

令和 4 年 6 月 22 日現在

機関番号：14301

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2019～2021

課題番号：19H01862

研究課題名（和文）遅いミクロ自由度に着目したスケール階層間連携によるソフトマター流動予測法の確立

研究課題名（英文）Studies on hierarchical simulation methods using slow variables to predict the flows of soft matter

研究代表者

谷口 貴志 (Taniguchi, Takashi)

京都大学・工学研究科・准教授

研究者番号：60293669

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,600,000 円

研究成果の概要（和文）：高分子材料は、様々な工業分野で利用され必要不可欠な存在となっている。このような高分子製品を製造するには、高分子溶融体を流路に流して成形するプロセスが必要になるが、高分子のミクロ状態とマクロな流動が互いに強く影響し合っているため、その流動の予測は容易ではない。より高い精度で流動や分子の状態を予測するために、本研究ではミクロな高分子の状態とマクロな流動を結合させたマルチスケールシミュレーション法を発展させ、壁面に囲まれた流路だけでなく、自由表面を有する流れに対しても、流体中の任意の位置での高分子の状態、温度分布、高分子の分子量分布を考慮して予測する方法を確立した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

ソフトマターの非平衡応答挙動やその結果である流動挙動を予測するには、マクロな流動とミクロな状態変化を同時に扱うことが本質的に必要となる。本研究では、流体を多数の流体粒子に分割し、それぞれがミクロな高分子の状態を記述できるシミュレータを持ち、マクロな流動と結合するマルチスケールシミュレーション法を構築した。この方法により分子状態とマクロな流動を繋いで理解できるようになったことは学術的のみならず、工学的にも価値の高い成果である。本方法は、原理的には流動のみならず、マルチスケール性が本質的な他の物理現象に対しても有効であり、これを利用してより正確な物性予測を可能とする方法論の端緒を開いた。

研究成果の概要（英文）：Polymeric materials are used in various industrial fields and have become indispensable in our daily life. To manufacture such polymer products, a process of flowing a polymer melt into a flow channel and molding it is required. But it is not easy to predict the flow because the microscopic states of polymer chains and macroscopic flow of the polymeric fluid have a strong influence on each other. In this research, to predict the polymeric flow and state of polymer chains with higher accuracy, we have developed a multi-scale simulation method that can deal simultaneously with the state of the microscopic state of polymer chains and a macroscopic flow. In addition, we have succeeded in extending the multiscale simulation method so that we can deal with the temperature distribution, the molecular weight distribution of the polymer, and a flow with a free surface.

研究分野：ソフトマター物理学

キーワード：マルチスケールシミュレーション ソフトマター物理 階層間連携 高分子流体

## 様式 C-19、F-19-1、Z-19 (共通)

### 1. 研究開始当初の背景

高分子系を代表とする多くのソフトマターの平衡状態は、スケーリング理論に代表される様々な理論によって非常によく理解されている。一方、ソフトマターは、ある温度領域で非常に柔らかく流動的で外力により容易に非平衡状態となるが、その応答挙動の理論的な理解は乏しいものが多い。例えば、外部からの力で系を流動させた場合、ソフトマターの多くは Newton 流体とは異なり、特異な流動現象(例えば「急縮小路中の流れの不安定流動」や「せん断流動下で空間的にせん断速度が異なるバンド構造が現れるシアバンド現象」など)を示すことが知られているが、その物理的起源は現在も不明なものが多く、流動を理論的に予測することが出来ていない。これは、ソフトマター系のそれぞれがマイクロからメソスケールの様々なスケールの内部構造を有し、さらに流動によって内部構造が幅広い時間スケールで変化し、同時にマイクロスケールの分子状態やメソスケールの構造の変化が、逆にマクロスケールの流動に影響を及ぼすためである。つまり、この流動挙動の予測の難しさは、ソフトマターの多くでマイクロ・メソスケールの特徴的時間スケール(緩和時間)が長く、マクロスケールの特徴的時間スケールに近いため、マイクロとマクロのスケール階層間の相関が本質的に強い系であることに由来する。このようにソフトマターの非平衡応答挙動やその結果である流動挙動を予測するには、流動とマイクロな状態変化を同時に扱うことが本質的に必要となる。実際、このようなスケール階層間の相関が強い現象を扱うために「階層間連携による物性予測法の確立の必要性」が叫ばれて久しいが、現在においてもそのような方法論が確立しているとは言い難い状況である。

