*, Vol. 1, (1963), pp. 3597–3615.
- (29) 南斎征夫, “低ひずみ速度におけるガラス状ポリメタクリル酸メチルの延性の低下”, *高分子論文集*, Vol. 41, No. 7 (1984), pp. 389–395.
- (30) 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 A 編*, Vol. 58, No. 554 (1992), pp. 1859–1863.
- (31) 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.
- (32) 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.
- (33) 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.
- (34) 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.
- (35) 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 A 編*, Vol. 68, No. 668 (2002), pp. 674–681.
- (36) 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 A 編*, Vol. 68, No. 668 (2002), pp. 682–689.
- (37) 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).
- (38) 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.
- (39) 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.
- (40) Tomita, Y. and Hayashi, K., “Deformation Behavior in Elasto-viscoplastic Polymeric Bars Under Tension”, *Proceedings of PLASTICITY '91*, (1991), pp. 524–527.
- (41) 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.

- (42) 水野衛・佐野村幸夫, “高分子材料の負荷反転時の非弾性挙動を表す粘塑性構成式”, 材料, Vol. 54, No. 4 (2005), pp. 414–419.
- (43) Drozdov, A.D., “Time-dependent Response of Polypropylene After Strain Reversal”, *International Journal of Solids and Structures*, Vol. 47, (2010), pp. 3221–3223.
- (44) 富田佳宏, “分子鎖網目理論による高分子材料の力学特性評価”, 材料, Vol. 57, No. 3 (2008), pp. 209–218.
- (45) Argon, A. S., “A Theory for the Low-temperature Plastic Deformation of Glassy Polymers”, *Philosophical Magazine*, Vol. 28, No. 4 (1973), pp. 839–865.
- (46) 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.
- (47) Kuhn, W. and Grün, F., “Beziehungen Zwischen Elastischen Konstanten und Dehnungsdoppelbrechung Hochelastischer Stoffe”, *Kolloid-Zeitschrift*, Vol. 101, No. 3 (1942), pp. 248–271.
- (48) 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.
- (49) 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.
- (50) 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.
- (51) 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.
- (52) 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.
- (53) 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.
- (54) 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 文集 A 編, Vol. 64, No. 623 (1998), pp. 1916–1922.
- (55) 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.
- (56) 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.
- (57) 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 文集 A 編, Vol. 66, No. 643 (2000), pp. 420–427.
- (58) 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.
- (59) 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.
- (60) 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.
- (61) 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.
- (62) Asaro, R.J., “Crystal Plasticity”, *Transactions of the ASME, Journal of Applied Mechanics*, Vol. 50, No. 4 (1983), pp. 921–934.
- (63) Taylor, G. I., “Plastic Strain in Metals”, *Journal of the Institute of Metals*, Vol. 62, (1938), pp. 307–324.
- (64) Sachs, G., “Zur Ableitung einer Fließbedingung”, *Zeitschrift des Vereines Deutscher Ingenieure*, Vol. 72, (1928), pp. 734–736.
- (65) 高橋寛, 多結晶塑性論, (1999), コロナ社.
- (66) Kroner, E., “Zur Plastischen Verformung des Vielkristalls”, *Acta Metallurgica*, Vol. 9, (1961), pp. 155–161.
- (67) Nakamachi, E., Tam, N.N. and Morimoto, H., “Multi-scale Finite Element Analysis of Sheet Metals by Using SEM-EBSD Measured Crystallographic RVE Models”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 23, (2007), pp. 450–489.
- (68) Fleck, N.A., Muller, G.M., Ashby, M.F. and Hutchinson, J.W., “Strain Gradient Plasticity: Theory and Experiment”, *Acta Metallurgica at Materialia*, Vol. 42, (1994), pp. 475–487.
- (69) Ohashi, T., “Crystal Plasticity Analysis of Dislocation Emission from Micro Voids”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 21, (2005), pp. 2071–2088.
- (70) Parks, D. M. and Ahzi, S., “Polycrystalline Plastic Deformation and Texture Evolution for Crystals Lacking Five Independent Slip Systems”, *Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 38, No. 5 (1990), pp. 701–724.
- (71) Ahzi, S. and Lee, B.J. and Asaro R.J., “Plasticity and Anisotropy Evolution in Crystalline Polymers”, *Materials Science and Engineering*, Vol. A189, (1994), pp. 35–44.
- (72) 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 A 編, Vol. 74, No. 737 (2008), pp. 99–106.
- (73) Nada, H., Hara, H., Tadano, Y. and Shizawa, K., “Molecular Chain Plasticity Model Similar to Crystal Plasticity Theory Based on Change in Local Free Volume and FE Simulation of Glassy Polymer”, *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 93, (2015), pp. 120–135.
- (74) 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.
- (75) 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.
- (76) 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 A 編, Vol. 74, No. 737 (2008), pp. 107–116.
- (77) 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.
- (78) 灘裕統・只野裕一・志澤一之, “非晶性ポリマの分子鎖多絡み点を考慮した分子鎖塑性モデルおよび変形誘起異方性に関する大変形 FEM 解析”, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 74, No. 743 (2008), pp. 961–970.
- (79) Lee, B.J., Parks, D.M. and Ahzi, S., “Micromechanical Modeling of Large Plastic Deformation and Texture Evolution in Semi-crystalline Polymers”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 41, No. 10 (1993), pp. 1651–1687.
- (80) 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 A 編, Vol. 71, No. 707 (2005), pp. 996–1002.
- (81) 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).
- (82) 寺田賢二郎・菊池昇, 均質化入門, (2003), 丸善.

- (83) Guedes, J.M. and Kikuchi, N., “Preprocessing and Postprocessing for Materials Based on the Homogenization Method with Adaptive Finite Element Methods”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 83, (1990), pp. 143–198.
- (84) Terada, K. and Kikuchi, N., “A Class of General Algorithms for Multi-scale Analyses of Heterogeneous Media”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 190, (2001), pp. 5427–5464.
- (85) Yuan, X., Tomita, Y. and Andou, T., “A Micromechanical Approach of Nonlocal Modeling for Media with Periodic Microstructures”, *Mechanics Research Communications*, Vol. 35, (2008), pp. 126–133.
- (86) Kouznetsova, V., Geers, M.G.D. and Brekelmans W.A.M., “Multi-scale Constitutive Modelling of Heterogeneous Materials with a Gradient-enhanced Computational Homogenization Scheme”, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol. 54, (2002), pp. 1235–1260.
- (87) 内田真・多田直哉, “巨視的なひずみこう配に対する特性変位関数を導入した2次均質化法に基づく有限要素法による変形解析法の構築”, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 79, No. 806 (2013), pp. 1486–1503.
- (88) Ohno, N., Okumura, D. and Noguchi, H., “Microscopic Symmetric Bifurcation Condition of Cellular Solids Based on a Homogenized Theory of Finite Deformation”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 50, No. 5 (2002), pp. 1125–1153.
- (89) 仲町英治・飯星真治・陳胎平・上田整・上辻靖智・藤田宏平, “結晶均質化有限要素法によるマルチスケール塑性変形解析”, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 70, No. 690 (2004), pp. 191–197.
- (90) Uchida, M. and Tada, N., “Micro-, Meso- to Macroscopic Modeling of Deformation Behavior of Semi-crystalline Polymer”, *International Journal of Plasticity*, Vol. 49, (2013), pp. 164–184.
- (91) Lemaitre, J.E.H., “Evaluation and Dissipation of Damage in Metals Subjected to Dynamic Loading”, *Proceedings of International Conference on the Mechanical Behavior of Materials*, (1971).
- (92) Grabacki, J., “On Continuous Description of Damage”, *Mechanika Teoretyczna I Stosowana*, Vol. 27, No. 2 (1989), pp. 271–291.
- (93) Rabotnov Y.N., *Progress in Applied Mechanics—the prager anniversary volume*, (1963), pp. 307–315.
- (94) 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 A 編, Vol. 70, No. 694 (2004), pp. 810–817.
- (95) 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.
- (96) 村上澄男・大野信忠, 日本機械学会全国大会講演論文集 A 編, Vol. 46, No. 409 (1980), pp. 940–946.
- (97) Gurson, A. L., “Continuum Theory of Ductile Rupture by Void Nucleation and Growth: Part I Yield Criteria and Flow Rules for Porous Ductile Media”, *Transactions of the ASME, Journal of Engineering Materials and Technology*, Vol. 99, (1977), pp. 2–15.
- (98) Steenbrink, A.C., Van del Giesen, E. and Wu, P.D., “Void Growth in Glassy Polymers”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 45, (1997), pp. 405–437.
- (99) 田中俊介・小林誠一・志澤一之, “ポリマに対するクレイズの伝ば・成長停止モデルと破断予測シミュレーション”, 日本機械学会全国大会講演論文集, Vol. 26, No. 03 (2003), pp. 393–394.
- (100) 高橋順一・山本敏治・志澤一之, “結晶性ポリマのクレイズ挙動に基づく延性破壊予測シミュレーション (クレイズの伝ば・成長停止モデルおよび汎用ソルバによる解析)”, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 76, No. 764 (2010), pp. 473–482.
- (101) 高橋順一・山本敏治・志澤一之, “広ひずみ速度域に対応したクレイズ挙動のモデル化とその結晶性ポリマの破壊予測シミュレーションへの応用”, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 79, No. 800 (2013), pp. 380–394.

- (102) 成沢郁夫・近土隆, “ガラス状高分子のクレイズとぜい性破壊”, 材料, Vol. 21, No. 223 (1972), pp. 315–320.
- (103) 成沢郁夫・近土隆, “ガラス状高分子のクレイズ発生機構に関する研究”, 材料, Vol. 21, No. 223 (1972), pp. 321–329.
- (104) 古口日出男・堀幸夫, “高分子材料のクレイズの発生・成長に関する研究 (第2報, アクリルの表面に発生するクレイズ長さの分布について)”, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 51, No. 467 (1985), pp. 1695–1701.
- (105) 北川正義・川越誠, “クレイズ発生と成長の統計的研究”, 材料, Vol. 27, No. 301 (1978), pp. 995–1000.
- (106) 古口日出男・堀幸夫, “高分子材料のクレイズの発生・成長に関する研究 (第1報, クリープとクレイズ成長との関係)”, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 51, No. 467 (1985), pp. 1687–1694.
- (107) 横堀武夫, 材料強度学, (1974), 岩波書店.
- (108) Kocks, U. F., Argon, A. S. and Ashby, M. F., *Thermodynamics and Kinetics of Slip*, Progress in Materials Science, (1975), Pergamon Press.
- (109) Duckett, R.A., Rabinowitz, S. and Ward, I.M., “The Strain-rate, Temperature and Pressure Dependence of Yield of Isotropic Poly(methylmethacrylate) and Poly(ethylene terephthalate)”, *Journal of Materials Science*, Vol. 5, (1970), pp. 909–915.
- (110) Ward, I.M., “Review: The Yield Behaviour of Polymers”, *Journal of Materials Science*, Vol. 6, (1971), pp. 1397–1417.
- (111) Green, A. E. and Zerna, W., *Theoretical Elasticity*, 2nd Edition, (1968), p. 72, Oxford University Press.
- (112) 灘裕統, “多結晶分子鎖すべりモデルによる非晶性ポリマの非晶性ポリマの非晶質状態の表現と自由体積変化を考慮した大変形シミュレーション”, 修士論文, 慶應義塾大学大学院, (2007).
- (113) 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.
- (114) Lee, E. H., “Elastic-plastic deformation at finite strains”, *Journal of Applied Mechanics*, Vol. 36, (1969), pp. 1–6.
- (115) 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.
- (116) Kratochvil, J., “Finite-strain Theory of Crystalline Elastic-inelastic Materials”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 42, No. 3 (1971), pp. 1104–1108.
- (117) Mandel, J., *CISM Course No. 97*, (1971), Springer-Verlag.
- (118) Dafalias, Y.F., “The Plastic Spin”, *Transaction of the ASME, Journal of Applied Mechanics*, Vol. 52, (1985), pp. 865–871.
- (119) 志澤一之・若林宏樹, “転位ドリフト速度理論における塑性スピンと背応力の構成式に対する熱・力学的検討”, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 66, No. 647 (2000), pp. 1290–1296.
- (120) 村上澄男, 連続体損傷力学, (2008), 森北出版.
- (121) 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.
- (122) 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.
- (123) 高橋順一, “結晶性ポリマにおけるクレイズ進展挙動のモデル化およびそれを用いた破壊予測シミュレーション”, 博士論文, 慶應義塾大学大学院, (2013).
- (124) (社) 土木学会, いまさら聞けない計算力学の常識, (2008), 丸善.
- (125) Eringen, A. C., *Continuum Physics 2*, (1975), Academic Press.
- (126) 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.

- (127) 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.
- (128) 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.
- (129) 黒澤瑛介, “FCC 超微細粒金属の力学特性に関するトリプルスケール転位–結晶塑性モデリングおよび大変形シミュレーション”, 博士論文, 慶應義塾大学大学院, (2010).
- (130) Jacob Fish and Ted Belytschko, 有限要素法 ABAQUS Student Edition 付, (2008), 丸善.
- (131) 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.
- (132) 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.
- (133) Eisele, U., *Introduction to Polymer Physics*, (1990), p. 104, Springer-Verlag.
- (134) 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.
- (135) Sugimoto, M. and Ishikawa, M., “Toughness of Polypropylene”, *Polymer*, Vol. 36, No. 19 (1995), pp. 3675–3682.
- (136) Tvergaard, V., “Necking in Tensile Bars with Rectangular Cross-section”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol. 103, (1993), pp. 273–290.
- (137) G’Sell, C., Dahoun, A., Favier, V., Hiver, J.M., Philippe, M.J. and Canova, G.R., “Microstructure Transformation and Stress-strain Behavior of Isotactic Polypropylene Under Large Plastic Deformation”, *Polymer Engineering and Science*, Vol. 37, No. 10 (1997), pp. 1702–1711.
- (138) 寺田賢二郎・平山紀夫・山本晃司・松原成志朗, “複合板の線形マルチスケール解析のための数値平板試験”, 日本計算工学会論文集, Vol. 2015, No. 20150001 (2015).
- (139) Yamanaka, Y. and Matsuda, T., “Effects of Laminate Misalignment on Thermoelastoviscoplastic Properties of Ultrafine Plate-fin Structures”, *Key Engineering Materials*, Vol. 626, (2015), pp. 301–306.
- (140) 灘裕統・工藤正和・高橋順一・山本敏治・原英之・志澤一之, “高分子多孔質膜製造プロセスのシミュレーション技術開発”, 日本機械学会 M&M2015 材料力学カンファレンス講演論文集, No. 15-6 (2015).
- (141) Truesdell, C. and Noll, W., *The Non-linear Field Theories of Mechanics*, (1965), Springer-Verlag OHG.
- (142) 吉田総仁, 弾塑性力学の基礎, (1997), 共立出版.
- (143) 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.
- (144) Hill, R., “Elastic Properties of Reinforced Solids: Some Theoretical Principles”, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol. 11, No. 5 (1963), pp. 357–372.
- (145) Suquet, P. M., “Elements of Homogenization Theory for Inelastic Solid Mechanics”, *Homogenization Techniques for Composite Media, Lecture Note in Physics*, No. 272 (1987), pp. 193–278.
- (146) 近藤瑠歩, “Multi-phase-field モデルおよび転位–結晶塑性モデルを用いた双晶組織変化を伴う純 Mg の塑性変形挙動のモデル化とその均質化 FEM 解析”, 博士論文, 慶應義塾大学大学院, (2014).
- (147) Bartczak, Z., Argon, A. S. and Cohen, R. E., “Deformation Mechanisms and Plastic Resistance in Single-Crystal- Textured High-Density Polyethylene”, *Macromolecules*, Vol. 25, No. 19 (1992), pp. 5036–5053.
- (148) 柘植洋太・青柳吉輝, “分子動力学法によるポリプロピレンの結晶相における分子鎖すべりシミュレーション”, 日本機械学会 M&M2015 材料力学カンファレンス講演論文集, No. 15-6 (2015).
- (149) 小林誠一・岡田裕・鳥垣俊和・志澤一之, “ポリマにおけるせん断帯伝ばと異方性クレイズの進展”, 日本

機械学会第 15 回計算力学講演会講演論文集, No. 2-2 (2002).

- (150) Betten, J., “Applications of Tensor Functions to the Formulation of Constitutive Equations Involving Damage and Initial Anisotropy”, *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 25, (1986), pp. 573–584.

本研究に関する原著論文および口頭発表

1. 定期刊行誌掲載論文（主論文に関連する原著論文）

- (1) 原英之, 水澤文彦・志澤一之, “自由体積変化に基づく非弾性応答則および均質化分子鎖塑性モデルを用いた結晶性ポリマに対するマルチスケールシミュレーション”, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 79, No. 800, (2013), pp. 364-379.
- (2) 原英之, 志澤一之, “反応速度論に基づくクレーズ発展式の構築および均質化分子鎖塑性モデルを用いた結晶性ポリマに対するクレーズ進展シミュレーション”, 日本機械学会論文集 A 編, Vol. 79, No. 807, (2013), pp. 1604-1619.
- (3) Hara, H. and Shizawa, K., “Three-dimensional FE Analysis Using Homogenization Method for Ductile Polymers Based on Molecular Chain Plasticity Model Considering Craze Evolution”, in “From Creep Damage Mechanics to Homogenization Methods” (Ed. Altenbach, H., Matsuda, T. and Okumura, D.), *Advanced Structured Materials*, Vol. 64, (2015), pp. 97-119.
- (4) Hara, H. and Shizawa, K., “Homogenized molecular chain plasticity simulation for crystalline polymer using craze evolution model based on chemical kinetics”, *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 101, (2015), pp. 180-195.

2. 定期刊行誌掲載論文（その他の論文）

- (1) Nada, H., Hara, H., Tadano, Y. and Shizawa, K., “Molecular chain plasticity model similar to crystal plasticity theory based on change in local free volume and FE simulation of glassy polymer”, *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol. 93, (2015), pp. 120-135.

3. 国際会議論文（査読付きの full-length papers）

- (1) Hara, H. and Shizawa, K., “Fracture Prediction Simulation for Crystalline Polymer Using Homogenized Molecular Chain Plasticity and Craze Evolution Models”, *Key Engineering Materials*, (AEPA 2014, Kaohsiung, Taiwan), Vol. 626, (2015), pp. 193-198.

4. その他の国際会議発表

- (1) Hara, H.* and Shizawa, K., “Multiscale Simulation for Deformation Response of Crystalline Polymer Using Homogenized Molecular Chain Plasticity Model”, *Proceedings of KSME-JSME Joint Symposium on CM & CAE 2012*, (Kanazawa, Japan), NM-JP-9 (7 pages), (2012-09).

- (2) Hara, H.* and Shizawa, K., “Homogenized Molecular Chain Plasticity Simulation for Crystalline Polymer Using Craze Evolution Model Based on Chemical Kinetics”, *Abstracts of 5th Asia Pacific Congress on Computational Mechanics*, (APCOM2013, Singapore, Republic of Singapore), 1314, (2013-12).
- (3) Hara, H.* and Shizawa, K., “Fracture Prediction Simulation for Crystalline Polymer Using Homogenized Molecular Chain Plasticity and Craze Evolution Models”, *Abstracts of 12th Asia-Pacific Conference on Engineering Plasticity and Its Applications*, (AEP2014, Kaohsiung, Taiwan), p. 59, (2014-05).

5. 国内学会発表

- (1) 原英之*, 水澤文彦, 志澤一之, “分子鎖塑性モデルに基づく均質化法を用いた結晶性ポリマに対するトリプルスケールシミュレーション”, 第 23 回計算力学講演会, (日本機械学会, 北海道, 2010-09), No.10-2, pp. 348-349.
- (2) 原英之*, 水澤文彦, 志澤一之, “除荷時の非線形ひずみ回復を考慮した結晶性ポリマに対するトリプルスケールシミュレーション”, 第 60 期学術講演会, (日本材料学会, 大阪, 2011-05), pp. 151-152.
- (3) 梶谷聡*, 原英之, 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結晶性ポリマに対するトリプルスケールシミュレーション”, 第 24 回計算力学講演会, (日本機械学会, 岡山, 2011-10), No.11-3, pp. 170-171.
- (4) 原英之*, 梶谷聡, 志澤一之, “除荷時の顕著なひずみ回復を考慮した結晶性ポリマに対するマルチスケールシミュレーション”, 第 61 回理論応用力学講演会, (日本学術会議, 東京, 2012-03), OS11-19 (2 pages).
- (5) 原英之*, 志澤一之, “反応速度論および分子鎖塑性論に基づく結晶性ポリマのクレイズ進展シミュレーション”, 第 61 期学術講演会, (日本材料学会, 岡山, 2012-05), 629 (2 pages).
- (6) 丸田祐介*, 原英之, 志澤一之, “反応速度論に基づくクレイズ進展モデルおよび分子鎖塑性モデルを用いた結晶性ポリマに対する破断予測シミュレーション”, 第 25 回計算力学講演会, (日本機械学会, 兵庫, 2012-10), No.12-4, pp. 670-671.
- (7) 志澤一之*, 原英之, “ポリマの塑性に関する分子鎖モデル”, 第 62 回理論応用力学講演会, (日本学術会議, 東京, 2013-03), OS21-17 (2 pages).
- (8) 原英之*, 志澤一之, “ひずみ速度に依存する結晶性ポリマの破壊挙動に関するクレイズ進展の分子鎖塑性シミュレーション”, 第 62 期学術講演会, (日本材料学会, 東京, 2013-05), 431 (2 pages).
- (9) 佐々木文章*, 中村亮介, 原英之, 志澤一之, “クレイズ進展の異方性を考慮した結晶性ポリマの均質化分子鎖塑性シミュレーション”, 第 26 回計算力学講演会, (日本機械学会, 佐賀, 2013-11), No.13-3, 1420 (2 pages).
- (10) 中村亮介*, 佐々木文章, 原英之, 志澤一之, “結晶性ポリマの結晶化度が延性に及ぼす影響に関するクレイズ進展形分子鎖塑性シミュレーション”, 第 63 期学術講演会, (日本材料学会, 福岡, 2014-05), 621 (2 pages).
- (11) 原英之*, 志澤一之, “クレイズ進展形分子鎖塑性モデルを用いた非晶性ポリマの三次元大変形 FEM 解析”, 第 58 回材料工学連合講演会, (日本学術会議, 京都, 2014-10), pp. 391-392.
- (12) 佐々木文章*, 中村亮介, 原英之, 志澤一之, “分子鎖の絡み点間距離に基づく寸法効果を有する非晶性ポリマの分子鎖塑性モデル”, 第 28 回計算力学講演会, (日本機械学会, 神奈川, 2015), No.15-9, 025 (2 pages).
- (13) 灘裕統*, 工藤正和, 高橋順一, 山本敏治, 原英之, 志澤一之, “高分子多孔質膜製造プロセスのシミュレーション技術開発” M&M2015 材料力学カンファレンス, (日本機械学会, 神奈川, 2015), No.15-6, OS1332-302 (3 pages).

6. その他

- (1) 発表 原英之*, 志澤一之, “クレーズ進展を考慮した均質化分子鎖塑性モデルによる結晶性ポリマの破断予測”, A-TS_01-15 研究会, 高分子材料の変形挙動の評価とモデル化—マイクロからマクロまで—, (日本材料学会塑性工学部門委員会主催, 日本機械学会 A-TS 協賛, 京都, 2014-03).
- (2) 受賞 日本材料学会 平成 26 年度 塑性工学部門委員会 優秀学生講演発表賞.

補足 A

第 1 章の補足

A.1 連続体の定義

1.1.1 項で述べたように，物質の最小構成単位は離散的に存在する原子またはさらに微小な粒子である．したがって，ある物質の運動を決定論的に追跡したければ，その物質内に含まれる個々の粒子に対する運動方程式を連立して解けばよい．しかしながら，上述のような分子動力学的なアプローチでは，高々 $1\ \mu\text{m}$ 四方の微小領域の数値計算を実施するのも莫大な計算時間が必要となり，実用的な工学問題における運動を明らかにすることは困難である．加えて，我々が日常的に取り扱う工学上の力学問題においては，全ての粒子の運動状態を詳細に把握する必要はなく，ある程度巨視的な領域における粒子群の平均的な振る舞いが明らかであれば十分な場合が多い．そこで，連続体力学においては本来は離散的に粒子が分布している領域 ΔV を，密度 ρ およびその他の物理量が空間について連続的に定義できる物質によって埋められていると考える．これは連続体近似と呼ばれ，密度を次式のように定義することと等価である．

$$\rho \equiv \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta m}{\Delta V} = \frac{dm}{dv} \dots\dots\dots (\text{A.1})$$

ここで， Δm は領域 ΔV の質量である．式 (A.1) は図 A.1 のように，物質の不連続な微視構造によって本来密度が振動してしまうスケールにおいても密度を連続関数として扱えるよう，無限小体積要素 dv に対しても密度を定義可能な物体を想定することを意味する．したがって，連続体力学の適用は実現象においても密度が振動せず，領域についての平均量が十分有為であると見なせるスケールに限られる．ただし，連続体の概念はあくまで相対的なものであり，連続体仮定を適用する粒子群として必ずしも原子または分子を想定する必要はないことに注意されたい．

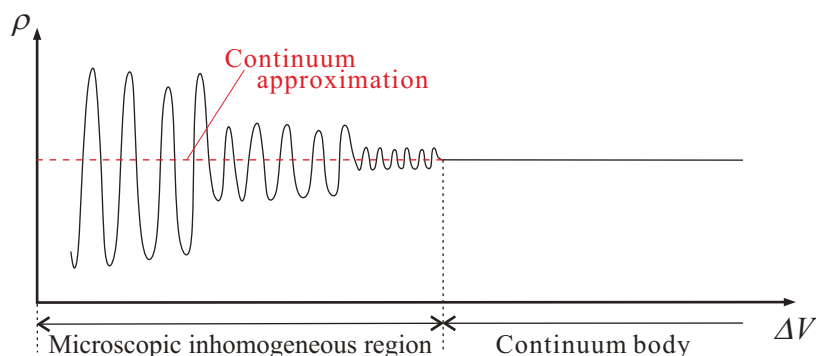


Fig. A.1 Definition of continuum body.

A.2 真応力-真ひずみおよび公称応力-公称ひずみの変換式

実験による応力-ひずみ応答が公称応力-公称ひずみ曲線ではなく、真応力-真ひずみ曲線で得られている場合には数値解析結果の公称応力-公称ひずみ曲線と比較するために公称値へ変換する必要がある。ここで、公称応力-公称ひずみ曲線は試験片全体に対して一つの応答が得られるのに対し、真応力-真ひずみ曲線は不均一変形を生じた試験片の各物質点において定義される。したがって、真応力および真ひずみを公称応力および公称ひずみに変換する場合には一様変形の仮定が必要となる。すなわち、試験片のいずれの点においても真応力は同じであるとする。加えて、以下の変換式では体積一定の仮定も用いている。

まず、本節では真応力 σ を式 (A.2) で、公称応力 σ_n を式 (A.3) で定義する。

$$\sigma = \frac{F}{A} \dots\dots\dots (A.2)$$

$$\sigma_n = \frac{F}{A_0} \dots\dots\dots (A.3)$$

ここで、 A_0 は変形前の断面積、 A は変形後の断面積、 F は荷重を表す。また、変形前後の試験片体積が一定だと仮定すると、以下の式が成り立つ。

$$A_0 l_0 = A l \dots\dots\dots (A.4)$$

l_0 は変形前の長さ、 l は変形後の長さを表す。式 (A.2) と式 (A.4) より真応力 σ は次式のように表記できる。

$$\sigma = \frac{F}{A_0} \frac{l}{l_0} \dots\dots\dots (A.5)$$

式 (A.5) に式 (A.3) を代入すると真応力 σ と公称応力 σ_n の関係式は次式のように表記できる。

$$\sigma = \sigma_n \frac{l}{l_0} \dots\dots\dots (A.6)$$

また、真ひずみ ε は式 (A.7)、公称ひずみ ε_n は式 (A.8) のように表される。

$$\varepsilon = \ln\left(\frac{l}{l_0}\right) \dots\dots\dots (A.7)$$

$$\varepsilon_n = \frac{l - l_0}{l_0} = \frac{l}{l_0} - 1 \dots\dots\dots (A.8)$$

式 (A.7) および式 (A.8) より真ひずみ ε と公称ひずみ ε_n の関係式が次式のように表記できる。

$$\varepsilon = \ln(\varepsilon_n + 1) \dots\dots\dots (A.9)$$

式 (A.6) および式 (A.9) を用いれば、真応力-真ひずみ関係で表記された応力-ひずみ曲線を公称応力-公称ひずみ関係に変換でき、単軸負荷問題における実験値と解析結果の比較が可能となる。

A.3 ラメラの分離によるクレーズの形成

結晶性ポリマにおいては図 A.2⁽¹⁰⁾ に示すように引張りを受けることでラメラが崩壊・分離する。このラメラ同士を接続する分子鎖(フィブリル)が引き伸ばされ、分子鎖密度が疎となった領域がクレーズとなる。したがって、ラメラを有さない非晶性ポリマの場合には分子鎖の引き抜きや緩和により形成する材料内部の空隙が微視的損傷に対応すると考えられる。

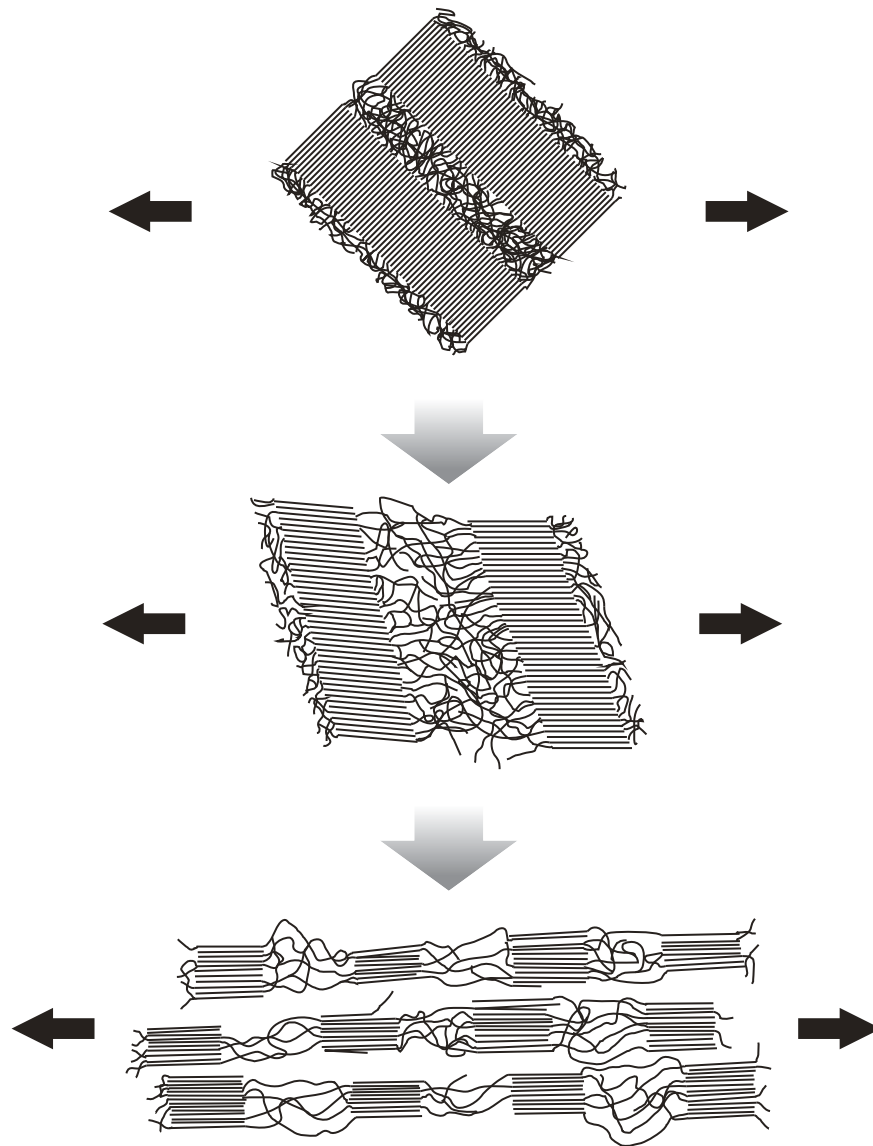
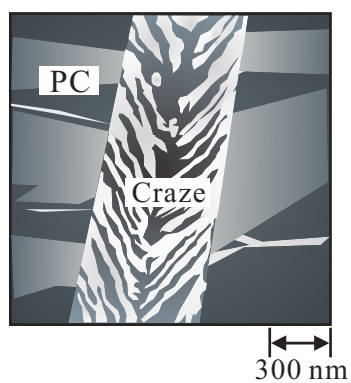
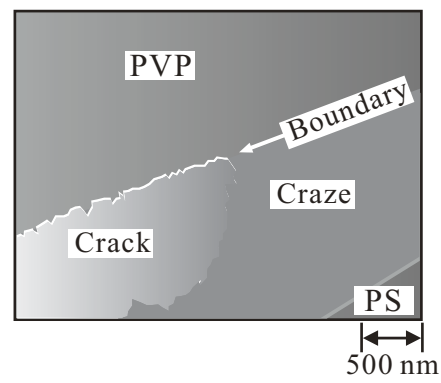


Fig. A.2 Mechanism of craze formation by breaking of lamellar.



