物質のレオロジーを始める前に

佐々木 裕[1]

東亞合成株式会社

[1]hiroshi_sasaki@mail.toagosei.co.jp

Outline

この章でのお話

具体的なレオロジーの議論に入る前に、もう少しだけ、これからの議論に必要となる数学と物理の基礎的な事項について確認していきましょう。
ここでは、前章よりは少し難しい話になり、高校から大学レベルのお話をすることになります。
具体的な事項を以下に列記しました。

- レオロジーで扱う関数について
  - 指数関数と対数関数について
- 微積分について
  - 微積分の見直しと簡単な微分方程式
- 物理モデルを物質の物理とつなげるために
  - 力、仕事、ポテンシャルと微積分

1. レオロジーで扱う関数について
   - 関数の一覧
   - 指数関数について
   - 対数関数について
2. 微積分について
   - 微分について
   - 積分について
   - 微積分と微分方程式
3. 物理モデルを物質の物理とつなげるために
   - 力、仕事、エネルギー
   - ポテンシャルと力と微積分
   - 摩擦と熱

レオロジーで多用する関数について

- 第二章において関数について簡単に触れた際に、物理的なイメージを得るためには線型性が成り立つような範囲で議論すると簡単にモデル化できるということをお話しました。
- これは関数としては、一次関数ということになります。
- 確かに、線型関係に持ち込めれば単純化できて便利なのですが、事象の関係はそう単純に進むわけでもありません。
- ここでは、レオロジーで非常に多く使われる 2 つの関数について、説明を行います。

関数の一覧

- 関数について、一覧表にしました。
  - 代数関数までが中学校、
  - 初等超越関数からが高校以降です。

関数					具体例
初等関数	代数関数	有理関数	多項式関数	定数関数	$f(x) = a$
				一次関数	$f(x) = ax + b$
				二次関数	$f(x) = ax^2 + bx + c$
				三次関数	$f(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d$
			分数関数		$f(x) = \frac{a}{x}$
		無理関数			$f(x) = \sqrt{x}$
	初等超越関数	指数関数			$f(x) = e^x$
		対数関数			$f(x) = \ln(x)$
		三角関数			$f(x) = \sin x$
		双曲線関数			$f(x) = \sinh x$
		冪関数			$f(x) = x^a$
特殊関数	ガンマ関数				$\Gamma(x)$
	ベータ関数				$\mathrm{B}(x, y)$
	誤差関数				$erf(x)$
	デルタ関数				Δ

ここで振り返る関数は

レオロジーを理解するために必要となる関数

- 指数関数
- 対数関数

<table>
<tr><th colspan="5">関数</th><th>具体例</th></tr>
<tr><td rowspan="11">初等関数</td><td rowspan="6">代数関数</td><td rowspan="5">有理関数</td><td rowspan="4">多項式関数</td><td>定数関数</td><td>$f(x) = a$</td></tr>
<tr><td>一次関数</td><td>$f(x) = ax + b$</td></tr>
<tr><td>二次関数</td><td>$f(x) = ax^2 + bx + c$</td></tr>
<tr><td>三次関数</td><td>$f(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d$</td></tr>
<tr><td colspan="2">分数関数</td><td>$f(x) = \frac{a}{x}$</td></tr>
<tr><td colspan="3">無理関数</td><td>$f(x) = \sqrt{x}$</td></tr>
<tr><td rowspan="5">初等超越関数</td><td colspan="3">指数関数</td><td>$f(x) = e^x$</td></tr>
<tr><td colspan="3">対数関数</td><td>$f(x) = \ln(x)$</td></tr>
<tr><td colspan="3">三角関数</td><td>$f(x) = \sin x$</td></tr>
<tr><td colspan="3">双曲線関数</td><td>$f(x) = \sinh x$</td></tr>
<tr><td colspan="3">冪関数</td><td>$f(x) = x^a$</td></tr>
<tr><td rowspan="4">特殊関数</td><td colspan="4">ガンマ関数</td><td>$\Gamma(x)$</td></tr>
<tr><td colspan="4">ベータ関数</td><td>$\mathrm{B}(x, y)$</td></tr>
<tr><td colspan="4">誤差関数</td><td>$erf(x)$</td></tr>
<tr><td colspan="4">デルタ関数</td><td>Δ</td></tr>
</table>

