

ネットワークによる弾塑性のモデル化

児玉大樹

東北大学材料科学高等研究所、理化学研究所 iTHEMS

吉田建一 (発表者)

埼玉大学大学院理工学研究科

kyoshida@mail.saitama-u.ac.jp

arXiv preprint: "A mathematical model of network elastoplasticity"

<https://arxiv.org/abs/2107.04310>

発表者の自己紹介

経歴:

2015/3 東京大学 数理科学研究科 博士課程修了
2015/4-2017/3 東京大学 数理科学研究科 研究員
2017/4-2019/3 京都大学 理科学研究科 研究員
2019/4- 埼玉大学 理工学研究科 研究員

専門: 3次元双曲多様体のトポロジー

現在, 材料科学における応用数学的なプロジェクトに参加している.

研究の動機, 位置付け

JST CRESTのプロジェクト “熱可塑性エラストマーにおける動的ネットワークのトポロジー制御” (課題番号 JPMJCR17J4) において, 熱可塑性エラストマー(TPE)の材料開発に向けた研究を行っている. このプロジェクトには, 材料科学, コンピュータシミュレーション, 数学の研究者が参加している. ここでの数学の役割は, 材料の構造をモデル化し, 新しい材料のための指針を提案することである. とくに, 離散幾何解析(微分幾何学の離散化を扱う分野)の手法を使う.

・ 本発表の概要

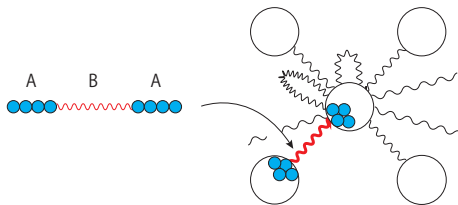
TPEの構造を周期的グラフによって表し, 弾性と塑性を記述する. それにより, 材料として興味深いネットワークを提案できるようになる.

熱可塑性エラストマーの構造

熱可塑性エラストマー thermoplastic elastomer (TPEと略す)

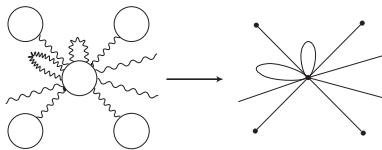
ゴム弾性を示し、高温で塑性変形する高分子材料。

典型的なTPEは、2種類のモノマーがA...AB...BA...Aという形で並んだ、ABAトリブロック共重合体というタイプの高分子からなる。(例えば A:スチレン, B:ブタジエン)



Aの部分がハードドメインを形成し、架橋点として機能する。Bの部分がソフトドメインを形成し、ゴム弾性が生じる。

ハードドメインを頂点、その間の鎖状高分子を辺に対応させることにより、グラフで構造を表す。



周期的であり、高分子が互いにぶつからず自由に動くものとして、TPEの構造を近似する。

TPEの性質:

- ゴム弾性はエントロピー弾性である。つまり、鎖状高分子がランダムに動くことにより縮もうとすることから生じる。
- 変形の際に、体積はほとんど変化しない。
- 普通のゴムは高分子を硫黄による共有結合によって架橋しているので頑丈である。対してTPEは、高温で塑性変形するので加工成型やリサイクルがしやすいという利点があるが、変形の際にハードドメインが壊れやすい。

グラフの周期的実現

小谷-砂田による周期的グラフについての離散幾何解析的な結果を利用する.

周期的グラフ $X = (V, E, w)$

V : 頂点の集合

E : (向きのついた)辺の集合

各辺 $e \in E$ に対して始点 $o(e) \in V$ と終点 $t(e) \in V$ と重み(辺の本数) $w(e)$ が指定されている. 周期的な対称性 ($\mathbb{Z}^N$ の X への自由な作用)がある.

X の周期的実現

$\Phi: V \rightarrow \mathbb{R}^N$ (頂点の位置を指定する.)

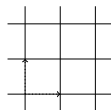
周期写像 $\rho: \mathbb{Z}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ があって, 周期に関する対称性を保つものを考える.

周期的グラフ X に対して周期的実現 Φ を指定したものをネットワークと呼ぶことにする.

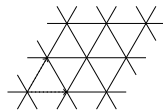
辺 $e \in E$ に対してベクトル

$\Phi(e) = \Phi(t(e)) - \Phi(o(e))$ が定まる.