(a) SEM observation (PC)



(b) TEM observation (PS/PVP blend)

Fig. A.3 Microphotographies of craze observed by (a) SEM and (b) TEM.

A.4 クレーズ進展の観察

図 A.3 は、PC に形成されるクレーズの SEM(Scanning Electron Microscope; 走査型電子顕微鏡) による観察結果の模式図⁽¹²⁾ および PS/PVP ブレンドの界面に形成されるクレーズとクラックの TEM(Transmission Electron Microscope; 透過型電子顕微鏡) の模式図⁽¹³⁾ である。図 A.3(a) でクレーズがひび割れのように PC 内に走っているのがわかる。一方、図 A.3(b) ではクレーズが PS と PVP の界面に集積しているが、フィブリルの破断したクラックの部分とは違っている。これによってクレーズとクラックの違いが確認できる。

A.5 クレーズ進展の異方性

クレーズの進展は引張方向に対して垂直に長く成長するという異方性を有する。例えば、図 A.4(a) のような観察領域に単軸引張負荷を加え、初期クレーズを形成した後、初期引張方向とは異なる方向に次の引張負荷を加えれば、その引張りにより発生するクレーズは 2 次引張方向と垂直に長く成長する。このようなクレーズ進展の異方性は微視的には、図 A.4(b) のように最大主応力方向の垂直方向にクレーズが長く成長する現象であると言える。

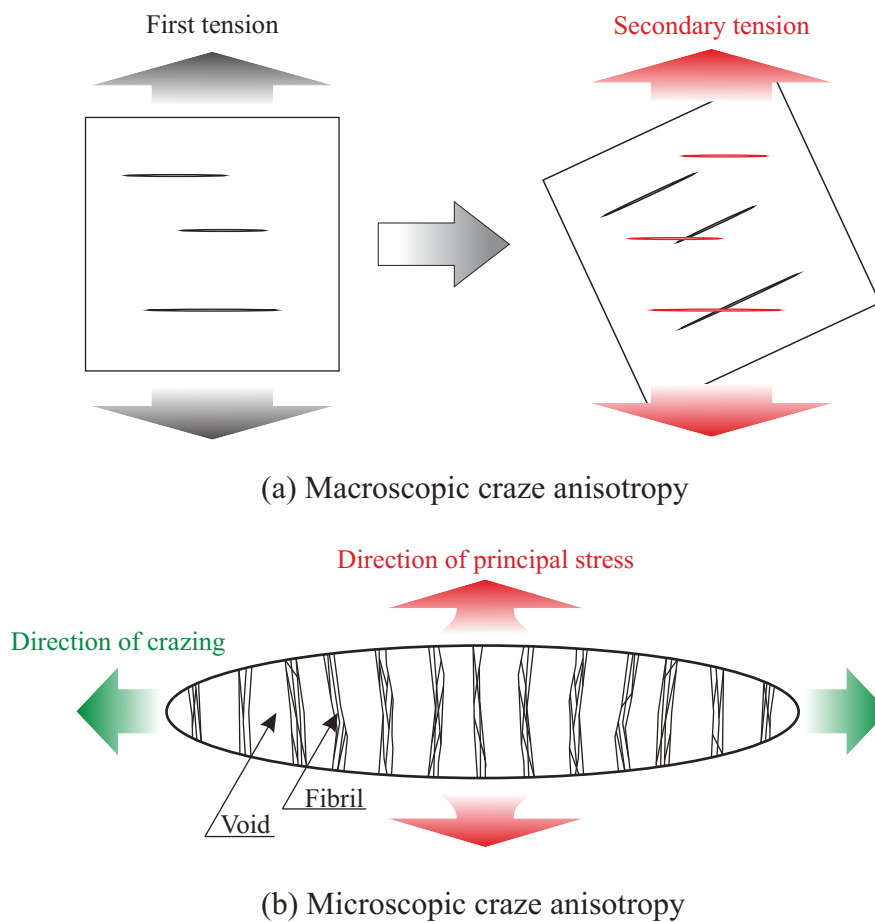


Fig. A.4 Anisotropy of craze evolution.

A.6 J₂-流れ理論に基づく弾粘塑性構成式

古典的塑性論における最も基本的な塑性構成式である J₂-流れ理論を用いた弾粘塑性構成式は共回転速度を連続体スピン \mathbf{W} に選んだ場合、次式のように表記することができる。

$$\dot{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^e : (\mathbf{D} - \mathbf{D}^p) = \mathbf{C}^e : \left(\mathbf{D} - \dot{\gamma}^p \frac{\mathbf{T}'}{\sqrt{2}\tau} \right) \dots \dots \dots \quad (\text{A.10})$$

ここで、 $\dot{\mathbf{T}} \equiv \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{W}\mathbf{T} + \mathbf{T}\mathbf{W}$ は Cauchy 応力 \mathbf{T} の Jaumann 速度、 $\tau = \sqrt{(\mathbf{T}' \cdot \mathbf{T}')}/2$ はせん断応力、 \mathbf{C}^e は 4 階の等方性弾性係数テンソル、 \mathbf{D} は変形速度、 \mathbf{D}^p は塑性変形速度である。式 (A.10) に加え、塑性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^p$ [補足 E.2] を求める硬化則を用いることによって、弾粘塑性体の解析が実施可能となる。また、式 (A.10) 右辺の偏差応力 \mathbf{T}' およびせん断応力 τ をそれぞれ式 (1.3) の背応力を用いて計算される有効偏差応力 $\hat{\mathbf{T}}'$ および有効せん断応力 $\hat{\tau}$ に置き換えるとともに、塑性せん断ひずみ速度の計算に式 (1.1) の Argon 硬化則を適用すれば、アフィンモデルの分子鎖網目理論に基づく変形解析が実施可能となる。なお、式 (A.10) からわかるように J₂-流れ理論においては塑性変形速度 \mathbf{D}^p の方向が偏差応力 \mathbf{T}' の方向と一致し、このような構成式は共軸構成式と呼ばれる。共軸構成式を用いた単軸引張解析では、変形の局所化が拡散くびれとして現れ、帯状に変形が局所化するせん断帯の形成を再現できないということが知られている。したがって、せん断帯の形成を再現するためには非共軸性を有する J₂-変形理論または結晶塑性論などに基づく塑性構成式を採用する必要がある。

A.7 結晶塑性論を用いた場合の降伏条件

結晶塑性論の体系に基づけば、降伏応力はすべり系毎の値、すなわち、流れ応力 $g^{(a)}$ の初期値として与えられる。さらに、2.5.2 項で述べているように、巨視的な降伏曲面を用いずに塑性変形速度を運動学的関係式から算出可能となる。このように、結晶塑性論では微視的なすべり系という立場から降伏現象を記述するため、通常は巨視的な立場に基づく降伏曲面を作成する必要がない。したがって、ポリマの非晶相および結晶相の双方の塑性変形を結晶塑性論に基づいて記述する本研究においても、巨視的な降伏条件について議論する必要性は特にないと言える。ただし、実際の工業上の強度設計においては、採用しているモデルの種類に関わらず、巨視的な降伏条件が明らかであることが重要となる。そのような場合には、様々な応力経路に対する大変形 FEM 解析を実施し、巨視的降伏を生じた際のマクロ物質点における主応力値を主応力空間上にプロットすることで、本研究のように結晶塑性論の構成式を採用したモデルにおいても理論上は巨視的な降伏曲面が作成可能となることを付記しておく。

A.8 正方向反応のみを考慮した反応速度論の注意点

負方向反応を無視し、正方向反応のみを考慮した反応速度論を用いる場合、式 (1.9) からわかるように応力 σ が零の状態でもわずかに反応が生じることに注意されたい。したがって、無応力状態において、せん断ひずみ速度などの正方向反応のみの反応速度論によって計算される量が厳密に零となるようにしたい場合には、数値解析上で応力値によって場合分けをする必要がある。なお、負方向反応まで考慮した反応速度論を用いる場合には式 (1.8) からわかるように、応力 σ が零であれば、自然に反応速度 V も零となる。

A.9 せん断強度を用いた反応速度論の表記

式 (1.9) の正方向の反応のみを考慮した反応速度論を用いて、塑性せん断ひずみ速度を表記すれば次式のようになる。

$$\dot{\gamma}^p = \dot{\gamma}_0 \exp\left(-\frac{\Delta F_0 - \tau \Delta v_\tau}{k_B \theta}\right) \dots \dots \dots (A.11)$$

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、 τ はせん断応力、 Δv_τ はせん断応力に対する活性化体積を表す。また、 ΔF_0 は無応力状態での活性化エネルギーであり、 $\tau \Delta v_\tau$ の項はせん断応力による見かけの活性化エネルギー変化を表す。なお、反応速度論では式 (1.5) の頻度係数が $\omega_c \equiv k_B \theta / h_P$ のように表わされるため、本来は式 (A.11) の参照ひずみ速度 $\dot{\gamma}_0$ も温度 θ に依存する係数となることが望ましい。しかしながら、係数部分の温度依存性は指数部分 $\exp(-\Delta F/k_B \theta)$ の温度依存性と比較して反応速度に与える影響が小さいため、反応速度論を用いた定式化では多くの場合、参照ひずみ速度は温度に依存しない定数として与えられる。ここで、 $\tau_0 \equiv \Delta F_0 / \Delta v_\tau$ で定義される材料定数を用いて式 (A.11) の活性化エネルギーの項の表記を変更すれば、

$$\Delta F_0 - \tau \Delta v_\tau = \Delta F_0 \left(1 - \tau \frac{\Delta v_\tau}{\Delta F_0}\right) = \Delta F_0 \left(1 - \frac{\tau}{\tau_0}\right) \dots \dots \dots (A.12)$$

となる。さらに、式 (A.12) を式 (A.11) に代入することで次式が得られる。

$$\dot{\gamma}^p = \dot{\gamma}_0 \exp\left[-\frac{\Delta F_0(1 - \tau/\tau_0)}{k_B \theta}\right] \dots \dots \dots (A.13)$$

式 (A.13) のように、 τ_0 を用いて記述された Eyring の反応速度論を材料応答則として採用すれば、塑性変形中の応力値、すなわち、流れ応力を応力次元の材料定数である τ_0 によって制御可能となり、活性化体積を用いた式 (A.11) と比較して材料定数を直観的に同定しやすくなるという利点がある。このことから、 τ_0 は参照応力と呼ばれる。あるいは、式 (A.13) の τ の値が τ_0 の値を超えない範囲でのみ用いられることから τ_0 はせん断強度と呼ばれることもあり、本論文においてもこちらの呼称を用いている。また、式 (A.12) は式 (1.11) において p および q を 1 とした場合に得られる式であることがわかる。したがって、Kocks らによって提案された式 (1.10) および式 (1.11) は p および q が 1 の場合にのみ反応速度論と一致し、 p および q は塑性せん断ひずみ速度の計算における反応速度論からのずれを表す材料定数であると言える。

A.10 構成式が満たすべき原理とその役割

力学場における構成式とは応力とひずみの関係式を指すが、広義には構成式とは物質特性を表す、熱力学的にエネルギー共役をなす量の関係式である。例えば、熱流速と温度こう配、磁束密度と磁場の関係式が挙げられる。また、構成式が満たすべき原理として Truesdell–Noll⁽¹⁴⁾ による有理連続体力学の中で提唱された次の 3 つの原理 [(1)~(3)] が知られている。さらに、連続体力学における熱力学的理論体系を考慮すれば、構成式は以下の 2 つの性質 [(4) および (5)] を満たさなければならないと言える。

- (1) 応力決定の原理：物体中の応力は物体の運動履歴によって決定される。
- (2) 局所作用の原理：物質点の応力の決定においては、その点の近傍の運動のみが関与し、その外の物質点の運動は無視できる。
- (3) 物質客観性の原理：構成式は観測者、すなわち、標構の違いに依存しない。この原理は標構無差別の原理とも呼ばれる。

- (4) エントロピー増大則：構成式の可逆部分 (保存部分) はエントロピーが常に増大するように決定される。
- (5) 最大散逸速度の原理：構成式の非可逆部分 (散逸部分) は内部エントロピー生成速度が最大になるように決定される。

一方、固体の変形解析において構成式がなす役割として次の 2 つが挙げられる。

- (1) 弱形式の釣合い方程式に代入し、物質特性を含む場の支配方程式を導く。
- (2) 支配方程式を解くことで得られる変位から計算されるひずみを用いて応力を更新する。

上記のうち、(1) は既に図 1.15 に示したとおりの性質である。また、(2) は支配方程式を解くことによって得られる物理量はあくまで変位のみであり、解析対象の応力を評価するには、まず、変位からひずみを算出し、そのひずみを構成式に適用することで応力を求める必要があることを述べている。実際の解析コードの構築においては、以上の 2 つの役割を解析スキームに組み込む必要がある。このとき、解析コードの設計を工夫することで、(1) および (2) の役割は単一のサブルーチン内にまとめて記述可能である。これによって物質点近傍のみで定義される構成式の体系と数値解析手法である有限要素法の体系を明確に区別した解析コードを作成することがプログラムの保守・運用の観点から望ましいと言える。ただし、数値解析上での (1) の役割は、式 (8.22) の構成式のマトリックスのうち材料特性を表す 2 つのマトリックス $[C^L]$ および $\{R^L\}$ の成分の値を求めることに対応する。

補足 B

第 2 章の補足

B.1 変形こう配を用いた速度こう配の表現

本節では現配置の速度こう配 \mathbf{L} および初期配置の速度こう配 $\mathbf{L}_{(I)}$ をそれぞれ変形こう配 \mathbf{F} を用いて表す手順を示す. まず, 現配置における速度こう配 \mathbf{L} は式 (2.4) のように物質速度ベクトル \mathbf{v} の現配置座標系 \mathbf{x} におけるこう配として定義されているため,

$$\begin{aligned}
 \mathbf{L} \equiv \text{grad } \mathbf{v} &= \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}} \\
 &= \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial \mathbf{x}_{(I)}} \frac{\partial \mathbf{x}_{(I)}}{\partial \mathbf{x}} \\
 &= \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{(I)}} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \right) \right] \frac{\partial \mathbf{x}_{(I)}}{\partial \mathbf{x}} \\
 &= \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}_{(I)}} \right) \right] \frac{\partial \mathbf{x}_{(I)}}{\partial \mathbf{x}} \\
 &= \dot{\mathbf{F}} \mathbf{F}^{-1} \dots \dots \dots \quad (\text{B.1})
 \end{aligned}$$

のように変形こう配を用いて書くことができる.

一方, 初期配置における速度こう配 $\mathbf{L}_{(I)}$ は, 初期配置座標系 $\mathbf{x}_{(I)}$ から観測した物質速度ベクトル $\mathbf{v}_{(I)}$ の初期配置座標系 $\mathbf{x}_{(I)}$ におけるこう配である. 初期配置における物質速度ベクトル $\mathbf{v}_{(I)}$ は $\mathbf{v}_{(I)} = \frac{\partial \mathbf{x}_{(I)}}{\partial t} = \frac{\partial \mathbf{x}_{(I)}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} = \mathbf{F}^{-1} \mathbf{v}$ のように現配置から写像されるものと考えれば

$$\begin{aligned}
 \mathbf{L}_{(I)} \equiv \text{Grad } \mathbf{v}_{(I)} &= \frac{\partial \mathbf{v}_{(I)}}{\partial \mathbf{x}_{(I)}} \\
 &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{(I)}} \left(\frac{\partial \mathbf{x}_{(I)}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \right) \\
 &= \frac{\partial \mathbf{x}_{(I)}}{\partial \mathbf{x}} \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_{(I)}} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial t} \right) \right] \\
 &= \frac{\partial \mathbf{x}_{(I)}}{\partial \mathbf{x}} \left[\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}_{(I)}} \right) \right] \\
 &= \mathbf{F}^{-1} \dot{\mathbf{F}} \dots \dots \dots \quad (\text{B.2})
 \end{aligned}$$

のように初期配置における速度こう配 $\mathbf{L}_{(I)}$ を表記できる.

B.2 共回転速度の導出

第2中間配置の2階のテンソル $\mathbf{S}_{(m')}$ および現配置の2階のテンソル \mathbf{S} の変換則 $\mathbf{S}_{(m')} = \chi^T \mathbf{S} \chi$ の両辺を物質時間微分すれば,

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{S}}_{(m')} &= (\chi^T \mathbf{S} \chi) \dot{} \\ &= \dot{\chi}^T \mathbf{S} \chi + \chi^T \dot{\mathbf{S}} \chi + \chi^T \mathbf{S} \dot{\chi} \\ &= \chi^T \chi \dot{\chi}^T \mathbf{S} \chi + \chi^T \dot{\mathbf{S}} \chi + \chi^T \mathbf{S} \dot{\chi} \chi^T \chi \\ &= \chi^T (\chi \dot{\chi}^T \mathbf{S} + \dot{\mathbf{S}} + \mathbf{S} \dot{\chi} \chi^T) \chi \dots \dots \dots \quad (\text{B.3}) \end{aligned}$$

のようになる. ここで, 直交テンソルの性質より $\chi \chi^T = \mathbf{I}$ であるため, これの両辺を物質時間微分すれば,

$$\begin{aligned} \dot{\chi} \chi^T + \chi \dot{\chi}^T &= \mathbf{0} \\ \dot{\chi} \chi^T &= -\chi \dot{\chi}^T \dots \dots \dots \quad (\text{B.4}) \end{aligned}$$

となる. 式 (B.4) を式 (B.3) に代入すれば, 共回転速度 $\overset{\nabla}{\mathbf{S}} \equiv \dot{\mathbf{S}} - \boldsymbol{\Omega}_\chi \mathbf{S} + \mathbf{S} \boldsymbol{\Omega}_\chi$ が次式のように導出できる.

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{S}}_{(m')} &= \chi^T (\dot{\mathbf{S}} - \dot{\chi} \chi^T \mathbf{S} + \mathbf{S} \dot{\chi} \chi^T) \chi \\ &= \chi^T (\dot{\mathbf{S}} - \boldsymbol{\Omega}_\chi \mathbf{S} + \mathbf{S} \boldsymbol{\Omega}_\chi) \chi \\ &= \chi^T \overset{\nabla}{\mathbf{S}} \chi \dots \dots \dots \quad (\text{B.5}) \end{aligned}$$

ここで, 共回転スピンの $\boldsymbol{\Omega}_\chi \equiv \dot{\chi} \chi^T$ である. なお, 本節では材料非依存性スピンを伴う共回転速度を導出したが, 上記の定式化において $m' \rightarrow m$, $\chi \rightarrow \mathbf{R}^*$, $\boldsymbol{\Omega}_\chi \rightarrow \mathbf{W}^*$ と置き換えることによって, 材料依存性スピンを伴う共回転速度, すなわち, Mandel-Kratochvil 速度 $\overset{\nabla}{\mathbf{S}} \equiv \dot{\mathbf{S}} - \mathbf{W}^* \mathbf{S} + \mathbf{S} \mathbf{W}^*$ を同様の手順で導出可能である.

B.3 速度こう配の分解

2.3.2 項における検討より, 速度こう配 \mathbf{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

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}^* + \mathbf{L}^e + \mathbf{L}^i \dots \dots \dots \quad (\text{B.6})$$

となる. さらに対称部分と反対称部分に分解すれば

$$\begin{aligned} \mathbf{L} &= (\mathbf{L}^*)_S + (\mathbf{L}^e)_S + (\mathbf{L}^i)_S + (\mathbf{L}^*)_A + (\mathbf{L}^e)_A + (\mathbf{L}^i)_A \\ &= \mathbf{D}^* + \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^i + \mathbf{W}^* + \mathbf{W}^e + \mathbf{W}^i \\ &= \mathbf{D} + \mathbf{W} \dots \dots \dots \quad (\text{B.7}) \end{aligned}$$

となる. ここで, $\mathbf{D} = \mathbf{L}_S$ は変形速度テンソルおよび $\mathbf{W} = \mathbf{L}_A$ は連続体スピンテンソルである. また, $(\mathbf{L}^*)_S = \mathbf{D}^* = \mathbf{0}$ および $(\mathbf{L}^e)_A = \mathbf{W}^e = \mathbf{0}$ であるから, 式 (B.7) は

$$\mathbf{L} = \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^i + \mathbf{W}^* + \mathbf{W}^i \dots \dots \dots \quad (\text{B.8})$$

と書ける. すなわち, \mathbf{D} および \mathbf{W} は次式のように分解することができる.

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}^e + \mathbf{D}^i \dots \dots \dots \quad (\text{B.9})$$

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}^* + \mathbf{W}^i \dots \dots \dots \quad (\text{B.10})$$

ここで、 \mathbf{D}^e および \mathbf{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、 \mathbf{W}^* および \mathbf{W}^i はそれぞれ下部構造スピン⁽¹¹⁶⁾⁽¹¹⁷⁾ および非弾性スピンである。式 (B.9) および式 (B.10) と式 (2.33)～(2.35) を比較することによって

$$\mathbf{L}^i = \mathbf{D}^i + \mathbf{W}^i = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1} \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (\text{B.11})$$

$$\mathbf{D}^e = \mathbf{R}^* \hat{\mathbf{U}}^e \hat{\mathbf{U}}^{e-1} \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (\text{B.12})$$

$$\mathbf{W}^* = \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (\text{B.13})$$

が得られる。

B.4 非弾性ひずみ速度および非弾性変形速度の関係

第 1 中間配置の非弾性変形速度および初期配置の非弾性ひずみ速度について式 (2.30) および式 (2.41) より次式の関係が得られる。

$$\begin{aligned} \mathbf{D}_{(M)}^i &= (\dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1})_S \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{F}^{i-T} \dot{\mathbf{F}}^{iT} + \dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1}) \\ &= \frac{1}{2} (\mathbf{F}^{i-T} \dot{\mathbf{F}}^{iT} \mathbf{F}^i \mathbf{F}^{i-1} + \mathbf{F}^{i-T} \mathbf{F}^{iT} \dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1}) \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{F}^{i-T} (\dot{\mathbf{F}}^{iT} \mathbf{F}^i + \mathbf{F}^{iT} \dot{\mathbf{F}}^i) \mathbf{F}^{i-1} \\ &= \mathbf{F}^{i-T} \dot{\mathbf{E}}_{(I)}^i \mathbf{F}^{i-1} \dots\dots\dots (\text{B.14}) \end{aligned}$$

また、式 (2.39) および式 (2.40) より現配置および第 2 中間配置の非弾性変形速度の関係が次式のように得られる。

$$\mathbf{D}^i = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(m)}^i \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (\text{B.15})$$

さらに、微小弾性変形の仮定を用いれば、式 (B.14) および式 (B.15) は式 (B.16) のようにまとめて表記できる。

$$\mathbf{D}^i = \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(m)}^i \mathbf{R}^{*T} \approx \mathbf{R}^* \mathbf{D}_{(M)}^i \mathbf{R}^{*T} = \mathbf{R}^* \mathbf{F}^{i-T} \dot{\mathbf{E}}_{(I)}^i \mathbf{F}^{i-1} \mathbf{R}^{*T} \dots\dots\dots (\text{B.16})$$

式 (B.16) より各配置での非弾性変形速度および非弾性ひずみ速度の関係がそれぞれ次式のように得られる。

$$\mathbf{D}^i \approx \hat{\mathbf{E}}^i, \quad \mathbf{D}_{(m)}^i \approx \hat{\mathbf{E}}_{(m)}^i, \quad \mathbf{D}_{(M)}^i \approx \hat{\mathbf{E}}_{(M)}^i \dots\dots\dots (\text{B.17})$$

ここで、 $\hat{\mathbf{S}}$ は初期配置を参照したときの Cotter–Rivlin 速度であり、それぞれ次式で定義される。

$$\hat{\mathbf{E}}_{(M)}^i \equiv \dot{\mathbf{E}}_{(M)}^i + \mathbf{L}_{(M)}^{iT} \mathbf{E}_{(M)}^i + \mathbf{E}_{(M)}^i \mathbf{L}_{(M)}^i \dots\dots\dots (\text{B.18})$$

$$\hat{\mathbf{E}}_{(m)}^i \equiv \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^i + \bar{\mathbf{L}}_{(m)}^T \mathbf{E}_{(m)}^i + \mathbf{E}_{(m)}^i \bar{\mathbf{L}}_{(m)} \dots\dots\dots (\text{B.19})$$

$$\hat{\mathbf{E}}^i \equiv \dot{\mathbf{E}}^i + \mathbf{L}^T \mathbf{E}^i + \mathbf{E}^i \mathbf{L} \dots\dots\dots (\text{B.20})$$

ただし、 $\mathbf{L}_{(M)}^i \equiv \dot{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1}$ および $\bar{\mathbf{L}}_{(m)} \equiv \dot{\bar{\mathbf{F}}} \bar{\mathbf{F}}^{-1}$ と定義され、 $\bar{\mathbf{F}}$ は初期配置から第 2 中間配置への写像を表すテンソル $\bar{\mathbf{F}} \equiv \hat{\mathbf{U}}^e \mathbf{F}^i$ である。

B.5 ひずみ尺度と変形尺度

式 (2.47) および式 (B.17) を用いて第 2 中間配置での変形速度は次式のように表現できる.

$$\mathbf{D}_{(m)} = \mathbf{D}_{(m)}^e + \mathbf{D}_{(m)}^i \approx \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \overset{\Delta}{\mathbf{E}}_{(m)}^i \dots\dots\dots (\text{B.21})$$

式 (B.21) を物質時間積分すれば

$$\int_{\mathcal{T}} \mathbf{D}_{(m)} dt = \int_{\mathcal{T}} \mathbf{D}_{(m)}^e dt + \int_{\mathcal{T}} \mathbf{D}_{(m)}^i dt \approx \mathbf{E}_{(m)}^e + \bar{\mathbf{E}}_{(m)}^i \dots\dots\dots (\text{B.22})$$

となる. ここで, $\bar{\mathbf{E}}_{(m)}^i$ は次式で定義される非弾性変形尺度であり, 非弾性ひずみ尺度 $\mathbf{E}_{(m)}^i$ とは異なる.

$$\bar{\mathbf{E}}_{(m)}^i \equiv \int_{\mathcal{T}} \overset{\Delta}{\mathbf{E}}_{(m)}^i dt, \quad \bar{\mathbf{E}}_{(m)}^i \neq \mathbf{E}_{(m)}^i \dots\dots\dots (\text{B.23})$$

したがって, 非弾性変形尺度は $\bar{\mathbf{E}}_{(m)}^i$ 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量である. 一方, $\mathbf{D}_{(m)}^e$ の積分形は弾性ひずみ尺度 $\mathbf{E}_{(m)}^e$ と一致する. よって, 弾性ひずみ $\mathbf{E}_{(m)}^e$ は熱力学的状態変数となる回復可能な量であると言える. 以上より, 現配置から弾・剛体回転を取り除いた第 2 中間配置で定義された量は客観性を有するため, 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言える.

B.6 すべり面に垂直な非弾性ひずみ速度の意味

式 (2.72) における両辺のトレース (跡) をとれば

$$\text{tr} \mathbf{L}_{(l)}^i = \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} (\mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)}) \right] \dots\dots\dots (\text{B.24})$$

となり, $\mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} = 0$ および $\mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)} \cdot \mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)} = 3$ であるから, 式 (B.24) は結局次式のように整理される.

$$\text{tr} \mathbf{L}_{(l)}^i = \sum_{\alpha} (3 \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)}) \dots\dots\dots (\text{B.25})$$

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

$$\sum_{\alpha} \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} = \frac{1}{3} (\text{tr} \mathbf{L}_{(l)}^i) \dots\dots\dots (\text{B.26})$$

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 (2.72) における $\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(l)}^{(\alpha)}$ 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.

B.7 分子鎖基底の配置変換則

本節では, 結晶塑性論的分子鎖塑性論の初期配置における速度こう配の非弾性部分

$$\mathbf{L}_{(l)}^i = \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} + \dot{\varepsilon}_m^{i(\alpha)} (\mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)}) \right] \dots\dots\dots (\text{B.27})$$

を第 1 中間配置へと配置変換する際の分子鎖基底ベクトル $\mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)}$ および $\mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)}$ の配置変換則について論ずる.

まず, 図 B.1(a) に示すように, $\mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)}$ 方向に x_1 軸, $\mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)}$ 方向に x_2 軸, $\mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)}$ 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 \mathbf{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 ($\mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}$ 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 $d\mathbf{x}_{(I)}$ は次式のように変換され, $d\mathbf{x}_{(M)}$ となる.

$$\left. \begin{aligned} dx_{(M)1} &= w dx_{(I)1} + w \tan \beta dx_{(I)2} \\ dx_{(M)2} &= w dx_{(I)2} \\ dx_{(M)3} &= w dx_{(I)3} \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (B.28)$$

式 (B.28) より, 非弾性変形こう配テンソル \mathbf{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.

$$[\mathbf{F}^i] = \begin{bmatrix} w & w \tan \beta & 0 \\ 0 & w & 0 \\ 0 & 0 & w \end{bmatrix} \dots\dots\dots (B.29)$$

さらに, 初期配置における分子鎖基底ベクトル $\mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}$, $\mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)}$ および $\mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)}$ を成分表示すれば,

$$\left\{ \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)} \right\} = \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad \left\{ \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \right\} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{Bmatrix}, \quad \left\{ \mathbf{t}_{(I)}^{(\alpha)} \right\} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (B.30)$$

となる.