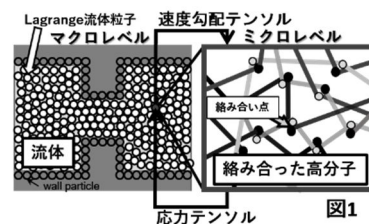
### 2. 研究の目的

高分子系の流動を予測するためには、流動に対する物質の応答である応力テンソルが空間の各点において正確に予測可能なことが必要不可欠であり、実際、マイクロスケールの分子の状態やメソスケールの構造の変化の応答は、この応力という物理量に集約される。このため、今まで多くの研究者が、印可されるひずみやひずみ速度テンソルの関数として応力テンソルがどのような方程式(応力に対する方程式を構成方程式と呼ぶ)で表されるかという問題に取り組んできた。しかしながら、実際に材料として使われている高分子は、高分子の分岐構造が複雑な場合(例えば、星形、H型、ランダム分岐)が一般的であり、加えて異なる化学種のブロックからなるブロック共重合体や、複数の種類の高分子のブレンド、あるいは会合性官能基を有する高分子もあるため、今迄の研究では応力算出に、経験論的、或いは理論的に導かれた様々な構成方程式が用いられてきた。これらの構成方程式を用いた流動予測は、構成方程式が高分子のマイクロスケールの状態や動力学を十分に捉え切れていないため、必ずしも正しい予測をするとは限らないという問題がある。一方、分子動力学法は高分子の運動を直接調べることができるが、流動の特徴時間まで計算を行うことはスーパーコンピュータを用いたとしても非現実的である。このように、単一種の高分子からなる溶融体に対してさえ、どのような高分子にも適用可能で流路中の任意の位置でのマイクロな高分子の状態(配向や絡み合い)も含めて流動予測するという計算法は未だに得られていない。加えて、ヘテロな高分子系では、動的特性を予測するのが非常に難しい。そこで、ソフトマターの流動予測の問題を解決するには、「微視的なスケール運動とマクロスケールの運動をどのように結合させて、階層間連携を如何に行うかという問題」、2つ目は、「マクロな流動現象に本質的な影響を与えるマイクロスケールの自由度の選択の問題」を解決する必要があると考えた。そこで本研究では、2つの空間スケール階層を同時に扱い、「高分子流体のマクロな流動」と「流動中の任意の位置での高分子の状態」とを予測する新奇な数値計算法(階層間連携による流動計算法)の確立すること、そしてスケール階層間の相関が強い系の流動現象にこの方法を応用すること、加えて、マクロな流動の予測と流動場中の任意の位置でのマイクロな内部状態の関係を明らかにすること目的とする。

### 3. 研究の方法

上述の問題に徹底する方法論について、マクロな流動挙動とマイクロな高分子の状態という全く異なるスケールの問題を同時に扱い2つの階層が互いに連携を取りながら流動予測の問題を解くという計算法を進める。この方法では、マクロな流動とマイクロな状態をつなぐ窓口として、マクロレベルで算出される「局所ひずみ速度テンソル」とマイクロレベルの高分子の状態から算出される「応力テンソル」を考え、これらの物理量をやり取りすることにより階層間の連携を行う(図1)。このような考え方で階層間連携は、1993年に H. Öttinger によって提案されていたが、この考えを、絡み合いがある高分子で、かつ分岐構造や分子量分布を有する高分子溶融体系に応用する方法は独自のものである。更にこの考えを発展させて、ヘテロ高分子系へ適用する。

