

博士論文

熱可塑性樹脂の材料構成則と増分ポテンシャル法
に基づく熱・機械強連成解析手法の開発

Development of the constitutive law and the
thermo-mechanical coupled scheme for thermoplastic resins

東北大学大学院工学研究科土木工学専攻

松原 成志朗

Seishiro MATSUBARA

2018年 3月

Copyright © 2018 by Seishiro MATSUBARA

寺田 賢二郎 教授
(主 査)

京谷 孝史 教授

山川 優樹 准教授

齊木 功 准教授

森口 周二 准教授

ABSTRACT

Development of the constitutive law and the thermo-mechanical coupled scheme for thermoplastic resins

Seishiro MATSUBARA

A method of strongly coupled analyses along with a constitutive law for amorphous polymers typifying thermoplastic (TP) resins is developed to simulate their thermo-mechanical responses in both glassy and rubbery states under a wide range of temperatures and strain rates in consideration of self-generated heat. The method is applied to microstructural analyses within the framework of computational homogenization to characterize the macroscopic thermo-mechanical behavior of fiber reinforced thermoplastics (FRTP), which necessarily reflects the unsteady microscopic thermal and mechanical responses involving self-generated heat caused by deformations of the polymeric matrix.

The proposed constitutive model is constructed by combining viscoplastic with viscoelastic rheology elements following the multi-mechanism theory. The generalized Maxwell model is employed to represent the temperature-dependent elastic properties across the glass-transition temperature and viscous effects to reproduce the elastic hysteresis and strain recovery phenomena. The viscoplastic part of the model to represent the flow rule follows the co-operative model proposed by Richeton et al. [Polymer, 2005] to deal with the transition between glassy and rubbery states and is composed of isotropic and kinematic hardening devices to reproduce the hardening phenomena peculiar to amorphous polymers. The evo-

lution law for the isotropic hardening behavior is introduced to realize both the dependency on viscoplastic deformation rates and the strain softening behavior. On the other hand, a free energy typically utilized in rubber elasticity is employed for the kinematic hardening device to simulate the orientation hardening behavior, which is analogous to that in rubber elasticity. The formulation of the proposed constitutive law ensuring the thermodynamical consistency so as to be amenable to the theory of Coleman and Noll [J. Chem. Phys., 1967].

The first feature of the proposed constitutive law is that the viscoelasticity and the viscoplasticity influence each other due to multiplicative decomposition of the total deformation gradient. The viscoelastic response is dominant at temperature above the glass transition temperature, whereas the viscoplastic flow is dominant at temperature below it. Thanks to this feature, the proposed constitutive law enables us to simulate the phenomenon such that the amount of strain recovery increases during unloading and with no-load processes at the rubbery state. The second feature is that the viscoplastic isotropic hardening behavior reflects the relaxation modulus so as to depend on both strain rates and temperatures. It is, therefore, possible to simulate not only the viscoplastic isotropic hardening behavior under a wide range of temperatures including the glass-transition temperature, but also the hardening behavior that transitions between glassy and rubbery states depending on strain rates.

The material parameters used in the proposed constitutive law are identified to represent the thermo-mechanical behavior of polycarbonate (PC), for which various experiments were conducted. The necessary data for the identification were obtained by the dynamic mechanical analysis (DMA) and by the uniaxial tensile/unloading/no-load tests with various strain rates. To demonstrate the capability and performance of the proposed constitutive law, which reflects the noteworthy features of the multi-mechanism theory, each of the rheology elements is gradually made active and eventually constitutes the whole mechanism represented

by the model so that their respective roles can be illustrated. Also, numerical simulations of uniaxial tensile/unloading/no-load tests at different temperatures and strain rates for PC are carried out to demonstrate the applicability for practical use.

Next, to realize fully thermo-mechanical coupled analyses, the proposed constitutive law along with the self-heating effect is incorporated into the incremental variational formulation, which was proposed by Yang et al. [J. Mech. Phys., 2016]. The proposed framework is accomplished by the introduction of all the energy functions corresponding to the proposed constitutive law in accordance with the thermodynamics requirements. Thanks to the accordance, the formulation enables us to calculate proper amount of self-generated heat in response to the constitutive behavior. To be more specific, the energy functions necessary for the formulation are the free energies and the dual dissipation potentials. Each of the free energies corresponds to the proposed constitutive law explained above, whereas each of the dual dissipation potentials also contribute in the constitutive law, but mainly produces self-generated heat that can be supplied as a heat source in the associated heat conduction problem. These dual dissipation potentials along with the rate of the free energies are used to define the incremental potential. In this regard, Legendre-Fenchel transformation has been performed for the derivation of these dual dissipation potentials by maximizing the dissipation energies with respect to the corresponding thermodynamical driving forces. In particular, in the track of the Perzyna type viscoplastic regularization, the viscoplastic dissipation potential is defined as a regularized function with the yield function and the plastic potential being independent variables. Owing to the thermodynamical consistency, it is proven that the first variation of the incremental potential with respect to the state variables yields to the proposed constitutive law. Fully coupled thermo-mechanical analyses are carried out to demonstrate the capability to simulate the actual uniaxial tensile tests conducted for a

PC specimen. Then, the results are compared with those obtained by deformation analyses only to examine the influence of heat conduction with self-generated heat on the mechanical behavior. At the same time, the performance of the proposed method for strongly coupled analyses is assessed by comparing the temperature rise with that measured with a thermographic DIC device.

The last part in this thesis is devoted to the characterization of the macroscopic thermo-mechanical behavior of FRTP, which is supposed to reflect unsteady heat conduction at a micro-scale coupled with deformations and deformation-induced self-generated heats. The proposed constitutive law along with the proposed analysis method developed for amorphous polymers is used for the numerical material testing (NMT) within the framework of computational homogenizations. More specifically, the anisotropic material responses at a macro-scale is evaluated by performing the microscopic analyses of a unit cell with a unidirectional reinforcement. The phenomenon of interest in this characterization is how the time-evolution of the microscopic temperature field influences the macroscopic thermo-mechanical behavior. To this end, the NMT results with the strongly coupled analysis method are compared with those obtained with the self-heating effect, but without microscopic heat conduction. Moreover, NMTs are performed at different strain rates and different dimensions of unit cells to see the effect of unsteadiness of heat conduction and deformation at a micro-scale.

In the final section, the concluding remarks are addressed by summarizing the contributions of this study and anticipating future works.

謝 辞

本論文は，東北大学大学院工学研究科土木工学専攻博士課程後期在学中（2015年4月～2018年3月）の研究成果をまとめたものです。この研究を進めるにあたり，多くの方々にご指導，ご助言を頂きました。ここに感謝の言葉を記します。

はじめに，本論文の審査委員を務めることをご快諾し，原稿の査読や複数回にわたる下見会へのご参加をして頂いた，寺田賢二郎教授，京谷孝史教授，山川優樹准教授，斉木功准教授，森口周二准教授に感謝を申し上げます。また，株式会社メカニカルデザイン小林卓哉社長，生出佳さん，三原康子さん，前田隆世さん，東洋紡株式会社野々村千里さん，古市謙次さん，住山琢哉さん，大同大学工学部機械工学科西脇武志教授，名古屋市工業研究所村田真伸さんには，本研究を進めるうえで必要となったポリカーボネートの動的粘弾性試験および負荷・除荷引張試験の計測結果を提供していただきました。重ねて，感謝を申し上げます。指導教員の寺田賢二郎教授には，非常に多くのご指導を頂きました。特に，修士課程から編入する際も暖かく受け入れて頂き，1年目から企業との共同研究も任せて頂きました。特に，学生の身分ながら東京などの場所に出張させて頂き，企業の方々と共同研究に関するディスカッションを行う機会を多く与えて頂きました。5年間もの間辛抱強くご指導をして頂き，誠にありがとうございました。今後ともよろしくお願い致します。材料力学研究室の京谷孝史教授には，終始丁寧かつ愛情あるご指導を頂きました。京谷先生からは力学現象の論理を正確に理解し，数学を用いてそれを精密に記述していくことの重要性を学びました。特に，現象の相似性に関してのご説明は，様々な力学現象を扱わねばならない私にとって非常に重要な心得となっています。5年間の間，ご指導を頂き誠にありがとうございました。また，今後ともよろしくお願い致します。森口周二准教授には，時には優しく，時に

は厳しく指導をして頂きました。特に、何も食べられなくなった時期に食べ物の差し入れをして頂いたり、研究がうまくいかなかったときにも気に留めて頂いたりして辛い研究室生活で救われることが多かったです。5年間の間、ご指導を頂き誠にありがとうございました。また、今後ともよろしくお願い致します。材料力学研究室の加藤準治准教授には、特に研究室を同じくしていた2年弱の間に熱い指導をして頂きました。加藤先生には、計算力学を専門としているものにとって材力・地安に所属していることの意味やその責任について教えて頂きました。その反面、研究室内での普段の生活や学会では、暖かくご指導して頂いたことも感謝しております。5年間の間、ご指導を頂き誠にありがとうございました。また、今後ともよろしくお願い致します。村松眞由助教には、4年間お世話になりました。村松さんは年の近い先生として、学生目線で私たちと接して頂いたり、どんなときにも学生の味方になってくれる先生でした。4年間の間、ご指導を頂き誠にありがとうございました。また、今後ともよろしくお願い致します。研究員の佐藤雅美さんには、2年間お世話になりました。佐藤さんは物腰が柔らかく、イタズラばかりしている私達を暖かく見守って頂きました。2年間の間、誠にありがとうございました。また、今後ともよろしくお願い致します。八戸工業大学土木建築工学科高瀬慎介講師には、4年間お世話になりました。特に、計算機環境や並列計算などの数値計算手法に関してサンプルプログラムや資料を提供頂いたり、多くの知見を教えて頂きました。5年間の間、ご指導を頂き誠にありがとうございました。また、今後ともよろしくお願い致します。株式会社メカニカルデザイン小林卓哉社長、生出佳さん、三原康子さん、前田隆世さん、東洋紡株式会社野々村千里さん、古市謙次さん、住山琢哉さん、大同大学工学部機械工学科西脇武志教授、名古屋市工業研究所村田真伸さんには私が遂行していた共同研究にて非常にお世話になりました。皆様との共同研究を通して、一つの形のあるものを作り上げられたことは非常に良い経験であったと考えております。3年間の間、ご指導を頂き誠にありがとうございました。

また、今後ともよろしくお願ひ致します。材力・地安の研究室のみなさんはいつも真面目で、研究に対して真摯に取り組む姿は後輩ながら非常に尊敬できました。また、秘書の芳賀麻由美さん、関根和代さんには、事務処理関係で非常にお世話になりました。特に、出張が多かった私は迷惑をかけることが多かったのですが、いつも優しく接していただいてとても感謝をしております。長い間、ありがとうございました。最後に博士論文の執筆を終えるまで私を支えてくださったすべての方々に感謝の言葉を記します。

平成30年1月

東北大学大学院工学研究科土木工学専攻

地域安全工学研究室

松原 成志朗

目 次

第1章 序論	1
1.1 本研究で対象とする材料の概要	1
1.1.1 熱可塑性樹脂の分類	1
1.1.2 繊維強化熱可塑性樹脂 (FRTP)	2
1.2 非晶性熱可塑性樹脂の材料構成則	3
1.2.1 材料挙動の概要	3
1.2.2 ガラス域の材料構成則に関する先行研究	6
1.2.3 ガラス-ゴム状態の材料構成則に関する先行研究	9
1.3 非晶性熱可塑性樹脂からなる構造物の自己発熱を考慮した熱・機械連成解析手法	12
1.3.1 非晶性熱可塑性樹脂の自己発熱現象	12
1.3.2 熱・機械連成解析手法に関する先行研究	14
1.4 FRTP の自己発熱を考慮した熱・機械連成解析手法	16
1.5 本研究の位置づけと目的	17
1.5.1 非晶性熱可塑性樹脂のガラス-ゴム状態を対象とした材料構成則に関する本研究の位置づけと目的	18
1.5.2 非晶性熱可塑性樹脂の自己発熱を考慮した熱・機械連成解析手法に関する本研究の位置づけと目的	19

1.5.3	F RTP の自己発熱を考慮した熱・機械連成解析手法に関する本研究の位置づけと目的	20
1.5.4	本論文の構成	21
第 2 章	非晶性熱可塑性樹脂の粘弾性・粘塑性複合構成則	27
2.1	はじめに	27
2.2	運動学的変数の定義	29
2.2.1	変形勾配の粘弾性・粘塑性乗算分解	29
2.2.2	各種運動学的変数	31
2.3	熱力学的定式化	33
2.3.1	自由エネルギーの定義	33
2.3.2	散逸エネルギーの導出	35
2.4	粘弾性モデル	36
2.4.1	超弾性構成則の具体化	36
2.4.2	粘弾性モデルの導出	39
2.4.3	純弾性モデルの定義	43
2.5	粘塑性モデル	44
2.5.1	粘塑性流れ駆動力の具体化と粘塑性流れの発展則	44
2.6	粘弾性・粘塑性複合構成則の基本的な性能の検証	48
2.7	動的粘弾性試験による粘弾性材料パラメータ同定	51
2.8	負荷・除荷引張試験による粘塑性材料パラメータ同定	55
2.8.1	引張試験解析	55
2.8.2	負荷・除荷・保持試験解析	59
2.9	環境温度依存性に関する表現性能の検証	60
2.10	まとめ	63

第 3 章	非晶性熱可塑性樹脂の熱・機械連成解析	93
3.1	はじめに	93
3.2	熱・機械連成増分ポテンシャル法	94
3.2.1	熱・機械連成増分ポテンシャル問題の定式化	94
3.2.2	増分ポテンシャル問題の Euler-Lagrange 方程式	97
3.3	非晶性熱可塑性樹脂の双対散逸ポテンシャル	99
3.4	熱・機械連成増分ポテンシャルの停留条件と支配方程式	104
3.5	数値解析例	107
3.5.1	熱・機械連成増分問題の検証例	107
3.5.2	PC に対する引張試験の再現解析	109
3.6	まとめ	112
第 4 章	F RTP に対するミクロ構造の非定常性を考慮した数値材料試験	127
4.1	はじめに	127
4.2	熱・機械連成解析による数値材料試験	128
4.3	ミクロ構造内の非定常性が巨視的力学応答に及ぼす影響	130
4.4	負荷速度に対する依存性	134
4.5	ユニットセルの寸法依存性	136
4.6	まとめ	137
第 5 章	結論	151
補遺 A	数値計算アルゴリズム	157
A.1	粘弾性・粘塑性複合構成則の return-mapping アルゴリズム	157
	参考文献	163

表 目 次

1.1	各種材料の密度とヤング率の一般的な値 ^{1,2)}	24
2.1	PCのせん断弾性率と緩和時間の同定結果	73
2.2	負荷・除荷引張試験の制御条件	75
2.3	PCの粘塑性材料パラメータの同定結果	77
3.1	α チタニウム合金の材料パラメータ ⁸⁴⁾	119
3.2	PCの熱に関する材料パラメータ	121
4.1	繊維材の材料パラメータ	138

目 次

1.1	分子鎖の形状	24
1.2	高分子材料の分類	25
1.3	樹脂内部の分子鎖組織構造	25
1.4	非晶性熱可塑性樹脂のガラスーゴム状態における力学挙動	26
1.5	Argon ^{16,17)} の二重キック理論	26
2.1	提案する粘弾性・粘塑性複合構成則のレオロジーモデル	66
2.2	提案する粘弾性・粘塑性複合構成則のまとめ	67
2.3	複数の負荷速度水準 (a) もしくは環境温度水準 (b) の条件下で粘弾性モデルのみを考慮した一様引張解析から得られた真応力ー真ひずみ関係	68
2.4	複数の負荷速度水準 (a) もしくは環境温度水準 (b) の条件下で粘弾性モデルに粘塑性等方硬化モデルを考慮した一様引張解析から得られた真応力ー真ひずみ関係	68
2.5	複数の負荷速度水準 (a) もしくは環境温度水準 (b) の条件下で粘弾性モデルに粘塑性等方・移動硬化モデルを考慮した一様引張解析から得られた真応力ー真ひずみ関係	69
2.6	環境温度 160[deg] における複数の負荷速度水準の条件下で粘弾性モデルに粘塑性等方・移動硬化モデルを考慮した一様引張解析から得られた真応力ー真ひずみ関係	69
2.7	ポリカーボネートに対する動的粘弾性試験の結果 ¹⁴⁾	70
2.8	ガラス域における貯蔵弾性率と損失弾性率 ¹⁴⁾	70
2.9	WLF 式のシフトファクター	71
2.10	一般化 WLF 式のシフトファクター	71

2.11	ポリカーボネートの動的粘弾性試験から得られた貯蔵弾性率と損失弾性率および損失正接のマスターカーブとそのカーブフィット結果	72
2.12	同定結果から算定した緩和スペクトル	74
2.13	同定結果から算定した緩和弾性率	74
2.14	ポリカーボネートに対する負荷・除荷引張試験の実験結果 ¹⁴⁾	76
2.15	R-20 型切欠き付き試験片の有限要素モデルと境界条件	76
2.16	同定したパラメータによる引張試験の再現解析の結果と実験結果の比較 (真応力-真ひずみ関係)	78
2.17	同定したパラメータによる引張試験の再現解析の結果と実験結果の比較 (公称応力-変位関係)	79
2.18	同定したパラメータによる引張試験の再現解析で得られた試験片モデル の変形形状および X 方向真応力と等価粘塑性ひずみ分布の推移 ([A]~ [E] は図 2.13(b) 中の各記号に対応)	80
2.19	同定したパラメータによる引張試験の再現解析の結果と実験結果の比較 (等価粘塑性ひずみ-真ひずみ関係)	81
2.20	同定したパラメータによる引張試験の再現解析で得られた等価応力と降 伏応力の推移	82
2.21	同定したパラメータによる引張試験の再現解析で得られたせん断降伏応 力の推移	83
2.22	同定したパラメータによる引張試験の再現解析で得られた背応力の推移	84
2.23	同定したパラメータによる 1[mm] 除荷試験の再現解析の結果と実験結 果の比較 (真応力-真ひずみ関係)	85
2.24	同定したパラメータによる 3[mm] 除荷試験の再現解析の結果と実験結 果の比較 (真応力-真ひずみ関係)	86

2.25	同定したパラメータによる 3[mm] 除荷試験の再現解析で得られた試験片モデルの変形形状および X 方向真応力と等価粘塑性ひずみ分布の推移 ([F]~[I] は図 2.20(b) 中の各記号に対応)	87
2.26	同定したパラメータによる環境温度 50, 75[deg] における負荷速度別の 3[mm] 除荷試験の再現解析の結果	88
2.27	同定したパラメータによる環境温度 100, 120[deg] における負荷速度別の 3[mm] 除荷試験の再現解析の結果	89
2.28	同定したパラメータによる環境温度 140, 150[deg] における負荷速度別の 3[mm] 除荷試験の再現解析の結果	90
2.29	同定したパラメータによる環境温度 155, 160[deg] における負荷速度別の 3[mm] 除荷試験の再現解析の結果	91
3.1	一般散逸固体 (連続体) モデルと境界条件	114
3.2	熱・機械連成増分ポテンシャルの変分構造と停留点問題	114
3.3	熱力学的過程から観察した熱・機械連成増分ポテンシャル法の論理	115
3.4	熱・機械連成-粘弾性・粘塑性複合増分ポテンシャルモデルのまとめ (1)	116
3.5	熱・機械連成-粘弾性・粘塑性複合増分ポテンシャルモデルのまとめ (2)	117
3.6	α チタニウム合金の熱・機械連成増分ポテンシャルモデルのまとめ ⁸⁴⁾	118
3.7	検証例題 ⁸⁴⁾ における解析結果と実験結果 ¹¹¹⁾ の真応力-真ひずみ関係の比較	120
3.8	検証例題 ⁸⁴⁾ における解析結果と実験結果 ¹¹¹⁾ の温度上昇-真ひずみ関係の比較	120
3.9	ポリカーボネートの R-20 型切欠き付き試験片の有限要素モデルと境界条件	121
3.10	引張試験に対する負荷速度別の再現解析で得られた真応力-真ひずみ関係	122

3.11	引張試験に対する負荷速度別の再現解析で得られた試験片モデルの最終的な変形形状と X 方向真応力分布	122
3.12	引張試験に対する負荷速度別の再現解析で得られた試験片モデルの最終的な変形形状と温度分布	123
3.13	引張試験の再現解析で得られた真応力-真ひずみ関係の比較	123
3.14	引張試験の再現解析で得られた降伏応力-真ひずみ関係の比較	124
3.15	引張試験の再現解析で得られた粘塑性乗数-真ひずみ関係の比較	124
3.16	引張試験に対する負荷速度別の再現解析で得られた温度上昇量の DIC 計測結果との比較	125
4.1	数値材料試験における各マクロ変形モード	138
4.2	一方向強化材モデル	139
4.3	数値材料試験結果：マクロ真応力-マクロ真ひずみ関係	139
4.4	数値材料試験結果：マクロ温度-マクロ真ひずみ関係	140
4.5	XX-tensile を負荷した数値材料試験で得られたユニットセルの変形形状とミクロ真応力の X 垂直方向成分の分布 ([A]~[D] は図 4.3(a) 中の各記号に対応)	141
4.6	XX-tensile を負荷した数値材料試験で得られたユニットセルの変形形状と温度分布 ([A]~[D] は図 4.4(a) 中の各記号に対応)	142
4.7	XY-shear を負荷した数値材料試験で得られたユニットセルの変形形状とミクロ真応力の XY 面のせん断方向成分の分布 ([A]~[D] は図 4.3(c) 中の各記号に対応)	143
4.8	XY-shear を負荷した数値材料試験で得られたユニットセルの変形形状と温度分布 ([A]~[D] は図 4.4(c) 中の各記号に対応)	144
4.9	負荷速度別の数値材料試験結果：マクロ真応力-マクロ真ひずみ関係	145

4.10	負荷速度別の数値材料試験結果：マクロ温度－マクロ真ひずみ関係 . . .	146
4.11	負荷速度別の XX-tensile を負荷した数値材料試験で得られたユニットセルの変形形状とマイクロ真応力の X 垂直方向成分の分布（[A]～[D] は図 4.9(a) 中の各記号に対応）	147
4.12	負荷速度別の XX-tensile を負荷した数値材料試験で得られたユニットセルの変形形状と温度分布（[A]～[D] は図 4.10(a) 中の各記号に対応） . . .	148
4.13	ユニットセル寸法別の数値材料試験結果：マクロ真応力－マクロ真ひずみ関係	149
4.14	ユニットセル寸法別の数値材料試験結果：マクロ温度－マクロ真ひずみ関係	150
A.1	Return-mapping 方程式の求解に必要な各種試行変数	161
A.2	Return-mapping 方程式の求解アルゴリズム	162

写 真 目 次

2.1 ポリカーボネートの R-20 型切欠き付き試験片	75
--	----

第1章 序論

1.1 本研究で対象とする材料の概要

1.1.1 熱可塑性樹脂の分類

高分子材料とは、図-1.1 に示す鎖状高分子（分子鎖）を基本構成要素として、これらが絡み合ったり化学的に結合することで構成される材料であり、それらは表-1.1 に示すように、金属よりも軽量かつ低剛性で、特有のクリープ特性や大変形能を有している。また、高分子材料は主成分がほぼ同じであっても分子鎖が作り出す構造形態が極めて多様であり、図-1.2 に示すように非常に多くの種類に分類される^{1,2)}。

第一に、ほとんどの高分子材料は自身の材料物性が著しく変化する固有のガラス転移温度を有している。特に、この温度を境に機械的特性が劇的に変化することが知られており³⁾、室温環境下で無負荷状態の時にこの温度より高温状態（ゴム状態）にある低剛性の材料をエラストマー、低温状態（ガラス状態）にある高剛性の材料を樹脂と呼んでいる

第二に、高分子材料は加熱による内部の化学的応答の違いによって熱硬化性と熱可塑性にも分類される⁴⁾。熱硬化性の材料は、加熱を施すことで隣接する分子鎖間を剛結する化学的な架橋反応が発現し、互いの運動を制限するため巨視的には固体状態として観察される。このような状態から冷却すると、形成された網目構造はその形態を保持したままで、再び溶融することはない。一方で、熱可塑性の材料は加熱しても化学

的な架橋反応がほとんど発現せず、分子鎖の重心運動が支配的となるため、巨視的には液体状態として観察される。しかし、冷却の際には運動に必要な熱エネルギーが取り除かれ、再度、固体として振る舞う。

特に後者の熱可塑性樹脂は、室温環境下で無負荷状態であれば高剛性のガラス状態にあり、加熱によってゴム状態、さらには液体に相変化する材料として定義することができる。このような材料は、加熱によって溶融する特性を活かすことで、射出成形などの熱間加工が容易であり、結果として大量生産が可能となる。さらに、製品の使用後に再度、溶融して成形することで再生が可能であるため、高リサイクル性も兼ね備えている。主な使用用途には、食品トレイやペットボトルなどの生活用品⁵⁾、梱包資材や断熱材などの建設資材⁶⁾が挙げられる。なかでもエンジニアリングプラスチックもしくはスーパーエンジニアリングプラスチックと呼ばれる工業用熱可塑性樹脂⁷⁾は、耐熱性、機械的強度、耐摩耗性に優れており、精密機器の機構部品に多用されている。

ところで、熱可塑性樹脂は、分子鎖が整列することで形成された結晶構造の含有度（結晶化度）に応じて分類がなされる。簡単には、結晶化度が0%であるものを非晶性熱可塑性樹脂、それ以外を結晶性熱可塑性樹脂と呼ぶ。なお、結晶化度が100%未満の結晶性熱可塑性樹脂は、高分子複合材料に分類され⁸⁾、マルチスケール解析手法などの数値解析手法を用いて巨視的な力学特性を評価しなければならないほど、その力学挙動は複雑であることが知られている。したがって、本研究ではこれらに対して比較的力学挙動が単純である非晶性熱可塑性樹脂を対象とする。

1.1.2 繊維強化熱可塑性樹脂 (FRTP)

樹脂の工業的な利用用途の中で、最も主流であるのが繊維強化樹脂 (FRP) である。FRP は、樹脂に繊維を充填させることで、双方の利点を活かしながら、かつ弱点を補いながら高強度・高剛性かつ軽量化を実現した複合材料である。代表的な FRP には、航

空宇宙分野や自動車の分野で主流の炭素繊維によって強化された CFRP や建設資材などで主流のガラス繊維によって強化された GFRP がある⁹⁾。

現在、FRP の母材に用いられる樹脂のほとんどは、エポキシ樹脂や不飽和ポリエステル樹脂などの熱硬化性樹脂である。これらは強度に優れ、クリープ性が単純といった力学的利点を有する一方で、先に述べたように固体状態になると再び、溶融することが出来ない弱点を有するため、加工やりサイクルが難しいとされる材料である¹⁰⁾。これらの問題点から、現状の FRP は生産性が非常に悪く高価であり、広く一般的な利用は未だ実現していない。

このような状況の中で、2013 年に NEDO プロジェクトとしてポリアミド系熱可塑性樹脂を母材とした炭素繊維強化熱可塑性樹脂 (CFRTP) が開発され¹¹⁾、多くの工業分野で注目されている。それを皮切りとして現在では、結晶性・非晶性に限らず多くの繊維強化熱可塑性樹脂 (FRTP) が開発されている。先述のように、熱可塑性樹脂は加熱を施しても個々の分子鎖が独立であり、巨視的には液体となる性質を有するため、これを母材とする FRTP は、生産性やりサイクル性に極めて優れ、さらに分子鎖の可動域が熱硬化性樹脂に比べて広いことから韌性にも優れた材料として知られている。したがって、FRTP は航空宇宙分野、自動車分野を代表として幅広い工業分野に利用が期待される次世代型新材料であるといえる。

1.2 非晶性熱可塑性樹脂の材料構成則

1.2.1 材料挙動の概要

微視的に観察した樹脂材料は、図-1.3 に示すように構成要素となる無数の分子鎖の絡み合いや接近、もつれによる物理架橋と炭素や水素などの主成分原子間の共有結合による化学架橋が混在した構造を有している。

このような構造に外的力学作用を与えた場合、個々の分子鎖は主鎖原子を起点として側鎖を回転させ（コンフォーメーション運動）、隣接した分子鎖との滑り運動を伴って構造が形態変化を行う。このとき、側鎖回転による分子鎖集団の系の乱雑さの増加を抑制する抵抗として弾性が発現し、絡み合った分子鎖間の摩擦抵抗として粘性が発現する。一方で、このような構造に熱を与え続けた場合、個々の分子鎖は自身の形態を変化させるのに必要なエネルギー（活性化エネルギー）を十分に有するため、コンフォーメーション運動が活発化する（ミクロブラウン運動）。このとき、外的力学作用に対して分子鎖集団は容易に形態変化を行い、巨視的にはガラス転移現象と呼ばれる剛性の急激な低下として観察される。このように、高分子材料は温度と負荷速度に依存した粘弾性体として捉えられ、これまで多数の材料モデルが提案されてきた^{8,12)}。そして、このクリープ特性を表現するのに最も基本的なものが一般化 Maxwell モデルを用いた粘弾性であり、現在でも高分子材料の実用的な変形・強度特性評価モデルとして広く用いられている。特に、ゴムや熱硬化性樹脂などの熱硬化性材料の場合では、**図-1.3**左に示すように、分子鎖集団の網目構造が個々の運動を制限しているため、主に引張条件下においては観察される粘性挙動も比較的単純であり、一般化 Maxwell モデルによってその力学挙動を精度良く予測することが可能であると示されている¹³⁾。

しかし、非晶性熱可塑性樹脂の場合は、**図-1.3**右に示すように、個々の分子鎖が乱雑に絡み合った構造を有し、外的力学作用に対して分子鎖構造の可動域は広範囲に渡る。このとき、物理架橋を基点とした複雑な滑り現象が発現し、**図-1.4**で示すように巨視的には極めて複雑なクリープ挙動が現れる¹⁴⁾。したがって非晶性熱可塑性樹脂の場合、熱硬化性材料で用いられるような粘弾性モデルだけでその力学挙動を再現することは困難である。具体的には、ガラス域における非晶性熱可塑性樹脂は微小変形域において分子鎖運動の可動域が少ないため、多くの樹脂材料に一般的な粘弾性挙動が支配的となって発現する。このとき [A] で示されるように、その挙動は温度と負荷速


度に依存した弾性として観察される。加えて、この変形域において除荷を施した場合には、微量の粘性流動が影響して弾性ヒステリシスが観察される。その後、さらなる負荷に対して多くの分子鎖が自身の形態変化に必要な活性化エネルギーを十分に蓄えることになり、可動域が増加して粘塑性初期降伏を迎える。このとき [B] で示されるように、応力勾配は滑らかに減少していきながら極大値に達し、応力のなめらかな減少に伴って急激に粘塑性変形が進展する。これがひずみ軟化現象であり、もつれながら分布していた分子鎖が外的力学作用に誘発されるコンフォーメーション運動によって整列した結果として、巨視的には粘塑性変形として現れる熱可塑性樹脂に特徴的な力学挙動である。その後、粘塑性変形が一気に進展した大変形域において、整列した分子鎖は外的作用に対して自身の化学的な結合間距離を延ばすことによつてのみ変形が可能となり、その際に現れる強い結合力が [C] で示されるような応力の立ち上がり挙動として観察される。これが配向硬化現象であり、分子鎖の伸び切り抵抗に伴って発現する硬化現象で、大変形域におけるゴム材料の力学挙動に類似性が認められる。一方で、ガラス域における非晶性熱可塑性樹脂に除荷を施した場合は、分子鎖の結合間距離が元に戻るものの、分子鎖集団の複雑な絡み合いが原因となって永久変形がほとんど保持されたままであり、[D] で示されるように、微小変形域における応力勾配をほとんど維持したまま応力が減少する。最後に、除荷終了後に一定の時間に渡って物体を保持するとき、巨視的には無応力状態であるが、微視的には分子鎖集団の絡み合い構造が起因となって、安定状態に至るまでの時間的なずれが生ずる。これが巨視的には [E] で示されるようなひずみ回復挙動である。

ところで、ガラス転移現象 [F] を発現し、ゴム域に突入した非晶性熱可塑性樹脂はガラス域とは異なる力学挙動を示す。まず、ゴム域における非晶性熱可塑性樹脂は、剛性が劇的に低下しているばかりでなく、[G] や [H] のように明確な弾性域を観察することすら不可能である。ガラス転移現象により外的力学作用をほとんど与えなくても分子

鎖はコンフォメーション運動やずり運動が可能となる活性化エネルギーを蓄えて自由に形態変化を行う。そして、ガラス域で観察されたような分子鎖の明確な可動域の増加を示す起点が消滅することで、ひずみ軟化現象が消滅し、巨視的には金属材料の一次クリープ挙動のように観察される。その後、定常クリープのような硬化挙動が進展し、最終的に [I] で示されるような応力の立ち上がり挙動が観察される。この挙動は、先述の [C] と同様に配向硬化現象によるものである。一方で、ゴム域における非晶性熱可塑性樹脂に除荷を施した場合、比較的ガラス転移点に近い温度環境を想定すると、ガラス状態で支配的であった粘塑性流動やレプテーションによる粘性流動が少なく、粘弾性的な緩和挙動が支配的となって [J] や [K] で示されるような、大きなひずみ回復が観察される。したがって、非晶性熱可塑性樹脂はガラス域からゴム域に渡って複雑に変化するクリープ特性を有しており、これが多種の環境温度・負荷条件を想定した非晶性熱可塑性樹脂からなる構造物の強度評価を極めて困難なものにしている..

1.2.2 ガラス域の材料構成則に関する先行研究

以上のように温度と負荷速度に依存した非晶性熱可塑性樹脂の力学挙動に関して、これまで様々な研究報告がされてきた。本項では、これまで多くの研究成果が報告されてきたガラス域における非晶性熱可塑性樹脂の材料構成則に関して代表的な先行研究をまとめた。

粘塑性流れ挙動に関する初期の研究には分子鎖の反応速度論を用いて物理化学的に検討した Eyring¹⁵⁾ の成果に端を発すると言われている。そして1960年代後半から70年代前半にかけて、ガラス域におけるクリープ挙動をモデリングする動きが加速し⁸⁾、現在でもほとんどの研究の基本となっている粘塑性流れモデルが提案された。Argon^{16,17)} は、Li と Gilman¹⁸⁾ や Liu と Li¹⁹⁾ の Disclination loop 理論に基づいて、 **図-1.5** で示すような2つのもつれを有する分子鎖を直線的に伸びる分子鎖で挟んだ二重キンクモデル

を設定し、せん断作用を与えた時に生じる分子鎖間の Gibbs エネルギーを導出することで、外力による活性化エネルギー障壁の変化をモデル化した。この理論の結果として得られた粘塑性乗数の発展則は、[B]における熱可塑性樹脂の初期降伏挙動を再現可能であり、ガラス領域における粘塑性流れモデルの代表格として多用されてきた。加えて、Argon は同論文の中で大変形域における二重キंकモデルのエントロピー変化を算出することで、配向硬化現象のマイクロメカニクスに基づくモデル化にも取り組んだ。

ところで、配向硬化現象はゴム材料の大変形域における弾性挙動に類似性が認められ、古くからこれを転用する形で研究が進められてきた。そもそも、ゴム材料の弾性挙動は内部エネルギーの変化に起因するもの（エネルギー弾性理論）ではなく、分子鎖集団の熱運動の際に生じる系の乱雑さを表すエントロピーの変化に対する抵抗（エントロピー弾性理論）として発現すると考えられている。具体的には、末端を化学架橋で剛結した一本の分子鎖モデルを設定し、コンフォメーション変化に対するポテンシャル障壁がないと仮定した上で、自由端の位置状態の分布関数からエントロピーを統計的に算出することで、最終的に弾性力を求める Gauss 鎖理論が初期の研究として代表的である⁴⁾。その後、Kuhn と Grim²⁰⁾ は Langevin 関数を導入して先述した分子鎖の伸び切り抵抗が考慮されたエントロピー弾性モデルを提案している。さらに、Flory と Rehner²¹⁾、Treloar²²⁾、Wang と Guth²³⁾ は複数本の分子鎖から構成される四面体や立方体形状の分子鎖モデルを設定し、系としてのエントロピー関数を導出することで、多軸場におけるゴム弾性挙動のモデル化に成功している。以上が、粘塑性流れ挙動と配向硬化現象（エントロピー弾性）に関する初期の研究であり、なかでもレオロジーモデルを用いた現象論的な非晶性熱可塑性樹脂の力学モデルについては、Eyring の粘性則を表現するダッシュポットと Langevin 関数を考慮したエントロピー弾性を表現するバネを並列に組み合わせた Haward と Thackray²⁴⁾ が比較的早期の研究として知られて

いる。

1980年代に入ると、現在でも主流とされる Boyce ら²⁵⁾の BPA モデルが提案された。彼女らは、Argon の粘塑性流れ則のなかでパラメータとして設定されていたせん断降伏強さに着目し、圧力依存性の付与とせん断降伏強さの発展則を現象論的にモデル化することで、[B]における初期降伏からその後のひずみ緩和挙動の再現に成功した。加えて、Wang と Guth モデル²³⁾を基本とした粘塑性変形量に依存するエントロピー抵抗から移動硬化則を導出することで、[C]における配向硬化現象の再現にも成功している。さらに、ひずみ緩和挙動は一軸引張試験で観察される瞬間的なネッキング現象の主要因として知られており、Wu と Giessen^{26,27)}は BPA モデルを応用し、平面ひずみ仮定の下での瞬間的なネッキング現象やネッキングの際に発生するせん断帯に関する考察も行っている。また、Arruda ら²⁸⁾はポリメチルメタクリレート (PMMA) の一軸圧縮試験から、真応力-真ひずみ関係と温度の時刻歴変化を測定した後、配向硬化モデルを Arruda-Boyce モデル²⁹⁾に置き換えた BPA モデルによる熱・機械連成解析を実行し、得られた解を実測値と比較することで時刻歴の温度変化に伴う BPA モデルの再現性能を評価した。Fleischhauer ら³⁰⁾は、熱可塑性樹脂の引張挙動に類似性が認められる熱硬化性樹脂の圧縮挙動の再現を実現するために、配向硬化現象のモデルを Miehe らの Micro sphere モデル^{31,32)}に置き換えた BPA モデルを用いて、エポキシ樹脂の圧縮挙動を高精度に予測している。Cynthia ら³³⁾は、ポリカーボネート (PC) の負荷・除荷、繰り返し載荷における力学挙動を実験的に評価するとともに、複雑な荷重条件に対する BPA モデルの表現性能を検証した。その他、Miehe ら³⁴⁾はマイクロメカニクスに基づき、一般に複雑である Argon の二重キック理論をベースとしながら、真ひずみで定式化し、アルゴリズムの簡略化や、高い数値安定性を実現可能な材料モデルを提案している。

さらに、図-1.4の[B]で観察される上降伏点近傍における応力の滑らかな推移は、図

-1.3に示すような分子鎖集団の中に分布する空隙（自由体積）の変化に由来しており、分子鎖の滑り運動を直接的にモデル化することで構築された Argon もしくは BPA モデルでは表現することが出来ない。そこで、Hasan と Boyce³⁵⁾ は分子鎖集団のスケールに注目し、コンフォメーション運動を抑制する活性化エネルギー障壁の空間分布の時刻歴変化を統計力学的に考慮することで、外的力学作用に対する分子鎖集団の複雑な流動性をモデル化し、上降伏点近傍における応力の滑らかな推移のモデル化に成功した。本モデルは Miehe ら³⁶⁾ によって 3次元問題へ拡張されており、マイクロメカニクスに基づくガラス域の粘塑性流れ挙動を高精度に再現可能なものである。ただし、この理論は非常に難解であるため普及していない。現在、提案されているほとんどの流れ則は、降伏強さの発展則を現象論的に改良したものであり、その代表例としては、Anand と Gurtin³⁷⁾ が挙げられる。彼らはその報告のなかで、BPA モデルの降伏強さの発展則に自由体積変化の影響を現象論的に考慮することで、非常に簡易なモデル化にも関わらず、上降伏点近傍における応力の滑らかな推移を高精度に再現した。加えて、BPA モデルで仮定されていた弾性非回転性を取り除き、熱力学的に完全な定式化を実現した。以上が、ガラス域のみを対象とした非晶性熱可塑性樹脂の力学モデルの代表例である。

1.2.3 ガラスーゴム状態の材料構成則に関する先行研究

一方で、[B] や [H] で示されるようなガラスーゴム状態における粘塑性降伏挙動の再現を目指した研究報告もされている。特に、Bauwens ら^{38,39)} は Ree-Eyring の非 Newtonian 粘性理論⁴⁰⁾ に基づいて、ガラス転移点を跨ぐ粘塑性降伏挙動のモデル化を行い、 α 緩和プロセスと β 緩和プロセスを考慮することが必要であることを示した。ここで、 α 緩和プロセスとはミクロブラウン運動やガラス転移現象に起因すると考えられており、この研究では、ガラス転移温度域における急激な剛性低下や損失正接の極大値、ならびに熱可塑性樹脂の低速負荷速度・高温状態におけるゴム域の材料挙動に言及してい

る。また、 β 緩和プロセスとは熱可塑性樹脂の高速負荷速度・低温状態におけるガラス域の材料挙動であり、未だ本質的なメカニズムは分かっていないが、一般に損失正接が極大値となる氷点下の温度近傍にて観測される緩和現象である。

この $\alpha - \beta$ 緩和プロセスモデルに基づく研究報告として、MullikenとBoyce⁴¹⁾が挙げられる。彼らは、 α および β 緩和プロセスをそれぞれ再現するBPAモデルを並列に繋いだレオロジーモデルを設定し、動的粘弾性試験を用いて実験的にそれぞれのプロセスに関する材料パラメータを決定することで、広域の負荷速度を対象としたガラス域における力学挙動の高精度な再現に成功しただけでなく、ガラス転移点を境とした粘塑性流れ挙動の遷移に関して有用な考察を与えた。実際に、DupaixとBoyce⁴²⁾はポリエチレンテレフタレート (PETG) に対するガラスーゴム状態の力学挙動の再現に成功している。さらに、Mathiesenら⁴³⁾はBoyceらのこれまでの成果を受け継ぐ形として、ガラスーゴム状態へ現象論的に拡張したBPAモデルと熱可塑性樹脂の準溶融域における力学挙動を表現可能なRouse linear entangled polymer (Rolie-Poly) モデル⁴⁴⁾を複合化させることによって、PMMAの広範な温度域に渡る応力緩和特性を評価した。その他、Hempel⁴⁵⁾は、BPAモデルを独自に改良した材料構成則を構築し、有限要素コード自動生成ソフトであるAceGenを利用することで、ガラスーゴム状態における非晶性熱可塑性樹脂構造物の3次元有限要素解析に成功した。

そのほか、 $\alpha - \beta$ 緩和プロセスモデルに基づき提案された代表的な粘塑性流れモデルとして、Richetonら⁴⁶⁻⁴⁸⁾のモデルが挙げられる。彼らは、FotheringhamとCherry⁴⁹⁾が“熱可塑性樹脂の粘塑性流れは個々の分子鎖が互いに協力し合いながら進展する”という考えの下で構築したco-operativeモデルをBauwensらの $\alpha - \beta$ 緩和プロセスモデルに適用することで、ガラスーゴム状態の粘塑性流れ挙動を高精度に再現可能なモデルを提案した。本モデルは、ガラスーゴム状態の非晶性熱可塑性樹脂に対する強度評価に関する研究に多用されており^{50,51)}、現在、ガラスーゴム域における材料モデリン

グにおいて主流とされる粘塑性流れモデルである。中でも、Richeton モデルを適用した研究成果として代表的なものに、Anand ら⁵²⁾ や Ames ら⁵³⁾ が挙げられる。これらの研究は、異なる力学現象を再現しうる要素を組み合わせたレオロジーモデルから非晶性熱可塑性樹脂が示す複雑な力学挙動を現象論的に予測しようとするマルチメカニズム理論⁵⁴⁾に基づいており、先述の Anand と Gurtin³⁷⁾ らと同様の熱力学的に整合する定式化を実現している。そして、提案モデルにより熱・機械連成解析を行って、ガラス域における非晶性熱可塑性樹脂の実用的な力学特性評価手法を提案している。さらに、これらの研究は Srivastava ら⁵⁵⁾ によってガラスーゴム状態を対象とした材料モデルに拡張されており、広範囲の温度・負荷速度域における負荷・除荷挙動の高精度な予測に成功している。一方、Bouvard ら⁵⁶⁾ は、内部変数理論⁵⁷⁾に基づく熱力学的定式化を行って、力学モデルの数理的側面を重視しており、ここで提案された材料構成則の適用範囲はガラス域に限定されるものの、非晶性熱可塑性樹脂の自己発熱現象に対する考察を与えている数少ない研究例である。

しかし、図-1.4 中の [E] や [K] で示すようなひずみ回復挙動は、粘弾性モデルによってのみ考慮可能な現象であるばかりでなく、微小変形域における弾性ヒステリシス、ガラス転移現象に伴う剛性低下挙動やゴム域における流動特性は粘弾性に起因しており、これは樹脂材料のモデル化で粘弾性を無視することは出来ないことを意味する。実際、非晶性熱可塑性樹脂の広範な温度・負荷速度域における粘弾性特性を取得する試みは散見される。まず、井上らは⁵⁸⁾ ポリカーボネート (PC) を対象として動的複屈折および動的粘弾性試験を実施し、分子鎖構造と粘弾性特性との関係性について検討した。また、Fan と Kazmer⁵⁹⁾ は WLF 式や Arrhenius 式などの温度時間換算則を整理して一般化 WLF 式を提案し、PC のガラス域から準溶融域までの粘弾性特性を取得することに成功している。さらに、Jazouli ら⁶⁰⁾ は室温環境に限定しているものの、PC の応力緩和試験から時間-応力重ね合わせの原理を用いてマスターカーブを描画する方法を提案

している。また、Richeton ら⁶¹⁾はMahieux と Reifsnider⁶²⁾の手法を拡張し、PMMA と PC を対象として広範な温度・負荷速度域における粘弾性特性の取得に成功している。最新の研究報告のなかには、Sangtabi ら⁶³⁾のように動的粘弾性試験を通して極めて長時間の粘弾性特性を取得することに成功した例もある。このように、一般の高分子材料を対象とした粘弾性と粘塑性の複合的な材料挙動について考察した研究例は数多く存在するが⁶⁴⁻⁶⁸⁾、非晶性熱可塑性樹脂の構成則の開発を意図した研究は極めて少ない。著者の文献調査の範囲内では、粘弾性と粘塑性の両方を考慮した初期の研究報告として Hasan と Boyce³⁵⁾が挙げられる。その後、Aleksy ら⁶⁹⁾や Kermouche ら⁷⁰⁾は、非晶性熱可塑性樹脂は上降伏点以前の微小・中間変形域において粘弾性が支配的であり、ひずみ軟化域を含めた大変形域においては粘塑性が支配的であると報告している。

1.3 非晶性熱可塑性樹脂からなる構造物の自己発熱を考慮した熱・機械連成解析手法

1.3.1 非晶性熱可塑性樹脂の自己発熱現象

前項で示したように、非晶性熱可塑性樹脂は負荷速度や温度に依存した弾性やクリープ特性を有しており、**図-1.4**に示すように、その全体的な力学挙動は実に複雑である。すなわち、非晶性熱可塑性樹脂からなる構造物の強度特性は、それが置かれた環境に依存することになる。このとき、その強度特性の予測を難しくさせているのが、非弾性変形に伴って発現する自己発熱現象である。特に衝撃荷重が負荷された構造物については、発熱によって生じた温度場の変化がその力学挙動に大きな影響を与えることが知られており、数値解析によって構造物の強度特性を正確に予測するためにはこのような自己発熱現象を考慮することが必要であると言われている⁷¹⁾。具体的には、負荷が与えられた非晶性熱可塑性樹脂は、降伏点を起点としたひずみ軟化に伴って粘塑性

変形が生じ、大きな散逸エネルギーが生み出される。そして、これらが熱エネルギーに変換されることで、変形部の温度が極端に増加する自己発熱現象となって観察される。事実、ポリカーボネート（PC）からなる構造物の引張試験では、ひずみ軟化に伴って瞬間的に約 30℃の温度増加が確認されており、後の変形域におけるクリープ特性に大きな影響を与えることが知られている¹⁴⁾。その後、自己発熱を熱源として非定常熱伝導が生じ、構造内で熱が伝搬していく。このとき、非晶性熱可塑性樹脂の材料特性は温度依存性が強いため、構造内で経時的に変化する温度場に追随しながら、その材料特性が非一様に分布することになる。つまり、構造物の変形・強度特性は、自身の発熱現象によって引き起こされる温度環境の変化を常に考慮する必要がある。そして、このような熱可塑性樹脂の熱・機械連成現象を予測するためには、その材料構成則の構築に加えて、経時的に変化する温度環境を考慮するための熱・機械連成解析手法を構築しなければならない。

ところで、前項で示したほとんどの先行研究では、非晶性熱可塑性樹脂の材料構成則の構築とともに熱・機械連成解析も行われている。それにも関わらず、これらのほとんどは汎用 CAE ソフトウェアのユーザーサブルーティンに実装することに終始しており、発熱による温度の上昇量の影響を明確には考慮していない（ただし、Arruda ら²⁸⁾、Richeton ら⁴⁸⁾、Bouvard ら⁵⁶⁾は例外）。また、前述の熱・機械連成解析の多くは熱力学第一法則と第二法則を組み合わせることによって導出した非定常熱伝導方程式と力学の平衡方程式を単に連立させただけの連成解析がほとんどである。このアプローチの問題点として、Clausius-Duhem の不等式から得られる散逸エネルギーをそのまま熱生成項に転用しており、非弾性散逸エネルギーが熱エネルギーに変化する際の効率が考慮されていないことやエントロピーに由来する熱伝導方程式の非定常項に対して力学作用の依存性を無視していること、さらには、熱伝導方程式と力学の平衡方程式の連立方程式が作り出す変分構造が保持されておらず、剛性マトリクスの非対称性な

どに起因して数値計算上の不安定性が避けられないことなどが挙げられる。特に非晶性熱可塑性樹脂の場合では、ひずみ軟化に伴って数十°Cの発熱が生じることが実験的に分かっており、それが自身の力学特性に大きな影響を与えるため、より精度の高い熱・機械連成解析手法が求められる。

1.3.2 熱・機械連成解析手法に関する先行研究

熱・機械連成解析手法の最初期の研究として Oden と Kross⁷²⁾ が挙げられる。彼らは力学の平衡方程式と熱力学第一法則、第二法則により導出した非定常熱伝導方程式を連立させることによって、温度場の変化に依存した熱弾性体の力学挙動の予測に成功した。ただし、有限要素離散化の際に温度場の変化が微小である仮定を設ける必要があり、大きな温度変化に伴う力学挙動の変化の再現には至っていない。関連して、熱弾性体を対象とした研究報告には Carter と Booker⁷³⁾ がある。彼らは、熱膨張による温度と変形の連成部分に起因する剛性マトリクスの非対称性を克服することで、数値的に安定的な熱弾性体の熱・機械連成解析手法を提案した。しかし、これらの定式化では非弾性発熱項の有限要素離散化が不可能であり、塑性を伴う問題に直接転用することは出来ない。

Oden と Kross 以降、長年の間、熱・機械連成解析手法に関する明確な研究報告はなされていなかったが、1990年になって Simo⁷⁴⁾ が塑性変形やそれに伴う発熱を考慮した熱・機械連成理論を提案した。具体的には、Clausius-Duhem の不等式から得られる散逸エネルギーを用いて散逸ポテンシャル関数を導出し、熱・機械連成問題をポテンシャルの停留点問題としてとらえることで、その統一的な議論を行った。その後、Armero と Simo⁷⁵⁾ は環境温度と物体の内部温度といった2つの温度変数を導入することによって、熱・機械連成ポテンシャルの変分構造を保証し、弾塑性体の有限要素解析によって数値的な安定性を例証している。

このように、熱・機械連成問題はポテンシャルの変分構造を担保するためにどのように定式化を行うかが重要となる。そのなかで、Ortiz と Stainier⁷⁶⁾ は連続体の物質点近傍におけるエネルギーの時間変化をモデリングし、その状態変数に対する最小化問題から増分的な応力や内部変数を求めようとする増分ポテンシャル法 (Incremental Variational Formulations) を提案した。本手法は、弾塑性体の数値計算手法で標準的な Return-mapping 法にとって代わるものであり、その後、様々な力学問題に対して適用がなされた。Fancello ら⁷⁷⁾ は粘弾性体に対する増分ポテンシャルを定式化し、これまで提案されてきた標準的な粘弾性モデルが増分ポテンシャルの状態変数に対する勾配から導出されることを示した。また、Fancello ら⁷⁸⁾ は粘塑性ひずみのスペクトル分解を用いて増分ポテンシャルを定式化することで粘塑性散逸固体を3次元問題へと拡張し、引張試験解析や膜の膨張解析を通してその性能を検証した。さらに、Mosler と Bruhns⁷⁹⁾ は、Drucker-Prager モデルや Mohr-Coulomb モデルを対象とした非関連塑性体の増分ポテンシャル法を提案し、その中で彼らは最大塑性散逸の原理にて現れる応力の最大化問題も増分ポテンシャルの最適化問題に含めることで、より一般的な定式化に成功している。その他、Bleier と Mosler⁸⁰⁾ らは弾塑性体の流れ則について増分ポテンシャル法を適用してより効率的なアルゴリズムを構築し、Balzani と Ortiz⁸¹⁾ や Miehe と Lambrecht⁸²⁾ はマルチスケール問題への応用も実現している。

この増分ポテンシャル法を熱・機械連成問題に応用したのが、Yang ら⁸³⁾ である。彼らは、Simo⁷⁴⁾ や Armero と Simo⁷⁵⁾ が行った熱・機械連成問題のポテンシャル理論に対して増分ポテンシャル法を適用することで、履歴依存問題に対する正確なポテンシャルの変分構造を保証し、本手法が散逸エネルギーの熱変換効率を理論的に算出可能であることを示した。その後、Stainier と Ortiz⁸⁴⁾ によって有限要素解析を通じた本手法の検証が行われている。また、Canadija と Mosler⁸⁵⁾ は Mosler と Bruhns の非関連塑性体⁷⁹⁾ に対する熱・機械連成問題への拡張を実現している。また、Stainier⁸⁶⁾ は熱・機械

連成増分ポテンシャル法に関する非弾性双対散逸ポテンシャルの数値解析における整合性に関して追加的な議論を行っている。一方、非定常熱伝導挙動に関して Bargmann と Steinmann⁸⁷⁾ は温度の時間積分量である熱変位ベクトル^{88,89)}を導入し、変形などへの依存性を包含する複雑な非定常熱伝導問題の統一的な記述に成功している。このように、発熱を考慮した熱・機械連成解析手法は Simo⁷⁴⁾ のポテンシャル理論に端を発し、Ortiz と Stainier⁷⁶⁾ の増分ポテンシャル法へと拡張されていった経緯がある。

1.4 FRTP の自己発熱を考慮した熱・機械連成解析手法

FRTP は、熱可塑性樹脂に繊維材を充填することによって構成される複合材料であり、その微視的（ミクロ）な構造の非均質性が巨視的（マクロ）な力学特性に影響を与えることが知られている。このような複合材料の強度特性の評価手法としては、ミクロな非均質性を表す代表体積要素（ユニットセル）と非均質性が平均化された複合材料に等価なマクロ構造への分離を数学的に実現し、両者の相互作用を考慮しながらその変形・強度特性評価を行う数学的均質化法に基づくマルチスケール解析手法⁹⁰⁾が主流であり、既に実用的な応用も実現している。そのなかで、寺田ら⁹¹⁾は周期構造に対する一般化収束論⁹²⁾において、非均質体の支配方程式に対するミクロ構造のスケールを無限小にする極限操作の two-scale 収束解が、ミクロとマクロの問題に分離を可能とすることを利用して、有限変形理論に基づく熱力学的に整合したマルチスケール解析手法を構築し、実際の物質および空間表記での数値計算アルゴリズムを提案している。また、多軸方向のミクロ構造解析結果を仮想的な実験結果と見立て、そのデータを基にあらかじめ設定しておいたマクロ材料構成則のパラメータを求めることで、ミクロとマクロの構造解析を完全に分離することを実現した数値材料試験⁹³⁾を提案している。

ところで、第 1.2 節と第 1.3 節で示したように、熱可塑性樹脂からなる構造物は強いクリープ特性や自己発熱現象に起因して、経時的に変化する温度場に追随しながら、そ

の材料特性が非一様に分布する。このような熱可塑性樹脂の変形と温度場が相互に影響する特性は、FRTPにも反映されることが知られている。例えば、FRTPの疲労特性は母材の自己発熱に影響を受けて低下すると言われており⁹⁴⁾、幅広い環境条件が想定されるFRTP構造物の寿命予測を難しくさせる。さらに、FRTPのマイクロ構造は母材と繊維材が混在した構造を有しているため、母材の発熱によって生じた温度の空間的な伝導形態はより一層複雑となる。したがって、FRTPの強度評価を実現するためには、マイクロ構造内の発熱に起因する変形と温度場の非定常性を考慮する必要がある、熱・機械連成問題に対するマルチスケール解析手法の構築が必要不可欠である。

これに関して、寺田ら⁹⁵⁾はマイクロ構造の熱伝達を考慮した熱・機械連成マルチスケール解析手法を提案しており、また、TemizerとWriggers⁹⁶⁾も熱弾性体に対する熱・機械連成マルチスケール解析手法を提案している。しかし、数学的均質化法はマイクロとマクロの問題の空間スケールに対する分離のみを考えているため、必然的にマイクロ構造内の物理量が常に定常状態であると仮定されてしまう。したがって、自己発熱に起因するマイクロな物理量の非定常性をマクロな物理量に反映するには理論の再構築が必要であるといえる..