指数関数とは

指数関数を天下りに定義

「指数関数とは、冪における指数を変数とし、その定義域を実数の全体へ拡張して定義される初等超越関数の一種」

$$f(x) = a^x$$

冪とは

「底」と呼ばれる正の数の右肩に「指数」と呼ばれる数を載せた数式表現、指数が自然数の場合に累乗

- 「累」＝ 重ねる、「乗」＝ 掛ける
- 累乗は複数回掛け合わせるという意味となる。

$$\underbrace{a \times a \times a \cdots \times a}_{n\text{ 個}} = a^n$$

指数の性質

指数の持つ性質を簡単にまとめました。

- 累乗同士の掛け算は、指数同士の足し算
  $a^n \times a^m = a^{(n+m)}$
- 累乗のさらなる累乗は、指数同士の掛け算
  $(a^n)^m = a^{(n \times m)}$
- 指数が 0 の場合は？ $a^0 = 1$
- 指数が負 $\Rightarrow$ 指数が正の逆数 $a^{-k} = \dfrac{1}{a^k}$
- 指数同士の割り算は指数の引き算 $a^n \div a^m = a^{n-m}$
- 指数が分数の場合
  - 分数の分母となる値を用いて累乗根を表し、
  - 分子はそのべき乗を表す
  $a^{\frac{m}{n}} = \sqrt[n]{a^m}$

指数の性質（自然数の場合）

同じ底の累乗同士の掛け算は、指数同士の足し算となる。

$$a^n \times a^m = (\underbrace{a \times a \times a \cdots \times a}_{n\text{ 個}}) \times (\underbrace{a \times a \times a \cdots \times a}_{m\text{ 個}})$$

$$= \underbrace{a \times a \times a \cdots \times a}_{n+m\text{ 個}} = a^{(n+m)}$$

累乗のさらなる累乗は、指数同士の掛け算となる。

$$(a^n)^m = \underbrace{(\underbrace{a \times a \cdots \times a}_{n\text{ 個}}) \times (\underbrace{a \times a \cdots \times a}_{n\text{ 個}}) \times \cdots \times (\underbrace{a \times a \cdots \times a}_{n\text{ 個}})}_{m\text{ 個}}$$

$$= \underbrace{a \times a \times a \cdots \times a}_{n \times m\text{ 個}} = a^{(n \times m)}$$

指数の性質（整数への拡張）

指数が 0 の場合は？: a^0

$$a^n \times a^0 = a^{(n+0)} = a^n$$

$$\therefore \ a^0 = 1$$

負数への拡張：k が正の整数

$$a^k \times a^{-k} = a^{k+(-k)} = a^0 = 1$$

$a^k (\neq 0)$ で両辺を除すと、

$$\therefore \ a^{-k} = \frac{1}{a^k}$$

指数が負 $\Rightarrow$ 指数が正の逆数

指数同士の割り算

- 割り算は指数が負になると考える。
- 結局、以下のように指数の引き算となる。

$$\begin{aligned} a^n \div a^m &= a^n \times \frac{1}{a^m} \\ &= a^n \times a^{-m} \\ &= a^{n+(-m)} \\ &= a^{n-m} \end{aligned}$$