(1)「高分子溶融体の流動と高分子の配向及び絡み合い状態の関係の解明」の研究として、マクロレベルで求めた速度勾配を条件としてマイクロな高分子の運動とその状態を計算し、得られる情報(応力)を用いて流動を解く方法論(ラグランジュ描像に基づく流動計算法と多数のマイクロシミュレータの階層間接続法)を確立する。ここでは、膨大な数のマイクロ系のシミュレーションをマクロ系の計算と同時に進行する必要で、並列数値計算法やマイクロ系のシミュレーションから応力の時間変化率と応力、およびひずみ速度との関係を機械学習する方法が非常に有効



であり、これらの方法を用いた高効率な計算法についても研究を行う。

(2)「ヘテロな高分子系の流動挙動と内部メソ構造変化の関係の解明」の研究では、会合性高分子系の典型例としてひも状ミセル溶液系の流動と分子状態との関係を具体的な課題として取り挙げる、DPD 法によるひも状ミセル系のプログラムの開発を行う。次に開発したプログラムを用いて外部からせん断流動が印可された系の計算を実行し、実験で得られている動的粘弾性特性と数値計算で得られた結果との比較を行う。得られた結果を基に、会合性を扱える粗視化高分子モデル (mSL モデル:modified Slip-Link model) を構築し、非線形レオロジーの予測を行う。

#### 4. 研究成果

##### (1) 高分子溶融体の流動と高分子の配向および絡み合い状態の関係の解明

高分子材料は、今日、自動車、繊維、医療、航空宇宙材料などに利用され必要不可欠な存在となっている。このような高分子製品を製造するには、通常、十分に長く互いに絡み合った高分子からなる高分子溶融体を様々な流路に流して、望みの形状に成形し、最終的に固化させるプロセスが必要になる。しかし、そのようなプロセスでの高分子流体の流動の予測は容易ではない。なぜなら、高分子流体は高分子間のミクロな絡み合い構造とマクロな流動が互いに強く影響し合っているため、一方のスケールのみを扱っては、正確な予測ができないからである。従来の流動予測は、マクロレベルの流体方程式に、ミクロレベルの高分子状態の帰結である応力に対する方程式 (構成方程式) を組み合わせた方法が用いられてきた。この構成方程式を用いる方法では実験で得られたデータをベースにパラメータを決めることで、ある程度の精度をもって、流動予測が可能であり、工業的な問題に対して一定の成果をあげてきた。しかしながら、この方法は、ある場合にうまく予測できたパラメータを用いて、別の流路の問題を解くと必ずしも正しい予測を与えない問題があった。これは、高分子のミクロな情報を方程式に完全な形で落とし込めていないためである。そのため、より高い精度で流動や分子の状態を予測するには、両スケールを関係づけて扱えるマルチスケールシミュレーション(MSS)法の確立が強く望まれている。

今までの MSS を用いた研究[例えば Murashima & Taniguchi, EPL, **96**, 18002 (2011)]では、流体が等温状態にあることが仮定されてきた。しかし、実際の工業的な問題では粘性発熱などによって系は非等温になるため、温度の影響を考慮できるようにすることは重要である。また、実際の工業プロセスでは自由表面を扱う必要があるが、そのような系の流動解析に MSS 法を用いた例はない。そこで研究では「非等温な高分子流体の管内流れ」と「管からの自由表面を伴う押し流れ」に MSS 法を適用し、巨視的な流動や高分子の微視的な状態に温度場や自由表面が与える影響について調べた。その結果を以下に示す。

[非等温な高分子流体の管内流れ]