1.5 本研究の位置づけと目的

以上の背景から、多種の環境温度、負荷速度条件を想定した非晶性熱可塑性樹脂およびFRTPからなる構造物の強度評価を実現するためには、ガラス域からゴム域に渡って複雑に変化するクリープ挙動を予測するだけでなく、クリープ変形に伴って発現する自己発熱が及ぼす変形と温度場の時刻歴変化を考慮することが必要である。したがって本研究ではまず、広域の温度・負荷速度帯におけるガラスーゴム状態を対象とした材料構成則の構築を行い、自己発熱を考慮した熱・機械連成解析手法へ応用することでこれを実現する。

1.5.1 非晶性熱可塑性樹脂のガラスーゴム状態を対象とした材料構成則に関する本研究の位置づけと目的

第1.2節で示したガラスーゴム状態を対象とする非晶性熱可塑性樹脂の力学挙動に関する先行研究は、粘弾性もしくは粘塑性のどちらか一方に傾倒しており、両方を取り入れた材料構成則に関する研究は極めて少ない。しかし、図-1.4の[B]に示すようなひずみ軟化挙動や[C]や[I]に示すような配向硬化現象は粘塑性特有の現象であり、第1.2.1項で示したように、そもそも粘弾性モデルのみではこれらの現象を再現をすることはできない。逆に、[E]や[K]に示すようなひずみ回復挙動や[J]に示すようなゴム域における応力勾配の大きな除荷挙動は粘弾性特有の現象であるばかりでなく、粘塑性モデルのみでは弾性特性の負荷速度依存性を考慮することができない。さらに、粘弾性と粘塑性は互いに影響しあうことで複雑なクリープ挙動を呈することが知られている。特にガラス転移温度域では分子鎖の熱運動が活発になることに起因して粘弾性が大きく発現するため、高速負荷を与えるとガラス状態の挙動を示し、逆に低速負荷を与えるとゴム状態の挙動を示すことが知られている¹⁴⁾。このような現象に対して、粘塑性モデルのみを用いた先行研究では、動的粘弾性測定(DMA)の結果からガラス転移温度に全変形速度の依存性を付与することで、その再現を試みている⁴²⁾。しかし、粘弾性特性は弾性係数や硬化係数の温度依存性に反映されるに過ぎず、粘弾性変形の影響を考慮することができないことが問題となっている。

以上の背景より、本研究では、上述のようにガラスーゴム状態における非晶性熱可塑性樹脂の力学挙動を再現するためには粘弾性と粘塑性の相互作用を明確にモデル化する必要があると考え、それらを複合的に考慮した材料構成則を提案する。そして、図-1.4の[A]から[K]で示される広域の温度・負荷速度帯における力学挙動を再現することを試みる。本研究で提案する材料構成則の特徴は、まず粘弾性と粘塑性の相互作用は全変形の乗算分解を基点としていることである。これにより、ガラス転移温度域で

粘弾性が大きく発現する際に、対応して粘塑性の永久変形が小さくなることで、[K]や[J]で示されるような粘弾性挙動を表現することが可能となる。また、ガラスーゴム状態に対応した粘塑性硬化現象を再現するために、粘弾性モデルによって定義可能な緩和弾性率が表現しうるガラス転移温度域における劇的な剛性低下の論理を粘塑性硬化発展則に反映させる。これにより、ガラス状態もしくはゴム状態で特徴的な粘塑性硬化挙動を再現可能となるばかりでなく、負荷速度に依存してガラスもしくはゴム状態に変化する粘塑性硬化挙動を再現可能となる。

1.5.2 非晶性熱可塑性樹脂の自己発熱を考慮した熱・機械連成解析手法に関する本研究の位置づけと目的

第1.2節で示した先行研究の多くは、非晶性熱可塑性樹脂からなる構造物の熱・機械連成解析を実施している。これらのなかには弱連成解析を実施している例が散見される。しかし、自己発熱による温度増加が激しいひずみ軟化域においては、ひずみ速度が数10[%/s]にも達するため¹⁴⁾、弱連成解析では非常に多くの計算ステップを刻む必要があり、誤差の蓄積なども問題となって非現実的であると考えられる。つまり、このような瞬間的な現象に対する熱・機械連成挙動を正確に捉えるためには強連成解析手法の導入は必須である。

一方で、非晶性熱可塑性樹脂の場合では強連成解析を試みるのが一般的である。しかしこれらのほとんどは、熱力学的定式化を通して得られる非弾性散逸エネルギーに熱変換効率を表すパラメータを掛けたものを自己発熱量とした簡易的な非定常熱伝導方程式を解いているに過ぎないため、自己発熱による温度上昇の定量的な評価には至っていない。この原因は、非弾性散逸エネルギーの熱力学的駆動力に対するLegendre-Fenchel変換から得られる散逸ポテンシャルの導出を行っておらず、材料モデルが有する本来の発熱性能を議論することができないからである。また、流れ則や発展則、降伏関数

などの熱力学的整合性は散逸ポテンシャルによって担保されることから、固体熱力学の理論的にも不完全なものであると言わざるを得ない。つまり、材料構成則が有する本来の発熱性能を踏まえて熱・機械連成解析手法を実行するためには、散逸ポテンシャルを導出して熱力学的定式化を完結させる必要がある。

そこで本研究では、固体熱力学的な整合性を重視して、粘弾性・粘塑性複合構成則の熱力学的定式化を完結させ、材料構成則が有する本来の発熱性能を再現可能な熱・機械連成解析の実現を目指す。その実現のために、提案する材料構成則に対して粘弾性と粘塑性の散逸ポテンシャルをそれぞれ導出し、構築した材料モデルを熱・機械連成増分ポテンシャル法⁸³⁾に適用する。本研究で実現する熱・機械連成解析の先行研究に対する大きな違いは、まず非弾性変形による散逸ポテンシャルを明確に定式化し、その独立変数に対する停留値から流れ則や発展則などのモデルが再生されることを示して固体熱力学的に整合した材料構成則を提案したこと、さらに、得られた散逸ポテンシャルを自己発熱による熱生成に用いることで、材料構成則が有する本来の発熱性能を考慮した熱・機械連成解析を実現することである。

1.5.3 FRTPの自己発熱を考慮した熱・機械連成解析手法に関する本研究の位置づけと目的

本研究の最終目標は、多種の環境温度、負荷速度条件を想定したFRTPからなる構造物のマクロな熱・機械連成特性を評価することである。ところが、第1.4節で示したように、これまでのマルチスケール解析手法はマクロ的に非定常であっても、ミクロ構造内の物理量は必ず定常状態である仮定の下で構築されており、自己発熱に起因するミクロ物理量の非定常性を考慮することができない。それどころか、このようなミクロな非定常性がマクロな物理量に与える影響について検討した先行研究も見当たらない。そこで、FRTPからなる構造物の熱・機械連成特性評価手法の構築を最終的な目標

としてまず、提案する非晶性熱可塑性樹脂の粘弾性・粘塑性複合構成則と熱・機械連成解析手法を用いた数値材料試験⁹³⁾を複数の力学条件下において実施することで、得られた結果から F RTP の自己発熱に起因するミクロ物理量の非定常性がマクロな熱・機械連成特性に与える影響について基本的な検討を行う。

1.5.4 本論文の構成

以上のような本研究の目的と先行研究の位置づけに対して、非晶性熱可塑性樹脂からなる構造物の熱・機械連成強度評価とその F RTP 構造物への応用に関して、本論文は下記に示す章立ての構成とする。

- 第二章 非晶性熱可塑性樹脂の粘弾性・粘塑性複合構成則
- 第三章 非晶性熱可塑性樹脂の熱・機械連成解析
- 第四章 F RTP に対するミクロ構造の非定常性を考慮した数値材料試験
- 第五章 結論

まず第二章では、ガラスーゴム状態を対象とした非晶性熱可塑性樹脂について、図-1.4に示す力学挙動のすべてを表現可能な材料構成則を定式化するために、マルチメカニズム理論に基づくレオロジーモデルを設定する。そして、これを参照しながら高分子材料で一般的な粘弾性モデルと非晶性熱可塑性樹脂特有の力学挙動を表現するための粘塑性モデルを複合化した材料構成則を提案する。具体的な定式化に際しては、粘弾性に Holzapfel と Simo^{100,101)} の一般化 Maxwell モデルによる線形粘弾性を採用し、Hencky 型超弾性構成則を用いてモデル化を行う。また、粘塑性流れに関しては Richeton ら⁴⁶⁾ が提案したガラスーゴム域の粘塑性流れを再現可能な co-operative モデルを採用する。等方硬化挙動には、Boyce ら²⁵⁾ や Bouvard ら⁵⁶⁾ のモデルを基本としてガラスーゴム域

に対応させるために緩和弾性率の論理を反映した独自のモデルを構築する。なお、配向硬化現象を再現するための粘塑性移動硬化には、Amesら⁵³⁾が用いているGent¹⁰⁴⁾のゴム弾性モデルを採用し、DupaixとBoyce⁴²⁾らと同等のゴム剛性の温度依存関数を定義することによって、そのガラスーゴム域に対応したモデル化を行う。本章の最後では、ポリカーボネート(PC)の動的粘弾性試験や一軸引張負荷・除荷・保持試験の結果¹⁴⁾を通して、提案した粘弾性・粘塑性構成則の材料パラメータを決定するとともに、そのガラスーゴム状態に渡る力学挙動の再現性能を検証する。

第三章では、第二章で構築した粘弾性・粘塑性複合構成則を熱・機械連成問題へ拡張するために、熱・機械連成増分ポテンシャル法⁸³⁾を導入する。具体的にはまず、熱・機械連成増分ポテンシャル法の概要を熱力学の観点から基本論理を対応付けて説明する。また、粘弾性・粘塑性複合構成則を増分ポテンシャル法に適用する際には、自由エネルギーや散逸エネルギーを内部変数の駆動力で最適化した双対散逸ポテンシャルが必要となるが、これらは、第二章で行った定式化を拡張し、ポテンシャル理論に基づいて独自に導出する。そして、導出した粘弾性・粘塑性複合構成則の増分ポテンシャルに対して各状態変数の第一変分を施すことで粘弾性・粘塑性複合構成則が再生されることを示す。解析例題にはまず、実装した増分ポテンシャル法の検証例としてStainierとOrtiz⁸⁴⁾が行った断熱状態における α チタニウムの引張試験解析を実施し、温度依存の力学挙動や非弾性変形に伴う発熱量が正確に再現できることを示す。次に、PCの一軸引張試験の再現解析を通して、力学応答のみの解析結果と比較を行い、構造物の温度環境の変化に起因する力学挙動の変化について考察する。関連して、本試験中にDIC計測された温度上昇量の実測値¹⁴⁾を再現解析の結果と比較することによって本手法の熱・機械連成特性の再現性能について検証する。

第四章では、FRTPからなる構造物のマルチスケール熱・機械連成特性評価への応用を見据えて、一方向強化材を模擬したユニットセルに対する数値材料試験⁹³⁾を実施す

る。具体的にはまず、提案した粘弾性・粘塑性複合構成則を実装した熱・機械連成解析手法を適用して数値材料試験を実施し、FRTPが示す異方的な非弾性挙動について考察する。そして、物質点断熱の下で簡易的に発熱を計算した力学応答解析の結果と比較することで、母材の発熱によるユニットセル内のマイクロ温度場の時刻歴変化が対応するマクロ応力やマクロ温度に与える影響について考察する。さらに、ユニットセル内の非定常性に関する追加的な考察として複数の負荷速度やユニットセル寸法を設定した数値材料試験を実施することで、負荷速度とユニットセル内の温度場の伝導速度の兼ね合いがユニットセル内の応力場や対応するマクロ応力並びにマクロ温度に与える影響を考察する。

第五章では、本研究で得られた結論及び克服すべき課題や今後の展望について総括する。

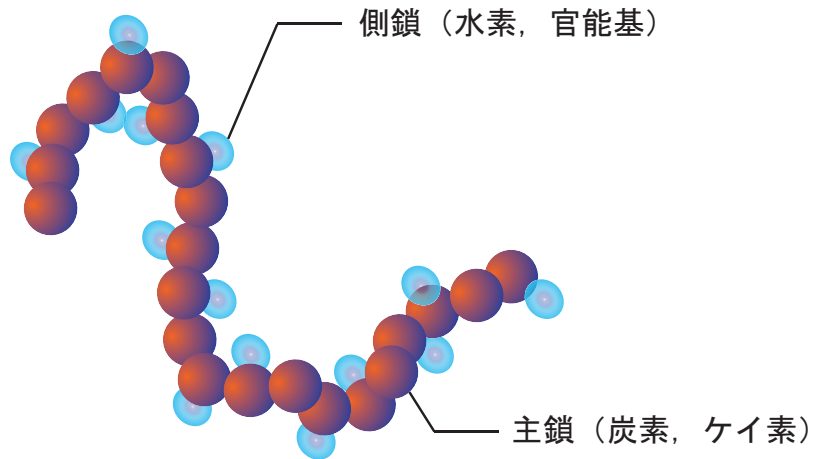


図-1.1 分子鎖の形状

表-1.1 各種材料の密度とヤング率の一般的な値^{1,2)}

	密度 [$\times 10^3 \text{kg/m}^3$]	ヤング率 [GPa]
工業用純鉄	7.87	205
アルミニウム	2.60	70~71
エポキシ樹脂	1.11~1.40	2.4
ポリカーボネート (PC)	1.20	2.4
弾性ゴム	0.91~0.96	0.0015~0.005

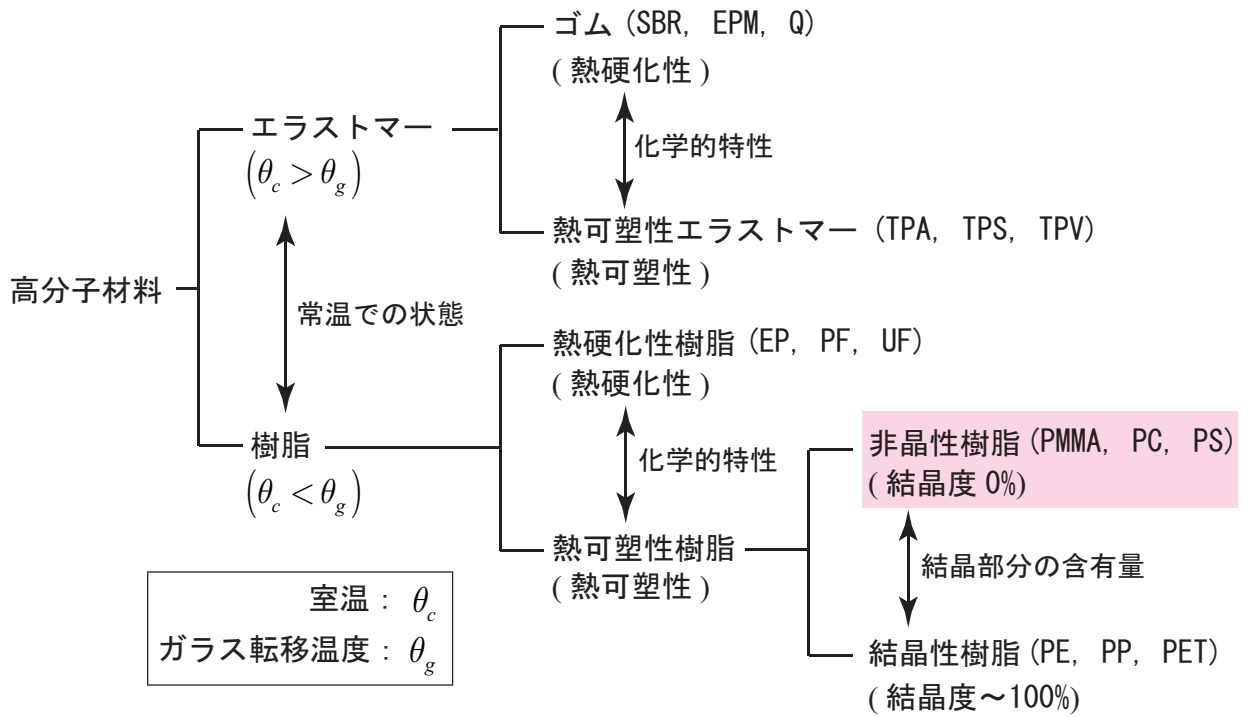


図-1.2 高分子材料の分類

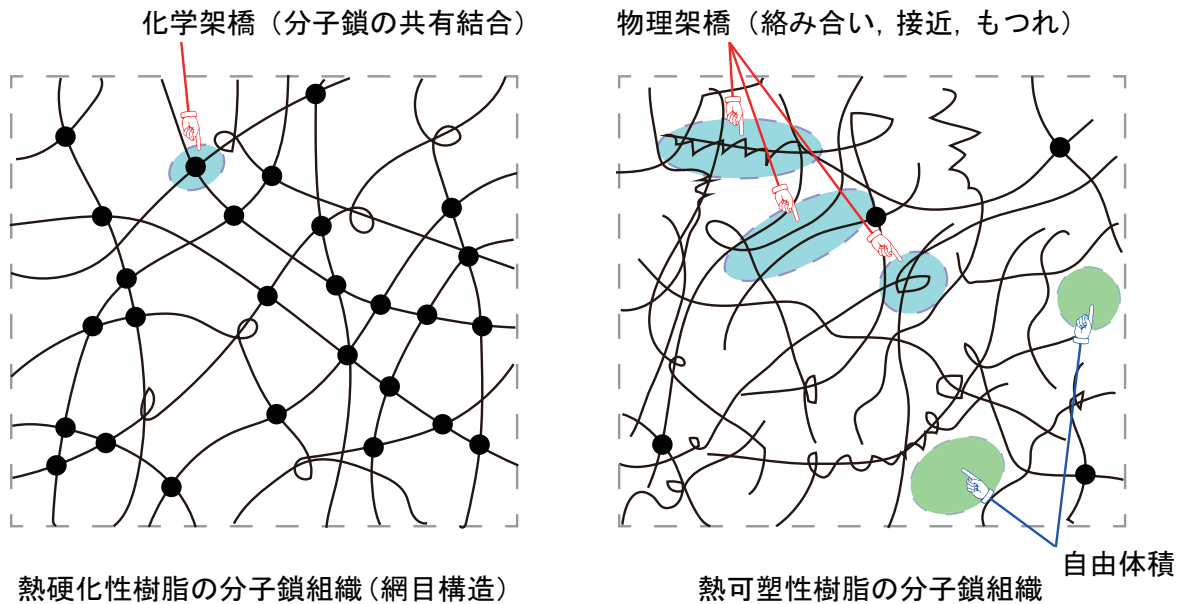


図-1.3 樹脂内部の分子鎖組織構造

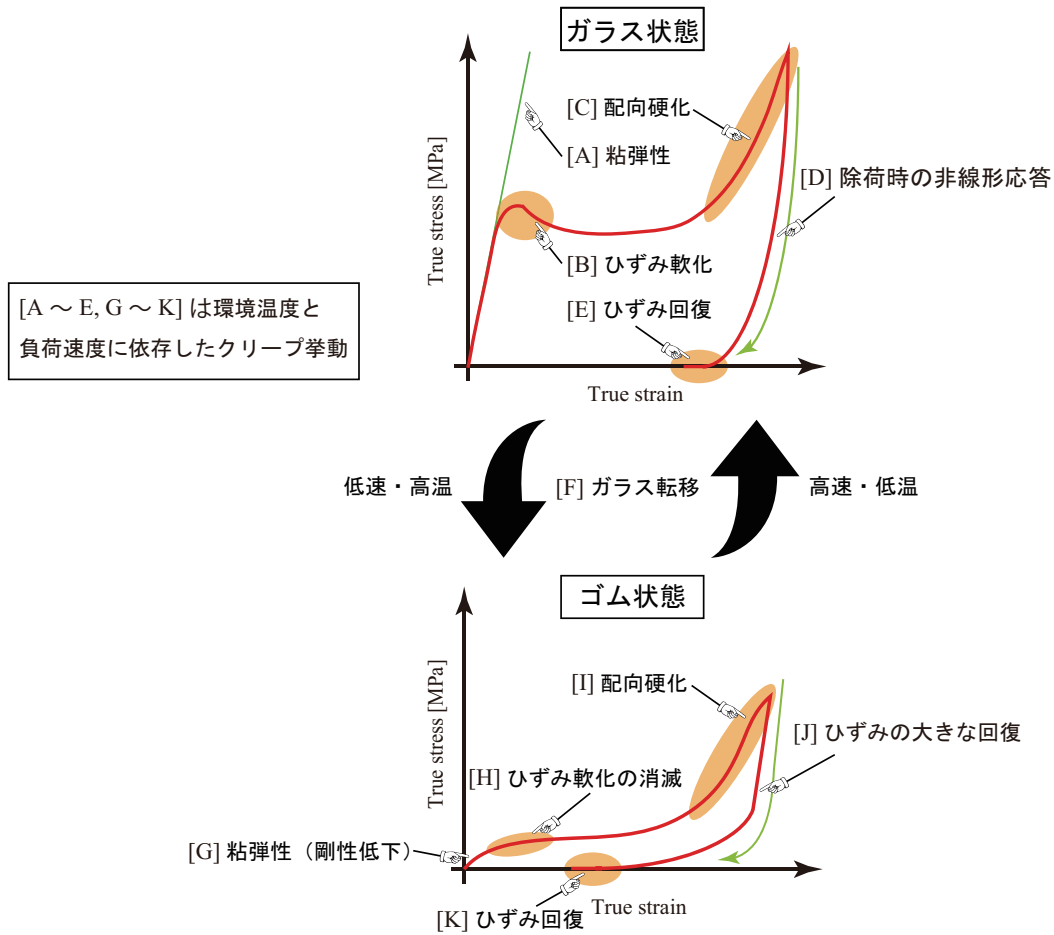


図-1.4 非晶性熱可塑性樹脂のガラスーゴム状態における力学挙動

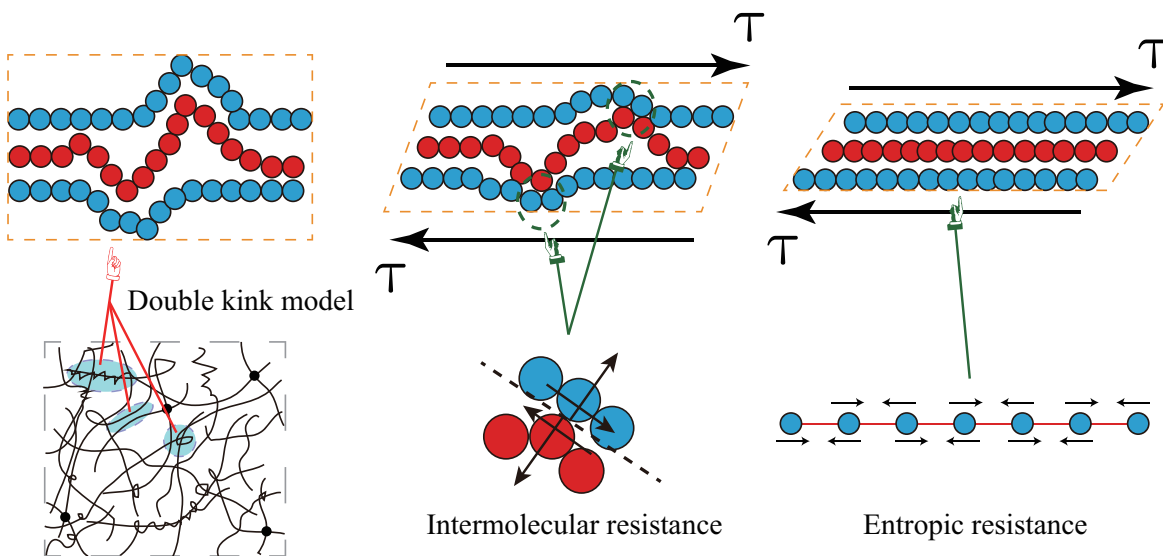


図-1.5 Argon^{16,17)} の二重キック理論

第2章 非晶性熱可塑性樹脂の粘弾性・粘塑性複合構成則

2.1 はじめに

第 1.5.1 項で示したように、ガラスーゴム状態を対象とした非晶性熱可塑性樹脂は、粘弾性と粘塑性が互いに影響しあうことで複雑なクリープ挙動を呈する。特にガラス転移温度域では分子鎖の熱運動が活発になることに起因して粘弾性が大きく発現するため、高速負荷を与えるとガラス状態の挙動を示し、逆に低速負荷を与えるとゴム状態の挙動を示す。ところが先行研究では、粘弾性もしくは粘塑性のどちらか一方に傾倒したモデルがほとんどであり、両方を取り入れた材料構成則に関する研究報告は極めて少ない。

そこで本研究では、非晶性熱可塑性樹脂に対する現象論的な材料モデリングで一般的なマルチメカニズム理論⁵⁴⁾に倣って図-2.1 に示すレオロジーモデルを設定し、これを参照しながら粘弾性と粘塑性を複合的に考慮した材料構成則を提案する。個々の力学モデルを概念的に示すレオロジー要素は並列に配置されることが一般的であるが、本研究では、これらを直列に配置することで、全変形の乗算分解を基点とした粘弾性と粘塑性のより強い相互作用を考慮する。これにより、ガラス転移温度域で粘弾性が大きく発現する際に、対応して粘塑性の永久変形が小さくなり、ゴム域において支配的な粘弾性挙動を表現することが可能となる。また、ガラスーゴム状態に対応した粘塑

性硬化現象を再現するために、粘弾性モデルによって定義可能な緩和弾性率が表現しうるガラス転移温度域における劇的な剛性低下の論理を粘塑性硬化発展則に反映する。これにより、ガラス状態もしくはゴム状態で特徴的な粘塑性硬化挙動を再現可能となるばかりでなく、負荷速度に依存してガラスもしくはゴム状態に変化する粘塑性硬化挙動を再現可能となる。

本章の構成はまず、第2.2節から第2.5節では、本研究で提案する粘弾性・粘塑性複合構成則の熱力学的定式化の詳細を示す。ここでは、図-2.1に示すレオロジーモデルを参照しながら、全変形を粘弾性成分と粘塑性成分に乗算分解し、粘弾性・粘塑性複合構成則として理論的に整合した材料構成則を構築する。また、粘塑性硬化現象の粘弾性による影響を考慮するために、各種硬化変数に対して緩和弾性率を反映した独自の発展則を提案する。第2.6節では、第2.7節と第2.8節で同定した材料パラメータを用いて、6面体要素1つで構築された解析モデルに対する一様変形解析を実施し、得られた真応力-真ひずみ関係から提案する粘弾性・粘塑性複合構成則の基本的な性能を示す。第2.7節では、ポリカーボネート（PC）に対する動的粘弾性試験の結果を用いて、提案する材料構成則の粘弾性部分の材料パラメータを同定する。特に、ガラス-ゴム状態における粘弾性特性を取得する必要があるため、本研究ではFanとKazmer⁵⁹⁾らのシフトファクターを用いてその材料パラメータを同定した。なお、同定結果の精度は緩和スペクトルや緩和弾性率から検証する。第2.8節では、ポリカーボネート（PC）に対する負荷・除荷引張試験の結果を用いて、提案する材料構成則の粘塑性部分の材料パラメータを同定する。特に、除荷を行う変形帯を複数設定することで、提案した材料構成則の各変形域における再現性能を検証する。また、除荷終了後に無負荷保持を行った試験結果を用いて、ひずみ回復挙動に対する再現性能を検証する。最後に第2.9節では、複数の環境温度と負荷速度水準を設定した負荷・除荷・無負荷保持試験の再現解析を行い、これらを実験結果と比較することで、材料構成則の再現性能を検証

する．特に，ガラス転移点を跨ぐ温度域におけるガラスからゴムへの遷移過程の再現性能に注視して検証する．

2.2 運動学的変数の定義

2.2.1 変形勾配の粘弾性・粘塑性乗算分解

時間 $t = t_0$ において 3 次元ユークリッド空間 \mathbb{R}^3 内に滑らかな境界 ∂B_0 を有する参照配置の連続体 $B_0 \subset \mathbb{R}^3$ を考え，その各物質点を $\mathbf{X} \in B_0$ とする．このとき，時間 t における現配置の連続体 B_t は一対一対応のなめらかな運動 $\varphi : B_0 \times [t_0, t] \rightarrow B_t \subset \mathbb{R}^3$ によって定義され，現時刻に対応する各物質点 $\mathbf{x} \in B_t$ は参照配置の物質点 \mathbf{X} と時間 t の関数として， $\mathbf{x} = \varphi(\mathbf{X}, t)$ のように表現される．同時に，現配置の物質点 \mathbf{x} は変位 $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{X}, t)$ を定義することによって $\mathbf{x} = \mathbf{u} + \mathbf{X}$ とされる．また，参照配置と現配置に，それぞれ正規直交基底 $[\mathbf{E}_I, I = 1, 2, 3]$ と $[\mathbf{e}_i, i = 1, 2, 3]$ で構成されるデカルト座標系 $\mathbf{O} - \mathbf{XYZ}$ と $\mathbf{o} - \mathbf{xyz}$ を設定したとき，各配置における物質点はそれぞれ $\mathbf{X} = X_I \mathbf{E}_I$ と $\mathbf{x} = x_i \mathbf{e}_i$ で記述される．さらに，各配置 B_0, B_t に対して物質点 \mathbf{X}, \mathbf{x} 近傍で定義される接線ベクトル $d\mathbf{X}, d\mathbf{x}$ の間で線形写像 $d\mathbf{x} = \mathbf{F}d\mathbf{X}$ となるような変形勾配 \mathbf{F} を次式で定義する．

$$\mathbf{F} \equiv \nabla_{\mathbf{X}} \varphi(\mathbf{X}, t) \quad (2.1)$$

ただし，連続体内の任意の物質点 \mathbf{X} における変形勾配は正則であるとする（体積ヤコビアン $J = \det(\mathbf{F}) > 0$ ）．なお，本研究では関数 $f(\mathbf{a})$ の \mathbf{a} に対する勾配を $\nabla_{\mathbf{a}} f(\mathbf{a})$ に統一して記述する．最後に，連続体内の一点の温度状態を物質表示 $\theta \equiv \theta(\mathbf{X}, t) \in \mathbb{R}_+ = \{\theta \mid \theta > 0, \theta \in \mathbb{R}\}$ の絶対温度で定義する．

図-2.1 には，本研究で構築する粘弾性・粘塑性複合構成則の基本構造を表すレオロジーモデルを示す．本レオロジーモデルは，粘弾性特性を表現するための一般化 Maxwell 要素と粘塑性流動や粘塑性移動硬化を表現するための粘塑性要素を直列に連結させる

ことによって構成される。まず、本レオロジーモデルを参照して変形勾配を次式のように乗算分解する^{97,98)}。

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^{\text{ve}} \mathbf{F}^{\text{vp}} \quad (2.2)$$

ここで、 \mathbf{F}^{ve} と \mathbf{F}^{vp} はそれぞれ一般化 Maxwell 要素に作用する粘弾性変形勾配と粘塑性要素に作用する粘塑性変形勾配である。また、物質点 \mathbf{X} 上の接線ベクトル $d\mathbf{X}$ に粘塑性変形勾配を作用することで得られる接線ベクトル $d\mathbf{X}^*$ が張る局所的な数学領域 $B^{\text{vp}} \subset \mathbb{R}^3$ を粘弾性応力解放配置として定義する。

一方で、変形勾配を次式のように体積変形成分と等容変形成分に乗算分解する⁹⁹⁾。

$$\mathbf{F} = J^{\frac{1}{3}} \bar{\mathbf{F}} \quad (2.3)$$

ここで、 $\bar{\mathbf{F}}$ は等容変形勾配である。このとき、式 (2.2) と式 (2.3) を併せて次式が成立する。

$$J = J^{\text{ve}} J^{\text{vp}}, \quad \bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{F}}^{\text{ve}} \bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}} \quad (2.4)$$

ここで、 J^{ve} 、 $\bar{\mathbf{F}}^{\text{ve}}$ 、 J^{vp} 、 $\bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}}$ はそれぞれ粘弾性体積ヤコビアン、粘弾性等容変形勾配、粘塑性体積ヤコビアン、粘塑性等容変形勾配である。なお、本研究では粘塑性変形が分子鎖間の相対的な滑り変形の結果として発現することを考慮して、次式で示すような非圧縮性を仮定する^{25,52,53)}。

$$J^{\text{vp}} = 1 \quad (2.5)$$

このとき、体積ヤコビアンは $J = J^{\text{ve}}$ となって体積変形は粘弾性変形のみとなる。

2.2.2 各種運動学的変数

次に、前項で定義した各変形勾配から得られる運動学的変数を定義する。まず、粘弾性変形勾配と粘塑性変形勾配に対する極分解は次式で得られる。

$$\mathbf{F}^{\text{ve}} = \mathbf{R}^{\text{ve}} \mathbf{U}^{\text{ve}} = \mathbf{V}^{\text{ve}} \mathbf{R}^{\text{ve}}, \quad \mathbf{F}^{\text{vp}} = \mathbf{R}^{\text{vp}} \mathbf{U}^{\text{vp}} = \mathbf{V}^{\text{vp}} \mathbf{R}^{\text{vp}} \quad (2.6)$$

ここで、 \mathbf{U}^{ve} , \mathbf{V}^{ve} , \mathbf{R}^{ve} はそれぞれ粘弾性右ストレッチ, 粘弾性左ストレッチと粘弾性回転であり, \mathbf{U}^{vp} , \mathbf{V}^{vp} , \mathbf{R}^{vp} はそれぞれ粘塑性右ストレッチ, 粘塑性左ストレッチと粘塑性回転である。このとき, 式(2.2)に示す乗算分解はこれらの極分解を代入することによって次式のように書き換えられる。

$$\mathbf{F} = \mathbf{V}^{\text{ve}} \mathbf{R}^{\text{ve}} \mathbf{R}^{\text{vp}} \mathbf{U}^{\text{vp}} \quad (2.7)$$

$$= \mathbf{V}^{\text{ve}} \mathbf{R} \mathbf{U}^{\text{vp}} \quad (2.8)$$

つまり, 参照配置の連続体 B_0 の物質点 \mathbf{X} における局所的な変形は, その接線ベクトル $d\mathbf{X}$ が \mathbf{U}^{vp} による粘塑性的な引き延ばしを受けた後, 回転 $\mathbf{R} = \mathbf{R}^{\text{ve}} \mathbf{R}^{\text{vp}}$ によって現配置 B_t を参照とする量に変換され, \mathbf{V}^{ve} によって粘弾性的な引き延ばしを受けて実現する。したがって, 変形勾配の極分解 $\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R}$ のように物体に作用する変形を単に回転と引き延ばしに分解することはできない。また, 変形勾配に対する右 Cauchy-Green テンソルは次式で得られる。

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^{\text{T}} \mathbf{F} = (\mathbf{F}^{\text{vp}})^{\text{T}} \mathbf{C}^{\text{ve}} \mathbf{F}^{\text{vp}} \quad (2.9)$$

ここで, \mathbf{C}^{ve} は次式で定義される粘弾性右 Cauchy-Green テンソルである。

$$\mathbf{C}^{\text{ve}} \equiv (\mathbf{F}^{\text{ve}})^{\text{T}} \mathbf{F}^{\text{ve}} = (\mathbf{U}^{\text{ve}})^2 \quad (2.10)$$

同時に粘塑性左 Cauchy-Green テンソル \mathbf{b}^{vp} を次式で定義する。

$$\mathbf{b}^{\text{vp}} \equiv \mathbf{F}^{\text{vp}} (\mathbf{F}^{\text{vp}})^{\text{T}} = (\mathbf{V}^{\text{vp}})^2 \quad (2.11)$$

さらに、全速度勾配は、次式のように加算分解形式で与えられる。

$$\boldsymbol{l} = \dot{\boldsymbol{F}}\boldsymbol{F}^{-1} = \boldsymbol{l}^{\text{ve}} + \boldsymbol{F}^{\text{ve}}\boldsymbol{l}^{\text{vp}}(\boldsymbol{F}^{\text{ve}})^{-1} \quad (2.12)$$

ここで、 $\boldsymbol{l}^{\text{ve}}$ 、 $\boldsymbol{l}^{\text{vp}}$ はそれぞれ次式で定義される粘弾性速度勾配と粘塑性速度勾配である。

$$\boldsymbol{l}^{\text{ve}} \equiv \dot{\boldsymbol{F}}^{\text{ve}}(\boldsymbol{F}^{\text{ve}})^{-1}, \quad \boldsymbol{l}^{\text{vp}} \equiv \dot{\boldsymbol{F}}^{\text{vp}}(\boldsymbol{F}^{\text{vp}})^{-1} \quad (2.13)$$

また、2階のテンソル \bullet の対称部分と反対称部分を、それぞれ $\text{sym}(\bullet)$ 、 $\text{skew}(\bullet)$ で表すことで各速度勾配 \boldsymbol{l} 、 $\boldsymbol{l}^{\text{ve}}$ 、 $\boldsymbol{l}^{\text{vp}}$ は、対応する変形速度、スピントンソルを用いてそれぞれ次式で得られる。

$$\boldsymbol{l} = \text{sym}(\boldsymbol{l}) + \text{skew}(\boldsymbol{l}) = \boldsymbol{d} + \boldsymbol{w} \quad (2.14)$$

$$\boldsymbol{l}^{\text{ve}} = \text{sym}(\boldsymbol{l}^{\text{ve}}) + \text{skew}(\boldsymbol{l}^{\text{ve}}) = \boldsymbol{d}^{\text{ve}} + \boldsymbol{w}^{\text{ve}} \quad (2.15)$$

$$\boldsymbol{l}^{\text{vp}} = \text{sym}(\boldsymbol{l}^{\text{vp}}) + \text{skew}(\boldsymbol{l}^{\text{vp}}) = \boldsymbol{d}^{\text{vp}} + \boldsymbol{w}^{\text{vp}} \quad (2.16)$$

ここで本研究では、提案する粘弾性・粘塑性複合構成則に等方性を仮定し、次式のように粘塑性変形が非回転であるとする。

$$\boldsymbol{w}^{\text{vp}} = \mathbf{0} \quad (2.17)$$

このとき、次式で示されるように粘塑性回転 $\boldsymbol{R}^{\text{vp}}$ は定数となる。

$$\dot{\boldsymbol{R}}^{\text{vp}} = \boldsymbol{w}^{\text{vp}}\boldsymbol{R}^{\text{vp}} = \mathbf{0} \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{R}^{\text{vp}} = \text{const.} \quad (2.18)$$

したがって本研究では、粘塑性回転を $\boldsymbol{R}^{\text{vp}} = \mathbf{1}$ と仮定することで、粘塑性変形が非回転であるとする。なお、 $\mathbf{1}$ は2階の単位テンソルである。さらに、粘塑性非圧縮性の仮定より

$$\boldsymbol{j}^{\text{vp}} = \boldsymbol{J}^{\text{vp}}\text{tr}(\boldsymbol{l}^{\text{vp}}) = 0 \quad \rightarrow \quad \text{tr}(\boldsymbol{l}^{\text{vp}}) = 0 \quad (2.19)$$

が成立するため、粘塑性速度勾配に非圧縮性を考慮すると次式が得られる。

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{l}^{\text{vp}} &= \dot{\boldsymbol{F}}^{\text{vp}} (\boldsymbol{F}^{\text{vp}})^{-1} \\
 &= \left[(J^{\text{vp}})^{\frac{1}{3}} \bar{\boldsymbol{F}}^{\text{vp}} \right]^{\bullet} \left[(J^{\text{vp}})^{\frac{1}{3}} \bar{\boldsymbol{F}}^{\text{vp}} \right]^{-1} \\
 &= \left[\left\{ \frac{1}{3} (J^{\text{vp}})^{\frac{1}{3}} \text{tr}(\boldsymbol{l}^{\text{vp}}) \right\} \bar{\boldsymbol{F}}^{\text{vp}} + (J^{\text{vp}})^{\frac{1}{3}} \dot{\bar{\boldsymbol{F}}}^{\text{vp}} \right] (J^{\text{vp}})^{-\frac{1}{3}} (\bar{\boldsymbol{F}}^{\text{vp}})^{-1} \\
 &= \dot{\bar{\boldsymbol{F}}}^{\text{vp}} (\bar{\boldsymbol{F}}^{\text{vp}})^{-1}
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

ここで、粘塑性等容速度勾配 $\bar{\boldsymbol{l}}^{\text{vp}}$ を次式で定義する。

$$\bar{\boldsymbol{l}}^{\text{vp}} = \dot{\bar{\boldsymbol{F}}}^{\text{vp}} (\bar{\boldsymbol{F}}^{\text{vp}})^{-1} \tag{2.21}$$

このとき、粘塑性非回転性を考慮すると粘塑性等容速度勾配 $\bar{\boldsymbol{l}}^{\text{vp}}$ は次式のように粘塑性等容変形速度 $\bar{\boldsymbol{d}}^{\text{vp}}$ となる。

$$\begin{aligned}
 \bar{\boldsymbol{l}}^{\text{vp}} &= \bar{\boldsymbol{d}}^{\text{vp}} + \bar{\boldsymbol{w}}^{\text{vp}} \\
 &= \bar{\boldsymbol{d}}^{\text{vp}}
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

なお、 $\bar{\boldsymbol{w}}^{\text{vp}} = \mathbf{0}$ は粘塑性等容スピントensorである。したがって、(2.12) 全速度勾配は次式のようになる。

$$\boldsymbol{l} = \boldsymbol{l}^{\text{ve}} + \boldsymbol{F}^{\text{ve}} \bar{\boldsymbol{d}}^{\text{vp}} (\boldsymbol{F}^{\text{ve}})^{-1} \tag{2.23}$$

2.3 熱力学的定式化

本節では、図-2.1 を参照して自由エネルギー密度を定義し、Coleman と Noll⁵⁷⁾ の熱力学的定式化に従って非弾性散逸エネルギーを導出する。

2.3.1 自由エネルギーの定義

本研究では、Holzapfel と Simo^{100,101)} に倣って一般化 Maxwell 要素の各ダッシュポットに作用する粘性変形を体積変形と偏差変形に対してそれぞれ独立の熱力学的示量変

数として $\Gamma_{\text{vol}}^\alpha, \Gamma_{\text{dev}}^\alpha$ ($\alpha = 1, N^{\text{ve}}$) と定義する. ここで, N^{ve} は Maxwell 要素数である. これらの熱力学的示量変数の導入は, 変形勾配の粘弾性成分をさらに弾性成分と粘性成分に乗算分解する手続きを簡略化するためであり, 線形粘弾性理論を大変形問題に直接適用したことに等しい. このため, 大変形域で粘弾性非線形性が顕著となる問題に対して適用することは適切ではないが, ガラス状態の非晶性熱可塑性樹脂は粘弾性が支配的である変形域が公称ひずみ約 2% 程度に過ぎないため, 本研究では, 線形粘弾性モデルを導入することにする.

一方で, 粘塑性要素に関して流れを表すスライダーに直列に取り付けられたバネ要素は, 熱力学的示量変数である等方硬化変数 ξ^{vp} が蓄積することで運動する. さらに, 並列に取り付けられたバネ要素は変形勾配の粘塑性成分 \mathbf{F}^{vp} が蓄積することで運動し, これが粘塑性移動硬化を表現するために機能する. したがって, 外的作用に対して, 本レオロジーモデルが蓄える全自由エネルギー密度は, 各バネ要素が蓄積する自由エネルギー密度の和として次式のようになる.

$$\begin{aligned}
\psi &= \inf_{\eta \in \mathbb{R}} \left\{ e \left(\mathbf{F}, \Gamma_{\text{vol}}^1, \dots, \Gamma_{\text{vol}}^{N^{\text{ve}}}, \Gamma_{\text{dev}}^1, \dots, \Gamma_{\text{dev}}^{N^{\text{ve}}}, \mathbf{F}^{\text{vp}}, \xi^{\text{vp}}, \eta \right) - \theta \eta \right\} \\
&= \psi \left(\mathbf{F}, \Gamma_{\text{vol}}^1, \dots, \Gamma_{\text{vol}}^{N^{\text{ve}}}, \Gamma_{\text{dev}}^1, \dots, \Gamma_{\text{dev}}^{N^{\text{ve}}}, \mathbf{F}^{\text{vp}}, \xi^{\text{vp}}, \theta \right) \\
&= \psi_{\text{vol}}^{\text{ve}} \left(J, \Gamma_{\text{vol}}^1, \dots, \Gamma_{\text{vol}}^{N^{\text{ve}}}, \theta \right) + \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}} \left(\bar{\mathbf{C}}, \Gamma_{\text{dev}}^1, \dots, \Gamma_{\text{dev}}^{N^{\text{ve}}}, \mathbf{F}^{\text{vp}} \right) + \psi_{\text{iso}}^{\text{vp}} \left(\xi^{\text{vp}} \right) + \psi_{\text{kin}}^{\text{vp}} \left(\mathbf{F}^{\text{vp}}, \theta \right) + \psi^{\text{ht}} \left(\theta \right)
\end{aligned} \tag{2.24}$$

ここで, e, η, θ はそれぞれ内部エネルギー密度, エントロピー密度と温度であり, $\psi_{\text{vol}}^{\text{ve}}, \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}, \psi_{\text{iso}}^{\text{vp}}, \psi_{\text{kin}}^{\text{vp}}, \psi^{\text{ht}}$ はそれぞれ粘弾性自由エネルギー密度の体積成分と偏差成分, 粘塑性等方硬化自由エネルギー密度, 粘塑性移動硬化自由エネルギー密度, 比熱に関する自由エネルギー密度である. なお, 物質客観性を考慮して $\psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}$ の全変形を表す状態変数を等容右 Cauchy-Green テンソル $\bar{\mathbf{C}} = \bar{\mathbf{F}}^T \bar{\mathbf{F}}$ で記述している. また, 粘塑性変形の変形非圧縮性により $\psi_{\text{vol}}^{\text{ve}}$ には粘塑性変形勾配が考慮されていない. このとき, 全自由エ

エネルギー密度の物質時間微分は次式のようになる.

$$\dot{\psi} = \nabla_F \psi : \dot{\mathbf{F}} + \sum_{\alpha=1}^{N^{ve}} \left(\nabla_{\Gamma_{vol}^\alpha} \psi \dot{\Gamma}_{vol}^\alpha + \nabla_{\Gamma_{dev}^\alpha} \psi : \dot{\mathbf{I}}_{dev}^\alpha \right) + \nabla_{F^{vp}} \psi : \dot{\mathbf{F}}^{vp} + \nabla_{\xi^{vp}} \psi \dot{\xi}^{vp} + \nabla_\theta \psi \dot{\theta} \quad (2.25)$$

2.3.2 散逸エネルギーの導出

配置 B_0 を参照とする Clausius-Duhem の散逸不等式は次式で与えられる.

$$D = \mathbf{P} : \dot{\mathbf{F}} - \rho_0 (\dot{\psi} + \dot{\theta} \eta) + \mathbf{G} \cdot \mathbf{Q} \geq 0 \quad (2.26)$$

ここで, \mathbf{P} , ρ_0 , $\mathbf{G} = -(\nabla_x \theta) / \theta$, \mathbf{Q} はそれぞれ第一 Piola-Kirchhoff 応力, 初期質量密度, 正規化温度勾配, 熱流束である. このとき, 式 (2.25) を式 (2.26) に代入し, 次式で定義される超弾性構成則とエントロピー密度式

$$\mathbf{P} \equiv \nabla_F (\rho_0 \psi) \quad (2.27)$$

$$\eta \equiv -\nabla_\theta \psi \quad (2.28)$$

を考慮することによって次式が得られる.

$$\begin{aligned} D &= - \sum_{\alpha=1}^{N^{ve}} \left(\nabla_{\Gamma_{vol}^\alpha} (\rho_0 \psi) \dot{\Gamma}_{vol}^\alpha + \nabla_{\Gamma_{dev}^\alpha} (\rho_0 \psi) : \dot{\mathbf{I}}_{dev}^\alpha \right) \\ &\quad - \nabla_{F^{vp}} (\rho_0 \psi) : \dot{\mathbf{F}}^{vp} - \nabla_{\xi^{vp}} (\rho_0 \psi) \dot{\xi}^{vp} + \mathbf{G} \cdot \mathbf{Q} \geq 0 \\ &= D^{ve} + D^{vp} + D^{ht} \geq 0 \end{aligned} \quad (2.29)$$

ここで,

$$D^{ve} = - \sum_{\alpha=1}^{N^{ve}} \left(\nabla_{\Gamma_{vol}^\alpha} (\rho_0 \psi) \dot{\Gamma}_{vol}^\alpha + \nabla_{\Gamma_{dev}^\alpha} (\rho_0 \psi) : \dot{\mathbf{I}}_{dev}^\alpha \right) \quad (2.30)$$

$$D^{vp} = -\nabla_{F^{vp}} (\rho_0 \psi) : \dot{\mathbf{F}}^{vp} - \nabla_{\xi^{vp}} (\rho_0 \psi) \dot{\xi}^{vp} \quad (2.31)$$

$$D^{ht} = \mathbf{G} \cdot \mathbf{Q} \quad (2.32)$$

はそれぞれ粘弾性散逸エネルギー，粘塑性散逸エネルギー，熱散逸エネルギーである。

最後に，これまで導入した熱力学的示量変数にエネルギー共役な熱力学的示強変数を定義する．まず，粘弾性非平衡応力を意味する $\Gamma_{\text{vol}}^\alpha$, $\Gamma_{\text{dev}}^\alpha$ にエネルギー共役な熱力学的示強変数を次式で定義する．

$$\mathbf{R}_{\text{vol}}^\alpha \equiv -\nabla_{\Gamma_{\text{vol}}^\alpha} (\rho_0 \psi) \quad (2.33)$$

$$\mathbf{R}_{\text{dev}}^\alpha \equiv -\nabla_{\Gamma_{\text{dev}}^\alpha} (\rho_0 \psi) \quad (2.34)$$

このとき，粘弾性散逸エネルギーは次式のようにになる．

$$D^{\text{ve}} = \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \left(\mathbf{R}_{\text{vol}}^\alpha \dot{\Gamma}_{\text{vol}}^\alpha + \mathbf{R}_{\text{dev}}^\alpha : \dot{\Gamma}_{\text{dev}}^\alpha \right) \quad (2.35)$$

同様に， \mathbf{F}^{vp} , ξ^{vp} にエネルギー共役な熱力学的示強変数を次式で定義する．

$$\mathbf{P}^{\text{vp}} \equiv -\nabla_{\mathbf{F}^{\text{vp}}} (\rho_0 \psi) \quad (2.36)$$

$$q^{\text{vp}} \equiv -\nabla_{\xi^{\text{vp}}} (\rho_0 \psi) \quad (2.37)$$

このとき，式(2.22)を考慮すると粘塑性散逸エネルギーは次式のようにになる．

$$\begin{aligned} D^{\text{vp}} &= \mathbf{P}^{\text{vp}} : \dot{\mathbf{F}}^{\text{vp}} + q^{\text{vp}} \dot{\xi}^{\text{vp}} \\ &= \mathbf{P}^{\text{vp}} (\mathbf{F}^{\text{vp}})^{\text{T}} : \dot{\mathbf{F}}^{\text{vp}} (\mathbf{F}^{\text{vp}})^{-1} + q^{\text{vp}} \dot{\xi}^{\text{vp}} \\ &= \mathbf{M}^{\text{eff}} : \bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}} + q^{\text{vp}} \dot{\xi}^{\text{vp}} \end{aligned} \quad (2.38)$$

ここで， $\mathbf{M}^{\text{eff}} = (\mathbf{M}^{\text{eff}})^{\text{T}}$ は粘塑性流れの熱力学的駆動力となる偏差対称有効 Mandel 応力である．

2.4 粘弾性モデル

2.4.1 超弾性構成則の具体化

図-2.1 に示すレオロジーモデルでは，一般化 Maxwell 要素と粘塑性要素を直列に連

結しているため、弾性応力はすべて一般化 Maxwell 要素から発現する。これは、弾性によるエネルギーが粘弾性自由エネルギー $\psi_{\text{vol}}^{\text{ve}}$, $\psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}$ に集約されていることを意味しており、式 (2.27) に示す B_0 を参照とする超弾性構成則は次式で書き換えられる。

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \nabla_{\mathbf{F}} (\rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\text{ve}}) + \nabla_{\mathbf{F}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \\ &= \mathbf{P}_{\text{vol}}^{\text{ve}} + \mathbf{P}_{\text{dev}}^{\text{ve}} \end{aligned} \quad (2.39)$$

ここで、 $\mathbf{P}_{\text{vol}}^{\text{ve}}$, $\mathbf{P}_{\text{dev}}^{\text{ve}}$ はそれぞれ体積粘弾性第一 Piola-Kirchhoff 応力、偏差粘弾性第一 Piola-Kirchhoff 応力である。さらに、式 (2.9) より、 $\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}} = (\bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}})^{-\text{T}} \bar{\mathbf{C}} (\bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}})^{-1} = \bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}} (\bar{\mathbf{C}}, \mathbf{F}^{\text{vp}})$ であり、粘弾性自由エネルギーの偏差成分の状態変数は $\psi_{\text{dev}}^{\text{ve}} = \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}} (\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}, \mathbf{\Gamma}_{\text{dev}}^{\alpha})$ と記述可能であるため、超弾性構成則は次式のように書き換えられる。

$$\begin{aligned} \mathbf{P} &= \nabla_{\mathbf{F}} (\rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\text{ve}}) + \nabla_{\mathbf{F}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \\ &= \nabla_J (\rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\text{ve}}) \nabla_{\mathbf{F}} J + \nabla_{\mathbf{C}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) : \nabla_{\mathbf{F}} \mathbf{C}^{\text{ve}} \\ &= \nabla_{\ln J} (\rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\text{ve}}) \mathbf{F}^{-\text{T}} + (\mathbf{F}^{\text{ve}})^{-\text{T}} \left[\mathbf{C}^{\text{ve}} \left\{ 2 \nabla_{\mathbf{C}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \right\} \right] (\mathbf{F}^{\text{vp}})^{-\text{T}} \\ &= \boldsymbol{\tau}_{\text{vol}}^{\text{ve}} \mathbf{F}^{-\text{T}} + (\mathbf{F}^{\text{ve}})^{-\text{T}} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}} (\mathbf{F}^{\text{vp}})^{-\text{T}} \end{aligned} \quad (2.40)$$

ここで、 $\boldsymbol{\tau}_{\text{vol}}^{\text{ve}} = \nabla_{\ln J} (\rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\text{ve}}) = \frac{1}{3} \text{tr} (\mathbf{P}_{\text{vol}}^{\text{ve}} \mathbf{F}^{\text{T}})$, $\mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}} = \mathbf{C}^{\text{ve}} \left\{ 2 \nabla_{\mathbf{C}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \right\} = (\mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}})^{\text{T}}$ はそれぞれ体積粘弾性 Kirchhoff 応力、偏差対称粘弾性 Mandel 応力である。

ところで、弾性の等方性より偏差対称粘弾性 Mandel 応力が粘弾性右ストレッチと共軸であることから、偏差粘弾性 Kirchhoff 応力 $\boldsymbol{\tau}_{\text{dev}}^{\text{ve}}$ は次式のように偏差粘弾性第一 Piola-Kirchhoff 応力を B_i へ push-forward することによって得られる。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau}_{\text{dev}}^{\text{ve}} &= \mathbf{P}_{\text{dev}}^{\text{ve}} \mathbf{F}^{\text{T}} \\ &= (\mathbf{F}^{\text{ve}})^{-\text{T}} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}} (\mathbf{F}^{\text{ve}})^{\text{T}} \\ &= \mathbf{R}^{\text{ve}} (\mathbf{U}^{\text{ve}})^{-\text{T}} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}} \mathbf{U}^{\text{ve}} (\mathbf{R}^{\text{ve}})^{\text{T}} \\ &= \mathbf{R}^{\text{ve}} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}} (\mathbf{R}^{\text{ve}})^{\text{T}} \end{aligned} \quad (2.41)$$

したがって、 B_i を参照とする超弾性構成則は次式で得られる。

$$\boldsymbol{\tau} = \nabla_{\ln J} (\rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\text{ve}}) \mathbf{1} + \mathbf{R}^{\text{ve}} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}} (\mathbf{R}^{\text{ve}})^{\text{T}} \quad (2.42)$$

次に、偏差対称粘弾性 Mandel 応力 $\mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}}$ に関して次式のような式展開を行う。

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}} &= \mathbf{C}^{\text{ve}} \left\{ 2 \nabla_{\mathbf{C}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \right\} \\ &= \mathbf{C}^{\text{ve}} \left\{ 2 \nabla_{\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \right\} : \nabla_{\mathbf{C}^{\text{ve}}} \bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}} \\ &= \bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}} \left\{ 2 \nabla_{\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \right\} - \frac{1}{3} \text{tr} \left[\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}} \left\{ 2 \nabla_{\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \right\} \right] \mathbf{1} \\ &= \mathbf{I}_{\text{dev}} : \bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}} \left\{ 2 \nabla_{\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \right\} \end{aligned} \quad (2.43)$$

ここで、 \mathbf{I} , $\mathbf{I}_{\text{dev}} \equiv \mathbf{I} - \frac{1}{3} \mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$ はそれぞれ4階の恒等テンソル，偏差単位テンソルである。さらに、超弾性の等方性から等容粘弾性右 Cauchy-Green テンソルとエネルギー共役な応力との間に共軸性が成立するため次式が得られる。

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}} \left\{ 2 \nabla_{\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \right\} &= \mathbf{A}^* \left[\sum_{i=1}^3 2 \lambda_{\bar{\mathbf{U}}^{\text{ve}}}^{2(i)} \left\{ \nabla_{\lambda_{\bar{\mathbf{U}}^{\text{ve}}}^{2(i)}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \right\} \mathbf{N}_{(i)}^* \otimes \mathbf{N}_{(i)}^* \right] (\mathbf{A}^*)^{\text{T}} \\ &= \mathbf{A}^* \left[\sum_{i=1}^3 \left\{ \nabla_{\ln(\lambda_{\bar{\mathbf{U}}^{\text{ve}}}^{(i)})} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \right\} \mathbf{N}_{(i)}^* \otimes \mathbf{N}_{(i)}^* \right] (\mathbf{A}^*)^{\text{T}} \\ &= \nabla_{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \end{aligned} \quad (2.44)$$

ここで、 $\mathbf{N}_{(i)}^*$, $\lambda_{\bar{\mathbf{U}}^{\text{ve}}}^{(i)}$ はそれぞれ $\bar{\mathbf{U}}^{\text{ve}}$ の主軸と $\bar{\mathbf{U}}^{\text{ve}}$ の固有値である。また、 \mathbf{A}^* は主軸空間からデカルト座標系 $\mathbf{O}^* - \mathbf{X}^* \mathbf{Y}^* \mathbf{Z}^*$ への変換行列であり、基底 \mathbf{E}_I を用いて次式のように与えられる。

$$(\mathbf{A}^*)_{J(i)} = \mathbf{E}_J \cdot \mathbf{N}_{(i)}^* \quad (2.45)$$

さらに、 $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}} = \mathbf{A}^* \left[\sum_{i=1}^3 \ln(\lambda_{\bar{\mathbf{U}}^{\text{ve}}}^{(i)}) \mathbf{N}_{(i)}^* \otimes \mathbf{N}_{(i)}^* \right] (\mathbf{A}^*)^{\text{T}}$ は等容粘弾性右 Hencky ひずみである。このとき最終的に偏差対称粘弾性 Mandel 応力は次式で与えられる。

$$\mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}} = \mathbf{I}_{\text{dev}} : \nabla_{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \quad (2.46)$$

2.4.2 粘弾性モデルの導出

本項では、Holzapfel と Simo¹⁰⁰⁾ の線形粘弾性の定式化に従って、粘弾性非平衡応力の発展式と粘弾性自由エネルギーを定式化する。まず、次式のように粘弾性自由エネルギーの各成分 $\psi_{\text{vol}}^{\text{ve}}$, $\psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}$ がそれぞれ粘性変形 $\Gamma_{\text{vol}}^\alpha$, $\Gamma_{\text{dev}}^\alpha$ に対して厳密に2次の凸関数であると仮定する。

$$\nabla_{\Gamma_{\text{vol}}^\alpha} \left\{ \sum_{\beta=1}^{N^{\text{ve}}} \nabla_{\Gamma_{\text{vol}}^\beta} (\rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\text{ve}}) \right\} = K^\alpha \delta_{\alpha\beta} \quad (2.47)$$

$$\nabla_{\Gamma_{\text{dev}}^\alpha} \left\{ \sum_{\beta=1}^{N^{\text{ve}}} \nabla_{\Gamma_{\text{dev}}^\beta} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \right\} = 2G^\alpha \delta_{\alpha\beta} (\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}) \quad (2.48)$$

ここで、 $\delta_{\alpha\beta}$ は Kronecker のデルタであり、 $K^\alpha > 0$, $G^\alpha > 0$ はそれぞれ α 番目の Maxwell 要素に対応する体積弾性係数とせん断弾性係数である。これらの式を粘性変形 $\Gamma_{\text{vol}}^\beta$, $\Gamma_{\text{dev}}^\beta$ について積分すると粘性変形と粘弾性非平衡応力の関係がそれぞれ次式のように得られる。

$$\mathbf{R}_{\text{vol}}^\alpha = -K^\alpha \Gamma_{\text{vol}}^\alpha - \mathbf{A}_{\text{vol}}^{(1)}(J, \theta) \quad (2.49)$$

$$\mathbf{R}_{\text{dev}}^\alpha = -2G^\alpha \Gamma_{\text{dev}}^\alpha - \mathbf{A}_{\text{dev}}^{(1)}(\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}) \quad (2.50)$$

ここで、 $\mathbf{A}_{\text{vol}}^{(1)}(J, \theta)$, $\mathbf{A}_{\text{dev}}^{(1)}(\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}})$ は積分定数である。さらに、粘性変形 $\Gamma_{\text{vol}}^\alpha$, $\Gamma_{\text{dev}}^\alpha$ について両辺を積分すると粘弾性自由エネルギーがそれぞれ次式のように得られる。

$$\rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\text{ve}} = \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \left\{ \frac{K^\alpha}{2} (\Gamma_{\text{vol}}^\alpha)^2 + \mathbf{A}_{\text{vol}}^{(1)}(J, \theta) \Gamma_{\text{vol}}^\alpha \right\} + \mathbf{A}_{\text{vol}}^{(2)}(J, \theta) \quad (2.51)$$

$$\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}} = \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \left\{ G^\alpha (\Gamma_{\text{dev}}^\alpha : \Gamma_{\text{dev}}^\alpha) + \mathbf{A}_{\text{dev}}^{(1)}(\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}) : \Gamma_{\text{dev}}^\alpha \right\} + \mathbf{A}_{\text{dev}}^{(2)}(\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}) \quad (2.52)$$

このとき、各粘弾性非平衡応力の物質時間微分 $\dot{\mathbf{R}}_{\text{vol}}^\alpha$, $\dot{\mathbf{R}}_{\text{dev}}^\alpha$ は粘弾性自由エネルギーの各成分を用いて次式で得られる。

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{R}}_{\text{vol}}^\alpha &= \frac{D}{Dt} \left\{ -\nabla_{\Gamma_{\text{vol}}^\alpha} (\rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\text{ve}}) \right\} \\ &= -\nabla_J A_{\text{vol}}^{(1)}(J, \theta) J - K^\alpha \dot{\Gamma}_{\text{vol}}^\alpha - \nabla_\theta A_{\text{vol}}^{(1)}(J, \theta) \dot{\theta} \\ &= -\frac{D}{Dt} \left\{ A_{\text{vol}}^{(1)}(J, \theta) \right\} - K^\alpha \dot{\Gamma}_{\text{vol}}^\alpha,\end{aligned}\quad (2.53)$$

$$\begin{aligned}\dot{\mathbf{R}}_{\text{dev}}^\alpha &= \frac{D}{Dt} \left\{ -\nabla_{\Gamma_{\text{dev}}^\alpha} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \right\} \\ &= -\nabla_{\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}} A_{\text{dev}}^{(1)}(\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}) : \dot{\bar{\mathbf{C}}}^{\text{ve}} - 2G^\alpha \dot{\Gamma}_{\text{dev}}^\alpha \\ &= -\frac{D}{Dt} \left\{ A_{\text{dev}}^{(1)}(\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}) \right\} - 2G^\alpha \dot{\Gamma}_{\text{dev}}^\alpha\end{aligned}\quad (2.54)$$

ここで、各粘弾性非平衡応力 $\mathbf{R}_{\text{vol}}^\alpha$, $\mathbf{R}_{\text{dev}}^\alpha$ の発展則が微小変形理論からの純粋な拡張として陽的な形で導かれることを意図して、式(2.49)と式(2.50)における積分定数 $A_{\text{vol}}^{(1)}(J, \theta)$, $A_{\text{dev}}^{(1)}(\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}})$ を次式のように仮定する。

$$A_{\text{vol}}^{(1)}(J, \theta) = -\gamma^\alpha M_{\text{vol}}^\infty = -\gamma^\alpha \nabla_{\ln J} (\rho_0 \psi_{\text{vol}}^\infty) \quad (2.55)$$

$$A_{\text{dev}}^{(1)}(\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}) = -\gamma^\alpha M_{\text{dev}}^\infty = -\gamma^\alpha \nabla_{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^\infty) \quad (2.56)$$