指数の性質（有理数への拡張）

$a^{\frac{1}{n}}$（n は整数）は？

- $a^{\frac{1}{n}}$ を n 乗すると、

$$\left(a^{\frac{1}{n}}\right)^n = a^{\frac{1}{n}\times n} = a$$

- すなわち、
  $a^{\frac{1}{n}}$ の n 乗が a

n 乗根とは

- x を n 乗すると
  y になるとき、
  （n は正の整数）
  - y を「x の n 乗根」
  - $\sqrt[n]{x}$ と表記

指数が分数の場合

- 分数の分母となる値を用いて累乗根を表し、
- 分子はそのべき乗を表すこととなり、

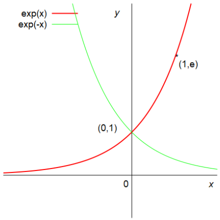
$$a^{\frac{m}{n}} = \sqrt[n]{a^m}$$

ネイピア数 e を底とする指数関数

ネイピア数 e を底

- 物理的な議論では、底にネイピア数 e を多用
  - ネイピア数 e は、π と同様に多用される数学定数の一つ
  - その値は、$e = 2.718281828\cdots$ と続く「超越数」
- 独立変数を見やすくするために、$\exp(x)$ と表記

- $\exp(x)$ は、単調増加。
- $\exp(-x) = \left(\dfrac{1}{e}\right)^x$ は、単調減少。
- 常に、点 $(0, 1)$ を通る。
- x 軸（$y = 0$）を漸近線



対数関数

「指数と対数は表裏一体」で、逆関数の関係

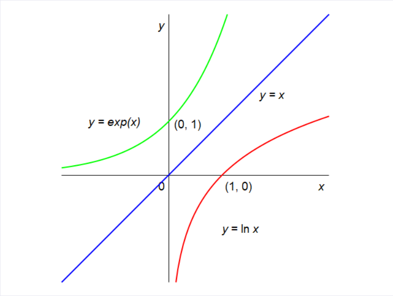
$$a^x = M \Leftrightarrow x = \log_a M$$

指数と対数

- 指数：
底に指数を作用 $\rightarrow$ 真数
$$f(x) = a^x$$
- 対数：
真数は底にどんな指数を与えたもの？
$$f(x) = \log_a x$$

グラフで見れば

底としてネイピア数を用いた場合、



$y = x$ のグラフに関して対称

対数の性質

対数の性質

任意の正の実数である M, N に対して、

- 対数同士の足し算は、真数の掛け算
  $\ln(M \times N) = \ln M + \ln N$
- 対数同士の引き算は、真数の割り算
  $\ln(M \div N) = \ln M - \ln N$
- 真数の冪は、冪を掛け算に $\ln M^p = p \ln M$
- 真数の逆数は、マイナスを付けて $\ln \dfrac{1}{M} = -\ln M$

対数の使い方

大きな数を桁数でざっくり見るときに便利

対数スケールの Wiki

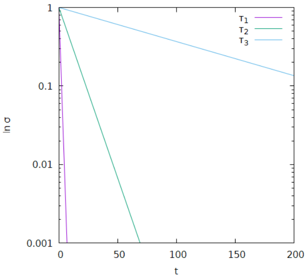
対数グラフ

片対数グラフ

指数関数で表される数式 $y = \exp(ax + b)$ があったとき、両辺の対数を取ると、

$$\ln y = ax + b$$

縦軸を対数目盛としたグラフにプロットすれば、その傾きが a、y 切片が b となる直線が得られる。



指数の異なる指数関数を片対数プロットした例

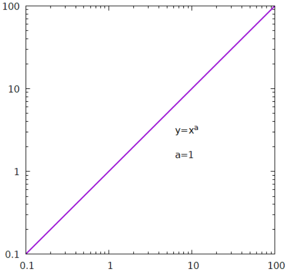
対数グラフ

両対数グラフ

- 極端に範囲の広いデータを扱えるため、粘弾性スペクトルは、通常この形で表される。
- 冪関数 $y = x^a$ を線型で処理できる。

$$\log y = a \log x$$

両対数グラフで、その傾きがベキに対応



冪関数を両対数グラフでプロットした例

1. レオロジーで扱う関数について
   - 関数の一覧
   - 指数関数について
   - 対数関数について
2. 微積分について
   - 微分について
   - 積分について
   - 微積分と微分方程式
3. 物理モデルを物質の物理とつなげるために
   - 力、仕事、エネルギー
   - ポテンシャルと力と微積分
   - 摩擦と熱