温度の空間分布を考慮したマルチスケールシミュレーションを確立するために、図 2 のようなベンチマーク的な流動の問題を考える。半径  $R$  の円筒の中心に一定の温度  $T_0$  をもつ半径  $r_0$  の棒が存在し、管の外壁は一定の温度  $T_1 (< T_0)$  に保たれている。この二重円筒管の中を高分子流体が外部から印加する圧力差によって流れる状況を考える。ここで考える高分子は平衡状態で絡み合い点が平均10個ある単分散の線状高分子である。流体の粘度が大きいので、巨視的流れは層流となり、速度と温度の時間発展方程式は、コーシーの運動量方程式 (Eq1) と粘性発熱を考慮した熱拡散方程式 (Eq2) により記述される。ここで、 $r, z$  はそれぞれ半径方向、管軸方向の座標を表す。半径方向を等間隔の格子点により分割し、各計算点で (Eq1) と (Eq2) から速度、温度を算出した。MSS 法では (Eq1) と (Eq2) の計算で用いる応力を流体中に埋め込まれたミクロシミュレータにより算出する。各ミクロシミュレータには、マクロレベルのシミュレータ [(Eqs1, 2)] から得られた局所的な速度勾配と温度  $T(r)$  の情報が各時刻で伝えられる。ミクロレベルのシミュレータは、その情報に基づいてミクロな高分子の状態を更新する。また、高分子の状態から統計的方法で応力を算出し、その応力情報を、そのミクロシミュレータが在る位置での応力テンソル値として、マクロレベルのシミュレータに伝える。このように各時刻でのマクロとミクロの相互の情報交換によりマルチスケールシミュレーションが実行される。

本研究ではミクロレベルの高分子の状態を計算するモデルとして絡み合い高分子の粗視化モデルの 1 つである Slip-link (SL) モデル [Doi & Takimoto, *Phil. Trans. R. Soc. Lond. A*, **361** 641 (2003)] を用いた。今までの MSS 法を用いた研究では、等温状態を仮定していたが、本系では温度が場所により異なるため、その効果をミクロなシミュレータでの計算に反映させる必要がある。そこで、大きな問題が生じる。それは、本研究で用いている粗視化ミクロモデルのパラメータの温度依存性は分かっていないため、それを何らかの方法で求めなければならないという問題である。この温度依存性を知るために、原理的には、更にミクロな高分子モデルをベースにした理論的導出やシミュレーション的方法から温度依存性を調べる必要があるが、この方法は未だに確立していない。そのため、我々は別のアプローチを考えた。詳細は割愛するが、我々はこの問題を解決するために、レオロジーの分野でよく知られている「温度・時間換算則」を用いて算出する方法を確立した。この方法により SL モデルを用いて高分子の状態を更新し実験的に知られているレオロジーの温度依存性を再現することができる。

本 MSS 計算において、マクロレベルは円管を半径方向に 25 の格子点に分割し、格子点間の中央にミクロシミュレータを含む流体粒子 24 個を配置してミクロレベルの計算を行った。ミクロシ

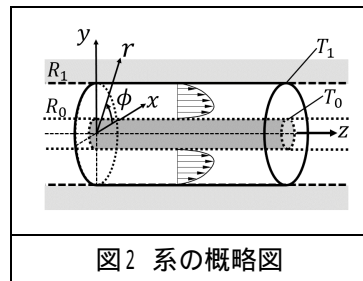


図2 系の概略図



ミュレータで計算する高分子としては、ポリスチレン(PS) (分子量 $M_w = 1.4 \times 10^5$ )を想定し、各流体粒子中に $10^5$ 本(圧力差印加後の Start-up 流れ),  $10^3$ 本(圧力差印加後の定常流れ)の高分子を配置した. 時間単位 $\tau_e = 2.2$  msec, 空間単位 $R_1 = 5$  mm, 応力単位 $\sigma_e = 0.5$  MPa を用い, 方程式 (Eq1)および(Eq2)を無次元化すると, 3つの無次元量 $Re^{(a)}$ ,  $Pe^{(a)}$   $Br^{(a)}$ が現れ, それらは $Re^{(a)} = 1.1 \times 10^{-2}$ ,  $Pe^{(a)} = 1.1 \times 10^5$ ,  $Br^{(a)} = 4.2 \times 10^4$ となった. また, ミクロモデルでの単位は, 長さ単位以外はマクロレベルと同じで, 長さ単位は, 高分子の平衡時の絡み合い点間距離 $a$ を用いた. その他の定数は,  $R_0 = R_1/2$ ,  $F_z^{(ext)} = 0.65\sigma_e/R_1$ ,  $T_1 = 433$ K とし,  $T_0$ が(i) 433 K, (ii) 453 K, (iii) 473 K の場合を計算した. ここでは紙面の関係で, 十分に時間が経った後の(iii)の場合の定常状態の結果のみを示す. 図3に, (iii) $T_0 = 473$ Kの場合の定常状態における特徴的な位置(a)-(f)での高分子鎖の状態を, (I) 温度に依存する Reptation 時間に基づいたワイゼンベルグ数 ( $Wi_d(T)$ )と(II)速度場と温度場と共に示す. ここで,