ここで、 γ^α , ψ_{vol}^∞ , ψ_{dev}^∞ , M_{vol}^∞ , M_{dev}^∞ はそれぞれ純弾性要素と各 Maxwell 要素に対する相対弾性係数、体積純弾性エネルギー、偏差純弾性エネルギー、体積純弾性 Mandel 応力、偏差純弾性 Mandel 応力であり、 ψ_{vol}^∞ と M_{vol}^∞ や ψ_{dev}^∞ と M_{dev}^∞ との間には次式の関係がある。

$$M_{\text{vol}}^\infty = \nabla_{\ln J} (\rho_0 \psi_{\text{vol}}^\infty) \quad (2.57)$$

$$M_{\text{dev}}^\infty = \nabla_{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^\infty) \quad (2.58)$$

さらに、非平衡応力と粘性変形に Newton 粘性則を仮定し、各粘性係数を次式で定義する。

$$\boldsymbol{\eta}_{\text{vol}}^{\alpha}(\theta) \equiv K^{\alpha} \hat{\tau}_{\text{vol}}^{\alpha}(\theta) \quad (2.59)$$

$$\boldsymbol{\eta}_{\text{dev}}^{\alpha}(\theta) \equiv 2G^{\alpha} \hat{\tau}_{\text{dev}}^{\alpha}(\theta) \mathbf{I}_{\text{dev}} \quad (2.60)$$

ここで、 $\hat{\tau}_{\text{vol}}^{\alpha}(\theta)$ 、 $\hat{\tau}_{\text{dev}}^{\alpha}(\theta)$ はそれぞれ体積、偏差成分に関する緩和時間である。なお、本研究では $\hat{\tau}_{\text{vol}}^{\alpha}(\theta) = \hat{\tau}_{\text{dev}}^{\alpha}(\theta) = \hat{\tau}^{\alpha}(\theta)$ とする。したがって、式(2.55)と式(2.54)は次式のような粘弾性非平衡応力の発展式となる。

$$\dot{\mathbf{R}}_{\text{vol}}^{\alpha} + \frac{\mathbf{R}_{\text{vol}}^{\alpha}}{\hat{\tau}^{\alpha}} = \gamma^{\alpha} \frac{D\mathbf{M}_{\text{vol}}^{\infty}}{Dt} \quad (2.61)$$

$$\dot{\mathbf{R}}_{\text{dev}}^{\alpha} + \frac{\mathbf{R}_{\text{dev}}^{\alpha}}{\hat{\tau}^{\alpha}} = \gamma^{\alpha} \frac{D\mathbf{M}_{\text{dev}}^{\infty}}{Dt} \quad (2.62)$$

そして、これらの式に対して時間に関する畳み込み積分を行うことで、時刻 t における非平衡応力は次式のように得られる。

$$\mathbf{R}_{\text{vol}}^{\alpha} = \int_0^t \gamma^{\alpha} \frac{D\mathbf{M}_{\text{vol}}^{\infty}}{Ds} \exp\left(-\frac{s-t}{\hat{\tau}^{\alpha}}\right) ds \quad (2.63)$$

$$\mathbf{R}_{\text{dev}}^{\alpha} = \int_0^t \gamma^{\alpha} \frac{D\mathbf{M}_{\text{dev}}^{\infty}}{Ds} \exp\left(-\frac{s-t}{\hat{\tau}^{\alpha}}\right) ds \quad (2.64)$$

また、式(2.49)と式(2.50)に積分定数を代入することで、時刻 t における非平衡応力は次式によっても得られる。

$$\mathbf{R}_{\text{vol}}^{\alpha} = -K^{\alpha} \Gamma_{\text{vol}}^{\alpha} + \gamma^{\alpha} M_{\text{vol}}^{\infty}, \quad \mathbf{R}_{\text{dev}}^{\alpha} = -2G^{\alpha} \Gamma_{\text{dev}}^{\alpha} + \gamma^{\alpha} M_{\text{dev}}^{\infty} \quad (2.65)$$

一方、式(2.51)と式(2.51)における積分定数 $A_{\text{vol}}^{(2)}(J, \theta)$ 、 $A_{\text{dev}}^{(2)}(\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}})$ を

$$A_{\text{vol}}^{(2)}(J, \theta) = \left(1 + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \gamma^{\alpha}\right) \rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\infty}(J, \theta) \quad (2.66)$$

$$A_{\text{dev}}^{(2)}(\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}) = \left(1 + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \gamma^{\alpha}\right) \rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\infty}(\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}) \quad (2.67)$$

のように仮定すると、粘弾性自由エネルギーは次式のようになる。

$$\rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\text{ve}} = \left(1 + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \gamma^\alpha \right) \rho_0 \psi_{\text{vol}}^\infty + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \left\{ \frac{K^\alpha}{2} (\Gamma_{\text{vol}}^\alpha \Gamma_{\text{vol}}^\alpha) - M_{\text{vol}}^\alpha \Gamma_{\text{vol}}^\alpha \right\} \quad (2.68)$$

$$\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}} = \left(1 + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \gamma^\alpha \right) \rho_0 \psi_{\text{dev}}^\infty + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \left\{ G^\alpha (\Gamma_{\text{dev}}^\alpha : \Gamma_{\text{dev}}^\alpha) - M_{\text{dev}}^\alpha : \Gamma_{\text{dev}}^\alpha \right\} \quad (2.69)$$

これらの関数形から、本粘弾性モデルは弾性変形が粘弾性変形と粘性変形の差によって得られ、線形の弾性構成則を大変形理論に直接応用されたものであるといえる。最後に、 $\tau_{\text{vol}}^{\text{ve}} = \nabla_{\ln J} (\rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\text{ve}})$ と式(2.46)に式(2.68)と式(2.69)をそれぞれ代入すると、全弾性応力の各成分は次式のように得られる。

$$\begin{aligned} \tau_{\text{vol}}^{\text{ve}} &= \nabla_{\ln J} (\rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\text{ve}}) \\ &= \left(1 + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \gamma^\alpha \right) \nabla_{\ln J} (\rho_0 \psi_{\text{vol}}^\infty) + \nabla_{\ln J} \left[\sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \left\{ \frac{K^\alpha}{2} (\Gamma_{\text{vol}}^\alpha \Gamma_{\text{vol}}^\alpha) - M_{\text{vol}}^\alpha \Gamma_{\text{vol}}^\alpha \right\} \right] \\ &= M_{\text{vol}}^\infty + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \gamma^\alpha (M_{\text{vol}}^\infty - K^\alpha \Gamma_{\text{vol}}^\alpha) \\ &= M_{\text{vol}}^\infty + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} R_{\text{vol}}^\alpha \end{aligned} \quad (2.70)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}} &= \mathbf{I}_{\text{dev}} : \nabla_{\bar{\epsilon}_{\text{H}}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \\ &= \left(1 + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \gamma^\alpha \right) \mathbf{I}_{\text{dev}} : \nabla_{\bar{\epsilon}_{\text{H}}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^\infty) + \mathbf{I}_{\text{dev}} : \nabla_{\bar{\epsilon}_{\text{H}}^{\text{ve}}} \left\{ \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \left\{ G^\alpha (\Gamma_{\text{dev}}^\alpha : \Gamma_{\text{dev}}^\alpha) - M_{\text{dev}}^\alpha : \Gamma_{\text{dev}}^\alpha \right\} \right\} \\ &= \mathbf{M}_{\text{dev}}^\infty + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \gamma^\alpha (\mathbf{M}_{\text{dev}}^\infty - 2G^\alpha \Gamma_{\text{dev}}^\alpha) \\ &= \mathbf{M}_{\text{dev}}^\infty + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \mathbf{R}_{\text{dev}}^\alpha \end{aligned} \quad (2.71)$$

したがって、これらを式(2.42)に代入することで、 B_i を参照とする超弾性構成則は次式で得られる。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\tau} &= \left(M_{\text{vol}}^\infty + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} R_{\text{vol}}^\alpha \right) \mathbf{1} + \mathbf{R}^{\text{ve}} \left(\mathbf{M}_{\text{dev}}^\infty + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \mathbf{R}_{\text{dev}}^\alpha \right) (\mathbf{R}^{\text{ve}})^{\text{T}} \\ &= \left\{ M_{\text{vol}}^\infty \mathbf{1} + \mathbf{R}^{\text{ve}} \mathbf{M}_{\text{dev}}^\infty (\mathbf{R}^{\text{ve}})^{\text{T}} \right\} + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \left\{ R_{\text{vol}}^\alpha \mathbf{1} + \mathbf{R}^{\text{ve}} \mathbf{R}_{\text{dev}}^\alpha (\mathbf{R}^{\text{ve}})^{\text{T}} \right\} \end{aligned} \quad (2.72)$$

2.4.3 純弾性モデルの定義

本項では、ゴム状態における純粋な弾性特性を表現するために導入した純弾性モデルについて述べる。まず、純弾性モデルの体積成分を表す体積純弾性自由エネルギーを次式で定義する。

$$\rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\infty}(J, \theta) = \frac{K^{\infty}}{2} (\ln J)^2 - 3K^{\infty} \alpha_{\text{th}}(\theta) \ln J \quad (2.73)$$

ここで、 α_{th} は熱膨張変形であり、ガラス転移点を境に樹脂の自由体積が増加する⁴⁾ことを考慮してガラス転移温度 θ_g で熱膨張変形量が増大するような次式の線形関数を定義する。

$$\alpha_{\text{th}}(\theta) = \alpha_{\text{th}}^R \langle \theta - \theta_g \rangle - \alpha_{\text{th}}^G \langle \theta_g - \theta \rangle + \alpha_{\text{th}}^G \langle \theta_g - \theta_0 \rangle \quad (2.74)$$

ここで、 θ_0 , α_{th}^G , α_{th}^R はそれぞれ基準温度、ガラス状態の熱膨張係数、ゴム状態の熱膨張係数であり、 $\alpha_{\text{th}}^G \leq \alpha_{\text{th}}^R$ である。また、 $\langle \cdot \rangle$ は Macaulay の括弧である。このとき、体積純弾性 Mandel 応力 M_{vol}^{∞} は、式 (2.57) より次式のようになる。

$$M_{\text{vol}}^{\infty} = \nabla_{\ln J} (\rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\infty}) = K^{\infty} \ln J - 3K^{\infty} \alpha_{\text{th}}(\theta) \quad (2.75)$$

一方、純弾性モデルの偏差成分を表す偏差純弾性自由エネルギーを次式で定義する。

$$\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\infty}(\bar{\mathbf{C}}^{\text{ve}}) = G^{\infty} (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}}) \quad (2.76)$$

このとき、偏差純弾性 Mandel 応力 $\mathbf{M}_{\text{dev}}^{\infty}$ は、式 (2.58) より次式のようになる。

$$\mathbf{M}_{\text{dev}}^{\infty} = \nabla_{\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\infty}) = 2G^{\infty} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}} \quad (2.77)$$

2.5 粘塑性モデル

2.5.1 粘塑性流れ駆動力の具体化と粘塑性流れの発展則

本項では、非晶性熱可塑性樹脂のネッキング変形域以降で支配的となる粘塑性流れについて流れ則や硬化則を定義する。まず、塑性変形勾配への依存性を有する自由エネルギーは、 $\psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}$, $\psi_{\text{kin}}^{\text{vp}}$ であるため、式(2.37)は次式のように書き換えられる。

$$\mathbf{P}^{\text{vp}} = -\nabla_{\mathbf{F}^{\text{vp}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) - \nabla_{\mathbf{F}^{\text{vp}}} (\rho_0 \psi_{\text{kin}}^{\text{vp}}) \quad (2.78)$$

このとき、まず第1項に関して式(2.38)を参照しながら次式のように展開する。

$$\begin{aligned} -\nabla_{\mathbf{F}^{\text{vp}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) &= -\nabla_{\mathbf{F}^{\text{vp}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) : \dot{\mathbf{F}}^{\text{vp}} \\ &= -\nabla_{\mathbf{C}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) : \nabla_{\mathbf{F}^{\text{vp}}} \mathbf{C}^{\text{ve}} : \dot{\mathbf{F}}^{\text{vp}} \\ &\rightarrow -\nabla_{\mathbf{C}_{kl}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \cdot \nabla_{F_{ij}^{\text{vp}}} \mathbf{C}_{kl}^{\text{ve}} \cdot \dot{F}_{ij}^{\text{vp}} \\ &= -\nabla_{\mathbf{C}_{kl}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \cdot \left\{ -\mathbf{C}_{il}^{\text{ve}} (\mathbf{F}^{\text{vp}})^{-1}_{jk} - \mathbf{C}_{ki}^{\text{ve}} (\mathbf{F}^{\text{vp}})^{-1}_{jl} \right\} \cdot \dot{F}_{ij}^{\text{vp}} \\ &= \nabla_{\mathbf{C}_{kl}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \cdot (\mathbf{C}_{il}^{\text{ve}} \mathbf{I}_{ik}^{\text{vp}} + \mathbf{C}_{ki}^{\text{ve}} \mathbf{I}_{il}^{\text{vp}}) \\ &= \mathbf{C}_{ik}^{\text{ve}} \cdot \left\{ 2 \nabla_{\mathbf{C}_{kl}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \right\} \cdot \mathbf{I}_{il}^{\text{vp}} \\ &\rightarrow \mathbf{C}^{\text{ve}} \left\{ 2 \nabla_{\mathbf{C}^{\text{ve}}} (\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}}) \right\} : \mathbf{I}^{\text{vp}} \\ &= \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}} : \bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}} \end{aligned} \quad (2.79)$$

同様に、第2項に関して次式のように展開する。

$$\begin{aligned} -\nabla_{\mathbf{F}^{\text{vp}}} (\rho_0 \psi_{\text{kin}}^{\text{vp}}) &= -\nabla_{\mathbf{F}^{\text{vp}}} (\rho_0 \psi_{\text{kin}}^{\text{vp}}) : \dot{\mathbf{F}}^{\text{vp}} \\ &= -\nabla_{\mathbf{b}^{\text{vp}}} (\rho_0 \psi_{\text{kin}}^{\text{vp}}) : \nabla_{\mathbf{F}^{\text{vp}}} \mathbf{b}^{\text{vp}} : \dot{\mathbf{F}}^{\text{vp}} \\ &= -2 \nabla_{\mathbf{b}^{\text{vp}}} (\rho_0 \psi_{\text{kin}}^{\text{vp}}) \mathbf{b}^{\text{vp}} : \mathbf{I}^{\text{vp}} \\ &= -\mathbf{M}^{\text{back}} : \bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}} \end{aligned} \quad (2.80)$$

ここで, $\mathbf{M}^{\text{back}} = 2\nabla_{\mathbf{b}^{\text{vp}}}(\rho_0\psi_{\text{kin}}^{\text{vp}})\mathbf{b}^{\text{vp}}$ は粘塑性背応力である. 以上より, 式(2.38)を参照すると, 最終的に次式が得られる.

$$\mathbf{M}^{\text{eff}} : \bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}} = (\mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}} - \mathbf{M}^{\text{back}}) : \bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}} \quad (2.81)$$

したがって, 粘塑性流れ $\bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}}$ は弾性応力である偏差対称粘弾性 Mandel 応力 $\mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}}$ と粘塑性移動硬化自由エネルギーによって得られる背応力 \mathbf{M}^{back} の差に対してエネルギー共役な関係にあることがわかる. そこで本研究では, 粘塑性散逸ポテンシャル $\hat{\varphi}^{\text{vp}}$ を導入することで最終的に粘塑性流れ則が次式で得られるものとする.

$$\bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}} = \dot{\gamma}^{\text{vp}} \mathbf{N}(\mathbf{M}^{\text{eff}}) = \dot{\gamma}^{\text{vp}} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\mathbf{M}^{\text{eff}}}{\|\mathbf{M}^{\text{eff}}\|} \quad (2.82)$$

ここで, $\dot{\gamma}^{\text{vp}}$, \mathbf{N} はそれぞれ粘塑性乗数と流れベクトルである. なお, 粘塑性散逸ポテンシャルに関する詳細な導出は第三章で行うことにする. また, 塑性変形勾配の発展則は式(2.22)によって次式で与えられる.

$$\dot{\bar{\mathbf{F}}}^{\text{vp}} = \bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}} \bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}} \quad (2.83)$$

一方, von-Mises の降伏関数を

$$f(\mathbf{M}^{\text{eff}}, q^{\text{vp}}, \theta) \equiv \tau^{\text{eff}} + q^{\text{vp}} + \tau^{\text{vol}} - \sigma_Y^0 \quad (2.84)$$

と定義すると, 弾性域 E_σ は $E_\sigma = \{(\mathbf{M}^{\text{eff}}, q^{\text{vp}}) | f(\mathbf{M}^{\text{eff}}, q^{\text{vp}}, \theta) < 0\}$ となる. ここで, 等価応力 τ^{eff} , τ^{vol} はそれぞれ次式で定義する Mises 相当応力, 静水圧である.

$$\tau^{\text{eff}} \equiv \sqrt{\frac{1}{2} (\mathbf{M}^{\text{eff}} : \mathbf{M}^{\text{eff}})}, \quad \tau^{\text{vol}} \equiv \alpha \tau_{\text{vol}}^{\text{ve}} \quad (2.85)$$

なお, 静水圧は Boyce ら²⁵⁾ が提示した降伏強さの圧力依存性を転用したものであり, 式(2.84)で示される降伏関数の独立変数にも含めない. つまり, 式(2.82)はあくまでも関連 Mises 流れ則であり, Drucker-Prager モデルとは異なることに留意する. また, σ_Y^0

は初期降伏応力であり，次式で定義する．

$$\sigma_Y^0 = \sum_{\alpha=1}^{N^{ve}} \left[\hat{\sigma}_Y^0 \gamma^\alpha \exp\left(-\frac{t}{\hat{\tau}^\alpha}\right) \right] + \zeta_c G^\infty \quad (2.86)$$

$$\hat{\sigma}_Y^0 = \alpha_Y^0 \left[(\theta_g - \theta) + \sqrt{(\theta_g - \theta)^2 + (\beta_Y^0)^2} \right] \quad (2.87)$$

ここで， ζ_c ， α_Y^0 ， β_Y^0 は材料パラメータである． θ_g はガラス転移温度である．Richeton⁴⁸⁾ や Bouvard⁵⁶⁾ によれば，ガラス域の初期降伏応力は線形変化するとされているが，ガラス転移点近傍の温度にまで達すると，降伏応力は粘弾性応力と同様に温度増加に対して急激に低下すると考えられる．したがって本研究では，これを考慮するために粘弾性モデルの導入によって得られる緩和弾性率を反映した式(2.87)を提案することによってガラス-ゴム状態における粘塑性硬化挙動の再現を試みる．一方で，硬化に関する熱力学的示量変数 ξ^{vp} に対する依存性を有する自由エネルギー ψ_{iso}^{vp} を次式で定義する．

$$\psi_{iso}^{vp} = \frac{h}{2} (\xi^{vp})^2 \quad (2.88)$$

このとき，式(2.37)は次式で書き換えられる．

$$q^{vp} = -\nabla_{\xi^{vp}} (\rho_0 \psi_{iso}^{vp}) = -h \xi^{vp} = -r^{vp} \quad (2.89)$$

ここで，

$$r^{vp} = h \xi^{vp} \quad (2.90)$$

はせん断降伏強さであり，その速度形の硬化則には Boyce ら²⁵⁾ の提案した次式を採用する．

$$\dot{r}^{vp} = h \left(1 - \frac{r^{vp}}{S_{ss}} \right) \dot{\gamma}^{vp}, \quad r^{vp}|_{t=0 \rightarrow t_{Yield}} = 0 \quad (2.91)$$

ここで， h はせん断降伏強さの時間変化率の大きさを規定するパラメータであり， $\bullet|_{t=0 \rightarrow t_{Yield}} = 0$ は初期状態 $t = 0$ から初期降伏を迎える時間 $t = t_{Yield}$ までにおいて $\bullet = 0$ であることを

意味する．また， s_{ss} は配向状態におけるせん断降伏強さであり．次の発展則⁵⁶⁾に従う．

$$\dot{s}_{ss} = (s_{ss}^{\infty} - g s_{ss}) \dot{\gamma}^{vp}, \quad s_{ss}|_{t=0 \rightarrow t_{yield}} = s_{ss}^0 \quad (2.92)$$

ここで， $s_{ss}^0, s_{ss}^{\infty}$ は，それぞれ s_{ss} の初期値と終局値であり， g は，材料パラメータである．なお， s_{ss}^0 については次式を設定する．

$$s_{ss}^0 = \sum_{\alpha=1}^{N^{ve}} \left[\hat{s}_{ss}^0 \gamma^{\alpha} \exp\left(-\frac{t}{\hat{\tau}^{\alpha}}\right) \right] + \frac{s_{ss}^{\infty}}{g} \quad (2.93)$$

また， \hat{s}_{ss}^0 は次式のように定義した．

$$\hat{s}_{ss}^0 = \alpha_{ss}^0 \left[(\theta_g - \theta) + \sqrt{(\theta_g - \theta)^2 + (\beta_{ss}^0)^2} \right] \quad (2.94)$$

ここで， $\alpha_{ss}^0, \beta_{ss}^0$ は材料パラメータである．

一方，粘塑性乗数の発展則には Richeton ら⁴⁶⁾ のガラス・ゴム領域に渡る粘塑性流動を表現可能な次式を採用する．

$$\dot{\gamma}^{vp} = \dot{\gamma}_0^{vp} \exp\left(-\frac{\Delta H}{R\theta}\right) \sinh^{\frac{1}{m}}\left(\frac{Af}{k\theta}\right) \quad (2.95)$$

ここで， $\dot{\gamma}_0^{vp}, \Delta H, A$ は，それぞれ初期粘塑性乗数，活性化エネルギー，活性化体積であり， R, k はそれぞれ気体定数と Boltzmann 定数である．

最後に，配向硬化現象を表現するために導入した粘塑性移動硬化モデルにおける背応力を定義する．配向硬化現象は，外力作用に対する分子鎖の伸び切り抵抗に起因している．そこで本研究では，Ames⁵³⁾ らの考え方に則り，Arruda-Boyce モデルを現象論的に簡略化した Gent¹⁰⁴⁾ の超弾性モデルに倣って次式のような自由エネルギーを用いる．

$$\rho_0 \psi_{kin}^{vp}(\mathbf{F}^{vp}, \theta) = -\mu(\theta) J_m \ln\left(1 - \frac{\bar{I}_1^{vp} - 3}{J_m}\right) \quad (2.96)$$

ここで， $\bar{I}_1^{vp} = \text{tr}(\bar{\mathbf{b}}^{vp})$ ， $J_m > 3.0$ はそれぞれ粘塑性左 Cauchy-Green テンソルの第一不変量と分子鎖の伸び切り長さを表すパラメータである．また， μ は背応力の剛性値であ

り，ガラス転移点を境として劇的に減少し，ゴム域での温度上昇に対して再び増加すること⁴⁸⁾を考慮した次式のような温度の関数として定義する．

$$\mu(\theta) = \frac{1}{2}(\mu_g + \mu_r) - \frac{1}{2}(\mu_g - \mu_r) \left[\tanh\left(\frac{\theta - \theta_g}{W_{\text{back}}}\right) - \beta_{\text{back}} |\theta - \theta_g| \right] \quad (2.97)$$

ここで， μ_g ， μ_r ， W_{back} ， β_{back} はそれぞれガラス域とゴム域における剛性値と温度上昇に伴う剛性値の変化を規定するパラメータである．このとき，式(2.80)より背応力は次式のように得られる．

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^{\text{back}} &= 2\nabla_{\mathbf{b}^{\text{VP}}} (\rho_0 \psi_{\text{kin}}^{\text{VP}}) \mathbf{b}^{\text{VP}} \\ &= 2\nabla_{\bar{\mathbf{I}}_1^{\text{VP}}} (\rho_0 \psi_{\text{kin}}^{\text{VP}}) : \nabla_{\mathbf{b}^{\text{VP}}} \bar{\mathbf{I}}_1^{\text{VP}} \mathbf{b}^{\text{VP}} \\ &= 2\nabla_{\bar{\mathbf{I}}_1^{\text{VP}}} (\rho_0 \psi_{\text{kin}}^{\text{VP}}) \left(\bar{\mathbf{b}}^{\text{VP}} - \frac{\bar{\mathbf{I}}_1^{\text{VP}}}{3} \mathbf{1} \right) \\ &= \mu(\theta) \left(1 - \frac{\bar{\mathbf{I}}_1^{\text{VP}} - 3}{J_m} \right)^{-1} \mathbf{I}_{\text{dev}} : \bar{\mathbf{b}}^{\text{VP}} \end{aligned} \quad (2.98)$$

以上が本研究で示す粘弾性・粘塑性複合構成則であり，これらをまとめた一覧を図-2.2に示す．

2.6 粘弾性・粘塑性複合構成則の基本的な性能の検証

本節では，第2.7節と第2.8節で同定するパラメータを用いて，6面体一次の低減積分要素1つで構築された解析モデルに対する一様変形解析を実施し，得られた真応力-真ひずみ関係から前節までに示した粘弾性・粘塑性複合構成則の基本的な性能を示す．ここで粘弾性・粘塑性複合構成則は，マルチメカニズム理論⁵⁴⁾に倣って個々の物理現象を表現しうる力学モデルの重ね合わせによって，ガラス-ゴム状態における非晶性熱可塑性樹脂が示す複雑なクリープ特性の再現を実現している．したがって本節では，粘弾性のみを考慮した力学挙動から粘塑性等方硬化および移動硬化を考慮した力学挙

動を段階的に示すことで、提案する材料構成則の各構成要素が非晶性熱可塑性樹脂の力学挙動を表すために果たす役割を例示することにする。

まず、図-2.3 に粘弾性モデルのみを考慮した真応力-真ひずみ関係を示す。ここで、図 (a) で示す解析条件には、雰囲気温度 30[deg] において 4 水準の負荷速度を設定し、図 (b) で示す解析条件には、負荷速度 0.1[mm/s] において 4 水準の雰囲気温度を設定した。これらの結果を観察すると、粘弾性特有の温度と負荷速度の依存性が明確に現れている。また、次節で示すようにガラス領域からゴム領域に渡る広範な粘弾性特性の取得に成功しているため、図 (b) で示すように低温のガラス状態（図中では赤色）から高温のゴム状態（図中では橙色）までの挙動を再現することに成功している。しかし、粘弾性のみを考慮した場合には一様なクリープ特性が再現されるだけであり、非晶性熱可塑性樹脂が呈する複雑なクリープ挙動の再現できない。

次に、図-2.4 に粘弾性に粘塑性等方硬化を考慮した場合における真応力-真ひずみ関係を示す。ここで、図 (a) で示す解析条件には、雰囲気温度 30[deg] において 4 水準の負荷速度を設定し、除荷速度も負荷速度と同じに設定した。また、無負荷保持の時間は 4 水準とも統一して 500[s] を設定している。一方で、図 (b) で示す解析条件には、負荷速度 0.1[mm/s] において 4 水準の雰囲気温度を設定し、(a) と同様の除荷および無負荷保持の条件を設定した。これらの結果を観察するとまず、粘塑性等方硬化モデルの導入によって非晶性熱可塑性樹脂に特有のひずみ軟化挙動が再現されていることがわかる。また図 (a) を観察すると、所与の負荷速度に対して応力の速度依存性が明確に表れている。加えて図 (b) を観察すると、温度依存性も明確に現れており、特にガラス転移温度 $\theta_g = 150[\text{deg}]$ よりも高温の結果（図中では橙色）では、ゴム状態に突入して急激に応力が低下しており、ひずみ軟化現象も消滅している。これは、粘塑性変形が速度依存性を有するだけでなく、初期降伏応力やせん断降伏応力のモデル化に緩和弾性率を反映させた結果である。ひずみ軟化後の大変形域においては、応力が低減し続

ける様子が確認できる。これは粘塑性移動硬化による配向硬化現象を考慮していないためであり、変形を持続的に進展させるとやがて一定応力に落ち着き、完全塑性的な挙動が現れることになる。最後に、図(a)や図(b)の赤、青、緑色で示した除荷曲線の結果を観察すると、粘塑性変形が支配的となっていることに起因して、ひずみはほとんど回復しない。したがって、無負荷保持を施してもひずみ回復が観察されることはない。これは、配向硬化現象を考慮していないために全応力が直接、粘塑性変形の進展に寄与するためである。ただし、図(b)の橙においてはガラス転移点を跨いで粘弾性の割合が大きくなるため、除荷における大きな応力勾配やひずみ回復が明確に観察される。これは、図-2.1に示すレオロジーモデルに基づいて、全変形勾配を粘弾性成分と粘塑性成分に乗算分解した結果であり、ガラス転移点を跨いで粘弾性特性が強く現れることを示している。

さらに、図-2.5には本材料構成則のすべての力学モデルを考慮した場合における真応力-真ひずみ関係を示す。なお、本解析条件は先述の粘弾性に粘塑性等方硬化を考慮した場合と同じであり、図(a)と図(b)でそれぞれ負荷速度と雰囲気温度を複数水準設定している。これらの結果を観察すると、粘塑性移動硬化モデルの導入によって配向硬化現象が再現されていることがわかる。したがって、図-1.4で示したような非晶性熱可塑性樹脂の力学挙動が再現され、これが本研究で提案する粘弾性・粘塑性複合構成則が示す非晶性熱可塑性樹脂の力学挙動である。また、図(a)や図(b)の赤、青、緑で示した除荷曲線の結果を観察すると、粘塑性等方硬化のみを考慮した場合と比較して大きな応力勾配を観察することができる。これは粘塑性移動硬化による背応力が、粘塑性変形の進展を抑制したことで粘弾性変形の割合が増加して生じたものであると考えられる。ただし、図(b)の橙色の曲線では粘塑性等方硬化のみを考慮した場合と同じく、ガラス転移点を跨いで粘弾性特性の割合が多くなるため、除荷や無負荷保持によるひずみの回復量は劇的に増大する。

最後に、図-2.6に本材料構成則のすべての力学モデルを考慮した場合における雰囲気温度 160[deg] 下で複数の負荷速度を設定した解析によって得られた真応力-真ひずみ関係を示す。これらの結果を観察すると、雰囲気温度をガラス転移温度よりも高く設定しているため、赤、青、緑色で示される真応力-真ひずみ関係はゴム域における力学挙動を示している。ところが、橙色で示される真応力-真ひずみ関係は明確なひずみ軟化挙動が観察され、ガラス状態の力学挙動を呈していることがわかる。これは、粘塑性硬化モデルに緩和弾性率を反映している結果であり、ガラス転移温度に変形速度依存性を考慮していなくても、負荷速度に依存してガラス状態もしくはゴム状態となることが再現可能であるとわかる。

2.7 動的粘弾性試験による粘弾性材料パラメータ同定

本研究では、ガラス転移点を跨ぐガラス-ゴム領域の包括的な粘弾性特性を取得するために、30~200[deg] を対象として行ったポリカーボネート (PC) の動的粘弾性試験結果¹⁴⁾を用いる。ここで、計測されたPCのせん断貯蔵弾性率、せん断損失弾性率、損失正接を図-2.7に示す。これらの結果を観察すると、どの計測結果も約 120[deg] まででは変化が小さく緩やかであり、これがガラス領域に対応することが分かる。この領域における計測結果をより詳しく観察するために、図-2.8にガラス域に注目して各弾性率の拡大図を示す。図-2.7では、ガラス域において貯蔵弾性率は小さいように観察されたが、30[deg] から 120[deg] までの間で約 150[MPa] の剛性低下が確認される。このように、実際には貯蔵弾性率は温度増加に対して線形的に低下しており、これがガラス域における力学挙動に大きな影響を与えられとされる。したがって、この領域での粘弾性特性にも配慮する必要がある。

再度、図-2.7を観察すると、温度の増加に伴って約 150[deg] まで損失弾性率と損失正接が指数関数的に上昇する。そして、約 150~160[deg] にかけて損失弾性率と損失正

接が極大値に達し、貯蔵弾性率が劇的に減少する。すなわち、この領域がガラス転移領域に対応し、ガラス転移点で損失正接が極大値をとる α -relaxation の理論に即した結果が得られている。それ以降の、約 190[deg] までは貯蔵弾性率と損失弾性率の変化が緩やかになり、この領域がゴム領域に対応することが分かる。最後に、約 190[deg] 以降は準溶融域に突入し、損失正接の上昇とともに貯蔵弾性率と損失弾性率がさらに低下していく。この領域における PC の内部構造は、分子鎖の重心運動（レプテーション運動）が支配的となっており、もはや固体としての形を留めることの限界に近い状態である。なお、このような分子鎖緩和プロセスは Rolie-Poly モデル⁴⁴⁾ を用いて再現することが一般的とされる。しかし、これはマイクロメカニクス的に導出された客観応力速度による非線形粘弾性モデルであり、本研究で提案した材料構成則では熱力学的な整合性を重視しているため、この温度域における力学挙動の再現は対象外とする。

ここで、PC の粘弾性特性が熱レオロジー的に単純であると仮定した上で、これらの計測結果から貯蔵弾性率と損失弾性率および損失正接のマスターカーブを描画する。この過程で周波数ごとに計測された結果を一本の線にまとめる際に、温度時間換算則におけるシフトファクターを求める必要があるが、高分子材料で一般的な WLF 式を用いた場合では、図-2.9 に示すように、特定の温度点において値が発散してしまい、ガラス-ゴム域におけるマスターカーブを描画することはできない。その回避策として、ある温度点から低温状態ではシフトファクターの値を一定にする方法も考えられるが、低温域における温度・変形速度の弾性特性を再現することが不可能となる。これらの問題点に対して、Fan と Kazmer⁵⁹⁾ は WLF 式や Arrhenius 式などの温度時間換算則を整理して一般化 WLF 式を提案し、PC のガラス域から準溶融域までの粘弾性特性を取得することに成功している。そこで本研究では、次式に示す一般化 WLF 式を用いてシフトファクター α_{st} を求める。

$$\text{Log}_{10}(\alpha_{st}) = \frac{a[1 - \exp\{-(b|\theta_R - \theta)^c\}]}{d + \exp\{-(b|\theta_R - \theta)^c\}} \quad (2.99)$$

ここで、 a, b, c, d はそれぞれ動的粘弾性試験から同定される材料パラメータであり、 θ_R はマスターカーブを描画する上での基準温度である。図-2.10 には、式(2.99)を用いて描画したシフトファクターを示す。このシフトファクターは 30~200[deg] の間で連続的な推移をしており、このような広範な温度域における粘弾性特性を取得することが可能である。式(2.99)で求めたシフトファクターを先述の計測結果に適用することにより描画した貯蔵弾性率（左）、損失弾性率（中）、損失正接（右）の計測値の各マスターカーブを図-2.11 左に示す。この結果から、換算周波数が最大もしくは最小となる領域で多少の誤差が観察される。まず、換算周波数が最大付近のガラス領域におけるシフトファクターの値を手動で計算した場合には約 30[deg] 付近で $\log_{10}\alpha_{st} = 30$ 程の値となるため、このような誤差が現れたと考えられる。また、換算周波数が最小付近の準溶融域においては、先述のように PC が固体を維持する限界に近い状態であり、熱レオロジー的単純性が失われたことが原因であると考えられる。しかし、どのマスターカーブも全体的にはほぼ一本の曲線として観察され、ガラス転移領域における貯蔵弾性率の劇的な減少や損失弾性率と損失正接の極大点を描画することに成功しているため、本研究ではこれらを良質なマスターカーブであると判断し、これを元データとして材料パラメータを同定することにする。

最後に、描画したマスターカーブから各 Maxwell 要素のせん断弾性係数 G^α と緩和時間 τ^α を同定する。なお、 $\hat{\tau}^\alpha(\theta) = \alpha_{st}(\theta)\tau^\alpha$ である。ここで、パラメータ同定に必要なせん断貯蔵弾性率 G' とせん断損失弾性率 G'' の関数形には次式を採用する。

$$G' = G^g + \sum_{\alpha=1}^{N^{ve}} \left[\frac{(\tau^\alpha \omega')^2}{1 + (\tau^\alpha \omega')^2} \right] G^\alpha \quad (2.100)$$

$$G'' = \sum_{\alpha=1}^{N^{ve}} \left[\frac{\tau^\alpha \omega'}{1 + (\tau^\alpha \omega')^2} \right] G^\alpha \quad (2.101)$$

ここで、 $\omega' = \alpha_{st}\omega$ は α 番目の Maxwell 要素に対する換算周波数である。また、本研究ではガラス-ゴム域に渡って広範囲の粘弾性特性を同定する必要があるため、Maxwell

要素数 N^{ve} は一般的なものよりも多い 22 個に設定した。なお、分子鎖の熱運動モードは無限通り考えられるため、 N^{ve} を一意に決めることは出来ないが、実用を考える上では、本研究で調査した結果を踏まえて、22 個程度が良好な同定結果を得るための最小数であると考えている。単純な繰り返し計算によって得られたカーブフィットの結果を図-2.11 右に示し、得られた材料パラメータを表-2.3 に示す。どのマスターカーブにおいても振動している様子はなく、良好に同定できているといえる。

最後に、同定結果を用いて描画される緩和スペクトルを図-2.12 に示す。ガラス域において緩和スペクトルは緩和時間とともに増加し、ガラス域における剛性の線形変化に対応している。また、ガラス転移点近傍に対応する緩和時間 $\tau^{\alpha} = 10^{-4}$ [sec] 付近で緩和スペクトルは極大値となり、ガラス転移現象を伴って急激に減少する。そして、ゴム域から準溶融域への遷移段階で、緩和スペクトルは一時的に増加するものの、それ以上の緩和時間の増加に対して、最終的にゼロになるまで減少する。このようなガラス-ゴム状態における緩和スペクトルはほとんどの高分子材料に対して一般的に観察されるものであり⁴⁾、本研究の同定結果が良好なものであると結論付けることが出来る。また、ここでの同定結果を用いて描画される緩和弾性率を図-2.13 に示す。まず、ガラス域における温度・変形速度依存の弾性特性を表現するために必要な線形的な剛性低下を表現することに成功していることがわかる。また、ガラス転移領域の付近では剛性の劇的な減少が観察され、ゴム域に至る段階では約 1000 分の 1 にまで低下している。そして、ゴム域では剛性は再度、緩やかに変化するが、最終的には準溶融域に至り、剛性がほとんど完全に失われる。このように、本研究で示した同定プロセスを実行することにより、ガラス域から準溶融域に渡る広範な粘弾性特性を取得することに成功した。

2.8 負荷・除荷引張試験による粘塑性材料パラメータ同定

2.8.1 引張試験解析

本研究では、構築した粘弾性・粘塑性複合構成則の粘塑性材料パラメータを同定するために、写真-2.1に示すPCのR-20型切欠き付き試験片を用いて、室温環境下（30[deg]）で行われた負荷・除荷引張試験の結果¹⁴⁾を用いる。本試験は、表-2.2に示す複数の負荷速度・目標変形帯が設定されている。そして、得られた真応力-真ひずみ曲線を図-2.14に示す。なお、本試験では除荷後に無負荷の状態ですべて500[sec]の間、試験片のひずみ変化を計測しており、粘弾性特有のひずみ回復現象のデータも取得されている。

得られた試験結果から粘塑性パラメータを同定するために、図-2.15に示す節点数2178、一次の低減積分要素1200で構成されるR-20型切欠き付き試験片の有限要素モデルを用いて試験の再現解析を行う。境界条件には、引張方向（X方向）に垂直な各端面に対して-X面には完全拘束を、+X面にはYおよびZ方向を拘束してX方向に強制変位を与える条件とした。さらに、力学応答のY方向およびZ方向の対称性を考慮して-Y面をY方向に拘束し、-Z面をZ方向に拘束する対称条件を課す。パラメータ同定の具体的な方法は、粘塑性パラメータの組み合わせを複数水準設定した試験片モデルの負荷・除荷および引張条件の解析を実行し、図-2.15に赤色で示す試験片中心部分の要素において積分点平均することで算出した真応力-真ひずみ関係と実験結果との誤差を最小化するような粘塑性パラメータの組み合わせをメタヒューリスティクスの一手法である差分進化法^{105,106)}を用いて求めた。表-2.3に同定した粘塑性材料パラメータを示す。

図-2.16には、引張同定解析で得られた真応力-真ひずみ曲線を示す。どの水準においても降伏前の微小変形域においては非常に高精度な結果が得られている。これは、先述の動的粘弾性試験を用いて粘弾性特性を同定した結果であると判断される。初期降伏

とその後のひずみ軟化挙動では、配向状態におけるせん断降伏強さの発展則を導入したことによって、滑らかな応力推移の再現に成功している。しかし、ケース 30[mm/min]については、初期降伏点の実験よりも高い位置にあり、これがその後の同定誤差につながっているものと考えられる。また、大変形域における配向硬化挙動に関して、ケース 0.3, 3.0[mm/min]については良好な結果が得られているといえる。しかし、ケース 30[mm/min]については、先の初期降伏とひずみ軟化にて現れた誤差により実験よりも早い変形域で配向硬化が発現しており、その後の大変形域における大きな誤差となって現れている。ただし、ひずみ軟化挙動が生ずる段階で大きな発熱が発生し、これが背応力の剛性を下げていると考えられるため、構造内の温度変化を考慮した解析を行うことによって誤差値は少なくなる可能性がある。それにもかかわらず、本研究で提案した粘弾性・粘塑性複合構成則は、概ね速度依存の弾性特性、降伏後のひずみ軟化挙動、配向硬化挙動の再現に成功しており、全体的な真応力-真ひずみ曲線の表現性能は高いといえる。

図-2.17 に引張同定解析で得られた公称応力-変位曲線を示す。また、この図中で指示のある変形状態に対応する、試験片モデルの X 方向の真応力と等価粘塑性ひずみの分布を図-2.18 に示す。まず、どの水準においても降伏前段階における応力勾配が大きく異なっている。ただし、この領域においては粘弾性が支配的であることを考慮すると、一概に本研究で提案した材料構成則に問題があるとはいえず、単に実験と解析の荷重-変位関係の取得方法あるいは真応力の算定方法等に齟齬がある可能性も否定できない。得られた結果を観察すると、まず [A] 点では粘弾性が支配的であることが確認できるが、詳細については後述する。次に、[B] から [C] にかけて公称応力が劇的に減少している。これは、試験片中央部におけるひずみ軟化挙動に起因しており、この変位域において試験片モデルがネッキングしている様子を確認することができる。同時に、このネッキングによって試験片中央部で大きな粘塑性ひずみが進展しているだけでな

く、試験片の標点間では、ほとんど一様であった応力分布が試験片中央に集中しはじめる様子を確認することができる。このような現象は、非晶性熱可塑性樹脂内部の分子鎖集団の熱運動が初期降伏を起点に活性化し、コンフォメーション運動が盛んになることによって急激な粘塑性流動を生じることが原因であるといわれている。その後、[D]から[E]にかけて公称応力が線形的に上昇する様子を観察することができる。この段階では、試験片中央部で応力や粘塑性ひずみが集中しており、この領域では樹脂内部の分子鎖集団は変形に対して伸び切ることによる配向硬化を示すようになる。そして、この配向硬化現象による応力の上昇が結果として公称応力の線形的な上昇に貢献する。また、以上のような解析によって得られた[B]から[E]における公称応力-変位関係を実験と比較すると、まず実験でも初期降伏点からの急激な公称応力の減少は観察されており、さらにその減少量も実験と解析の間でほとんど一致した値となっている。その後の大変形域において、ケース 3.0, 30[mm/min]については非常に良好な結果が得られている。ただし、ケース 0.3[mm/min]については、実験に対して応力やその勾配が小さく、両者の差は非常に大きくなっている。これは、配向硬化現象が分子鎖の変形量に依存することを考慮すると、本来は他の高速の水準に対して応力勾配が変化しないにもかかわらず、他の高速水準における配向硬化に合うように同定されてしまった結果であると考えられる。このように、微小変形域における応力勾配の差異は確認されるが、本研究で提案した材料構成則を用いることによって、公称応力の急激な減少やその後の線形的な硬化を再現可能であり、実測と計算の齟齬を解消することにより、より良好な結果が得られるものと考えている。

次に、ひずみ軟化挙動に的を絞って本材料構成則の性能を検証する。まず、**図-2.19**に等価粘塑性ひずみ速度を実験と解析で比較した結果を示す。なお、実験から取得したひずみ速度は厳密には単なる真ひずみの時間変化であるが、ひずみ軟化域では粘塑性流動がほぼ完全に支配的であることから、これを等価粘塑性ひずみ速度として扱う

こととする。

全水準ともひずみ軟化域において等価粘塑性ひずみ速度が急激に増大する様子を確認することができ、ケース 0.3, 30[mm/min] については良好な結果が得られている。しかし、ケース 3.0[mm/min] については解析で得られた等価粘塑性ひずみ速度の極大値が約半分程度にとどまっており、ひずみ軟化挙動の再現性に問題が残る結果となった。また、**図-2.19**の結果から、実験と解析の結果はともにひずみ軟化に伴って非常に大きな等価粘塑性ひずみ速度が現れている。特にケース 30[mm/min] については、瞬間的な速度が約 100%にも達しており、この急激な速度増加が非晶性熱可塑性樹脂に特有のひずみ軟化や瞬間的なネッキング現象を生み出している。このようなひずみ速度の急激な増加は等価応力と降伏応力の差にあり、それを裏付ける結果がこれらの推移を示す**図-2.20**である。この図から、等価応力は初期降伏点に達するまでほとんど線形的に増加していくが、降伏後からその勾配が徐々に減少していき、最終的には極大点に達する。このとき、降伏応力との差は非常に大きくなっており、この応力差が駆動力となって非常に速い粘塑性流動を発生させる。なお、このような等価応力や降伏応力が極大値をとるのは、配向状態におけるせん断降伏強さの発展則に起因している。その推移を示す**図-2.21**を見ると、初期降伏の段階までは、等価応力と降伏応力の値の差が大きい領域でせん断降伏強さの発展が加速されており、その値が急速に上昇する様子が確認できる。そして、両者が一致する段階では逆に、せん断降伏強さの発展速度がゼロに近づき、なめらかに極大点に達する。その後、配向状態におけるせん断降伏強さの軌跡に追従する形で再度、せん断降伏強さは急激に減少し、最終的に一定値に達する。これがひずみ軟化による応力の減少を表現しており、粘塑性移動硬化がない場合は配向した分子鎖の伸び切り抵抗を考慮していないため、あたかも完全塑性体であるかのように振る舞う。また、このようにせん断降伏強さの発展速度が配向状態におけるせん断降伏強さの進展に依存するモデル化を行うことによって、せん断降伏応力が初期降

伏点近傍でなめらかな軌跡を描き、結果として応力のなめらかさに影響するといえる。

最後に、配向硬化現象を表現する背応力の推移を図-2.22に示す。この図から、どの速度水準においてもほとんど同じ指数関数的な軌跡をたどる結果となった。これは、背応力が粘塑性変形量に依存することに起因しており、このことは本研究の材料構成則で表現する配向硬化現象には変形速度への依存性は現れないことを意味する。

2.8.2 負荷・除荷・保持試験解析

本項では、前項の引張試験と同じ条件で1.0もしくは3.0[mm]の引張を与え、その後、除荷と無負荷状態の保持を行う試験の結果を示す。なお、図-2.17に示す公称応力-変位関係でみられたような降伏前段階における計測値との応力勾配の差異が原因となつて、所与の強制変位が負荷された試験片モデルの中心部におけるひずみ量に計測値との齟齬が認められる。したがって、本研究では試験片モデルの中心部におけるひずみ量に一致するように、所与の強制変位量を補正する形で再現解析を実施した。

まず、1.0[mm]負荷・除荷・無負荷保持の試験結果を図-2.23に示す。結果を観察すると、動的粘弾性試験によってあらかじめ粘弾性特性を取得していたため、全水準とも最大の応力値は実験と近い値を示している。また、除荷を通して形成される弾性ヒステリシスや保持段階のひずみ緩和挙動も再現することができている。しかし、実験では負荷速度が高速になるほど弾性ヒステリシスが大きくなるのに対して、解析では全く逆の傾向を示している。これは、この変形域において解析の方では未だ粘塑性降伏をしていないのに対して、高速水準の実験結果では粘塑性降伏をしている様子が観察され、この差が弾性ヒステリシスの誤差へと繋がったものと考えられる。

次に、3.0[mm]負荷・除荷・無負荷保持の試験結果を図-2.24に示す。結果を観察すると、どの水準についても比較的良好な結果が得られているといえる。具体的には、まず応力極大点近傍からひずみ軟化後にかけての応力のなめらかな軌跡とその量が良好

な結果として現れている。そして、その後の配向硬化による応力の上昇傾向もこのひずみ域まではある程度の一致が見られる。これら一連の軌跡をたどって得られた変位量 3.0[mm] における試験片の変形状態や真応力、等価粘塑性ひずみ速度分布を図-2.25 に示す。この段階 [F] ではちょうど配向硬化が始まった段階で、試験片中央部に応力やひずみが集中している様子を観察することができる。その後の、除荷過程において実験では変形を増加させるような膨らみを伴って応力が減少していくが、解析ではその膨らみが除荷の初期段階でわずかに観察される程度であり、ほとんど直線的な応力の減少となっている。この除荷過程における応力の膨らみは、負荷から除荷に切り替わる際の粘性による応答の遅れが現れたものであると考えられるが、解析では応力極大点近くにおけるこの粘弾性特性を正確に表現できていないために、このふくらみも表現できていない。これは、非線形粘弾性を考慮する必要があることを示唆している。この段階の対応する試験片モデルは図-2.24 の [F] から [H] の状態であり、試験片中央部で応力が減少する様子を観察することができる。さらに、完全に除荷して無負荷状態 [H] を観察すると、試験片中央部で未だ応力が発生していることが確認できる。これは、粘弾性の非平衡応力の作用であり、その後の無負荷保持段階 [I] にわたって進展するひずみ回復挙動の駆動力となっている。実際に、実験でも応力-ひずみ関係でも無負荷保持段階におけるひずみ回復挙動が観測されており、本研究で提案した構成則のように、粘弾性モデルを導入することによってはじめて再現できる力学挙動である。ただし、実験的にはより多くのひずみ緩和挙動が観測されており、このことも解析では粘弾性変形の総量が不足していることを裏付ける傍証といえる。

2.9 環境温度依存性に関する表現性能の検証

本節では、これまで室温環境下 (30[deg]) で行った 3.0[mm] 負荷・除荷・保持試験に関連して、環境温度を変化させた試験を実施することにより、本研究で提案する粘弾

性・粘塑性構成則の温度依存性の表現性能やガラス転移現象を跨いだときの力学挙動の変化を考察する。しかし取得されている実験のデータは、荷重－変位関係のみであるため、環境温度依存に関する構成則の表現性能については、定性的な考察に留めることにする。まず、図-2.26と図-2.27に環境温度 50[deg], 75[deg], 100[deg], 120[deg] における荷重速度別の結果を示す。まず、環境温度 50[deg] のケースについて、実験ではほとんど速度依存性が観察されないが、解析では明確な速度依存性が現れている。先述の 30[deg] の場合では、実験と解析の応力水準に良好な関係が認められたことを考慮すると、実験結果をそのまま信用することは出来ないが、非晶性熱可塑性樹脂の粘性特性は荷重－変位曲線にほとんど影響を与えないことを示している。これは、動的粘弾性試験の結果を整理する際に設定したガラス域におけるシフトファクターが実際の測定結果よりも小さいことに起因しており、ガラス域の緩和時間帯が狭まり、結果として荷重速度に対して実際よりも敏感になってしまったことが原因であると考えられる。ただし、ひずみ軟化後においては解析でもほとんど荷重速度依存性が観察されず、実験結果に即した解析結果が得られたと言える。次に、除荷過程については、解析結果の方が実験よりも回復する変位量が少ない。これは、解析の方で早い段階から粘塑性降伏をしていることに起因しており、結果として永久変形が蓄積されてしまったからであると考えられる。また、解析では除荷の過程で変曲点が観察されるが、これは粘塑性移動硬化が通常よりも速く進展してしまったため、弾性除荷が途中の段階で終了し、このような変曲点となって現れたものと考えられる。最後の無荷保持の過程では、実験と解析の両方でひずみ緩和挙動を観察することができる。ただし、前項で説明したように解析の中間変形域における粘弾性挙動を正確に表現できていないため、ひずみ回復量が実験結果よりも少なくなっている。

次に、75[deg] から 120[deg] までの結果については、まず温度の上昇に伴い剛性の低下が確認される。そして対応する実験と応力値が近くなっており、良好な結果が得られ

ているといえる。しかし、ひずみ軟化に伴う応力勾配に関して、実験では温度増加に対してもそれほど大きな変化がないように観察されるが、解析では徐々に応力勾配が減少している。この解析の結果は、式(2.91)に与えたせん断降伏強さの発展則の関数形を反映しており、温度上昇に伴って徐々にその極大値と終局値の差が少なくなっていることに起因している。

次に、環境温度 140[deg], 150[deg] における負荷速度別の結果を図-2.28 に示す。これら温度状態は既にガラス転移領域に突入しており、負荷速度や温度条件によって敏感に粘弾性および粘塑性の特性が変化する。実際、実験では負荷速度に依存してガラス域とゴム域の力学挙動が混在した様子を観察することができる。例えば、環境温度 140[deg] のケース 3.0, 30, 300[mm/min] でガラス域が保持されている一方で、ケース 0.3[mm/min] においてはひずみ軟化挙動が消滅し、ゴム域に特徴的な挙動が表れている様子が確認できる。また、初期変形域における応力水準の差は、前節で示した動的粘弾性試験の結果が正確に反映されていることを示している。そして、ケース 0.3[mm/min] におけるひずみ軟化挙動の消滅やその後の応力状態が維持されていることに関しては、緩和弾性率に依存した粘塑性硬化の発展則の導入によって、温度と負荷速度の依存性が考慮された結果が現れているものと考えられる。さらに、除荷過程における背応力に起因する変曲点を確認されるものの、無府 k 保持の段階における大きなひずみ回復挙動も再現されている。これは、温度増加に対して粘弾性変形の比率が上昇していることを示しており、ガラス域からゴム域に変化する際に、全体の変形の中で支配的な非弾性変形が遷移することを表現している。すなわち、本研究で提案した材料構成則は、粘弾性を考慮することで β -relaxation 挙動から α -relaxation 挙動への移り変わりを表現可能である材料モデルといえる。一方、環境温度 150[deg] のケースでも同様の考察が可能である。先述の温度帯よりも 10[deg] も高温状態であるにもかかわらず、ケース 30, 300[mm/min] についてはガラス域を維持したままとなっている。しかし、ケー

ス 3.0[mm/min] については、実験結果では未だガラス域を維持した結果が現れているのに対して、解析結果ではもはやゴム状態に達している。ただし、この温度域における力学挙動はこれまで述べたように環境温度や負荷速度に対して非常に敏感であり、動的粘弾性試験の同定精度をより高めることによってこの齟齬を解消することができるかと期待している。

最後に、環境温度 155[deg], 160[deg] における負荷速度別の結果を図-2.29 に示す。これらの温度帯はガラス転移点よりも高温側に位置し、既にガラス転移領域もしくはゴム領域に移行している。したがって、実験結果を観察するとケース 300[mm/min] については未だにガラス域の力学挙動を示すものの、その他速度水準の結果は全てゴム域に達していることがわかる。一方で、解析結果でもこのような傾向が観察でき、ガラス域からゴム域への遷移過程における力学挙動をある程度良好に再現できているといえる。また、無負荷保持の段階におけるひずみ回復現象も再現できており、特に環境温度 160[deg] のケース 300[mm/min] で観察される無負荷保持の段階では、ほとんどすべての変形が回復する様子を再現できている。しかしながら、この環境温度 160[deg] のケース 300[mm/min] では、実験結果の方で除荷過程における変曲点が現れていることに加え、このケースの引張における応力の軌跡が実験と解析で大きく異なっている。これは、ゴム域において発現するレプテーションによる粘塑性流れ挙動を考慮していないことが原因であると考えられ、今後はこれを考慮することによって実験で得られているような引張段階での応力の軌跡や除荷段階での変曲点の出現を予測することが可能になるものと考えている。

2.10 まとめ

本章では、非晶性熱可塑性樹脂の力学挙動が粘弾性と粘塑性の複合現象であるとの考え方から、図-2.1 に示すレオロジーモデルを参照して広域の温度・負荷速度帯にお

けるガラスーゴム状態を対象とした非晶性熱可塑性樹脂の力学挙動を再現可能な粘弾性・粘塑性複合構成則を提案した。提案した材料構成則は以下の特徴を有している。

- 熱力学的定式化を通して構築されているため、固体熱力学的に整合している。
- 粘弾性モデルを陽に考慮しているため、弾性特性の速度依存性および、ひずみ回復挙動が自然な形で再現可能である。
- 全変形勾配の粘弾性成分と粘塑性成分への乗算分解を基点としているため、ガラス域では粘塑性変形が支配的であり、逆にミクロブラウン運動の発現によってゴム域では粘弾性変形が支配的となることを再現可能である。
- 粘塑性硬化モデルに緩和弾性率を反映させているため、温度や負荷速度に依存した粘塑性硬化挙動を再現できるだけでなく、ゴム域においてひずみ軟化が消滅する現象なども再現可能である。

このような特徴を有する材料構成則によれば、微小変形域から大変形域までの広域の変形帯を網羅したガラスーゴム状態における非晶性熱可塑性樹脂の負荷・除荷挙動を再現することが可能である。さらに、無負荷保持状態におけるひずみ回復挙動の再現も可能であるため、構造物の最終的な形状の予測精度を高めることにもなると期待される。

ただし、実際のガラス状態における非晶性熱可塑性樹脂は、ひずみ軟化に突入する寸前まで粘弾性挙動が支配的であり、事実、上降伏点において除荷を施すと、ほぼ永久変形が残らないことが観察されている¹⁴⁾。これを再現するためには、充填ゴムの材料モデリングで一般的に用いられているような振幅依存性を考慮した非線形粘弾性モデルが必要である。しかし、固体熱力学的な整合性を担保しながら粘弾性・粘塑性複合構成則を導入するためには、本章で示した熱力学的定式化を再検討しなければならず、これについては今後の課題としたい。また準溶融域における力学挙動に関しては、

第 2.7 節で示したように，Rolie-Poly モデル⁴⁴⁾などの客観応力速度による非線形粘弾性モデルを導入する必要があり，先述のようにこれを導入するためには，熱力学的定式化を再検討しなければならない。

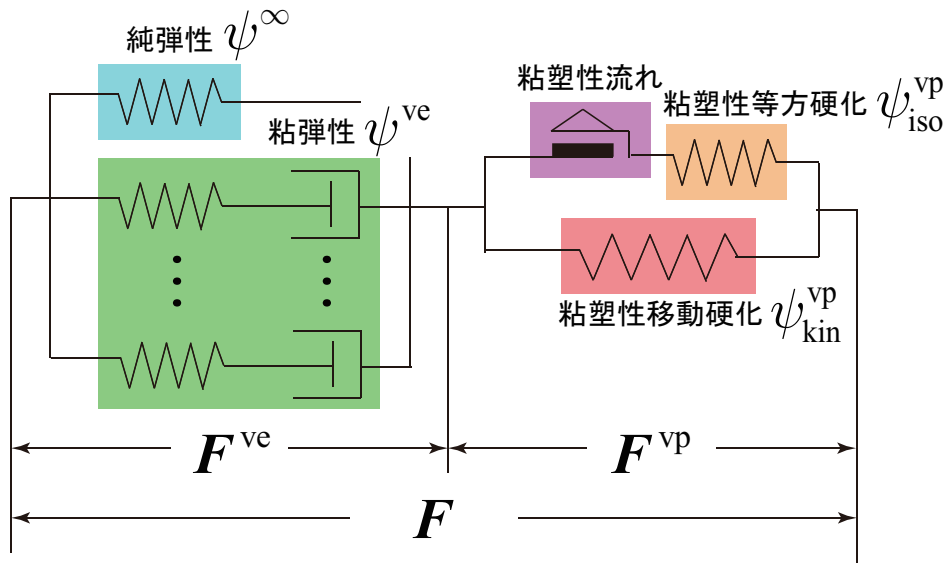


図-2.1 提案する粘弾性・粘塑性複合構成則のレオロジーモデル

[1] 全 Kirchhoff 応力

$$\boldsymbol{\tau} = \tau_{\text{vol}}^{\text{ve}} \cdot \mathbf{1} + \mathbf{R}^{\text{ve}} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}} \left(\mathbf{R}^{\text{ve}} \right)^{\text{T}}, \quad \tau_{\text{vol}}^{\text{ve}} = \tau_{\text{vol}}^{\infty} + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} R_{\text{vol}}^{\alpha}, \quad \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}} = \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\infty} + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \mathbf{R}_{\text{dev}}^{\alpha}$$

[2] 純弾性応力

$$(2.1) \text{ 体積成分} \quad \tau_{\text{vol}}^{\infty} = K^{\infty} (\ln J - 3\alpha_{\text{th}}(\theta)), \quad \alpha_{\text{th}}(\theta) = \alpha_{\text{th}}^{\text{R}} \cdot \langle \theta - \theta_{\text{g}} \rangle - \alpha_{\text{th}}^{\text{G}} \cdot \langle \theta_{\text{g}} - \theta \rangle + \alpha_{\text{th}}^{\text{G}} \cdot \langle \theta_{\text{g}} - \theta_0 \rangle$$

$$(2.2) \text{ 偏差成分} \quad \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\infty} = G^{\infty} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}}, \quad \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}} = \mathbf{A}^* \left[\sum_{i=1}^3 \ln \left(\lambda_{\text{I}^{\text{ve}}}^{(i)} \right) \mathbf{N}_{(i)}^* \otimes \mathbf{N}_{(i)}^* \right] \left(\mathbf{A}^* \right)^{\text{T}}$$