微分の考え方

微分とは

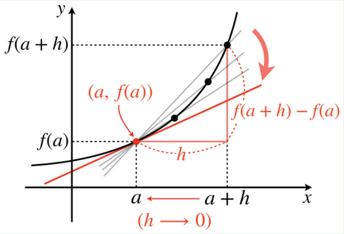
- 対象とする関数が、
- 注目する点の周りで、
- どう振る舞うかを、
- 明らかにする方法

ざっくりとは

- 入力が増加したときの
- 関数の振る舞い
  - 微分が正 ⇔ 出力は増加
  - 微分が負 ⇔ 出力が減る

細かく言えば、

- 接線の「傾き」
  - 変数の増分と、
  - 関数の増分の
  - 「比」に対応
- 変数の増分を無限小



最小限の微分の知識

微分の記法

- $f(x)$ を x で微分を、$\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}$ と書き表す。
- d が微小量を表し、（分母：変数）と（分子：関数）との僅かな変化の比をとるイメージ

微分の対象	公式	メモ
冪の微分	$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x^a = ax^{a-1}$	多項式では線形性も利用
指数関数の微分	$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\exp(x) = \exp(x)$	ネイピア数の場合
自然対数の微分	$\dfrac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\ln x = \dfrac{1}{x}$	底がネイピア数

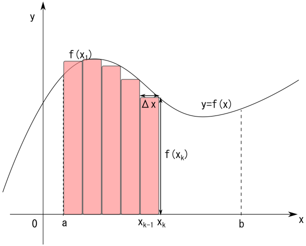
積分の２つのイメージ（定積分）

定積分は面積

- 直感的には「面積」
  - 微小な刻み $\mathrm{d}x$ と
  - $f(x)$ との積（面積：グラフの台形）を
  - 積算する。

$$[F(x)]_a^b = \int_a^b f(x)\mathrm{d}x$$

- 積分記号 $\int$ は、
  - 和を表す $\sum$ Summation から
  - S を縦方向に長く



自動車の速度の例

- 速度が $v(t)$ のとき、
- 時刻 t_0 から t_1 までに進んだ距離 L は、

$$L = \int_{t_0}^{t_1} v(t)\mathrm{d}t$$

積分の２つのイメージ（微分の逆操作）

微分の逆操作としての不定積分

- 微分するとその関数 $f(x)$ に一致するような
- 原始関数 $F(x)$ を求める操作
  - 積分範囲を定めない（不定）
  - このとき、**定数 C （積分定数）だけ不定値**が出る。