$Wi_d(T) > 1$ となる領域を灰色の背景にして表示している. 圧力勾配印加直後の状態と比較して, 特に低温側の高分子が流動方向に強く引き伸ばされていることが分かる. また管壁から離れており, かつ, 高温側にある(c)の位置では, 高分子鎖はほぼ等方的な配位を示している. さらに, 高分子鎖が高度に配向している(d)-(f)はいずれも $Wi_d(T) > 1$ 領域に属していることが分かる. このように, 定常状態での高分子鎖の変形の様子を理解するには, せん断速度だけでなく $Wi_d(T)$ の値を用いることが有効だと分かった

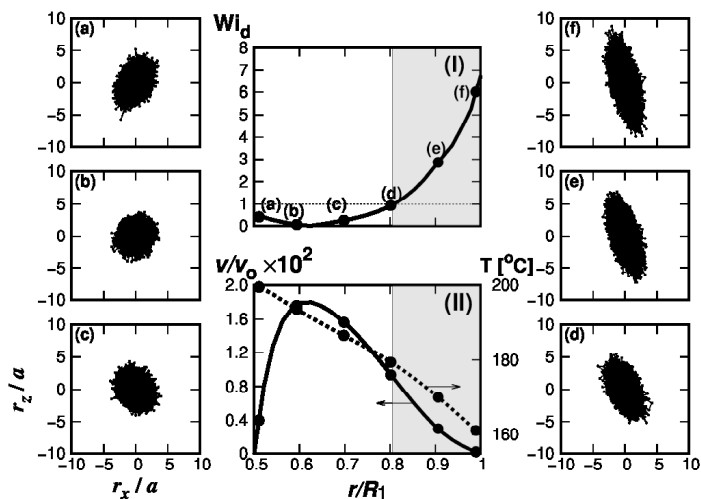


図3 (iii)の場合の定常状態での(I) 温度依存 Reptation 時間基準のワイゼンベルグ数 $Wi_d(T)$ プロファイルと (II) 速度プロファイルと温度プロファイル. 左右にある(a)-(f)の図は半径方向に沿った特徴的な位置での高分子鎖の配位の様子.

#### [管からの自由表面を伴う押出流れ]

典型的な高分子成形プロセスの1つである押出成形に見られる自由表面を含む高分子流動に着目した. この成形プロセスで発現する代表的な現象としてダイスウェルがある. ダイスウェルとは, 流体をダイから大気中に押し出した際, 押し出し物の厚みがダイの厚みより膨らむ現象である. ダイスウェルは押出成形物の寸法精度に大きく関わってくるため, 工学的に重要な課題である. また, この現象は, ダイ内を流動方向に配向しながら流動する高分子鎖が, ダイから押し出され配向が緩和する過程で生じると考えられており, マクロな流動のみならずミクロな高分子の状態の詳細な理解が必要となる. 既往の研究では, 構成方程式を用いた手法で粘弾性流体の自由表面流れの解析を行っている. しかし, 粘弾性の起源であるミクロな分子状態の情報を得るのが難しく, 成形加工と関係する高分子の状態に関する知見は十分に得られていない. そのような背景から, MSS 法を自由表面流れに適用できるように拡張し, マクロな流動と高分子配向や高分子鎖の伸びなどのミクロな状態の関係について考察を行った.