[3] 粘弾性非平衡応力

$$R_{\text{vol}}^{\alpha} = \int_0^t \gamma^{\alpha} \frac{D\tau_{\text{vol}}^{\infty}}{Ds} \exp \left(\frac{s-t}{\hat{\tau}^{\alpha}(\theta)} \right) ds, \quad \mathbf{R}_{\text{dev}}^{\alpha} = \int_0^t \gamma^{\alpha} \frac{D\mathbf{M}_{\text{dev}}^{\infty}}{Ds} \exp \left(\frac{s-t}{\hat{\tau}^{\alpha}(\theta)} \right) ds$$

[4] 粘塑性流れ則

$$\bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}} = \dot{\gamma}^{\text{vp}} \frac{\mathbf{M}^{\text{eff}}}{\|\mathbf{M}^{\text{eff}}\|}, \quad \mathbf{M}^{\text{eff}} = \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}} - \mathbf{M}^{\text{back}}$$

[5] 粘塑性背応力

$$\mathbf{M}^{\text{back}} = \mu(\theta) \left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}} - 3}{J_{\text{m}}} \right)^{-1} \mathbf{I}_{\text{dev}} : \bar{\mathbf{b}}^{\text{vp}}, \quad \mu(T) = \frac{1}{2}(\mu_{\text{g}} + \mu_{\text{r}}) - \frac{1}{2}(\mu_{\text{g}} - \mu_{\text{r}}) \left\{ \tanh \left(\frac{\theta - \theta_{\text{g}}}{W_{\text{back}}} \right) - \beta_{\text{back}} |\theta - \theta_{\text{g}}| \right\}$$

[6] 降伏関数

$$f(\mathbf{M}^{\text{eff}}, r^{\text{vp}}, \theta) = \tau^{\text{eff}} + \tau^{\text{vol}} - (r^{\text{vp}} + \sigma_Y^0), \quad E_{\sigma} = \left\{ (\mathbf{M}^{\text{eff}}, r^{\text{vp}}) \mid f(\mathbf{M}^{\text{eff}}, r^{\text{vp}}, \theta) < 0 \right\}$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] \left(\text{等価応力} \right) \left[\begin{array}{l} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] \tau^{\text{eff}} = \sqrt{\frac{3}{2} \mathbf{M}^{\text{eff}} : \mathbf{M}^{\text{eff}}} \left[\begin{array}{l} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right]$$

$$\left[\begin{array}{l} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right] \tau^{\text{vol}} = \alpha \tau_{\text{vol}}^{\text{ve}} \left[\begin{array}{l} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} \right]$$

[7] 初期降伏応力

$$\sigma_Y^0 = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{ve}}} \left\{ \hat{\sigma}_Y^0 \gamma^{\alpha} \exp \left(-\frac{t}{\hat{\tau}^{\alpha}} \right) \right\} + \zeta_c G^{\infty}, \quad \hat{\sigma}_Y^0 = \alpha_Y^0 \left\{ (\theta_{\text{g}} - \theta) + \sqrt{(\theta_{\text{g}} - \theta)^2 + (\beta_Y^0)^2} \right\}$$

[8] せん断降伏応力（等方硬化駆動力）の発展則

$$\dot{r}^{\text{vp}} = h \left(1 - \frac{r^{\text{vp}}}{s_{\text{SS}}} \right) \dot{\gamma}^{\text{vp}}, \quad r^{\text{vp}}|_{t=0 \rightarrow t_{\text{yield}}} = 0$$

$$\dot{s}_{\text{SS}} = (s_{\text{SS}}^{\infty} - g_{\text{SS}}) \dot{\gamma}^{\text{vp}}, \quad s_{\text{SS}}|_{t=0 \rightarrow t_{\text{yield}}} = s_{\text{SS}}^0, \quad s_{\text{SS}}^0 = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{ve}}} \left\{ \hat{s}_{\text{SS}}^0 \gamma^{\alpha} \exp \left(-\frac{t}{\hat{\tau}^{\alpha}} \right) \right\} + \frac{s_{\text{SS}}^{\infty}}{g}, \quad \hat{s}_{\text{SS}}^0 = \alpha_{\text{SS}}^0 \left\{ (\theta_{\text{g}} - \theta) + \sqrt{(\theta_{\text{g}} - \theta)^2 + (\beta_{\text{SS}}^0)^2} \right\}$$

[9] 粘塑性乗数の発展則

$$\dot{\gamma}^{\text{vp}} = \dot{\gamma}_0^{\text{vp}} \exp \left(-\frac{\Delta H}{R\theta} \right) \left[\sinh \left(\frac{Af}{k\theta} \right) \right]^{\frac{1}{m}}$$

図-2.2 提案する粘弾性・粘塑性複合構成則のまとめ

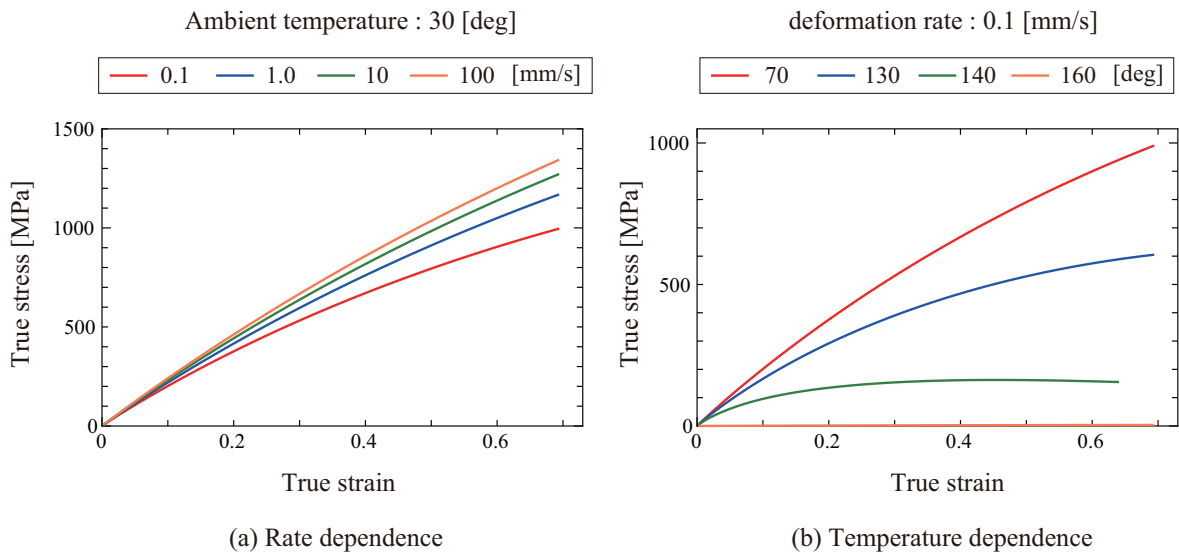


図-2.3 複数の負荷速度水準 (a) もしくは環境温度水準 (b) の条件下で粘弾性モデルのみを考慮した一様引張解析から得られた真応力-真ひずみ関係

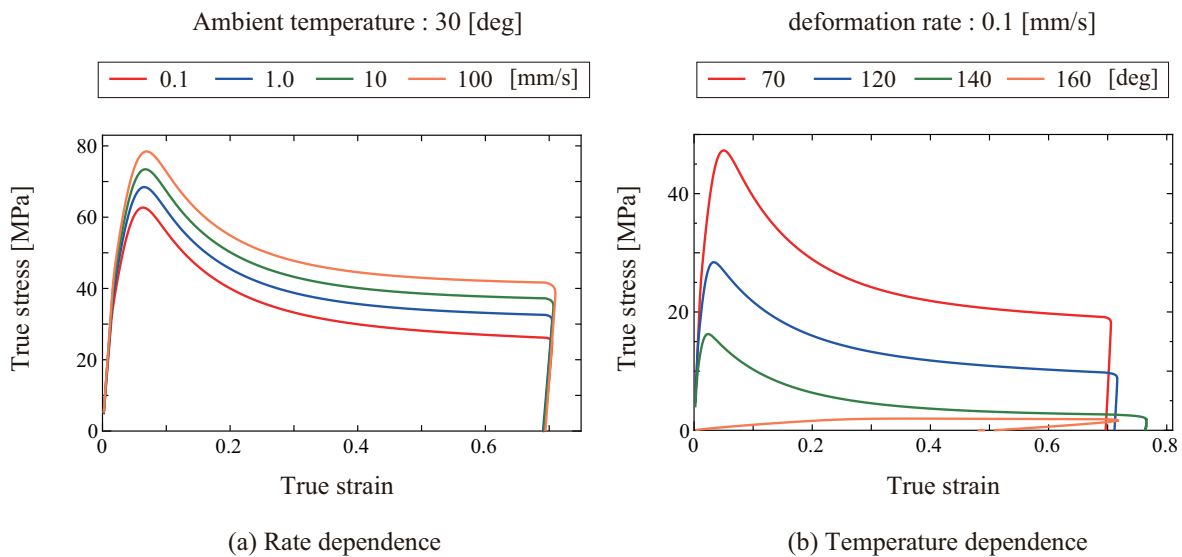


図-2.4 複数の負荷速度水準 (a) もしくは環境温度水準 (b) の条件下で粘弾性モデルに粘塑性等方硬化モデルを考慮した一様引張解析から得られた真応力-真ひずみ関係

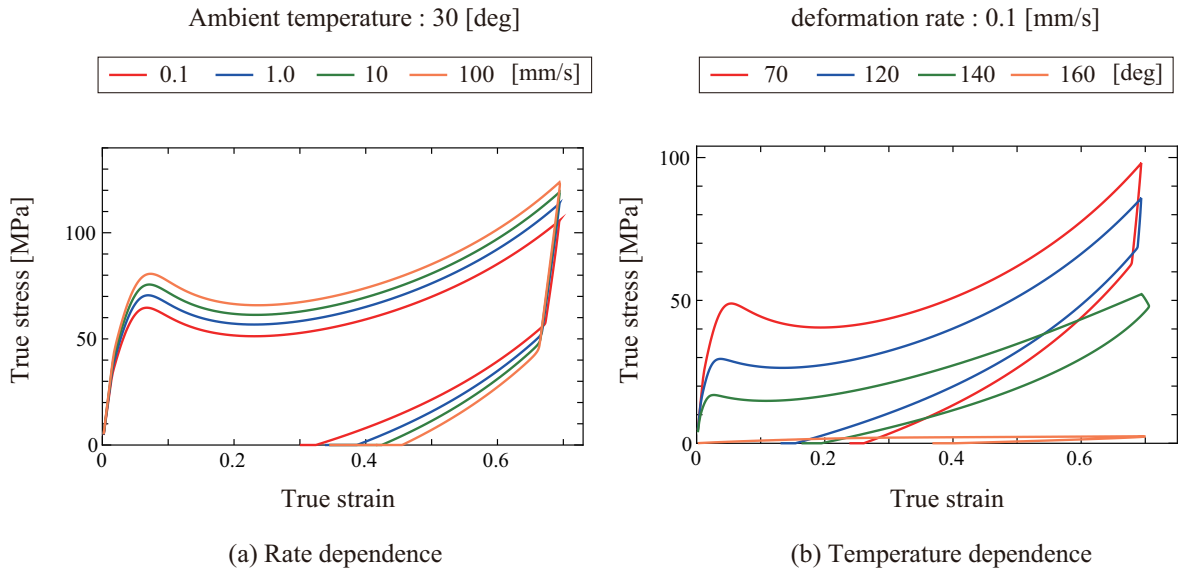
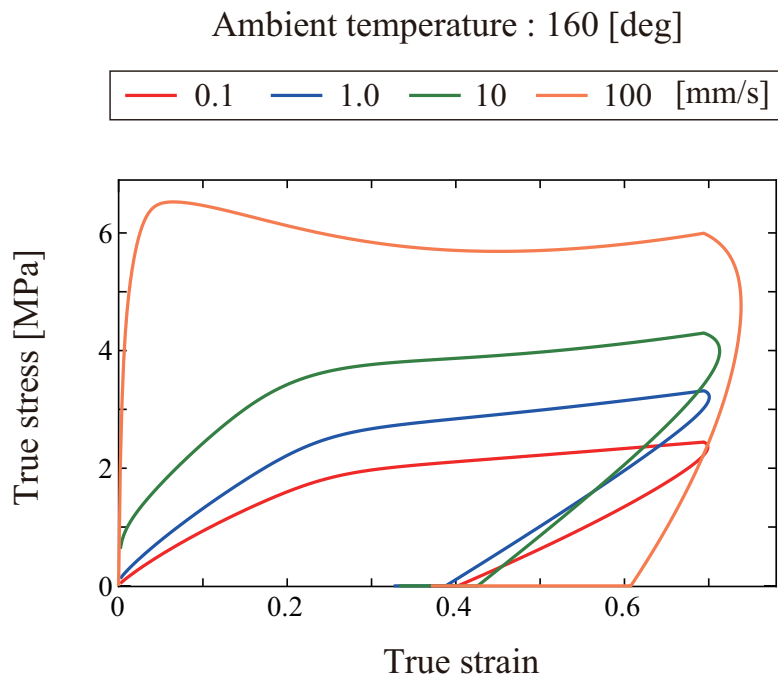


図-2.5 複数の負荷速度水準 (a) もしくは環境温度水準 (b) の条件下で粘弾性モデルに粘塑性等方・移動硬化モデルを考慮した一様引張解析から得られた真応力-真ひずみ関係



(b) Viscoelasticity + Isotropic hardening + Kinematic hardening

図-2.6 環境温度 160[deg] における複数の負荷速度水準の条件下で粘弾性モデルに粘塑性等方・移動硬化モデルを考慮した一様引張解析から得られた真応力-真ひずみ関係

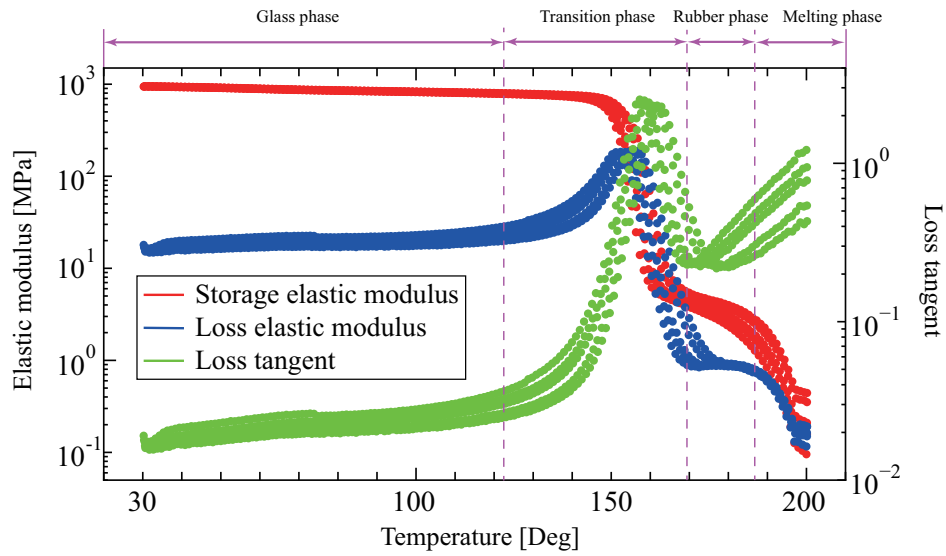


図-2.7 ポリカーボネートに対する動的粘弾性試験の結果¹⁴⁾

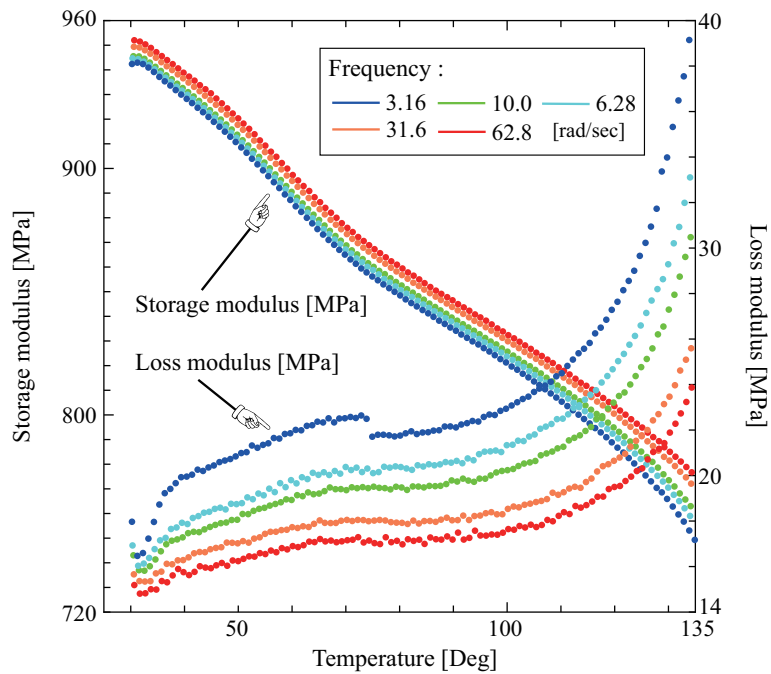


図-2.8 ガラス域における貯蔵弾性率と損失弾性率¹⁴⁾

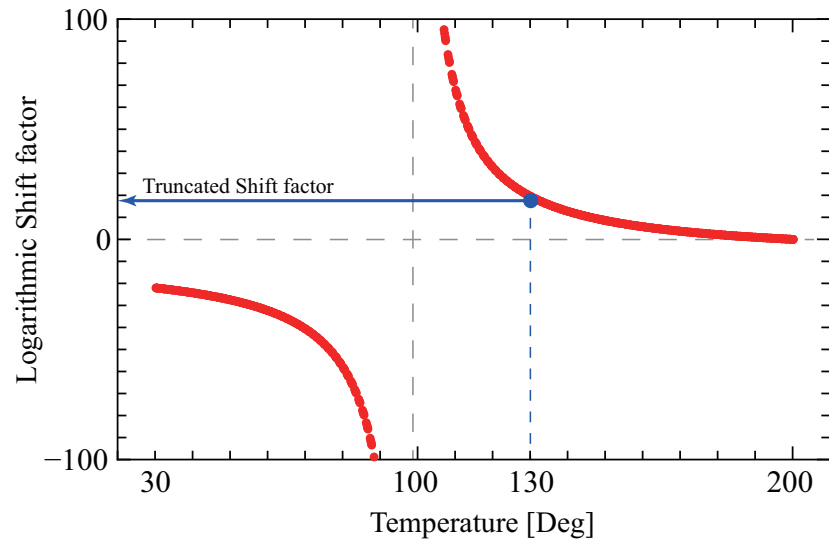


図-2.9 WLF 式のシフトファクター

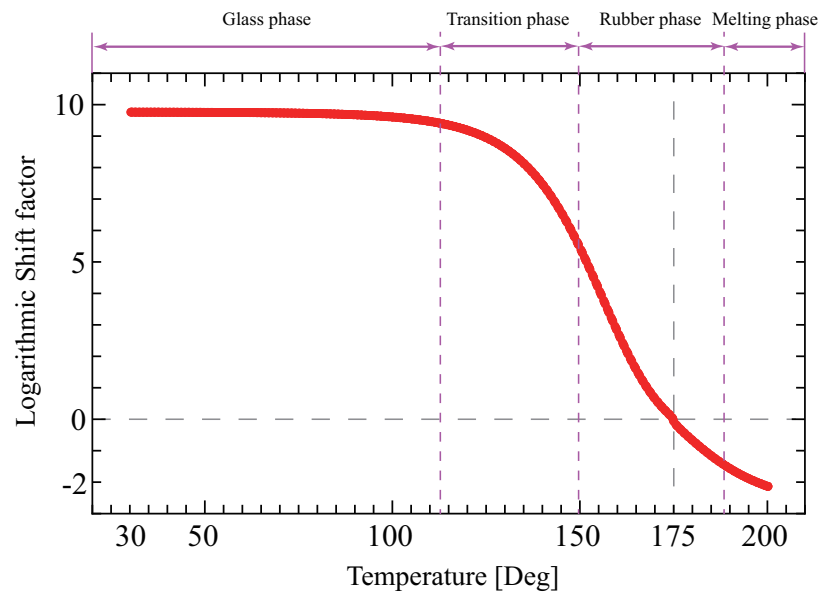


図-2.10 一般化 WLF 式のシフトファクター

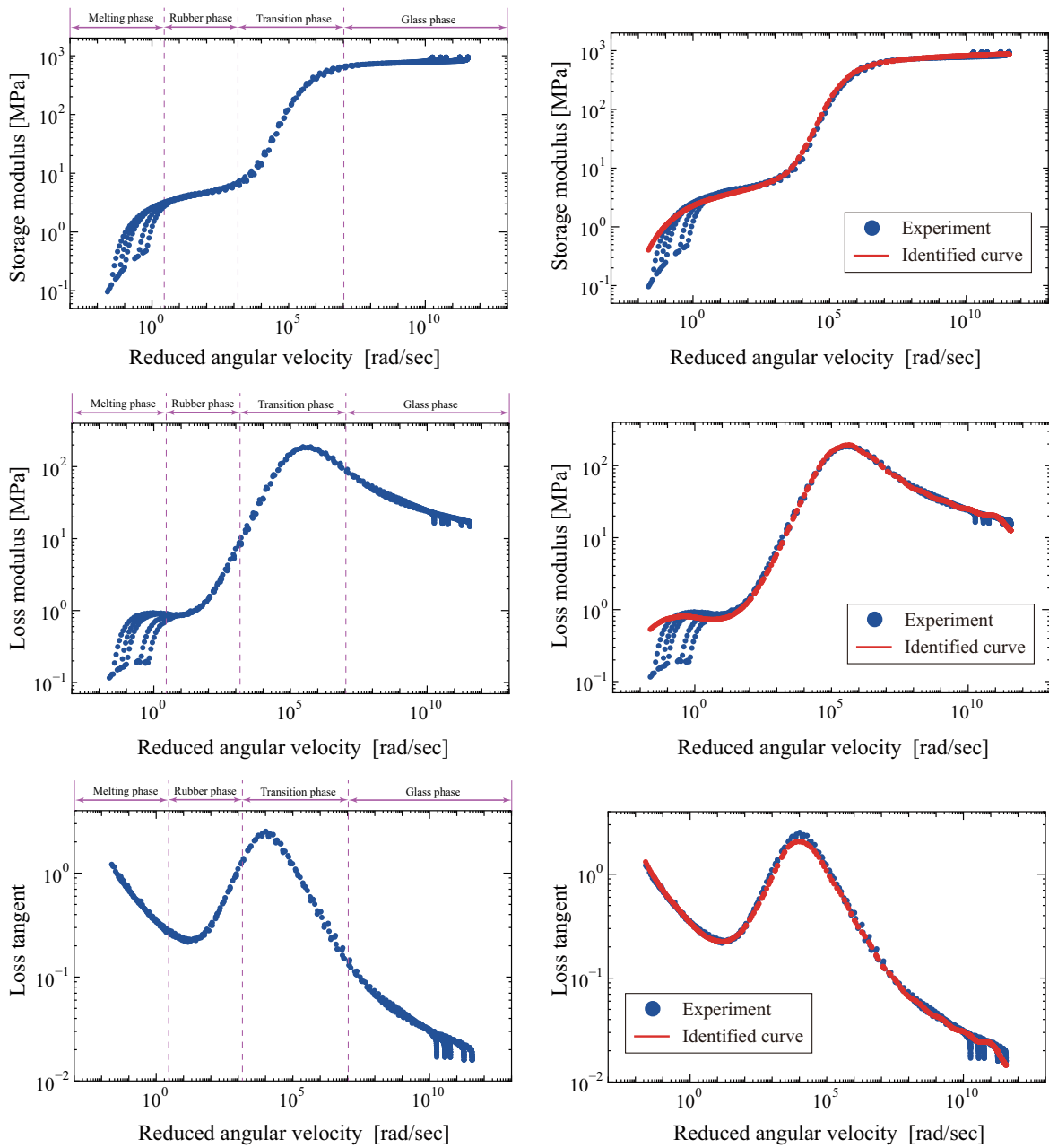


図-2.11 ポリカーボネートの動的粘弾性試験から得られた貯蔵弾性率と損失弾性率および損失正接のマスターカーブとそのカーブフィット結果

表- 2.1 PC のせん断弾性率と緩和時間の同定結果

No.	G^α [MPa]	τ^α [s]	No.	G^α [MPa]	τ^α [s]
1	27.557	3.938×10^{-13}	12	3.5628	2.041×10^{-4}
2	29.761	10.00×10^{-12}	13	1.4268	1.049×10^{-3}
3	30.302	8.804×10^{-11}	14	1.0167	4.179×10^{-3}
4	37.979	6.520×10^{-10}	15	0.6876	2.209×10^{-2}
5	50.404	4.690×10^{-9}	16	0.5843	9.676×10^{-2}
6	77.752	3.712×10^{-8}	17	0.4850	3.451×10^{-1}
7	149.04	3.086×10^{-7}	18	0.5680	$1,056 \times 10^0$
8	265.07	2.106×10^{-6}	19	0.7060	3.235×10^0
9	178.65	1.001×10^{-5}	20	0.6993	1.235×10^1
10	30.000	3.452×10^{-5}	21	0.4727	4.471×10^1
11	7.9185	1.010×10^{-5}	22	0.1013	1.012×10^2

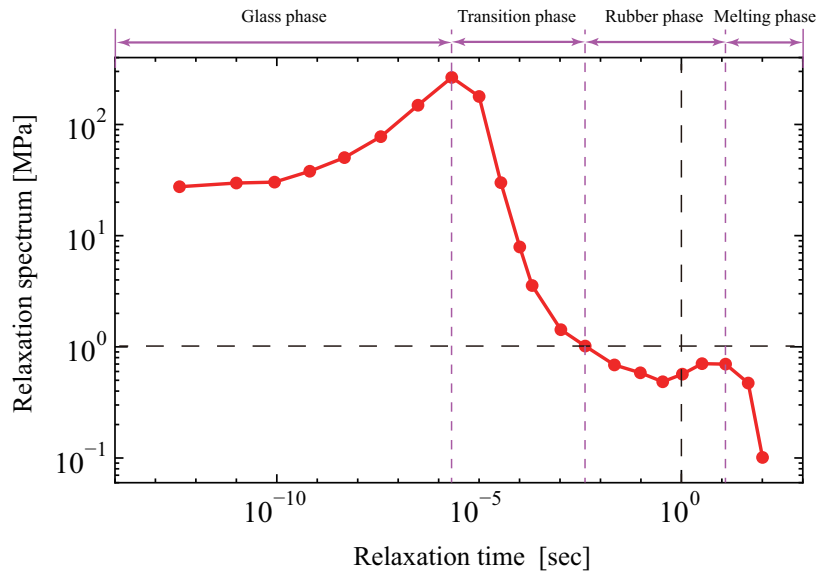


図-2.12 同定結果から算定した緩和スペクトル

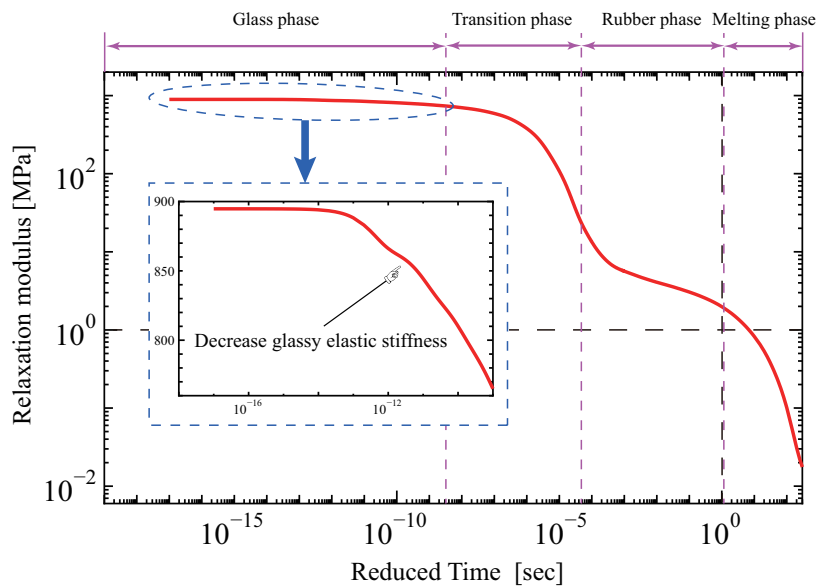


図-2.13 同定結果から算定した緩和弾性率

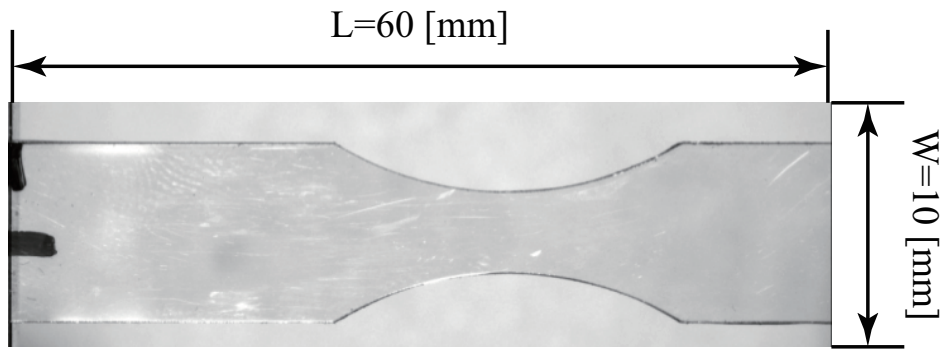


写真-2.1 ポリカーボネートの R-20 型切欠き付き試験片

表- 2.2 負荷・除荷引張試験の制御条件

変位量／変位速度 [mm/min]	0.3	3.0	30.0	300.0
引張	○	○	○	○
1[mm] 負荷・除荷・保持	○	○	○	○
3[mm] 負荷・除荷・保持	○	○	○	実験不能

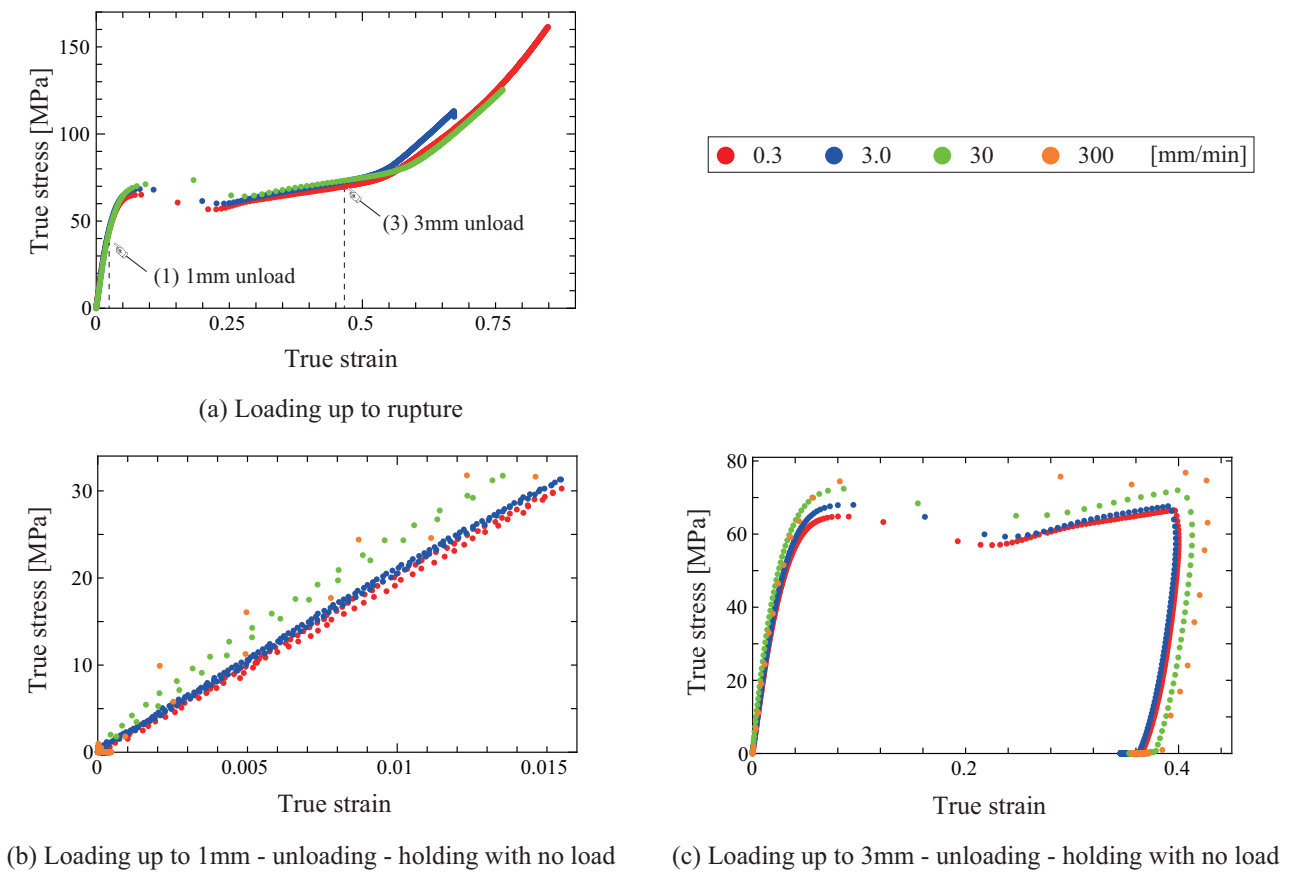


図-2.14 ポリカーボネートに対する負荷・除荷引張試験の実験結果¹⁴⁾

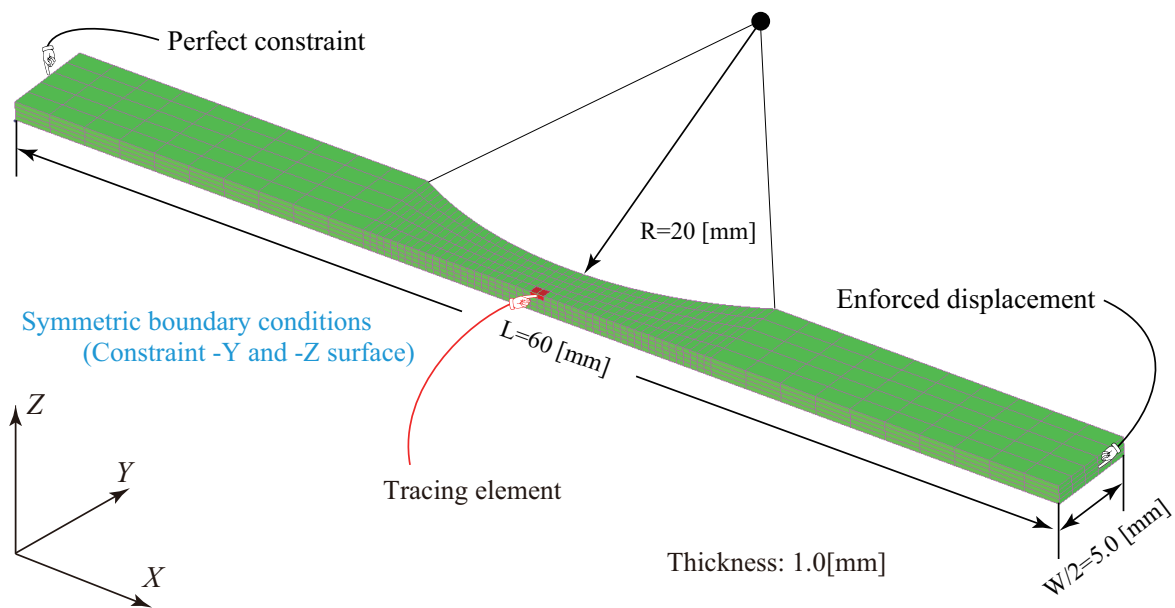


図-2.15 R-20型切欠き付き試験片の有限要素モデルと境界条件

表-2.3 PCの粘塑性材料パラメータの同定結果

Parameter	α_{th}^G [/K]	α_{th}^R [/K]	$\dot{\gamma}_0^{vp}$ [/s]	ΔH [J/mol]	A [mm ³]
Identified result	6.5×10^{-5}	1.2×10^{-4}	1.29×10^{18}	5.77×10^4	4.98×10^{-20}
Parameter	m	α	ζ_c	α_Y^0 [MPa/K]	β_Y^0 [K]
Identified result	0.146	0.01	0.02	1.065×10^{-6}	75.0
Parameter	h [MPa]	g	α_{ss}^0 [MPa/K]	β_{ss}^0 [K]	s_{ss}^∞ [MPa]
Identified result	1350	6.6	1.4497×10^{-6}	75.0	1.75
Parameter	μ_g [MPa]	μ_r [MPa]	β_{back}	W_{back}	J_m
Identified result	18.0	0.4	1.5×10^{-3}	5.8	5.8

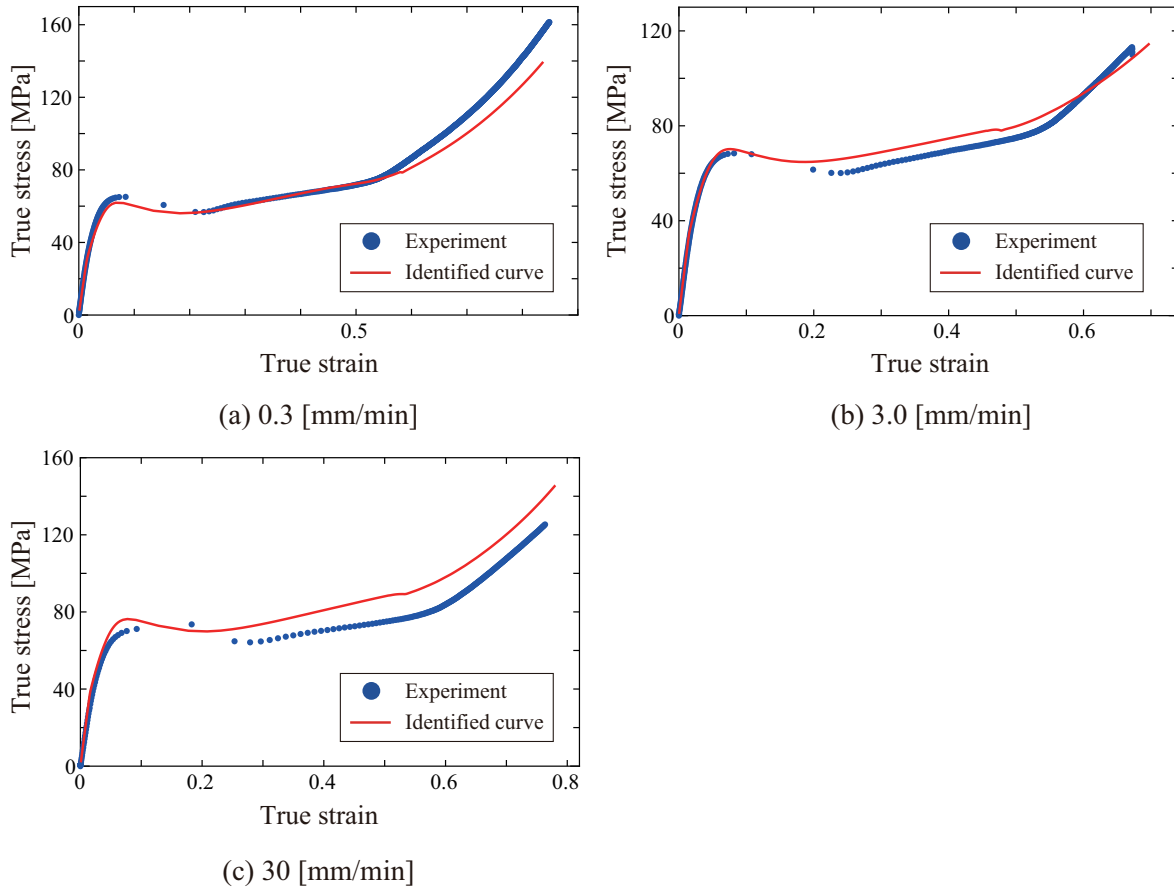


図-2.16 同定したパラメータによる引張試験の再現解析の結果と実験結果の比較（真応力-真ひずみ関係）

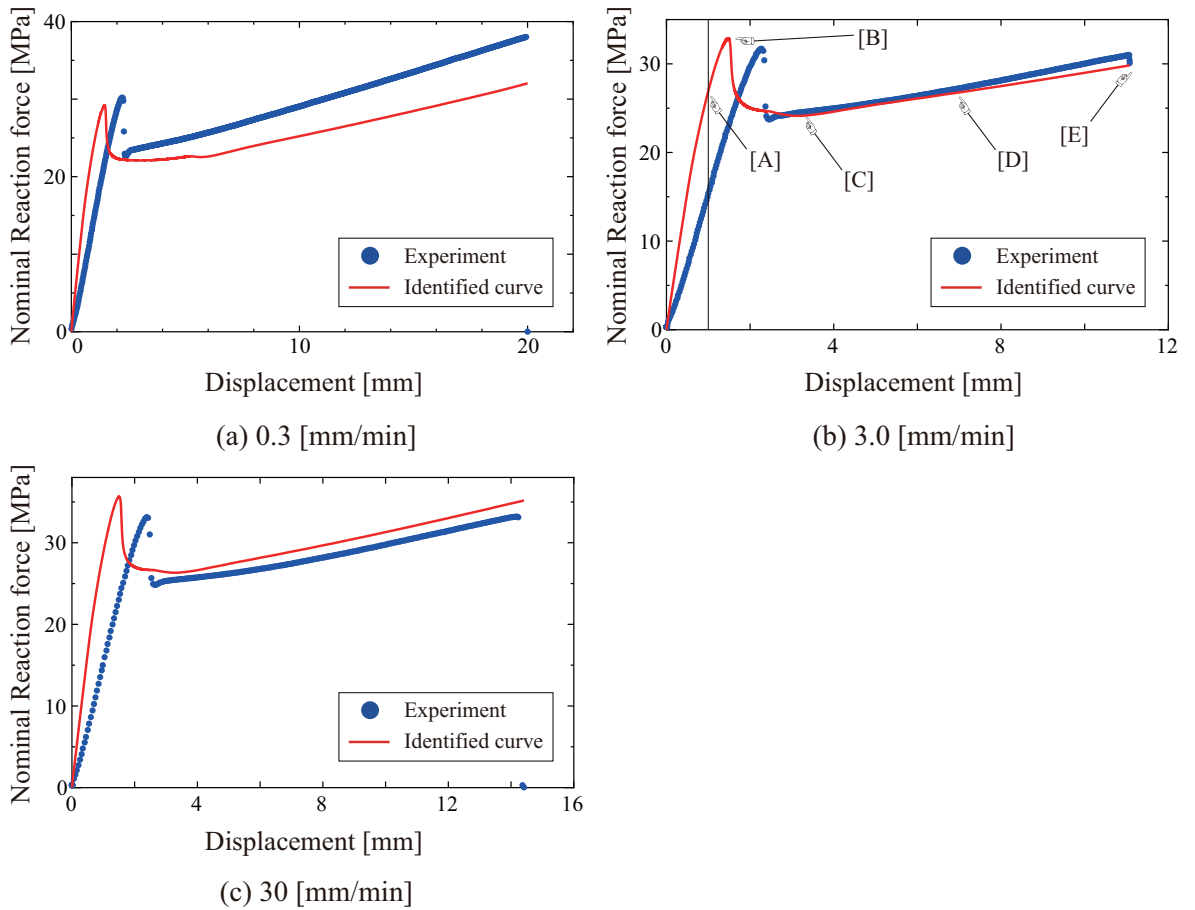


図-2.17 同定したパラメータによる引張試験の再現解析の結果と実験結果の比較（公称応力－変位関係）

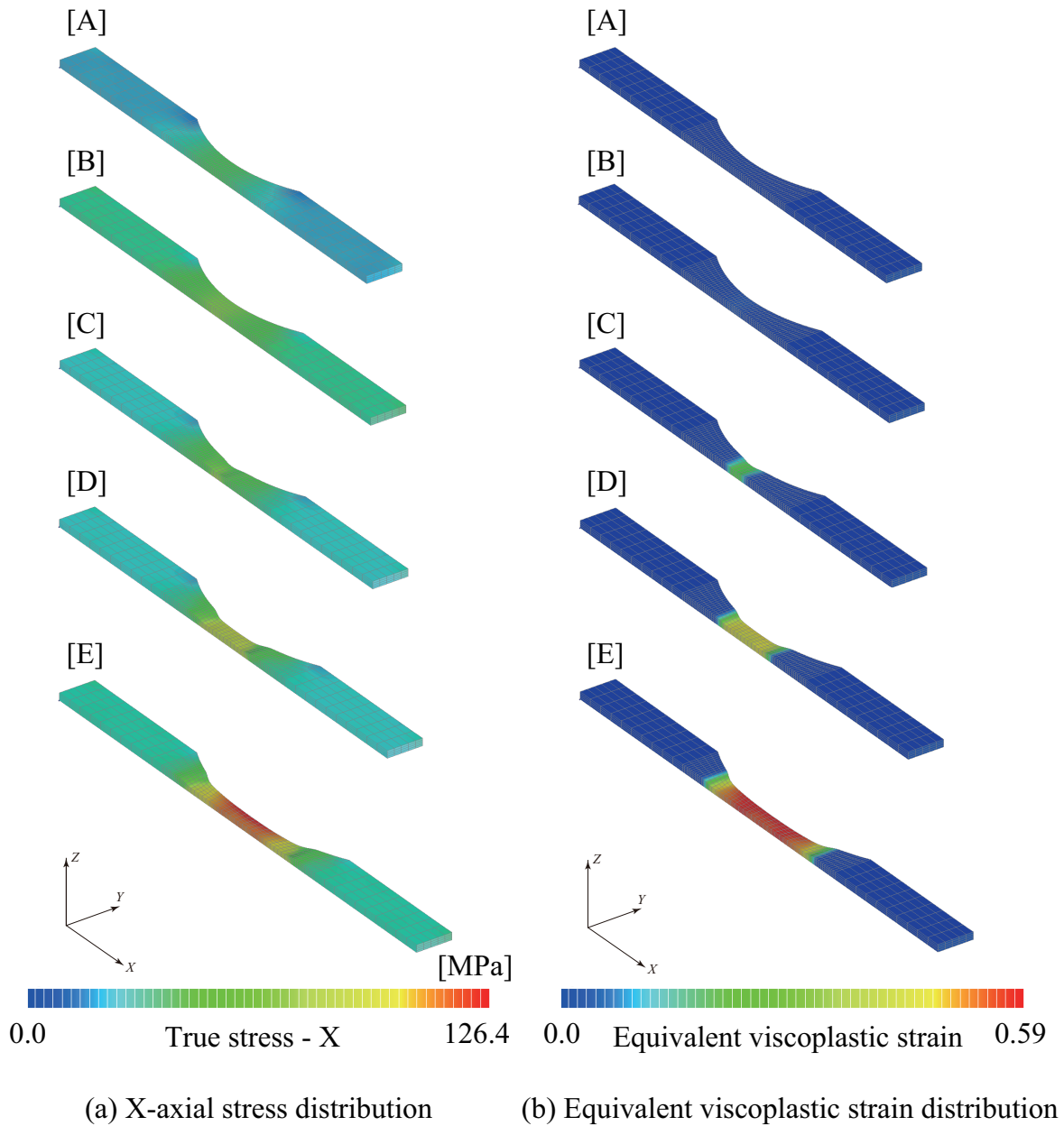


図-2.18 同定したパラメータによる引張試験の再現解析で得られた試験片モデルの変形形状およびX方向真応力と等価粘塑性ひずみ分布の推移（[A]～[E]は図2.13(b)中の各記号に対応）

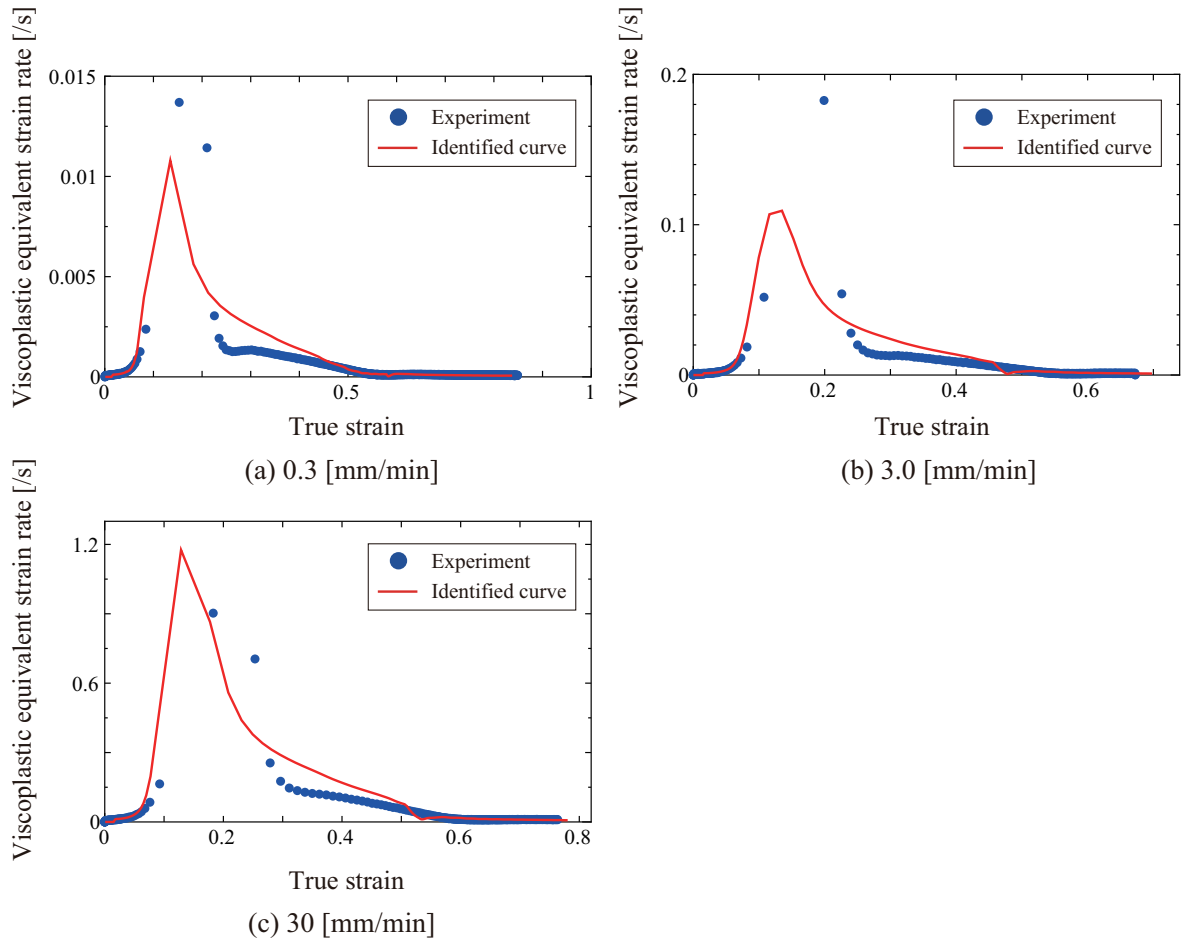


図-2.19 同定したパラメータによる引張試験の再現解析の結果と実験結果の比較（等価粘塑性ひずみ-真ひずみ関係）

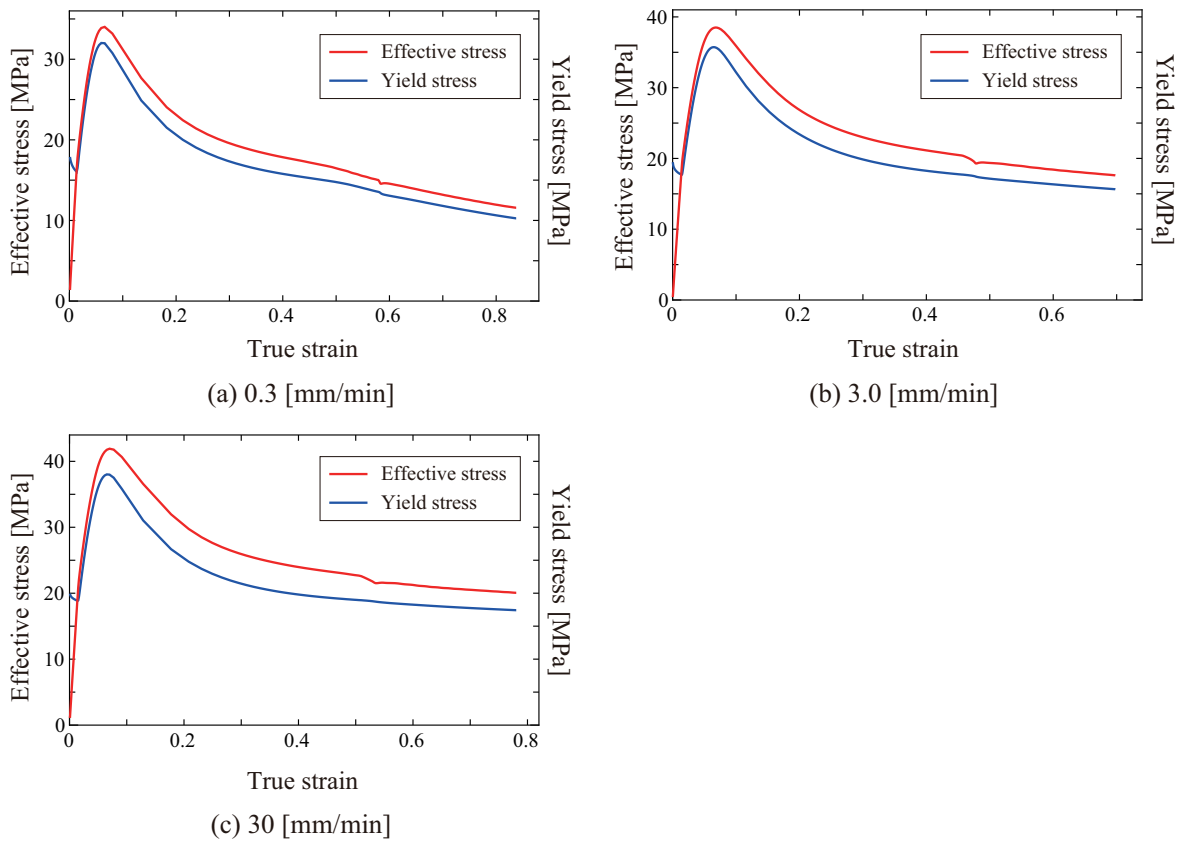


図-2.20 同定したパラメータによる引張試験の再現解析で得られた等価応力と降伏応力の推移

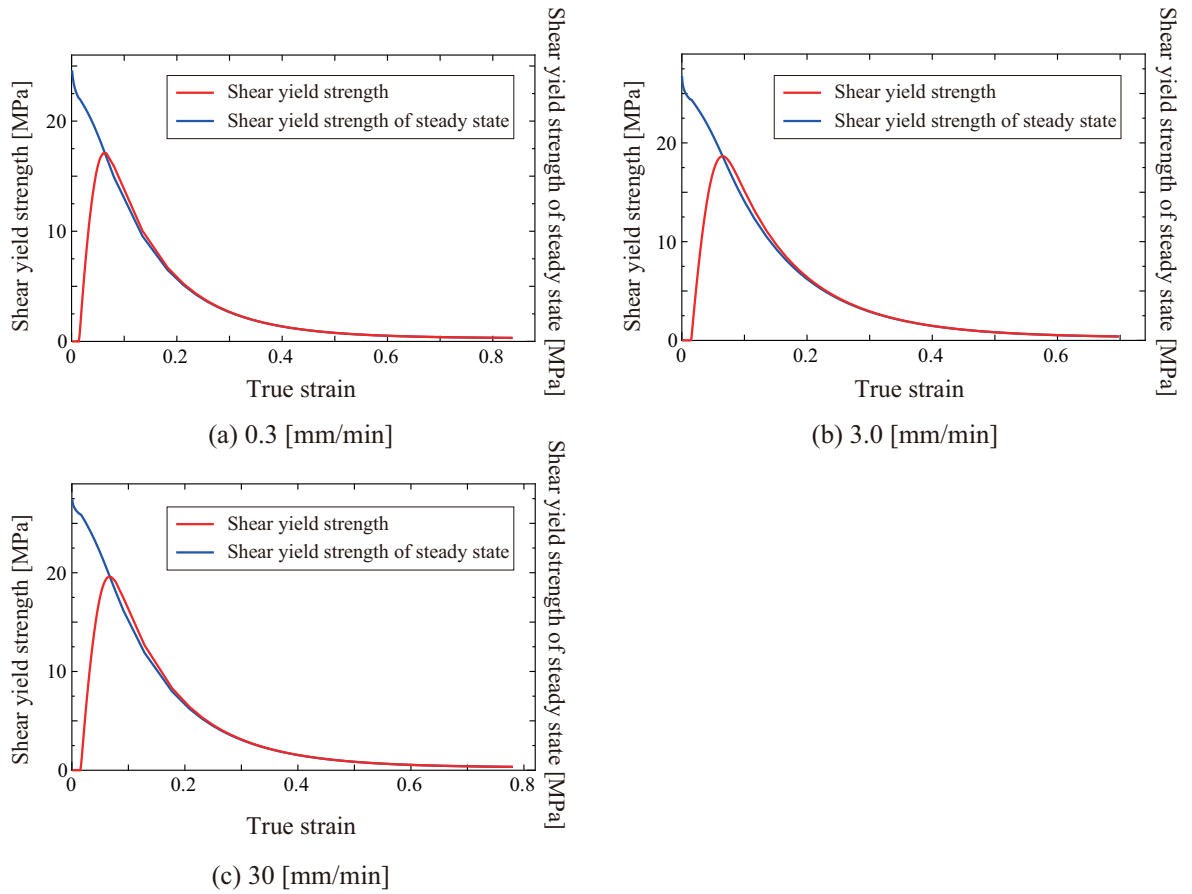


図-2.21 同定したパラメータによる引張試験の再現解析で得られたせん断降伏応力の推移

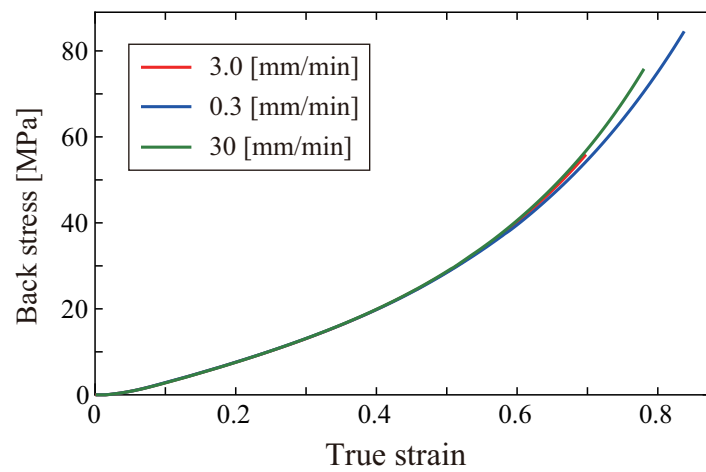


図-2.22 同定したパラメータによる引張試験の再現解析で得られた背応力の推移

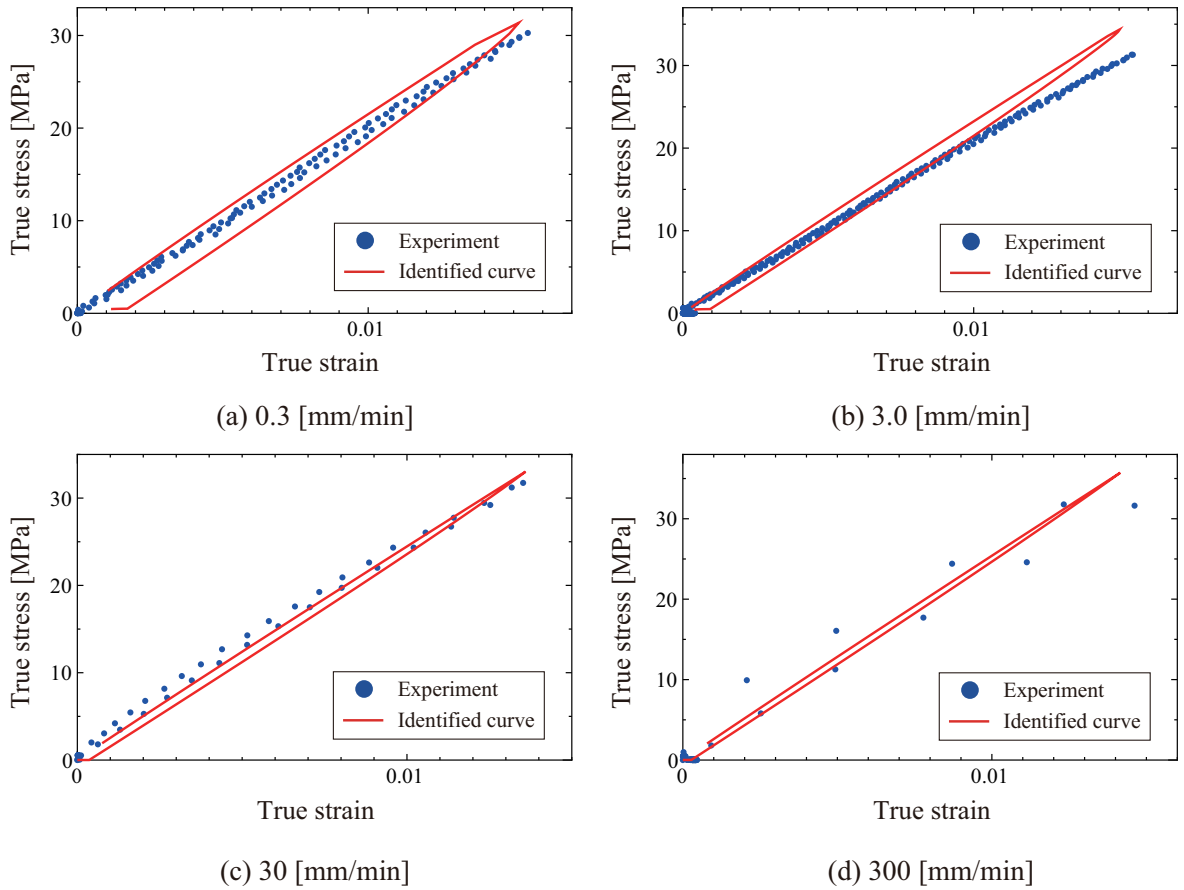


図-2.23 同定したパラメータによる1[mm]除荷試験の再現解析の結果と実験結果の比較（真応力-真ひずみ関係）

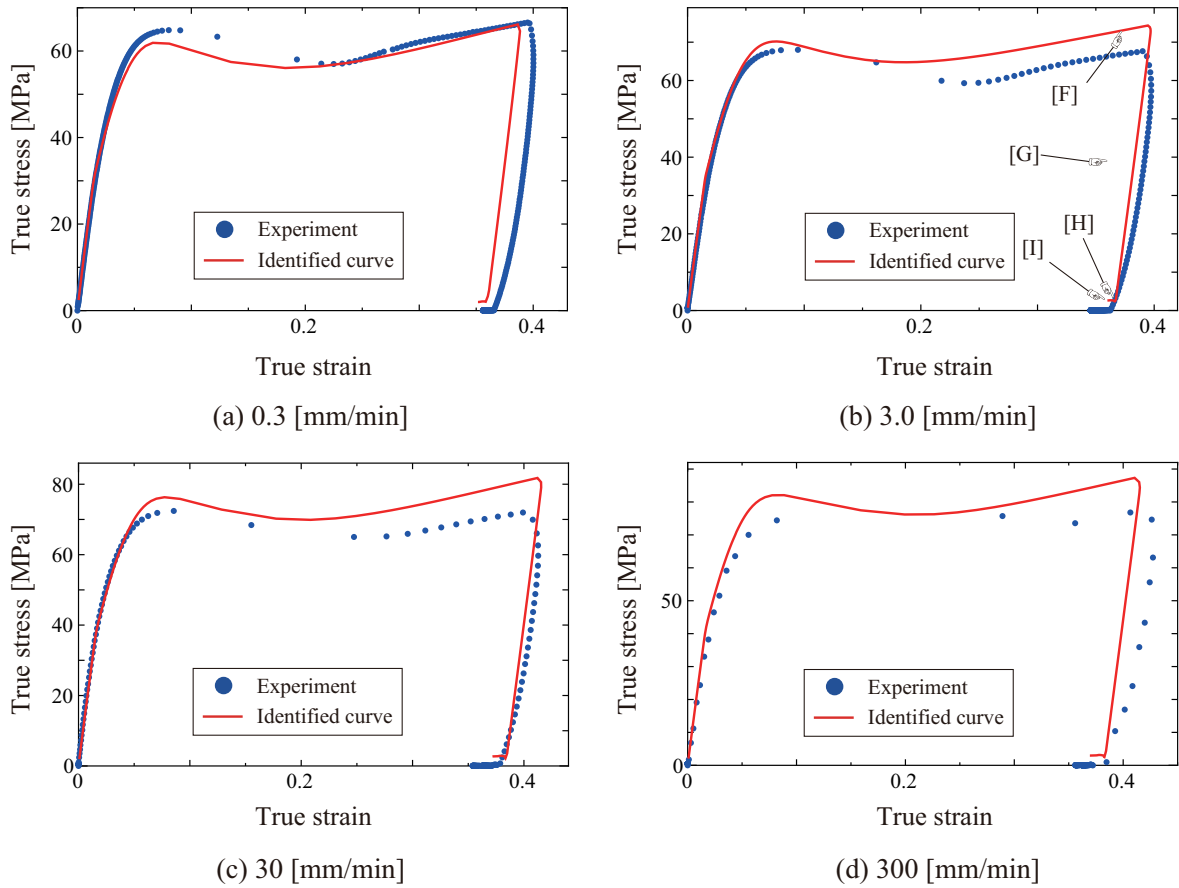
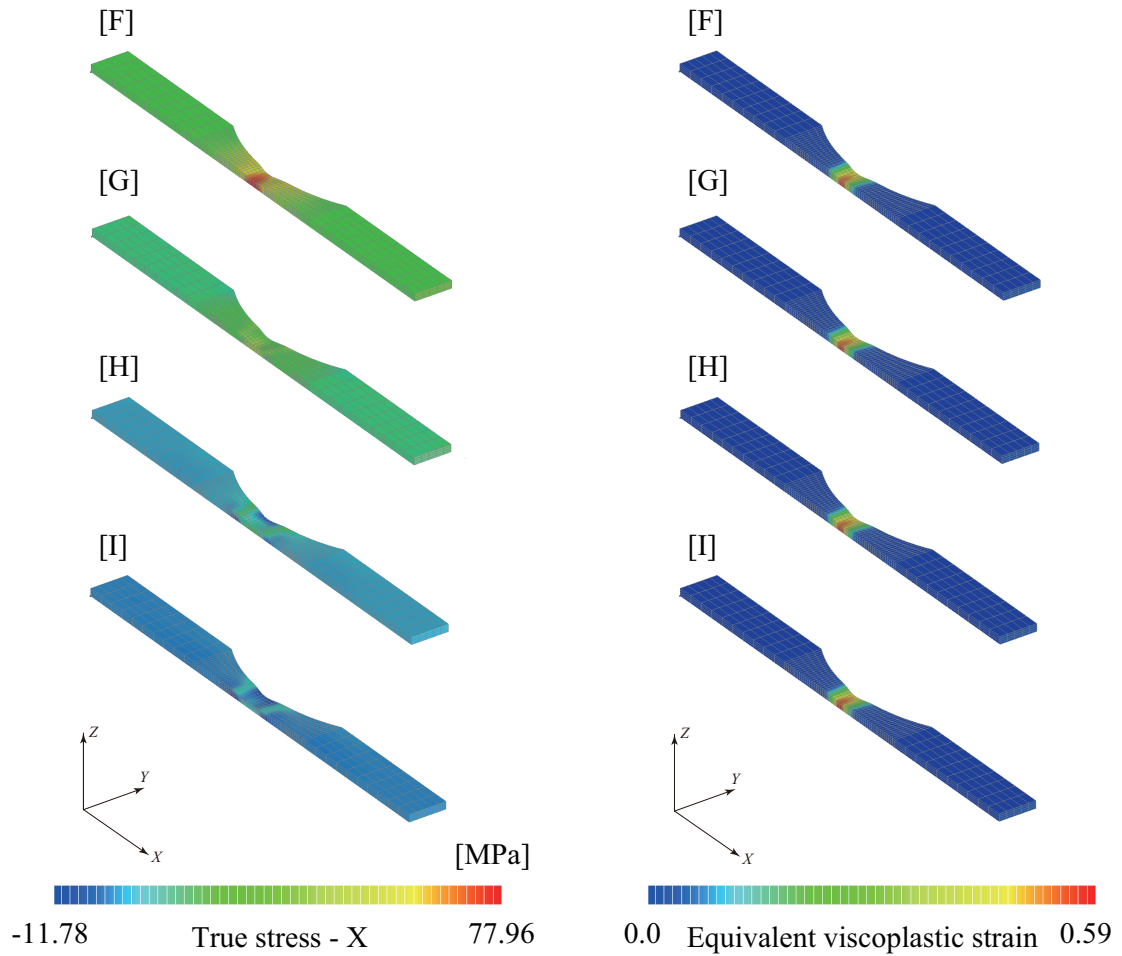