$$F(x) = \int f(x)\mathrm{d}x + C$$

- **（逆操作）**両辺を微分すれば、元の関数

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}F(x) = f(x)$$

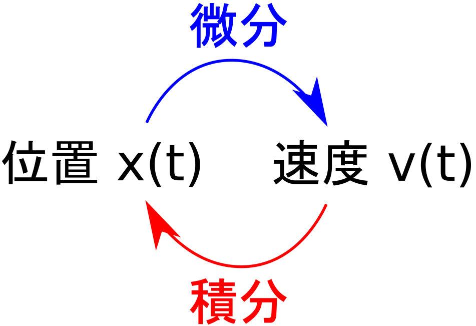
微積分の直感的理解

微積分を使えば、

- 微分で瞬間の描像を取り出し、
- 積分で全体のふるまいを総量として把握。

小学生レベルでは、
平均としての運動
（一定値）を考えて、
単純に割り算

距離＝速度×時間
速度＝距離÷時間



自転車のライトで微分をイメージ

自転車のライトは、

- 速度を上げると明るく、止まると消える。
  - 明るさが瞬間的な速度
  - 微分の値の大小に対応
- 明るさ ⇔ 非常に短い時間あたりに進める距離

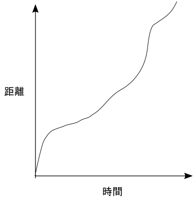
微分の表すもの

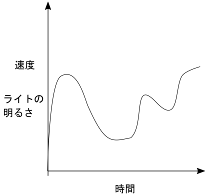
- 微分で見ることで、関数の瞬間的な振る舞いがわかる。
  - 微分大 ⇔ その瞬間に変化量が大きい
  - 微分小 ⇔ その瞬間にはあまり変化しない。

自転車のライトは微分と同じ

距離と速度の関係

- 時間 t の関数として進んだ距離 l を $l(t)$ と表したとき、
- その微分を取れば各瞬間での速度 $v(t)$ となる。





注意点

- ライトのアナロジーは微分値が正の場合のみ。
- 微分は負の値も取る。

微分で表される自然事象

微分方程式とは？

物理現象や化学現象を、微分の形で記述したもの

- 例えば、「放射性物質の崩壊」等の、一次反応と呼ばれる化学現象を記述する頻出の微分方程式の形

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}N(t) = -aN(t)$$

- この式の意味は、
  - 左辺は時間の関数である $N(t)$ の時間変化を微分の形、
  - 右辺はその変化が、$N(t)$ の量に比例して減少（負号がついているから）することを表す。
  - 定数 a は $[1/\mathrm{T}]$ の次元を持つ。
- 積分を使って、方程式を解く。

微分で表される自然事象

微分方程式を解く

- 変数を両辺に振り分ける。

$$\frac{\mathrm{d}N}{N} = -a\mathrm{d}t$$

- 両辺を積分する。

$$\int \frac{\mathrm{d}N}{N} = -a \int \mathrm{d}t$$

$$\ln N = -at + C$$

- 指数関数に書き直し

$$N = \exp(-at + C) = \exp(C) \times \exp(-at) = C' \exp(-at)$$

微分で表される自然事象

微分方程式を解く

- 初期条件を考慮して変数を決める。
  - $t = 0$ での初期濃度が N_0 とすると、

$$N(t=0) = C' \exp(-a * 0) = N_0$$
$$\therefore \ C' = N_0$$

  - また、a は [1/T] の次元であったので、時間の次元を持った $1/\tau$ と書き換え、
- 結局、

$$N = N_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$$

指数関数的減少の具体的な例

指数関数的減少とは？

- 下式をグラフに表すと、右図となる。

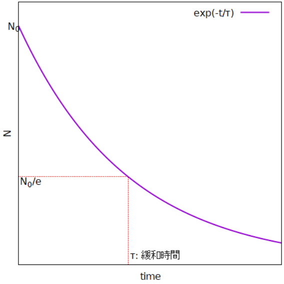
$$N(t) = N_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$$

- 時間経過に伴い濃度が減少し $t = \tau$ において

$$N(\tau) = N_0 \exp(-1) = \frac{N_0}{e}$$

緩和時間とは、

時間の次元を持つ τ は、初期濃度の $\frac{1}{e}$ となる時間



緩和時間の（一つの）考え方

初期の減少速度は？

- 濃度の式を時間で微分して減少速度は、

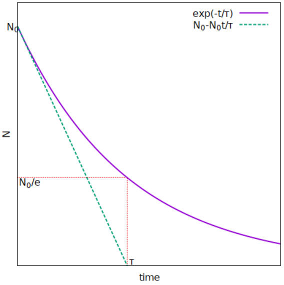
$$\frac{\mathrm{d}N(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{N_0}{\tau}\exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$$

- $t = 0$ での減少速度は、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}N(0) = -\frac{N_0}{\tau}\exp\left(-\frac{0}{\tau}\right) = -\frac{N_0}{\tau}$$