本計算では, 2次元平行平板ダイ(厚み $L = 40b$ , 流体粒子の初期配置の間隔 $b$ を長さの単位とした)から平衡時からみあい数 $Z_{eq} = 10$ の直鎖状高分子溶融体(最長緩和時間 $\tau_d \approx 350\tau_e$ ,  $\tau_e$ は Slip-link モデルの単位時間, ゼロせん断粘度: $\eta_0 \approx 71.0\sigma_e\tau_e$ )が圧力勾配によりダイから押し出される状況を考える. 一定の圧力勾配 $dP/dx = -2.50 \times 10^{-4}\eta_0/b\tau_e$ を印加した平行平板間の流れを, 定常に至るまで行うことで得られた速度と高分子鎖の状態を流入境界条件として設定した. まず, 流動挙動に関して, Newton 流体の挙動とは異なり, 高分子溶融体においてはダイ厚みよりも流体の幅が広がる(ダイスウェルが起きている)ことが確認できる. ダイ内の高分子鎖(図4(a))と比較して, ダイから吐出された直後の高分子鎖が伸長している様子が確認できる(図4(b)). これは高分子溶融体流れがある点でダイの壁を離れる必要があり, それが局所的な伸長流を引き起こすためだと考えられる. また, この高分子鎖の伸長を誘起するダイ出口付近での伸長流は, ダイ内でのせん断よりも大きいことが示唆される. これらの高分子鎖が緩和していくこと(図4(c)(d))によりダイスウェルが発現することがよくわかる.

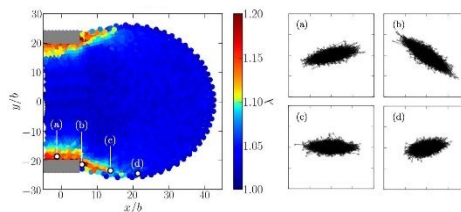


図4 (左)  $t/\tau_e = 400$ における高分子溶融体の吐出の様子および高分子鎖の伸び $\lambda$ の分布. (右) 高分子の配向の様子 (a)~(d) は左側に対応している).

## (2) 「ヘテロな高分子系の流動挙動と内部メソ構造変化の関心の解明」

界面活性剤は親水基と疎水基から構成され、水中で“ミセル”と呼ばれる集合体を形成する。特に、イオン性界面活性剤は対イオン存在下でひも状のミセルを形成し、互いにかみ合うことで高分子溶液に似た複雑な挙動を示すようになる。また、ひも状ミセルを含む界面活性剤水溶液の流動特性は界面活性剤と対イオンの濃度を变化させることで容易に操作できるという特徴から、抵抗低減を目的として暖房設備の熱媒流体や石油掘削の破砕液などに添加して利用されている。しかし、マクロな流動に影響を与えるミセルのメソスケールの挙動については未だ完全に解明されていない。そこで、DPD 法と呼ばれる粗視化シミュレーション手法を用いて、ひも状ミセルに特徴的なメソスケールの挙動について調査した。そして、このDPD法による調査で得られたデータを基に、からみ合い粗視化手法であるSlip-link モデルに分裂・結合機構を取り入れることで、ひも状ミセル用に考案したSlip-link モデル(mSLモデル) を構築し、シミュレーションを行うことでそのレオロジー挙動の再現を行った。