図-2.24 同定したパラメータによる3[mm]除荷試験の再現解析の結果と実験結果の比較（真応力-真ひずみ関係）



(a) X-axial stress distribution

(b) Equivalent viscoplastic strain distribution

図- 2.25 同定したパラメータによる3[mm]除荷試験の再現解析で得られた試験片モデルの変形形状およびX方向真応力と等価粘塑性ひずみ分布の推移（[F]～[I]は図2.20(b)中の各記号に対応）

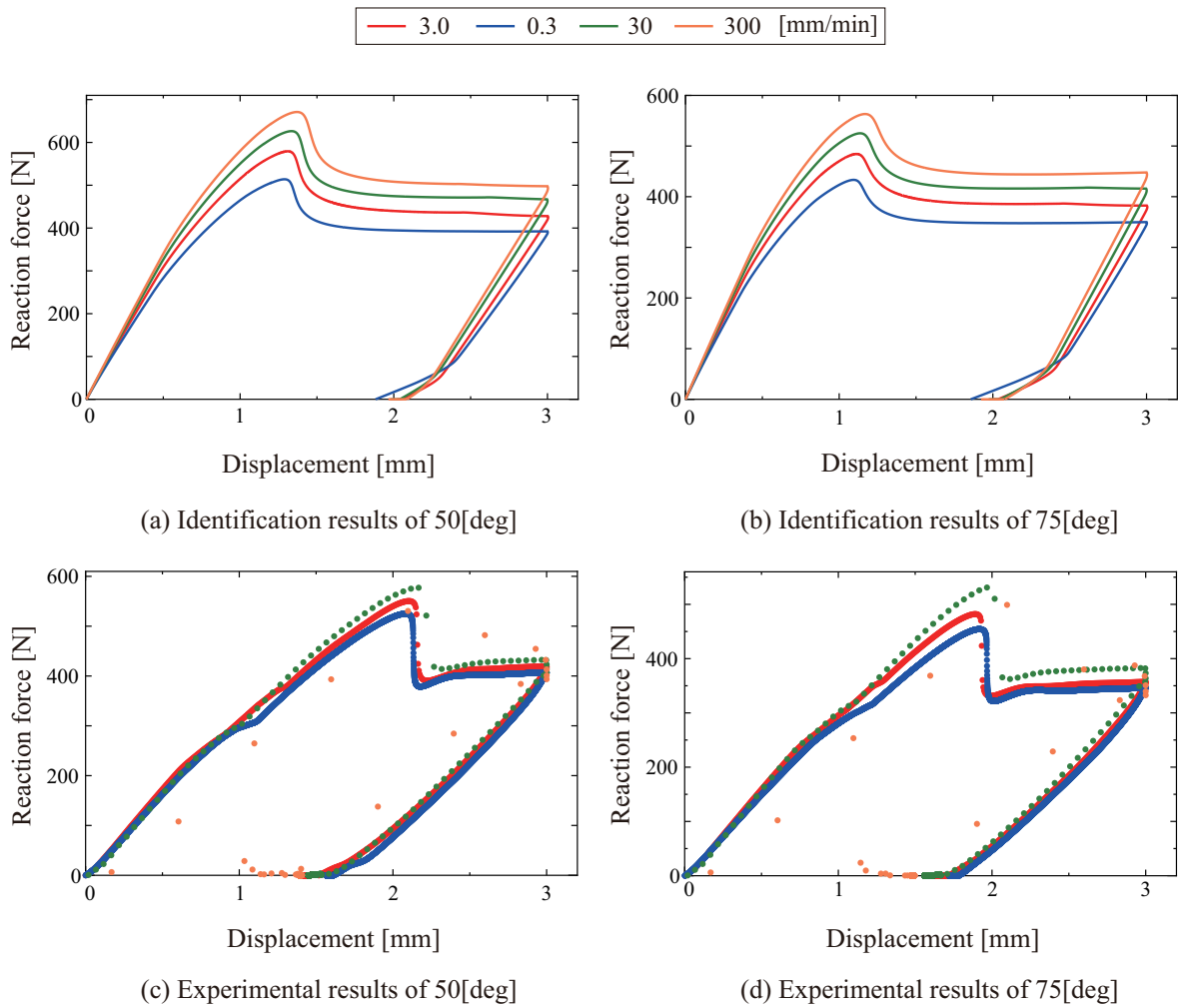


図-2.26 同定したパラメータによる環境温度 50, 75[deg]における負荷速度別の3[mm]除荷試験の再現解析の結果

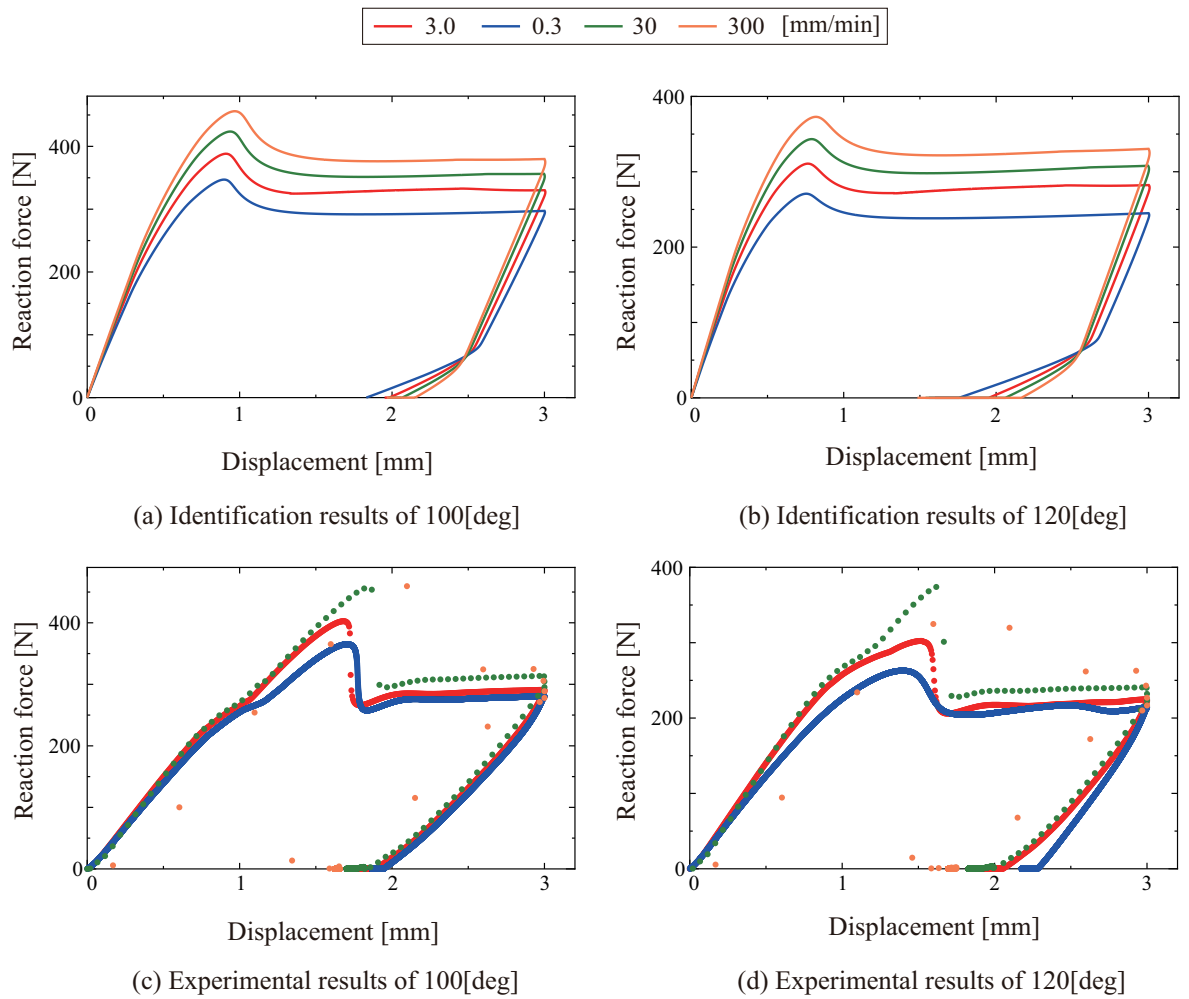


図-2.27 同定したパラメータによる環境温度 100, 120[deg] における負荷速度別の 3[mm] 除荷試験の再現解析の結果

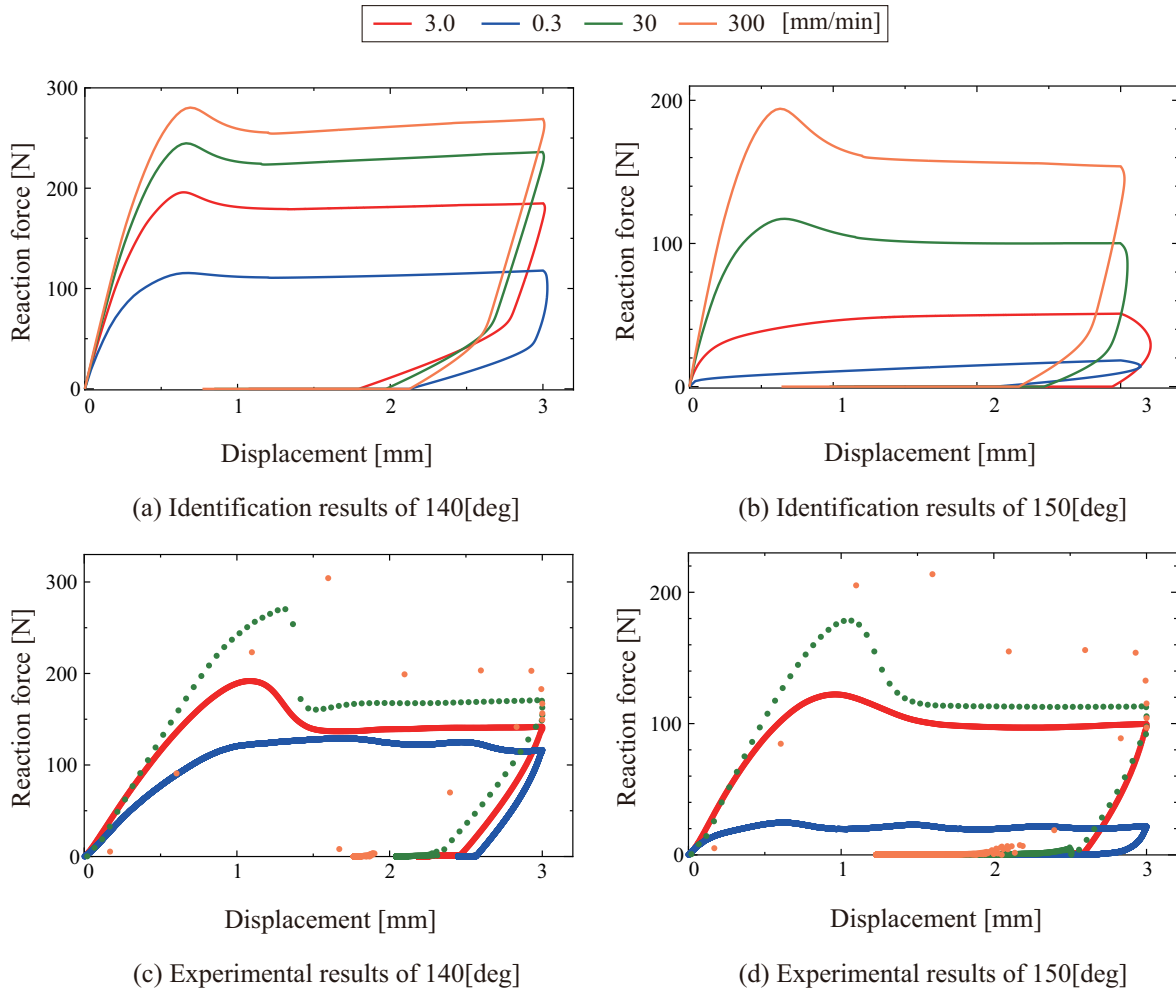


図-2.28 同定したパラメータによる環境温度 140, 150[deg] における負荷速度別の 3[mm] 除荷試験の再現解析の結果

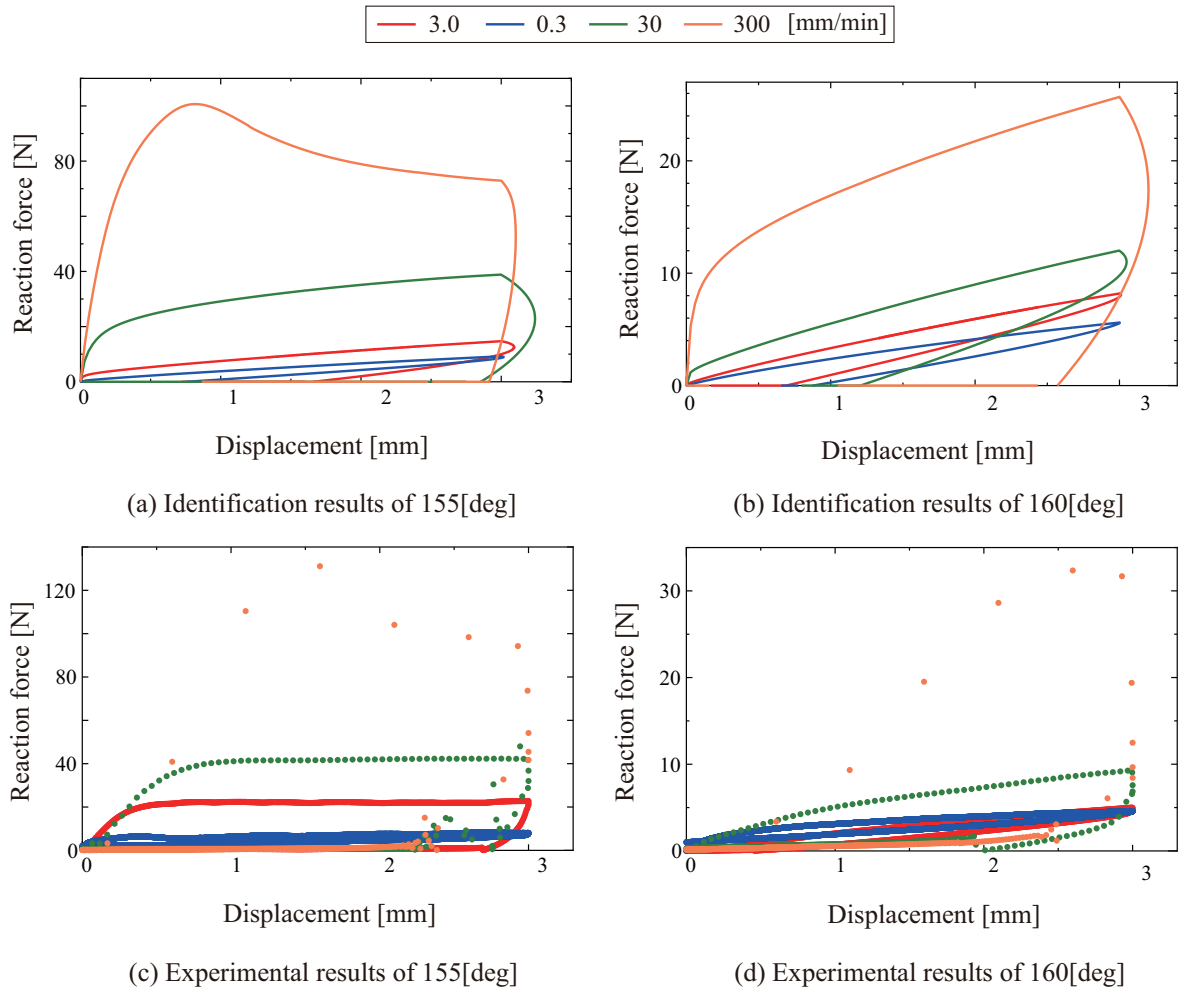


図-2.29 同定したパラメータによる環境温度 155, 160[deg] における負荷速度別の 3[mm] 除荷試験の再現解析の結果

第3章 非晶性熱可塑性樹脂の熱・機械連成解析

3.1 はじめに

第 1.5.2 項で示したように、ほとんどの先行研究では、熱力学的定式化を通して非弾性散逸エネルギーを導出しているのにも関わらず、それに熱変換効率の係数を掛けたもので簡易的に非弾性変形による発熱量をモデル化しているため、自己発熱による温度上昇の定量的な評価をするには至っていない。

このような背景から、本章では、材料構成則が有する本来の発熱性能を厳密に評価するために、第 2 章で示した粘弾性・粘塑性複合構成則を、Yang ら⁸³⁾が提案した熱・機械連成増分ポテンシャル法 (Thermo-mechanical Incremental Variational Formulations) の枠組みに適用し、非晶性熱可塑性樹脂からなる構造物の自己発熱現象を考慮した温度と変形の強連成解析手法を提案する。具体的には、熱・機械連成増分ポテンシャル法において必要となる粘弾性と粘塑性の散逸ポテンシャルを非弾性散逸エネルギーの Legendre-Fenchel 変換を起点としたポテンシャル論の枠組みで定式化を行い、最終的には各熱力学的示量変数の積分形として導出する。特に、粘塑性散逸エネルギーから散逸ポテンシャルを導く際には、せん断降伏強さの時間発展則が導かれるような、粘塑性ポテンシャルを定義し、粘塑性正規化の手順にしたがって散逸ポテンシャルの具体形を導く。なお、先行研究における熱・機械連成増分ポテンシャル法の適用例題はそのすべてが物質点断熱を仮定しており、本研究で初めて空間的な熱伝導の再現性能を考察する。

第3.2節では、Yangら⁸³⁾が提案した熱・機械連成増分ポテンシャル法の概要を述べる。第3.3節では、第2章で示した粘弾性・粘塑性複合構成則に対して、粘弾性と粘塑性の散逸ポテンシャルを非弾性散逸エネルギーの Legendre-Fenchel 変換を起点としたポテンシャル論の枠組みで定式化を行い、各熱力学的示量変数の積分形として導出する。第3.4節では、本研究で提案する粘弾性・粘塑性複合構成則に対応した熱・機械連成増分ポテンシャルモデルに対して、解くべき未知量に対する停留条件からそれぞれの支配方程式を導き、本研究で提案する熱・機械連成解析手法の特徴を考察する。なお、熱・機械連成解析において必要となる、比熱に関する自由エネルギーやエントロピーも示す。最後に第3.5節ではまず、本研究で独自に実装した熱・機械連成増分ポテンシャル法の検証例題として、StainierとOrtiz⁸⁴⁾が行った物質点断熱状態における α チタニウム合金の引張解析を実施する。そして、ポリカーボネート(PC)の引張試験を模擬した熱・機械連成解析を実施し、引張試験中に試験片表面でDIC計測された温度の時刻歴変化と比較することで、本研究で提案する熱・機械連成解析手法の再現性能を検証する。加えて、同様の条件で力学応答のみの解析を実施し、発熱による温度増加が材料挙動に与える影響に関しても考察する。

3.2 熱・機械連成増分ポテンシャル法

3.2.1 熱・機械連成増分ポテンシャル問題の定式化

熱・機械連成増分ポテンシャル法は、図-3.1に示す連続体 B に対する時刻 t_0 から t_1 の全エネルギーの変化量を次式で定義することから始まる。

$$\Psi_{t_0 \rightarrow t_1} = \inf_{\text{path}} \int_{t_0}^{t_1} \phi(\dot{\varphi}, T, \theta, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}) dt \quad (3.1)$$

ここで、 $\bullet_{t_0 \rightarrow t_1}$ は \bullet の時刻 t_0 から t_1 までにおける変化量として定義する。さらに、 $\dot{\varphi} = \frac{D\varphi}{Dt}$ 、 T はそれぞれ物質点 \mathbf{X} の運動に関する速度と外部温度（熱力学的非平衡温度）で

あり，次式で示す Dirichlet 条件が課される．

$$\dot{\varphi} = \dot{\varphi}_D \quad \text{on} \quad \partial_{MD}B_0 = \partial B_0 \setminus \partial_{MN}B_0 \quad (3.2)$$

$$T = T_D \quad \text{on} \quad \partial_{HD}B_0 = \partial B_0 \setminus (\partial_{HN}B_0 \cup \partial_{HR}B_0) \quad (3.3)$$

また， θ ， $\dot{\eta}$ ， $\dot{\mathbf{Z}}$ はそれぞれ熱力学的平衡温度，エントロピー密度速度，内部変数速度である．ここで，熱力学的平衡温度は $\theta \equiv \nabla_{\dot{\eta}} e$ によってのみ定義される．なお，2つの温度場 T ， θ の関係については，熱・機械連成増分ポテンシャル法の熱力学的意味と関連付けて後述する．さらに，式 (3.1) 中の \inf_{path} は時刻 t_0 から t_1 の時間増分間で，全エネルギーの変化量が最小となり，常に安定な経路をたどることを規定している．このとき，大域的ポテンシャル速度 ϕ は次式で定義されるような，この連続体における単位時間あたりの全エネルギー収支を表す．

$$\phi(\dot{\varphi}, T, \theta, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}) = \int_{B_0} \Upsilon(\dot{\mathbf{F}}, T, \theta, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}) dV - G(\dot{\varphi}, T) \quad (3.4)$$

ここで，内部ポテンシャル速度 $\Upsilon(\dot{\mathbf{F}}, T, \theta, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}})$ はこの連続体内の物質点 \mathbf{X} における単位時間当たりの内部ポテンシャル変化であり，次式で定義した．

$$\Upsilon(\dot{\mathbf{F}}, T, \theta, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}) \equiv \rho_0 \dot{e}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}) - \rho_0 T \dot{\eta} + \varphi\{f(T, \theta)\dot{\mathbf{Z}}, \theta\} - \chi(\mathbf{G}) \quad (3.5)$$

ここで， ρ_0 は質量密度， \dot{e} は内部エネルギー密度速度である．また， φ と χ は Clausius-Duhem の不等式から得られる散逸エネルギーに Legendre-Fenchel 変換を施すことによって得られる双対散逸ポテンシャルと Fourier ポテンシャル¹⁰⁷⁾ である．特に，塑性変形に関する双対散逸ポテンシャル $\varphi^p \geq 0$ は \mathbf{Z} と共役な熱力学的内部駆動力を \mathbf{Y} としたとき，次式の最大塑性散逸の原理によって得られる支持関数となる．

$$\varphi^p(\mathbf{Z}) = \sup_{\mathbf{Y}} [\mathbf{Y} : \mathbf{Z} - \hat{\varphi}^p(\mathbf{Y})] \quad (3.6)$$

ここで， $\hat{\varphi}^p(\mathbf{Y}) \geq 0$ は \mathbf{Y} が許容応力の集合に属しているときのみ 0 となる標示関数である．

一方、 $G(\dot{\phi}, T)$ は次式で示す外部ポテンシャル速度であり、単位時間当たりの外的操作によって蓄えられる連続体内のエネルギー変化速度である。

$$G(\dot{\phi}, T) = G^{\text{Mech}}(\dot{\phi}) + G^{\text{Heat}}(T)$$

$$G^{\text{Mech}}(\dot{\phi}) = \int_{B_0} \rho_0 \mathbf{b} \cdot \dot{\phi} dV + \int_{\partial_{\text{MN}} B_0} \mathbf{T}_N \cdot \dot{\phi} dA \quad (3.7)$$

$$G^{\text{Heat}}(T) = \int_{\partial_{\text{HN}} B_0} \mathbf{Q}_N \log\left(\frac{T}{T_0}\right) dA + \int_{\partial_{\text{HR}} B_0} \beta \left[T - T_R \log\left(\frac{T}{T_0}\right) \right] dA - \int_{B_0} \rho_0 h \log\left(\frac{T}{T_0}\right) dV \quad (3.8)$$

ここで、 β , T_R , h はそれぞれ熱伝達係数、雰囲気温度、単位時間単位体積あたりの外部熱供給である。なお、連続体に課される Neumann 条件は、**図-3.1** に示すように設定している。

ところで、式 (3.5) 中に導入した $f(T, \theta)$ は積分因子 (Integration factor) と呼ばれ、大域的ポテンシャル速度 ϕ の変分構造を保証する第二変分の対称条件から得られる微分方程式を解くことで次式のように唯一に決定される変数である。

$$f(T, \theta) = \frac{T}{\theta} \quad (3.9)$$

この変数の導入によって、この増分間での非弾性変形による散逸エネルギーから熱エネルギーへの変換効率が算定でき、弾塑性問題については金属材料を対象とした Taylor-Quinney 因子¹⁰⁸⁾ などの実験的に求められた熱変換効率を高精度に予測できることが示されている⁸⁴⁾。また、非定常熱伝導と非弾性変形に起因する2つの熱力学的非平衡過程に対して、現象の進展時間を整合させるために導入された時間積分因子として解釈することができる。

増分ポテンシャル法において求めるべき状態変数は、次式で示すような $\Psi_{t_0 \rightarrow t_1}$ の停留点問題の解 $(\dot{\phi}^{\text{eff}}, T^{\text{eff}}, \dot{\eta}^{\text{eff}}, \dot{\mathbf{Z}}^{\text{eff}})_{t_0 \rightarrow t_1}$ である。

$$(\dot{\phi}^{\text{eff}}, T^{\text{eff}}, \dot{\eta}^{\text{eff}}, \dot{\mathbf{Z}}^{\text{eff}})_{t_0 \rightarrow t_1} = \arg \left[\inf_{\dot{\phi}, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}} \sup_T (\Psi_{t_0 \rightarrow t_1}) \right] \quad (3.10)$$

本停留点問題は、図-3.2 に示すように $(\dot{\varphi}, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}})$ 軸に対して凸、 T に対して凹な増分ポテンシャルに対する鞍点問題である。また、 $(\dot{\varphi}, T)$ と $(\dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}})$ は、それぞれ大域の変数と局所の変数であり、後者は Υ にのみ依存する。したがって、この停留点問題は次式のように大域形と局所形に分離可能である。

$$(\dot{\varphi}^{\text{eff}}, T^{\text{eff}})_{t_0 \rightarrow t_1} = \arg \left[\inf_{\dot{\varphi}} \sup_T \left\{ \Psi_{t_0 \rightarrow t_1}(\dot{\varphi}, T, \dot{\eta}^{\text{eff}}, \dot{\mathbf{Z}}^{\text{eff}}) \right\} \right] \quad (3.11)$$

$$(\dot{\eta}^{\text{eff}}, \dot{\mathbf{Z}}^{\text{eff}})_{t_0 \rightarrow t_1} = \arg \left[\inf_{\dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}} \left\{ \Psi_{t_0 \rightarrow t_1}(\dot{\varphi}^{\text{fix}}, T^{\text{fix}}, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}) \right\} \right] \quad \forall \mathbf{X} \in B_0 \quad (3.12)$$

3.2.2 増分ポテンシャル問題の Euler-Lagrange 方程式

$\Psi_{t_0 \rightarrow t_1}$ の第一変分から得られる物質点 \mathbf{X} における局所的な支配方程式を示す。まず、 $\Psi_{t_0 \rightarrow t_1}$ に式 (3.5) を代入し、内部エネルギー速度 \dot{e} の時間加積性を意味する熱力学第一法則を考慮すると、次式が得られる。

$$\begin{aligned} \Psi_{t_0 \rightarrow t_1} &= \inf_{\text{path}} \int_{t_0}^{t_1} \left[\int_{B_0} (\rho_0 \dot{e} - \rho_0 T \dot{\eta} + \varphi - \chi) dV - G(\dot{\varphi}, T) \right] dt \\ &= \int_{B_0} \rho_0 (e_1 - e_0) dV + \inf_{\text{path}} \int_{t_0}^{t_1} \left[\int_{B_0} (-\rho_0 T \dot{\eta} + \varphi - \chi) dV - G(\dot{\varphi}, T) \right] dt \end{aligned} \quad (3.13)$$

ここで、 $e_0 = e(t_0)$ 、 $e_1 = e(t_1)$ である。また、この第2式の第一項の外部温度 T に対する依存性が無いことを考慮すると、外部温度 T に関する $\Psi_{t_0 \rightarrow t_1}$ の第一変分は、時刻 t_0 から t_1 を定義域とする時間 $t \in [t_0, t_1]$ に対して次の局所形の支配方程式 (Euler-Lagrange 方程式) が得られる。

$$\rho_0 \dot{\eta} = \frac{1}{\theta} \nabla_{\mathbf{Z}} \varphi : \dot{\mathbf{Z}} - \frac{1}{T} \nabla_{\mathbf{X}} \cdot \mathbf{Q} + \frac{1}{T} \rho_0 h \quad \text{in } B_0 \quad (3.14)$$

$$\mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} = Q_N \quad \text{on } \partial_{\text{HN}} B_0 \quad (3.15)$$

$$\mathbf{Q} \cdot \mathbf{N} = \beta(T - T_R) \quad \text{on } \partial_{\text{HR}} B_0 \quad (3.16)$$

このことは、連続体内の非定常熱伝導は常に熱力学的非平衡状態であり、時間連続的に進展する現象であると解釈できる。

次に、状態変数 $(\varphi, \eta, \dot{\mathbf{Z}})$ に関する第一変分から時間間隔 $t = [t_0, t_1]$ における時間離散的な方程式と時間 $t \in [t_0, t_1]$ における時間連続的な方程式の両方が次式のように得られる。

- 時間間隔 $t = [t_0, t_1]$ における時間離散的な方程式（熱力学的平衡状態）

$$\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{P}_1 + \rho_0 \mathbf{b}_1 = \mathbf{0} \quad \text{in } B_0 \quad (3.17)$$

$$\mathbf{P}_1 \cdot \mathbf{N} - \mathbf{T}_{N1} = \mathbf{0} \quad \text{on } \partial_{MN} B_0 \quad (3.18)$$

$$\theta_1 - T_1 = 0 \quad \text{in } B_0 \quad (3.19)$$

$$\frac{T_1}{\theta_1} \nabla_{\dot{\mathbf{Z}}} \varphi_1 - \mathbf{Y}_1 = \mathbf{0} \quad \text{in } B_0 \quad (3.20)$$

（式中の添字”1”は、時刻 t_1 での値を意味する）

- 時刻 $t \in [t_0, t_1]$ における時間連続的な方程式（熱力学的非平衡状態）

$$\rho_0 \dot{T} + \nabla_{\eta} \varphi = 0 \quad \text{in } B_0 \quad (3.21)$$

$$-\frac{D}{Dt} \left(\frac{T}{\theta} \nabla_{\dot{\mathbf{Z}}} \varphi \right) + \nabla_{\dot{\mathbf{Z}}} \varphi = \mathbf{0} \quad \text{in } B_0 \quad (3.22)$$

以上より、熱・機械連成増分ポテンシャル法の熱力学的意味は、**図-3.3** に示す形で説明することが可能である。すなわち、まず連続体の時刻 t_0 と t_1 における2つの熱力学的平衡状態を考えると、その熱平衡性を表すように外部温度と熱力学的平衡温度が一致しており、その際にこれらの力学的な現象を支配する方程式が式(3.20)である。そして、本式はHu-Washizu式との類似性が認められるように、内部変数に関する構成関係を伴っているものの、連続体力学で標準的な支配方程式として構成されている。つまり、これまでの固体熱力学理論で示されてきた支配方程式は時間離散的な熱平衡過程を結んだ力学現象を説明するものであると解釈できる。逆に、これら2つの熱力学的平衡状態を時間連続に結ぶ熱力学的非平衡状態では、式(3.14)に示す非定常熱伝導方程式に従いながら、常に物体内の外部温度やエントロピー（熱力学的平衡温度）分

布が変化している。同時に、この過程において生ずる力学現象は、双対散逸ポテンシャルによる外部温度の変化や熱力学的内部駆動力 \mathbf{Y} の時間発展であり、その支配方程式が式 (3.20) である。

3.3 非晶性熱可塑性樹脂の双対散逸ポテンシャル

本節では、第2章で示した非晶性熱可塑性樹脂の粘弾性・粘塑性複合構成則に対して、熱・機械連成増分ポテンシャル法を適用する際に必要となる双対散逸ポテンシャルを導出する。そのために、式 (2.29) で得られた全散逸エネルギー D を以下に再掲しておく。

$$D = D^{\text{ve}} + D^{\text{vp}} + D^{\text{ht}} \geq 0 \quad (3.23)$$

$$D^{\text{ve}} = \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \left(R_{\text{vol}}^{\alpha} \cdot \dot{\Gamma}_{\text{vol}}^{\alpha} + \mathbf{R}_{\text{dev}}^{\alpha} : \dot{\Gamma}_{\text{dev}}^{\alpha} \right) \quad (3.24)$$

$$D^{\text{vp}} = \mathbf{M}^{\text{eff}} : \bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}} + q^{\text{vp}} \cdot \dot{\xi}^{\text{vp}} \quad (3.25)$$

$$D^{\text{ht}} = \mathbf{G} \cdot \mathbf{Q} \quad (3.26)$$

本研究では、 $D^{\text{ve}} \geq 0$, $D^{\text{vp}} \geq 0$, $D^{\text{ht}} \geq 0$ と仮定し、それぞれ独立なポテンシャル関数を定義する。

まず、熱散逸エネルギー D^{ht} の熱流束 \mathbf{Q} に対する負の Legendre-Fenchel 変換から Fourier ポテンシャル $\chi(\mathbf{G}) \geq 0$ が次式のように得られる。

$$\chi(\mathbf{G}) = \inf_{\mathbf{Q}} \left[\hat{\chi}(\mathbf{Q}) - D^{\text{ht}} \right] \quad (3.27)$$

ここで、 $\hat{\chi}(\mathbf{Q}) \geq 0$ は、Fourier ポテンシャルと双対関係にある独立変数を熱流束としたポテンシャルである。また当然、 $\mathbf{G} = \nabla_{\mathbf{Q}} \hat{\chi}$, $\mathbf{Q} = \nabla_{\mathbf{G}} \chi$ である。このとき、本研究では熱流束と負の温度勾配が一定の熱伝導係数によって関係づけられる標準的な Fourier 則を

採用することを意図して、Fourier ポテンシャルが \mathbf{G} に対する狭義の凸関数となるよう次式で定義する。

$$\chi(\mathbf{G}) \equiv \frac{\kappa_H}{2} \mathbf{G} \cdot \mathbf{G} \quad (3.28)$$

ここで、 $\mathbf{G} \equiv -\frac{1}{\theta} \nabla_X T$ と定義した。また、 κ_H は熱生成係数であり、熱伝導係数 κ との関係は $\kappa = \kappa_H/\theta$ によって得られる。

次に、粘弾性散逸エネルギー D^{ve} の粘弾性非平衡応力 \mathbf{R}_{vol}^α , \mathbf{R}_{dev}^α に対する Legendre-Fenchel 変換から、 α 番目の Maxwell 要素に対応する粘弾性双対散逸ポテンシャル $\varphi^\alpha \geq 0$ が次式のように得られる。

$$\varphi^\alpha(\dot{\Gamma}_{vol}^\alpha, \dot{\Gamma}_{dev}^\alpha, \theta) = \sup_{\mathbf{R}_{vol}^\alpha, \mathbf{R}_{dev}^\alpha} [D^{ve} - \hat{\varphi}^\alpha(\mathbf{R}_{vol}^\alpha, \mathbf{R}_{dev}^\alpha, \theta)] = \varphi_{vol}^\alpha(\dot{\Gamma}_{vol}^\alpha, \theta) + \varphi_{dev}^\alpha(\dot{\Gamma}_{dev}^\alpha, \theta) \quad (3.29)$$

ここで、 $\hat{\varphi}^\alpha(\mathbf{R}_{vol}^\alpha, \mathbf{R}_{dev}^\alpha, \theta) \geq 0$ は粘弾性散逸ポテンシャルであり、 $\varphi_{vol}^\alpha(\dot{\Gamma}_{vol}^\alpha, \theta) \geq 0$ と $\varphi_{dev}^\alpha(\dot{\Gamma}_{dev}^\alpha, \theta) \geq 0$ は、それぞれ φ^α の体積成分と偏差成分である。また、Legendre-Fenchel 変換の性質より、 φ^α は熱力学的平衡温度 θ に対して凹である。このとき、 φ_{vol}^α , φ_{dev}^α の粘弾性変形 $\dot{\Gamma}_{vol}^\alpha$, $\dot{\Gamma}_{dev}^\alpha$ に対する勾配は、それぞれ粘弾性非平衡応力 \mathbf{R}_{vol}^α , \mathbf{R}_{dev}^α に一致するため、粘弾性双対散逸ポテンシャル $\varphi^{ve} \geq 0$ は次式のように得られる。

$$\begin{aligned} \varphi^{ve}(\dot{\Gamma}_{vol}^\alpha, \dot{\Gamma}_{dev}^\alpha, \theta) &= \sum_{\alpha=1}^{N^{ve}} \left(\int_0^{\dot{\Gamma}_{vol}^\alpha} \mathbf{R}_{vol}^{\alpha*} \cdot d\dot{\Gamma}_{vol}^{\alpha*} + \int_0^{\dot{\Gamma}_{dev}^\alpha} \mathbf{R}_{dev}^{\alpha*} : d\dot{\Gamma}_{dev}^{\alpha*} \right) \\ &= \sum_{\alpha=1}^{N^{ve}} \frac{\hat{\tau}^\alpha(\theta)}{2} \left[K^\alpha (\dot{\Gamma}_{vol}^\alpha)^2 + 2G^\alpha \|\dot{\Gamma}_{dev}^\alpha\|^2 \right] \end{aligned} \quad (3.30)$$

最後に、粘塑性散逸エネルギー D^{vp} の偏差対称有効 Mandel 応力 \mathbf{M}^{eff} と粘塑性等方便化駆動力 q^{vp} に対する Legendre-Fenchel 変換から粘塑性双対散逸ポテンシャル $\varphi^{vp} \geq 0$ が次式のように得られる。

$$\varphi^{vp}(\bar{\mathbf{d}}^{vp}, \xi^{vp}, \theta) = \sup_{\mathbf{M}^{eff}, q^{vp}} [D^{vp} - \hat{\varphi}^{vp}(\mathbf{M}^{eff}, q^{vp}, \theta)] \quad (3.31)$$

ここで、 $\hat{\varphi}^{\text{vp}}(\mathbf{M}^{\text{eff}}, q^{\text{vp}}, \theta) \geq 0$ は、粘塑性散逸ポテンシャルである。そして、 φ^{vp} も同じく θ に対して凹である。このとき、同時に次式が成立する。

$$\begin{aligned} \mathbf{M}^{\text{eff}} &= \nabla_{\bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}}} \varphi^{\text{vp}} \\ q^{\text{vp}} &= \nabla_{\dot{\xi}^{\text{vp}}} \varphi^{\text{vp}} \end{aligned} \quad (3.32)$$

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}} &= \nabla_{\mathbf{M}^{\text{eff}}} \hat{\varphi}^{\text{vp}} \\ \dot{\xi}^{\text{vp}} &= \nabla_{q^{\text{vp}}} \hat{\varphi}^{\text{vp}} \end{aligned} \quad (3.33)$$

いま、粘塑性散逸ポテンシャルを次式で仮定する。

$$\hat{\varphi}^{\text{vp}} = \frac{1}{2\eta^{\text{vp}}(\theta)} \left[h_+^{\text{vp}}(f) + \hat{\Omega}(f + \phi^{\text{vp}}) \right] \quad (3.34)$$

ここで、

$$\eta^{\text{vp}} = \eta^{\text{vp}}(\theta) = \exp\left(\frac{\Delta H}{R\theta}\right) \in (+0, +\infty) \quad (3.35)$$

は Arrhenius 型の粘塑性粘性係数であり、 $h_+^{\text{vp}}(f)$ は次式の条件を満たすような、Perzyna タイプの粘塑性正規化において仮定される C^1 以上の連続性を有するポテンシャル¹⁰⁹⁾ である。

$$h_+^{\text{vp}} = \begin{cases} \geq 0 & \text{if } f \geq 0 \\ = 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3.36)$$

また、 $\hat{\Omega}(f + \phi^{\text{vp}})$ は、後述するせん断降伏強さ r^{vp} の発展則を導くための付加的なポテンシャルであり、 ϕ^{vp} は次式で定義されるような粘塑性ポテンシャルである。

$$\phi^{\text{vp}}(q^{\text{vp}}, \theta) = \frac{1}{s_{ss}(\theta)} (q^{\text{vp}})^2 \quad (3.37)$$

このとき、式(3.33)より、偏差粘塑性変形速度 $\bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}}$ と等方硬化内部変数速度 $\dot{\xi}^{\text{vp}}$ は次式のように展開される。

$$\bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}} = \frac{1}{2\eta^{\text{vp}}} \left[\nabla_f h_+^{\text{vp}} \cdot \nabla_{\mathbf{M}^{\text{eff}}} f + \nabla_{(f+\phi)} \hat{\Omega} \cdot \nabla_{\mathbf{M}^{\text{eff}}} (f + \phi) \right] \quad (3.38)$$

$$\dot{\xi}^{\text{vp}} = \frac{1}{2\eta^{\text{vp}}} \left[\nabla_f h_+^{\text{vp}} \cdot \nabla_{q^{\text{vp}}} f + \nabla_{(f+\phi)} \hat{\Omega} \cdot \nabla_{q^{\text{vp}}} (f + \phi) \right] \quad (3.39)$$

ここで、粘塑性乗数を

$$\dot{\gamma}^{\text{vp}} = \nabla_f h_+^{\text{vp}} / \eta^{\text{vp}} = \nabla_{(f+\phi)} \hat{\Omega} / \eta^{\text{vp}} \quad (3.40)$$

と仮定すると、これらは最終的に次式のようになる。

$$\bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}} = \frac{\dot{\gamma}^{\text{vp}}}{2} (\mathbf{N} + \mathbf{N}) = \dot{\gamma}^{\text{vp}} \mathbf{N} \quad (3.41)$$

$$\dot{\xi}^{\text{vp}} = \frac{\dot{\gamma}^{\text{vp}}}{2} \left(1 + 1 + \frac{2}{s_{ss}} q^{\text{vp}} \right) = \dot{\gamma}^{\text{vp}} \left(1 + \frac{q^{\text{vp}}}{s_{ss}} \right) = \dot{\gamma}^{\text{vp}} \left(1 - \frac{r^{\text{vp}}}{s_{ss}} \right) \quad (3.42)$$

前者は粘塑性流れ則を表す。また、後者の式(3.42)を式(2.90)の両辺を時間微分することによって得られる $\dot{r}^{\text{vp}} = h \dot{\xi}^{\text{vp}}$ に代入すると、次式のように等方硬化発展則が導かれる。

$$\dot{r}^{\text{vp}} = h \dot{\gamma}^{\text{vp}} \left(1 - \frac{r^{\text{vp}}}{s_{ss}} \right) \quad (3.43)$$

ところで、抗応力 (drag stress) ¹¹⁰⁾ を $K \equiv k\theta/A = K(\theta)$ と定義して、式(3.35)の粘塑性粘性係数とともに Richeton ら ⁴⁶⁾ の発展則(2.95)に代入すると次式が得られる。

$$\dot{\gamma}^{\text{vp}} = \frac{\dot{\gamma}_0^{\text{vp}}}{\eta^{\text{vp}}} \left[\sinh \left(\frac{f}{K} \right) \right]^{\frac{1}{m}} \quad (3.44)$$

また、この式は降伏関数 f について書き換えると次式が得られる。

$$f = K \sinh^{-1} \left[\left\{ \eta^{\text{vp}} \left(\frac{\dot{\gamma}^{\text{vp}}}{\dot{\gamma}_0^{\text{vp}}} \right) \right\}^m \right] \equiv \Lambda(\dot{\gamma}^{\text{vp}}, \theta) \quad (3.45)$$

さらに、式(3.33)より、

$$\begin{aligned} \nabla_{\dot{\gamma}^{\text{vp}}} \varphi &= \nabla_{\bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}}} \varphi^{\text{vp}} : \nabla_{\dot{\gamma}^{\text{vp}}} \bar{\mathbf{d}}^{\text{vp}} + \nabla_{\dot{\xi}^{\text{vp}}} \varphi^{\text{vp}} : \nabla_{\dot{\gamma}^{\text{vp}}} \dot{\xi}^{\text{vp}} \\ &= \mathbf{M}^{\text{eff}} : \mathbf{N} + q^{\text{vp}} \cdot \left(1 + \frac{q^{\text{vp}}}{s_{ss}} \right) \\ &= \tau^{\text{eff}} + q^{\text{vp}} + \frac{(q^{\text{vp}})^2}{s_{ss}} \\ \Leftrightarrow \tau^{\text{eff}} + q^{\text{vp}} &= \nabla_{\dot{\gamma}^{\text{vp}}} \varphi - \frac{(q^{\text{vp}})^2}{s_{ss}} \end{aligned} \quad (3.46)$$

が成立するため、式 (3.45) は次式のように式展開される。

$$\begin{aligned}
\tau^{\text{eff}} + \tau^{\text{vol}} + q^{\text{vp}} - \sigma_Y^0 &= \Lambda(\dot{\gamma}^{\text{vp}}, \theta) \\
\Leftrightarrow \nabla_{\dot{\gamma}^{\text{vp}}} \varphi - \frac{(q^{\text{vp}})^2}{s_{ss}} + \tau^{\text{vol}} - \sigma_Y^0 &= \Lambda(\dot{\gamma}^{\text{vp}}, \theta) \\
\Leftrightarrow \nabla_{\dot{\gamma}^{\text{vp}}} \varphi &= (\sigma_Y^0 - \tau^{\text{vol}}) + \frac{(q^{\text{vp}})^2}{s_{ss}} + \Lambda(\dot{\gamma}^{\text{vp}}, \theta)
\end{aligned} \tag{3.47}$$

したがって、最終的に式 (3.31) の粘塑性双対散逸ポテンシャルは次式のようになる。

$$\varphi^{\text{vp}} = \dot{\gamma}^{\text{vp}} (\sigma_Y^0 - \tau^{\text{vol}}) + \int_0^{\dot{\gamma}^{\text{vp}}} \frac{(\hat{q}^{\text{vp}})^2}{s_{ss}} d\hat{\gamma}^{\text{vp}} + \int_0^{\dot{\gamma}^{\text{vp}}} \Lambda(\hat{\gamma}^{\text{vp}}, \theta) d\hat{\gamma}^{\text{vp}} \tag{3.48}$$

ここで、本研究では簡単のために、

$$\int_0^{\dot{\gamma}^{\text{vp}}} \frac{(\hat{q}^{\text{vp}})^2}{s_{ss}} d\hat{\gamma}^{\text{vp}} = \dot{\gamma}^{\text{vp}} \cdot \frac{(q^{\text{vp}})^2}{s_{ss}} \tag{3.49}$$

と仮定した。この粘塑性双対散逸ポテンシャルの第一項は初期降伏に関する完全塑性的な応答に対するエネルギー散逸を表し、第二項は非晶性熱可塑性樹脂に特有の粘塑性等方硬化に対するエネルギー散逸を表す。そして、第三項 $\varphi_{3\text{rd}}^{\text{vp}} = \int_0^{\dot{\gamma}^{\text{vp}}} \Lambda(\hat{\gamma}^{\text{vp}}, \theta) d\hat{\gamma}^{\text{vp}}$ は降伏曲面より外の過応力状態において発生する粘性に起因したエネルギー散逸を表す。なお、Ree-Eyring の発展則 ($m = 1$)⁴⁰⁾ を用いる場合は、次式のように第三項 $\varphi_{3\text{rd}}^{\text{vp}}$ を理論的に積分することが可能である。

$$\begin{aligned}
\varphi_{3\text{rd}}^{\text{vp}} &= \int_0^{\dot{\gamma}^{\text{vp}}} K \sinh^{-1}(\Xi \hat{\gamma}^{\text{vp}}) d\hat{\gamma}^{\text{vp}} \\
&= \frac{K}{\Xi} \left\{ \left[x \sinh^{-1}(x) \right]_0^{\Xi \dot{\gamma}^{\text{vp}}} - \int_0^{\Xi \dot{\gamma}^{\text{vp}}} \frac{x}{\sqrt{x^2 + 1}} dx \right\} \\
&= \frac{K}{\Xi} \left\{ \Xi \dot{\gamma}^{\text{vp}} \sinh^{-1}(\Xi \dot{\gamma}^{\text{vp}}) - \sqrt{(\Xi \dot{\gamma}^{\text{vp}})^2 + 1} \right\}
\end{aligned} \tag{3.50}$$

ここで、 $\Xi = \eta^{\text{vp}} / \dot{\gamma}_0^{\text{vp}}$ である。

3.4 熱・機械連成増分ポテンシャルの停留条件と支配方程式

本節では、本研究で独自に構築した非晶性熱可塑性樹脂の増分ポテンシャルに対して、3.2.1節で定義した増分ポテンシャル停留条件を用いて、熱・機械連成支配方程式を導出し、得られた方程式から本研究で提案するモデルの特徴を説明する。

まず、物質点 \mathbf{X} で定義される非晶性熱可塑性樹脂の内部ポテンシャル速度は次式のように与えられる。

$$\Upsilon(\dot{\mathbf{F}}, T, \theta, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}) = \rho_0 \dot{e}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{\eta}, \dot{\mathbf{Z}}) - \rho_0 T \dot{\eta} + \varphi^{\text{ve}} \left(\frac{T}{\theta} \dot{\Gamma}_{\text{vol}}^{\alpha}, \frac{T}{\theta} \dot{\Gamma}_{\text{dev}}^{\alpha}, \theta \right) + \varphi^{\text{vp}} \left(\frac{T}{\theta} \dot{\gamma}^{\text{vp}}, \theta \right) - \chi(\mathbf{G}) \quad (3.51)$$

ここで、内部変数の集合とその速度は $\mathbf{Z} = (\Gamma_{\text{vol}}^{\alpha}, \Gamma_{\text{dev}}^{\alpha}, \mathbf{F}^{\text{vp}}, \xi^{\text{vp}})$, $\dot{\mathbf{Z}} = (\dot{\Gamma}_{\text{vol}}^{\alpha}, \dot{\Gamma}_{\text{dev}}^{\alpha}, \dot{\gamma}^{\text{vp}})$ である。さらに、内部エネルギー密度の自由エネルギー密度に対する負の Legendre-Fenchel 変換 $e = \sup_T (\psi + T \cdot \eta)$ を用いることで、内部ポテンシャル速度は次式のように書き換えられる。

$$\Upsilon(\dot{\mathbf{F}}, T, \theta, \dot{\mathbf{Z}}) = \rho_0 \dot{\psi}(\dot{\mathbf{F}}, \dot{T}, \dot{\mathbf{Z}}) + \rho_0 \dot{T} \eta + \varphi^{\text{ve}} \left(\frac{T}{\theta} \dot{\Gamma}_{\text{vol}}^{\alpha}, \frac{T}{\theta} \dot{\Gamma}_{\text{dev}}^{\alpha}, \theta \right) + \varphi^{\text{vp}} \left(\frac{T}{\theta} \dot{\gamma}^{\text{vp}}, \theta \right) - \chi(\mathbf{G}) \quad (3.52)$$

このとき、内部ポテンシャル速度のエントロピー速度に対する依存性が消滅することに留意する。また、式(3.52)中の双対散逸ポテンシャル式(3.30)と式(3.48)は、積分因子(Integration factor) (3.9)を代入することで次式のようになる。

$$\varphi^{\text{ve}} \left(\frac{T}{\theta} \dot{\Gamma}_{\text{vol}}^{\alpha}, \frac{T}{\theta} \dot{\Gamma}_{\text{dev}}^{\alpha}, \theta \right) = \left(\frac{T}{\theta} \right)^2 \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \frac{\hat{r}^{\alpha}(\theta)}{2} \left[K^{\alpha} (\dot{\Gamma}_{\text{vol}}^{\alpha})^2 + 2G^{\alpha} \|\dot{\Gamma}_{\text{dev}}^{\alpha}\|^2 \right] \quad (3.53)$$

$$\varphi^{\text{vp}} \left(\frac{T}{\theta} \dot{\gamma}^{\text{vp}}, \theta \right) = \left(\frac{T}{\theta} \right) \dot{\gamma}^{\text{vp}} \left[\sigma_Y^0 - \tau^{\text{vol}} + \frac{(q^{\text{vp}})^2}{s_{ss}} \right] + \int_0^{\dot{\gamma}^{\text{vp}}} \Lambda \left(\frac{T}{\theta} \dot{\gamma}^{\text{vp}}, \theta \right) \cdot \left(\frac{T}{\theta} \right) d\dot{\gamma}^{\text{vp}} \quad (3.54)$$

以下では、以上の式に対して、各状態変数に対する停留点を導出する。

まず、式(3.51)における内部ポテンシャル速度に対するエントロピー密度速度の停

留点は次式のように得られる.

$$\nabla_{\dot{\eta}} \Upsilon = \nabla_{\dot{\eta}} (\rho_0 \dot{e}) - \rho_0 T = 0 \Rightarrow \theta = T \quad (3.55)$$

この関係式は、物質点 \mathbf{X} 近傍の局所的な領域において、内部ポテンシャル速度がエントロピー密度速度に関して停留するとき、常に熱力学的平衡状態であることを示している.