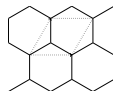
2次元の周期的グラフの実現の例:



正方格子



三角格子



六角格子

(周期ごとの)エネルギー

$$\mathcal{E}(X, \Phi) = \frac{1}{2} \sum_{e \in E_0} w(e) \|\Phi(e)\|^2$$

(E_0 は $E/\mathbb{Z}^N$ の代表元の集合)

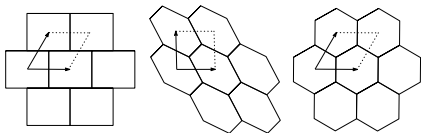
調和的实现: 周期を固定した上でエネルギーが最小になる実現.

$$\Phi \text{ が調和的} \Leftrightarrow \text{各 } v \in V \text{ に対して} \\ \sum_{o(e)=v} \Phi(e) = 0.$$

標準的实现: 周期ごとの体積を固定した上でエネルギーが最小になる, 特別な調和的实现.

ネットワークの弾性

同じ周期的グラフの異なる実現の例:



調和的でない 調和的だが標準的でない 標準的

ネットワークの大域的な歪みを調べるため、テンションテンソルという行列を導入した。

(周期ごとの)テンションテンソル

$$\mathcal{T}(X, \Phi) = \frac{1}{2} \sum_{e \in E_0} w(e) \Phi(e)^{\otimes 2}$$

ここで、($N = 3$ のとき)

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}^{\otimes 2} = \begin{pmatrix} x^2 & xy & xz \\ xy & y^2 & yz \\ xz & yz & z^2 \end{pmatrix} \text{ とする.}$$

$\text{tr}(\mathcal{T}(X, \Phi)) = \mathcal{E}(X, \Phi)$ が成り立ち、 $\mathcal{T}(X, \Phi)$ は方向付きのエネルギーを表すとみなせる。

標準的实现の特徴づけ

Φ が標準的 $\Leftrightarrow \Phi$ が調和的かつ $\mathcal{T}(X, \Phi)$ が単位行列の定数倍。

線形変換 $A \in SL(N, \mathbb{R})$ により、テンションテンソルは $\mathcal{T}(X, A \circ \Phi) = A \mathcal{T}(X, \Phi) A^T$ にうつる。

TPEの変形についての力学的設定

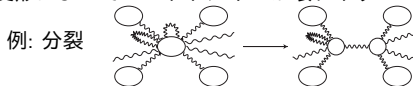
ネットワークのエネルギー $\mathcal{E}(X, \Phi)$ を弾性エネルギー(ヘルムホルツの自由エネルギー)とみなし、調和的实现を平衡状態とみなす。巨視的な変形として、体積を保つ線形変換を考える。

巨視的な材料としてのコーシー応力テンソルが $2(\text{vol}(\mathbb{R}^N / \rho(\mathbb{Z}^N)))^{-1} \mathcal{T}(X, \Phi)$ で定まる。これにより、標準的实现は外力がない状態とみなせる。

グラフのトポロジーが変わらない限り、応力にネットワークの内部構造は反映されない。

ネットワークの塑性

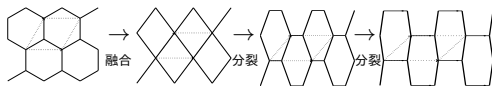
TPEは変形によってハードドメインが壊れやすい.



大域の変形の際に, 局所的な条件によってグラフのトポロジーが変わるとする. さらに局所変形後のネットワークが調和的に実現されるとする.

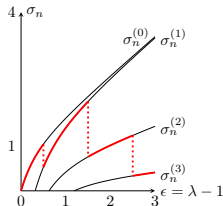
このとき弾性からの逸脱, つまり塑性が生じる.

例: 六角格子を横に一軸伸長する. (ループは省略.)



λ 倍に伸ばす一軸変形についての応力-歪み曲線 (連続ではない.)

$\sigma_n^{(i)}$: i 回局所変形が起こったときの工学的応力



塑性の度合いを表す量

ネットワーク (X, Φ) が変形して, 周期を元に戻したとき (X', Φ') になったとする. このときエネルギー損失率を $R = 1 - (\mathcal{E}(X', \Phi')/\mathcal{E}(X, \Phi))$ で定義する.

材料のブレンドに相当する, 重ね合わせの例:

X_0, X_1 : 周期ごとの頂点が1個のネットワーク
 $X_s = (1-s)X_0 + sX_1$ ($0 \leq s \leq 1$): 重ね合わせたネットワーク (辺の数を足し合わせる.)

R_s : X_s の頂点が1回分裂したときのエネルギー損失率

分裂後新しいブリッジになるループの割合が一定とする. $R_0 = R_1$ ならば, $R_s \leq R_0$ が成り立つ.

ブレンドによって塑性が減る傾向があるとみなせる.