ここで, 分子鎖基底ベクトル $\mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}$ の座標変換を考える. まず, $\mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}$ に対して式 (B.29) で成分表示される非弾性変形こう配 \mathbf{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.

$$[\mathbf{F}^i] \left\{ \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)} \right\} = \begin{bmatrix} w & w \tan \beta & 0 \\ 0 & w & 0 \\ 0 & 0 & w \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} w \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (B.31)$$

一方, $\mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)}$ に対して \mathbf{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.

$$\left\{ \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)} \right\} [\mathbf{F}^{i-1}] = [\mathbf{F}^{i-T}] \left\{ \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)} \right\} = \begin{Bmatrix} 1/w \\ -\tan \beta / w \\ 0 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (B.32)$$

次に, 分子鎖基底ベクトル $\mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)}$ に対して式 (B.31) および式 (B.32) と同様の座標変換を行えば, その結果はそれぞれ次式のようになる.

$$[\mathbf{F}^i] \left\{ \mathbf{m}_{(I)}^{(\alpha)} \right\} = \begin{Bmatrix} w \tan \beta \\ w \\ 0 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (B.33)$$

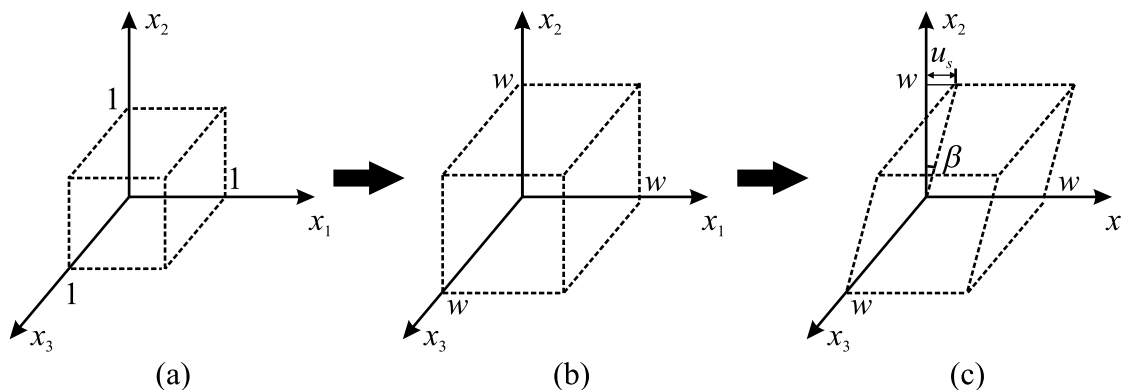


Fig. B.1 Concrete representation of inelastic deformation.

$$\{\mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)}\} [\mathbf{F}^{i-1}] = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1/w \\ 0 \end{Bmatrix} \dots \dots \dots \quad (\text{B.34})$$

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 $\mathbf{L}_{(M)}^i$ は次式のように表わされる。

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_{(M)}^i &= \sum_{\alpha} \mathbf{F}^i \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(l)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(l)}^{(\alpha)} \right) \mathbf{F}^{i-1} \\ &= \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} \|\mathbf{F}^i \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)}\| \|\mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{i-1}\| \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \right. \\ &\quad \left. + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{F}^i \left(\mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)} \right) \mathbf{F}^{i-1} \right] \dots \dots \dots \quad (\text{B.35}) \end{aligned}$$

ここで、式 (B.35) の右辺第1項におけるベクトルの大きさ $\|\mathbf{F}^i \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)}\|$ および $\|\mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{i-1}\|$ については、それぞれ式 (B.31) および式 (B.34) を用いて具体的に計算することができ、

$$\|\mathbf{F}^i \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)}\| = \sqrt{w^2} = w \dots \dots \dots \quad (\text{B.36})$$

$$\|\mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{i-1}\| = \sqrt{\frac{1}{w^2}} = \frac{1}{w} \dots \dots \dots \quad (\text{B.37})$$

となることから、結局次式が成り立つ。

$$\|\mathbf{F}^i \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)}\| \|\mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{i-1}\| = w \times \frac{1}{w} = 1 \dots \dots \dots \quad (\text{B.38})$$

ゆえに、式 (B.35) の右辺第1項は次式のように整理できる。

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} \|\mathbf{F}^i \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)}\| \|\mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} \mathbf{F}^{i-1}\| \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (\text{B.39})$$

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 (B.35) 右辺第2項における初期配置での分子鎖基底テンソル $\mathbf{Q}_{(l)}^{(\alpha)}$ は式 (B.30) を用いて具体的に成分表示することができ、その導出過程は次式のようなものである。

$$\{\mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)}\} \otimes \{\mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)}\} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \dots \dots \dots \quad (\text{B.40})$$

$$\{\mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)}\} \otimes \{\mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)}\} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \dots \dots \dots \quad (\text{B.41})$$

$$\{\mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)}\} \otimes \{\mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)}\} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \dots \dots \dots \quad (\text{B.42})$$

式 (B.40)、式 (B.41) および式 (B.42) を加えれば、

$$[\mathbf{Q}_{(l)}^{(\alpha)}] = \{\mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)}\} \otimes \{\mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)}\} + \{\mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)}\} \otimes \{\mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)}\} + \{\mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)}\} \otimes \{\mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)}\} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \dots \dots \dots \quad (\text{B.43})$$

となる。すなわち、初期配置での分子鎖基底テンソル $\mathbf{Q}_{(l)}^{(\alpha)}$ 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 $\mathbf{Q}_{(l)}^{(\alpha)}$ 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 (B.35) の右辺第2項においても次式が成り立つ。

$$\mathbf{F}^i \left(\mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(l)}^{(\alpha)} \right) \mathbf{F}^{i-1} = \mathbf{F}^i \mathbf{I} \mathbf{F}^{i-1} = \mathbf{I}$$

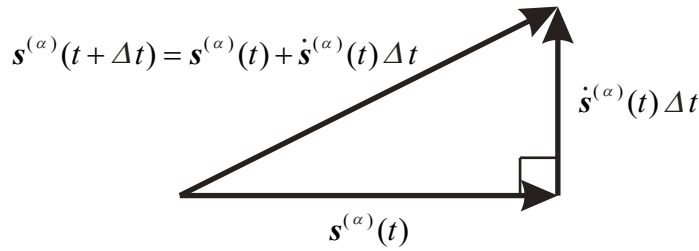


Fig. B.2 Update of crystal base vector.

$$= \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \dots \quad (\text{B.44})$$

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 (B.39) および式 (B.44) より得られた結論を考慮することにより、第 1 中間配置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。

$$L_{(M)}^i = \sum_{\alpha} \left[\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \left(\mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} + \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} + \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{t}_{(M)}^{(\alpha)} \right) \right] \dots \quad (\text{B.45})$$

B.8 結晶基底ベクトルの更新における問題点

式 (2.80) から $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ の時間増分を求めて $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ を更新すると

$$\mathbf{s}^{(\alpha)}(t + \Delta t) = \mathbf{s}^{(\alpha)}(t) + \dot{\mathbf{s}}^{(\alpha)}(t) \Delta t = \mathbf{s}^{(\alpha)}(t) + \mathbf{W}^* \mathbf{s}^{(\alpha)}(t) \Delta t = (\mathbf{I} + \mathbf{W}^* \Delta t) \mathbf{s}^{(\alpha)}(t) \dots \quad (\text{B.46})$$

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 B.2 のように、必ず $\|\mathbf{s}^{(\alpha)}(t + \Delta t)\| \geq \|\mathbf{s}^{(\alpha)}(t)\|$ になってしまう。このことは、時間ステップごとに結晶基底ベクトルが伸びることを意味しており、結晶基底の正規性が保たれなくなる。さらに、 $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ についても同様の更新方法をとるため、 $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ と $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ が直交しなくなる恐れもある。なお、分子鎖塑性論における分子鎖基底ベクトルの更新においても同様のことが言える。

B.9 分子鎖基底ベクトルの発展式の導出

分子鎖基底の発展式を導出するにあたり、まず初期配置から第 1 中間配置へ至る変形過程である非弾性変形こう配 \mathbf{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 B.3 参照)。

$$\mathbf{F}^i = \hat{\mathbf{R}}^i \hat{\mathbf{U}}^i \dots \quad (\text{B.47})$$

ここで、 $\hat{\mathbf{R}}^i$ は $(\hat{\mathbf{F}}^i \mathbf{F}^{i-1})_A \equiv \hat{\mathbf{R}}^i \hat{\mathbf{R}}^{iT}$ 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、 $\hat{\mathbf{U}}^i$ 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 (B.47) は極分解ではなく、 $\hat{\mathbf{U}}^i$ は $(\hat{\mathbf{U}}^i \hat{\mathbf{U}}^{i-1})_A = \mathbf{0}$ 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 B.3 中の $\mathbf{s}_{(M)}^{(1)}$ 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 2.7(b) によると、分子鎖基底ベクトルの初期配置から第 1 中間配置への回転は、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 $\hat{\mathbf{R}}^{i(\alpha)}$ と表し ($\hat{\mathbf{R}}^i = \prod_{\alpha} \hat{\mathbf{R}}^{i(\alpha)}$)、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 $\bar{\mathbf{R}}^{i(\alpha)} = \prod_{\beta \neq \alpha} \hat{\mathbf{R}}^{i(\beta)}$ と表すと、分子鎖基底ベクトル $\mathbf{s}^{(\alpha)}$ および $\mathbf{m}^{(\alpha)}$ に対する配置変換則はそれぞれ次式のようになる。

$$\mathbf{s}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \mathbf{s}_{(m)}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \mathbf{s}_{(M)}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \bar{\mathbf{R}}^{i(\alpha)} \mathbf{s}_{(I)}^{(\alpha)} \dots \quad (\text{B.48})$$

$$\mathbf{m}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \mathbf{m}_{(M)}^{(\alpha)} = \mathbf{R}^* \bar{\hat{\mathbf{R}}}^{i(\alpha)} \mathbf{m}_{(l)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (\text{B.49})$$

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 \mathbf{F} の回転成分 ($\mathbf{R}^* \bar{\hat{\mathbf{R}}}^{i(\alpha)}$) 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 $\hat{\mathbf{R}}^{i(\alpha)}$ 、非弾性ストレッチ $\hat{\mathbf{U}}^i$ および弾性ストレッチ $\hat{\mathbf{U}}^e$ 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 $\dot{\mathbf{s}}_{(l)}^{(\alpha)} = \mathbf{0}$ であるから、式 (B.48) の両辺を時間微分すれば次式が得られる。

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{s}}^{(\alpha)} &= \left(\mathbf{R}^* \bar{\hat{\mathbf{R}}}^{i(\alpha)} \dot{\mathbf{s}}_{(l)}^{(\alpha)} \right) \\ &= \dot{\mathbf{R}}^* \bar{\hat{\mathbf{R}}}^{i(\alpha)} \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} + \mathbf{R}^* \dot{\bar{\hat{\mathbf{R}}}}^{i(\alpha)} \mathbf{s}_{(l)}^{(\alpha)} \\ &= \dot{\mathbf{R}}^* \bar{\hat{\mathbf{R}}}^{i(\alpha)} \left(\bar{\hat{\mathbf{R}}}^{i(\alpha)T} \mathbf{R}^{*T} \right) \mathbf{s}^{(\alpha)} + \mathbf{R}^* \dot{\bar{\hat{\mathbf{R}}}}^{i(\alpha)} \left(\bar{\hat{\mathbf{R}}}^{i(\alpha)T} \mathbf{R}^{*T} \right) \mathbf{s}^{(\alpha)} \\ &= \dot{\mathbf{R}}^* \mathbf{R}^{*T} \mathbf{s}^{(\alpha)} + \mathbf{R}^* \left(\dot{\bar{\hat{\mathbf{R}}}}^{i(\alpha)} \bar{\hat{\mathbf{R}}}^{i(\alpha)T} \right) \mathbf{R}^{*T} \mathbf{s}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (\text{B.50}) \end{aligned}$$

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 $\bar{\hat{\mathbf{R}}}^{i(1)} = \hat{\mathbf{R}}^{i(3)} \hat{\mathbf{R}}^{i(2)}$ とすると、初期配置におけるすべり系 1 の分子鎖基底 $\mathbf{s}_{(l)}^{(1)}$ は図 B.3 のように第 1 中間配置における基底 $\mathbf{s}_{(M)}^{(1)}$ へ変換される。ただし、分子鎖基底 $\mathbf{s}_{(l)}^{(1)}$ は非弾性ストレッチ $\hat{\mathbf{U}}^i$ および自身のすべり系 1 の活動による非弾性回転 $\hat{\mathbf{R}}^{i(1)}$ による変換を受けても回転しない。ここで、図 B.3 中の $\mathbf{s}_{(M)}^{(1)}$ は初期配置から非弾性ストレッチ $\hat{\mathbf{U}}^i$ およびすべり系 1 の活動による非弾性回転 $\hat{\mathbf{R}}^{i(1)}$ により変換された配置における分子鎖基底、 $\mathbf{s}_{(M)}^{(1)}$ は第 1 中間配置からすべり系 3 の活動による非弾性回転 $\hat{\mathbf{R}}^{i(3)}$ 分だけ戻した配置における分子鎖基底を表す。このとき、

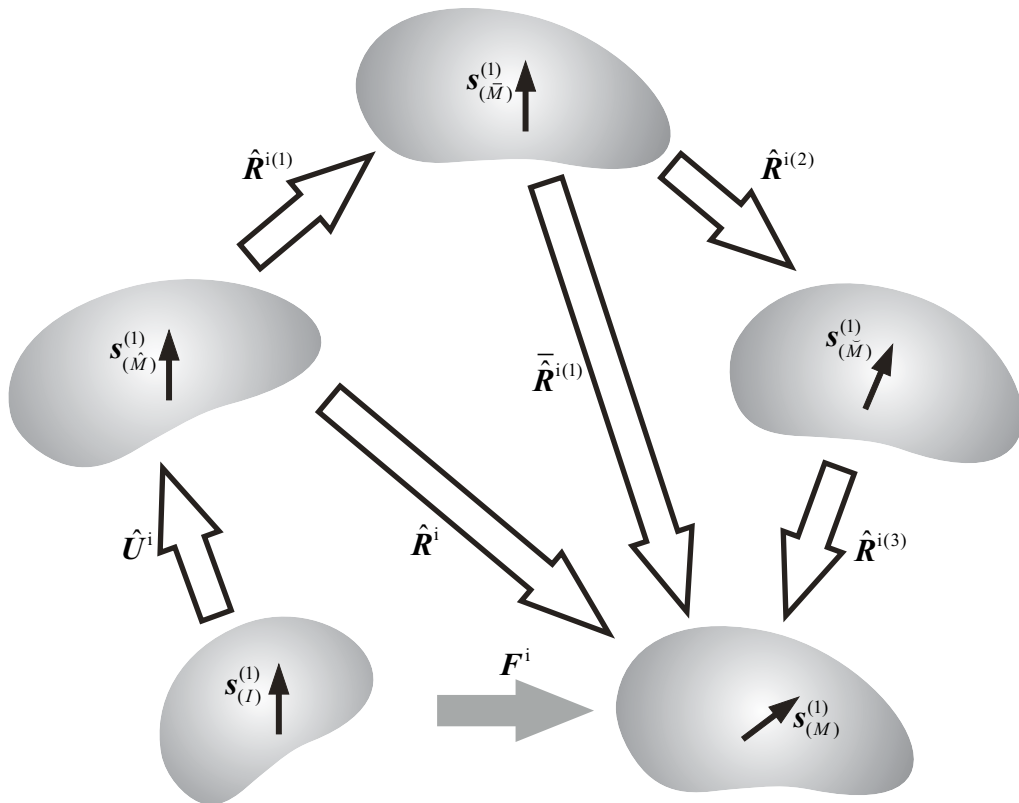


Fig. B.3 Inelastic rotation of slip system.

$\dot{\hat{R}}^{i(1)} \bar{\hat{R}}^{i(1)T}$ は

$$\begin{aligned} \dot{\hat{R}}^{i(1)} \bar{\hat{R}}^{i(1)T} &= (\hat{R}^{i(3)} \hat{R}^{i(2)}) \cdot (\hat{R}^{i(3)} \hat{R}^{i(2)})^T \\ &= (\hat{R}^{i(3)} \hat{R}^{i(2)}) (\hat{R}^{i(2)T} \hat{R}^{i(3)T}) + (\hat{R}^{i(3)} \hat{R}^{i(2)}) (\hat{R}^{i(2)T} \hat{R}^{i(3)T}) \\ &= \hat{R}^{i(3)} \hat{R}^{i(3)T} + \hat{R}^{i(3)} \hat{R}^{i(2)} \hat{R}^{i(2)T} \hat{R}^{i(3)T} \dots \dots \dots \quad (\text{B.51}) \end{aligned}$$

となる．ここで，第 1 中間配置におけるすべり系 3 の活動による非弾性スピン $W_{(M)}^{i(3)}$ は $W_{(M)}^{i(3)} \equiv \hat{R}^{i(3)} \hat{R}^{i(3)T}$ ，第 1 中間配置から $\hat{R}^{i(3)}$ 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 $W_{(M)}^{i(2)} \equiv \hat{R}^{i(2)} \hat{R}^{i(2)T}$ のように表されるので，式 (B.51) は

$$\begin{aligned} \hat{R}^{i(3)} \hat{R}^{i(3)T} + \hat{R}^{i(3)} \hat{R}^{i(2)} \hat{R}^{i(2)T} \hat{R}^{i(3)T} &= W_{(M)}^{i(3)} + \hat{R}^{i(3)} W_{(M)}^{i(2)} \hat{R}^{i(3)T} \\ &= W_{(M)}^{i(3)} + W_{(M)}^{i(2)} \\ &= \sum_{\beta \neq 1} W_{(M)}^{i(\beta)} \dots \dots \dots \quad (\text{B.52}) \end{aligned}$$

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 $\dot{\hat{R}}^{i(\alpha)} \bar{\hat{R}}^{i(\alpha)T} = \sum_{\beta \neq \alpha} W_{(M)}^{i(\beta)}$ と書けることがわかる．したがって，式 (B.50) は次のようになる．

$$\dot{s}^{(\alpha)} = W^* s^{(\alpha)} + R^* \left(\sum_{\beta \neq \alpha} W_{(M)}^{i(\beta)} \right) R^{*T} s^{(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (\text{B.53})$$

ただし， W^* は先に示した下部構造スピンである．

一方， $\dot{m}^{(\alpha)} = \mathbf{0}$ を考慮して式 (B.49) を時間微分すれば式 (B.53) と同様に次式が得られる．

$$\begin{aligned} \dot{m}^{(\alpha)} &= \left(R^* \bar{\hat{R}}^{i(\alpha)} m_{(I)}^{(\alpha)} \right) \\ &= W^* m^{(\alpha)} + R^* \left(\sum_{\beta \neq \alpha} W_{(M)}^{i(\beta)} \right) R^{*T} m^{(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (\text{B.54}) \end{aligned}$$

さらに，微小弾性変形の仮定を用いれば， $W_{(M)}^{i(\alpha)} \approx W_{(m)}^{i(\alpha)}$ となるため，式 (B.53) および式 (B.54) における $R^* \left(\sum_{\beta \neq \alpha} W_{(M)}^{i(\beta)} \right) R^{*T}$ の部分は

$$\begin{aligned} R^* \left(\sum_{\beta \neq \alpha} W_{(M)}^{i(\beta)} \right) R^{*T} &= \sum_{\beta \neq \alpha} \left(R^* W_{(M)}^{i(\beta)} R^{*T} \right) \\ &\approx \sum_{\beta \neq \alpha} \left(R^* W_{(m)}^{i(\beta)} R^{*T} \right) = \sum_{\beta \neq \alpha} W^{i(\beta)} \dots \dots \dots \quad (\text{B.55}) \end{aligned}$$

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式のように記述できる．

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

$$= (\mathcal{W} - \mathcal{W}^{i(\alpha)}) \mathbf{s}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (B.56)$$

$$\dot{\mathbf{m}}^{(\alpha)} = (\mathcal{W} - \mathcal{W}^{i(\alpha)}) \mathbf{m}^{(\alpha)} \dots \dots \dots (B.57)$$

ただし、 $\mathcal{W}^* = \mathcal{W} - \mathcal{W}^i = \mathcal{W} - \sum_{\alpha} \mathcal{W}^{i(\alpha)}$ という関係を用いている。

補足 C

第 3 章の補足

C.1 全体系と局所系の保存則

本節では、図 C.1 に示したような力学的かつ熱的な外部供給を受ける任意の領域について全体系の保存則を述べる。さらに、各保存則について物体内の 1 点において成り立つ局所形の保存則を導出する。ただし、構成式の導出に用いるエントロピー増大則については本文 4.1.1 項に記載している。なお、外部供給のうち、物体の表面を介して直接系に作用するものは直接作用、物体の体積に対して触れずに作用するものは遠隔作用と呼ばれる。

C.1.1 質量保存則 (連続の式)

全体系の質量保存則は「系の全質量の時間変化はない。」と述べられ、次式のように定式化できる。

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}} \rho \, dv = 0 \dots\dots\dots (C.1)$$

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、 D/Dt は物質時間微分 $D\mathfrak{S}/Dt \equiv \dot{\mathfrak{S}}$ を表す演算子である。

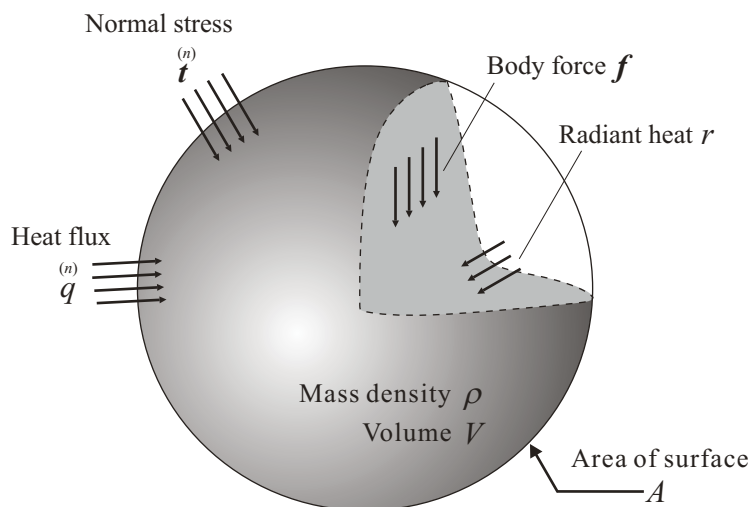


Fig. C.1 System applied mechanical and thermal effects (for conservation laws in global form).

式 (C.1) の左辺に Reynolds の輸送定理

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}} \boldsymbol{\kappa} dv = \int_{\mathcal{V}} (\dot{\boldsymbol{\kappa}} + \boldsymbol{\kappa} \operatorname{div} \boldsymbol{v}) dv \dots\dots\dots (C.2)$$

を適用するとともに体積積分のみで記述されている方程式の積分領域は任意であることから積分記号を外せば、局所系の質量保存則、すなわち、連続の式が次式のように得られる。

$$\dot{\rho} + \rho \operatorname{div} \boldsymbol{v} = 0 \dots\dots\dots (C.3)$$

ここで、 \boldsymbol{v} は物質速度である。なお、上述のような保存則の体積積分を外す操作を局所化と呼ぶ。

C.1.2 運動量保存則 (運動方程式)

全体系の運動量保存則は「系内の全運動量の時間変化は、系に働く外力、すなわち、表面力および物体力に等しい。」と述べられ、次式のように定式化できる。

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}} \rho \boldsymbol{v} dv = \oint_{\mathcal{A}} \overset{(n)}{\boldsymbol{t}} da + \int_{\mathcal{V}} \rho \boldsymbol{f} dv \dots\dots\dots (C.4)$$

ここで、 $\overset{(n)}{\boldsymbol{t}}$ は表面力ベクトルであり、 \boldsymbol{f} は物体力ベクトルである。

いま、式 (C.4) の右辺第 1 項に対して Cauchy の基本定理を適用するとともに発散定理を適用すれば、

$$\oint_{\mathcal{A}} \overset{(n)}{\boldsymbol{t}} da = \oint_{\mathcal{A}} \boldsymbol{T} n da = \int_{\mathcal{V}} \operatorname{div} \boldsymbol{T} dv \dots\dots\dots (C.5)$$

のように表面力項を体積積分で表記できる。式 (C.4) の左辺に Reynolds の輸送定理を適用し、さらに、同式に式 (C.5) を代入することで局所化すれば、局所系の運動量保存則、すなわち、運動方程式が次式のように得られる。

$$\operatorname{div} \boldsymbol{T} + \rho (\boldsymbol{f} - \dot{\boldsymbol{v}}) = 0 \dots\dots\dots (C.6)$$

C.1.3 角運動量保存則 (角運動方程式)

全体系の角運動量保存則は「系内の全角運動量の時間変化は、系に働く外力のモーメント、すなわち、表面力および物体力によるモーメントに等しい。」と述べられ、次式のように定式化できる。

$$\frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}} \boldsymbol{x} \times \rho \boldsymbol{v} dv = \oint_{\mathcal{A}} \boldsymbol{x} \times \overset{(n)}{\boldsymbol{t}} da + \int_{\mathcal{V}} \boldsymbol{x} \times \rho \boldsymbol{f} dv \dots\dots\dots (C.7)$$

ここで、 \boldsymbol{x} は任意点の位置ベクトルである。

式 (C.7) の左辺に対して Reynolds の輸送定理を、右辺第 1 項に対して Cauchy の基本定理および発散定理をそれぞれ適用して整理すれば、

$$\int_{\mathcal{V}} \left[e_{ijk} T_{kj} + e_{ijk} x_j \{ T_{kl,l} + \rho (f_k - \dot{v}_k) \} \right] dv = 0 \dots\dots\dots (C.8)$$

となる。式 (C.8) 左辺における中括弧内は運動方程式 [式 (C.6)] により零となるため最終的に局所化された角運動量保存則、すなわち、角運動方程式が

$$\boldsymbol{e} \cdot \boldsymbol{T} = 0 \dots\dots\dots (C.9)$$

のように得られる。ただし、 $\mathbf{e} \cdots \mathbf{T} \equiv e_{ijk} T_{kj} \mathbf{e}_i$ である。さらに、式 (C.9) を変形すれば、

$$\begin{aligned} e_{kij} T_{ji} &= \frac{1}{2}(e_{kij} T_{ji} + e_{kij} T_{ji}) = \frac{1}{2}(e_{kij} T_{ji} - e_{kij} T_{ij}) \\ &= \frac{1}{2} e_{kij} (T_{ji} - T_{ij}) = 0 \dots\dots\dots \end{aligned} \quad (C.10)$$

となる。交代記号 e_{ijk} が常に零とならないことを考慮すれば、式 (C.10) から Cauchy 応力テンソルの対称性 $T_{ij} = T_{ji}$ が導かれる。ただし、式 (C.10) においてはダミー指標の交換および交代記号の反対称性を用いている。

C.1.4 エネルギー保存則 (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。

$$\oint_{\mathcal{A}} P_s da + \int_{\mathcal{V}} P_b dv + \oint_{\mathcal{A}} Q_s da + \int_{\mathcal{V}} Q_b dv - \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}} \rho(\hat{\varepsilon} + K) dv = 0 \dots\dots\dots (C.11)$$

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。

$$Q_s \equiv -\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = \overset{(n)}{q}, \quad Q_b \equiv \rho r, \quad K \equiv \frac{1}{2} \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \dots\dots\dots (C.12)$$

ここで、 r は放射熱密度である。

一方、力学的エネルギーの釣合い方程式は仮想仕事率の原理 [式 (3.12)] 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。

$$\oint_{\mathcal{A}} P_s da + \int_{\mathcal{V}} P_b dv - \frac{D}{Dt} \int_{\mathcal{V}} \rho K dv - \int_{\mathcal{V}} P dv = 0 \dots\dots\dots (C.13)$$

式 (C.11) と式 (C.13) で辺々を差し引きし、局所化すれば、局所系のエネルギー保存則、すなわち、エネルギー方程式が次式のように得られる。

$$\mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - \text{div } \mathbf{q} + \rho(r - \dot{\hat{\varepsilon}}) = 0 \dots\dots\dots (C.14)$$

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通常と異なる。

C.2 仮想仕事率の原理からの力学的釣合い方程式の導出

本節では、仮想仕事率の原理式 [式 (3.12)] から力学的釣合い方程式を得る手順を述べる。まず、内力のなす仮想仕事率 [式 (3.15)] は以下のように書き換えることができる [補足 C.2.1]。

$$\begin{aligned} \check{P} &= \mathbf{T} \cdot \check{\mathbf{D}} \\ &= \mathbf{T} \cdot (\check{\mathbf{L}} - \check{\mathbf{W}}) \\ &= \mathbf{T} \cdot (\text{grad } \check{\mathbf{v}} - \mathbf{I} \times \check{\mathbf{w}}) \end{aligned}$$

$$= \operatorname{div}(\mathbf{T}^T \dot{\mathbf{v}}) - (\operatorname{div} \mathbf{T}) \cdot \dot{\mathbf{v}} - (\mathbf{e} \cdot \mathbf{T}) \cdot \dot{\mathbf{w}} \dots \dots \dots \quad (\text{C.15})$$

ここで、 $\check{\mathbf{L}}$ および $\check{\mathbf{W}}$ は、それぞれ速度こう配 \mathbf{L} およびその反対称部分 \mathbf{W} の仮想量である。また、 $\dot{\mathbf{w}}$ は反対称テンソル $\check{\mathbf{W}}$ に双対な軸性ベクトルである。

式 (3.13), (3.14) および式 (C.15) を仮想仕事率の原理 [式 (3.12)] に代入し、さらに Gauss の発散定理を用いると次式を得る [補足 C.2.2].

$$\oint_{\mathcal{A}} (\mathbf{t} - \mathbf{T} \mathbf{n}) \cdot \dot{\mathbf{v}} da + \int_{\mathcal{V}} [\{\operatorname{div} \mathbf{T} + \rho(\mathbf{f} - \dot{\mathbf{v}})\} \cdot \dot{\mathbf{v}} + (\mathbf{e} \cdot \mathbf{T}) \cdot \dot{\mathbf{w}}] dv = 0 \dots \dots \dots \quad (\text{C.16})$$

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 (C.16) が任意の仮想量 $\dot{\mathbf{v}}$, $\dot{\mathbf{w}}$ について成立するための条件として式 (C.17)~(C.19) を得る。

$$\mathbf{t} = \mathbf{T} \mathbf{n} \dots \dots \dots \quad (\text{C.17})$$

$$\operatorname{div} \mathbf{T} + \rho(\mathbf{f} - \dot{\mathbf{v}}) = \mathbf{0} \dots \dots \dots \quad (\text{C.18})$$

$$\mathbf{e} \cdot \mathbf{T} = \mathbf{0} \dots \dots \dots \quad (\text{C.19})$$

式 (C.17) は表面における力学的境界条件を表す Cauchy の基本定理、式 (C.18) および式 (C.19) はそれぞれ運動量および角運動量の釣り合いを表す運動方程式および角運動方程式である。

C.2.1 内力のなす仮想仕事率に関する変形

ここでは、式 (C.15) の計算過程を示す。式 (3.15) における変形速度の仮想量 $\check{\mathbf{D}}$ は、速度こう配 \mathbf{L} の対称部分の仮想量であるから、次式のように置き換えることができる。

$$\check{\mathbf{D}} = \check{\mathbf{L}} - \check{\mathbf{W}} \dots \dots \dots \quad (\text{C.20})$$

ただし、 $\check{\mathbf{W}}$ は、速度こう配 \mathbf{L} の反対称部分 \mathbf{W} の仮想量である。また、速度こう配 \mathbf{L} およびその反対称テンソル \mathbf{W} の仮想量は次式のように表せる。

$$\left. \begin{aligned} \check{\mathbf{L}} &= \operatorname{grad} \dot{\mathbf{v}} \\ \check{\mathbf{W}} &= \mathbf{I} \times \dot{\mathbf{w}} \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots \quad (\text{C.21})$$

式 (C.20), 式 (C.21) を式 (3.15) に代入すると次式のようになる。

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{P}} &= \mathbf{T} \cdot \check{\mathbf{D}} \\ &= \mathbf{T} \cdot (\check{\mathbf{L}} - \check{\mathbf{W}}) \\ &= \mathbf{T} \cdot (\operatorname{grad} \dot{\mathbf{v}} - \mathbf{I} \times \dot{\mathbf{w}}) \dots \dots \dots \quad (\text{C.22}) \end{aligned}$$

ここで、次の指標表示から得る、2つの関係式を利用する。

$$\begin{aligned} \mathbf{T} \cdot \operatorname{grad} \dot{\mathbf{v}} &\rightarrow T_{ij} \dot{v}_{i,j} = (T_{ij} \dot{v}_i)_{,j} - T_{i,j} \dot{v}_i \\ &\rightarrow \operatorname{div}(\mathbf{T}^T \dot{\mathbf{v}}) - (\operatorname{div} \mathbf{T}) \cdot \dot{\mathbf{v}} \dots \dots \dots \quad (\text{C.23}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{T} \cdot (\mathbf{I} \times \dot{\mathbf{w}}) &\rightarrow T_{ij} e_{jkl} \delta_{ik} \dot{w}_l = e_{jkl} T_{ij} \delta_{ik} \dot{w}_l \\ &= e_{ijk} \delta_{ki} T_{ij} \dot{w}_l \\ &= e_{ljk} T_{kj} \dot{w}_l \\ &\rightarrow (\mathbf{e} \cdot \mathbf{T}) \cdot \dot{\mathbf{w}} \dots \dots \dots \quad (\text{C.24}) \end{aligned}$$

式 (C.23) および式 (C.24) を式 (C.22) に代入して式 (C.15) を得る。

C.2.2 式 (C.16) の導出

ここでは、式 (C.16) の導出過程を Gauss の発散定理を用いて詳細に示す。式 (3.13), (3.14) および式 (C.15) を仮想仕事率の原理 [式 (3.12)] に代入して次式を得る。

$$\int_v \left\{ \rho(\mathbf{f} - \dot{\mathbf{v}}) \cdot \check{\mathbf{v}} + (\text{div } \mathbf{T}) \cdot \check{\mathbf{v}} + (\mathbf{e} \cdot \mathbf{T}) \cdot \check{\mathbf{w}} - \underline{\text{div}(\mathbf{T}^T \check{\mathbf{v}})} \right\} dv + \oint_{\partial v}^{(n)} \check{\mathbf{t}} \cdot \check{\mathbf{v}} da = 0 \dots\dots\dots (C.25)$$