次に、式 (3.51) で記述された内部ポテンシャル速度に対する内部変数速度の停留点は、それぞれ次式のようになる.

$$\begin{aligned} \nabla_{\dot{\Gamma}_{\text{vol}}^{\alpha}} \Upsilon &= K^{\alpha} \Gamma_{\text{vol}}^{\alpha} - M_{\text{vol}}^{\alpha} + \left(\frac{T}{\theta}\right)^2 K^{\alpha} \hat{\tau}^{\alpha} \dot{\Gamma}_{\text{vol}}^{\alpha} = 0 \\ \Leftrightarrow M_{\text{vol}}^{\alpha} - K^{\alpha} \Gamma_{\text{vol}}^{\alpha} &= \left(\frac{T}{\theta}\right)^2 K^{\alpha} \hat{\tau}^{\alpha} \dot{\Gamma}_{\text{vol}}^{\alpha} \end{aligned} \quad (3.56)$$

$$\begin{aligned} \nabla_{\dot{\Gamma}_{\text{dev}}^{\alpha}} \Upsilon &= 2G^{\alpha} \Gamma_{\text{dev}}^{\alpha} - M_{\text{dev}}^{\alpha} + \left(\frac{T}{\theta}\right)^2 2G^{\alpha} \hat{\tau}^{\alpha} \dot{\Gamma}_{\text{dev}}^{\alpha} = 0 \\ \Leftrightarrow M_{\text{dev}}^{\alpha} - 2G^{\alpha} \Gamma_{\text{dev}}^{\alpha} &= \left(\frac{T}{\theta}\right)^2 2G^{\alpha} \hat{\tau}^{\alpha} \dot{\Gamma}_{\text{dev}}^{\alpha} \end{aligned} \quad (3.57)$$

$$\begin{aligned} \nabla_{\dot{\gamma}^{\text{vp}}} \Upsilon &= -\left[\tau^{\text{eff}} + q^{\text{vp}} \cdot \left(1 + \frac{q^{\text{vp}}}{s_{ss}}\right)\right] + \left(\frac{T}{\theta}\right) \left[\sigma_Y^0 - \tau^{\text{vol}} + \frac{(q^{\text{vp}})^2}{s_{ss}}\right] + \Lambda \left(\frac{T}{\theta} \dot{\gamma}^{\text{vp}}, \theta\right) \cdot \left(\frac{T}{\theta}\right) = 0 \\ \Leftrightarrow \tau^{\text{eff}} + \tau^{\text{vol}} + q^{\text{vp}} - \left(\frac{T}{\theta}\right) \sigma_Y^0 &= \frac{(q^{\text{vp}})^2}{s_{ss}} \left(1 - \frac{T}{\theta}\right) + \Lambda \left(\frac{T}{\theta} \dot{\gamma}^{\text{vp}}, \theta\right) \cdot \left(\frac{T}{\theta}\right) \end{aligned} \quad (3.58)$$

ここで、式 (3.55) と次式が成立することを考慮すると、

$$R_{\text{vol}}^{\alpha} = M_{\text{vol}}^{\alpha} - K^{\alpha} \Gamma_{\text{vol}}^{\alpha} \quad (3.59)$$

$$R_{\text{dev}}^{\alpha} = M_{\text{dev}}^{\alpha} - 2G^{\alpha} \Gamma_{\text{dev}}^{\alpha} \quad (3.60)$$

$$f = \tau^{\text{eff}} + \tau^{\text{vol}} + q^{\text{vp}} - \sigma_Y^0 \quad (3.61)$$

最終的に Newton 粘性則と粘塑性流れの発展則が次式のように再生される.

$$R_{\text{vol}}^{\alpha} = (K^{\alpha} \hat{\tau}^{\alpha}) \dot{\Gamma}_{\text{vol}}^{\alpha} \quad (3.62)$$

$$R_{\text{dev}}^{\alpha} = (2G^{\alpha} \hat{\tau}^{\alpha}) \dot{\Gamma}_{\text{dev}}^{\alpha} \quad (3.63)$$

$$f = \Lambda (\dot{\gamma}^{\text{vp}}, \theta) \quad (3.64)$$

このことは、エントロピー密度速度と内部変数速度に関する内部ポテンシャル速度の最小化問題の最適解は非弾性流れの発展則を満足しなければならないことを示している。

最後に、大域的ポテンシャル速度 ϕ の大域変数 $(\dot{\phi}, T)$ に対する停留条件を考える。まず、 $\dot{\phi}$ に対する停留条件から次式が得られる。

$$\begin{aligned}
 D\phi[\delta\dot{\phi}] &= \int_{B_0} D\Upsilon[\delta\dot{F}]dV - DG[\delta\dot{\phi}] \\
 &= \int_{B_0} \nabla_{\dot{F}}\Upsilon : \delta\dot{F}dV - DG^{\text{Mech}}[\delta\dot{\phi}] \\
 &= \int_{B_0} \nabla_{\dot{F}}(\rho_0\dot{\psi}) : \delta\dot{F}dV - \int_{B_0} D(\rho_0\mathbf{b} \cdot \dot{\phi})[\delta\dot{\phi}]dV - \int_{\partial_{\text{MN}}B_0} D(\mathbf{T}_N \cdot \dot{\phi})[\delta\dot{\phi}]dA \\
 &= \int_{B_0} \mathbf{P} : \delta\dot{F}dV - \int_{B_0} \rho_0\mathbf{b} \cdot \delta\dot{\phi}dV - \int_{\partial_{\text{MN}}B_0} \mathbf{T}_N \cdot \delta\dot{\phi}dA = 0 \tag{3.65}
 \end{aligned}$$

すなわち、大域的ポテンシャル速度 ϕ の $\dot{\phi}$ に関する最小化問題の最適解は運動に関する仮想仕事式を満足しなければならないことを示している。また、外部温度 T に対する停留条件から次式が得られる。

$$\begin{aligned}
 D\phi[\delta T] &= \int_{B_0} D\Upsilon[\delta T]dV - DG[\delta T] \\
 &= \int_{B_0} \nabla_T\Upsilon \cdot \delta TdV - DG^{\text{Heat}}[\delta T] \\
 &= \int_{B_0} \left[-\rho_0\dot{\eta} + \nabla_T\varphi^{\text{ve}} + \nabla_T\varphi^{\text{vp}} - \mathbf{Q} \cdot \nabla_X \left(\frac{1}{T} \right) \right] \cdot \delta TdV - \int_{\partial_{\text{HN}}B_0} \mathbf{Q}_N \frac{\delta T}{T}dA \\
 &\quad - \int_{\partial_{\text{HR}}B_0} \beta \left[1 - \frac{T_R}{T} \right] \delta TdA + \int_{B_0} \rho_0 h \frac{\delta T}{T}dV = 0 \tag{3.66}
 \end{aligned}$$

さらに整理すると最終的に、次式が得られる。

$$\begin{aligned}
 \int_{B_0} \rho_0\dot{\eta} \cdot \delta TdV &= \int_{B_0} (\nabla_T\varphi^{\text{ve}} + \nabla_T\varphi^{\text{vp}}) \cdot \delta TdV - \int_{B_0} \mathbf{Q} \cdot \nabla_X \left(\frac{1}{T} \right) \cdot \delta TdV \\
 &\quad - \int_{\partial_{\text{HN}}B_0} \mathbf{Q}_N \frac{\delta T}{T}dA - \int_{\partial_{\text{HR}}B_0} \beta \left[1 - \frac{T_R}{T} \right] \delta TdA + \int_{B_0} \rho_0 h \frac{\delta T}{T}dV \tag{3.67}
 \end{aligned}$$

すなわち、ポテンシャル ϕ の T に関する最小化問題の最適解は非定常熱伝導方程式を満足する。ただし、右辺第一項で示される非弾性発熱は、単に Clausius-Duhem 式から導出された非弾性散逸エネルギーからもたらされるものではなく、積分因子 (Integration

factor) 式 (3.9) が考慮された双対散逸ポテンシャルポテンシャルの温度勾配によって得られることに留意されたい。これが、従来の熱力学第一と第二法則から導出される標準的な非定常熱伝導方程式と異なる部分であり、その差が Taylor-Quinney 因子¹⁰⁸⁾ など実験的に求められた熱変換効率の高精度な予測結果となって現れる。最後に、本研究で示す非晶性熱可塑性樹脂の熱・機械連成解析に必要なエントロピーを以下に示しておく。

$$\rho_0\eta = \rho_0\eta_{\text{vol}}^{\text{ve}} + \rho_0\eta^{\text{vp}} + \rho_0\eta^{\text{h}} \quad (3.68)$$

$$\rho_0\eta_{\text{vol}}^{\text{ve}} = 3K^\infty \{\nabla_T \alpha_{\text{th}}(T)\} \left[\ln(J) + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \gamma^\alpha \{\ln(J) - \Gamma_{\text{vol}}^\alpha\} \right] \quad (3.69)$$

$$\rho_0\eta^{\text{ht}} = c \ln\left(\frac{T}{T_0}\right) \quad (3.70)$$

$$\rho_0\eta^{\text{vp}} = \begin{cases} \frac{\mu_r - \mu_g}{2} \left\{ \frac{1}{W_{\text{back}}} \cosh^{-2}\left(\frac{T-T_g}{W_{\text{back}}}\right) - \beta_{\text{back}} \frac{T-T_g}{|T-T_g|} \right\} J_m \ln\left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}} - 3}{J_m}\right) & \text{if } T \neq T_g \\ \frac{\mu_r - \mu_g}{2W_{\text{back}}} J_m \ln\left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}} - 3}{J_m}\right) & \text{if } T = T_g \end{cases} \quad (3.71)$$

なお、比熱に関する自由エネルギー ψ^{ht} には次式を用いる。

$$\rho_0\psi^{\text{ht}}(T) = \rho_0c \left[T - T_0 - T \ln\left(\frac{T}{T_0}\right) \right] \quad (3.72)$$

ここで、 c は比熱である。

以上が、本研究で示す非晶性熱可塑性樹脂の熱・機械連成増分ポテンシャルモデルであり、これらをまとめたものを図-3.4 と図-3.5 に示す。

3.5 数値解析例

3.5.1 熱・機械連成増分問題の検証例

本項ではまず、本研究で独自に実装した熱・機械連成増分ポテンシャル法に基づく解析手法の検証例として Stainier と Ortiz⁸⁴⁾ が行った物質点断熱状態 $\chi(\mathbf{G}) = 0$ における α

チタニウム合金の引張解析を行う。ここで、用いた粘塑性材料モデルを図-3.6に示し、対応する α チタニウム合金の材料パラメータを表-3.1に示す。参照とする実験¹¹¹⁾は、Split-Hopkinson 圧力棒法によって応力-ひずみ関係や温度増加を測定しているが、解析上では局所断熱状態であることを考慮して、本研究では雰囲気温度 20℃における6面体一次要素3個で構成される解析モデルに対する一様変形解析に簡略化した。なお、詳細は省略するが、熱・機械連成増分ポテンシャル法の数値計算アルゴリズムにおける勾配や接線の計算には Tanaka ら^{112,113)}が提案した数値的でありながら完全精度の高階微分値を算出可能である超双対数微分近似手法¹¹⁴⁾を用いている。

得られた解析結果と実験値¹¹¹⁾の真応力-真ひずみ関係を図-3.7に、温度上昇量-真ひずみ関係を図-3.8に示す。これらの結果を観察すると、本研究では、実際の実験条件を簡略化して物質点断熱状態 $\chi(\mathbf{G}) = 0$ が仮定された単純な解析モデルに対する一様変形解析を実施しており、その影響が多少の誤差となって結果に現れている。しかし、傾向はおおむね一致しており、本研究で実装した熱・機械連成増分ポテンシャル法に基づく強連成解析によって、 α チタニウム合金の熱・機械連成挙動を正確に予測することが可能であるといえる。また、熱・機械連成増分ポテンシャル法に特徴的な双対散逸ポテンシャルや積分因子 (Integration factor) によって、Taylor-Quinney 因子などの係数を考慮しなくても非弾性散逸エネルギーの熱変換効率が算出されており、発熱による温度上昇量が高精度に予測されている。

このように、熱・機械増分ポテンシャル法に基づく強連成解析手法は有効であると判断して、次項以降で示す非晶性熱可塑性樹脂の粘弾性・粘塑性複合構成則による熱・機械連成解析を実行する。

3.5.2 PC に対する引張試験の再現解析

本項では、前節で構築した非晶性熱可塑性樹脂の熱・機械連成－粘弾性・粘塑性複合増分ポテンシャルモデルの性能を検証するために、PCの引張試験を模擬した熱・機械連成解析を行い、得られた結果と引張試験中の試験片表面でDIC計測された温度の時刻歴変化を比較する。

まず、本解析にて用いたPCのR-20型切り欠き付き試験片モデルや境界条件を図-3.9に示す。本有限要素モデルは6面体一次要素を用いて節点数7029、要素数5600で構成されており、非定常熱伝導による温度の空間的な広がりがひずみ軟化域を中心として非一様になることを考慮して、試験片形状をそのまま模擬している。なお、使用した有限要素は標準的な一次要素であるため、体積ロッキングを避けることができない。したがって、前章で示した同様の解析結果と比較して体積応力が硬めに現れ、変形が抑制されることによって自己発熱量が小さく見積もられることに留意されたい。また、引張方向に平行となる試験片表面には断熱条件を課し、直交する試験片端面では環境温度30℃に固定するDirichlet条件を課す。そして、制御条件には実験と同様に負荷速度0.3[mm/min]から300[mm/min]までの4水準を設定する。最後に、本解析を実行するために必要な追加の材料パラメータを表-3.2に示す。

まず、図-3.10に得られた4水準の負荷速度に対する真応力－真ひずみ関係を示す。全体的には非晶性熱可塑性樹脂で一般的な初期降伏や配向硬化現象が観察され、負荷速度が速いほど真応力は大きくなる結果が得られている。また、図-3.11には試験片モデルの最終的な変形形状とX方向真応力の分布を示す。試験片の最終的な力学状態は、どの水準でも中央部でネッキングが生じており、そこで応力集中が発生していることが再現されている。一方で、図-3.12で示す最終的な変形時における温度の分布を観察すると、負荷速度が遅い水準ほど中央部における最終的な温度が低く、試験片全体で一様な温度分布となって観察される。逆に、負荷速度が速い水準ほど最終的な温度は

中央部に集中して高いことが観察される。これは、負荷速度が遅い水準では空間的な熱伝導が進展するのに十分な時間があるため、発熱に伴う温度増加量が試験片全体に伝導し、あたかも定常状態であるかのような温度分布が観察されることとなる。逆に、負荷速度が速い水準では空間的な熱伝導が進展するのに十分な時間が無く、温度が停留するため、発熱に伴う温度増加が中央部に集中し、そこで高い温度となって観察される。このような温度分布の違いは少なからず非晶性熱可塑性樹脂の力学挙動に影響を与え、大きな温度上昇が観察されるひずみ軟化域以降の応力-ひずみ関係にそれが反映されることになる。

ところで、**図-3.10**における真ひずみ0.1付近の挙動をみると、実験で現れるひずみ軟化挙動が再現されていない。これは、標準的な6面体一次要素を用いたことが原因で体積応力が大きく見積もられて、ひずみ軟化挙動を打ち消してしまったとも考えられるが、この原因を詳しく調べるために、本研究では同様の解析条件で力学応答のみを考慮した解析を実施した。解析結果として、**図-3.13**に負荷速度3.0[mm/min]と300[mm/min]に対する真応力-真ひずみ関係を示して比較する。力学応答解析のみの場合ではひずみ軟化が観察され、両者の力学挙動の差はこのひずみ軟化を起点に大きくなる。この要因として、この差は粘塑性等方硬化や移動硬化によって生み出されるものであると考えられる。そこでまず、粘塑性等方硬化の影響を調べるために**図-3.14**に降伏応力 $(r^{vp} + \sigma_Y^0)$ -真ひずみ関係の比較結果を示す。負荷速度3.0[mm/min]の結果では両者にそれほどの差が観測されないが、負荷速度300[mm/min]の結果では真ひずみ0.2付近を起点として大小が逆転しており、真ひずみが大きくなるにしたがって両者の値は再度、近づいていくことが観察される。このような傾向は真応力-真ひずみ関係にも現れており、真ひずみの増加に対してやがて真応力の差が逆転することが考えられる。つまり、負荷速度の速い水準に関しては降伏応力の差が真応力にならなからず影響を与えていることが分かる。これは、負荷速度の速い水準ではひずみ軟化以降、試験片中央

部で高い温度が観測されるが、降伏応力がその温度状態に影響を受けて、力学応答のみの解析結果よりも早く安定状態に至ることが原因であると考えられる。ただし、力学応答のみの解析結果の方も引張に対してやがては安定状態に至るため、真ひずみの増加によって両者の値が近づいていくように観察されることが考えられる。

しかし、負荷速度 3.0[mm/min] の結果においてはそれほど目立った温度上昇が無いにも関わらず、両者のひずみ軟化以降の力学応答は非常に異なっている。この原因と特定するために、図-3.15 に負荷速度 3.0[mm/min] と 300[mm/min] に対する粘塑性乗数-真ひずみ関係の比較結果を示す。ひずみ軟化域において観察される両者の粘塑性乗数の最大値は約 3 倍近くの差を生じている。つまり、熱・機械連成解析の結果の方が全体の変形に対して粘塑性変形の割合が非常に多いといえる。そして、この差は配向硬化現象を再現するための背応力の量に影響を与え、熱・機械連成解析の結果の方では、ひずみ軟化域で既に背応力が大きく発現するほどの粘塑性変形を蓄えており、比較的大きな背応力がひずみ軟化に伴う応力勾配の減少を抑制したため、図-3.10 の結果が得られたものと考えられる。なお、負荷速度 300[mm/min] の結果においても熱・機械連成解析の方が背応力の進展が進んでおり、背応力は指数関数的に増大するため両者の値が大きくなると考えられるにも関わらず、大変形域において両者の真応力の差は縮小傾向にある。これは、先述のような等方硬化の影響も含まれるが、発熱によって生じた温度増加が背応力の剛性に影響を与え、配向硬化に伴う応力の増加をある程度抑制しているからであると考えられる。事実、配向硬化現象による応力勾配は熱・機械連成解析の方が緩やかであり、特に真ひずみ 0.7 付近でそれが明確に観察される。このように、自己発熱によって生じた構造内の温度場の時刻歴変化が特に、ひずみ軟化域において強く自身の力学挙動に影響を及ぼすことが分かる。また、本解析で用いた材料パラメータは第 2 章で行った自己発熱を考慮しない解析によって同定されたものであるため、ひずみ軟化の消滅など実験との大きな差が目立つ結果となった。つまり、実

験結果のより高精度な再現結果を得るためには、自己発熱を考慮した熱・機械連成解析によって同定された材料パラメータを利用しなければならないと考えられる。

最後に、本解析で得られた試験片中央部における温度増加と実験的に計測した温度増加の比較を図-3.16に示す。本結果を観察すると、負荷速度が遅い水準については、温度の増加から空間的な熱伝導による低下までのプロセスをある程度再現できていることが分かる。しかし、負荷速度が速い水準については、大変形域入ると非常に大きな温度増加を再現できず、最大でも約3分の1程度の発熱量に収まっている。これは、解析では粘塑性変形の進展速度がひずみ軟化域で激増し、その後はすぐに減少しているが、本来はよりなだらかに速度が減少していくと考えられる。これを改善するには、散逸エネルギーの蓄積をより増やすようなモデル化が必要であると考えられる。


3.6 まとめ

本章では、第2章で示した粘弾性・粘塑性複合構成則が有する本来の発熱性能を厳密に評価するために、Yangら⁸³⁾が提案した熱・機械連成増分ポテンシャル法を採用し、非晶性熱可塑性樹脂からなる構造物の自己発熱現象を考慮した温度と変形の強連成解析手法を提案した。本提案手法は以下の特徴を有している。

- Yangら⁸³⁾が提案した熱・機械連成増分ポテンシャル法の枠組みに則っており、材料構成則が有する本来の発熱性能を厳密に評価することが可能である。
- 非弾性双対散逸ポテンシャルから、第2章で示したNewton粘性則や粘塑性流れ則および降伏関数が再生されることを示しており、固体熱力学の理論的に首尾一貫したモデルである。

本研究で提案した非晶性熱可塑性樹脂の熱・機械連成—粘弾性・粘塑性複合増分ポテンシャルモデルは、固体熱力学的に整合しており、発熱による温度増加を厳密に定量

的な評価が可能であるため、熱・機械連成－粘弾性・粘塑性複合増分ポテンシャルモデルの性能を正確に示すことが可能であり、既存の熱・機械連成解析モデルよりも信頼性が高いものであると期待される。さらに、熱伝導方程式と力学の平衡方程式の連立方程式が作り出す変分構造が保持されているため、剛性マトリクスが必ず対称となり数値計算に対する安定性に関して、既存モデルに対する優位性を主張することができる..

ただし、自己発熱による温度増加量は、第2章で示した粘弾性・粘塑性複合構成則の性能に強く依存するため、-3.16で示したように、実験に対する表現性能に関して課題が残る結果となった。特にひずみ軟化域においては、Richetonら⁴⁸⁾やBouvardら⁵⁶⁾も示しているように、粘塑性乗数の発展則に原因があるとされ、今後は発熱量にも焦点を当てた流れ則に関する検討を行わなければならない。また、熱・機械連成増分ポテンシャル法自体もその論理の複雑性から、ほとんど先行研究が存在せず、未だ発展途上である。特に、 $\Psi_{t_0 \rightarrow t_1}$ に対する時間離散化の方法や空間的な熱伝導特性に関しては検討されておらず、これらに関しては今後の課題とする。

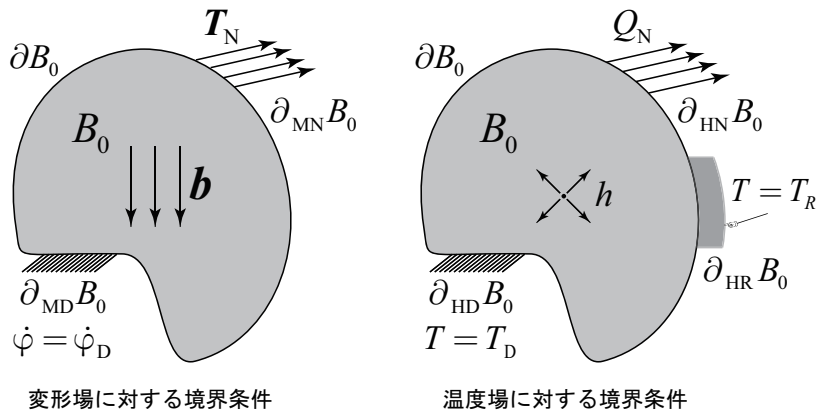


図-3.1 一般散逸固体（連続体）モデルと境界条件

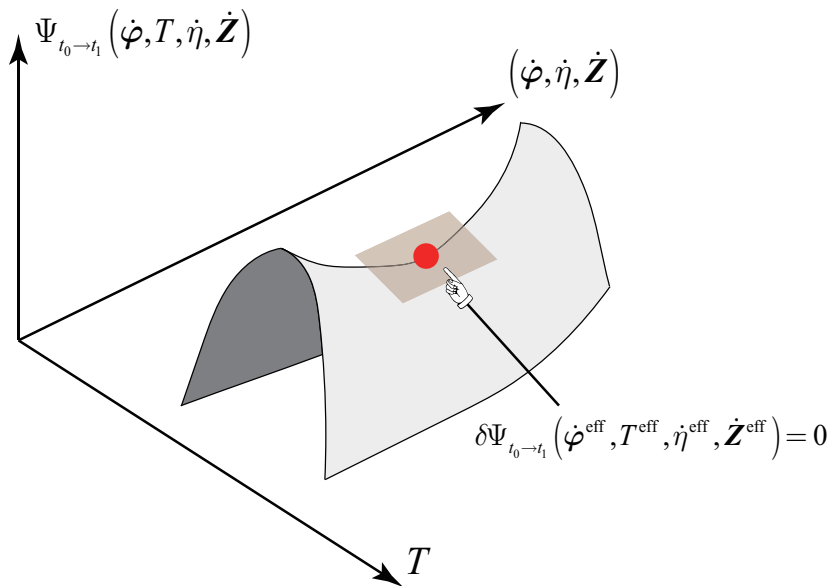


図-3.2 熱・機械連成増分ポテンシャルの変分構造と停留点問題

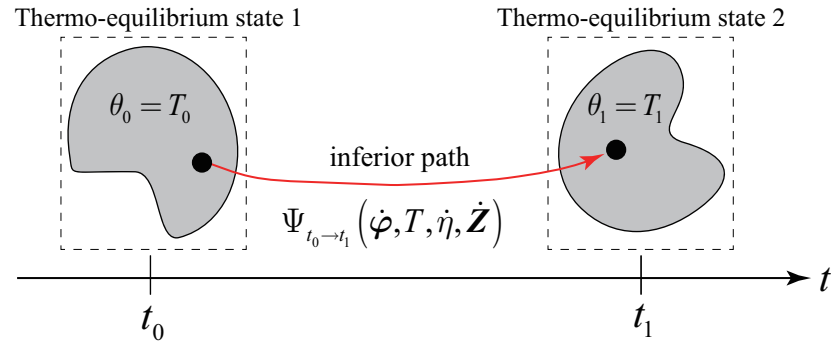


図-3.3 熱力学的過程から観察した熱・機械連成増分ポテンシャル法の論理

[1] 全増分ポテンシャル ($t_0 \rightarrow t_1$)

$$\Psi_{t_0 \rightarrow t_1} = \inf_{\text{path}} \int_{t_0}^{t_1} \phi(\dot{\varphi}, T, \dot{\mathbf{Z}}) dt, \quad \dot{\varphi} = \dot{\varphi}_D \text{ on } \partial_{\text{MD}} B_0, \quad T = T_D \text{ on } \partial_{\text{HD}} B_0$$

$$\blackrightarrow \text{状態変数の最適解 } (\dot{\varphi}^{\text{eff}}, T^{\text{eff}}, \dot{\mathbf{Z}}^{\text{eff}})_{t_0 \rightarrow t_1} = \arg \left[\inf_{\dot{\varphi}, \dot{\mathbf{Z}}} \sup_T (\Psi_{t_0 \rightarrow t_1}) \right]$$

[2] 大域的増分ポテンシャル速度

$$\phi(\dot{\varphi}, T, \dot{\mathbf{Z}}) = \int_{B_0} \Upsilon(\dot{\mathbf{F}}, T, \dot{\mathbf{Z}}) dV - G^{\text{Mech}}(\dot{\varphi}) - G^{\text{Heat}}(T)$$

(2.1) 外部ポテンシャル速度

$$(2.1.1) \text{ 外力成分 } \quad G^{\text{Mech}}(\dot{\varphi}) = \underbrace{\int_{B_0} \rho_0 \mathbf{b} \cdot \dot{\varphi} dV}_{\text{物体力項}} + \underbrace{\int_{\partial_{\text{MN}} B_0} \mathbf{T}_N \cdot \dot{\varphi} dA}_{\text{表面力項}}$$

$$(2.1.2) \text{ 熱供給成分 } \quad G^{\text{Heat}}(T) = \underbrace{\int_{\partial_{\text{HN}} B_0} Q_N \log\left(\frac{T}{T_0}\right) dA}_{\text{表面熱伝導項}} + \underbrace{\int_{\partial_{\text{HR}} B_0} \beta \left[T - T_R \log\left(\frac{T}{T_0}\right) \right] dA}_{\text{伝熱項}} - \underbrace{\int_{B_0} \rho_0 h \log\left(\frac{T}{T_0}\right) dV}_{\text{外部熱生成}}$$

(2.2) 内部ポテンシャル速度

$$\Upsilon(\dot{\mathbf{F}}, T, \dot{\mathbf{Z}}) = \rho_0 \psi(\dot{\mathbf{F}}, \dot{T}, \dot{\mathbf{Z}}) + \rho_0 \eta \dot{T} + \varphi \left(\frac{T}{\theta} \dot{\mathbf{Z}}, \theta \right) - \chi(\mathbf{G})$$

$$\text{※内部変数とその速度 } \quad \mathbf{Z} = (\Gamma_{\text{vol}}^\alpha, \Gamma_{\text{dev}}^\alpha, \mathbf{F}^{\text{vp}}, \xi^{\text{vp}}), \quad \dot{\mathbf{Z}} = (\dot{\Gamma}_{\text{vol}}^\alpha, \dot{\Gamma}_{\text{dev}}^\alpha, \dot{\gamma}^{\text{vp}})$$

図-3.4 熱・機械連成-粘弾性・粘塑性複合増分ポテンシャルモデルのまとめ (1)

[3] 全自由エネルギー $\psi = \psi_{\text{vol}}^{\text{ve}} + \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}} + \psi_{\text{iso}}^{\text{vp}} + \psi_{\text{kin}}^{\text{vp}} + \psi^{\text{ht}}$

(3.1) 体積粘弾性成分

$$\rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\text{ve}} = \left(1 + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \gamma^{\alpha}\right) \cdot \rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\infty} + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \left\{ \frac{K^{\alpha}}{2} (\mathbf{I}_{\text{vol}}^{\alpha} \cdot \mathbf{I}_{\text{vol}}^{\alpha}) - \mathbf{M}_{\text{vol}}^{\alpha} \cdot \mathbf{I}_{\text{vol}}^{\alpha} \right\}, \quad \rho_0 \psi_{\text{vol}}^{\infty} = K^{\infty} \left(\frac{1}{2} \ln J - 3K^{\infty} \alpha_{\text{th}}(T) \right) \ln J$$

(3.2) 偏差粘弾性成分

$$\rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\text{ve}} = \left(1 + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \gamma^{\alpha}\right) \cdot \rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\infty} + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \left\{ G^{\alpha} (\mathbf{I}_{\text{dev}}^{\alpha} : \mathbf{I}_{\text{dev}}^{\alpha}) - \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\alpha} : \mathbf{I}_{\text{dev}}^{\alpha} \right\}, \quad \rho_0 \psi_{\text{dev}}^{\infty} = G^{\infty} (\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}} : \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}})$$

(3.3) 粘塑性等方硬化成分 $\rho_0 \psi_{\text{iso}}^{\text{vp}} = \frac{h}{2} (\xi^{\text{vp}})^2$

(3.4) 粘塑性移動硬化成分 $\rho_0 \psi_{\text{kin}}^{\text{vp}} = -\mu(T) J_m \ln \left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}} - 3}{J_m} \right)$

(3.5) 非定常熱伝導成分 $\rho_0 \psi^{\text{ht}} = \rho_0 c \left[T - T_0 - T \ln \left(\frac{T}{T_0} \right) \right]$

[4] エントロピー $\rho_0 \eta = \rho_0 \eta_{\text{vol}}^{\text{ve}} + \rho_0 \eta^{\text{vp}} + \rho_0 \eta^{\text{ht}}$

(4.1) 体積粘弾性成分 $\rho_0 \eta_{\text{vol}}^{\text{ve}} = 3K^{\infty} \nabla_T \alpha_{\text{th}}(T) \left\{ \ln J + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \gamma^{\alpha} (\ln J - \mathbf{I}_{\text{vol}}^{\alpha}) \right\}, \quad \nabla_T \alpha_{\text{th}}(T) = \begin{cases} \alpha_{\text{th}}^{\text{G}} & T \leq T_g \\ \alpha_{\text{th}}^{\text{R}} & T > T_g \end{cases}$

(4.2) 粘塑性移動硬化成分 $\rho_0 \eta^{\text{vp}} = \begin{cases} \frac{\mu_r - \mu_g}{2} \left[\frac{1}{W_{\text{back}}} \cosh^{-2} \left(\frac{T - T_g}{W_{\text{back}}} \right) - \beta_{\text{back}} \frac{T - T_g}{|T - T_g|} \right] J_m \ln \left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}} - 3}{J_m} \right) & \text{if } T \neq T_g \\ \frac{\mu_r - \mu_g}{2W_{\text{back}}} J_m \ln \left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}} - 3}{J_m} \right) & \text{if } T = T_g \end{cases}$

(4.3) 非定常熱伝導成分 $\rho_0 \eta^{\text{ht}} = c \ln \left(\frac{T}{T_0} \right)$

$$\left[\begin{array}{l} \text{--- Drag stress } \quad K(\theta) = \frac{k\theta}{A} \\ \text{--- 粘塑性粘性係数 } \quad \rho_0 \eta^{\text{vp}}(\theta) = \exp \left(\frac{\Delta H}{R\theta} \right) \end{array} \right]$$

[5] 双対散逸ポテンシャル $\varphi = \varphi^{\text{ve}} + \varphi^{\text{vp}}$

(5.1) 体粘弾性成分 $\varphi^{\text{ve}} = \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \left(\frac{T}{\theta} \right)^2 \frac{\hat{\tau}^{\alpha}(\theta)}{2} \left[K^{\alpha} (\dot{\mathbf{I}}_{\text{vol}}^{\alpha})^2 + 2G^{\alpha} \|\dot{\mathbf{I}}_{\text{dev}}^{\alpha}\|^2 \right]$

(5.2) 粘塑性成分 $\varphi^{\text{vp}}(\dot{\gamma}^{\text{vp}}, \theta, T) = \left(\frac{T}{\theta} \right) \dot{\gamma}^{\text{vp}} (\sigma_r^0 - \tau^{\text{vol}}) + \left(\frac{T}{\theta} \right) \int_{+0}^{\dot{\gamma}^{\text{vp}}} \frac{(\hat{q}^{\text{vp}})^2}{s_{ss}} d\dot{\gamma}^{\text{vp}*} + \int_{+0}^{\dot{\gamma}^{\text{vp}}} \left(\frac{T}{\theta} \right) K(\theta) \sinh^{-1} \left[\left\{ \left(\frac{T}{\theta} \right) \eta^{\text{vp}}(\theta) \left(\frac{\dot{\gamma}^{\text{vp}*}}{\dot{\gamma}_0^{\text{vp}}} \right) \right\}^m \right] d\dot{\gamma}^{\text{vp}*}$

[6] Fourier ポテンシャル $\chi(\mathbf{G}) = \frac{k_{\text{H}}}{2} \mathbf{G} : \mathbf{G}, \quad \mathbf{G}(T) = -\frac{1}{\theta} (\nabla_x T)$

図-3.5 熱・機械連成-粘弾性・粘塑性複合増分ポテンシャルモデルのまとめ (2)

[1] 全自由エネルギー

$$\rho_0 \psi(\mathbf{F}, T, \mathbf{Z}) = \rho_0 \psi^e + \rho_0 \psi^{vp} + \rho_0 \psi^{ht}, \quad \mathbf{Z} = (\bar{\varepsilon}^{vp}), \quad \dot{\mathbf{Z}} = (\dot{\bar{\varepsilon}}^{vp})$$

$$(1.1) \text{ 弾性成分 } \rho_0 \psi^e(\mathbf{F}, T, \mathbf{Z}) = \frac{K(T)}{2} \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}_H^e)^2 + G(T) \text{dev}(\boldsymbol{\varepsilon}_H^e) : \text{dev}(\boldsymbol{\varepsilon}_H^e) - 3K_0 \alpha (T - \theta_0) \ln J, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_H^e = \frac{1}{2} \ln(\mathbf{C}^e)$$

$$K(T) = K_0 - K_1(T - \theta_0), \quad G(T) = G_0 - G_1(T - \theta_0)$$

$$(1.2) \text{ 粘塑性等方硬化成分 } \rho_0 \psi^{vp}(\bar{\varepsilon}^{vp}, T) = \frac{n}{n+1} \frac{\sigma_0(T)}{b} (1 + b \bar{\varepsilon}^{vp})^{\frac{n+1}{n}} + \hat{\sigma}_0(T) \left[\bar{\varepsilon}^{vp} + \frac{1}{d} \exp(-d \bar{\varepsilon}^{vp}) \right]$$

$$\sigma_0(T) = \bar{\sigma}_0 [1 - \omega_0(T - \theta_0)], \quad \hat{\sigma}_0(T) = \bar{\hat{\sigma}}_0 [1 - \hat{\omega}_0(T - \theta_0)]$$

$$(1.3) \text{ 非定常熱伝導成分 } \rho_0 \psi^{ht}(T) = \rho_0 c T \left[1 - \ln \frac{T}{\theta_0} \right]$$

[2] エントロピー

$$\rho_0 \eta = \rho_0 \eta^e + \rho_0 \eta^{vp} + \rho_0 \eta^{ht}$$

$$(2.1) \text{ 弾性成分 } \rho_0 \eta^e = \frac{K_1}{2} \text{tr}(\boldsymbol{\varepsilon}_H^e)^2 + G_1 \text{dev}(\boldsymbol{\varepsilon}_H^e) : \text{dev}(\boldsymbol{\varepsilon}_H^e) + 3K_0 \alpha \ln J$$

$$(2.2) \text{ 粘塑性等方硬化成分 } \rho_0 \eta^{vp} = \frac{n}{n+1} \frac{\bar{\sigma}_0 \omega_0}{b} (1 + b \bar{\varepsilon}^{vp})^{\frac{n+1}{n}} + \bar{\hat{\sigma}}_0 \hat{\omega}_0 \left[\bar{\varepsilon}^{vp} + \frac{1}{d} \exp(-d \bar{\varepsilon}^{vp}) \right]$$

$$(2.3) \text{ 非定常熱伝導成分 } \eta^{ht} = \rho_0 C_0 \ln \left(\frac{T}{\theta_0} \right)$$

[3] 双対粘塑性散逸ポテンシャル

$$\varphi(\dot{\mathbf{Z}}, T, \theta) = \sigma_y(\bar{\varepsilon}^{vp}, \theta) \left(\frac{T}{\theta} \right)^{\dot{\bar{\varepsilon}}^{vp}} + \frac{m}{m+1} \sigma_v(\theta) \dot{\varepsilon}_0 \left[\left(\frac{T}{\theta} \right)^{\frac{\dot{\bar{\varepsilon}}^{vp}}{\dot{\varepsilon}_0}} \right]^{\frac{m+1}{m}}$$

$$\sigma_y(\bar{\varepsilon}^{vp}, \theta) = \sigma_1(\theta) (1 + b' \bar{\varepsilon}^{vp})^{\frac{1}{n'}} + \hat{\sigma}_1(\theta) [1 - \exp(-d' \bar{\varepsilon}^{vp})]$$

$$\sigma_1(\theta) = \bar{\sigma}_1 [1 - \omega_1(\theta - \theta_0)], \quad \hat{\sigma}_1(\theta) = \bar{\hat{\sigma}}_1 [1 - \hat{\omega}_1(\theta - \theta_0)], \quad \sigma_v(\theta) = \sigma_v [1 - \omega_v(\theta - \theta_0)]$$

図-3.6 α チタニウム合金の熱・機械連成増分ポテンシャルモデルのまとめ⁸⁴⁾

表-3.1 α チタニウム合金の材料パラメータ⁸⁴⁾

Parameter	θ_0 [K]	K_0 [MPa]	K_1 [MPa/K]	G_0 [MPa]	G_1 [MPa/K]
	293.0	128900	0.0	43000	0.0
Parameter	α_{th} [/K]	n	b	d	$\bar{\sigma}_0$ [MPa]
	8.9×10^{-6}	1.0	-4.0	10.0	75.0
Parameter	ω_0 [/K]	$\bar{\sigma}_0$ [MPa]	$\hat{\omega}_0$ [/K]	m	n'
	0.0	120.0	0.0	5.0	1.5
Parameter	b'	d'	$\bar{\sigma}_1$ [MPa]	ω_1 [/K]	$\bar{\sigma}_1$ [MPa]
	5.0	7.0	300.0	0.0008	200.0
Parameter	$\hat{\omega}_1$ [/K]	σ_v [MPa]	ω_v [/K]	$\dot{\epsilon}_0$ [/s]	c [N · mm/t · K]
	0.0	50.0	0.0006	1.0	5.18×10^8
Parameter	ρ_0 [t/mm ³]				
	4.5×10^{-9}				

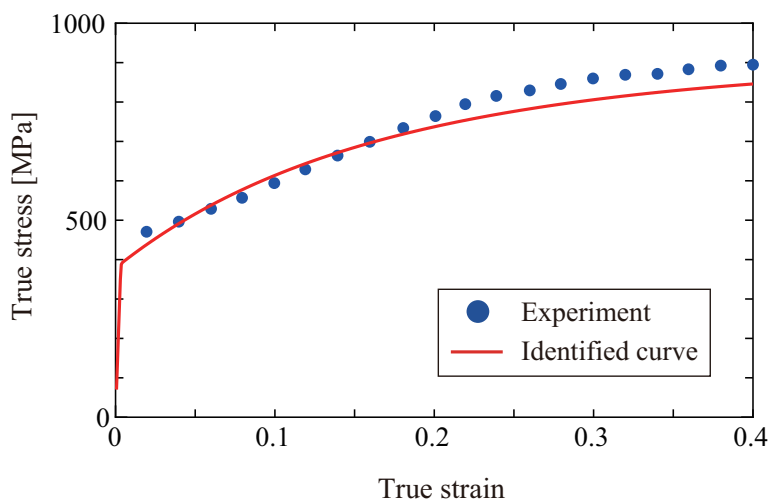


図-3.7 検証例題⁸⁴⁾における解析結果と実験結果¹¹¹⁾の真応力-真ひずみ関係の比較

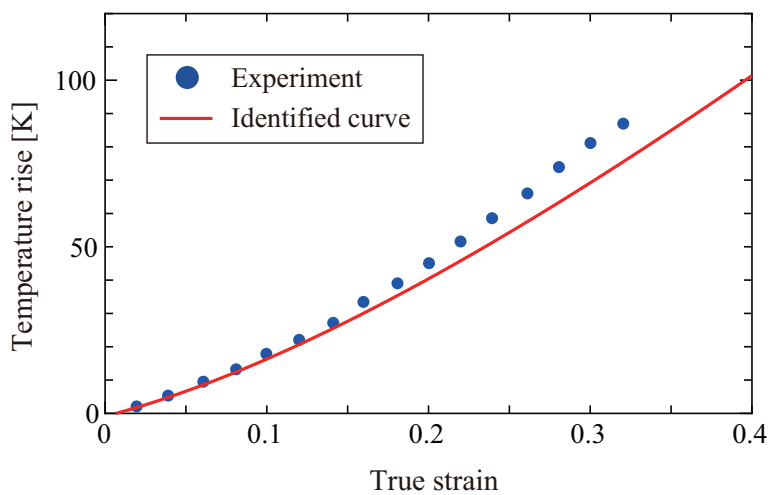


図-3.8 検証例題⁸⁴⁾における解析結果と実験結果¹¹¹⁾の温度上昇-真ひずみ関係の比較

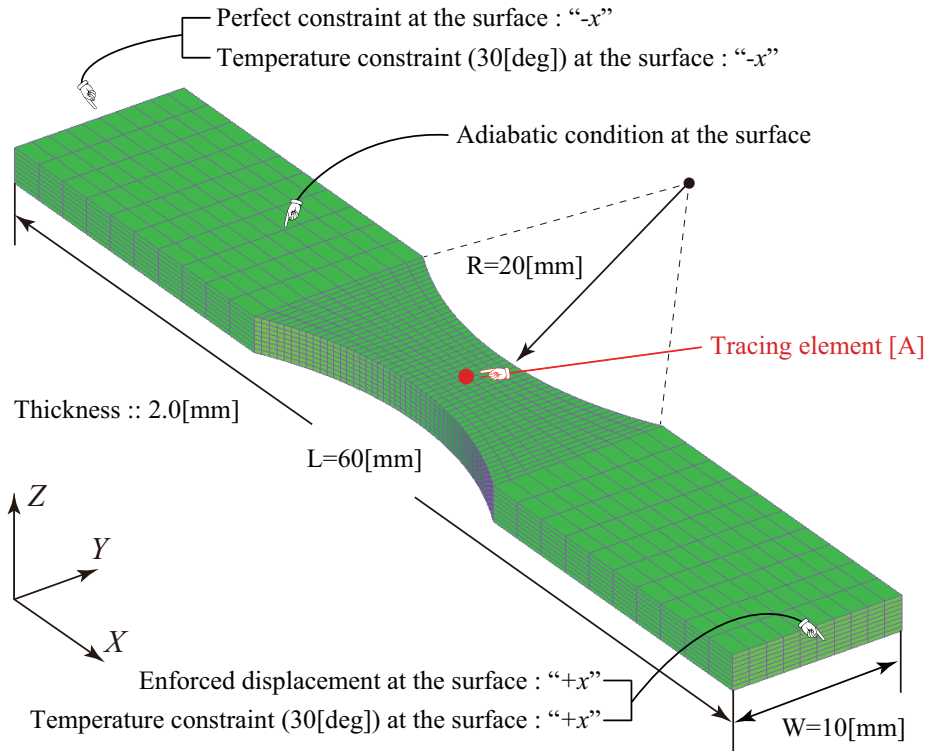


図-3.9 ポリカーボネートの R-20 型切欠き付き試験片の有限要素モデルと境界条件

表-3.2 PC の熱に関する材料パラメータ

c_0 [N · mm / (t · K)]	κ [t · mm / (s ⁻³ · K)]
1.26×10^9	0.19

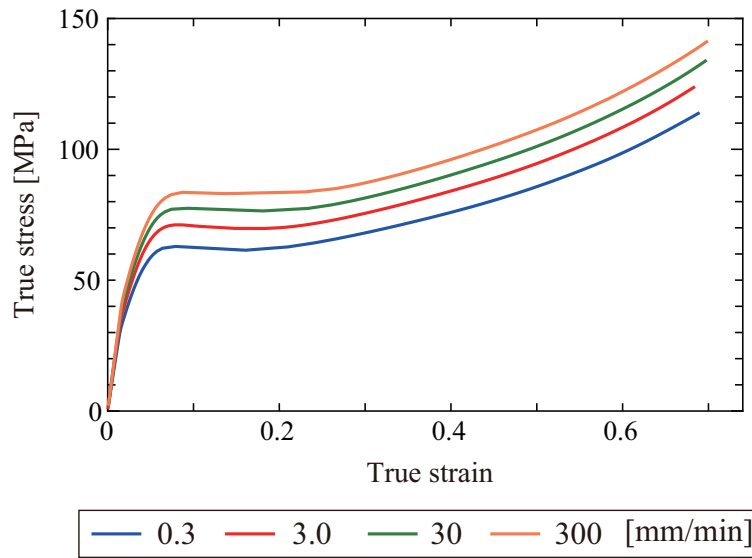


図-3.10 引張試験に対する負荷速度別の再現解析で得られた真応力-真ひずみ関係

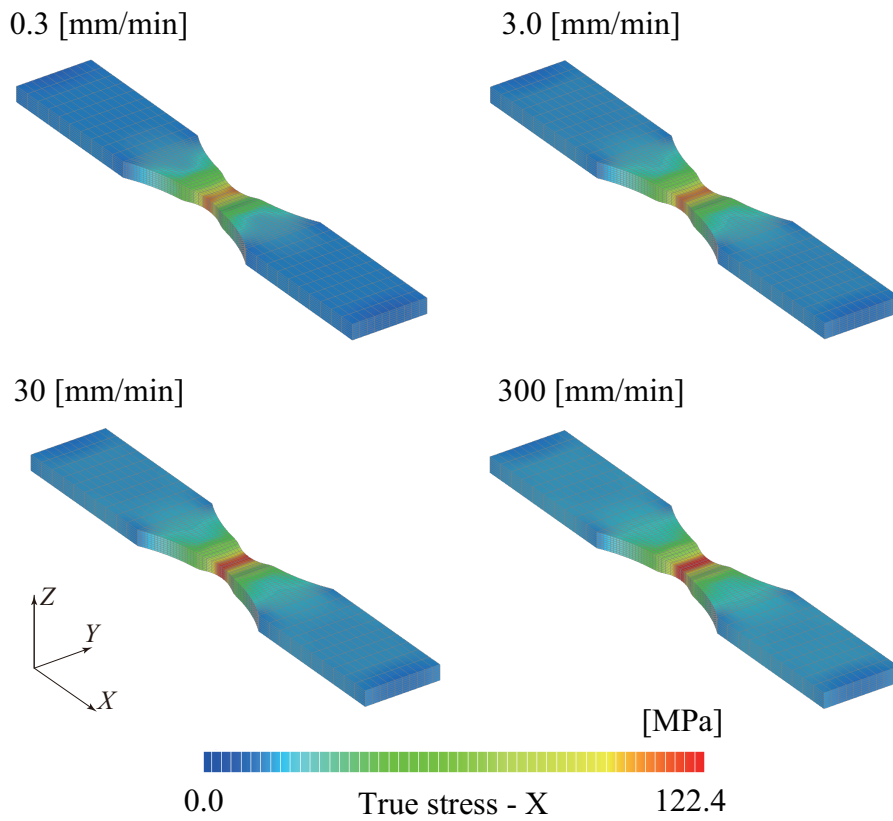


図-3.11 引張試験に対する負荷速度別の再現解析で得られた試験片モデルの最終的な変形状と X 方向真応力分布

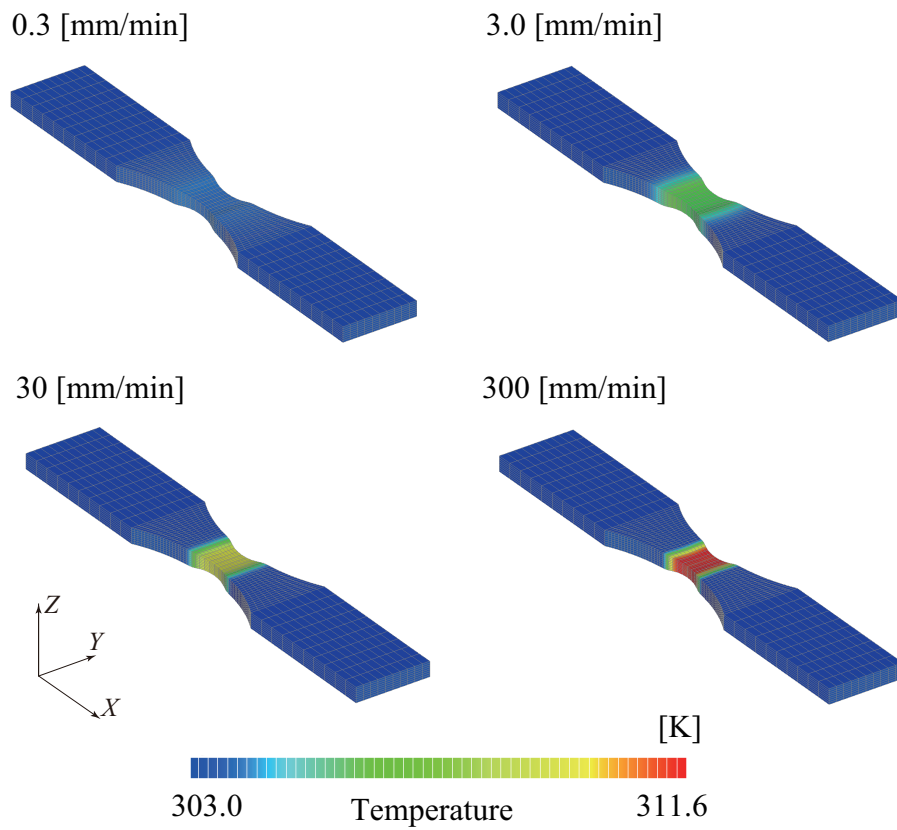


図-3.12 引張試験に対する負荷速度別の再現解析で得られた試験片モデルの最終的な変形形状と温度分布

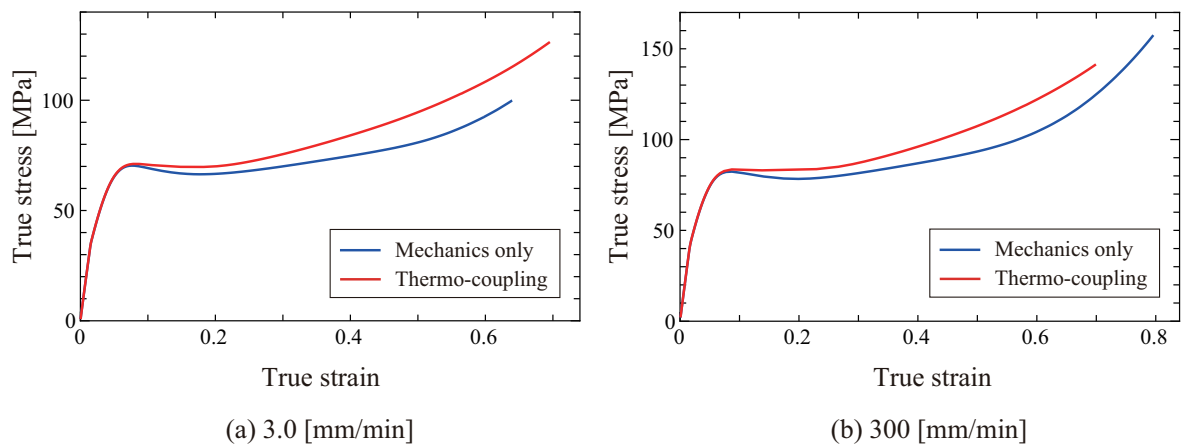


図-3.13 引張試験の再現解析で得られた真応力-真ひずみ関係の比較

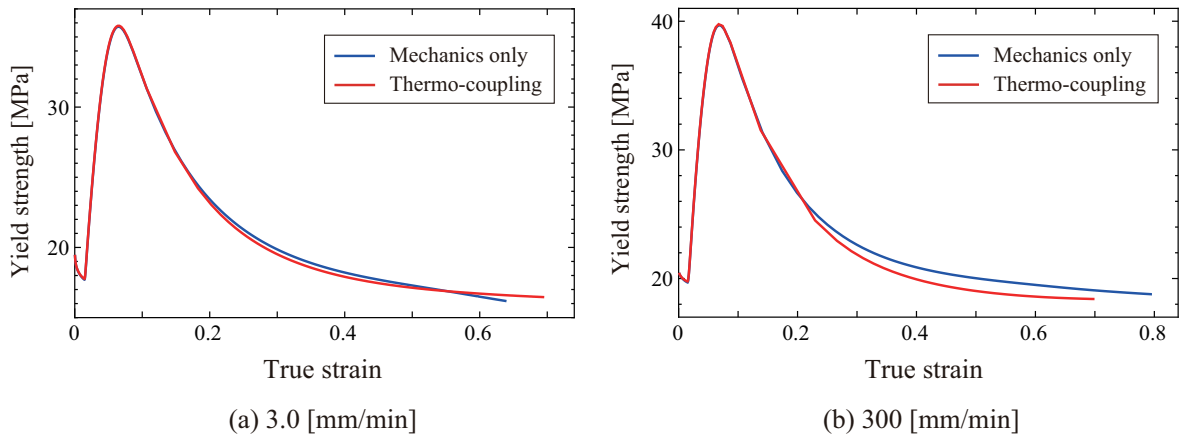


図- 3.14 引張試験の再現解析で得られた降伏応力-真ひずみ関係の比較

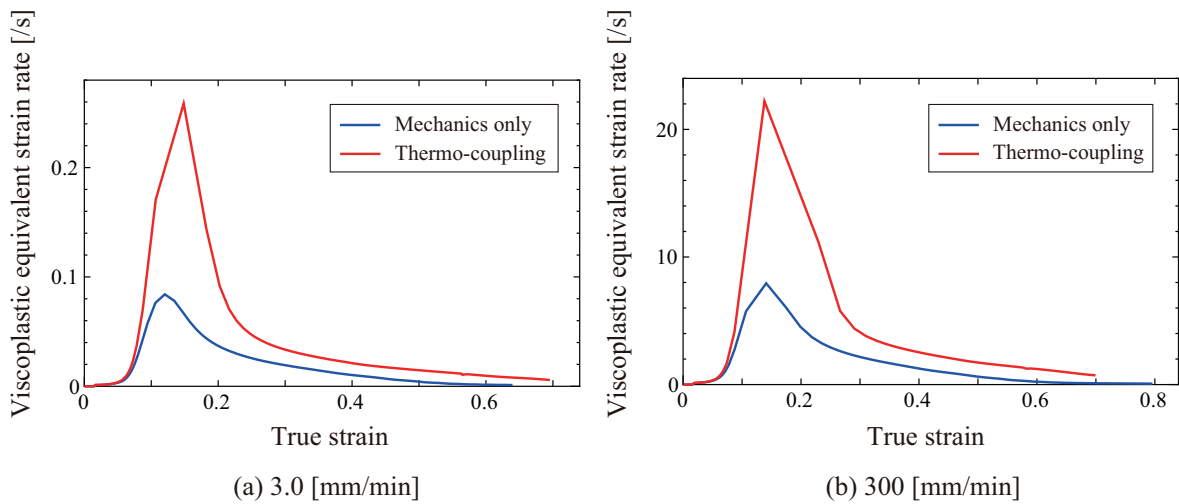


図- 3.15 引張試験の再現解析で得られた粘塑性乗数-真ひずみ関係の比較

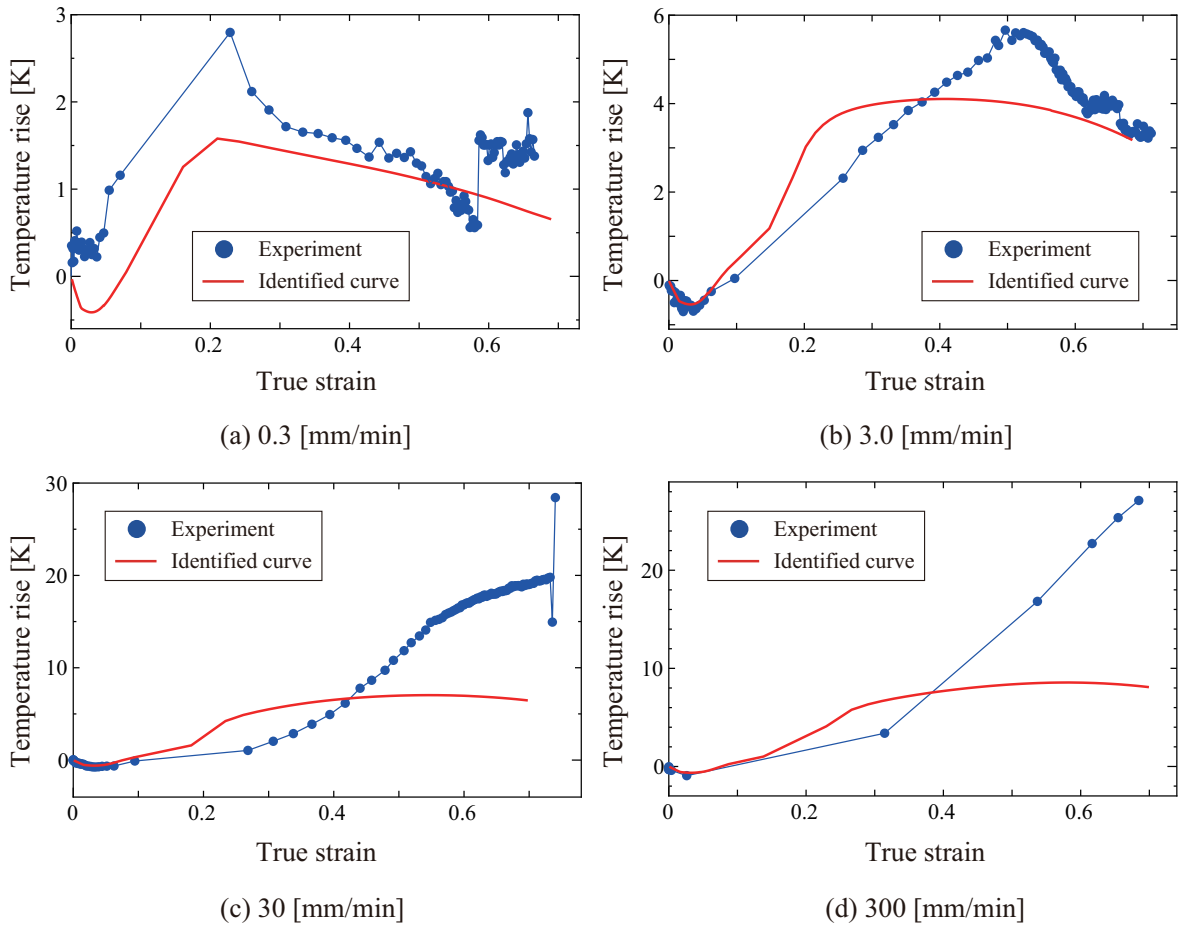


図-3.16 引張試験に対する負荷速度別の再現解析で得られた温度上昇量のDIC計測結果との比較

第4章 FRTP に対するミクロ構造の非定常性を 考慮した数値材料試験

4.1 はじめに

第1.4節で示したように、FRTPは熱可塑性樹脂を母材としており、そのクリープ特性を反映して強く環境温度や負荷速度に依存する。さらに、母材は、ひずみ軟化現象を呈することで大きく発熱するため、特に変形が卓越すると考えられる材料界面近傍では大きな温度上昇が観測され、逆に自身の材料特性にも影響を与える。つまり、多種の環境温度、負荷速度条件を想定したFRTPからなる構造物のマクロな熱・機械連成特性を正確に評価するためには、ミクロ構造内の自己発熱に起因する温度場と変形場の非定常な相互作用を考慮したマルチスケール強度評価手法を構築しなければならない。ところが、これまでの数学的均質化法では、複合材料の空間スケールに対する分離のみを考えており、ミクロスケールとマクロスケール間で生ずる現象の進展時間に関しては一切、考慮していないため、マクロ的には非定常問題として扱われるケースにおいても必然的にミクロ構造内の物理量は常に定常状態であると仮定されてしまう。これは、材料界面近傍で発生した自己発熱による温度上昇がミクロ構造全体に伝導する際のミクロ材料物性の非定常な変化をマクロな物理量に反映できないことを意味している。さらに、このようなミクロな非定常性がマクロな物理量に与える影響について検討した先行研究すら見当たらない。

そこで本章では、FRTP 母材の発熱に起因する変形と温度場の非定常性を考慮したマルチスケール解析手法の構築を意図して、前章で構築した増分ポテンシャル法に基づく熱・機械連成解析手法を適用してユニットセルの熱・機械連成解析による数値材料試験を実施し、得られた結果からマイクロな非定常性を考慮したマクロな熱・機械連成特性に関する考察を行う。特に、マイクロ構造内の変形と温度場の時刻変化の兼ね合いがマクロな熱・機械連成特性にどのような応答差を与えるかというところに興味があり、負荷速度やユニットセル寸法を複数水準設定した解析を実施して、得られた結果を比較する。

第4.2節では、数値材料試験を実施するにあたっての解析条件やマクロな熱・機械連成特性の取得方法を示す。第4.3節では、熱・機械連成解析による数値材料試験の結果をマイクロ物質点断熱の条件下で簡易的に発熱量を算出した数値材料試験の結果と比較することで、マイクロ構造内の非定常な変形と温度場がマクロ熱・機械連成特性に及ぼす影響を考察する。本節の最後には、分離型マルチスケール解析手法に応用する際に必要となるマクロな熱・機械連成特性のモデル化に関する検討を示す。第4.4節では、複数の異なるマクロ負荷速度水準に対する数値材料試験を実行し、負荷速度がマクロな熱・機械連成特性に与える影響について考察する。最後に第4.5節では、寸法差の異なる2つのユニットセルに対して数値材料試験を実施し、得られた解を比較することによってユニットセル寸法の依存性について考察する。

4.2 熱・機械連成解析による数値材料試験

機械変形に関する数値材料試験⁹³⁾とは、図-4.1に示すようにユニットセルに対して各軸方向の基本的変形モードを与えて平衡方程式を解き、得られたマイクロ応力に対して次式で示すマイクロ構造における空間的平均化を施すことによってマクロ応力を算定

するための仮想的な実験の手法である。

$$\mathbf{P}^M(\mathbf{x}) = \frac{1}{|Y_0|} \int_{Y_0} \mathbf{P}^m(\mathbf{x}; \mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (4.1)$$

ここで、 \mathbf{P}^M , \mathbf{P}^m , Y_0 はそれぞれマクロ第一 Piola-Kirchhoff 応力, ミクロ第一 Piola-Kirchhoff 応力, ユニットセル領域であり, \mathbf{x} , \mathbf{y} はそれぞれマクロスケール, ミクロスケールと呼ばれ, マクロとミクロの測度となる座標系である。また, 本研究では次式で定義するマクロ温度を導入することによって, 熱に関する数値材料試験を実施し, ミクロ構造内の発熱やその後の非定常熱伝導に起因したマクロな温度変化を考察する。

$$T^M(\mathbf{x}) \equiv \frac{1}{|Y_0|} \int_{Y_0} T^m(\mathbf{x}; \mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad (4.2)$$

ここで, T^M , T^m はそれぞれマクロ温度とミクロ温度である。

また, 本章にて用いるユニットセルは図-4.2 に示すような 6 面体一次要素を用いて節点数 4165, 要素数 3072 で構成された一方向強化材とし, 実在の繊維材を想定するために, その材料モデルには次式で示すような Bonet と Burton¹¹⁵⁾ が提案した横等方性を有する異方性超弾性モデルを用いる。

$$\begin{aligned} \rho_0 \psi^{\text{fiber}}(\mathbf{F}, T) = & \frac{\lambda}{2} (J - 1)^2 - \mu \ln J + \frac{\mu}{2} (I_1 - 3) \\ & + [\alpha + \beta \ln J + \gamma (I_4 - 1)] (I_4 - 1) - \frac{\alpha}{2} (I_5 - 1) \\ & - 3\alpha_{\text{th}} K \ln J (T - \theta_0) + \rho_0 c \left[T - \theta_0 - T \ln \left(\frac{T}{\theta_0} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.3)$$

ここで, I_1 , I_4 , I_5 は次式で定義される右 Cauchy-Green テンソルに関する第一, 第四, 第五不変量である。

$$I_1 = \frac{1}{2} \text{tr}(\mathbf{C}), \quad I_4 = \mathbf{A} \cdot \mathbf{C} \mathbf{A}, \quad I_5 = \mathbf{A} \cdot \mathbf{C}^2 \mathbf{A} \quad (4.4)$$

なお, \mathbf{A} は繊維材の配向方向を表す単位ベクトルである。また, K , λ , μ , α , β , γ は次

式で定義される異方性弾性係数である.

$$\begin{aligned} K &= \frac{3\lambda + 2\mu}{3}, \quad \lambda = \frac{E_t\nu_t + E_f\nu_t^2}{a(1 + \nu_t)}, \quad a = 1 - \nu_t - \frac{2E_f\nu_t^2}{E_t}, \quad \mu = \frac{E_t}{2(1 + \nu_t)} \\ \alpha &= \mu - \frac{E_f}{2(1 + \nu_f)}, \quad \beta = \frac{\nu_t^2(E_t - E_f)}{4a(1 + \nu_t)}, \quad \gamma = \frac{E_f(1 - \nu_t)}{8a} - \frac{\lambda + 2\mu}{8} + \frac{\alpha}{2} - \beta \end{aligned} \quad (4.5)$$

ここで, E_t, ν_t, E_f, ν_f はそれぞれ繊維配向の直交方向におけるヤング率, ポアソン比と繊維配向方向におけるヤング率, ポアソン比である. また, α_{th}, θ_0, c はそれぞれ熱膨張係数, 基準温度, 比熱である. なお, 実際の繊維材として東レの T300-3000¹¹⁶⁾ を想定し, 文献¹¹⁸⁾ から得られる材料パラメータを表-4.1 に示す. 最後に, 雰囲気温度は 30 °C とし, 境界条件は変位と温度に周期境界条件と, 剛体変位を防ぐ目的でのユニットセル中心部の一点の節点の変位を固定する.