ひも状ミセルのからみ合い点における挙動を調べるため、ミセル衝突のシミュレーションを行った。空間上に垂直に配置された2本のミセルを用意し、互いに衝突する方向へ非常に小さい速度(DPD 粒子の移動に伴う運動エネルギーが系全体のエネルギーに影響を与えない速度)で移動させ、からみ合い点生成後の挙動を観測した。界面活性剤分子の親水基間にはたらく相互作用の大きさ $a_{hh}$ を变化させ、各場合に対して200回の計算を行った。その結果、ひも状ミセルのからみ合い点解消のパターンは、(i) breakdown: 片方のミセルがもう一方のミセルをからみ合い点で断ち切るパターン(図5 (i)), (ii) cutdown: 2本のひも状ミセルがからみ合い点で融合した後、形成されたからみ合い点から分岐したミセルのいずれかが引き伸ばされることで分裂するパターン(図5 (ii)), (iii) passing-through: 2本のひも状ミセルが融合し、形成されたからみ合い点で引き伸ばされ2本のミセルが分離するパターン(図5 (iii)), の3つに分類された。 $a_{hh}$  が大きくなるにつれ, cutdown の頻度が減少し、一方でbreakdownの頻度が増大した。これは、親水基間の反発が大きくなることで界面活性剤分子同士が分離しやすくなったためと考えられる。一方で、いずれの $a_{hh}$  値においてもpassing-through はほとんど発生しなかった。すなわち、ミセルからみ合い点における応力緩和はミセルの分裂による影響が支配的であると結論付けられた。これらの情報を基にSlip-linkモデルをひも状ミセルのからみ合いモデル用に拡張したmSLモデルを構築した。図6にひも状ミセル水溶液の線形粘弾性を示す。分裂頻度が増加するに従い、応力緩和モードは、赤破線で示したMaxwell model に遷移していることがわかる。この挙動は、実験において界面活性剤水溶液に添加する対イオンを増加させた際の傾向と一致している。これは分裂・結合頻度増大に伴い、極端に短いあるいは長いミセルが長時間存在し続けることができず、平均的な長さを持つミセルの緩和現象のみが観測されたためと考えられる。次に非線形粘弾性領域でのレオロジー挙動である定常せん断粘度を示す(図7)。せん断速度が増加に伴い、 $Wi_R^{(s)} \approx 0.1$  付近から粘度の減少が見られる。これは、等方的に分布していたミセルの配向が揃うことによる緩和の影響である。また、せん断速度がラウス緩和速度よりも速い $Wi_R^{(s)} > 1$  の領域においても依然として粘度が減少している。オリジナルのSlip-link モデルでは、このような領域での応力緩和を表現できなかったが、本モデルで導入した非平衡状態での分裂機構により、実験で観測されている高せん断速度領域でのシアニングを再現することに成功した。

本研究で、マルチスケールシミュレーション(MSS)法を、非等温条件下での絡み合いのある高分子溶融体の流動計算、自由表面を有する流れに適用できるよう拡張することに成功した。また、詳しく述べられなかったが、分子量分布がある系、また構成式を機械学習する方法の確立に成功した。更に、会合系としてミセル系を扱い、拡張 SL モデルの開発に成功した。今後この方法を更に発展させることで、様々な高分子流動プロセスにマルチスケールシミュレーション法が応用され、より深いレベルで工業的な高分子流動問題を解くことが可能となることが期待される。

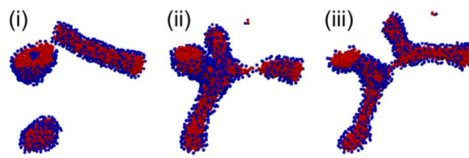


図5 衝突の分類 . (i) breakdown, (ii) cutdown, (iii) passing-through

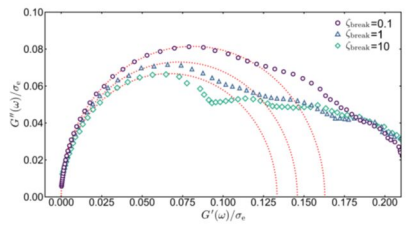


図6 線形粘弾性(横軸:貯蔵弾性率,縦軸:損失弾性率) 赤破線はMaxwell model によるフィッティングの結果 .

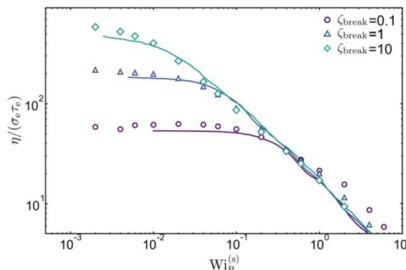


図7 ラウス緩和時間で無次元化したせん断速度に対する定常せん断粘度 . 実線は線形粘弾性から得られた粘度 .