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。

$$\begin{aligned} \int_v \text{div}(\mathbf{T}^T \check{\mathbf{v}}) dv &\rightarrow \int_v (T_{ji} \check{v}_j)_{,i} dv = \oint_{\partial v} T_{ji} \check{v}_j n_i da \\ &= \oint_{\partial v} T_{ji} n_i \check{v}_j da \\ &\rightarrow \oint_{\partial v} (\mathbf{T}\mathbf{n}) \cdot \check{\mathbf{v}} da \dots\dots\dots (C.26) \end{aligned}$$

式 (C.26) を式 (C.25) に代入して、式 (C.16) を得る。

C.3 第 1 種 Piola-Kirchhoff 応力速度と Cauchy 応力速度の関係式

本節では、 $\dot{\mathbf{H}}\mathbf{F}^T = J(\dot{\mathbf{T}} - \mathbf{T}\mathbf{L}^T + \mathbf{T}\text{tr}\mathbf{L})$ という関係を導出する。まず、第 1 種 Piola-Kirchhoff 応力 \mathbf{H} と Cauchy 応力 \mathbf{T} の関係 $\mathbf{H} = (J\mathbf{T}\mathbf{F}^{-T})$ を $\dot{\mathbf{H}}\mathbf{F}^T$ に代入すれば、次式のようになる。

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{H}}\mathbf{F}^T &= (J\mathbf{T}\mathbf{F}^{-T})\dot{\mathbf{F}}^T \\ &= (J\dot{\mathbf{T}}\mathbf{F}^{-T} + J\dot{\mathbf{T}}\mathbf{F}^{-T} + J\mathbf{T}\dot{\mathbf{F}}^{-T})\mathbf{F}^T \\ &= J\dot{\mathbf{T}} + J\dot{\mathbf{T}} + J\mathbf{T}\dot{\mathbf{F}}^{-T}\mathbf{F}^T \dots\dots\dots (C.27) \end{aligned}$$

ここで、 $\mathbf{L}^T = -\dot{\mathbf{F}}^{-T}\mathbf{F}^T$ [補足 C.4] および $\dot{J} = J\text{tr}\mathbf{L}$ という関係 [補足 C.5] をそれぞれ式 (C.27) に適用すれば、

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{H}}\mathbf{F}^T &= J(\text{tr}\mathbf{L})\mathbf{T} + J\dot{\mathbf{T}} - J\mathbf{T}\mathbf{L}^T \\ &= J(\dot{\mathbf{T}} - \mathbf{T}\mathbf{L}^T + \mathbf{T}\text{tr}\mathbf{L}) \dots\dots\dots (C.28) \end{aligned}$$

を得る。なお、式 (C.28) を $\dot{\mathbf{H}} = J(\dot{\mathbf{T}} - \mathbf{T}\mathbf{L}^T + \mathbf{T}\text{tr}\mathbf{L})\mathbf{F}^{-T}$ のように表記すれば、式 (C.28) は初期配置の応力速度 $\dot{\mathbf{H}}$ と現配置の応力速度 $\dot{\mathbf{T}}$ の関係を与えていることがわかる。

C.4 変形こう配を用いた速度こう配の転置の表現

まず、 $\mathbf{F}\mathbf{F}^{-1} = \mathbf{I}$ という関係の両辺を物質時間微分すれば、 \mathbf{I} は恒等テンソルであるため、

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} + \mathbf{F}\dot{\mathbf{F}}^{-1} &= \mathbf{0} \\ \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} &= -\mathbf{F}\dot{\mathbf{F}}^{-1} \dots\dots\dots (C.29) \end{aligned}$$

となる。式 (C.29) を式 (2.5) に代入すれば、現配置の速度こう配 \mathbf{L} およびその転置 \mathbf{L}^T をそれぞれ次式のように表記できる。

$$\mathbf{L} = -\mathbf{F}\dot{\mathbf{F}}^{-1} \dots\dots\dots (C.30)$$

$$\mathbf{L}^T = -(\mathbf{F}\dot{\mathbf{F}}^{-1})^T = -\dot{\mathbf{F}}^{-T}\mathbf{F}^T \dots\dots\dots (C.31)$$

C.5 Jacobian の物質時間微分

行列式の展開公式

$$(\det \mathbf{A}) e_{ijk} = e_{lmn} A_{il} A_{jm} A_{kn} \dots \dots \dots \quad (\text{C.32})$$

より, 次式が成り立つ.

$$J e_{ijk} = e_{lmn} F_{il} F_{jm} F_{kn} \dots \dots \dots \quad (\text{C.33})$$

式 (C.33) の両辺に e_{ijk} を乗じ, $e_{ijk} e_{ijk} = 6$ を用いれば

$$J = \frac{1}{6} e_{ijk} e_{lmn} F_{il} F_{jm} F_{kn} \dots \dots \dots \quad (\text{C.34})$$

を得る. 式 (C.34) 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

$$\begin{aligned} \dot{J} &= \frac{1}{6} e_{ijk} e_{lmn} (\dot{F}_{il} F_{jm} F_{kn} + F_{il} \dot{F}_{jm} F_{kn} + F_{il} F_{jm} \dot{F}_{kn}) \\ &= \frac{1}{6} e_{ijk} e_{lmn} (v_{i,p} F_{pl} F_{jm} F_{kn} + F_{il} v_{j,p} F_{pm} F_{kn} + F_{il} F_{jm} v_{k,p} F_{pn}) \\ &= \frac{1}{6} (e_{pjk} v_{p,i} + e_{ipk} v_{p,j} + e_{ijp} v_{p,k}) e_{lmn} F_{il} F_{jm} F_{kn} \\ &= \frac{1}{6} (e_{pjk} v_{p,i} + e_{ipk} v_{p,j} + e_{ijp} v_{p,k}) J e_{ijk} \\ &= \frac{1}{6} (e_{pjk} e_{ijk} v_{p,i} + e_{ipk} e_{ijk} v_{p,j} + e_{ijp} e_{ijk} v_{p,k}) J \\ &= \frac{1}{6} (2\delta_{pi} v_{p,i} + 2\delta_{pj} v_{p,j} + 2\delta_{pk} v_{p,k}) J \\ &= \frac{1}{3} (v_{p,p} + v_{p,p} + v_{p,p}) J \\ &= J v_{i,i} \\ &= J (\text{tr} \mathbf{L}) \dots \dots \dots \quad (\text{C.35}) \end{aligned}$$

が得られる.

補足 D

第 4 章の補足

D.1 材料応答則の引数の検討

通常の塑性論においては、式 (4.22) 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導出される。しかしながら、本研究では結晶塑性論の体系に基づく塑性論を採用したことにより、式 (2.78) に示したように \mathbf{D}^i が運動学的に決定される。したがって、テンソル形の塑性構成式は不要となり、必要となるのはスカラー形の塑性構成式である材料応答則のみとなる。そこで、本節では、式 (4.22) に示した散逸関数の純粋散逸部分から、分解せん断応力の引数に静水圧応力および温度に加え、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。

式 (2.78) で表される運動学的関係式を第 2 中間配置へと戻し、式 (4.22) に代入すれば、非弾性仕事率 $\dot{\bar{\Psi}}^i$ 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。

$$\dot{\bar{\Psi}}^i = \mathbf{T}_{(m)} \cdot \sum_{\alpha} \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(m)}^{(\alpha)} \right) + \mathbf{M}_{(m)} \cdot \sum_{\alpha} \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(m)}^{(\alpha)} \right) - H^d \dot{\theta} + Y^d \dot{\omega} \dots \dots \dots \quad (\text{D.1})$$

ここで、式 (D.1) における応力 $\mathbf{T}_{(m)}$ を $\mathbf{T}_{(m)} = \mathbf{T}'_{(m)} + \sigma_m \mathbf{I}$ のようにその偏差部分 (偏差応力 $\mathbf{T}'_{(m)}$) 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 $\dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)}$ は急変しないと仮定し、 $\dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \approx 0$ とする。以上より、式 (D.1) は次式のようになる。

$$\begin{aligned} \dot{\bar{\Psi}}^i &= \left(\mathbf{T}'_{(m)} + \sigma_m \mathbf{I} \right) \cdot \sum_{\alpha} \left(\dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)} + \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(m)}^{(\alpha)} \right) + \mathbf{M}'_{(m)} \cdot \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)} - H^d \dot{\theta} + Y^d \dot{\omega} \\ &= \mathbf{T}'_{(m)} \cdot \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)} + \sigma_m \mathbf{I} \cdot \sum_{\alpha} \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} \mathbf{Q}_{(m)}^{(\alpha)} + \mathbf{M}'_{(m)} \cdot \sum_{\alpha} \dot{\gamma}^{(\alpha)} \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)} - H^d \dot{\theta} + Y^d \dot{\omega} \dots \dots \dots \quad (\text{D.2}) \end{aligned}$$

さらに、式 (D.2) をすべり面上の量を用いて表現すれば次式が得られる。

$$\dot{\bar{\Psi}}^i = \sum_{\alpha} \tau^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} + 3 \sum_{\alpha} \sigma_m \dot{\epsilon}_m^{i(\alpha)} + \sum_{\alpha} \kappa^{(\alpha)} \dot{\gamma}^{(\alpha)} - H^d \dot{\theta} + Y^d \dot{\omega} \dots \dots \dots \quad (\text{D.3})$$

ただし、分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ は式 (2.59) のように表わされ、 $\kappa^{(\alpha)} \equiv \mathbf{M}'_{(m)} \cdot \mathbf{P}_{(m)S}^{(\alpha)}$ はすべり面上の $\mathbf{M}'_{(m)}$ の値である。

次に、負荷過程のみを考慮して式 (D.3) を全微分形で書き改めれば次式のようになる。

$$d\bar{\Psi}^i = \sum_{\alpha} \hat{\tau}^{(\alpha)} d\gamma^{(\alpha)} + 3 \sum_{\alpha} \sigma_m d\epsilon_m^{i(\alpha)} + \sum_{\alpha} \kappa^{(\alpha)} d\gamma^{(\alpha)} - H^d d\theta + Y^d d\omega \dots \dots \dots \quad (\text{D.4})$$

ここで、Gibbs 関数の散逸部分 \bar{G}^d を

$$\bar{G}^d \equiv \bar{\Psi}^i - 3 \sum_{\alpha} \sigma_m \epsilon_m^{i(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (\text{D.5})$$

と定義し、これを用いて式 (D.4) を Legendre 変換すると

$$d\bar{G}^d = \sum_{\alpha} \tau^{(\alpha)} d\gamma^{(\alpha)} - 3 \sum_{\alpha} \varepsilon_m^{i(\alpha)} d\sigma_m + \sum_{\alpha} \kappa^{(\alpha)} d\dot{\gamma}^{(\alpha)} - H^d d\theta + Y^d d\omega \dots \dots \dots (D.6)$$

となる. 式 (D.6) 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.

$$\bar{G}^d = \bar{G}^d(\gamma^{(\alpha)}, \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \sigma_m, \theta, \omega) \dots \dots \dots (D.7)$$

同様に, 式 (D.6) より, $\tau^{(\alpha)} = \frac{\partial \bar{G}^d}{\partial \gamma^{(\alpha)}}$ と表されることから, 分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ の関数形も次式のように得られる.

$$\tau^{(\alpha)} = \tau^{(\alpha)}(\gamma^{(\alpha)}, \dot{\gamma}^{(\alpha)}, \sigma_m, \theta, \omega) \dots \dots \dots (D.8)$$

さらに, 式 (D.8) 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材料応答則が得られる.

$$\dot{\gamma}^{(\alpha)} = \dot{\gamma}^{(\alpha)}(\tau^{(\alpha)}, \gamma^{(\alpha)}, \sigma_m, \theta, \omega) \dots \dots \dots (D.9)$$

式 (D.9) より, 非晶相の材料応答則の引数に温度 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, 結晶相に対する通常の結晶塑性論では非弾性体積変形を表すための $\mathbf{q}^{(\alpha)}$ に関する項が存在しないため, 材料応答則の引数に静水圧応力が導入されないことに注意されたい.

D.2 等方性弾性係数の成分

弾性変形速度テンソル \mathbf{D}^e の対称性を考慮した場合, 等方性弾性係数は式 (4.36) に示されるように, その対称性から 21 成分に制限される. これを 6×6 のマトリックス表示にすると, 次式のようになる.

$$[\mathbf{C}^e] = \begin{bmatrix} C_{1111}^e & C_{1122}^e & C_{1133}^e & C_{1112}^e & C_{1123}^e & C_{1131}^e \\ & C_{2222}^e & C_{2233}^e & C_{2212}^e & C_{2223}^e & C_{2231}^e \\ & & C_{3333}^e & C_{3312}^e & C_{3323}^e & C_{3331}^e \\ & & & C_{1212}^e & C_{1223}^e & C_{1231}^e \\ & \text{Sym.} & & & C_{2323}^e & C_{2331}^e \\ & & & & & C_{3131}^e \end{bmatrix} \dots \dots \dots (D.10)$$

さらに, 式 (4.35) を代入すれば

$$[\mathbf{C}^e] = \begin{bmatrix} \lambda + 2\mu & \lambda & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & \lambda + 2\mu & \lambda & 0 & 0 & 0 \\ & & \lambda + 2\mu & 0 & 0 & 0 \\ & & & \mu & 0 & 0 \\ & \text{Sym.} & & & \mu & 0 \\ & & & & & \mu \end{bmatrix} \dots \dots \dots (D.11)$$

のように, 独立な 2 成分, すなわち, λ および μ のみで弾性係数マトリックスの各成分が決定される.

D.3 Hillの方法の意味

Hillの方法とは式(4.43)のように弾性構成式の弾性変形速度を全変形速度および非弾性変形速度の差で表すことで弾塑性構成式または弾粘塑性構成式を導出する方法である。すなわち、Hillの方法は弾塑性変形中であっても、応力値は弾性変形のみによって決定されるということの意味している。このことを応力-ひずみ曲線の模式図として表わせれば、図D.1のようになる。図D.1から降伏後の弾塑性変形中においても、応力値は弾性ひずみに弾性係数によって表わされる傾きを乗ずることによって得られることがわかる。これは、除荷によって回復可能な弾性ひずみによってのみ応力が発生することに対応している。

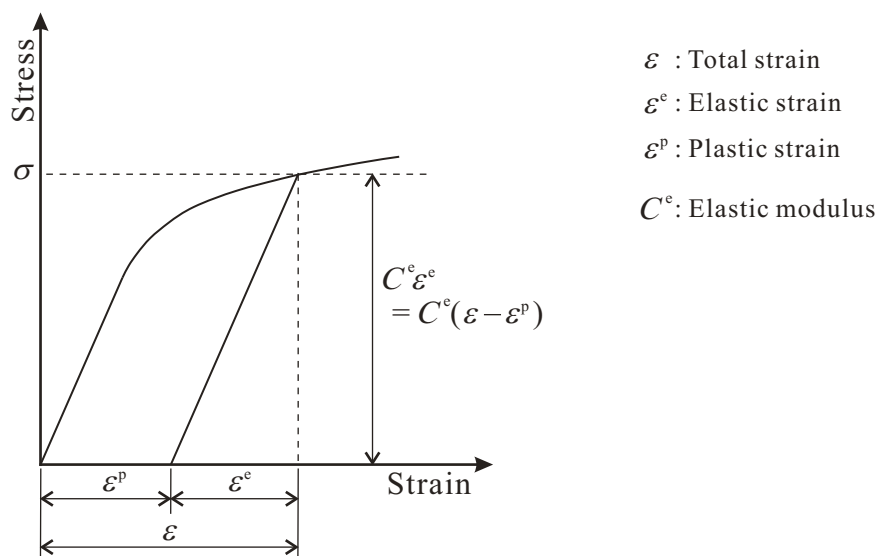


Fig. D.1 Schematic expression of Hill's method.

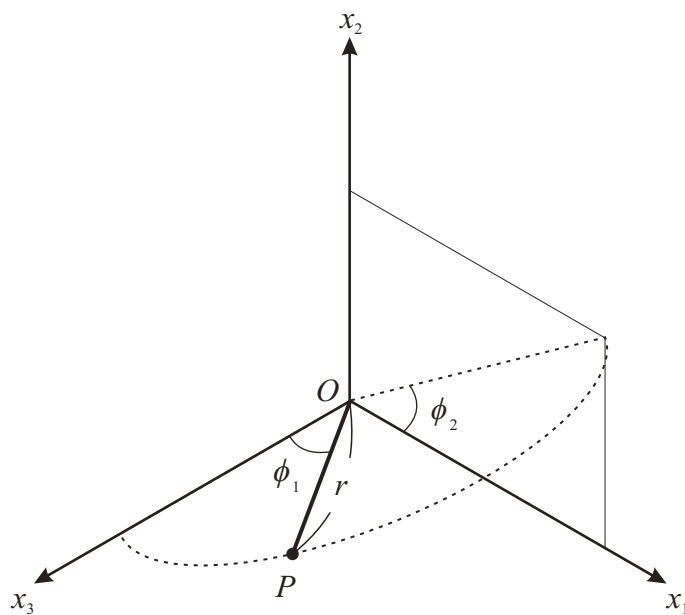


Fig. D.2 Three-dimensional polar coordinates.

なお、弾性体を想定する場合は全ひずみが弾性ひずみそのものであるため、弾性構成式をそのまま用いれば応力が計算可能である。これに対して、弾塑性体または弾粘塑性体の場合には弾性ひずみを直接算出することができないため、Hillの方法によって全ひずみから非弾性ひずみを除くことで弾性ひずみを計算していると言える。

D.4 三次元極座標

三次元極座標では図 D.2 のように原点 O からの距離 r および 2 つの角度 ϕ_1 , ϕ_2 を用いて空間中のある点 P の位置を表す。ここで、 ϕ_1 は x_3 軸および点 P を含む面内で線 OP と x_3 軸がなす角度、 ϕ_2 は x_3 軸および点 P を含む面と x_1x_2 平面の交線が x_1 軸からなす角度である。これらを用いて直交座標系における $x_1 \sim x_3$ を表せば、次式のようになる。

$$\begin{cases} x_1 = r \sin\phi_1 \cos\phi_2 \\ x_2 = r \sin\phi_1 \sin\phi_2 \\ x_3 = r \cos\phi_1 \end{cases} \dots\dots\dots (D.12)$$

このとき、 ϕ_1 および ϕ_2 の値の範囲はそれぞれ $0 \leq \phi_1 \leq \pi$ および $0 \leq \phi_2 \leq 2\pi$ であり、この角度の範囲で r の値を変更することで、三次元空間中の全ての点を表すことができる。なお、式 (D.12) を用いて分子鎖基底ベクトルの成分を表す場合は、分子鎖基底が単位ベクトルであることから $r = 1$ と置ける。

補足 E

第 5 章の補足

E.1 Hasan-Boyce の非弾性応答則の補足

本節では、灘⁽³⁾によって説明された Hasan-Boyce の非弾性応答則の数理的機構および解釈を示す。

E.1.1 自由体積率の定義

式 (5.2) における $\varphi^{(a)}(\Delta F_0)$ および図 E.1 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 (5.2) を $0 \leq \Delta F_0 < \infty$ の範囲で ΔF_0 について積分して図 E.1 の曲線と横軸で囲まれた面積を求めると 1 となる。この $\varphi^{(a)}(\Delta F_0)$ に、図 E.2 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 (E.1) および図 E.3 に示す確率分布関数 $\Xi^{(a)}(\Delta F_0, \theta)$ である。

$$\Xi^{(a)}(\Delta F_0, \theta) = \varphi^{(a)}(\Delta F_0) \exp\left(-\frac{\Delta F_0}{k_B \theta}\right) \dots \dots \dots (E.1)$$

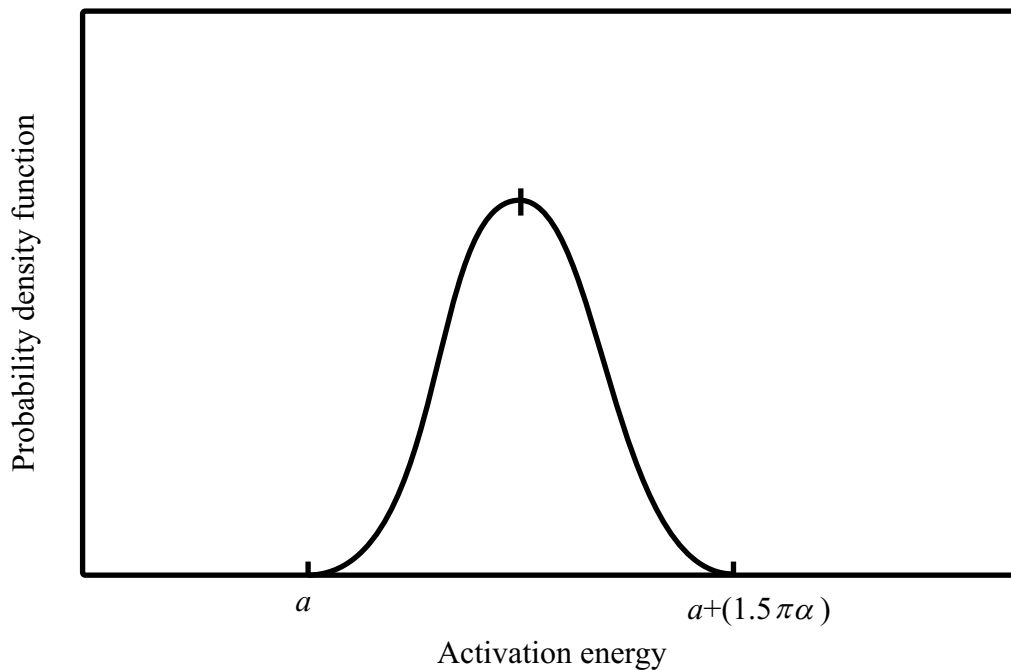


Fig. E.1 Probability density function with respect to activation energy.

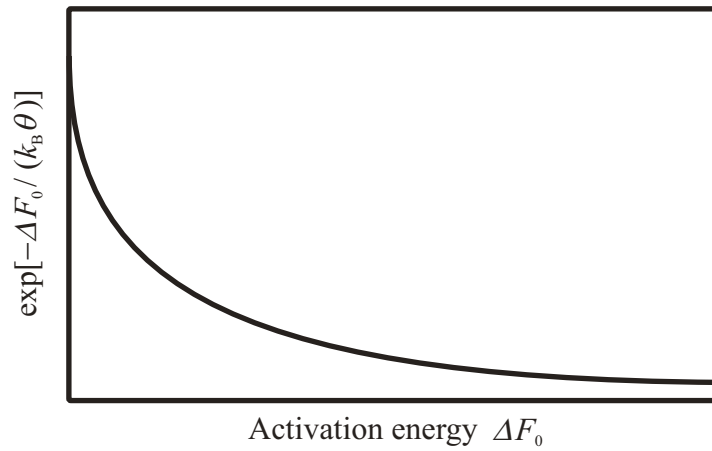


Fig. E.2 Probability of local shear deformation with respect to activation energy.

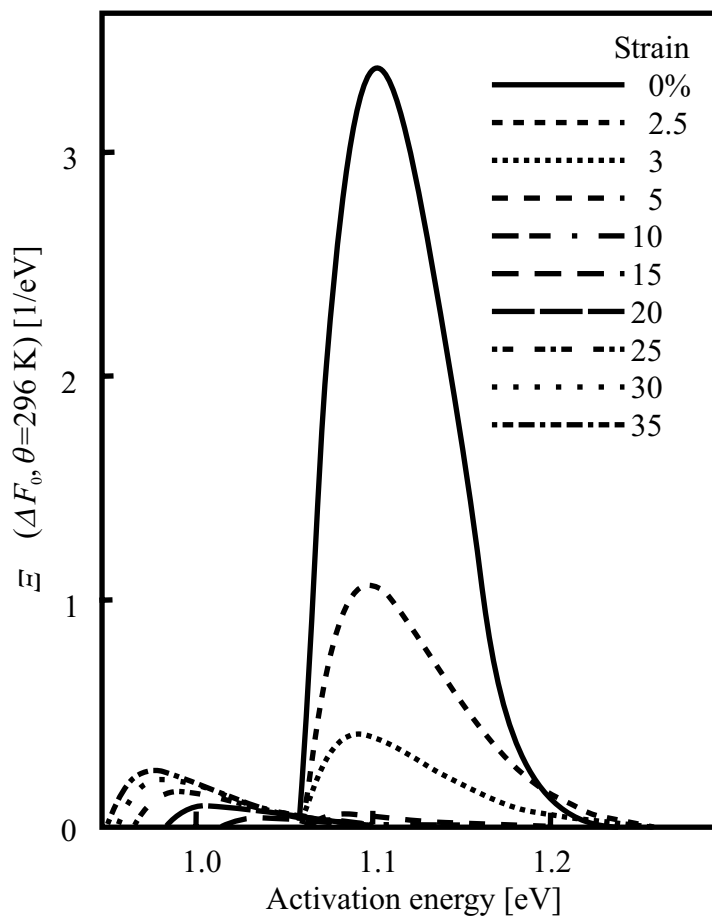


Fig. E.3 Probability distribution function of local free volume with respect to activation energy.

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 E.3 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言える。したがって、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。ただし、本項で定義した「自由体積率」はあくまで自由体積の増減と対応する量であり、実際の材料内部の自由体積領域の割合そのものを表すわけではないことに注意されたい。

E.1.2 自由体積率の積分計算

E.1.1 項で述べたように、式 (E.1) および図 E.3 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 E.3 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。5.1.5 項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。

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

ただし、以下のようにおいた。

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

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

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、

$$\begin{aligned}
J_1^{(\alpha)} &= \left[\exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0}{k_B \theta}\right) (-\alpha^{(\alpha)}) \cos\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \right]_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \\
&\quad - \int_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \left(\frac{1}{\alpha^{(\alpha)}} - \frac{1}{k_B \theta} \right) \exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0}{k_B \theta}\right) (-\alpha^{(\alpha)}) \cos\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) d\Delta F_0 \\
&= -\alpha^{(\alpha)} \left[\exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0}{k_B \theta}\right) \cos\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \right]_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \\
&\quad + \left(1 - \frac{\alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \left[\exp\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \exp\left(\frac{-\Delta F_0}{k_B \theta}\right) \alpha^{(\alpha)} \sin\left(\frac{\Delta F_0 - a^{(\alpha)}}{\alpha^{(\alpha)}}\right) \right]_{a^{(\alpha)}}^{a^{(\alpha)}+(3\pi\alpha^{(\alpha)})/4} \\
&\quad - \left(1 - \frac{\alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right)^2 \dots\dots\dots (E.5)
\end{aligned}$$

式 (E.5) 右辺の $J_1^{(\alpha)}$ の項を左辺へ移項し、整理すると

$$J_1^{(\alpha)} = \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + [1 - \alpha^{(\alpha)}/(k_B \theta)]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 - \frac{\alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \exp\left(\frac{3\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4\}}{k_B \theta}\right) + \exp\left(\frac{-a^{(\alpha)}}{k_B \theta}\right) \right] \dots \quad (E.6)$$

同様に $J_2^{(\alpha)}$ についても計算すると

$$J_2^{(\alpha)} = \frac{\alpha^{(\alpha)}}{1 + [1 + \alpha^{(\alpha)}/(k_B \theta)]^2} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} \left(2 + \frac{\alpha^{(\alpha)}}{k_B \theta} \right) \exp\left(-\frac{\pi}{4}\right) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/4\}}{k_B \theta}\right) + \exp(-\pi) \exp\left(\frac{-\{a^{(\alpha)} + (3\pi\alpha^{(\alpha)})/2\}}{k_B \theta}\right) \right] \dots \quad (E.7)$$

式 (E.6) および式 (E.7) を式 (E.2) 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。

E.1.3 自由体積と分子鎖のキック回転との関係

5.1.1 項のような 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。まず、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。灘⁽³⁾は、図 E.4 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。

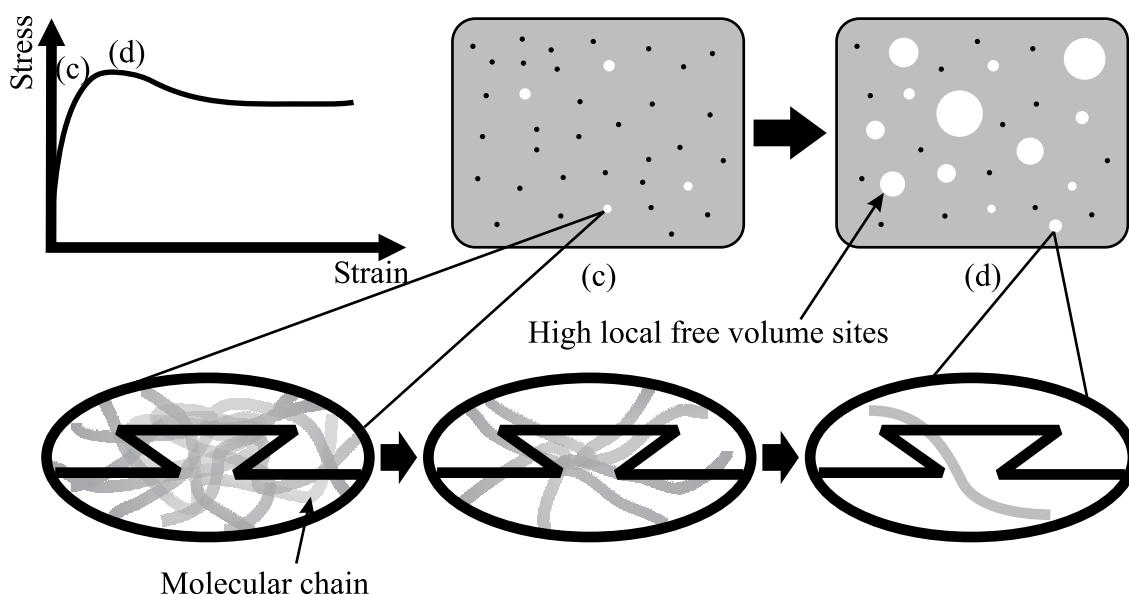


Fig. E.4 Schematic representation of relationship between local free volume and rotation of kink in molecular chain.

E.1.4 内部変数の発展の意味

本項では、内部変数 $a^{(\alpha)}$ および $\alpha^{(\alpha)}$ がどのように確率分布関数 $\Xi^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta)$ に関与するかについて述べる。図 E.5 に示すように、内部変数の発展式 [式 (5.3) および式 (5.4)] により、変形とともにまず $\alpha^{(\alpha)}$ が増加し、少し遅れて $a^{(\alpha)}$ が減少し始めている。変数 $\alpha^{(\alpha)}$ は、図 E.1 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 E.1 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 $\Xi^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta)$ 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、 $\Xi^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta)$ の積分値は減少していくことになる (図 E.3 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 E.1 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 E.1 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、局所せん断変形が起こる確率がより高くなるため、 $\Xi^{(\alpha)}(\Delta F_0, \theta)$ 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 E.3 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。

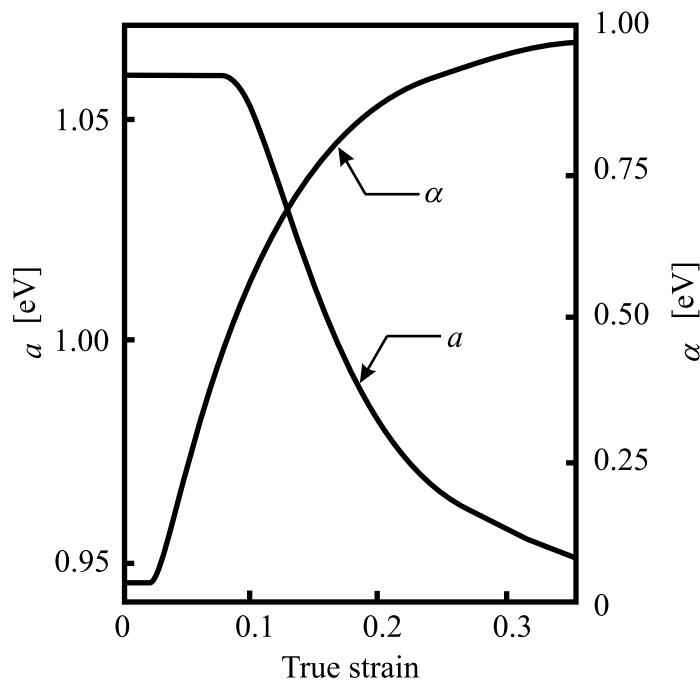


Fig. E.5 Evolution of internal variables of probability density function with increasing true strain.