緩和時間の意味

初期速度を維持して減少すると、$t = \tau$ で濃度が 0

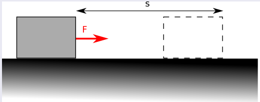


1. レオロジーで扱う関数について
   - 関数の一覧
   - 指数関数について
   - 対数関数について
2. 微積分について
   - 微分について
   - 積分について
   - 微積分と微分方程式
3. 物理モデルを物質の物理とつなげるために
   - 力、仕事、エネルギー
   - ポテンシャルと力と微積分
   - 摩擦と熱

仕事とエネルギー

仕事とは

- 質点に力を作用して移動すること
- 仕事は作用させた力 F と移動した距離 s の積



仕事
$W = F \times s$

エネルギーとは

- 仕事をする能力のこと
- 物体や空間（場）は、その状態を変えることによりエネルギーを蓄える。
- 仕事とエネルギーの次元は同一。

仕事の次元と単位

- 次元：[仕事] = [力][距離] = $[ML^2T^{-2}]$
- 単位：ジュール J

仕事とポテンシャル

ポテンシャルとは

- 基準の状態を定めて、
  - その着目する状態にするために、
  - その物体あるいは空間に加えた仕事の量
- 逆に言えば
  - ある状態から基準の状態に戻るまでに、
  - 外に取り出すことのできるエネルギーの量
- 力が「保存力」であれば、
- ポテンシャルが「位置のみの関数の状態量」となる

それぞれの定義

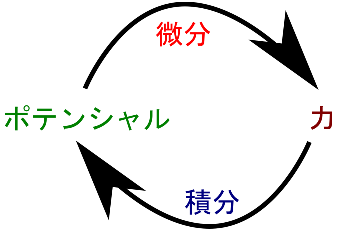
- 保存力の定義：仕事が経路によらないこと
- 状態量：系の状態だけで、一意に決まる物理量

ポテンシャルと力

ポテンシャル $U(\boldsymbol{r})$ は、

- 基準の位置 $\boldsymbol{r}_0$ から、
- 位置 $\boldsymbol{r}$ までの、
- 力 $F(\boldsymbol{r})$ の積分

$$W(\boldsymbol{r}) = \int_{\boldsymbol{r}_0}^{\boldsymbol{r}} F(\boldsymbol{r})\mathrm{d}\boldsymbol{r} = -U(\boldsymbol{r})$$



力 $F(\boldsymbol{r})$ は、

- 任意の位置で、
- $U(\boldsymbol{r})$ を微分すれば、

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}U(\boldsymbol{r}) = -F(\boldsymbol{r})$$

バネの場合は

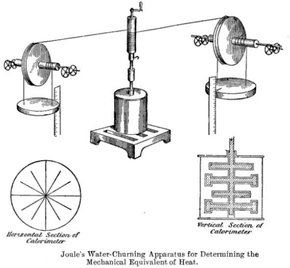
- 力は $F(x) = -kx$
- ポテンシャル $U(x)$ は

$$U(x) = -\int_0^x F(x')\mathrm{d}x' = \frac{1}{2}kx^2$$

摩擦について

摩擦と熱とエネルギー

- 摩擦力は非保存力
  - ポテンシャルは状態量ではなく経路に依存
- 内部の粒子の摩擦により、
  - 粒子の運動エネルギーが増加し系全体の温度が上昇
  - 非断熱系では、熱エネルギーとして外界に散逸。
- 非保存力も含めれば、系全体のエネルギーは保存



ジュールの試験

まとめ

- 数学的な事項について
  - レオロジーで扱う関数について、指数関数とその逆関数に対応する対数関数の確認
  - 微積分について、微分が「瞬間的な振る舞いを記述」し、積分が「全体の量を把握」する
  - 簡単な微分方程式を解くことで、レオロジー関連の事項で頻出の「指数関数的な応答」を理解
- 物理に関する事項として
  - 力、仕事、エネルギー、ポテンシャルを確認し、
  - それら相互の関係と微積分について
  - 摩擦と熱についても