4.3 ミクロ構造内の非定常性が巨視的力学応答に及ぼす影響

本節では, 熱・機械連成解析による数値材料試験 (Thermo-coupling) の結果をミクロ物質点断熱の条件下で簡易的に発熱量を算出した数値材料試験 (Self-heat) の結果と比較することで, ミクロ構造内の非定常温度場がマクロ熱・機械連成特性に及ぼす影響を考察する. 解析の制御条件は, マクロ公称ひずみ 40% を 10[%/s] で与えることにする. また, ユニットセルの対称性により, 本節以降も統一して "XX-tensile, ZZ-tensile, XY-shear, YZ-shear" の 4 水準に対する数値材料試験を実施する. さらに, 物質点断熱のみの数値材料試験における時間増分 Δt に対する温度増加量 ΔT は, 後退差分近似を用いて次式で見積ることとする.

$$\Delta T = \frac{\Delta t}{\rho_0 c} (D^{ve} + D^{vp}) \quad (4.6)$$

得られたマクロ真応力-マクロ真ひずみ関係とマクロ温度-マクロ真ひずみ関係を、それぞれ図-4.3と図-4.4に示す。まず、Thermo-couplingとSelf-heatの両者ともに、各方向に対して得られるマクロ応力やマクロ温度が異なる値となっている。これは、ミクロ構造の非均質性に起因したマクロ応答の異方性であり、母材の材料特性を反映した極めて複雑なクリープ挙動が現れている。関連して、“XX-tensile”と“YZ-shear”の関係、ならびに“ZZ-tensile”と“YZ-shear”のマクロ応力に相似性が観察される。これは、“XX-tensile”と“YZ-shear”については母材の変形が卓越する一方で、“ZZ-tensile”と“YZ-shear”については繊維材の変形が卓越するためと考えられる。このことはマクロ温度にも反映されており、繊維材が単なる超弾性体でモデル化されているため、“ZZ-tensile”と“YZ-shear”では繊維材の変形が卓越することで、熱膨張変形に関連する熱・機械連成項が相対的に大きくなることが現れた結果である。すなわち、これは繊維材の断熱膨張の効果が相対的に大きくなっていることを示しており、Thermo-couplingでは変形の増加に伴ってマクロ温度が低下し続ける現象となって観察される。ただし、Self-heatの方では、熱膨張変形に伴うエントロピー変化を考慮していないため、単に母材の発熱の効果のみが反映されて温度増加が観察されている。しかし、Thermo-couplingにおけるこのような大きな温度低下が実現象で認められるとは考えにくい。本来は、繊維材の熱膨張変形によって生じる温度低下を打ち消すような外的な温度供給を考慮しなければならないが、本解析では所与のマクロ温度勾配をゼロに仮定しており、ユニットセルに外的な温度供給が無い場合、このような大きな温度低下が結果として顕著に現れたと考えられる。

一方で、“XX-tensile”と“YZ-shear”については母材の変形が卓越しているため、得られるマクロ応力やマクロ温度に母材特有の力学挙動や非弾性変形による発熱が卓越している。ここで、各マクロ変形域に対するこれらの力学応答を詳しく考察するために、“XX-tensile”の各変形域におけるのミクロ X 軸方向垂直応力場とミクロ温度場の分布を図-4.5

と図-4.6, "XY-shear"の各変形域におけるマイクロXY面せん断応力場とマイクロ温度場の分布を図-4.7と図-4.8に示す。まず"XX-tensile"に関して, [A]までの変形域においてはマクロ応力に Thermo-coupling と Self-heat の間にほとんど差はなく, 対応するマイクロ構造内の応力分布もほとんど変わらない。マクロ温度場に関しても Thermo-coupling の方で断熱膨張による温度低下が確認されるものの, この変形域までは両者に明確な差は現れない。これは, 母材の粘弾性発熱が極めて微量であり, その剛性も低いために断熱膨張の効果がほとんど現れないことが起因していると考えられる。その後, ひずみ軟化を伴って [B] に到達すると両者のマクロ応力とマクロ温度に明確な差が現れ始める。Thermo-coupling の方では, 繊維材の界面近傍において圧縮応力が発生しており, これが繊維材の変形を抑制するため, ユニットセル境界面近傍で観察されるべき母材の応力集中が, 対応する Self-heat の結果よりも弱くなっている。また, Thermo-coupling の方では, 理論的に散逸エネルギーの熱変換効率が自然に考慮されているため, Self-heat で観察される発熱量より低く見積もられる。結果として母材の温度は低めに算出されることは必然的であるといえる。その後, [C] に到達すると, Thermo-coupling の方では, マクロ応力が停滞し続けているのに対して, Self-heat のマクロ応力はその変形に対する勾配が増加し続けていることがわかる。一方, マクロ温度量に関しては Self-heat の方は線形的な増加傾向が観察されるのに対して, Thermo-coupling の方では, 温度が極大点に達している。これは恐らく Thermo-coupling の方では, 母材に働く圧縮応力がこの変形域を起点として母材全体の応力を低下させることで弾性状態の割合を増やし, 粘塑性変形が抑制されることで, 非定常熱伝導による温度の低下として現れたものと考えられる。事実, [D] においてマイクロ構造内の応力は非常に小さく, 温度が高い領域も確実に減っている。このように, "XX-tensile"については Thermo-coupling のひずみ軟化に伴う圧縮応力分布の発現が両者のマクロ的な熱・機械連成特性に大きな影響を与えると結論付けられる。

一方, "XY-shear" に関しても, [A] までの変形域においては両者の間で明確な結果の差は観察されない. ひずみ軟化を伴って [B] に到達すると, 微量ながら Self-heat の方がマクロ温度が高くなっている. しかし, "XX-tensile" とは異なり, ひずみ軟化が生じたとしてもすぐに結果に差が現れるわけではなく, [C] 付近に到達した段階で, 明確な差が現れ始める. これは, "XX-tensile" で観察された断熱膨張が "XY-shear" ではほとんど生じておらず, Thermo-coupling と Self-heat の間で環境条件にほとんど差が出ていないことに起因すると考えられる. ところで, [C] におけるマクロ応力やマクロ温度に関して, "XX-tensile" のときとは, 両者の間で全く逆の傾向が観察されている. これはミクロ構造内の応力分布が Self-heat の場合は, 母材と繊維材の応力差が小さいのに対して, Thermo-coupling の場合は, 繊維材部分の応力集中が生じていることに起因している. つまり, 両者の間でのマクロ応力の差は繊維材の応力によるものであり, これが樹脂の応力差によって異なる結果が得られたに "XX-tensile" とは逆の傾向が現れる原因になっている. また, [D] において Thermo-coupling のミクロ温度分布は比較的全体に渡っていることが特徴として挙げられる. また, 対応する応力分布は繊維材部分の応力集中が顕著となっている. つまり, "XY-shear" におけるミクロ構造内の非定常熱伝導は他のモードにおけるそれよりも早く進展しており, ミクロ構造内で全体的に温度が高くなっていることが, Thermo-coupling の解析では高いマクロ温度が算定される原因として考えられる.

以上のように, ミクロ構造内におけるの発熱に起因した非定常性熱伝導を考慮すると, すべての変形モードに対して明確な差が現れ, 特に非晶性熱可塑性樹脂の場合では大きな発熱が見込まれるひずみ軟化域以降でそれが卓越することが数値的に評価可能となることが例証された.

ところで, 標準的な分離型マルチスケール解析手法のアプローチは, 上述の例題で観察されたような, 異方性マクロ力学応答を十分に再現しうる異方性材料構成則をあ

あらかじめ設定しておき、数値材料試験によって得られた仮想的な実験データによって、関連する材料パラメータを同定することでマクロ力学挙動をモデル化することである。このとき、これまでの分離型マルチスケール解析手法を拡張する形で、マイクロな非定常性を考慮したマクロな熱・機械連成特性をモデル化するためには、増分ポテンシャル法の考え方を活かしてマクロエネルギー関数をあらかじめ設定し、上述の例題で示した数値材料試験の結果から、関連するパラメータを同定することが有効であると考えられる。具体的には、自由エネルギーのひずみや温度に関する勾配はそれぞれ応力とエントロピーであるため、数値材料試験によってマクロ自由エネルギーのマクロひずみやマクロ温度との関係性を算出することで、マクロ力学応答やマクロな非定常性の度合いを見積もることができると期待される。また同様の考え方で、双対散逸ポテンシャルの内部変数速度や温度に関する勾配はそれぞれ熱力学的駆動力や発熱量であるため、数値材料試験によってマクロ双対散逸ポテンシャルのマクロ内部変数速度やマクロ温度との関係性を導出することで、マクロな非弾性応答やマクロ発熱量を見積もることができると期待される。したがって、数値材料試験によってマクロエネルギー関数のマクロ状態変数との関係性を算出することで、マクロな熱・機械連成特性をモデル化可能であることが期待される。

4.4 負荷速度に対する依存性

前章でも示したように、負荷速度が異なると所要の変形域における温度の空間的な分布が異なるため、最終的な熱・機械連成特性がこれに依存して変化することになる。そこで本節では、複数の異なるマクロ負荷速度水準に対する数値材料試験を実行し、負荷速度がマクロな熱・機械連成特性に与える影響について考察する。解析の制御条件には、4.0[s]間でマクロ公称ひずみが40%(10[%/s])となるような拘束を与えるもの(middle)を基本とし、400[s]間でマクロ公称ひずみが40%(0.1[%/s])を与えるもの(fast)

と 0.4[s] 間でマクロ公称ひずみが 40%(100[%/s]) を与えるもの (slow) を加えた 3 水準を用意した。

得られたマクロ真応力-マクロ真ひずみ関係とマクロ温度-マクロ真ひずみ関係をそれぞれ図-4.9 と図-4.10 に示す。まず、繊維配向方向の変形モードである”ZZ-tensile”と”YZ-shear”については、マクロ温度にわずかな差が表れるが、マクロ応力に関しては全く差が現れていない。これは、繊維材の変形が卓越することで母材の発熱による応答差が消されてしまったためである。したがって、以下では明確に応答差が現れた”XX-tensile”に絞って考察を進めることとする。”XX-tensile”に対する力学応答を詳しく考察するために、この各変形過程におけるのミクロ X 軸方向垂直応力場とミクロ温度場の分布を図-4.11 と図-4.12 に示す。まず”XX-tensile”に関して、[A] までの変形過程においては母材の粘弾性が卓越して、マクロ応力の速度依存性が表れている。また、母材の熱膨張変形に伴う断熱膨張にも粘弾性の影響が現れており、剛性が高くなる fast の温度低下量が最も大きくなっている。その後、ひずみ軟化域に対応する [B] において全水準のマクロ温度が一致している様子が確認される。しかし、ミクロ構造の温度分布を観察するとその様相は全く非常に異なっている。恐らく、母材の発熱に伴う高温部分と断熱膨張による繊維材の低温部分が平均化操作によって相殺された結果であり、その後の傾向としてはひずみ軟化に伴う発熱量が大きい fast の水準が最も高いマクロ温度となる。また、ミクロ温度場について負荷速度が速いほど繊維材部分の温度が低くなっていることが特徴として挙げられる。これは負荷速度と非定常熱伝導の速度の兼ね合いによってもたらされる現象であり、負荷速度が遅いほど繊維材に熱が伝導し、より一様な温度分布となろうとする傾向が観察されることになる。さらに負荷を続け、[C] に到達すると、マクロ温度に明確な差が現れている。同時に、この変形域からミクロ構造内で圧縮応力が生じ始めている。これも、繊維材の断熱膨張がもたらす効果であり、負荷速度水準が小さいほどミクロ構造内の温度分布が一様となるため、圧縮応

力もほとんど発生しない。最後に、[D]に到達すると、母材の配向硬化によって全水準のマクロ応力が上昇し始め、マクロ温度は極大点を境に減少していく。これも配向硬化現象の発現によって母材の弾性変形の割合が増加し、非弾性変形による新たな発熱が抑制されながら、非定常熱伝導が進展するため、マクロ温度の低下となって現れるものと考えられる。

このように、母材の変形が卓越するモードに限っては負荷速度と非定常熱伝導の速度の兼ね合いによってマクロな熱・機械連成特性に影響を及ぼすことを例証することができた。

4.5 ユニットセルの寸法依存性

これまでの均質化理論では、マイクロ構造の寸法依存性は対応するマクロ挙動に影響を与えないとされてきた。しかし、温度の空間的な伝導形態はマイクロ構造の寸法に依存するはずであり、自ずとマクロな熱・機械連成特性に影響を与えると考えられる。したがって、本研究では図-4.2に示すように、各方向の寸法差が10倍異なる2つのユニットセル（StandardとSmall）に対して数値材料試験を実施し、得られた解を比較することによってユニットセル寸法の依存性について考察する。なお解析の制御条件は、4.0[s]間でマクロ公称ひずみ40% (10[%/s])の変形を与えることにする。

得られたマクロ真応力-マクロ真ひずみ関係とマクロ温度-マクロ真ひずみ関係をそれぞれ図-4.13と図-4.14に示す。本結果を観察すると、全モードに対するマクロ応力及び、マクロ温度に関してほとんど差が現れなかった。つまり、ユニットセル寸法の差は負荷速度や非定常熱伝導の速度の差に相似ではなく、発熱によって生じた温度増加が即座にユニットセル全体に伝導するほど寸法を小さく設定しない限り、マイクロな物理量の非定常性がマクロな物理量にほとんど反映されないことが判明した。

4.6 まとめ

本章では、FRTP母材の発熱に起因する変形と温度場の非定常性を考慮したマルチスケール解析手法の構築を意図して、前章で構築した増分ポテンシャル法に基づく熱・機械連成解析手法を適用してユニットセルの熱・機械連成解析による数値材料試験を実施し、得られた結果からミクロな非定常性を考慮したマクロな熱・機械連成特性に関する考察を行った。まず、ミクロ物質点断熱の条件下で簡易的に発熱量を算出した数値材料試験の結果と比較すると、両者のユニットセル内における変形と温度場は明確に異なっており、それが両者のマクロな熱・機械連成特性の差となって現れていることを確認した。特に、繊維材の配向方向に対応するモードに関しては、断熱膨張の効果が支配的となり、マクロ的には大きな温度低下として観測された。さらに、複数の負荷速度水準を設定した解析結果からは、ユニットセル内の変形と温度場の時刻変化の兼ね合いを明確に観察することができた。特に、最も負荷速度が遅い水準0.1[%/s]においては発熱によって上昇した温度がユニットセル全体に伝導するのに十分な時間を有しており、疑似的な定常状態として観測された。最後に、各方向の寸法差が10倍異なる2つのユニットセルを設定して、これらのマクロな熱・機械連成特性の差を比較した。しかし、両者の応答差はどのモードに対してもほとんど観測されず、ミクロな非定常性を反映したマクロな熱・機械連成特性のユニットセル寸法に対する依存性は非常に小さいことがわかった。

Macroscopic deformation gradient : $F^M = \mathbf{1} + H^M$ (symbol “•” = constraint)

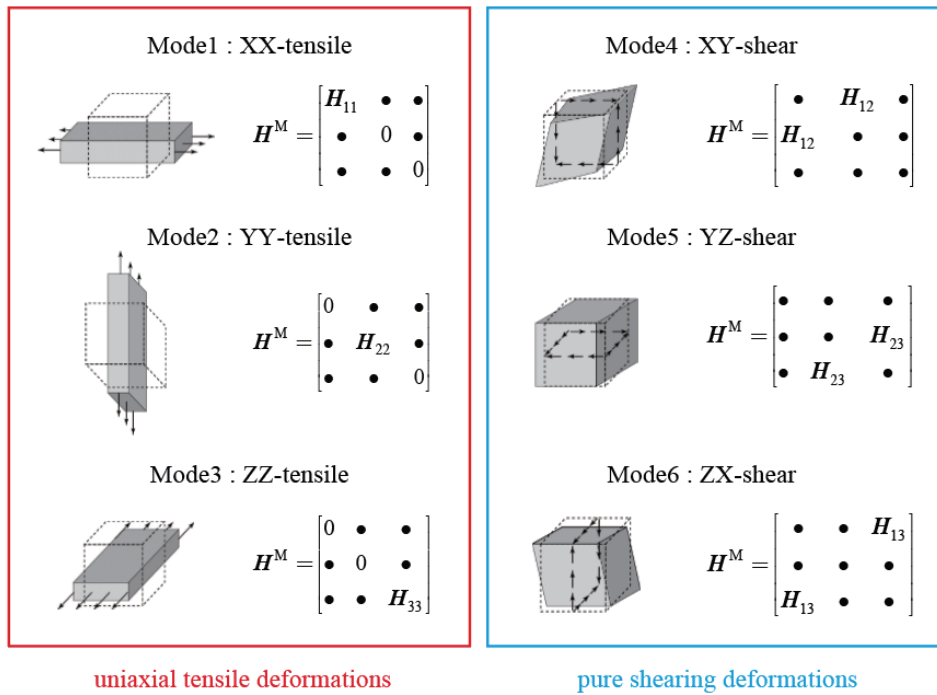


図- 4.1 数値材料試験における各マクロ変形モード

表- 4.1 繊維材の材料パラメータ

Parameter	E_t [MPa]	ν_t	E_f [MPa]	ν_f	ρ_0 [t/mm ³]
	1.40×10^4	0.125	2.24×10^5	0.2	1.76×10^{-9}
Parameter	α_{th} [/K]	c_0 [N · mm / (t · K)]	κ [t · mm / (s ⁻³ · K)]	A	
	1.0×10^{-4}	0.75×10^9	10.0	$(0, 0, 1)^T$	

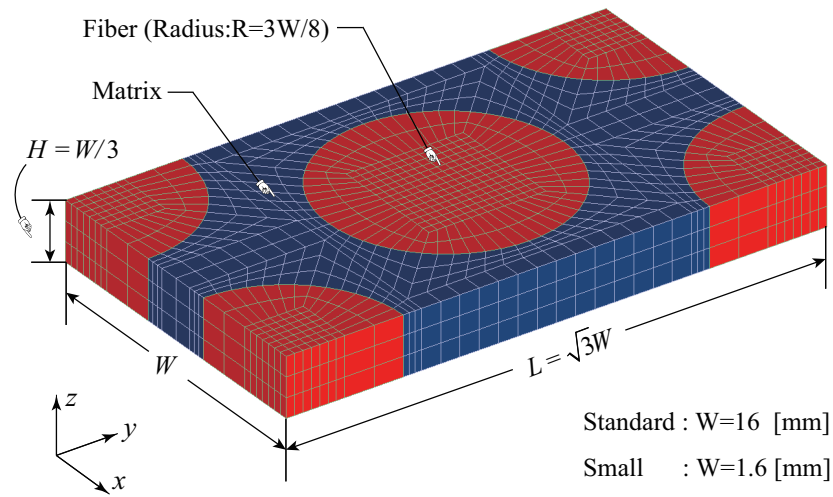


図-4.2 一方向強化材モデル

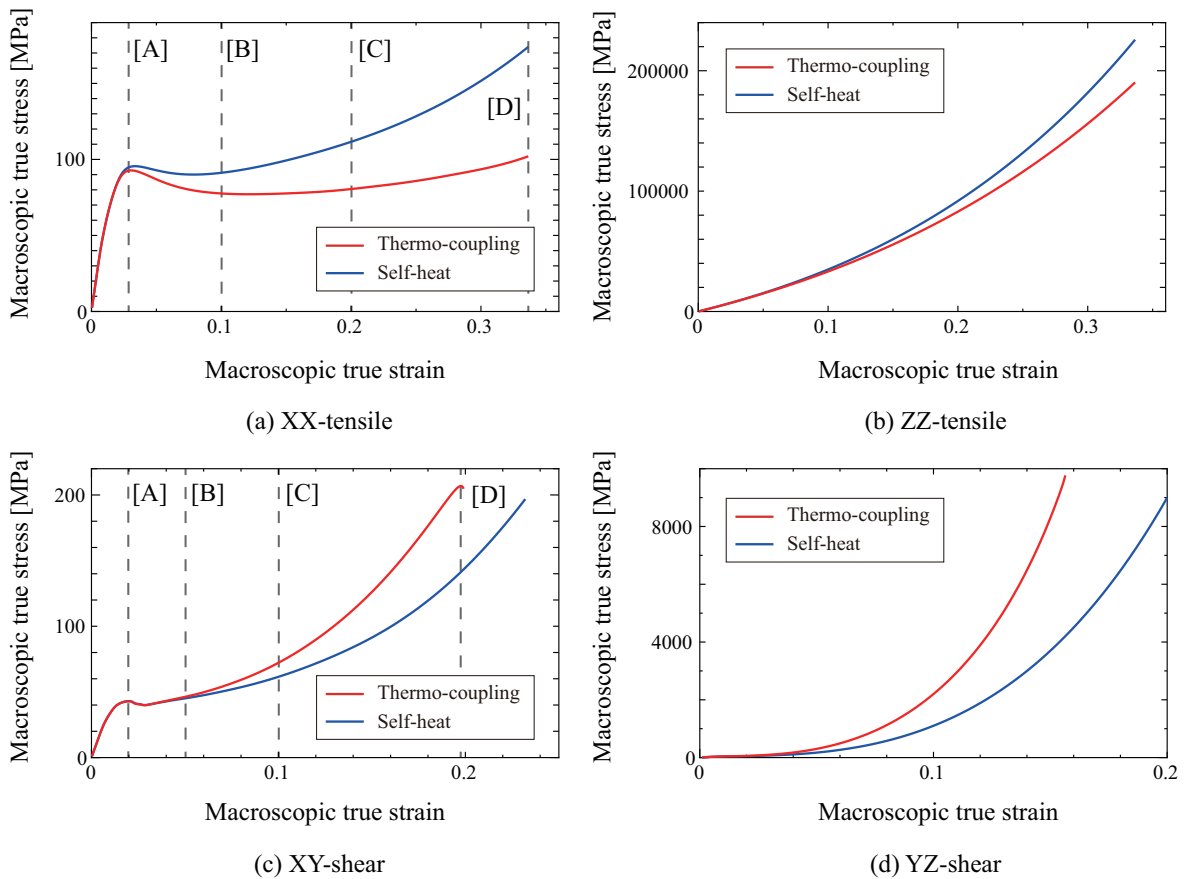


図-4.3 数値材料試験結果：マクロ真応力-マクロ真ひずみ関係

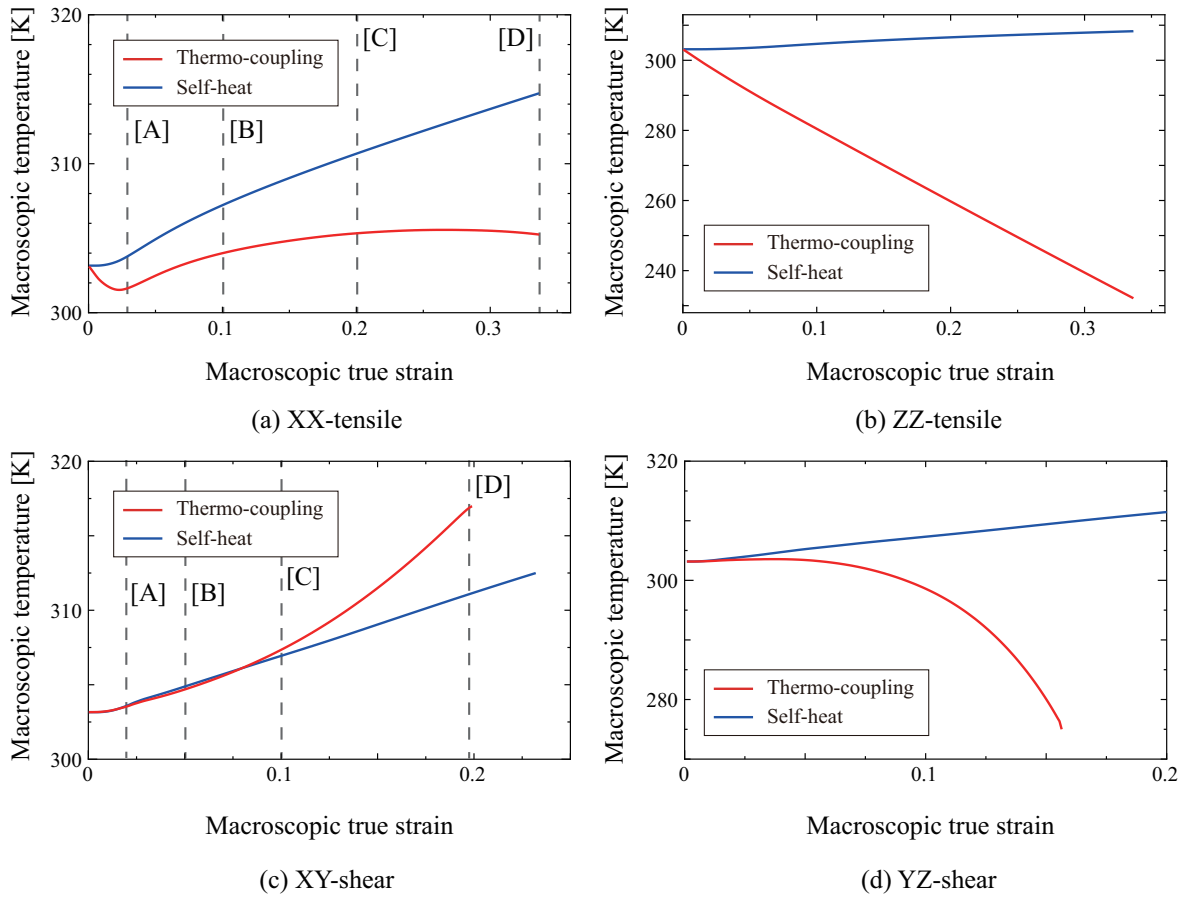


図-4.4 数値材料試験結果：マクロ温度-マクロ真ひずみ関係

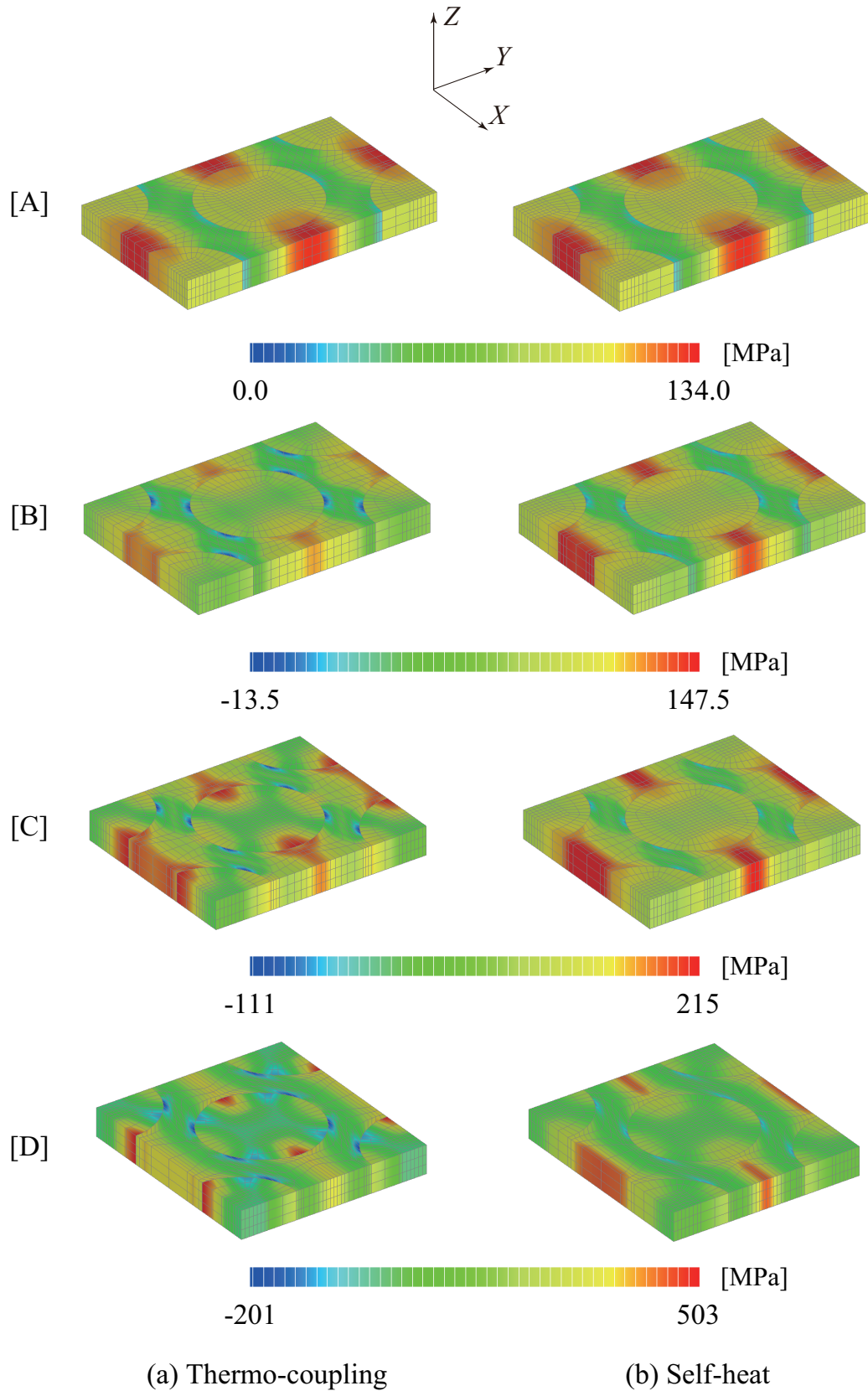


図-4.5 XX-tensile を負荷した数値材料試験で得られたユニットセルの変形形状とマイクロ真応力の X 垂直方向成分の分布 ([A]~[D] は図 4.3(a) 中の各記号に対応)

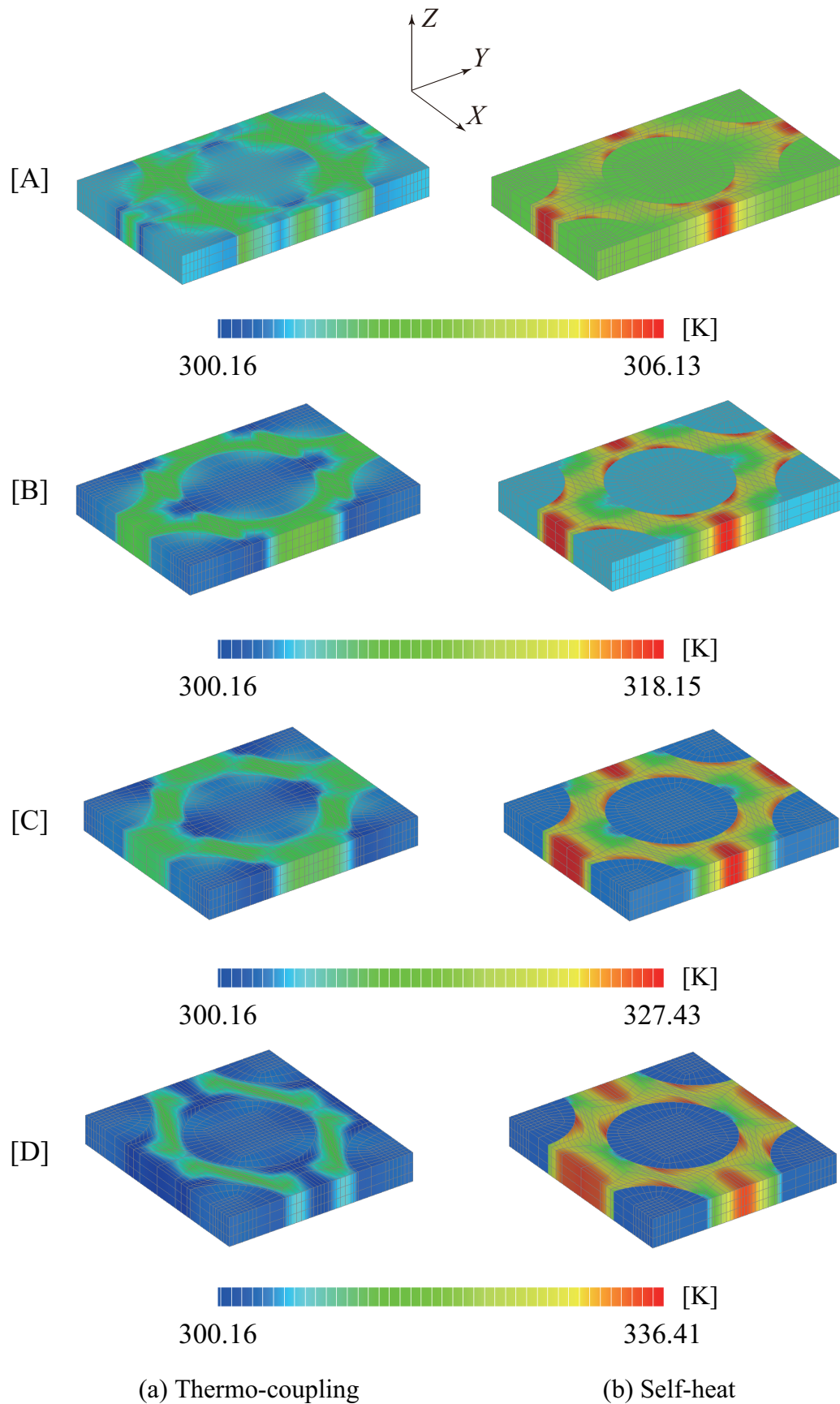


図-4.6 XX-tensile を負荷した数値材料試験で得られたユニットセルの変形形状と温度分布 ([A]~[D] は図 4.4(a) 中の各記号に対応)

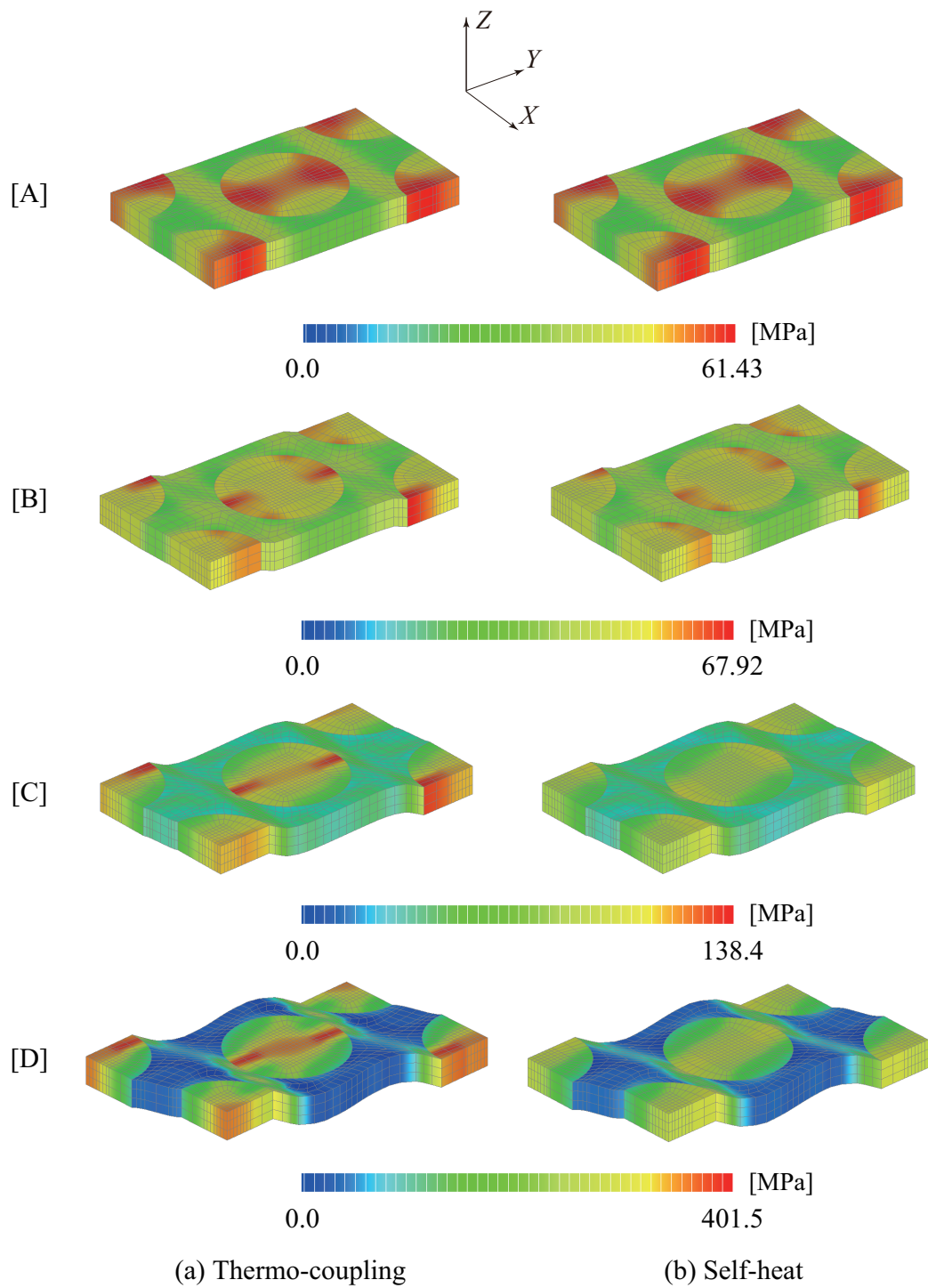


図-4.7 XY-shear を負荷した数値材料試験で得られたユニットセルの変形形状とマイクロ真応力のXY面のせん断方向成分の分布（[A]～[D]は図4.3(c)中の各記号に対応）

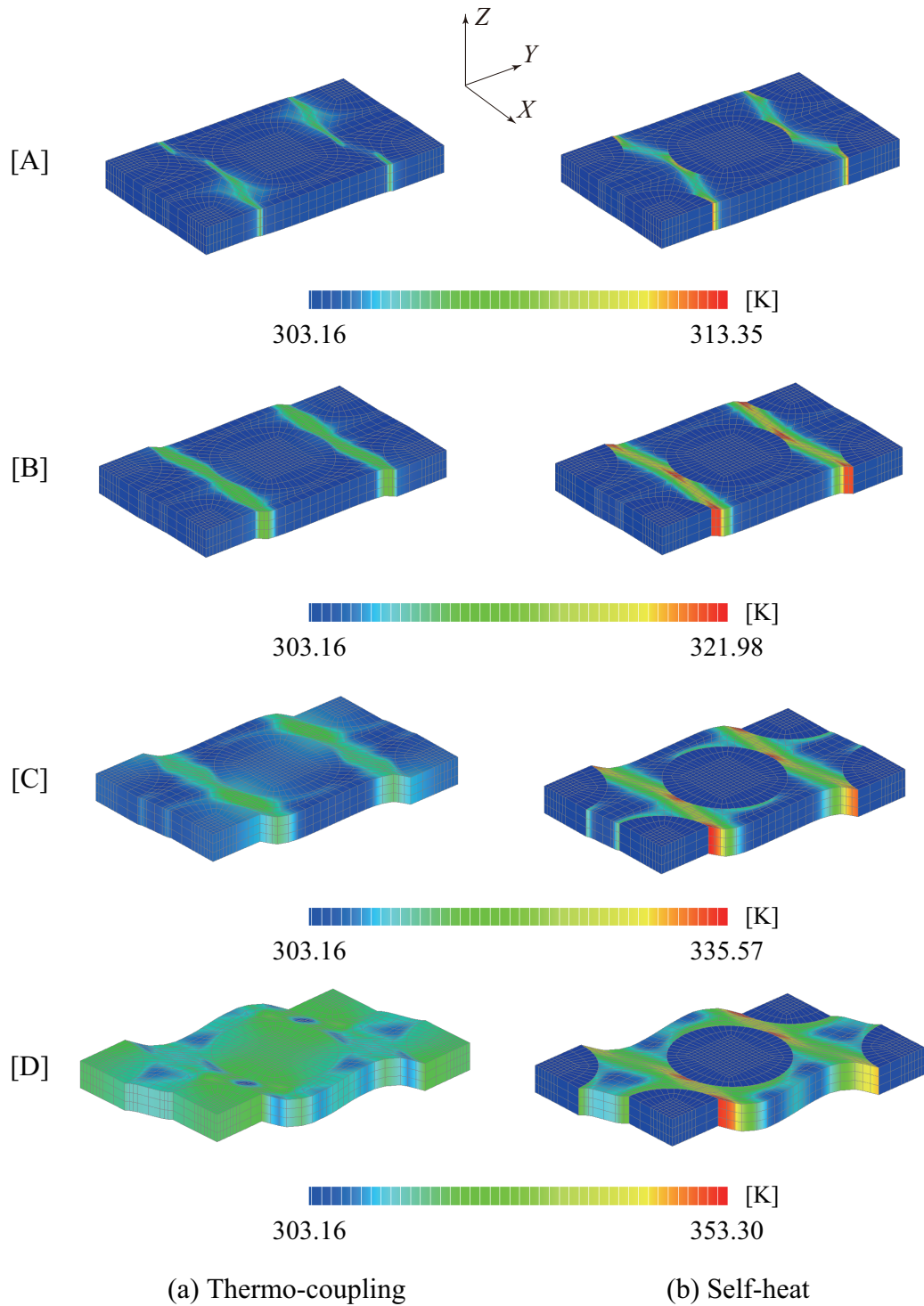


図-4.8 XY-shear を負荷した数値材料試験で得られたユニットセルの変形形状と温度分布 ([A]~[D] は図 4.4(c) 中の各記号に対応)

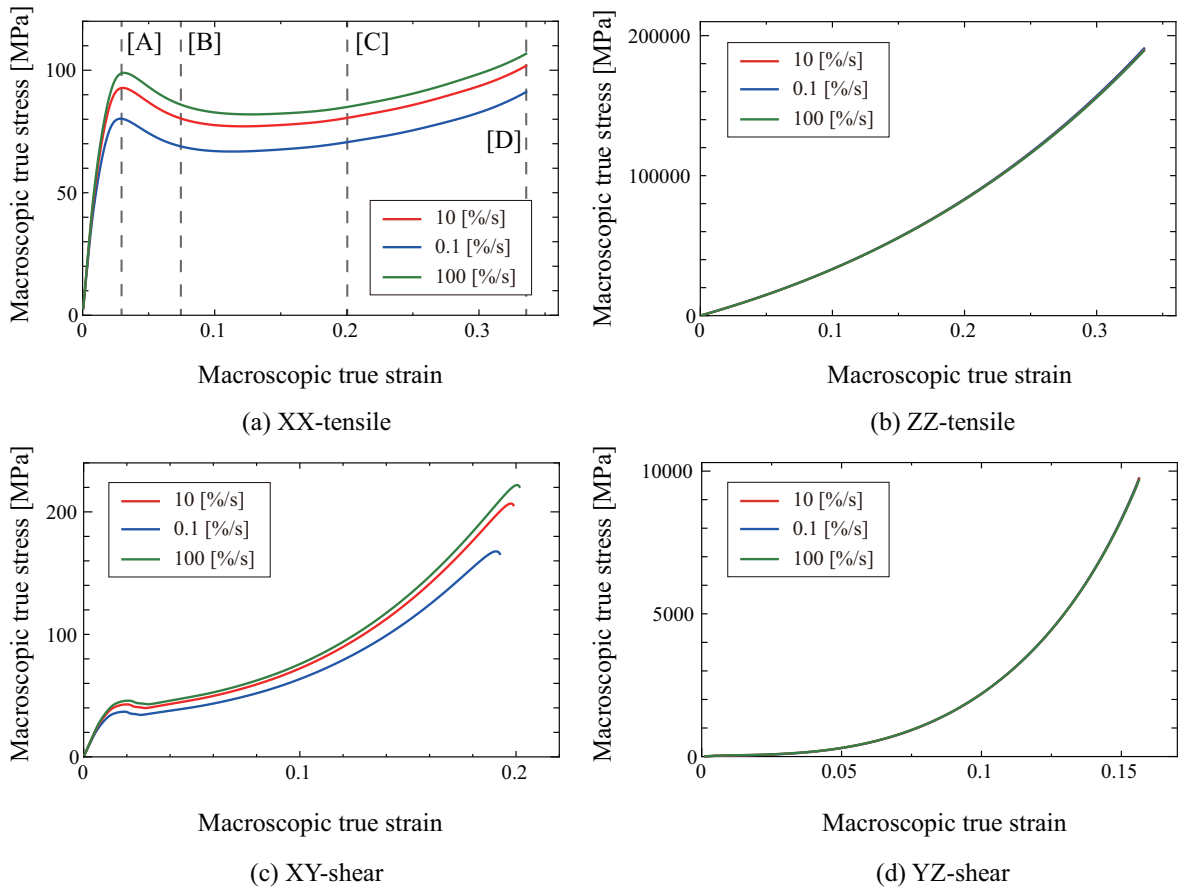


図-4.9 負荷速度別の数値材料試験結果：マクロ真応力-マクロ真ひずみ関係

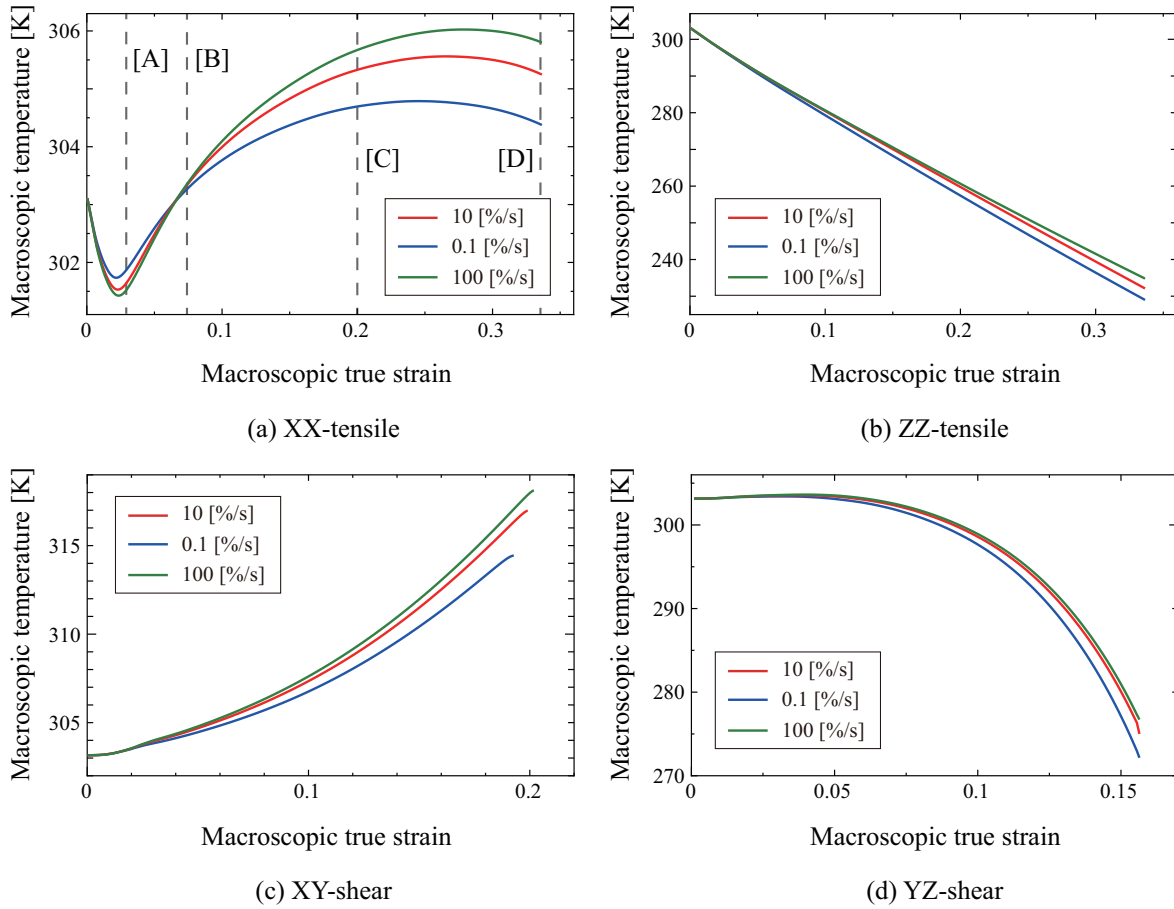


図-4.10 負荷速度別の数値材料試験結果：マクロ温度-マクロ真ひずみ関係

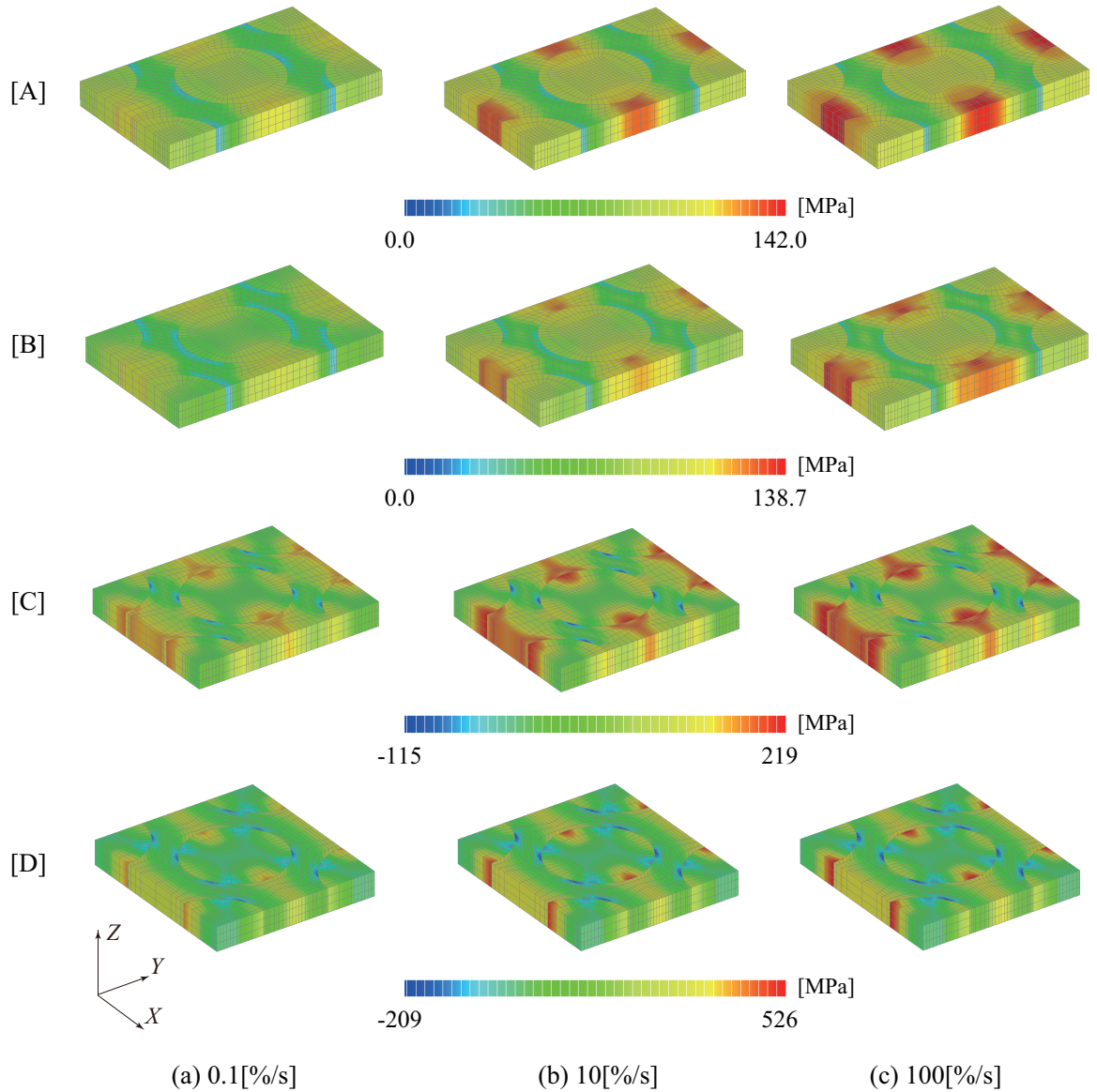


図-4.11 負荷速度別の XX-tensile を負荷した数値材料試験で得られたユニットセルの変形形状とマイクロ真応力の X 垂直方向成分の分布 ([A]~[D] は図 4.9(a) 中の各記号に対応)

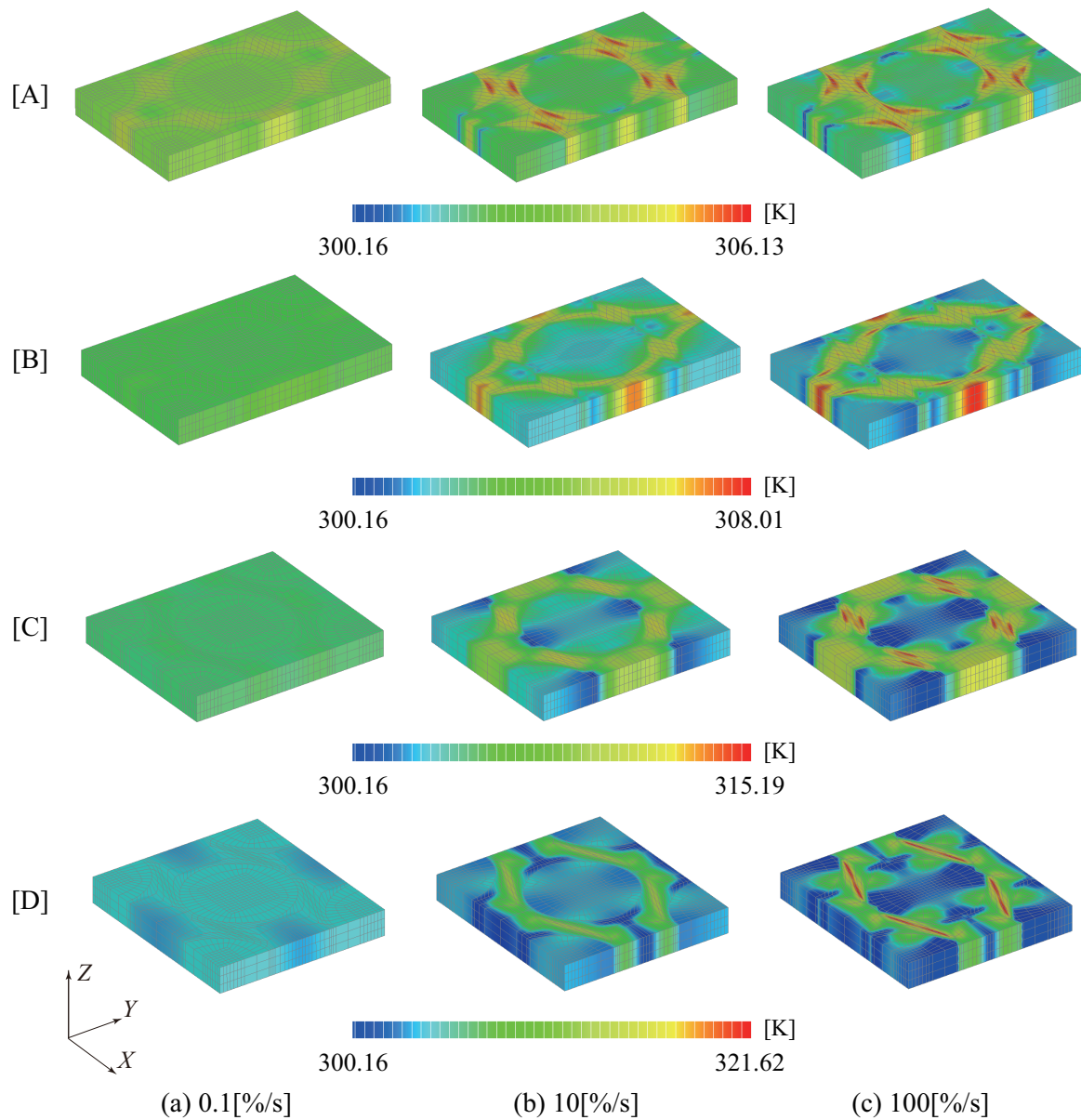


図-4.12 負荷速度別の XX-tensile を負荷した数値材料試験で得られたユニットセルの変形形状と温度分布 ([A]~[D] は図 4.10(a) 中の各記号に対応)