E.1.5 通常の結晶塑性論における流れ応力の発展との対応

自由体積変化に基づく非弾性応答則では、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。代わりに、発展式 (5.3) および式 (5.4) により内部変数 $a^{(\alpha)}$ および $\alpha^{(\alpha)}$ 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 (5.3) および式 (5.4) においては、 $|\dot{\gamma}^{(\beta)}|$ あるいは $\omega^{(\beta)}$ 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 (5.3) および式 (5.4) 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

$$\dot{g}^{(\alpha)} = \sum_{\beta} h^{(\alpha\beta)} |\dot{\gamma}^{(\beta)}| \dots \dots \dots \quad (\text{E.8})$$

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。

E.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。

$$\mathbf{D}^p = \frac{3}{2} \dot{\varepsilon}^p \frac{\mathbf{T}'}{\bar{\sigma}} \dots \dots \dots \quad (\text{E.9})$$

ここで、 \mathbf{D}^p は塑性変形速度、 \mathbf{T}' は偏差応力 ($\mathbf{T}' \equiv \mathbf{T} - (\text{tr} \mathbf{T} / 3) \mathbf{I}$)、 $\dot{\varepsilon}^p$ 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、次式のように定義される⁽¹⁴²⁾。

$$\dot{\varepsilon}^p \equiv \sqrt{\frac{2}{3} \mathbf{D}^p \cdot \mathbf{D}^p} \dots \dots \dots \quad (\text{E.10})$$

$$\bar{\sigma} \equiv \sqrt{\frac{3}{2} \mathbf{T}' \cdot \mathbf{T}'} \dots \dots \dots \quad (\text{E.11})$$

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⁽⁴⁶⁾ および富田⁽¹⁴³⁾ 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。

$$\mathbf{D}^p = \dot{\gamma}^p \frac{\mathbf{T}'}{\sqrt{2} \tau} \dots \dots \dots \quad (\text{E.12})$$

$$\tau = \sqrt{\frac{\mathbf{T}' \cdot \mathbf{T}'}{2}} \dots \dots \dots \quad (\text{E.13})$$

富田⁽¹⁴³⁾ 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 (E.11) を式 (E.9) に代入すると

$$\mathbf{D}^p = \sqrt{\frac{3}{2}} \dot{\varepsilon}^p \frac{\mathbf{T}'}{\sqrt{\mathbf{T}' \cdot \mathbf{T}'}} \dots \dots \dots \quad (\text{E.14})$$

となる。一方、式 (E.13) を式 (E.12) に代入すると

$$\mathbf{D}^p = \dot{\gamma}^p \frac{\mathbf{T}'}{\sqrt{\mathbf{T}' \cdot \mathbf{T}'}} \dots\dots\dots (E.15)$$

となる。式 (E.9) と式 (E.12) は等価なものであるため、式 (E.14) と式 (E.15) を比較すると、式 (E.10) から

$$\dot{\gamma}^p = \sqrt{\frac{3}{2}} \dot{\epsilon}^p = \sqrt{\mathbf{D}^p \cdot \mathbf{D}^p} \dots\dots\dots (E.16)$$

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

$$\dot{\gamma}^p \equiv \sqrt{\frac{\mathbf{D}^p \cdot \mathbf{D}^p}{2}} \dots\dots\dots (E.17)$$

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

$$\dot{\gamma}^p \equiv \sqrt{2(\mathbf{D}^p \cdot \mathbf{D}^p)} \dots\dots\dots (E.18)$$

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 (E.12) はそれぞれ次式のように変更を受ける。

$$\mathbf{D}^p = \dot{\gamma}^p \frac{\mathbf{T}'}{\tau} \dots\dots\dots (E.19)$$

$$\mathbf{D}^p = \dot{\gamma}^p \frac{\mathbf{T}'}{2\tau} \dots\dots\dots (E.20)$$

すなわち、式 (E.12) における (式 (E.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 (E.18) による定義) である。そのため、Hasan-Boyce の非弾性応答則 [式 (5.1)] から導出される非弾性せん断ひずみ速度 (式 (E.16) による定義) を本理論に適用する際、結晶塑性論における「すべり」との定義の仕方の違いから、式 (5.1) 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とを付記しておく。

E.3 Eyring 形硬化則が適用可能なひずみ速度の範囲

式 (5.23) および式 (5.45) からわかるように結晶塑性形のひずみ速度硬化則は非弾性せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ および分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ が同符号、すなわち、共に正または負の場合にしか定義できない。式 (5.45) の Eyring 形硬化則を用いて解析する場合、図 5.5(a) に示したようにひずみ速度の対数的な減少に対して分解せん断応力が線形に減少し、非常に遅いひずみ速度域では分解せん断応力が負となるため、計算が破綻してしまう。したがって、Eyring 形硬化則を用いる場合は適用可能なひずみ速度の範囲に下限があることに注意が必要である。一方、式 (5.23) の Pan-Rice 形硬化則を用いた場合には、図 5.4(b) からわかるように両対数線図上で分解せん断応力およびひずみ速度の関係が線形なため、無限小に遅いひずみ速度においても応力値は正のままとなる。したがって、Pan-Rice 形硬化則には適用可能なひずみ速度の範囲に特に制限はないと言える。ただし、実際の数値解析において極めて遅いひずみ速度で解析するために、時間増分を大きく取った場合には、その分計算が不安定化することに注意されたい。

補足 F

第 6 章の補足

F.1 平衡相における混合のエントロピー変化

単一分子の総数を n_1 , i 個の分子からなる芽の数を n_i とする. ある平衡相において n_i 個の芽が生じた場合, その系は芽と他の粒子との混合物となり, その系のエントロピーは増大する. この混合のエントロピー変化を ΔS とする. 全ての大きさの芽の総和が単一分子の総数 n_1 よりはるかに小さく, さらに, i が非常に小さい時には, 混合のエントロピー変化は $n_1 + n_i$ 個の位置に n_1 個の粒子と n_i 個の芽を分配するしかたの数 W から, 次式のように求められる⁽¹⁰⁷⁾.

$$\Delta S = k_B \ln W = k_B \ln \frac{(n_1 + n_i)!}{n_1! n_i!} = k_B \{ \ln(n_1 + n_i)! - \ln n_1! - \ln n_i! \} \dots \dots \dots (F.1)$$

さらに, スターリングの近似式 $\ln x! \approx x \ln x - x$ を用いると, 式 (F.1) 最右辺の各項はそれぞれ次式のように近似できる.

$$\ln(n_1 + n_i)! \approx (n_1 + n_i) \ln(n_1 + n_i) - (n_1 + n_i) \dots \dots \dots (F.2)$$

$$\ln n_1! \approx n_1 \ln n_1 - n_1 \dots \dots \dots (F.3)$$

$$\ln n_i! \approx n_i \ln n_i - n_i \dots \dots \dots (F.4)$$

式 (F.2)~(F.4) を式 (F.1) に代入し, さらに式変形を行えば,

$$\begin{aligned} \Delta S &\approx k_B \{ (n_1 + n_i) \ln(n_1 + n_i) - n_1 \ln n_1 - n_i \ln n_i \} \\ &= k_B \left\{ n_1 \ln \left(\frac{n_1 + n_i}{n_1} \right) + n_i \ln \left(\frac{n_1 + n_i}{n_i} \right) \right\} \\ &= k_B \left\{ n_1 \ln \left(1 + \frac{n_i}{n_1} \right) + n_i \ln \left[\frac{n_1}{n_i} \left(1 + \frac{n_i}{n_1} \right) \right] \right\} \\ &= k_B \left\{ n_1 \ln \left(1 + \frac{n_i}{n_1} \right) + n_i \ln \frac{n_1}{n_i} + n_i \ln \left(1 + \frac{n_i}{n_1} \right) \right\} \\ &\approx k_B \left\{ n_1 \frac{n_i}{n_1} + n_i \ln \frac{n_1}{n_i} + n_i \frac{n_i}{n_1} \right\} \\ &\approx k_B \left\{ n_i + n_i \ln \frac{n_1}{n_i} \right\} \\ &= k_B n_i \left\{ 1 - \ln \frac{n_i}{n_1} \right\} \dots \dots \dots (F.5) \end{aligned}$$

を得る. ただし, $\ln(1+x)$ の $x=0$ まわりにおける Taylor 展開の 1 次近似式, すなわち $\ln(1+x) \approx x$ および $n_1 \gg n_i$ の条件を用いている. 式 (F.5) において n_1 を ρ^* に, n_i を ρ_0 に置き換えれば, 本文と同様のクレーズの芽の形成による混合エントロピー変化 ΔS が得られる.

F.2 飽和クレーズ数密度の導出

式 (6.3) の ΔS に $\Delta S = k_B \rho_0 [1 - \ln(\rho_0/\rho^*)]$ を代入すれば次式のようになる.

$$\Delta F = \rho_0 \Delta G_{10} - \theta k_B \rho_0 \left(1 - \ln \frac{\rho_0}{\rho^*}\right) \dots \dots \dots (F.6)$$

このとき, $\partial \Delta F / \partial \rho_0 = 0$ の極値条件は以下のように表わされる.

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Delta F}{\partial \rho_0} &= \Delta G_{10} - \theta k_B \left[\left(1 - \ln \frac{\rho_0}{\rho^*}\right) + \rho_0 \left(-\frac{1}{\rho^* \rho_0}\right) \right] \\ &= \Delta G_{10} + k_B \theta \ln \frac{\rho_0}{\rho^*} \\ &= 0 \dots \dots \dots (F.7) \end{aligned}$$

したがって,

$$\begin{aligned} \ln \frac{\rho_0}{\rho^*} &= -\frac{\Delta G_{10}}{k_B \theta} \\ \rho_0 &= \rho^* \exp\left(-\frac{\Delta G_{10}}{k_B \theta}\right) \dots \dots \dots (F.8) \end{aligned}$$

を得る. さらに, 式 (F.8) の活性化エネルギーに対して作用応力による活性化エネルギー変化を導入すれば, $\partial \Delta F / \partial \rho_0 = 0$ の極値を与える ρ_0 の値は最終的に次式で表わされる.

$$\rho_0 = \rho^* \exp\left(-\frac{\Delta G_{10} - \sigma \Delta v_1}{k_B \theta}\right) \dots \dots \dots (F.9)$$

F.3 クレーズの体積分率と面積分率の変換則

本節ではクレーズ密度の体積分率と面積分率の変換式を図 F.1 に示す 3 種類のポイド形状に対して示す. なお, 本節ではクレーズ密度の体積分率を $\hat{\omega}$ で表わす.

(a) 立方体状ポイドの場合

一辺 L の立方体状の観察体積中に一辺 l の小さな立方体状ポイドが 1 個存在する場合, $\hat{\omega}$ および ω はそれぞれ次式のようになる.

$$\hat{\omega} = \left(\frac{l}{L}\right)^3 \dots \dots \dots (F.10)$$

$$\omega = \left(\frac{l}{L}\right)^2 \dots \dots \dots (F.11)$$

式 (F.10) および式 (F.11) から l/L を消去して $\hat{\omega}$ と ω の関係を求めれば次式のようになる.

$$\hat{\omega} = \omega^{3/2} \dots \dots \dots (F.12)$$

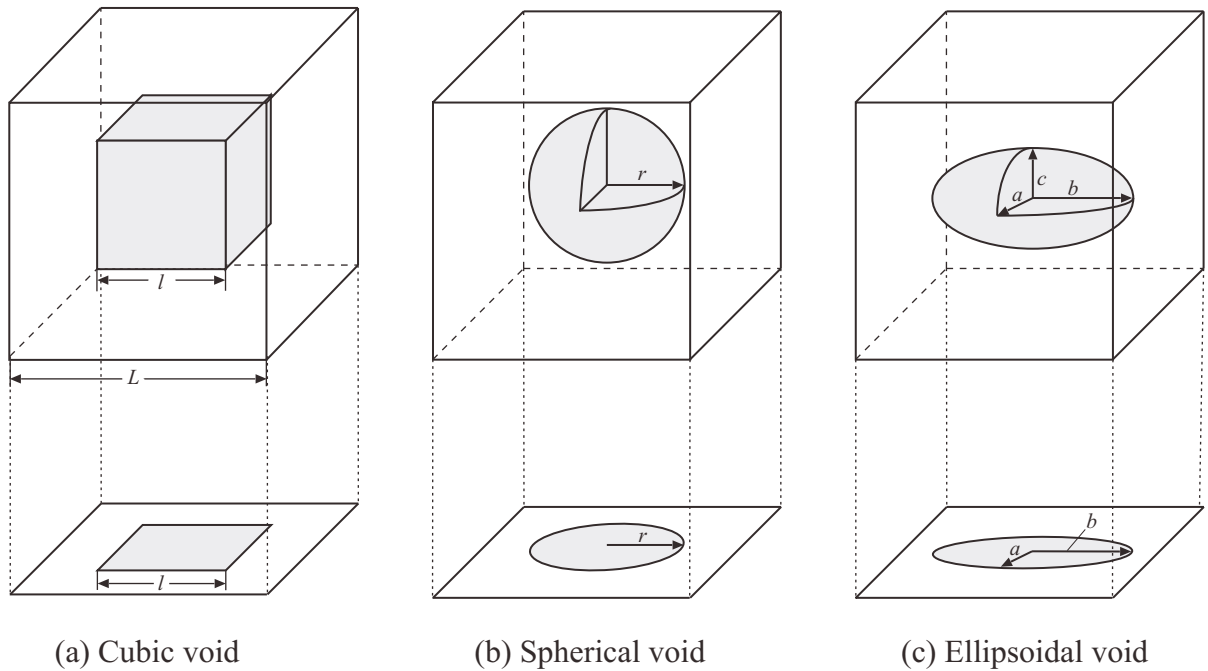


Fig. F.1 Conversion of volume-area fraction for each void morphology.

(b) 球状ボイドの場合

一辺 L の立方体の中に半径 $r (r < L)$ のボイドが 1 個存在している場合、クレーズの体積分率 $\hat{\omega}$ は次式にて表される。

$$\hat{\omega} = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{r}{L}\right)^3 \dots\dots\dots (F.13)$$

一方、球の大円を含む面で切断したとき、正方形の中に円孔ボイドが存在することになるが、そのクレーズの面積分率 ω は、

$$\omega = \pi \left(\frac{r}{L}\right)^2 \dots\dots\dots (F.14)$$

となる。式 (F.14) を r/L について解き、式 (F.13) に代入すれば次式を得る。

$$\hat{\omega} = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \omega^{3/2} \dots\dots\dots (F.15)$$

(c) 楕円体状ボイドの場合

球をさらに一般化して、3 軸の長さが $2a, 2b, 2c$ である楕円体状ボイドに置き換えれば、 $\hat{\omega}$ および ω は次のようになる。

$$\hat{\omega} = \frac{4\pi abc/3}{L^3} = \frac{4\pi}{3} \frac{abc}{L^3} \dots\dots\dots (F.16)$$

$$\omega = \frac{\pi ab}{L^2} \dots\dots\dots (F.17)$$

式 (F.17) を $1/L$ で解いて式 (F.16) に代入すれば、 $\hat{\omega}$ と ω の関係が、

$$\hat{\omega} = \frac{4c}{3\sqrt{\pi ab}} \omega^{3/2} \dots\dots\dots (F.18)$$

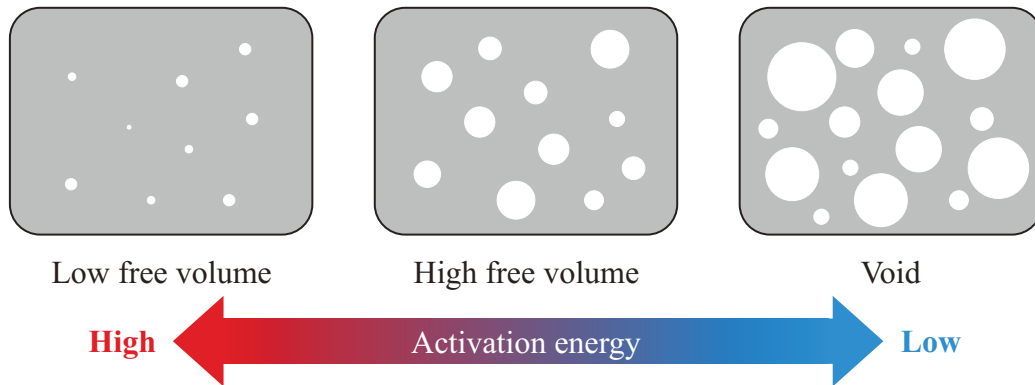


Fig. F.2 Correspondence of activation energy and free volume fraction.

のように得られる. 式 (F.18) で $a = b = c = r$ とおけば, 式 (F.18) は式 (F.15) に帰着する.

(d) 変換則の一般化

以上の式 (F.12), (F.15) および式 (F.18) の右辺における $\omega^{3/2}$ の係数を k とおけば, これらの式は全て次式の形に集約できる.

$$\hat{\omega} = k\omega^{3/2} \dots \dots \dots (F.19)$$

実際のクレーズの形状はクレーズごとに一定ではないので, 一般性を持たせるのであれば式 (F.19) のように表記してもよい. ここで, クレーズ中のポイドが極端に潰れた楕円形で, $b = c = 0.02a$ だと仮定した場合, 式 (F.18) によれば約 $k = 0.106$ となる. 他の 2 軸に対して特定の 1 軸が 50 倍長いクレーズ中の楕円ポイドが存在したとしても, $k = 0.1$ 程度を想定しておけば良い. したがって, ポイドの形状が立方体に近い場合も含めて, k の範囲は $0.1 < k < 1$ が妥当であると言える.

F.4 クレーズ進展に要する活性化エネルギー

5.1.1 項で述べたように, 自由体積変化に基づく非弾性応答則では, 活性化エネルギーの高い領域が低自由体積領域に, 活性化エネルギーの低い領域が高自由体積領域に対応している. したがって, 図 F.2 のようにポイドの形成を伴うクレーズの進展に必要な活性化エネルギーは高自由体積領域における活性化エネルギーよりさらに低くなることが予測される. 本研究では式 (6.26) のようにクレーズ進展に要する活性化エネルギーを自由体積変化に基づく非弾性応答則において用いられる ΔF_0 の関数として定式化し, その係数 C_i に 1 より小さい値を与えて用いることで上述のような低活性化エネルギー状態をモデル化している.

補足 G

第 7 章の補足

G.1 接線係数法を導入した場合の結晶相の構成則テンソルの具体形

接線係数法を適用した結晶相の構成式は式 (5.43) のように変更を受けるため、式 (5.43) および式 (7.1) を比較することで結晶相の構成則テンソル \mathbf{C}^L および \mathbf{R}^L はそれぞれ次式のように得られる.

$$\mathbf{C}^L \equiv \mathbf{C}^{\text{tan}} + \psi_0 \mathbf{S}^{(1)} \otimes \mathbf{S}^{(1)}, \quad \mathbf{R}^L \equiv \sum_{\alpha} \dot{v}^{(\alpha)} \boldsymbol{\Omega}_0^{(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (\text{G.1})$$

G.2 周期性および応力の釣り合いを利用したじょう乱速度こう配項の消去

いま、式 (7.17) の左辺における次の 2 項に注目する.

$$\int_{\mathbf{y}} L_{ij}^{\dagger} T_{jk} \check{L}_{ik}^0 dy = \int_{\mathbf{y}} L_{ij}^{\dagger} T_{jk} dy \check{L}_{ik}^0 \dots \dots \dots \quad (\text{G.2})$$

$$\int_{\mathbf{y}} L_{ij}^0 T_{jk} \check{L}_{ik}^{\dagger} dy = \int_{\mathbf{y}} T_{jk} \check{L}_{ik}^{\dagger} dy L_{ij}^0 \dots \dots \dots \quad (\text{G.3})$$

ただし、上式ではマクロ領域についての積分の表記を省略している. また、上式右辺においては、マクロ速度こう配がマイクロ座標系に依存しないことを利用し、マクロ速度こう配をマイクロ領域積分の外に出している. 式 (G.2) の $\int_{\mathbf{y}} L_{ij}^{\dagger} T_{jk} dy$ は部分積分と発散定理を用いることによって、次式のように書ける.

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{y}} L_{ij}^{\dagger} T_{jk} dy &= \int_{\mathbf{y}} (v_i^{\dagger} T_{jk})_{,j} dy - \int_{\mathbf{y}} v_i^{\dagger} T_{jk,j} dy \\ &= \int_{\mathcal{A}_Y} v_i^{\dagger} T_{kj} n_j da_y - \int_{\mathbf{y}} v_i^{\dagger} T_{kj,j} dy \dots \dots \dots \quad (\text{G.4}) \end{aligned}$$

ここで、 \mathcal{A}_Y はマイクロ構造のユニットセル Y を囲む検査面、 da_y はマイクロ構造の微小面積素である. 式 (G.4) 2 行目の第 1 項は v_i^{\dagger} の Y -周期性および $T_{kj} n_j$ の反 Y -周期性により零となり [図 G.1], 第 2 項はユニットセル内の応力の釣り合い、すなわち、式 (7.11) により零となるため、次式が成り立つ.

$$\int_{\mathbf{y}} L_{ij}^{\dagger} T_{jk} dy = 0 \dots \dots \dots \quad (\text{G.5})$$

したがって、式 (7.17) の左辺に現れる式 (G.2) の項は零となる. 同様に、マイクロ構造の Y -周期性およびユニットセルの応力の釣り合いを考慮することで、式 (G.3) の項も零となる.

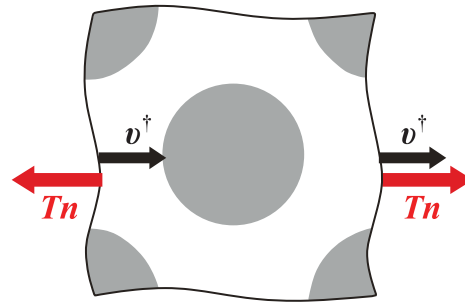


Fig. G.1 Periodicity of disturbance velocity and anti-periodicity of normal stress.

G.3 力学的考察に基づく粘塑性均質化理論の定式化

G.3.1 ミクロ方程式およびマクロ構成式の導出

漸近展開法と異なり，力学的考察に基づく均質化理論は Hill-Mandel⁽¹⁴⁴⁾ の条件，すなわち，「ミクロ領域に与えられた仕事の体積平均がマクロ領域における局所的な内部仕事に等しい」という条件に基づいて定式化される．この条件から周期構造を有するユニットセル Y の仮想仕事率の体積平均がマクロ構造の局所の仮想仕事率と等しいことを表す周期材料に対する仮想仕事の原理⁽¹⁴⁵⁾ が導かれる．いま，有限変形理論における Updated Lagrange 形式の周期材料に対する仮想仕事の原理は，式 (3.25) 左辺を考慮すれば次式のように書ける⁽⁸⁸⁾．

$$\frac{1}{Y} \int_Y \dot{\boldsymbol{\pi}} \cdot \check{\mathbf{L}} dy = \dot{\mathbf{H}}^H \cdot \check{\mathbf{L}}^0 \dots\dots\dots (G.6)$$

ここで， $\dot{\boldsymbol{\pi}}$ および $\dot{\mathbf{H}}^H$ は式 (3.23) で定義される Updated Lagrange 形式の第 1 種 Piola-Kirchhoff 応力速度をそれぞれミクロ構造およびマクロ構造の応力速度として表記したものであり，次式のように定義される [補足 G.3.3]．

$$\dot{\boldsymbol{\pi}} \equiv \dot{\mathbf{T}} - \mathbf{T}\mathbf{L}^T + \mathbf{T}\text{tr}\mathbf{L} \dots\dots\dots (G.7)$$

$$\dot{\mathbf{H}}^H \equiv \dot{\mathbf{T}}^H - \mathbf{T}^H\mathbf{L}^{0T} + \mathbf{T}^H\text{tr}\mathbf{L}^0 \dots\dots\dots (G.8)$$

式 (G.6) の釣合い式に式 (7.8) を代入することで，仮想速度こう配 $\check{\mathbf{L}}$ をマクロ成分およびじょう乱成分に分解して整理すれば

$$\left(\dot{\mathbf{H}}^H - \frac{1}{Y} \int_Y \dot{\boldsymbol{\pi}} dy \right) \cdot \check{\mathbf{L}}^0 - \frac{1}{Y} \int_Y \dot{\boldsymbol{\pi}} \cdot \check{\mathbf{L}}^\dagger dy = 0 \dots\dots\dots (G.9)$$

を得る．いま， $\check{\mathbf{L}}^0$ が任意の量であることを考慮すれば，式 (G.9) から次の 2 式が得られる．

$$\dot{\mathbf{H}}^H = \frac{1}{Y} \int_Y \dot{\boldsymbol{\pi}} dy \dots\dots\dots (G.10)$$

$$\int_Y \dot{\boldsymbol{\pi}} \cdot \check{\mathbf{L}}^\dagger dy = 0 \dots\dots\dots (G.11)$$

式 (G.10) はミクロ構造の応力速度 $\dot{\boldsymbol{\pi}}$ の体積平均がマクロ構造の応力速度と等しいことを表しているため，同式よりマクロ構造の均質化された構成式が導かれる．一方，式 (G.11) はミクロ構造のじょう乱成分がなす仮想仕事率が零であることを表しており，ミクロ構造のじょう乱速度成分を求める積分方程式に相当する．ここ

で、非圧縮仮定 ($\text{tr} \mathbf{L} \approx 0$) および式 (3.26) を考慮して、マイクロ構造の構成式 [式 (7.1)] を式 (G.7) に代入すれば次式を得る。

$$\dot{\boldsymbol{\pi}} = (\mathbf{C}^L - \mathbf{P}) : \mathbf{D} - \mathbf{R}^L + \mathbf{L} \mathbf{T} \dots \dots \dots \quad (\text{G.12})$$

(a) ミクロ方程式の導出

式 (G.12) を式 (G.11) に代入するとともに、式 (7.8) および式 (7.9) を用いて \mathbf{L} および \mathbf{D} をそれぞれマクロ成分とじょう乱成分に分解すれば、

$$\int_{\mathcal{Y}} [\{ (\mathbf{C}^L - \mathbf{P}) : (\mathbf{D}^0 + \mathbf{D}^\dagger) - \mathbf{R}^L \} \cdot \check{\mathbf{D}}^\dagger + \mathbf{L}^\dagger \mathbf{T} \cdot \check{\mathbf{L}}^\dagger] dy = 0 \dots \dots \dots \quad (\text{G.13})$$

を得る。ただし、式 (G.13) ではマイクロ構造の Y -周期性およびユニットセルの応力の釣合いを考慮して、 \mathbf{L}^0 の項を消去している [補足 G.2]。さらに、式 (G.13) のじょう乱速度 \mathbf{v}^\dagger 以外の項を右辺に移項すれば、

$$\int_{\mathcal{Y}} [\{ (\mathbf{C}^L - \mathbf{P}) : \mathbf{D}^\dagger \} \cdot \check{\mathbf{D}}^\dagger + \mathbf{L}^\dagger \mathbf{T} \cdot \check{\mathbf{L}}^\dagger] dy = - \left\{ \int_{\mathcal{Y}} \check{\mathbf{D}}^\dagger : (\mathbf{C}^L - \mathbf{P}) dy \right\} : \mathbf{D}^0 + \int_{\mathcal{Y}} \mathbf{R}^L \cdot \check{\mathbf{D}}^\dagger dy \dots \dots \dots \quad (\text{G.14})$$

となり、式 (7.20) と同様のマイクロじょう乱速度 \mathbf{v}^\dagger を決定するための積分方程式が得られる。

(b) マクロ構成式の導出

式 (G.12) を式 (G.10) に代入するとともに、式 (7.8) および式 (7.9) を用いて \mathbf{L} および \mathbf{D} をそれぞれマクロ成分とじょう乱成分に分解すれば、

$$\dot{\mathbf{I}}^H = \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} \{ \mathbf{C}^L : \mathbf{D}^0 + (\mathbf{C}^L - \mathbf{P}) : \mathbf{D}^\dagger - \mathbf{R}^L \} dy - \mathbf{P}^H : \mathbf{D}^0 + \mathbf{L}^0 \mathbf{T}^H \dots \dots \dots \quad (\text{G.15})$$

となる。ただし、式 (G.15) ではマイクロ構造の Y -周期性およびユニットセルの応力の釣合いを考慮して、 \mathbf{L}^\dagger の項を消去している [補足 G.2]。また、 \mathbf{T}^H および \mathbf{P}^H はそれぞれ式 (7.26) および式 (7.27) のように定義される。ここで、マクロ構造の Updated Lagrange 形式の第 1 種 Piola-Kirchhoff 応力速度 $\dot{\mathbf{I}}^H$ は式 (3.26) と同様に、マクロ構造の Cauchy 応力 \mathbf{T}^H の Jaumann 速度 $\overset{\circ}{\mathbf{T}}^H = \dot{\mathbf{T}}^H - \mathbf{W}^0 \mathbf{T}^H + \mathbf{T}^H \mathbf{W}^0$ を用いて次式のように表記できる。

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{I}}^H &= \dot{\mathbf{T}}^H - \mathbf{T}^H \mathbf{L}^{0T} + \mathbf{T}^H \text{tr} \mathbf{L}^0 \\ &= \overset{\circ}{\mathbf{T}}^H + \mathbf{W}^0 \mathbf{T}^H - \mathbf{T}^H \mathbf{W}^0 - \mathbf{T}^H (\mathbf{D}^0 + \mathbf{W}^0)^T + \mathbf{T}^H \text{tr} \mathbf{L}^0 \\ &= \overset{\circ}{\mathbf{T}}^H + (\mathbf{L}^0 - \mathbf{D}^0) \mathbf{T}^H - \mathbf{T}^H \mathbf{W}^0 - \mathbf{T}^H \mathbf{D}^0 + \mathbf{T}^H \mathbf{W}^0 + \mathbf{T}^H \text{tr} \mathbf{L}^0 \\ &= \overset{\circ}{\mathbf{T}}^H - \mathbf{D}^0 \mathbf{T}^H - \mathbf{T}^H \mathbf{D}^0 + \mathbf{L}^0 \mathbf{T}^H + \mathbf{T}^H \text{tr} \mathbf{L}^0 \\ &= \overset{\circ}{\mathbf{T}}^H - \mathbf{P}^H : \mathbf{D}^0 + \mathbf{L}^0 \mathbf{T}^H + \mathbf{T}^H \text{tr} \mathbf{L}^0 \dots \dots \dots \quad (\text{G.16}) \end{aligned}$$

非圧縮仮定 ($\text{tr} \mathbf{L}^0 \approx 0$) を考慮して、式 (G.15) および式 (G.16) を比較すれば、マクロ構造の Jaumann 応力速度 $\overset{\circ}{\mathbf{T}}^H$ が次式のように書ける。

$$\overset{\circ}{\mathbf{T}}^H = \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} \{ \mathbf{C}^L : \mathbf{D}^0 + (\mathbf{C}^L - \mathbf{P}) : \mathbf{D}^\dagger - \mathbf{R}^L \} dy \dots \dots \dots \quad (\text{G.17})$$

さらに、漸近展開法の場合と同様に、マイクロ方程式 [式 (G.14)] の形からじょう乱速度 \mathbf{v}^\dagger を特性速度 χ_i^{kl} および ϕ_i を用いて式 (G.18) のように表すことでじょう乱変形速度 D_{ij}^\dagger が式 (G.19) のように書ける。

$$v_i^\dagger = -\chi_i^{kl} D_{kl}^0 + \phi_i \dots \dots \dots \quad (\text{G.18})$$

$$D_{ij}^\dagger = -\chi_{(i,j)}^{kl} D_{kl}^0 + \phi_{(i,j)} \dots \dots \dots (G.19)$$

式 (G.19) の特性速度を用いて表されたじょう乱変形速度 D^\dagger を式 (G.17) に代入し、マクロ変形速度 D^0 で括れる項および括れない項へと整理すれば、最終的に Jaumann 応力速度で表記されたマクロ構造の均質化粘塑性構成式が次式のように得られる。

$$\dot{T}^H = C^H : D^0 - R^H \dots \dots \dots (G.20)$$

ただし、 C^H および R^H はそれぞれ式 (7.24) および式 (7.25) のように定義される。

G.3.2 マクロ方程式の導出

マクロ構造の支配方程式は通常 of 支配方程式の導出の手順と同様に、マクロ構造の弱形式の釣合い方程式に対して G.3.1 項で得たマクロ構成式を代入することによって得られる。ここで、マクロ構造の弱形式の釣合い方程式は式 (3.28) の Updated Lagrange 形式の速度形仮想仕事の原理をマクロ量を用いて書き直すことによって次式のように表わされる。

$$\int_{\mathcal{V}} \left[(\dot{T}^H - P^H : D^0) \cdot \dot{D}^0 + (L^0 T^H) \cdot \dot{L}^0 \right] dv = \int_{\mathcal{A}} \overset{(n)}{t} \cdot \dot{v}^0 da + \int_{\mathcal{V}} \rho \dot{f} \cdot \dot{v}^0 dv \dots \dots \dots (G.21)$$

さらに、式 (G.20) のマクロ構造の均質化構成式を式 (G.21) に代入するとともにマクロ変位速度 v^0 以外の項を右辺へと移項すれば、式 (7.23) と同様のマクロ構造における支配方程式が次式のように得られる。

$$\int_{\mathcal{V}} \left[\{ (C^H - P^H) : D^0 \} \cdot \dot{D}^0 + (L^0 T^H) \cdot \dot{L}^0 \right] dv = \int_{\mathcal{A}} \overset{(n)}{t} \cdot \dot{v}^0 da + \int_{\mathcal{V}} \rho \dot{f} \cdot \dot{v}^0 dv + \int_{\mathcal{V}} R^H \cdot \dot{D}^0 dv \dots \dots (G.22)$$

以上のように、7章で述べた漸近展開法に基づく定式化および本節で述べた力学的考察に基づく定式化のいずれを用いた場合にも最終的に得られるミクロおよびマクロ構造の支配方程式は同様の形式となる。なお、力学的考察に基づく定式化においても局所化問題は 7.5 節と同様の手法で実施する。

G.3.3 マクロ構造の Updated Lagrange 形式の第1種 Piola-Kirchhoff 応力速度

本項では、式 (G.7) の体積平均が式 (G.8) のマクロ構造の Updated Lagrange 形式の第1種 Piola-Kirchhoff 応力速度の定義と一致することを示す。はじめに、式 (7.26) のマクロ応力の物質時間微分を考える。

$$\begin{aligned} \dot{T}^H &= \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} T dy \right) \\ &= \frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{Y} \right) \int_{\mathcal{Y}} T dy + \frac{1}{Y} \frac{D}{Dt} \left(\int_{\mathcal{Y}} T dy \right) \\ &= -\frac{1}{Y^2} \frac{DY}{Dt} \int_{\mathcal{Y}} T dy + \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} (\dot{T} + T \text{tr} L) dy \\ &= -\frac{1}{Y} (\text{tr} L^0) \int_{\mathcal{Y}} T dy + \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} (\dot{T} + T \text{tr} L) dy \\ &= \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} (\dot{T} + T \text{tr} L) dy - T^H \text{tr} L^0 \dots \dots \dots (G.23) \end{aligned}$$

なお、上式では輸送定理 [式 (C.2)] および $DY/Dt = (\text{tr} L^0)Y$ という関係を用いている。式 (G.7) の体積平均および式 (G.23) を比較すれば、

$$\frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} \dot{\pi} dy = \dot{T}^H + T^H \text{tr} L^0 - \frac{1}{Y} \int_{\mathcal{Y}} T L^T dy \dots \dots \dots (G.24)$$

となる. 式 (G.24) の右辺第 3 項は式 (7.8) を用いて \mathbf{L} をマクロ成分およびじょう乱成分に分解するとともに, ミクロ構造の Y -周期性およびユニットセルの応力の釣合いを考慮すれば, じょう乱成分の項が消去される [補足 G.2]. したがって,

$$\begin{aligned} \frac{1}{Y} \int_{\mathbf{y}} \dot{\boldsymbol{\pi}} d\mathbf{y} &= \dot{\mathbf{T}}^H + \mathbf{T}^H \text{tr} \mathbf{L}^0 - \frac{1}{Y} \int_{\mathbf{y}} \mathbf{T} \mathbf{L}^{0T} d\mathbf{y} \\ &= \dot{\mathbf{T}}^H + \mathbf{T}^H \text{tr} \mathbf{L}^0 - \mathbf{T}^H \mathbf{L}^{0T} \dots\dots\dots (G.25) \end{aligned}$$

となる. 式 (G.25) より, ミクロ構造の Updated Lagrange 形式の第 1 種 Piola-Kirchhoff 応力速度の体積平均は式 (G.8) のマクロ構造の Updated Lagrange 形式の第 1 種 Piola-Kirchhoff 応力速度と一致することがわかる. 一方, Cauchy 応力の物質速度については式 (G.23) から, $\dot{\mathbf{T}}^H \neq \frac{1}{Y} \int_{\mathbf{y}} \dot{\mathbf{T}} d\mathbf{y}$ であることがわかる. したがって, ミクロ応力速度の平均化によってマクロ構成式を導出する際には, Cauchy 応力速度を平均化するのではなく, 式 (G.10) に示したように Updated Lagrange 形式の第 1 種 Piola-Kirchhoff 応力速度を平均化する必要がある.

補足 H

第 8 章の補足

H.1 Euler の陽解法と陰解法

本節では、次式のような時刻 t の微分で表わされる常微分方程式の数値解法のうち、最も基本的な解法である Euler の陽解法および陰解法について述べる。

$$\frac{dx}{dt} = f(x, t) \dots\dots\dots (H.1)$$

ただし、ここでは x は時刻 t の関数 $x = x(t)$ とする。

(a) Euler 陽解法

いま、ある時刻 t における $x(t)$ および $f(x, t)$ が既知である場合に、時刻 $t + \Delta t$ における x を求めるために、次のような時刻 t まわりでの Taylor 展開を考える。

$$x(t + \Delta t) = x(t) + \frac{dx}{dt}\Delta t + \frac{1}{2}\frac{d^2x}{dt^2}(\Delta t)^2 + \dots\dots\dots (H.2)$$

ここで、時間変化 Δt が十分に小さい場合には、式 (H.2) 右辺の第 3 項以降を無視することができ、 $x(t + \Delta t)$ は次式のように表わされる。

$$x(t + \Delta t) \approx x(t) + f(x, t)\Delta t \dots\dots\dots (H.3)$$

このように、Taylor 展開の 1 次の項までを考慮する微分方程式の数値解析手法を Euler 法と呼ぶ。ここで、現時刻 t を数値解析上の離散化された時間ステップ i 、その後の時刻 $t + \Delta t$ を時間ステップ $i + 1$ であると見なせば、式 (H.3) は以下のように書き換えられる。

$$x^{i+1} = x^i + f(x^i, t^i)\Delta t \dots\dots\dots (H.4)$$

$$\frac{x^{i+1} - x^i}{\Delta t} = f(x^i, t^i) \dots\dots\dots (H.5)$$

式 (H.4) は現時刻 i での x の 1 階の導関数に t の変化分をかけた値を現時刻 i での x の値に足すことで、次の時刻 $i + 1$ での x の値が得られることを表している。このような時間積分法は式 (H.2) の Taylor 展開を、陽に値が得られている現時刻 t のまわりで実施したこと、すなわち、支配方程式が現時刻において成り立っていると仮定したことに加え、上述のように Euler 法に基づいていることから Euler 陽解法と呼ばれる。なお、Euler 陽解法は他の Taylor 展開の高次項まで考慮する解法と比較して計算精度が低いことに加え、後述の陰解法と比べて解の収束性も悪いことに注意されたい。

(b) Euler 陰解法

陽解法の場合と異なり、陰解法ではある時刻 t における $x(t)$ および $f(x, t)$ が既知である場合に、時刻 $t - \Delta t$ における x の時刻 t まわりでの Taylor 展開を考える。

$$x(t - \Delta t) = x(t) - \frac{dx}{dt}\Delta t + \frac{1}{2} \frac{d^2x}{dt^2}(\Delta t)^2 - \dots \quad (\text{H.6})$$

ここで、時間変化 Δt が十分に小さいと考え、式 (H.6) 右辺の第 3 項以降を無視することで $x(t - \Delta t)$ を次式のように表す。

$$x(t - \Delta t) \approx x(t) - f(x, t)\Delta t \quad (\text{H.7})$$

さらに、現時刻 $t - \Delta t$ を数値解析上の離散化された時間ステップ i 、その後の時刻 t を時間ステップ $i + 1$ であると見なせば、式 (H.7) は以下のように書き換えられる。

$$x^{i+1} = x^i + f(x^{i+1}, t^{i+1})\Delta t \quad (\text{H.8})$$

$$\frac{x^{i+1} - x^i}{\Delta t} = f(x^{i+1}, t^{i+1}) \quad (\text{H.9})$$

式 (H.8) は次の時刻 $i + 1$ での x の 1 階の導関数に t の変化分をかけた値を現時刻 i での x の値に足すことで、次の時刻での x の値が得られることを表している。このような時間積分法は式 (H.6) の Taylor 展開を、陽に値が得られていない次の時刻 t のまわりで実施したこと、すなわち、支配方程式が次の時刻において成り立っていると仮定したことに加え、Euler 法に基づいていることから Euler 陰解法と呼ばれる。一般的に陰解法は陽解法と比較して解が発散しにくいという特徴がある。なお、陰解法では式 (H.8) 右辺に次の時刻 $i + 1$ での値が含まれているため、式 (H.8) の形のまま数値解析を実施することはできない。陰解法に基づいた数値解析を実施するには、一度 x^{i+1} について方程式を代数的に解くか、補足 H.2 に述べるような数値解析的な収束計算手法を用いる必要がある。

H.2 Newton-Rapson 法による釣合い方程式の収束計算

本節では、Newton-Rapson 法を用いた収束計算により、陰解法的に定式化した釣合い方程式 [式 (8.67)] をより厳密に満たす手法について述べる。なお、「より厳密に」と表現した理由は数値解析を行う上では少なからず数値誤差を伴うことになり、内力と外力の釣り合いを完全に満たすことはできないためである。Newton-Rapson 法とは非線形問題の近似解を反復計算により求める手法である。本手法を有限要素法の釣合い方程式に適用すれば、反復 1 回目における計算は次式のように書ける。

$${}^t[\mathbf{K}_V]\{\Delta \mathbf{U}^{0f}\}^{(1)} = \{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{ext}}\} + \{\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{app}}\} + {}^t\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{res}}\} \quad (\text{H.10})$$

$${}^{t+\Delta t}\{\mathbf{U}^{0f}\}^{(1)} = {}^t\{\mathbf{U}^{0f}\} + \{\Delta \mathbf{U}^{0f}\}^{(1)} \quad (\text{H.11})$$

$${}^{t+\Delta t}\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{res}}\}^{(1)} = {}^{t+\Delta t}\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{ext}}\} - {}^{t+\Delta t}\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{int}}\}^{(1)} \quad (\text{H.12})$$

ここで、 $(i)^{(j)}$ は反復回数 i における量であることを表す。式 (H.10)~(H.12) は、まず、式 (H.10) を所定の境界条件の下で解くことで得られる変位増分 $\{\Delta \mathbf{U}^{0f}\}^{(1)}$ を用いて式 (H.11) によって変形状態を更新し、次に、その変形状態 ${}^{t+\Delta t}\{\mathbf{U}^{0f}\}^{(1)}$ において計算される内力ベクトル ${}^{t+\Delta t}\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{int}}\}^{(1)}$ から再度残差力 ${}^{t+\Delta t}\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{res}}\}^{(1)}$ を求めることを意味する。さらに、反復 2 回目以降の計算は次式のように実行される。

$${}^{t+\Delta t}[\mathbf{K}_V]^{(i-1)}\{\Delta \mathbf{U}^{0f}\}^{(i)} = {}^{t+\Delta t}\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{res}}\}^{(i-1)} \quad (\text{H.13})$$

$${}^{t+\Delta t}\{\mathbf{U}^{0l}\}^{(i)} = {}^{t+\Delta t}\{\mathbf{U}^{0l}\}^{(i-1)} + \{\Delta\mathbf{U}^{0l}\}^{(i)} \dots\dots\dots (H.14)$$

$${}^{t+\Delta t}\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{res}}\}^{(i)} = {}^{t+\Delta t}\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{ext}}\} - {}^{t+\Delta t}\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{int}}\}^{(i)} \dots\dots\dots (H.15)$$

ここで、反復 2 回目以降の式 (H.13) による変位増分の計算では、外力増分ベクトル $\{\Delta\bar{\mathbf{F}}^{\text{ext}}\}$ および見かけの外力増分ベクトル $\{\Delta\bar{\mathbf{F}}^{\text{app}}\}$ を右辺に導入しないことに注意されたい。これは、反復 2 回目以降の計算においてはあくまで外力と内力の釣り合いをより厳密に満たすための修正を施しているだけであり、新たな外力に対する変形状態を計算するわけではないためである。以上のように反復 1 回目においては式 (H.10)~(H.12) を、反復 2 回目以降においては式 (H.13)~(H.15) を用いて変形状態を更新していくことで、時刻 $t + \Delta t$ における内力と外力の釣り合いをより厳密に満たす解を得ることが可能となる。ここで、Newton-Rapson 法による近似解法の模式図を図 H.1 に示す。同図より、反復計算によって変位が徐々に平衡解に収束していくことが確認できる。また、図 H.1 に示したように、増分計算を開始する基準時刻 t において外力と内力の釣り合いが成り立っている場合には式 (H.10) における $\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{res}}\}$ は理論上零となることに注意されたい。なお、後述の収束判定に関わらず、反復計算を 1 回のみ実施する場合、すなわち、式 (H.10)~(H.12) による計算のみを実施する場合には Newton-Rapson 法は 8.5 節で述べた釣り合い修正法と同様の解法に帰着する。

また、実際の数値解析では反復計算毎に得られる残差力ベクトル ${}^{t+\Delta t}\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{res}}\}^{(i)}$ を用いて収束判定、すなわち、残差力が十分に小さくなっているかの判定を実施する。十分な精度の解が得られている場合には反復計算を打ち切り、次の時間ステップの解析へと移行する。ここで、収束判定法の簡単な例を述べる。収束点では理論上は残差ベクトル ${}^{t+\Delta t}\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{res}}\}^{(i)}$ の全ての成分が零となるが、数値解析上は残差ベクトルの全成分が厳密に零となることはない。そこで、通常は残差力ベクトルをスカラ化し、許容誤差以下だった場合に収束したと見なす。例えば、次のような条件を満たす場合に反復計算を打ち切る方法が挙げられる。

$$\|{}^{t+\Delta t}\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{res}}\}^{(i)}\| < \varepsilon_r F_{\text{ref}} \dots\dots\dots (H.16)$$

ここで、 $\|{}^{t+\Delta t}\{\bar{\mathbf{F}}^{\text{res}}\}^{(i)}\|$ は残差力ベクトルの大きさ、 ε_r は許容誤差、 F_{ref} は基準節点力である。また、 F_{ref} の値は解析中に生じる節点力ベクトルの値を参考に決定することが好ましい。粘塑性解析の場合であれば、解析の非線形性に強く影響する見かけの節点外力ベクトルの大きさ $\|\{\Delta\bar{\mathbf{F}}^{\text{app}}\}\|$ を F_{ref} の値として採用する方法などが挙げられる。

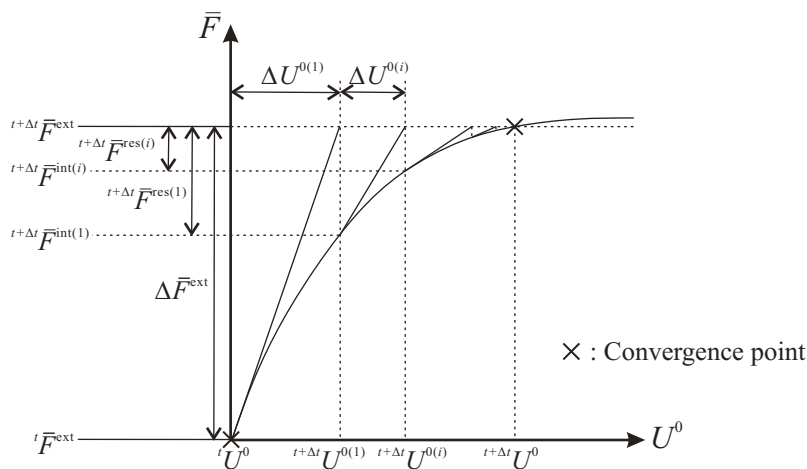


Fig. H.1 Schematic expression of Newton-Rapson method.

H.3 ヤコビ行列の行列式の計算

式 (8.20) は式 (8.54) で定義されるヤコビ行列 $[J]$ を用いれば、次式のように表記できる.

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial N^{0f}}{\partial x_1} \\ \frac{\partial N^{0f}}{\partial x_2} \\ \frac{\partial N^{0f}}{\partial x_3} \end{pmatrix} = [J]^{-T} \begin{pmatrix} \frac{\partial N^{0f}}{\partial r_1} \\ \frac{\partial N^{0f}}{\partial r_2} \\ \frac{\partial N^{0f}}{\partial r_3} \end{pmatrix} \dots\dots\dots (H.17)$$

式 (H.17) より、形状関数の物理座標系での微分を計算するにはヤコビ行列の転置行列を作成し、その逆行列を計算すればよいことがわかる. 一方、式 (8.52) および式 (8.53) に示した物理座標系から自然座標系への写像ではヤコビ行列の行列式 $\det J$ が必要となる. ここで、ヤコビ行列の行列式はその転置行列の行列式と等しいことが知られている. すなわち、

$$\det J = \det J^T \dots\dots\dots (H.18)$$

が成り立つ. したがって、実際の数値計算においてはヤコビ行列 $[J]$ そのものを作成する必要はなく、ヤコビ行列の転置行列 $[J]^T$ を作成し、その逆行列を計算することで式 (H.17) の計算を、逆行列の計算過程で得られる $\det J^T$ を用いて式 (8.52) または式 (8.53) の計算を実施すればよい.

H.4 一次元の Gauss 積分と多重積分

表 H.1 に自然座標系における一次元の Gauss 積分の積分点の座標および重みを示す. ただし、表 H.1 における Order はその Gauss 積分点数 n_{int} を用いた場合に精度保証される被積分関数の多項式の次数を表す.

さらに、表 H.1 のような一次元の数値積分の情報を用いて多重積分を実施すれば、自然座標系における六面体要素の体積積分および四角形要素の面積積分がそれぞれ式 (H.19) および式 (H.20) のように得られる.

$$\int_{V^E} f(\mathbf{x}) dv = \int_{V^r} f(\mathbf{r}) \det J dv^r = \sum_{k=1}^{n_{\text{int}}} \sum_{j=1}^{n_{\text{int}}} \sum_{i=1}^{n_{\text{int}}} w^i w^j w^k f(r_1^i, r_2^j, r_3^k) \det J \dots\dots\dots (H.19)$$

$$\int_{A^E} f(\mathbf{x}) da = \int_{A^r} f(\mathbf{r}) \det J da^r = \sum_{j=1}^{n_{\text{int}}} \sum_{i=1}^{n_{\text{int}}} w^i w^j f(r_1^i, r_2^j) \det J \dots\dots\dots (H.20)$$

また、式 (H.19) および式 (H.20) をそれぞれ式 (8.52) 式 (8.53) と比較すれば、六面体要素の体積積分および四角形要素の面積積分における積分点数、積分点座標および積分点での重みが一次元の数値積分の情報のみから算出できることがわかる. 例えば、表 8.1(b) に示した 8 節点六面体の体積積分に用いる各値は表 H.1 の Order が 3 の Gauss 積分を用いた 3 重積分の値に対応している. ただし、表 8.1(a) に示したような四面体要素または三角形要素の Gauss 積分点の座標および重みは表 H.1 の値のみから直接算出できない. 二次元三角形要素の面積積分に必要な Gauss 積分点の座標値および重みは表 H.2 のように与えられる. ただし、各要素の自然座標系での節点座標は図 H.2 のように与えられるものとする.

H.5 四角形要素の積分点数と次数低減積分

補足 H.4 で述べたように、四角形要素の領域積分の積分点数は 1 次元の数値積分を 2 重に行う際に必要な積分点数として算出可能である. 例えば、四角形 2 次要素 (8 節点, 9 節点要素) の場合に解析精度を保証する

Table H.1 Coordinates and weights at sampling points of one-dimensional gaussian integration⁽¹³¹⁾.

Order	Number of sampling point n_{int}	Coordinates r^i	Weight w^i
1	1	0.00000 00000 00000	2.00000 00000 00000
3	2	$\pm 0.57735 02691 89626$	1.00000 00000 00000
5	3	$\pm 0.77459 66692 41483$ 0.00000 00000 00000	0.55555 55555 55556 0.88888 88888 88889
7	4	$\pm 0.86113 63115 94053$ $\pm 0.33998 10435 84856$	0.34785 48451 37454 0.65214 51548 62546

Table H.2 Coordinates and weights at sampling points of gaussian integration for two-dimensional triangular elements⁽¹³⁰⁾⁽¹⁴⁶⁾.

(a) 3-node triangular element ($n_A = 1$)

Sampling point i	Coordinates r_1^i r_2^i		Weight w_A^i
1	0.33333 33333 33333	0.33333 33333 33333	0.50000 00000 00000

(b) 6-node triangular element ($n_A = 3$)

Sampling point i	Coordinates r_1^i r_2^i		Weight w_A^i
1	0.16666 66666 66667	0.16666 66666 66667	0.16666 66666 66667
2	0.66666 66666 66667	0.16666 66666 66667	0.16666 66666 66667
3	0.16666 66666 66667	0.66666 66666 66667	0.16666 66666 66667

(c) 10-node triangular element ($n_A = 7$)

Sampling point i	Coordinates r_1^i r_2^i		Weight w_A^i
1	0.10128 65073 23456	0.10128 65073 23456	0.06296 95902 72413
2	0.79742 69853 53087	0.10128 65073 23456	0.06296 95902 72413
3	0.10128 65073 23456	0.79742 69853 53087	0.06296 95902 72413
4	0.47014 20641 05115	0.05971 58717 89770	0.06619 70763 94253
5	0.47014 20641 05115	0.47014 20641 05115	0.06619 70763 94253
6	0.05971 58717 89770	0.47014 20641 05115	0.06619 70763 94253
7	0.33333 33333 33333	0.33333 33333 33333	0.11250 00000 00000

Table H.3 Number of sampling points of gaussian integration for two-dimensional quadrilateral elements.

Element type	n_A	n_A^R	n_A^{SR}
4-node element	4	1	5
8-node element	9	4	13
9-node element	9	4	13
12-node element	16	9	25
16-node element	16	9	25

ために必要な 1 次元の Gauss 積分の積分点数 n_{int} は 3 であるため、面積積分に必要な積分点数は $3^2 = 9$ 個となる。このように内挿関数の積分を正しく表現できるように積分次数を決定した積分は完全積分と呼ばれる。これに対して、あえて 1 次元の数値積分の積分点数を完全積分の積分点数より減少させて積分する手法を次数低減積分と呼ぶ。次数低減積分は完全積分によって剛性が過大に評価され、非常に硬い解が得られるロッキングという現象を回避するために用いられる。しかしながら、次数低減積分を用いた場合、剛体モード以外にエネルギーが零と評価される擬似モード⁽⁵⁸⁾が剛性マトリックスに含まれ、境界条件によっては明らかに虚為の解が得られるため、その適用には注意を要する。なお、8 節点四角形要素などの次数低減積分を用いた解析は単純に計算コストを削減する目的から採用される場合もある。さらに、ロッキング現象および擬似モードの双方の発生を抑制する積分方法としてロッキングの原因となる項についてのみ次数低減積分を実施し、その他の項については完全積分を実施する選択形次数低減積分という積分手法も存在する。ただし、選択形次数低減積分では次数低減積分および完全積分の双方の積分点の情報を必要とするため、計算機の使用メモリおよび計算コストが増大するという難点がある。

最後に、四角形要素の面積積分に必要な積分点数を表 H.3 にまとめる。ここで、 n_A 、 n_A^R および n_A^{SR} はそれぞれ完全積分、次数低減積分および選択形次数低減積分を実施するのに必要な積分点数である。

H.6 平面要素を用いた場合の Jaumann 応力速度

面外スピン W_{23} および W_{31} が零であるとした場合の Cauchy 応力 \mathbf{T} の物質速度および Jaumann 速度の各成分の関係は次式ようになる。

$$\begin{pmatrix} \dot{T}_{11} - 2W_{12}T_{12} \\ \dot{T}_{22} + 2W_{12}T_{12} \\ \dot{T}_{33} \\ \dot{T}_{12} - W_{12}(T_{11} - T_{22}) \\ \dot{T}_{23} + W_{12}T_{31} \\ \dot{T}_{31} - W_{12}T_{23} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \overset{\circ}{T}_{11} \\ \overset{\circ}{T}_{22} \\ \overset{\circ}{T}_{33} \\ \overset{\circ}{T}_{12} \\ \overset{\circ}{T}_{23} \\ \overset{\circ}{T}_{31} \end{pmatrix} \dots \dots \dots \quad (\text{H.21})$$

H.7 平面応力条件の構成式のマトリックス表示

本節ではマクロ構造の解析に平面応力条件を適用した場合の構成式のマトリックス表記について述べる。なお、8.6 節と異なり、マクロ構造の構成式のみに対して平面応力条件によるマトリックスの縮約を実施する理由は、板厚方向である y_3 方向にも周期性が仮定されているミクロ構造に対しては薄板形状を仮定する平面応力条件が不適合となるためである。ここで、式 (8.21) を参考に三次元問題におけるマクロ構造の構成式をマトリックス表記すれば次式のようなになる。

$$\begin{Bmatrix} \overset{\circ}{T}_{11}^H \\ \overset{\circ}{T}_{22}^H \\ \overset{\circ}{T}_{33}^H \\ \overset{\circ}{T}_{12}^H \\ \overset{\circ}{T}_{23}^H \\ \overset{\circ}{T}_{31}^H \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111}^H & C_{1122}^H & C_{1133}^H & C_{1112}^H & C_{1123}^H & C_{1131}^H \\ C_{2211}^H & C_{2222}^H & C_{2233}^H & C_{2212}^H & C_{2223}^H & C_{2231}^H \\ C_{3311}^H & C_{3322}^H & C_{3333}^H & C_{3312}^H & C_{3323}^H & C_{3331}^H \\ C_{1211}^H & C_{1222}^H & C_{1233}^H & C_{1212}^H & C_{1223}^H & C_{1231}^H \\ C_{2311}^H & C_{2322}^H & C_{2333}^H & C_{2312}^H & C_{2323}^H & C_{2331}^H \\ C_{3111}^H & C_{3122}^H & C_{3133}^H & C_{3112}^H & C_{3123}^H & C_{3131}^H \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_{11}^0 \\ D_{22}^0 \\ D_{33}^0 \\ 2D_{12}^0 \\ 2D_{23}^0 \\ 2D_{31}^0 \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} R_{11}^H \\ R_{22}^H \\ R_{33}^H \\ R_{12}^H \\ R_{23}^H \\ R_{31}^H \end{Bmatrix} \dots \dots \dots \quad (\text{H.22})$$

また、平面応力条件では次の 2 通りの定式化が考えられる。すなわち、面外スピン W_{23}^0 および W_{31}^0 に加え、 D_{23}^0 、 D_{31}^0 および T_{33}^H を零とする定式化ならびに面外スピン W_{23}^0 および W_{31}^0 に加え、 T_{23}^H 、 T_{31}^H および T_{33}^H を零とする定式化である。以下にそれぞれの場合の構成式マトリックスの縮約について述べる。なお、平面応力解析を実施する場合の構成式マトリックス以外のマクロ構造の各マトリックスの具体形は 8.6 節に示したものと同様である。

(a) 面外せん断変形を零とする定式化

いま、面外せん断変形速度 D_{23}^0 、 D_{31}^0 が零であることから式 (H.22) を次式のように縮約できる。

$$\begin{Bmatrix} \overset{\circ}{T}_{11}^H \\ \overset{\circ}{T}_{22}^H \\ \overset{\circ}{T}_{33}^H \\ \overset{\circ}{T}_{12}^H \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111}^H & C_{1122}^H & C_{1133}^H & C_{1112}^H \\ C_{2211}^H & C_{2222}^H & C_{2233}^H & C_{2212}^H \\ C_{3311}^H & C_{3322}^H & C_{3333}^H & C_{3312}^H \\ C_{1211}^H & C_{1222}^H & C_{1233}^H & C_{1212}^H \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_{11}^0 \\ D_{22}^0 \\ D_{33}^0 \\ 2D_{12}^0 \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} R_{11}^H \\ R_{22}^H \\ R_{33}^H \\ R_{12}^H \end{Bmatrix} \dots \dots \dots \quad (\text{H.23})$$

なお、式 (H.23) は軸対称問題における構成式のマトリックス表記に対応しており、さらに、面外垂直変形速度 D_{33} も零であるとした場合には平面ひずみ条件の構成式マトリックス [(8.79)] に帰着する。ここで、面外垂直応力が常に零、すなわち、 $T_{33}^H = \dot{T}_{33}^H = 0$ という条件を式 (H.23) に適用すれば、 D_{33}^0 が次式のように得られる。

$$D_{33}^0 = -\frac{1}{C_{3333}^H} (C_{3311}^H D_{11}^0 + C_{3322}^H D_{22}^0 + 2C_{3312}^H D_{12}^0 - R_{33}^H) \dots \dots \dots \quad (\text{H.24})$$

式 (H.24) を式 (H.23) に代入すれば、仮想仕事率に寄与する応力速度成分を

$$\begin{Bmatrix} \overset{\circ}{T}_{11}^H \\ \overset{\circ}{T}_{22}^H \\ \overset{\circ}{T}_{12}^H \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{C}_{1111}^H & \hat{C}_{1122}^H & \hat{C}_{1112}^H \\ \hat{C}_{2211}^H & \hat{C}_{2222}^H & \hat{C}_{2212}^H \\ \hat{C}_{1211}^H & \hat{C}_{1222}^H & \hat{C}_{1212}^H \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_{11}^0 \\ D_{22}^0 \\ 2D_{12}^0 \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} \hat{R}_{11}^H \\ \hat{R}_{22}^H \\ \hat{R}_{12}^H \end{Bmatrix} \dots \dots \dots \quad (\text{H.25})$$

のように表記できる。ただし、見かけの構成則テンソル \hat{C}_{ijkl}^H および \hat{R}_{ij}^H は次式のように定義される。

$$\hat{C}_{ijkl}^H \equiv C_{ijkl}^H - \frac{C_{ij33}^H}{C_{3333}^H} C_{33kl}^H, \quad \hat{R}_{ij}^H \equiv R_{ij}^H - \frac{C_{ij33}^H}{C_{3333}^H} R_{33}^H \dots\dots\dots (H.26)$$

式 (H.25) をマクロ構造のマトリックス表記された弱形式の釣合い方程式に適用すれば、多くの現象論的構成式を用いた場合、面外応力成分 T_{23}^H , T_{31}^H および T_{33}^H が零となる解析を実施可能である。しかしながら、構成式の弾性変形または非弾性変形に面外異方性が存在する場合には、必ずしも T_{23}^H および T_{31}^H が零とならない。特に、結晶塑性形の構成式を用いた場合には平面すべり問題を仮定しない限り、非弾性変形が面外異方性を有することになる。このような場合に面外応力成分を零とするためには、次に示すような定式化を行う必要がある。

(b) 面外せん断応力を零とする定式化

はじめに式 (H.22) を次の 2 式に分離する。

$$\begin{Bmatrix} \dot{T}_{11}^H \\ \dot{T}_{22}^H \\ \dot{T}_{12}^H \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111}^H & C_{1122}^H & C_{1112}^H \\ C_{2211}^H & C_{2222}^H & C_{2212}^H \\ C_{1211}^H & C_{1222}^H & C_{1212}^H \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_{11}^0 \\ D_{22}^0 \\ 2D_{12}^0 \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} C_{1133}^H & C_{1123}^H & C_{1131}^H \\ C_{2233}^H & C_{2223}^H & C_{2231}^H \\ C_{1233}^H & C_{1223}^H & C_{1231}^H \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_{33}^0 \\ 2D_{23}^0 \\ 2D_{31}^0 \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} R_{11}^H \\ R_{22}^H \\ R_{12}^H \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (H.27)$$

$$\begin{Bmatrix} \dot{T}_{33}^H \\ \dot{T}_{23}^H \\ \dot{T}_{31}^H \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{3311}^H & C_{3322}^H & C_{3312}^H \\ C_{2311}^H & C_{2322}^H & C_{2312}^H \\ C_{3111}^H & C_{3122}^H & C_{3112}^H \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_{11}^0 \\ D_{22}^0 \\ 2D_{12}^0 \end{Bmatrix} + \begin{bmatrix} C_{3333}^H & C_{3323}^H & C_{3331}^H \\ C_{2333}^H & C_{2323}^H & C_{2331}^H \\ C_{3133}^H & C_{3123}^H & C_{3131}^H \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_{33}^0 \\ 2D_{23}^0 \\ 2D_{31}^0 \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} R_{33}^H \\ R_{23}^H \\ R_{31}^H \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (H.28)$$