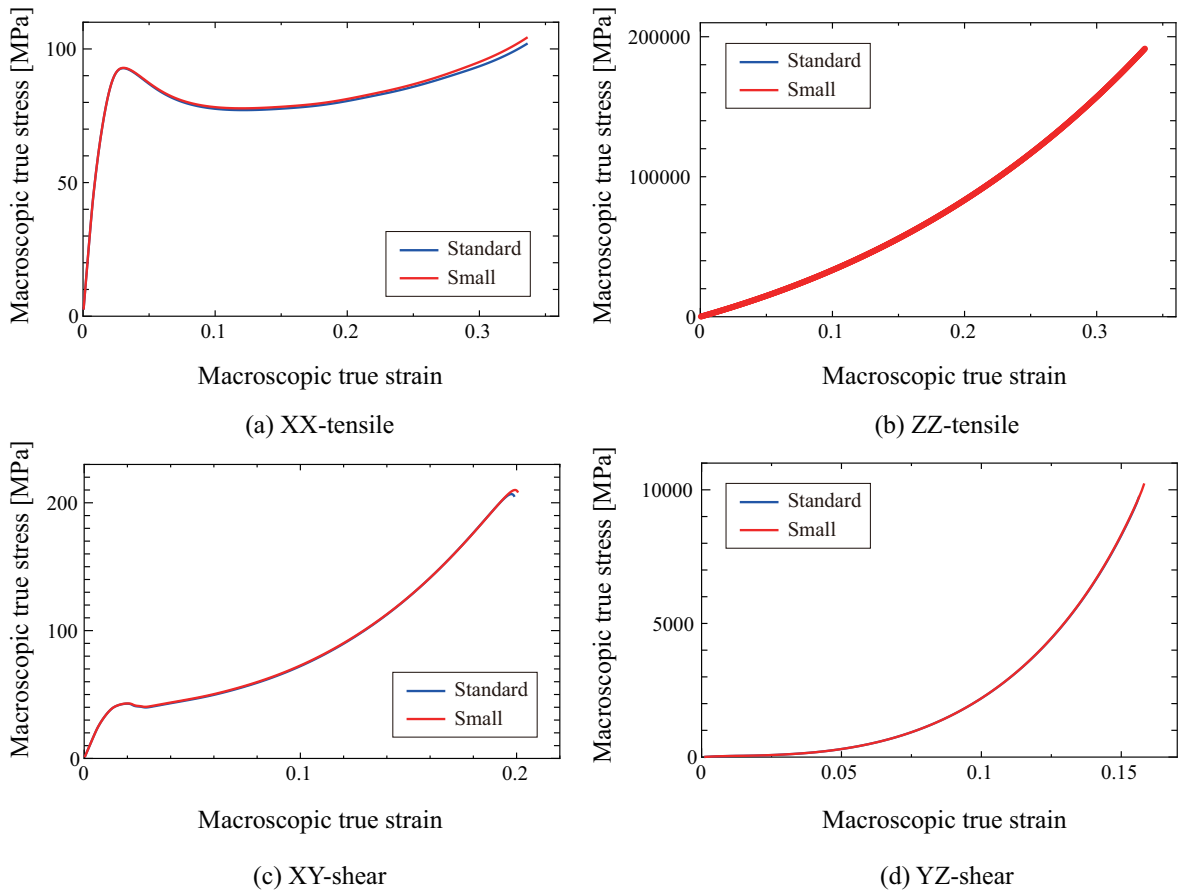


図-4.13 ユニットセル寸法別の数値材料試験結果：マクロ真応力-マクロ真ひずみ関係

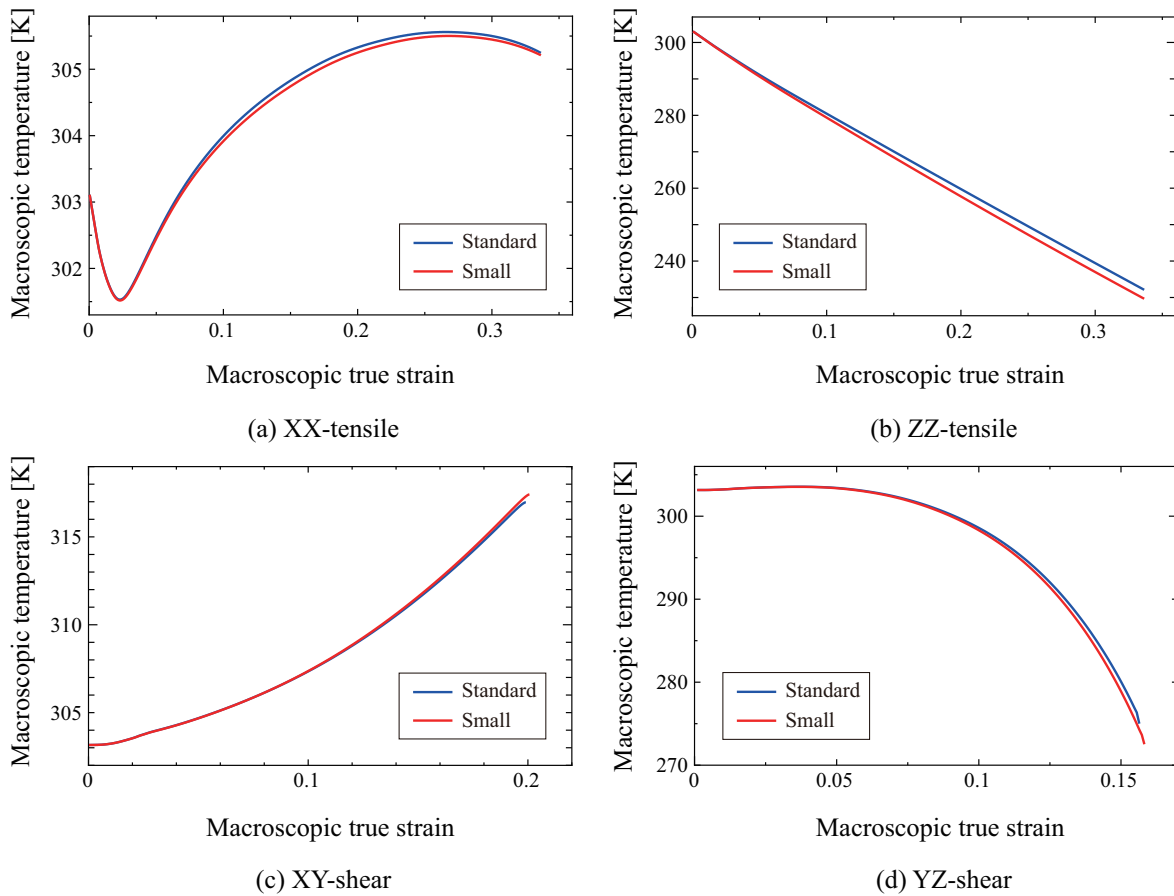


図-4.14 ユニットセル寸法別の数値材料試験結果：マクロ温度－マクロ真ひずみ関係

第5章 結論

本研究では、非晶性熱可塑性樹脂からなる構造物の熱・機械連成強度評価とそのFRTPの変形強度特性評価への応用を実現するために、粘弾性・粘塑性複合構成則を構築し、これを用いて増分ポテンシャル法に基づく熱・機械強連成解析手法を開発するとともに、最終的に数値材料試験に適用してFRTPの変形・強度特性評価への基本的検討を行った。以下では、本研究で得られた結論及び克服すべき課題や今後の展望について総括する。

第二章では、ガラスーゴム状態を対象とした非晶性熱可塑性樹脂の力学挙動をモデル化するために、熱力学的に整合した定式化によって粘弾性・粘塑性複合構成則を構築した。本材料構成則の特徴は、非晶性熱可塑性樹脂の材料モデリングにて一般的に用いられてこなかった粘弾性モデルをそのまま考慮するばかりでなく、緩和弾性率が表現可能なガラス転移現象による劇的な剛性低下挙動を粘塑性硬化のガラス転移現象による変化の論理に反映したところにある。また、微小変形域における弾性ヒステリシスやひずみ緩和などの挙動をガラスーゴムを包括した領域で再現することに本材料構成則の新規性がある。

この章の最後の数値解析に際しては、ポリカーボネート（PC）を対象とした動的粘弾性試験と引張負荷・除荷・無負荷保持試験の結果¹⁴⁾から本材料構成則の材料パラメータを同定し、その基本性能を検証した。まず、初期降伏前の弾性域において除荷と無負荷保持を行った引張試験の再現解析によって、負荷速度に依存した弾性特性や除荷

後の保持段階におけるひずみ回復の再現することに成功した。これは、Fan と Kazmer⁵⁹⁾の一般化 WLF 式を用いてガラス-ゴムの粘弾性特性を取得した結果である。しかし、弾性ヒステリシスについては実測値と逆の傾向が現れており、解析結果でこれを再現するには至らなかった。次に、破断強度までの引張試験の再現解析では、試験片端面から算出した荷重-変位関係の初期変形域における誤差が目立つ結果となったが、真応力やひずみ速度に関しては実測値との良好な一致が見られた。

最後に、環境温度や負荷速度を複数設定した一軸引張負荷・除荷・無負荷保持試験の結果¹⁴⁾を荷重-変位関係から比較することで、本材料構成則の温度依存性に関する表現性能に関して考察した。そこでは、温度増加に対して応力が減少していく様子や無負荷保持試験時の大きなひずみ回復、さらにはガラス転移点以降にゴム状態に移った際の力学挙動を再現することに成功した。

以上より、本研究で開発した非晶性熱可塑性樹脂の粘弾性・粘塑性複合構成則によって、負荷・除荷・無負荷保持条件下におけるガラス-ゴム状態の包括的な力学挙動の再現に成功した。しかし、ひずみ軟化や除荷における再現性能に課題が残る結果となってしまったため、今後は、等方硬化則のさらなる改良や非線形粘弾性の導入を意図した材料構成則の改良を行う必要がある。第三章では、熱・機械連成増分ポテンシャル法⁸³⁾を導入して第二章で構築した粘弾性・粘塑性複合構成則を用いた熱・機械連成解析手法を提案した。具体的にはまず、熱・機械連成増分ポテンシャル法に特徴的な外部温度と熱力学的平衡温度を用いて非平衡熱力学の観点から、定式化の概要を説明した。そして、粘弾性・粘塑性複合構成則を増分ポテンシャル法に適用する際に必要な、自由エネルギーや散逸エネルギーを内部変数の駆動力で最適化した双対散逸ポテンシャルに対して、これらをポテンシャル理論に基づいて導出した。特に、粘塑性双対散逸ポテンシャルの導出の際には、せん断降伏応力の発展則も導かれるように、粘塑性散逸ポテンシャルが降伏関数と塑性ポテンシャルに依存する粘塑性正規化関数

として定義した。本手法の新規性は、非晶性熱可塑性樹脂の発熱や構造物の非定常熱伝導に対して固体熱力学的に整合した熱・機械連成解析手法を構築したところにある。

本章の最後では、本研究で独自に実装した熱・機械連成増分ポテンシャル法による PC の一軸引張試験の再現解析を行い、その結果と力学応答のみの解析結果とを比較し、構造物の温度環境の変化に起因する力学挙動の変化について考察した。関連して、本試験中に DIC 計測された温度上昇量の実測値¹⁴⁾を再現解析の結果と比較することによって本手法の熱・機械連成特性の再現性能について検証した。初期降伏に至るまでの力学挙動は発熱量の少なさもあり、両者に明確な差が現れなかったが、ひずみ軟化を起点として、その後の降伏挙動に顕著な差が現れることが観察された。これは、ひずみ軟化後の硬化挙動の違いが原因となっていると考察した。また、実測値との温度上昇量の比較について、低速負荷水準においてはその発熱量から非定常熱伝導による温度低下を再現することに成功したが、高速負荷水準においては見積もられた発熱量が少なく、さらに大変形域においても継続的に増加する温度の再現には至らなかった。これは、高速負荷水準においては大変形域以降でも粘塑性変形が持続的に増加することで発熱し続け、非定常熱伝導の速度に対して負荷速度が速いために温度が停留することでこのような結果が観測されたのではないかと推察した。

以上より、本研究で開発した非晶性熱可塑性樹脂の熱・機械連成解析手法によれば、変形の進展と自己発熱による温度増加や非定常熱伝導が相互に依存した熱・機械連成挙動を再現できることが示された。しかし、高速負荷試験における発熱量の再現性能に課題が残る結果が得られており、今後は要素開発などを含む手法の多面的な高精度化や発熱に注視した材料構成則の改良を行う必要がある。第四章では、FRTP となる構造物のマルチスケール熱・機械連成特性評価への応用を見据えて、一方向強化材を模擬したユニットセルに対する数値材料試験⁹³⁾に本研究で開発した非晶性熱可塑性樹脂の熱・機械連成解析手法を適用した。これらの熱・機械連成解析による数値材

料試験の結果から、物質点断熱の下で簡易的に発熱を計算した力学応答解析の結果と比較することで、母材の発熱によるユニットセル内のマイクロ温度場の時刻歴変化が対応するマクロ応力やマクロ温度に与える影響について考察した。まず、マクロ応力に関してはひずみ軟化を起点として両者に大きな挙動差が観測された。特に、繊維配向に直交する方向の軸方向引張と純せん断に関しては両者の大小が逆転しており、母材の温度依存性が繊維材の応力場にも大きな影響を与えていることが観測された。一方、マクロ温度に関しても、全モードについて両者に明確な差が現れた。特に、繊維配向に直交する方向の軸方向引張と純せん断に関しては、マクロ温度についてもマクロ応力と同様の傾向が観察された。

また、ユニットセル内の非定常性に関する追加的な考察として3水準のマクロ負荷速度や2種類のユニットセル寸法を設定した数値材料試験を実施することで、負荷速度とユニットセル内の温度場の伝導速度の兼ね合いがユニットセル内の応力場や対応するマクロ応力、ならびにマクロ温度の時間発展に与える影響を考察した。繊維配向に直交する方向の軸方向引張と純せん断については、母材の負荷速度依存性に起因してマクロ応力とマクロ温度ともに異なる結果として観察された。特にマクロ温度に関しては、母材の断熱膨張が粘弾性に依存することに起因して、降伏前段階においては、負荷速度が速いほど温度が低く観察されたのに対して、ひずみ軟化に伴う温度上昇が負荷速度が速いほど大きくなることに起因して、途中で大小が逆転する様子を観察することができた。さらに、低速負荷については、非定常熱伝導の進展時間が十分であり、どのモードに対してもほとんどマイクロ温度分布の定常性が確認された。また、ユニットセル寸法の依存性を検証するために両者の寸法サイズが10倍異なる2水準のユニットセルに対して数値材料試験を実施したが、得られたマクロ応答はほとんど変わらないという結果を得た。これは、ユニットセル寸法が極端に小さいか、与える負荷速度が遅くなければ、そこまでの応答差は生じないということであり、寸法依存性

の影響は負荷速度の影響よりも鈍感であることが分かった。

これらの解析で得られたマクロ応力やマクロ温度の結果を用いてミクロ構造内の非定常性を考慮したマクロな熱・機械連成特性のモデル化を行うためには、温度や負荷速度に依存する非晶性熱可塑性樹脂の材料構成則を反映した異方性マクロ材料構成則を構築するとともに、断熱膨張や発熱に起因したマクロ温度の違いを反映する必要がある。そのためには、増分ポテンシャル法を用いた各材料挙動を再現するエネルギーを適切にモデル化する必要があるが、これらについては今後の課題としたい。

補遺 A 数値計算アルゴリズム

A.1 粘弾性・粘塑性複合構成則の return-mapping アルゴリズム

本節では、第2章で示した粘弾性・粘塑性複合構成則の return-mapping アルゴリズムを示す。本アルゴリズムは、後退差分近似された時間 $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ と温度 $\theta_{n+1} = \theta_n + \Delta\theta$ に対して、応力 σ_{n+1} と粘塑性乗数 $\Delta\gamma^{\text{vp}} = \dot{\gamma}^{\text{vp}}\Delta t$ を求めるものである。

まず、次式の return-mapping 方程式を解く際に必要なステップ“ $n+1$ ”および試行の各種変数を図-A.1に示す。

$$g(\Delta\gamma^{\text{vp}}) = \Delta\gamma^{\text{vp}} - \Delta t \frac{\dot{\gamma}_0^{\text{vp}}}{\eta_{n+1}^{\text{vp}}} \sinh^{\frac{1}{m}} \left(\frac{f_{n+1}}{K_{n+1}} \right) \quad (\text{A.1})$$

ここで本節では、Newton-Raphson 法を用いて $\Delta\gamma^{\text{vp}}$ を求めるために必要な勾配のみを示す。まず、 $g(\Delta\gamma^{\text{vp}})$ の $\Delta\gamma^{\text{vp}}$ に対する勾配は次式で得られる。

$$\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} g(\Delta\gamma^{\text{vp}}) = 1 - \frac{\dot{\gamma}_0^{\text{vp}} \Delta t}{m K_{n+1} \eta_{n+1}^{\text{vp}}} \sinh^{\frac{1-m}{m}} \left(\frac{f_{n+1}}{K_{n+1}} \right) \cosh \left(\frac{f_{n+1}}{K_{n+1}} \right) \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} f_{n+1} \quad (\text{A.2})$$

ここで、 f_{n+1} の $\Delta\gamma^{\text{vp}}$ に対する勾配は次式で得られる。

$$\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} f_{n+1} = N_{n+1} : \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{n+1}^{\text{eff}} - \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} r_{n+1}^{\text{vp}} \quad (\text{A.3})$$

まず、 $\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{n+1}^{\text{eff}}$ は次式で得られる。

$$\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{n+1}^{\text{eff}} = \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \left(\mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{vp}} \Big|_{n+1} - \mathbf{M}_{n+1}^{\text{back}} \right) \quad (\text{A.4})$$

ここで、離散化された非平衡応力の発展式を参照すると、 $\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{vp}}|_{n+1}$ は次式で得られる。

$$\begin{aligned}
\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{vp}}|_{n+1} &= \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\infty}|_{n+1} \\
&+ \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \left[\exp\left(-\frac{\Delta t}{\hat{\tau}^{\alpha}}\right) R_{\text{dev}}^{\alpha}|_n + \frac{\gamma^{\alpha} \hat{\tau}^{\alpha}}{\Delta t} (\mathbf{M}_{\text{dev}}^{\infty}|_{n+1} - \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\infty}|_n) \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\hat{\tau}^{\alpha}}\right) \right\} \right] \\
&= \left[1 + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \frac{\gamma^{\alpha} \hat{\tau}^{\alpha}}{\Delta t} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\hat{\tau}^{\alpha}}\right) \right\} \right] \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\infty}|_{n+1} \\
&= 2G \left[1 + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \frac{\gamma^{\alpha} \hat{\tau}^{\alpha}}{\Delta t} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\hat{\tau}^{\alpha}}\right) \right\} \right] \text{dev}(\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}}|_{n+1}) \tag{A.5}
\end{aligned}$$

一方で、 $\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}}|_{n+1} \approx \frac{1}{2} \ln(\bar{\mathbf{C}}_{n+1}^{\text{ve}})$ とすると、 $\bar{\mathbf{C}}_{n+1}^{\text{ve}} = (\Delta \mathbf{F}_{n+1}^{\text{vp}})^{-\text{T}} \bar{\mathbf{C}}_{\text{trial}}^{\text{ve}} (\Delta \mathbf{F}_{n+1}^{\text{vp}})^{-1}$ であるため、次式が得られる。

$$\begin{aligned}
\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}}|_{n+1} &\approx \frac{1}{2} \ln \left[(\Delta \mathbf{F}_{n+1}^{\text{vp}})^{-\text{T}} \bar{\mathbf{C}}_{\text{trial}}^{\text{ve}} (\Delta \mathbf{F}_{n+1}^{\text{vp}})^{-1} \right] \\
&= \frac{1}{2} \ln(\bar{\mathbf{C}}_{\text{trial}}^{\text{ve}}) - \ln(\Delta \mathbf{F}_{n+1}^{\text{vp}}) \\
&= \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{trial}}^{\text{ve}} - \Delta\gamma^{\text{vp}} \mathbf{N}_{n+1} \tag{A.6}
\end{aligned}$$

したがって、 $\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{vp}}|_{n+1}$ は次式で得られる。

$$\begin{aligned}
\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{vp}}|_{n+1} &= 2G \left[1 + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \frac{\gamma^{\alpha} \hat{\tau}^{\alpha}}{\Delta t} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\hat{\tau}^{\alpha}}\right) \right\} \right] \text{dev}(\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}}|_{n+1}) \\
&= -2G \Delta\gamma^{\text{vp}} \left[1 + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \frac{\gamma^{\alpha} \hat{\tau}^{\alpha}}{\Delta t} \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\hat{\tau}^{\alpha}}\right) \right\} \right] \mathbf{N}_{n+1} \tag{A.7}
\end{aligned}$$

次に、 $\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{n+1}^{\text{back}}$ は次式で得られる。

$$\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{n+1}^{\text{back}} = \mu(\theta_{n+1}) \left\{ \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}}|_{n+1} - 3}{J_{\text{m}}} \right)^{-1} \text{dev}(\bar{\boldsymbol{b}}_{n+1}^{\text{vp}}) + \left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}}|_{n+1} - 3}{J_{\text{m}}} \right)^{-1} \text{dev}(\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \bar{\boldsymbol{b}}_{n+1}^{\text{vp}}) \right\} \tag{A.8}$$

ところで、 $\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}}|_{n+1} - 3}{J_{\text{m}}} \right)^{-1}$ は次式で得られる。

$$\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}}|_{n+1} - 3}{J_{\text{m}}} \right)^{-1} = \frac{1}{J_{\text{m}}} \left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}}|_{n+1} - 3}{J_{\text{m}}} \right)^{-2} \text{tr}(\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \bar{\boldsymbol{b}}_{n+1}^{\text{vp}}) \tag{A.9}$$

したがって、 $\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{n+1}^{\text{back}}$ は次式で得られる.

$$\begin{aligned} \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{n+1}^{\text{back}} &= \mu(\theta_{n+1}) \frac{1}{J_m} \left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}}|_{n+1} - 3}{J_m} \right)^{-2} \text{tr} \left(\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \bar{\mathbf{b}}_{n+1}^{\text{vp}} \right) \text{dev} \left(\bar{\mathbf{b}}_{n+1}^{\text{vp}} \right) \\ &\quad + \mu(\theta_{n+1}) \left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}}|_{n+1} - 3}{J_m} \right)^{-1} \text{dev} \left(\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \bar{\mathbf{b}}_{n+1}^{\text{vp}} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

また、 $\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}} = \exp(\Delta\gamma^{\text{vp}} \mathbf{N}_{n+1}) \approx 1 + \Delta\gamma^{\text{vp}} \mathbf{N}_{n+1}$ と近似すると、 $\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \bar{\mathbf{b}}_{n+1}^{\text{vp}}$ は次式で得られる.

$$\begin{aligned} \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \bar{\mathbf{b}}_{n+1}^{\text{vp}} &= \left(\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}} \right) \bar{\mathbf{b}}_n^{\text{vp}} \left(\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}} \right)^{\text{T}} + \Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}} \bar{\mathbf{b}}_n^{\text{vp}} \left(\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}} \right)^{\text{T}} \\ &= \mathbf{N}_{n+1} \bar{\mathbf{b}}_n^{\text{vp}} \left(\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}} \right)^{\text{T}} + \Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}} \bar{\mathbf{b}}_n^{\text{vp}} \mathbf{N}_{n+1} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

以上より、 $\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{n+1}^{\text{eff}}$ を算出することが可能となった.

一方で、 $\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} r_{n+1}^{\text{vp}}$ の算出手続きを示す. まず、式(2.91)で示される r^{vp} の発展則を後退差分近似すると次式が得られる.

$$\begin{aligned} r_{n+1}^{\text{vp}} &= r_n^{\text{vp}} + h \left(1 - \frac{r_{n+1}^{\text{vp}}}{s_{\text{ss}}|_{n+1}} \right) \Delta\gamma^{\text{vp}} \\ \Leftrightarrow \left(1 + \frac{h\Delta\gamma^{\text{vp}}}{s_{\text{ss}}|_{n+1}} \right) r_{n+1}^{\text{vp}} &= r_n^{\text{vp}} + h\Delta\gamma^{\text{vp}} \\ \Leftrightarrow r_{n+1}^{\text{vp}} &= \left(r_n^{\text{vp}} + h\Delta\gamma^{\text{vp}} \right) \left(1 + \frac{h\Delta\gamma^{\text{vp}}}{s_{\text{ss}}|_{n+1}} \right)^{-1} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

また、式(2.92)で示される s_{ss} の発展則を後退差分近似すると次式が得られる.

$$\begin{aligned} s_{\text{ss}}|_{n+1} &= s_{\text{ss}}|_n (s_{\text{ss}}^{\infty} - g s_{\text{ss}}|_{n+1}) \Delta\gamma^{\text{vp}} \\ \Leftrightarrow (1 + g\Delta\gamma^{\text{vp}}) s_{\text{ss}}|_{n+1} &= s_{\text{ss}}|_n + s_{\text{ss}}^{\infty} \Delta\gamma^{\text{vp}} \\ \Leftrightarrow s_{\text{ss}}|_{n+1} &= (s_{\text{ss}}|_n + s_{\text{ss}}^{\infty} \Delta\gamma^{\text{vp}}) (1 + g\Delta\gamma^{\text{vp}})^{-1} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

したがって、 r_{n+1}^{vp} は次式で算出される.

$$\begin{aligned} r_{n+1}^{\text{vp}} &= \left(r_n^{\text{vp}} + h\Delta\gamma^{\text{vp}} \right) \left\{ 1 + h\Delta\gamma^{\text{vp}} (s_{\text{ss}}|_n + s_{\text{ss}}^{\infty} \Delta\gamma^{\text{vp}})^{-1} (1 + g\Delta\gamma^{\text{vp}}) \right\}^{-1} \\ &= F_1 F_2^{-1} \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

ここで、 $F_1 \equiv r_n^{\text{vp}} + h\Delta\gamma^{\text{vp}}$ 、 $F_2 \equiv 1 + h\Delta\gamma^{\text{vp}}(s_{\text{ss}|n} + s_{\text{ss}}^\infty \Delta\gamma^{\text{vp}})^{-1}(1 + g\Delta\gamma^{\text{vp}})$ とした。このとき、 $\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} r_{n+1}^{\text{vp}}$ は次式で得られる。

$$\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} r_{n+1}^{\text{vp}} = (\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} F_1) F_2^{-1} - F_1 F_2^{-2} (\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} F_2) \quad (\text{A.15})$$

ここで、 $\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} F_1 = h$ であり、 $\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} F_2$ は $G_1 \equiv h\Delta\gamma^{\text{vp}}(1 + g\Delta\gamma^{\text{vp}})$ 、 $G_2 \equiv (s_{\text{ss}|n} + s_{\text{ss}}^\infty \Delta\gamma^{\text{vp}})^{-1}$ とすると、次式で得られる。

$$\begin{aligned} \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} F_2 &= \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} (1 + G_1 G_2^{-1}) \\ &= (\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} G_1) G_2^{-1} - G_1 G_2^{-2} (\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} G_2) \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

ここで、 $\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} G_1 = h(1 + 2g\Delta\gamma^{\text{vp}})$ 、 $\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} G_2 = s_{\text{ss}}^\infty$ である。以上をまとめると、 $\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} r_{n+1}^{\text{vp}}$ は最終的に次式で算出される。

$$\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} r_{n+1}^{\text{vp}} = hF_2^{-1} - F_1 F_2^{-2} \{h(1 + 2g\Delta\gamma^{\text{vp}})G_2^{-1} - s_{\text{ss}}^\infty G_1 G_2^{-2}\} \quad (\text{A.17})$$

以上より、 $\Delta\gamma^{\text{vp}} f_{n+1}$ を算出することが可能となった。最後に、return-mapping 方程式のアルゴリズムを図-A.2 に示す。

For step “ $n+1$ ” : $t_{n+1} = t_n + \Delta t$, $\theta_{n+1} = \theta_n + \Delta \theta$

Already computed: \mathbf{F}_n , \mathbf{F}_{n+1} , \mathbf{F}_n^{vp} , $\mathbf{R}_{\text{vol}}^\alpha|_n$, $\mathbf{R}_{\text{dev}}^\alpha|_n$, r_n^{vp}

Unknown: $\boldsymbol{\sigma}_{n+1}$, $\Delta \gamma_{n+1}^{\text{vp}}$

[1] Multiplicative decomposition

$$\mathbf{F}_{n+1} = (J_{n+1})^{1/3} \bar{\mathbf{F}}_{n+1} \quad \left\{ \begin{array}{l} J_{n+1} = J_{n+1}^{\text{ve}} \quad \text{s.t.} \quad J_{n+1}^{\text{vp}} = 1 \\ \bar{\mathbf{F}}_{n+1} = \bar{\mathbf{F}}_{n+1}^{\text{ve}} \bar{\mathbf{F}}_{n+1}^{\text{vp}} = \bar{\mathbf{F}}_{n+1}^{\text{ve}} \Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}} \bar{\mathbf{F}}_n^{\text{vp}} = \bar{\mathbf{F}}_{\text{trial}}^{\text{ve}} \bar{\mathbf{F}}_n^{\text{vp}} \end{array} \right.$$

$$\text{s.t.} \quad \Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}} = \exp(\Delta \mathbf{d}^{\text{vp}}) = \exp(\Delta \gamma^{\text{vp}} \mathbf{N}_{n+1})$$

[2] Viscoelastic stresses $\boldsymbol{\sigma}_{n+1} = \frac{1}{J_{n+1}} \left\{ \tau_{\text{vol}}^{\text{ve}}|_{n+1} \mathbf{1} + \mathbf{R}_{n+1} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}}|_{n+1} (\mathbf{R}_{n+1})^{\text{T}} \right\}$

(A) Volumetric part

$$\tau_{\text{vol}}^\infty|_{n+1} = K^\infty \left\{ \ln(J_{n+1}) - \alpha_{\text{th}} \right\}$$

$$\tau_{\text{vol}}^{\text{ve}}|_{n+1} = \tau_{\text{vol}}^\infty|_{n+1} + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \left[\exp\left(-\frac{\Delta t}{\hat{\tau}^\alpha}\right) R_{\text{vol}}^\alpha|_n + \frac{\gamma^\alpha \hat{\tau}^\alpha}{\Delta t} (\tau_{\text{vol}}^\infty|_{n+1} - \tau_{\text{vol}}^\infty|_n) \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\hat{\tau}^\alpha}\right) \right\} \right]$$

(B) Deviatoric part

$$\mathbf{M}_{\text{dev}}^\infty|_j = 2G^\infty \text{dev}\left(\bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}}|_j\right), \quad \bar{\boldsymbol{\varepsilon}}_{\text{H}}^{\text{ve}}|_j = \mathbf{A}_j^* \left[\sum_{i=1}^3 \ln\left(\lambda_{\bar{\mathbf{U}}_j^{\text{ve}}}(i)\right) \mathbf{N}_{(i)}^*|_j \otimes \mathbf{N}_{(i)}^*|_j \right] (\mathbf{A}_j^*)^{\text{T}}$$

$$\mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}}|_j = \mathbf{M}_{\text{dev}}^\infty|_j + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \left[\exp\left(-\frac{\Delta t}{\hat{\tau}^\alpha}\right) \mathbf{R}_{\text{dev}}^\alpha|_n + \frac{\gamma^\alpha \hat{\tau}^\alpha}{\Delta t} (\mathbf{M}_{\text{dev}}^\infty|_j - \mathbf{M}_{\text{dev}}^\infty|_n) \left\{ 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\hat{\tau}^\alpha}\right) \right\} \right]$$

[3] Back stress For $j = “n+1”$, “trial”

$$\mathbf{M}_{\text{trial}}^{\text{back}} = \mu \left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}}|_{\text{trial}} - 3}{J_{\text{m}}} \right)^{-1} \text{dev}\left(\bar{\mathbf{b}}_{\text{trial}}^{\text{vp}}\right), \quad \bar{I}_1^{\text{vp}}|_{\text{trial}} = \text{tr}\left(\bar{\mathbf{b}}_{\text{trial}}^{\text{vp}}\right), \quad \bar{\mathbf{b}}_{\text{trial}}^{\text{vp}} = \bar{\mathbf{F}}_{\text{trial}}^{\text{vp}} \left(\bar{\mathbf{F}}_{\text{trial}}^{\text{vp}}\right)^{\text{T}}$$

[4] Flow vector

$$\mathbf{N}_{n+1} = \frac{\mathbf{M}_{n+1}^{\text{eff}}}{\tau_{n+1}^{\text{eff}}} = \frac{\mathbf{M}_{\text{trial}}^{\text{eff}}}{\tau_{\text{trial}}^{\text{eff}}}, \quad \mathbf{M}_{\text{trial}}^{\text{eff}} = \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{ve}}|_{\text{trial}} - \mathbf{M}_{\text{trial}}^{\text{back}}, \quad \tau_{\text{trial}}^{\text{eff}} = \sqrt{2} \|\mathbf{M}_{\text{trial}}^{\text{eff}}\|$$

図– A.1 Return-mapping 方程式の求解に必要な各種試行変数

[1] Return-mapping equation

$$g(\Delta\gamma^{\text{vp}}) = \Delta\gamma^{\text{vp}} - \Delta t \frac{\dot{\gamma}_0^{\text{vp}}}{\eta_{n+1}^{\text{vp}}} \sinh^{\frac{1}{m}} \left(\frac{f_{n+1}}{K_{n+1}} \right) = 0$$

$$f_{n+1} = \tau_{n+1}^{\text{eff}} + \tau_{n+1}^{\text{vol}} - r_{n+1}^{\text{vp}} - \sigma_Y^0, \quad \tau_{n+1}^{\text{vol}} = \alpha \tau_{\text{vol}}^{\text{ve}} \Big|_{n+1}$$

$$r_{n+1}^{\text{vp}} = F_1 F_2^{-1}, \quad F_1 = r_n^{\text{vp}} + h \Delta\gamma^{\text{vp}}, \quad F_2 = 1 + h \Delta\gamma^{\text{vp}} \left(s_{\text{ss}} \Big|_n + s_{\text{ss}}^\infty \Delta\gamma^{\text{vp}} \right)^{-1} (1 + g \Delta\gamma^{\text{vp}})$$

[2] Gradient of return-mapping equation

$$\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} g(\Delta\gamma^{\text{vp}}) = 1 - \frac{\dot{\gamma}_0^{\text{vp}} \Delta t}{m K_{n+1} \eta_{n+1}^{\text{vp}}} \sinh^{\frac{1-m}{m}} \left(\frac{f_{n+1}}{K_{n+1}} \right) \cosh \left(\frac{f_{n+1}}{K_{n+1}} \right) \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} f_{n+1}$$

※ Gradient of yield function

$$\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} f_{n+1} = \mathbf{N}_{n+1} : \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{n+1}^{\text{eff}} - \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} r_{n+1}^{\text{vp}}$$

$$\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{n+1}^{\text{eff}} = \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{vp}} \Big|_{n+1} - \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{n+1}^{\text{back}}$$

$$\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{\text{dev}}^{\text{vp}} \Big|_{n+1} = -2G \Delta\gamma^{\text{vp}} \left[1 + \sum_{\alpha=1}^{N^{\text{ve}}} \frac{\gamma^\alpha \hat{\tau}^\alpha}{\Delta t} \left\{ 1 - \exp \left(-\frac{\Delta t}{\hat{\tau}^\alpha} \right) \right\} \right] \mathbf{N}_{n+1}$$

$$\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \mathbf{M}_{n+1}^{\text{back}} = \mu(\theta_{n+1}) \frac{1}{J_m} \left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}} \Big|_{n+1} - 3}{J_m} \right)^{-2} \text{tr} \left(\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \bar{\mathbf{b}}_{n+1}^{\text{vp}} \right) \text{dev} \left(\bar{\mathbf{b}}_{n+1}^{\text{vp}} \right)$$

$$+ \mu(\theta_{n+1}) \left(1 - \frac{\bar{I}_1^{\text{vp}} \Big|_{n+1} - 3}{J_m} \right)^{-1} \text{dev} \left(\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \bar{\mathbf{b}}_{n+1}^{\text{vp}} \right)$$

$$\text{s.t. } \nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} \bar{\mathbf{b}}_{n+1}^{\text{vp}} = \mathbf{N}_{n+1} \bar{\mathbf{b}}_n^{\text{vp}} \left(\Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}} \right)^{\text{T}} + \Delta \bar{\mathbf{F}}^{\text{vp}} \bar{\mathbf{b}}_n^{\text{vp}} \mathbf{N}_{n+1}$$

$$\nabla_{\Delta\gamma^{\text{vp}}} r_{n+1}^{\text{vp}} = h F_2^{-1} - F_1 F_2^{-2} \left\{ h (1 + 2g \Delta\gamma^{\text{vp}}) G_2^{-1} - s_{\text{ss}}^\infty G_1 G_2^{-2} \right\}$$

$$\text{s.t. } G_1 = h \Delta\gamma^{\text{vp}} (1 + g \Delta\gamma^{\text{vp}}), \quad G_2 = \left(s_{\text{ss}} \Big|_n + s_{\text{ss}}^\infty \Delta\gamma^{\text{vp}} \right)^{-1}$$

図- A.2 Return-mapping 方程式の求解アルゴリズム

参考文献

- 1) 日本大学 邊研究室: 主な機械材料の物理的性質, http://www.me.cit.nihon-u.ac.jp/lab/ben/LectureCourse/New_1Mechanics/Material_Properties.pdf, (参照日 2017 年 10 月 6 日)
- 2) 株式会社 KDA: PC ポリカーボネート樹脂 (物性表 1) | KDA のプラスチック加工技術, http://www.kda1969.com/materials/pla_mate_pc2.htm, (参照日 2017 年 10 月 6 日)
- 3) 関集三: ガラス転移現象, 日本結晶学会誌, Vol.14.6 (1992), pp.335-345.
- 4) 深堀美英: 高分子の力学, 技報堂出版, (2000)
- 5) 株式会社リッチェル: そもそも, プラスチックって?—プラスチックの種類と使用例, <http://www.richell.co.jp/industry/plastic03.html>, (参照日 2017 年 10 月 1 日)
- 6) 社団法人 日本建材産業協会: 平成 16 年度 廃プラスチックリサイクル・システム調査委員会報告書 (建築現場における熱可塑性プラスチックのリサイクル・システム調査研究), http://www.kensankyo.org/kankyo/hyoka_system/pdf/H16hai_pura.pdf, (参照日 2017 年 10 月 1 日)
- 7) エンプラ技術連合会: エンプラとは, <http://enpla.jp/enpla/index.html>, (参照日 2017 年 10 月 1 日)

- 8) I. M. Ward and J. Sweeney: *Mechanical properties of solid polymers (Third edition)*, Wiley, (2013)
- 9) 末益博志 (編著) : 日本複合材料学会監修 入門複合材料の力学, 培風館, (2009)
- 10) 株式会社奥谷金網製作所: CFRTP (炭素繊維強化熱可塑性樹脂) パンチング, <http://www.punchingworld.com/cfrtp/>, (参照日 2017 年 10 月 1 日)
- 11) 国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) : 炭素繊維強化熱可塑性プラスチックを開発, http://www.nedo.go.jp/news/press/AA5_100221.html, (参照日 2017 年 10 月 1 日)
- 12) A. S. Wineman and K. R. Rajagopal: *Mechanical response of polymers an introduction*, Cambridge university press, (2000)
- 13) P. Prasatya, G. B. McKenna and S. L. Simon: A viscoelastic model for predicting isotropic residual stresses in thermosetting materials: effects of processing parameters, *Journal of Composite Materials*, Vol.35 (2001), Issue10, pp. 826-848.
- 14) 前田隆世, 小林卓哉, 住山琢哉, 古市謙次, 野々村千里, 村田真伸, 西脇武志, 松原成志朗, 寺田賢二郎: 粘弾性・粘塑性構成則の開発を目的とした熱可塑性樹脂の材料試験, 計算工学講演会論文集, Vol.22 (2017), 5p.
- 15) H. Eyring: Viscosity, Plasticity and Diffusion as Examples of Absolute Reaction Rates, *The Journal of Chemical Physics*, Vol.4 (1936), p.283.
- 16) A. S. Argon: A theory for the low-temperature plastic deformation of glassy polymers, *Philosophical Magazine*, Vol.28 (1973), pp.839-865.
- 17) A. S. Argon: *The physics of Deformation and Fracture of Polymers*, Cambridge University Press, (2013)

- 18) J. C. M. Li and J. J. Gilman: Disclination loops in polymers, *Journal of applied physics*, Vol.41 (1970), pp.4248-4256.
- 19) G. C. T. Liu and J. C. M. Li: Strain energies of disclination loops, *Journal of applied physics*, Vol.42 (1971), pp.3313-3315.
- 20) W. Kuhn and F. Grun: Beziehung zwischen elastischen Konstanten und Dehnungsdoppelberechnung hochelastischer Stoffe, *Kolloid-Zeitschrift*, Vol.101 (1942), pp.248-271.
- 21) P. J. Flory and J. Jr. Rehner: Statistical mechanics of cross-linked polymer networks I. Rubberlike elasticity, *The Journal of Chemical Physics*, Vol.11 (1943), No.11, pp.512-520.
- 22) L. R. G. Treloar: The elasticity of a network of long-chain molecules. -III, *Transactions of the Faraday Society*, Vol.42 (1946), pp.83-94.
- 23) M. C. Wang and E. Guth: Statistical theory of networks of non-Gaussian flexible chains, *The Journal of Chemical Physics*, Vol.20 (1952), No.7, pp.1144-1157.
- 24) R. N. Haward and G. Thackray: The use of a mathematical model to describe isothermal stress-strain curves in glassy thermoplastics, *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, Vol.302 (1968), No.1471, pp.453-472.
- 25) M. C. Boyce, D. M. Parks and A. S. Argon: Large inelastic deformation of glassy polymers. PartI: Rate dependent constitutive model, *Mechanics of Materials*, Vol.7 (1988), pp.15-33.
- 26) P. D. Wu and E. V. D. Giessen: On neck propagation in amorphous glassy polymers

- under plane strain tension, *International Journal of Plasticity*, Vol.11 (1995), No.3, pp.211-235.
- 27) P. D. Wu and E. V. D. Giessen: Analysis of shear band propagation in amorphous glassy polymers, *International Journal Solids and Structures*, Vol.31 (1994), No.11, pp.1493-1517.
- 28) E. M. Arruda, M. C. Boyce and R. Jayachandran: Effects of strain rate, temperature and thermomechanical coupling on the finite strain deformation of glassy polymers, *Mechanics of Materials*, Vol.19 (1995), No.2-3, pp.193-212.
- 29) E. M. Arruda and M. C. Boyce: A Three-Dimensional constitutive model for the large stretch behavior of rubber elastic materials, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.41 (1993), pp.389-412.
- 30) R. Fleischhauer, H. Dal, M. Kaliske and K. Schneider: A constitutive model for finite deformation of amorphous polymers, *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol.65 (2012), pp.48-63.
- 31) C. Miehe, S. Goktepe and F. Lulei: A micro-macro approach to rubber-like materials Part I the non-affine micro-sphere model of rubber elasticity, *Journal of the Mechanics and Physics of solids*, Vol.52 (2004), pp.2617-2660.
- 32) C. Miehe and S. Goktepe: A micro-macro approach to rubber-like materials Part II The micro-sphere model of finite rubber viscoelasticity, *Journal of the Mechanics and Physics of solids*, Vol.53 (2005), pp.2231-2258.
- 33) C. Dreistadt, A. Bonnet, P. Chevrier and P. Lipinski: Experimental study of the polycar-

- bonate behaviour during complex loadings and comparison with the Boyce, Parks and Argon model predictions, *Materials & Design*, Vol.30 (2009), No.8, pp.3126-3140.
- 34) C. Miehe, S. Goktepe and J. M. Diez: Finite viscoplasticity of amorphous glassy polymers in the logarithmic strain space, *International Journal of Solids and Structures*, Vol.46 (2009), pp.181-202.
- 35) O. A. Hasan and M. C. Boyce: A constitutive model for the nonlinear viscoelastic viscoplastic behavior of glassy polymers, *Polymer Engineering & Science*, Vol.35 (1995), No.4, pp.331-344.
- 36) C. Miehe, J. M. Diez, S. Goktepe and L. M. Schanzel: Coupled thermoviscoplasticity of glassy polymers in the logarithmic strain space based on the free volume theory, *International Journal of Solids and Structures*, Vol.48 (2011), pp.1799-1817.
- 37) L. Anand and M. E. Gurtin: A theory of amorphous solids undergoing large deformations with application to polymeric glasses, *International Journal of Solids and Structures*, Vol.40 (2003), pp.1465-1487.
- 38) C. Bauwens-Crowet, J. C. Bauwens and G. Homes: Tensile yield-stress behavior of glassy polymers, *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, Vol.7 (1969), No.4, pp.735-742.
- 39) C. Bauwens-Crowet: The compression yield behaviour of polymethyl methacrylate over a wide range of temperatures and strain-rates, *Journal of Materials Science*, Vol.8 (1973), No.7, pp.968-979.
- 40) T. Ree and H. Eyring: Theory of non-Newtonian flow. I. Solid plastic system, *Journal of Applied Physics*, Vol.26 (1955), pp.793-800.

- 41) A. D. Mulliken and M. C. Boyce: Mechanics of the rate-dependent elastic-plastic deformation of glassy polymers from low to high strain rates, *International of Solids and Structures*, Vol.43 (2006), pp.1331-1356.
- 42) R. B. Dupaix and M. C. Boyce: Constitutive modeling of the finite strain behaviour of amorphous in and above the glass transition, *Mechanics of Materials*, Vol.39 (2007), pp.39-52.
- 43) D. Mathiesen, D. Vogtmann and R. B. Dupaix: Characterization and constitutive modeling of stress-relaxation behavior of poly (methyl methacrylate)(PMMA) across the glass transition temperature, *Mechanics of Materials*, Vol.71 (2014), pp.74-84.
- 44) D. S. A. D. Focatiis, J. Embery and C. P. Buckley: Large deformations in oriented polymer glasses: Experimental study and a new glass-melt constitutive model, *Journal of Polymer Science Part B: Polymer Physics*, Vol.48 (2010), No.13, pp.1449-1463.
- 45) P. Hempel: *Constitutive modeling of amorphous thermoplastic polymers with special emphasis on manufacturing processes*, KIT Scientific Publishing, Vol.2 (2016)
- 46) J. Richeton, S. Ahzi, L. Daridon and Y. Remond: A formulation of the cooperative model for the yield stress of amorphous polymers for a wide range of strain rates and temperatures, *Polymer*, Vol.46 (2005), pp.6035-6043.
- 47) J. Richeton, S. Ahzi, K. S. Vecchio, F. C. Jiang and R. R. Adharapurapu: Influence of temperature and strain rate on the mechanical behavior of three amorphous polymers: Characterization and modeling of the compressive yield stress, *International Journal of Solids and Structures*, Vol.43 (2006), pp.2318-2335.
- 48) J. Richeton, S. Ahzi, K. S. Vecchio, F. C. Jiang and A. Makradi: Modeling and validation

- of the large deformation inelastic response of amorphous polymers over a wide range of temperatures and strain rates, *International Journal of Solids and Structures*, Vol.44 (2007), pp.7938-7954.
- 49) D. G. Fotheringham and B. W. Cherry: The role of recovery forces in the deformation of linear polyethylene, *Journal of materials science*, Vol.13 (1978), pp.951-964.
- 50) O. Colak, U. Ozgen, S. Ahzi and Y. Remond: Cooperative viscoplasticity theory based on the overstress approach for modeling large deformation behavior of amorphous polymers, *Polymer International*, Vol.62 (2013), No.11, pp.1560-1565.
- 51) P. Yu, X. Yao, Q. Han, S. Zang and Y. Gu: A visco-elastoplastic constitutive model for large deformation response of polycarbonate over a wide range of strain rates and temperatures, *Polymer*, Vol.55 (2014), No.25, pp.6577-6593.
- 52) L. Anand, N. M. Ames, V. Srivastava and S. A. Chester: A thermo-mechanically coupled theory for large deformations of amorphous polymers. Part I: Formulation, *International Journal of Plasticity*, Vol.25 (2009), pp.1474-1494.
- 53) N. M. Ames, V. Srivastava, S. A. Chester and L. Anand: A thermo-mechanically coupled theory for large deformations of amorphous polymers. Part II: Applications, *International Journal of Plasticity*, Vol.25 (2009), pp.1495-1539.
- 54) M. Jeridi, H. Chouchene, V. Keryvin and K. Sai: Multi-mechanism modeling of amorphous polymers, *Mechanics Research Communications*, Vol.56 (2014), pp.136-142.
- 55) V. Srivastava, S. A. Chester, N. M. Ames and L. Anand: A thermo-mechanically-coupled large-deformation theory for amorphous polymers in a temperature range which

- spans their glass transition, *International Journal of Plasticity*, Vol.26 (2010), pp.1138-1182.
- 56) J. L. Bouvard, D. K. Francis, M. A. Tschopp, E. B. Marin, D. J. Bammann and M. F. Horstemeyer: An internal state variable material model for predicting the time, thermomechanical, and stress state dependence of amorphous glassy polymers under large deformation, *International Journal of Plasticity*, Vol.42 (2013), pp.168-193.
- 57) B. D. Coleman and M. E. Gurtin: Thermodynamics with internal state variables, *The Journal of Chemical Physics*, Vol.47 (1967), pp.597-613.
- 58) 井上正志, 尾崎邦宏, 森下浩延, 田村裕之, 坂元秀治: 系統的に分子構造を変化させたポリカーボネート類の粘弾性と複屈折, *材料*, Vol.52 (2003), No.3, pp.314-318.
- 59) B. Fan and D. O. Kazmer: Low-temperature modeling of the time-temperature shift factor for polycarbonate, *Advances in Polymer Technology*, Vol.24 (2005), No.4, pp.278-287.
- 60) S. Jazouli, W. Luo, F. Bremand and T. Vu-Khanh: Nonlinear creep behavior of viscoelastic polycarbonate, *Journal of materials science*, Vol.41 (2006), No.2, pp.531-536.
- 61) J. Richeton, G. Schlatter, K. S. Vecchio, Y. Remond and S. Ahzi: A unified model for stiffness modulus of amorphous polymers across transition temperatures and strain rates, *Polymer*, Vol.46 (2005), pp.8194-8201.
- 62) C. A. Mahieux and K. L. Reifsnider: Property modeling across transition temperatures in polymers: a robust stiffness-temperature model, *Polymer*, Vol.42 (2001), No.7, pp.3281-3291.

- 63) M. R. Sangtabi and M. S. Kiasat: Long-term viscoelastic properties of an adhesive and molding compound, characterization and modeling, *Polymer*, Vol.116 (2017), pp.204-217.
- 64) B. Nedjar: Frameworks for finite strain viscoelastic-plasticity based on multiplicative decompositions. Part I: Continuum formulations, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Vol.191 (2002), pp.1541-1562.
- 65) B. Nedjar: Frameworks for finite strain viscoelastic-plasticity based on multiplicative decompositions. Part II: Computational aspects, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Vol.191 (2002), pp.1563-1593.
- 66) J. S. Kim and A. H. Muliana: A time-integration method for the viscoelastic-viscoplastic analyses of polymers and finite element implementation, *International journal for numerical methods in engineering*, Vol.79 (2009), No. 5, pp.550-575.
- 67) H. Ghoneim and C. Yu: A viscoelastic-viscoplastic constitutive equation and its finite element implementation, *Computers & Structures*, Vol.17 (1983), No.4, pp.499-509.
- 68) H. Yan and C. Oskay: A viscoelastic-viscoplastic model of titanium structures subjected to thermo-chemo-mechanical environment, *International Journal of Solids and Structures*, Vol.56 (2015), pp.29-42.
- 69) N. Aleksy, G. Kermouche, A. Vautrin and J. M. Bergheau: Numerical study of scratch velocity effect on recovery of viscoelastic-viscoplastic solids, *International Journal of Mechanical Sciences*, Vol.52 (2010), pp.455-463.
- 70) G. Kermouche, N. Aleksy and J. M. Bergheau: Viscoelastic-Viscoplastic Modelling

of the Scratch Response of PMMA, *Advances in Materials Science and Engineering*, Vol.2013 (2013), Article ID 289698

- 71) 筒渕雅明, 廣田知生, 丹羽康仁, 島崎泰: プラスチック CAE 技術の活用-衝撃解析を中心に-, 住友化学技術誌, (2011), pp. 26-36.
- 72) J. T. Oden and D. A. Kross: Analysis of general coupled thermoelasticity problems by the finite element method, *Proceedings of the Second Conference on Matrix Methods in Structural Mechanics (AFFDL-TR-68-150)*, (1968), pp.1091-1120.
- 73) J. P. Carter and J. R. Booker: Finite element analysis of coupled thermoelasticity, *Computers & Structures*, Vol.31 (1989), No.1, pp.73-80.
- 74) J. C. Simo: Nonlinear stability of the time-discrete variational problem of evolution in nonlinear heat conduction, plasticity and viscoplasticity, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.88 (1991), No.1, pp.111-131.
- 75) F. Armero and J. C. Simo: A priori stability estimates and unconditionally stable product formula algorithms for nonlinear coupled thermoplasticity, *International Journal of Plasticity*, Vol.9 (1993), No. 6, pp.749-782.
- 76) M. Ortiz and L. Stainier: The variational formulation of viscoplastic constitutive updates, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Vol.171 (1999), No.3-4, pp.419-444.
- 77) E. A. Fancello and J. P. Ponthot and L. Stainier: A variational framework for nonlinear viscoelastic models in finite deformation regime, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, Vol.215 (2008), No.2, pp.400-408.

- 78) E. Fancello and J. M. Vassoler and L. Stainier: A variational constitutive update algorithm for a set of isotropic hyperelastic-viscoplastic material models, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.197 (2008), No.49, pp.4132-4148.
- 79) J. Mosler and O. T. Bruhns: Towards variational constitutive updates for non-associative plasticity models at finite strain: models based on a volumetric-deviatoric split, *International Journal of Solids and Structures*, Vol.46 (2009), No.7, pp.1676-1684.
- 80) N. Bleier and J. Mosler: Efficient variational constitutive updates by means of a novel parameterization of the flow rule, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol.89 (2012), No.9, pp.1120-1143.
- 81) D. Balzani and M. Ortiz: Relaxed incremental variational formulation for damage at large strains with application to fiber-reinforced materials and materials with truss-like microstructures, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol.92 (2012), No.6, pp.551-570.
- 82) C. Miehe and M. Lambrecht: Analysis of microstructure development in shearbands by energy relaxation of incremental stress potentials: Large-strain theory for standard dissipative solids, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, Vol.58 (2003), No.1, pp.1-41.
- 83) Q. Yang and L. Stainier and M. Ortiz: A variational formulation of the coupled thermo-mechanical boundary-value problem for general dissipative solids, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.54 (2006), No.2, pp.401-424.
- 84) L. Stainier and M. Ortiz: Study and validation of a variational theory of thermo-mechanical coupling in finite visco-plasticity, *International Journal of Solids and Structures*, Vol.47 (2010), No.5, pp.705-715.

- 85) M. Canadija and J. Mosler: On the thermomechanical coupling in finite strain plasticity theory with non-linear kinematic hardening by means of incremental energy minimization, *International Journal of Solids and Structures*, Vol.48 (2011), No.7, pp.1120-1129.
- 86) L. Stainier: Consistent incremental approximation of dissipation pseudo-potentials in the variational formulation of thermo-mechanical constitutive updates, *Mechanics research communications*, Vol.38 (2011), No.4, pp.315-319.
- 87) S. Bargmann and P. Steinmann: An incremental variational formulation of dissipative and non-dissipative coupled thermoelasticity for solids, *Heat and Mass Transfer*, Vol.45 (2008), No.1, pp.107-116.
- 88) S. Bargmann and P. Steinmann: Classical results for a non-classical theory: remarks on thermodynamic relations in Green-Naghdi thermo-hyperelasticity, *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, Vol.19 (2007), No.1-2, pp.59-66.
- 89) S. Bargmann: Remarks on the Green–Naghdi theory of heat conduction, *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, Vol.38 (2013), No.2, pp.101-118.
- 90) 寺田賢二郎, 菊池昇: 均質化法入門 (計算力学レクチャーシリーズ), 丸善, (2003)
- 91) K. Terada, I. Saiki, K. Matsui and Y. Yamakawa: Two-scale kinematics and linearization for simultaneous two-scale analysis of periodic heterogeneous solids at finite strain, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.192 (2003), No.31, pp.3531-3563.
- 92) G. Allaire: Homogenization and two-scale convergence, *SIAM Journal on Mathematical Analysis*, Vol.23 (1992), No.6, pp.1482-1518.

- 93) K. Terada, J. Kato, N. Hirayama, T. Inugai and K. Yamamoto: A method of two-scale analysis with micro-macro decoupling scheme: application to hyperelastic composite materials, *Computational Mechanics*, Vol.52 (2013), No.5, pp.1199-1219.
- 94) S. Mortazavian, A. Fatemi, S. R. Mellott and A. Khosrovaneh: Effect of cycling frequency and self heating on fatigue behavior of reinforced and unreinforced thermoplastic polymers, *Polymer Engineering and Science*, Vol.55 (2015), No.10, pp.2355-2367.
- 95) K. Terada, M. Kurumatani, T. Ushida and N. Kikuchi: A method of two-scale thermo-mechanical analysis for porous solids with micro-scale heat transfer, *Computational Mechanics*, Vol.46 (2010), No.2, pp.269-285.
- 96) I. Temizer and P. Wriggers: Homogenization in finite thermoelasticity, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.59 (2011), No.2, pp.344-372.
- 97) E. Kroner: Allgemeine kontinuumstheorie der versetzungen und eigenspannungen. *Archive for Rational Mechanics and Analysis*, Vol.4 (1960), pp.273-334.
- 98) E. H. Lee: Elastic plastic deformation at finite strain, *ASME Journal of Applied Mechanics*, Vol.36 (1969), p.16.
- 99) P. J. Flory: Thermodynamics relations for high elastic materials, *Transactions of the Faraday Society*, Vol.57 (1961), pp.829-838.
- 100) G. A. Holzapfel and J. C. Simo: A new viscoelastic constitutive model for continuous media at finite thermomechanical changes, *International Journal of Solids and Structures*, Vol.33 (1996), No.20-22, pp.3019-3034.
- 101) G. A. Holzapfel: *Nonlinear solid mechanics A continuum approach for engineering*, Wiley, (2000)

- 102) J. C. Simo: On a fully three-dimensional finite-strain viscoelastic damage model: formulation and computational aspects, *Computer methods in applied mechanics and engineering*, Vol.60 (1987), pp.153-173.
- 103) S. Govindjee and J. C. Simo: Mullin's effect and the strain amplitude dependence of the storage modulus, *International Journal Solids and Structures*, Vol.29 (1992), No.14-15, pp.1737-1751.
- 104) A. N. Gent: A New Constitutive Relation for Rubber, *Rubber Chemistry and Technology*, Vol.69 (1996), pp.59-61.
- 105) M. Ali, M. Pant and A. Abraham: Uniconventional initialization methods for differential evolution, *Applied Mathematics and Computation*, Vol.219 (2013), pp.4474-4494.
- 106) R. Storn and K. Price: Differential evolution - a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces, *Journal of Global Optimization*, Vol.11 (1997), pp.341-359.
- 107) M. A. Biot: Linear thermodynamics and the mechanics of solids, *Cornell Aeronautical Laboratory, Inc.*, (1958)
- 108) G. I. Taylor and H. Quinney: The latent heat remaining in a metal after cold working, *Proceedings of the Royal Society of London Series A*, Vol.163 (1958), pp.157-181
- 109) J. C. Simo and T. J. R. Hughes: *Computational inelasticity*, Springer Science & Business Media, Vol.7 (2006)
- 110) 長谷部忠司, 芝原顕, 今井田豊: FCC 金属における転移相互作用のモデル化と非比例繰返し負荷への適用, *材料*, Vol.46 (1997), No.5, pp.475-480.

- 111) J. Hodowany, G. Ravichandran, A. J. Rosakis and P. Rosakis: Partition of plastic work into heat and stored energy in metals, *Experimental Mechanics*, Vol.40 (2000), No.2, pp.113-123.
- 112) M. Tanaka, T. Sasagawa, R. Omote, M. Fujikawa, D. Balzani and J. Schroder: A highly accurate 1st- and 2nd-order differentiation scheme for hyperelastic material models based on hyper-dual numbers, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.283 (2015), pp.22-45.
- 113) M. Tanaka, D. Balzani and J. Schroder: Implimentation of incremental variational formulations based on the numerical calculation of derivatives using hyper dual numbers, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.301 (2016), pp.216-241.
- 114) J. A. Fike and J. J. Alonso: The Development of hyper-dual numbers for exact second-derivative calculations, *AIAA paper*, Vol.886 (2016), p.124.
- 115) J. Bonet and A. J. Burton: A simple orthotropic transversely isotropic hyperelastic constitutive equation for large strain computations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.162 (1998), pp.151-164.
- 116) 東レ: トレカ糸の製品データ, http://www.torayca.com/lineup/product/pro_001_01.html, (参照日 2017 年 10 月 24 日)
- 117) C. Miehe: Numerical computation of algorithmic (consistent) tangent moduli in large-strain computational inelasticity, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.134 (1996), pp.223-240.

- 118) 小林大志, 平山紀夫, 山本晃司, 寺田賢二郎: 均質化法を用いた CFRTTP 熱膨張係数の同定, 計算工学講演会論文集, Vol.21 (2016), 4p.