ここで、式 (H.28) に面外応力が常に零、すなわち、 $T_{23}^H = T_{31}^H = T_{33}^H = \dot{T}_{23}^H = \dot{T}_{31}^H = \dot{T}_{33}^H = 0$ および面外スピンの零という条件を適用すれば、式 (H.28) の左辺の 3 成分が零となる。さらに、同式を面外変形速度成分 D_{33}^0 , D_{23}^0 および D_{31}^0 について解けば、

$$\begin{Bmatrix} D_{33}^0 \\ 2D_{23}^0 \\ 2D_{31}^0 \end{Bmatrix} = - \begin{bmatrix} C_{3333}^H & C_{3323}^H & C_{3331}^H \\ C_{2333}^H & C_{2323}^H & C_{2331}^H \\ C_{3133}^H & C_{3123}^H & C_{3131}^H \end{bmatrix}^{-1} \left(\begin{bmatrix} C_{3311}^H & C_{3322}^H & C_{3312}^H \\ C_{2311}^H & C_{2322}^H & C_{2312}^H \\ C_{3111}^H & C_{3122}^H & C_{3112}^H \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_{11}^0 \\ D_{22}^0 \\ 2D_{12}^0 \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} R_{33}^H \\ R_{23}^H \\ R_{31}^H \end{Bmatrix} \right) \dots\dots\dots (H.29)$$

となる。式 (H.29) を式 (H.27) に代入すれば、仮想仕事率に寄与する応力速度成分が

$$\begin{Bmatrix} \dot{T}_{11}^H \\ \dot{T}_{22}^H \\ \dot{T}_{12}^H \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{C}_{1111}^H & \hat{C}_{1122}^H & \hat{C}_{1112}^H \\ \hat{C}_{2211}^H & \hat{C}_{2222}^H & \hat{C}_{2212}^H \\ \hat{C}_{1211}^H & \hat{C}_{1222}^H & \hat{C}_{1212}^H \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_{11}^0 \\ D_{22}^0 \\ 2D_{12}^0 \end{Bmatrix} - \begin{Bmatrix} \hat{R}_{11}^H \\ \hat{R}_{22}^H \\ \hat{R}_{12}^H \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (H.30)$$

のように式 (H.25) と同様の形式で得られる。ただし、式 (H.25) とは見かけの構成則マトリックスの成分が異なっており、それぞれ次式のように定義される。

$$\begin{bmatrix} \hat{C}_{1111}^H & \hat{C}_{1122}^H & \hat{C}_{1112}^H \\ \hat{C}_{2211}^H & \hat{C}_{2222}^H & \hat{C}_{2212}^H \\ \hat{C}_{1211}^H & \hat{C}_{1222}^H & \hat{C}_{1212}^H \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} C_{1111}^H & C_{1122}^H & C_{1112}^H \\ C_{2211}^H & C_{2222}^H & C_{2212}^H \\ C_{1211}^H & C_{1222}^H & C_{1212}^H \end{bmatrix} - [A] \begin{bmatrix} C_{3311}^H & C_{3322}^H & C_{3312}^H \\ C_{2311}^H & C_{2322}^H & C_{2312}^H \\ C_{3111}^H & C_{3122}^H & C_{3112}^H \end{bmatrix} \dots\dots\dots (H.31)$$

$$\begin{Bmatrix} \hat{R}_{11}^H \\ \hat{R}_{22}^H \\ \hat{R}_{12}^H \end{Bmatrix} \equiv \begin{Bmatrix} R_{11}^H \\ R_{22}^H \\ R_{12}^H \end{Bmatrix} - [A] \begin{Bmatrix} R_{33}^H \\ R_{23}^H \\ R_{31}^H \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (H.32)$$

$$[A] \equiv \begin{bmatrix} C_{1133}^H & C_{1123}^H & C_{1131}^H \\ C_{2233}^H & C_{2223}^H & C_{2231}^H \\ C_{1233}^H & C_{1223}^H & C_{1231}^H \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_{3333}^H & C_{3323}^H & C_{3331}^H \\ C_{2333}^H & C_{2323}^H & C_{2331}^H \\ C_{3133}^H & C_{3123}^H & C_{3131}^H \end{bmatrix}^{-1} \dots\dots\dots (H.33)$$

式 (H.30) には拘束条件として $T_{23}^H = T_{31}^H = T_{33}^H = 0$ が導入されているため、どのような構成式を用いた場合にも面外応力が零となる解析を実施可能である。ただし、平面応力条件の場合には平面ひずみ条件と異なり、数値解析上、面外応力成分に直接零を代入しない。実際には、式 (H.29) によって計算された面外変形速度を用いて応力を更新することで、面外応力が零となるようにしているため、計算誤差によって面外応力が少なからず生じる。このような誤差が許容できない場合には、本節で行った定式化において面外応力速度に零ではなくその解析ステップまでに生じた面外応力を打ち消すような値を代入することで誤差を補正することが望ましい。

H.8 平面要素の種類

平面要素には 8.6.1 項に示した 3 節点三角形要素に加え、図 H.2 に示すような種類の要素が存在する。

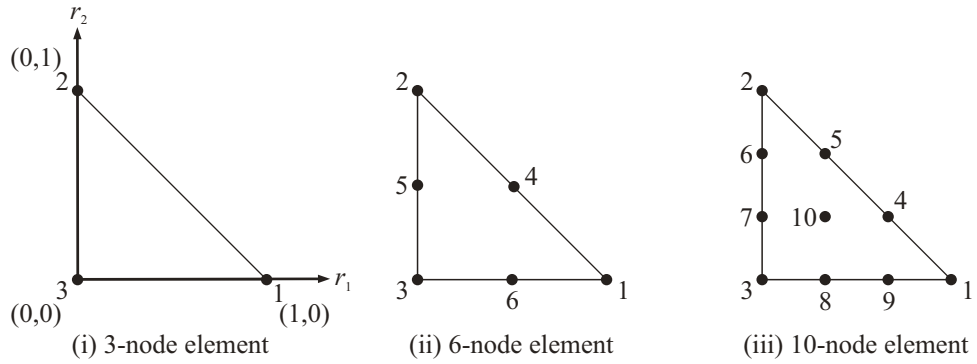
ここで、三角形または四角形の頂点上にのみ節点が配置されている要素、すなわち、3 節点三角形要素および 4 節点四角形要素は式 (H.34) および式 (H.35) からわかるように形状関数が各自然座標の 1 次関数のみで記述されることから 1 次要素と呼ばれる。特に、8.6.1 項で述べたように、3 節点三角形要素は形状関数の座標での 1 階微分が定数となることから定ひずみ要素と呼ばれる。一方、4 節点四角形要素は 1 次要素ではあるものの、その形状関数の 1 階微分は定数とはならず、要素内でのひずみ分布を表現可能である。このような理由から 4 節点四角形要素は双 1 次要素と呼ばれる。

また、三角形および四角形の各頂点に加え、各辺を等間隔に分割する点または要素内部にも節点を加えた要素は高次要素と呼ばれる。例えば、図 H.2(a)-(ii) の 6 節点三角形要素は三角形 2 次要素、図 H.2(a)-(iii) の 10 節点三角形要素は三角形 3 次要素と呼ばれる。一方、四角形の 2 次要素 [図 H.2(b)-(ii),(iii)] および 3 次要素 [図 H.2(b)-(iv),(v)] には要素内部に節点を有さないものおよび要素内部に節点を有するものの 2 通りが存在する。高次要素の中でも前者は *serendipity* 要素、後者は *Lagrange* 要素と呼ばれる。*Lagrange* 要素は *Lagrange* 多項式に基づいて形状関数を構成可能であるが、*serendipity* 要素の形状関数は 8.1.4 項に述べたような形状関数の性質を満たすよう試行的に決定されたものである。一般に、*serendipity* 要素は内部節点を有さないため、*Lagrange* 要素と比較して計算コストを抑えられるという利点がある。以上のような高次要素は 1 次要素と比較して自由度数および積分点数が増加するため計算コストが増大する代わりに計算精度に優れる。特に、辺上にも節点を有し、形状関数が高次となることから要素内での曲げを表現でき、任意の幾何形状に適用しやすいという特徴がある。

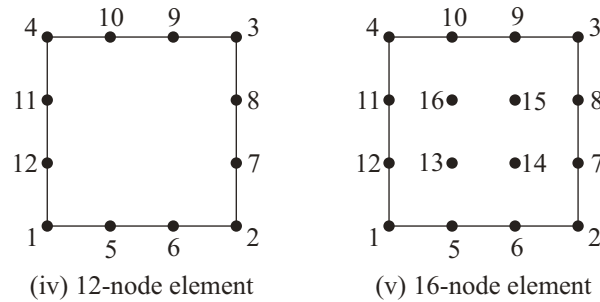
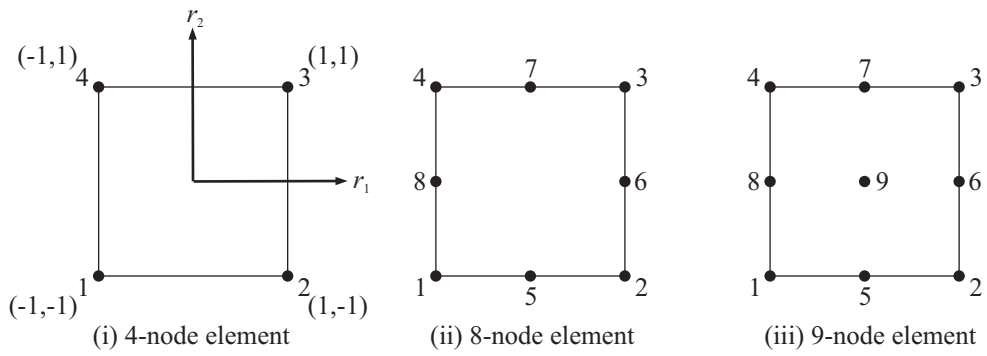
最後に、各平面要素の自然座標系における形状関数を以下に列挙する⁽¹³⁰⁾⁽¹³¹⁾。ただし、三角形要素の形状関数における r_3 は $r_3 \equiv 1 - r_1 - r_2$ である。まず、1 次要素、すなわち、3 節点三角形要素および 4 節点四角形要素の自然座標系での形状関数をそれぞれ式 (H.34) および式 (H.35) に示す。

$$\left. \begin{aligned} N^{0^1} &= r_1 \\ N^{0^2} &= r_2 \\ N^{0^3} &= r_3 \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (H.34)$$

$$\left. \begin{aligned} N^{0^1} &= \frac{1}{4}(1-r_1)(1-r_2) \\ N^{0^2} &= \frac{1}{4}(1+r_1)(1-r_2) \\ N^{0^3} &= \frac{1}{4}(1+r_1)(1+r_2) \\ N^{0^4} &= \frac{1}{4}(1-r_1)(1+r_2) \end{aligned} \right\} \dots\dots\dots (H.35)$$



(a) Triangular elements



(b) Quadrilateral elements

Fig. H.2 Two-dimensional continuum elements.

次に、2 次要素、すなわち、6 節点三角形要素、8 節点四角形要素および 9 節点四角形要素の自然座標系における形状関数をそれぞれ式 (H.36)、(H.37) および式 (H.38) に示す。

$$\left. \begin{array}{ll} N^{01} = r_1(2r_1 - 1) & N^{04} = 4r_1r_2 \\ N^{02} = r_2(2r_2 - 1) & N^{05} = 4r_2r_3 \\ N^{03} = r_3(2r_3 - 1) & N^{06} = 4r_3r_1 \end{array} \right\} \dots\dots\dots (H.36)$$

$$\left. \begin{array}{ll} N^{01} = \frac{1}{4}(1 - r_1)(1 - r_2)(-1 - r_1 - r_2) & N^{05} = \frac{1}{2}(1 - r_1^2)(1 - r_2) \\ N^{02} = \frac{1}{4}(1 + r_1)(1 - r_2)(-1 + r_1 - r_2) & N^{06} = \frac{1}{2}(1 - r_2^2)(1 + r_1) \\ N^{03} = \frac{1}{4}(1 + r_1)(1 + r_2)(-1 + r_1 + r_2) & N^{07} = \frac{1}{2}(1 - r_1^2)(1 + r_2) \\ N^{04} = \frac{1}{4}(1 - r_1)(1 + r_2)(-1 - r_1 + r_2) & N^{08} = \frac{1}{2}(1 - r_2^2)(1 - r_1) \end{array} \right\} \dots\dots\dots (H.37)$$

$$\left. \begin{array}{ll} N^{01} = \frac{1}{4}(1 - r_1)(1 - r_2)r_1r_2 & N^{05} = -\frac{1}{2}(1 - r_1^2)(1 - r_2)r_2 \\ N^{02} = -\frac{1}{4}(1 + r_1)(1 - r_2)r_1r_2 & N^{06} = \frac{1}{2}(1 - r_2^2)(1 + r_1)r_1 \\ N^{03} = \frac{1}{4}(1 + r_1)(1 + r_2)r_1r_2 & N^{07} = \frac{1}{2}(1 - r_1^2)(1 + r_2)r_2 \\ N^{04} = -\frac{1}{4}(1 - r_1)(1 + r_2)r_1r_2 & N^{08} = -\frac{1}{2}(1 - r_2^2)(1 - r_1)r_1 \\ & N^{09} = (1 - r_1^2)(1 - r_2^2) \end{array} \right\} \dots\dots\dots (H.38)$$

さらに、3 次要素、すなわち、10 節点三角形要素、12 節点四角形要素および 16 節点四角形要素の自然座標系における形状関数をそれぞれ式 (H.39)、(H.40) および式 (H.41) に示す。

$$\left. \begin{array}{lll} N^{01} = \frac{9}{2}r_1(r_1 - \frac{1}{3})(r_1 - \frac{2}{3}) & N^{04} = \frac{27}{2}r_1r_2(r_1 - \frac{1}{3}) & N^{07} = \frac{27}{2}r_2r_3(r_3 - \frac{1}{3}) \\ N^{02} = \frac{9}{2}r_2(r_2 - \frac{1}{3})(r_2 - \frac{2}{3}) & N^{05} = \frac{27}{2}r_1r_2(r_2 - \frac{1}{3}) & N^{08} = \frac{27}{2}r_1r_3(r_3 - \frac{1}{3}) \\ N^{03} = \frac{9}{2}r_3(r_3 - \frac{1}{3})(r_3 - \frac{2}{3}) & N^{06} = \frac{27}{2}r_2r_3(r_2 - \frac{1}{3}) & N^{09} = \frac{27}{2}r_1r_3(r_1 - \frac{1}{3}) \\ & N^{010} = 27r_1r_2r_3 & \end{array} \right\} \dots\dots\dots (H.39)$$

$$\left. \begin{array}{ll} N^{01} = \frac{1}{32}(1 - r_1)(1 - r_2)(-10 + 9r_1^2 + 9r_2^2) & \\ N^{02} = \frac{1}{32}(1 + r_1)(1 - r_2)(-10 + 9r_1^2 + 9r_2^2) & \\ N^{03} = \frac{1}{32}(1 + r_1)(1 + r_2)(-10 + 9r_1^2 + 9r_2^2) & \\ N^{04} = \frac{1}{32}(1 - r_1)(1 + r_2)(-10 + 9r_1^2 + 9r_2^2) & \\ N^{05} = \frac{9}{32}(1 - 3r_1)(1 - r_1^2)(1 - r_2) & N^{09} = \frac{9}{32}(1 + 3r_1)(1 - r_1^2)(1 + r_2) \\ N^{06} = \frac{9}{32}(1 + 3r_1)(1 - r_1^2)(1 - r_2) & N^{010} = \frac{9}{32}(1 - 3r_1)(1 - r_1^2)(1 + r_2) \\ N^{07} = \frac{9}{32}(1 - 3r_2)(1 - r_2^2)(1 + r_1) & N^{011} = \frac{9}{32}(1 + 3r_2)(1 - r_2^2)(1 - r_1) \\ N^{08} = \frac{9}{32}(1 + 3r_2)(1 - r_2^2)(1 + r_1) & N^{012} = \frac{9}{32}(1 - 3r_2)(1 - r_2^2)(1 - r_1) \end{array} \right\} \dots\dots\dots (H.40)$$

$$\left. \begin{array}{llll} N^{01} = H^1(r_1)H^1(r_2) & N^{05} = H^3(r_1)H^1(r_2) & N^{09} = H^4(r_1)H^2(r_2) & N^{013} = H^3(r_1)H^3(r_2) \\ N^{02} = H^2(r_1)H^1(r_2) & N^{06} = H^4(r_1)H^1(r_2) & N^{010} = H^3(r_1)H^2(r_2) & N^{014} = H^4(r_1)H^3(r_2) \\ N^{03} = H^2(r_1)H^2(r_2) & N^{07} = H^2(r_1)H^3(r_2) & N^{011} = H^1(r_1)H^4(r_2) & N^{015} = H^4(r_1)H^4(r_2) \\ N^{04} = H^1(r_1)H^2(r_2) & N^{08} = H^2(r_1)H^4(r_2) & N^{012} = H^1(r_1)H^3(r_2) & N^{016} = H^3(r_1)H^4(r_2) \end{array} \right\} \dots \quad (\text{H.41})$$

ただし, $H^1(r_i) \sim H^4(r_i)$ は次式のように与えられる.

$$\left. \begin{array}{l} H^1(r_i) = -\frac{1}{16}(1-r_i)(1-9r_i^2) \\ H^2(r_i) = -\frac{1}{16}(1+r_i)(1-9r_i^2) \\ H^3(r_i) = \frac{9}{16}(1-3r_i)(1-r_i^2) \\ H^4(r_i) = \frac{9}{16}(1+3r_i)(1-r_i^2) \end{array} \right\} \dots \quad (\text{H.42})$$

補足 I

第 9 章の補足

I.1 本論文の解析に要する時間

本研究では基本的に均質化法を用いてマイクロ-マクロ連成解析を実施しているため、試験片形状の単純な解析であっても通常マイクロ構造を考慮しない FEM 解析と比較して多くの計算コストが必要となる。例えば、9.1 節や 9.2 節に掲載しているような平面ひずみ条件下での試験片の二次元解析ではマクロ試験片を 1/4 モデルに簡略化したうえで、約 5~6 時間の計算時間を要する。一方、9.6.3 項に掲載している三次元問題に拡張した結晶性ポリマの解析ではマクロ試験片を 1/8 モデルに簡略化したうえで、1 日~1 日半程度の計算時間が必要となる。ただし、これらの計算時間はあくまで目安の時間であり、当然のことながら、解析モデルのメッシュの分割数、要素の種類、時間増分や最大変形率などによって計算に要する時間は大きく変化することに注意されたい。なお、使用した計算機は Xeon 3.10 GHz の CPU が 16 コア搭載されたワークステーションであり、OpenMP を用いてマクロ評価点についての計算を 16 スレッドで並列化している。

I.2 本モデルの材料定数の総数

2 章~7 章までに構築した材料モデル全体での材料定数をまとめて表記すれば表 I.1 のようになり、その総数は 34 個である。ただし、流れ応力 $g^{(a)}$ は結晶相のすべり系の数と同数存在する。よって、本研究の場合、平面単すべり問題では 1 つ、三次元すべり問題では 8 つの流れ応力値が必要となる。ここで、表 I.1 においては各材料定数を非晶相の変形、結晶相の変形およびクレーズ進展の表現に必要な材料定数にそれぞれ分類して表記するとともに応力-ひずみ応答およびクレーズ発展量の制御において主に変更して用いるものを [] の中に、多くの場合変更する必要がないものを () の中に表記している。表 I.1 からわかるように、本研究においては多様な種類のポリマに適用できるように、一般性を持たせるためにあえて変数として定義している材料定数も多いため、実際の解析において同定する必要がある材料定数の数は全体の半数程度であると言える。また、こ

Table I.1 Material constants and numerical parameters in material models of ductile polymer.

Deformation in glassy phase	[$E_0, \nu_0, \tau_{0H}, \varpi_0, a_0, a_{eq}$] ($\dot{\gamma}_{0H}, \zeta, \alpha_p, \alpha_0, \alpha_{eq}, S_0, \beta_1, \beta_2, \beta_3, \beta_4, \beta_5$)
Deformation in crystalline phase	[$E_0, \nu_0, \Delta F_0, \kappa, g^{(a)}$] ($\psi_0, \dot{\gamma}_{0E}$)
Craze evolution	[$n_r, g_r, \gamma_c, C_1, C_2$] ($\omega^*, D_1, D_2, p_1, p_2$)

これらの材料定数の同定手法については補足 I.3 を参照されたい。なお、表 I.1 において () 内に表記した材料定数であっても一切変更しないわけではないことに注意されたい。例えば、 α_p は降伏応力の静水圧応力依存性を、 $\beta_1 \sim \beta_5$ は除荷時の非線形ひずみ回復を制御する際に変更することになる。

I.3 材料定数の同定手順

本節では、表 I.1 の [] の中に記した材料定数群についてその具体的な値の決定手順を結晶性ポリマの場合を例に述べる。なお、以下の材料定数の決定手順はあくまで一例であり、必ずしも以下のとおりに材料定数を同定する必要はないことを付記しておく。

- (1) まず、弾性変形場に対する材料定数 E_0 および ν_0 を、実験的に測定値が得られている場合にはその値から、得られていない場合には応力-ひずみ応答の弾性変形領域における直線の傾きが実験値と一致するよう決定する。
- (2) 次に、結晶相の非弾性変形の材料定数を決定する。このとき、結晶相のひずみ速度依存性が既知であれば、 κ および ΔF_0 についてはそれぞれ式 (5.55) および式 (5.56) から算出する。また、流れ応力 $g^{(a)}$ については結晶相単相のすべり抵抗の測定結果⁽¹⁴⁷⁾ または分子動力学法による検討⁽¹⁴⁸⁾ などから与えることが望ましい。
- (3) さらに、非晶相の非弾性変形の材料定数を巨視的な応力-ひずみ曲線が実験値と一致するよう決定する。なお、図 I.1 に示すように、 τ_{0H} は応力-ひずみ曲線の非弾性変形領域の応力値全体を、 a_0 および a_{eq} はそれぞれ降伏応力およびひずみ軟化後の応力値を変化させる役割を有している。また、 ϖ_0 は式 (5.3) および式 (5.4) からわかるように Hasan-Boyce の非弾性応答則の内部変数の発展量を決定しているため、図 I.1 のよう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が生じる早さに影響を与える。したがって、これらの材料定数の効果を適切に組み合わせることによって、多くの種類のポリマの応力-ひずみ応答に比較的柔軟に対応可能である。
- (4) 最後に、クレーズ発展式中の材料定数を決定する。ここで、 n_r および g_r はクレーズ発生量およびクレーズ成長量そのものを変化させる。 C_1 および C_2 は図 6.2(a) に示したように、主にクレーズ進展のひずみ速度依存性を変化させる。また、配向硬化ひずみ γ_c は真応力-真ひずみ曲線上において配向硬化が生じるひずみ値を参考に決定すればよい。ただし、クレーズ発展式のひずみ依存項における γ_a は

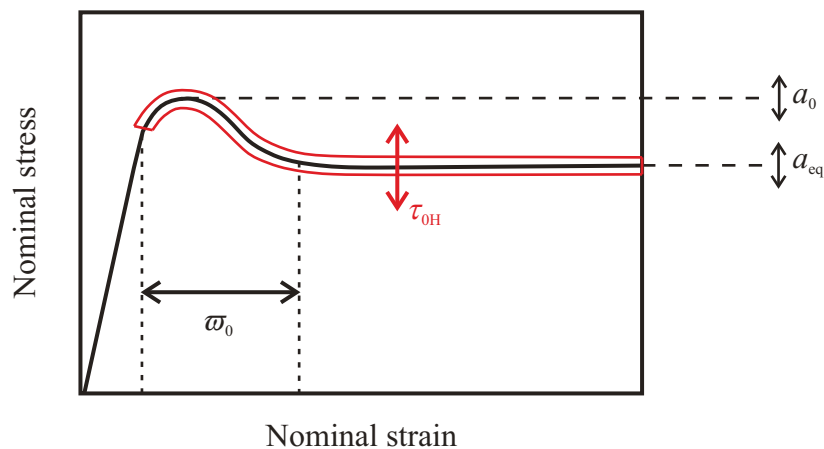


Fig. I.1 Effect of material constants in inelastic response law of Hasan and Boyce on nominal stress-strain curve .

$\gamma_a = \sum_a \gamma^{(a)}$ で定義されていることに注意されたい。なお、9.5.3 項でも言及しているように、クレーズ密度そのものを実験的に測定することは困難であるため、クレーズ発展式の材料定数は所定の破断予測条件の下で破断時の公称ひずみが実験結果と一致するように同定する必要がある。

以上に示した手順はまず、実験的に測定可能な材料定数を優先的に決定し、その後、数値解析特有の材料定数を決定するということを表している。なお、クレーズ密度は現実的な値の範囲、すなわち、0.5 を超えない程度であれば応力-ひずみ応答へ与える影響は比較的小さい [補足 I.4]。そのため、上記の手順では変形場の材料定数を決定した後に、クレーズ発展式の材料定数を単独で調整するようにしている。

I.4 クレーズ密度の応力-ひずみ応答への影響

図 I.2 に 9.2.3 項と同様の解析条件でクレーズ発展量が零となるよう材料定数 n_r のみを $10.0 \text{ ns}^{-1} \rightarrow 0.00 \text{ s}^{-1}$ と変更し、解析を行った際の公称応力-公称ひずみ曲線を示す。また、同図には比較のため、図 9.21(a) と同様の解析結果、すなわち、クレーズ発展を伴う場合の公称応力-公称ひずみ曲線を併せて掲載している。図 I.2 の応力-ひずみ応答を比較すれば、クレーズ発展を伴うことにより、非弾性変形領域における公称応力値が多少減少することがわかる。これは、クレーズ密度が非弾性変形中に多く増加し、さらに、式 (2.54) によってクレーズ密度の増加に伴い、見かけの縦弾性係数の値が減少するためである。ここで、クレーズ発展を伴う場合の解析では試験片全体のクレーズ密度は約 0.30 程度であり、これによる公称応力値の減少量は図 I.2 から約 1~2 MPa 程度であることがわかる。したがって、クレーズ密度が比較的現実的な値の範囲で用いられている限り、クレーズ密度による公称応力値への影響はそれほど大きくないと言える。

I.5 本論文で実施している解析の種類

本論文では二次元解析および三次元の区分に加え、図 I.3 に示すような 3 通りの FEM 解析を実施している。1 つ目は図 I.5(a) に示すようなマイクロ構造であるユニットセルの微視的不均一性を考慮したマクロ試験片の解析であり、これはマイクロマクロ連成解析または強連成解析などと呼ばれる。このとき、構成式はユニットセルの各評価点に対して定義され、局所化および均質化処理を含むマイクロ解析全体がマクロ構造の構成式に相当する役割をなす。本論文で実施している解析の多くはこの解析に該当する。2 つ目は図 I.5(b) に示すようなユニットセルによる微視的内部構造の情報を介さない試験片の FEM 解析である。これは均質化法を適用しない

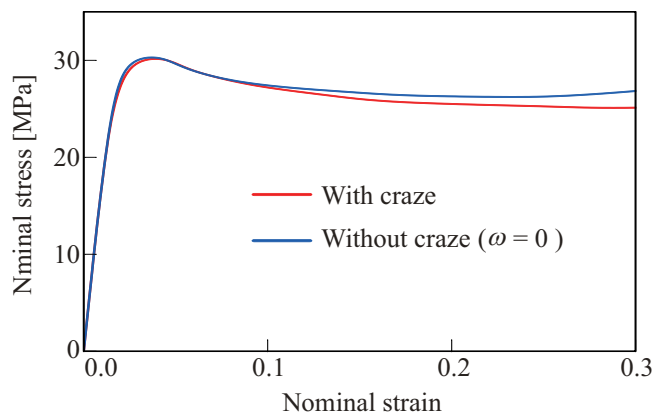


Fig. I.2 Numerically obtained nominal stress-strain curves with and without craze evolution.

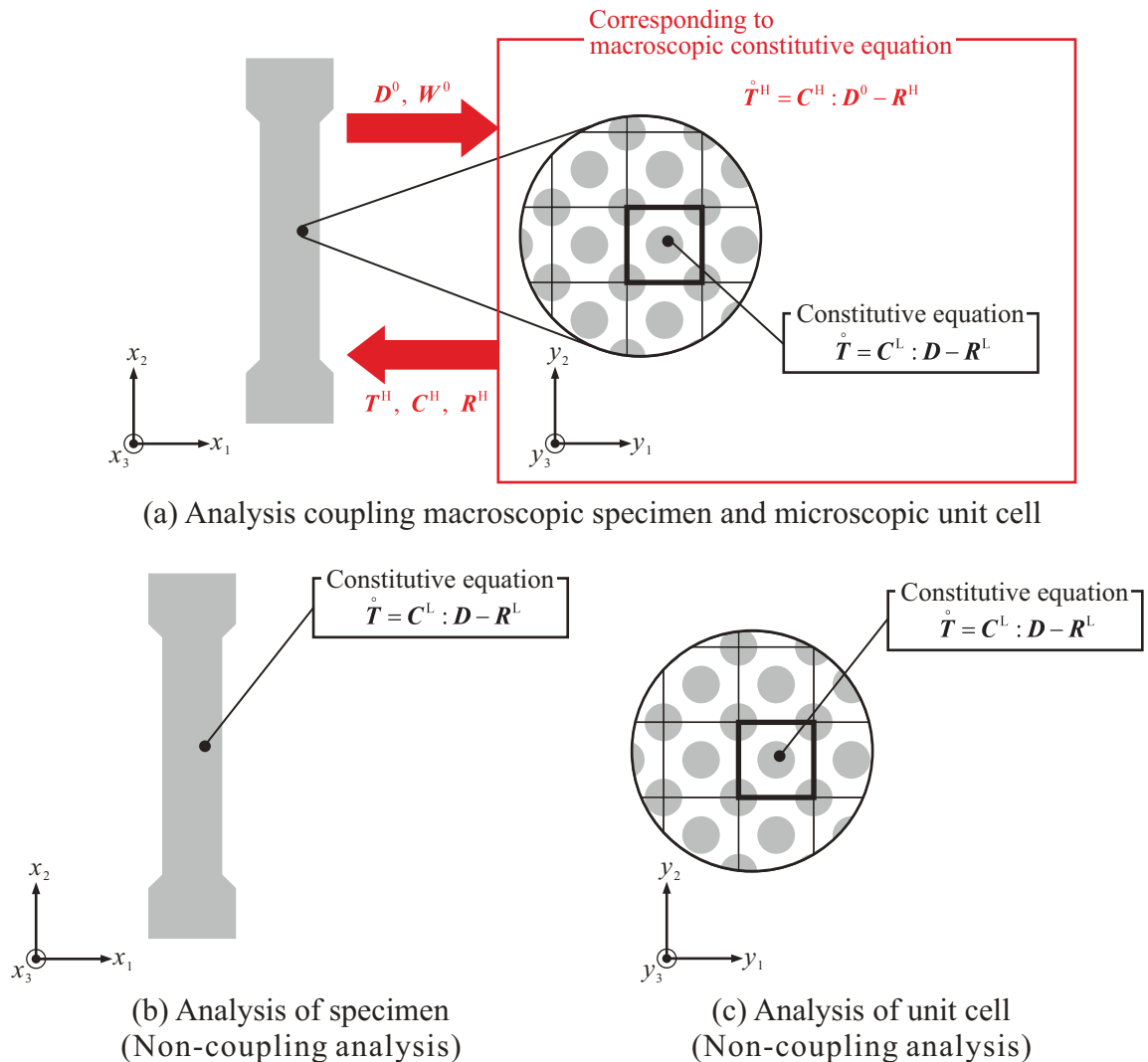


Fig. I.3 Types of analysis conducted in this thesis.

場合の通常の FEM 解析と等価であり，構成式は試験片の各評価点について定義される．本論文では 9.6.1 項の解析がこの解析に該当する．3 つ目は図 I.3(c) のようにマクロ変形の均一性を仮定することで単一のユニットセルのみに対する FEM 解析を実施する手法であり，本文中ではこれをユニットセル解析と呼んでいる．この解析では，図 I.3(a) の場合と同様に構成式はユニットセルの各評価点について定義され，マクロ構成式を用いてユニットセルに与えるマクロ変形速度を算出することになる．本論文では 9.2.1 項，9.2.2 項および 9.6.2 項においてユニットセル解析を実施している．

図 I.3(a) に示すような解析を実施する手順は 8 章で述べたとおりである．以下にその他の 2 通りの解析を実施する手法について述べる．

(a) 図 I.3(b) の解析手法

図 I.3(b) のような解析を実施するためには，マクロ構造の支配方程式において均質化材料定数マトリックスをミクロ構成式で用いられている材料定数マトリックスに置き換えればよい．すなわち，式 (8.39) において $[C^H] \rightarrow [C^L]$ および $\{R^H\} \rightarrow \{R^L\}$ とし，所定の境界条件の下で同方程式を解けば，変位増分を算出可

能である．同様に，式 (H.22) のマクロ構成式においても材料定数マトリックスをマイクロ構造の材料定数マトリックスに置き換え，各評価点の応力を更新する．

(b) 図 I.3(c) の解析手法

マイクロ構造の変形状態は与えられたマクロ変形速度 \mathbf{D}^0 に対して周期境界条件下でマイクロ内力が自己釣り合いを満たすように決定される．図 I.5(a) のようなマイクロ-マクロ連成解析を実施する場合には，マクロ解析によってマイクロ構造に与えるべきマクロ変形速度が算出されることになる．一方，図 I.3(c) のようなユニットセル解析を実施する場合には，マクロ構造の FEM 解析を実施しないため，ユニットセルに与えるマクロ変形速度は任意の値を与えることとなる．このとき，マクロ変形速度 $\{\mathbf{D}^0\}$ の 6 成分を全て任意に決定することも可能であるが，マクロ構造の Jaumann 応力速度 $\{\dot{\mathbf{T}}^H\}$ の 6 成分が任意の値となるようにマクロ変形速度を決定することも可能である．すなわち，マクロ構成式 [(H.22)] は 6 個の連立方程式であるため， $\{\mathbf{D}^0\}$ および $\{\dot{\mathbf{T}}^H\}$ の計 12 成分のうち，6 個を決定すればその他の成分が全て決定可能である．

以下に，本文 9.2.1 項および 9.2.2 項で実施している平面ひずみ条件下における y_2 方向への単軸引張のユニットセル解析を例に，ユニットセルに与えるべきマクロ変形速度の算出方法を示す．まず，平面ひずみ条件下ではマクロ構成式を次式のようなマトリックスに縮約できる．

$$\begin{Bmatrix} \dot{T}_{11}^H + R_{11}^H \\ \dot{T}_{22}^H + R_{22}^H \\ \dot{T}_{12}^H + R_{12}^H \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111}^H & C_{1122}^H & C_{1112}^H \\ C_{2211}^H & C_{2222}^H & C_{2212}^H \\ C_{1211}^H & C_{1222}^H & C_{1212}^H \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_{11}^0 \\ D_{22}^0 \\ 2D_{12}^0 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (I.1)$$

式 (I.1) は 3 個の連立方程式であるため， $\{\mathbf{D}^0\}$ および $\{\dot{\mathbf{T}}^H\}$ の計 6 成分のうち，3 個を決定すればその他の成分が全て決定可能である．ここで， y_2 方向への単軸引張を想定することから \dot{T}_{11}^H ， \dot{T}_{12}^H および D_{22}^0 に対してある既知の値 $\bar{\dot{T}}_{11}^H$ ， $\bar{\dot{T}}_{12}^H$ および \bar{D}_{22}^0 を与えれば，式 (I.1) からマクロ変形速度の未知成分を決定するための方程式が次式のように得られる．

$$\begin{Bmatrix} D_{11}^0 \\ 2D_{12}^0 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111}^H & C_{1112}^H \\ C_{1211}^H & C_{1212}^H \end{bmatrix}^{-1} \begin{Bmatrix} \bar{\dot{T}}_{11}^H + R_{11}^H - C_{1122}^H \bar{D}_{22}^0 \\ \bar{\dot{T}}_{12}^H + R_{12}^H - C_{1222}^H \bar{D}_{22}^0 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (I.2)$$

なお，9.2.1 項および 9.2.2 項では応力速度の既知量として $\bar{\dot{T}}_{11}^H = 0$ MPa および $\bar{\dot{T}}_{12}^H = 0$ MPa を与え，変形速度 \bar{D}_{22}^0 には本文中に示した値を与えている．式 (I.2) から算出される D_{11}^0 および $2D_{12}^0$ に加え，既知量として与えた D_{22}^0 をマイクロ構造の支配方程式 [式 (8.26)] の $\{\mathbf{D}^0\}$ に適用し，周期境界条件下で同方程式を解くことでユニットセル解析が実施可能となる．また，得られた D_{11}^0 および $2D_{12}^0$ を用いれば，残りの未知量である \dot{T}_{22}^H も算出可能であるが，ユニットセル解析では $\{\dot{\mathbf{T}}^H\}$ の成分を必要としないため， \dot{T}_{22}^H の計算も行わない．ここで，式 (I.2) では，既知量が代入されたことにより，式 (I.1) と比較してマトリックスの大きさが縮約を受けている．プログラミング上， $\{\mathbf{D}^0\}$ の既知の成分数に応じてマトリックスを縮約することは手間を要するため，実際の数値計算では式 (I.2) と等価な次式のような方程式を解くことで，マトリックスを縮約することなく $\{\mathbf{D}^0\}$ の未知量を算出している．

$$\begin{Bmatrix} D_{11}^0 \\ \bar{D}_{22}^0 \\ 2D_{12}^0 \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111}^H & 0 & C_{1112}^H \\ 0 & 1 & 0 \\ C_{1211}^H & 0 & C_{1212}^H \end{bmatrix}^{-1} \begin{Bmatrix} \bar{\dot{T}}_{11}^H + R_{11}^H - C_{1122}^H \bar{D}_{22}^0 \\ \bar{D}_{22}^0 \\ \bar{\dot{T}}_{12}^H + R_{12}^H - C_{1222}^H \bar{D}_{22}^0 \end{Bmatrix} \dots\dots\dots (I.3)$$

以上のような手順に基づいて $\{D^0\}$ を計算すれば、単軸引張に限らず、圧縮やせん断変形などの各変形モードに対するユニットセル解析を実施できる。

I.6 結晶相のすべり系の平面すべり問題への簡単化

斜方晶構造を有する結晶相の分子鎖の折り畳み構造の模式図は図 I.4 のように表わせる。このとき、三次元問題において考慮すべきすべり系は図 2.5 に示した通りである。本節では、同構造を平面すべり問題に簡単化の際に考慮すべきすべり系を示す。まず、図 I.4 のような三次元構造を二次元問題として取り扱うために、 a 、 b および c 軸のいずれか一つの軸が紙面垂直方向を向いている状態を考える。このとき、紙面に垂直とならない残りの 2 軸によって定義される面内で考慮可能なすべり系を図示すれば図 I.5 のようになる。ただし、平面すべり問題においてはすべり方向 $s^{(a)}$ およびすべり面の法線方向 $m^{(a)}$ が面外に向いているすべり系は考慮できないものとしている。図 I.5(a) および (b) に示すように a 軸または b 軸を紙面垂直方向に取れば、考慮可能なすべり系は単一の Chain slip のみとなる。一方、 c 軸が紙面垂直方向に向くとした場合、Chain slip は考慮できなくなるものの 4 つの Transverse slip 全てを平面すべり解析に導入可能である。本論文では平面ひずみ問題においても 4.4.2 項でモデル化したペナルティ法による分子鎖方向への非延伸拘束の影響が導入できるよう、Chain slip が考慮可能な図 I.5(b) の簡単化を採用している。

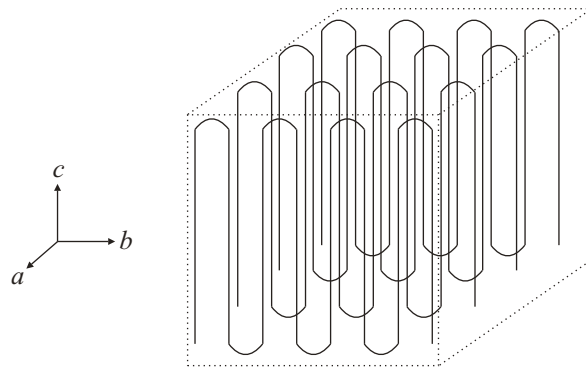


Fig. I.4 Schematic expression of three-dimensional molecular chain structure in crystalline phase.

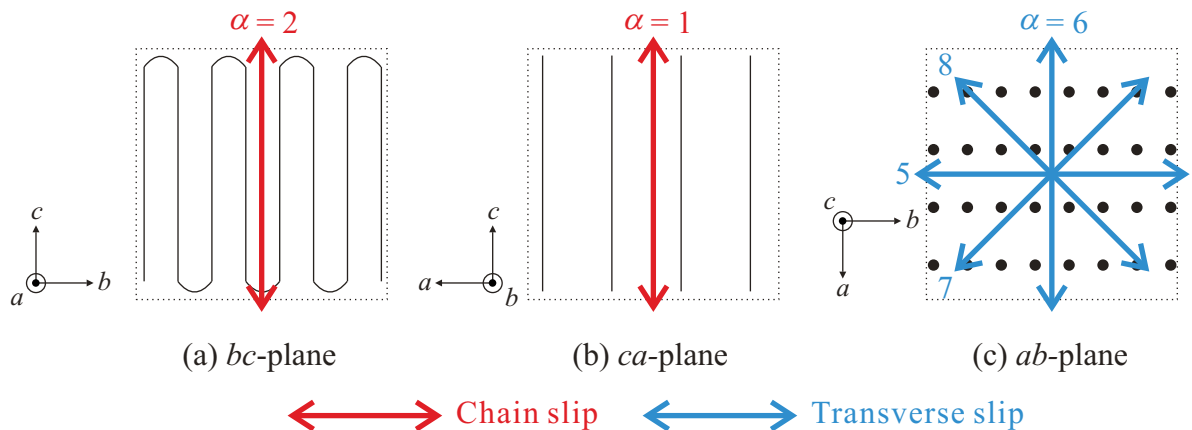


Fig. I.5 Two-dimensional slip systems in crystalline phase.

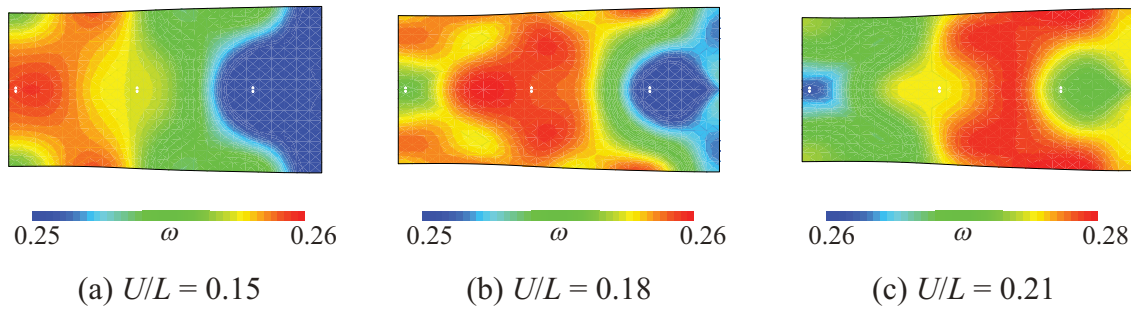


Fig. I.6 Distributions of craze density corresponding to numerical result of $\dot{U}/L = 1 \text{ s}^{-1}$ in Fig.9.30 .

1.7 くびれの伝ぱが開始する引張率

本節では、9.5.3 項の破断予測において比較的高延性であると認められる破断ひずみの値をクレーズ密度分布から具体的に調べる。9.5 節の解析における端面強制ひずみ速度が 1 s^{-1} の場合の各伸び率でのクレーズ密度分布を図 I.6 に示す。まず、図 I.6(a) ではまだくびれが伝ぱしておらず、試験片中心部に高クレーズ密度領域が形成している。次に、図 I.6(b) および (c) を見ると高クレーズ密度領域がくびれとともに引張方向へ伝ぱしている様子が確認できる。これらの結果から、伸び率 16~17% で高クレーズ密度領域が試験片中心部から引張方向へ伝ぱし始めることがわかる。したがって、破断ひずみが 0.16 以上であれば比較的高延性であると言える。すなわち、クレーズ密度が原因で破断する場合にくびれ進行端部から破断すると予測できる。なお、本節では引張速度 1 s^{-1} の場合について検証したが、引張速度によってはくびれおよび高クレーズ密度領域が伝ぱし始める伸び率が多少前後することに注意されたい。

1.8 クレーズ進展の異方性を考慮した解析

本論文では簡単化のため、クレーズの等方性を仮定することでクレーズ密度をスカラ量として取り扱い、クレーズ進展モデルの構築および FEM 解析を実施した。しかしながら、補足 A.5 で述べたようにクレーズは主応力の垂直方向に長く成長するという異方性を有しており、本来はクレーズ密度をスカラではなくテンソルとして表すことが望ましい。そこで、本節では、本研究の今後の発展性の一例としてクレーズ密度をテンソルへと拡張した場合のクレーズ進展のモデル化手法を提案するとともに同モデルを用いた FEM 解析の例を示す。なお、異方性損傷密度に依存した速度形弾性構成式の導出までの手順は小林ら⁽¹⁴⁹⁾による研究に倣っている。

1.8.1 異方性を有する損傷を伴う損傷配置の導入

まず、2.4 節に示した損傷配置および擬似無損傷配置間の応力および縦弾性係数の関係を図 I.7 に示すようなテンソル形の損傷密度を伴う場合に拡張する。なお、本項では 2.4 節と同様に構成式を導出する配置である第 2 中間配置において諸関係式を議論する。単位面積当たりの損傷密度テンソルを ω とすれば、損傷配置における応力、すなわち実応力カテンソルは式 (2.50) より次式のようにになると考えられる。

$$\mathbf{T}_{(m)}^* = (\mathbf{I} - \omega_{(m)})^{-1} \mathbf{T}_{(m)} \dots\dots\dots (I.4)$$

しかしながら、式 (I.4) を用いた場合、損傷配置における応力 $\mathbf{T}_{(m)}$ の対称性が満足されないという問題がある。これに対し、Betten⁽¹⁵⁰⁾ は次式のような配置変換を提案している。

$$\mathbf{T}_{(m)}^* = (\mathbf{I} - \boldsymbol{\omega}_{(m)})^{-1} \mathbf{T}_{(m)} (\mathbf{I} - \boldsymbol{\omega}_{(m)})^{-1} \dots\dots\dots (I.5)$$

式 (I.5) は実応力の対称性を満足するが、損傷による影響 $(\mathbf{I} - \boldsymbol{\omega}_{(m)})^{-1}$ が 2 重に乘じられてしまうという点が好ましくない。そこで、ここでは次式のように実応力を定義する。

$$\mathbf{T}_{(m)}^* = \frac{1}{A_\omega} (\mathbf{I} - \boldsymbol{\omega}_{(m)})^{-1} \mathbf{T}_{(m)} (\mathbf{I} - \boldsymbol{\omega}_{(m)})^{-1} \dots\dots\dots (I.6)$$

$$A_\omega \equiv \sqrt{\frac{(\mathbf{I} - \boldsymbol{\omega}_{(m)})^{-1} \cdot (\mathbf{I} - \boldsymbol{\omega}_{(m)})^{-1}}{\mathbf{I} \cdot \mathbf{I}}} \dots\dots\dots (I.7)$$

ここで、 A_ω は式 (I.6) において、両側から $(\mathbf{I} - \boldsymbol{\omega}_{(m)})^{-1}$ を乗じたために生じる余剰分を、 $(\mathbf{I} - \boldsymbol{\omega}_{(m)})^{-1}$ の大きさで除すために定義している量である。ただし、分母の $\mathbf{I} \cdot \mathbf{I} = 3$ はクレーズ密度が零の場合に $\mathbf{T}_{(m)}^* = \mathbf{T}_{(m)}$ を成立させるために付している。

また、ひずみ等価配置の考えは、擬似無損傷配置での弾性ひずみテンソル $\mathbf{E}_{(m)}^e$ および損傷配置での弾性ひずみテンソル $\mathbf{E}_{(m)}^{e*}$ を用いることによって $\mathbf{E}_{(m)}^e = \mathbf{E}_{(m)}^{e*}$ のように表わされる。一方、擬似無損傷配置での異方性線形弾性構成式および損傷配置での等方性線形弾性構成式はそれぞれ式 (I.8) および式 (I.9) のように与えられる。

$$\mathbf{T}_{(m)} = \mathbf{C}^e : \mathbf{E}_{(m)}^e \dots\dots\dots (I.8)$$

$$\mathbf{T}_{(m)}^* = \mathbf{C}_0^e : \mathbf{E}_{(m)}^{e*} \dots\dots\dots (I.9)$$

ここで、式 (I.8) の擬似無損傷配置での弾性係数テンソル \mathbf{C}^e は異方性を有するクレーズ密度の影響により、異方性弾性係数となるため、もはや式 (4.34) および式 (4.35) の定義は成り立たないことに注意されたい。

式 (I.6) を式 (I.9) に代入して得られる式を、ひずみ等価配置の考えの下で式 (I.8) と比較すれば、損傷密度の増加により減少する擬似無損傷配置の弾性係数テンソル \mathbf{C}^e が次式のように具体化される。

$$C_{ijkl}^e = A_\omega (\delta_{im} - \omega_{(m)im}) C_{(0)mnkl}^e (\delta_{nj} - \omega_{(m)nj}) \dots\dots\dots (I.10)$$

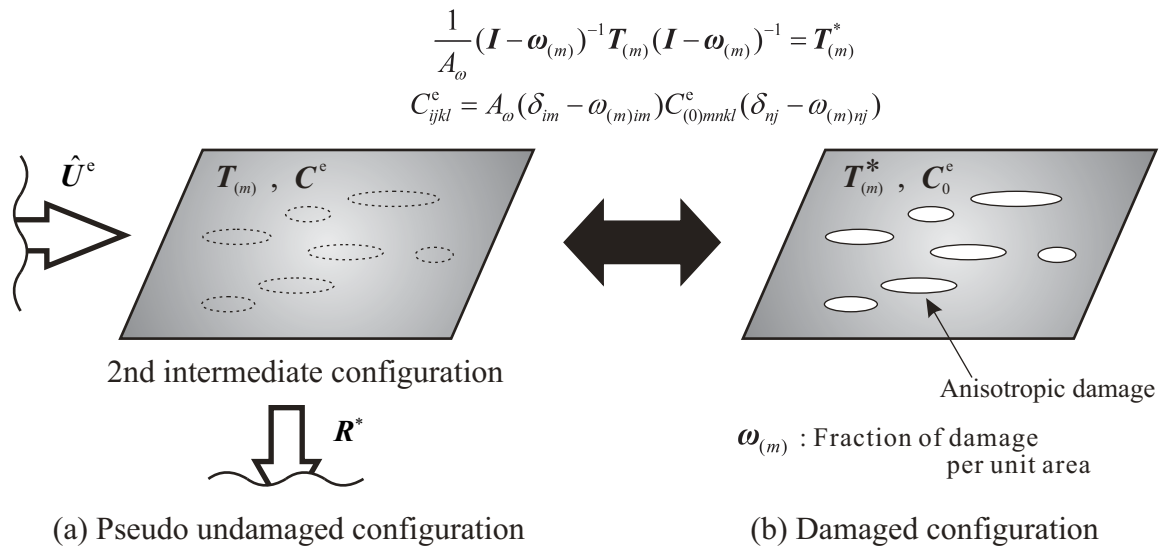


Fig. I.7 Configurations with anisotropic damage.

1.8.2 異方性損傷密度に依存した速度形弾性構成式

いま、構成式の導出配置である擬似無損傷配置での弾性構成式 [式 (I.8)] の両辺に物質時間微分を施せば、

$$\dot{\mathbf{T}}_{(m)} = \dot{\mathbf{C}}^e : \mathbf{E}_{(m)}^e + \mathbf{C}^e : \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e \dots \dots \dots \quad (\text{I.11})$$

となる。ここで、 $\dot{\mathbf{C}}^e$ は式 (I.10) を物質時間微分することにより、次式のように表せる。

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{C}}_{ijkl}^e &= \dot{A}_\omega (\delta_{im} - \omega_{(m)im}) C_{(0)m nkl}^e (\delta_{nj} - \omega_{(m)nj}) + A_\omega (\delta_{im} - \omega_{(m)im}) \dot{C}_{(0)m nkl}^e (\delta_{nj} - \omega_{(m)nj}) \\ &\quad + A_\omega (\delta_{im} - \omega_{(m)im}) \dot{C}_{(0)m nkl}^e (\delta_{nj} - \omega_{(m)nj}) + A_\omega (\delta_{im} - \omega_{(m)im}) C_{(0)m nkl}^e (\delta_{nj} - \omega_{(m)nj}) \\ &= \frac{\dot{A}_\omega}{A_\omega} C_{ijkl}^e - A_\omega \dot{\omega}_{(m)im} C_{(0)m nkl}^e (\delta_{nj} - \omega_{(m)nj}) - A_\omega (\delta_{im} - \omega_{(m)im}) C_{(0)m nkl}^e \dot{\omega}_{(m)nj} \\ &= \frac{\dot{A}_\omega}{A_\omega} C_{ijkl}^e - \dot{\omega}_{(m)im} (\delta_{mp} - \omega_{(m)mp})^{-1} C_{pjkl}^e - C_{inql}^e (\delta_{nq} - \omega_{(m)nq})^{-1} \dot{\omega}_{(m)qj} \dots \dots \dots \quad (\text{I.12}) \end{aligned}$$

式 (I.12) を式 (I.11) に代入するとともに、式 (I.8) の関係を用いて弾性ひずみ $\mathbf{E}_{(m)}^e$ の項を応力 $\mathbf{T}_{(m)}$ によって表記すれば、

$$\dot{\mathbf{T}}_{(m)} = \mathbf{C}^e : \dot{\mathbf{E}}_{(m)}^e + \frac{\dot{A}_\omega}{A_\omega} \mathbf{T}_{(m)} - \left[\dot{\omega}_{(m)} (\mathbf{I} - \omega_{(m)})^{-1} \mathbf{T}_{(m)} + \mathbf{T}_{(m)} (\mathbf{I} - \omega_{(m)})^{-1} \dot{\omega}_{(m)} \right] \dots \dots \dots \quad (\text{I.13})$$

となる。さらに、式 (I.13) を現配置へと回転させれば、現配置で客観性を有する異方性損傷密度に依存した速度形弾性構成式が次式のように得られる。

$$\overset{\nabla}{\mathbf{T}} = \mathbf{C}^e : \mathbf{D}^e + \frac{\dot{A}_\omega}{A_\omega} \mathbf{T} - \left[\overset{\nabla}{\dot{\omega}} (\mathbf{I} - \omega)^{-1} \mathbf{T} + \mathbf{T} (\mathbf{I} - \omega)^{-1} \overset{\nabla}{\dot{\omega}} \right] \dots \dots \dots \quad (\text{I.14})$$

式 (I.14) の弾性構成式に基づいて 4.3 節と同様の手順で非晶相の弾粘塑性構成式を導出すれば、異方性損傷密度に依存した弾粘塑性構成式が得られる。また、結晶相の弾粘塑性構成式については損傷密度の影響を受けないため、式 (4.68) のままである。

1.8.3 異方性クレーズの発展式

まず、構成式の導出と同様に第2中間配置において、クレーズ密度速度テンソル $\dot{\omega}_{(m)}^{(\alpha)}$ をクレーズ発生による損傷密度速度テンソル $\dot{\omega}_{n(m)}^{(\alpha)}$ およびクレーズ成長による損傷密度速度テンソル $\dot{\omega}_{g(m)}^{(\alpha)}$ の和として次式のように表す。

$$\dot{\omega}_{(m)}^{(\alpha)} = \dot{\omega}_{n(m)}^{(\alpha)} + \dot{\omega}_{g(m)}^{(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (\text{I.15})$$

ここでは、クレーズはフィブリルの直交方向に形成し、一度形成したクレーズはその方向に成長すると考え、クレーズ発生速度 $\dot{\omega}_{n(m)}^{(\alpha)}$ およびクレーズ成長速度 $\dot{\omega}_{g(m)}^{(\alpha)}$ をそれぞれ次式のように与える。

$$\dot{\omega}_{n(m)}^{(\alpha)} = \dot{\omega}_{n(m)}^{(\alpha)} \mathbf{M}_{(m)}^{(\alpha)}, \quad \dot{\omega}_{g(m)}^{(\alpha)} = \dot{\omega}_{g(m)}^{(\alpha)} \frac{\omega_{(m)}^{(\alpha)}}{\|\omega_{(m)}^{(\alpha)}\|} \dots \dots \dots \quad (\text{I.16})$$

ここで、 $\mathbf{M}_{(m)}^{(\alpha)}$ は分子鎖の直交方向を表す分子鎖基底テンソルであり、 $\mathbf{M}_{(m)}^{(\alpha)} \equiv \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)} \otimes \mathbf{m}_{(m)}^{(\alpha)}$ のように定義される。

さらに、式 (I.15) および式 (I.16) を現配置へと回転させれば、最終的な異方性クレーズの発展式が次式のように得られる。

$$\overset{\nabla}{\dot{\omega}}^{(\alpha)} = \overset{\nabla}{\dot{\omega}}_n^{(\alpha)} + \overset{\nabla}{\dot{\omega}}_g^{(\alpha)} \dots \dots \dots \quad (\text{I.17})$$

$$\overset{\nabla}{\omega}_n^{(\alpha)} = \dot{\omega}_n^{(\alpha)} \mathbf{M}^{(\alpha)}, \quad \overset{\nabla}{\omega}_g^{(\alpha)} = \dot{\omega}_g^{(\alpha)} \frac{\boldsymbol{\omega}^{(\alpha)}}{\|\boldsymbol{\omega}^{(\alpha)}\|} \dots\dots\dots (I.18)$$

ここで、 $\overset{\nabla}{\omega} \equiv \dot{\omega}^{(\alpha)} - \mathbf{W}^* \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} + \boldsymbol{\omega}^{(\alpha)} \mathbf{W}^*$ はクレーズ密度テンソルの Mandel–Kratovich 速度である。また、クレーズ発生および成長の発展量を決定するスカラクレーズ密度速度 $\dot{\omega}_n^{(\alpha)}$ および $\dot{\omega}_g^{(\alpha)}$ は、それぞれ 6 章で定式化したスカラクレーズの発展式 [式 (6.21) および式 (6.22)] によって計算する。

I.8.4 異方性クレーズを用いた FEM 解析の例

I.8.2 項で導出した速度形弾性構成式に基づいて定式化した変形場の支配方程式および I.8.3 項に示したクレーズ発展式を用いて結晶性ポリマの単軸引張解析を実施した際の伸び率 30% でのマクロ試験片における主応力および主クレーズ密度の分布図を図 I.8 に示す。また、図 I.8 の評価点 I に配置されたユニットセルにおける同量の分布図を図 I.9 に示す。なお、図 I.8 および図 I.9 においては各線素の向きが主方向を、各線素の色および長さが主値の値を表している。解析条件としてはマクロ構造を平面ひずみ条件の 1/2 モデル、マイクロ構造を非晶相中に 9 個の結晶相を含む平面ひずみ条件の正方形平板とし、分子鎖塑性論および結晶塑性論にお

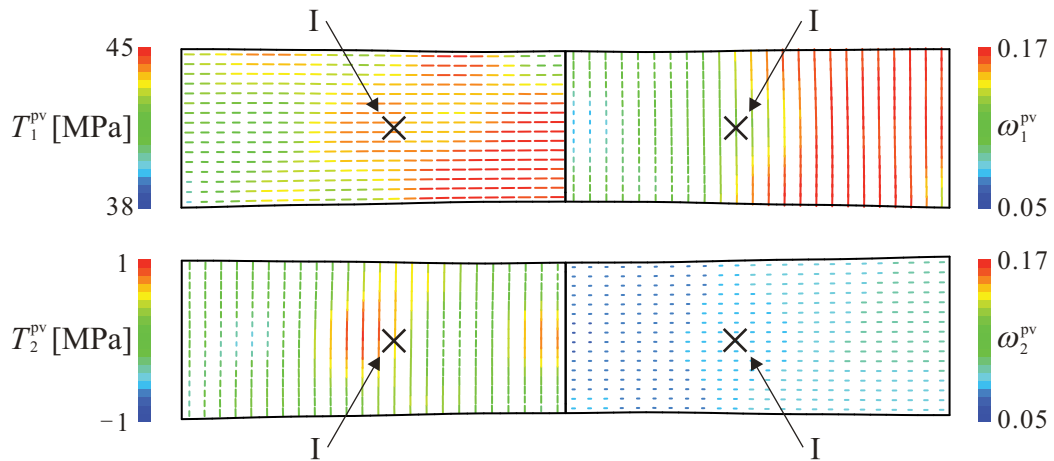


Fig. I.8 Distributions and orientations of principal values of stress and craze density in macroscopic specimen at 30% elongation.

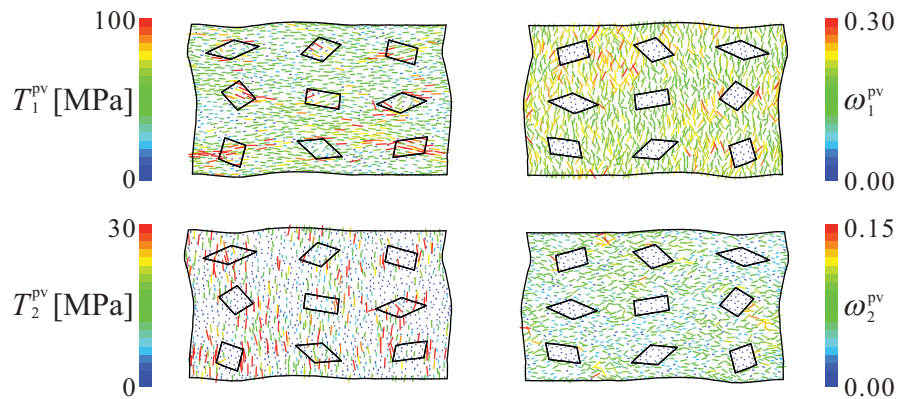


Fig. I.9 Distributions and orientations of principal values of stress and craze density in unit cell at sampling point I.

けるすべり系も平面すべり問題へと単純化している。マイクロ評価点における絡み点数 N_g は 5 とし、そのすべり系の初期方位は本文における解析と異なり、図 9.2 の $\phi_g^{(1)}$ に $0 \sim 180^\circ$ の範囲で一様に分布する乱数を与え、 $\phi_g^{(2)} = \phi_g^{(1)} + 45^\circ$ としている。また、環境温度 $\theta = 297 \text{ K}$ 、端面強制ひずみ速度を 1 s^{-1} として解析を実施した。

図 I.8 の左右の図を比較すれば、応力の主方向およびクレーズ密度の主方向が互いに直交していることが確認できる。また、主応力は引張方向に対して大きくなっている。さらに、マクロ試験片全域においてクレーズ密度テンソルの主値 ω_1^{pv} が ω_2^{pv} の 2 倍程度の値となっている。したがって、マクロ試験片においてクレーズが引張方向に対して垂直に長く成長する傾向が再現されており、クレーズ密度テンソルが異方性を有していると言える。一方、ユニットセルにおける主応力および主クレーズ密度の分布を見ると、マイクロ構造ではマクロ構造に比べて応力の主方向およびクレーズ密度の主方向が完全に一方向にはそろわず、その方位にばらつきがあることがわかる。ただし、それぞれの評価点における両者の方位はマクロ構造と同じく直交性を有していると言える。以上のように、微視的には応力の主方向とクレーズ密度の主方向が直交する一方、巨視的には引張方向の垂直方向にクレーズが長く成長しており、補足 A.5 で述べたクレーズ進展の異方性が定性的に再現されていると言える。