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 5件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 5件）

1. 著者名 Sato Takeshi, Taniguchi Takashi	4. 巻 49
2. 論文標題 Multiscale Simulation of the Flows of a Bidisperse Entangled Polymer Melt	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nihon Reoroji Gakkaishi	6. 最初と最後の頁 87～95
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1678/rheology.49.87	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Seryo Naoki, Molina John J., Taniguchi Takashi	4. 巻 49
2. 論文標題 Select Applications of Bayesian Data Analysis and Machine Learning to Flow Problems	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Nihon Reoroji Gakkaishi	6. 最初と最後の頁 97～113
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1678/rheology.49.97	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 TANIGUCHI Takashi, MOLINA John J.	4. 巻 35
2. 論文標題 Machine Learning for the Flow Prediction of Fluids with Memory Effects on the Stress	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 JAPANESE JOURNAL OF MULTIPHASE FLOW	6. 最初と最後の頁 426～436
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.3811/jjmf.2021.T008	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Seryo Naoki, Sato Takeshi, Molina John J., Taniguchi Takashi	4. 巻 2
2. 論文標題 Learning the constitutive relation of polymeric flows with memory	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 033107-1～16
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1103/PhysRevResearch.2.033107	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 Yuji Hamada, Takeshi Sato, and Takashi Taniguchi	4. 巻 3
2. 論文標題 Multiscale simulation of a polymer melt flow between two coaxial cylinders under nonisothermal conditions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Mathematics in Engineering	6. 最初と最後の頁 1~23
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.3934/mine.2021042	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Yoshimoto Kenji, Taniguchi Takashi	4. 巻 154
2. 論文標題 Viscoelastic phase separation model for ternary polymer solutions	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Chemical Physics	6. 最初と最後の頁 104903 ~ 104903
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0039208	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計40件(うち招待講演 2件/うち国際学会 21件)

1. 発表者名 Souta Miyamoto, John J. Molina, Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Application of machine-learned constitutive relations for well-entangled polymer melt flows
3. 学会等名 American Physical Society (APS) March Meeting 2022 (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 John J. Molina, Souta Miyamoto, and Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Learning the constitutive relation of polymer melt flows
3. 学会等名 The 2021 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takafumi Hiramatsu and Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Rheology of worm-like micelles solutions --- DPD and slip-link simulation study --
3. 学会等名 The 2021 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Multi-Scale Simulation for well-entangled polymer melt flows
3. 学会等名 The 19th International Symposium on Applied Rheology (ISAR) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takashi Taniguchi, Yuji Hamada and Takeshi Sato
2. 発表標題 Hybrid simulations of polymer melt spinning using the molecular dynamics and a conventional macroscopic model
3. 学会等名 The 36th International Conference of the Polymer Processing Society (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuji Hamada Takeshi Sato Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Hybrid polymer melt spinning simulations combined a molecular dynamics and a conventional macroscopic mode
3. 学会等名 18th International Congress on Rheology (国際学会)
4. 発表年 2020年



1. 発表者名 Naoki Seryo Takashi Taniguchi and John J. Molina
2. 発表標題 PS69 Learning the Constitutive Relation of Non-Newtonian Fluids from Microscopic Dynamics
3. 学会等名 18th International Congress on Rheology ( 国際学会 )
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yuji Hamada Takeshi Sato Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Mesoscale simulation model for entangled wormlike micelles
3. 学会等名 21st International Union of Materials Research Societies- International Conference in Asia (IUMRS-ICA 2020) ( 国際学会 )
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Souta Miyamoto John Molina Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Learning the constitutive relation of entangled polymer melts from a dual slip-link model
3. 学会等名 21st International Union of Materials Research Societies- International Conference in Asia (IUMRS-ICA 2020) ( 国際学会 )
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takafumi Hiramatsu Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Mesoscale simulation model for entangled wormlike micelles
3. 学会等名 21st International Union of Materials Research Societies- International Conference in Asia (IUMRS-ICA 2020) ( 国際学会 )
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takashi Taniguchi Yuji Hamada Takeshi Sato
2. 発表標題 Temperature Effects in the Flow of Well-Entangled Polymer Melts Between Two Co-Axial Cylinders: A Multi-Scale Approach
3. 学会等名 SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE21) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 John Molina Naoki Seryo Takeshi Sato and Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Learning the Constitutive Relation of Polymer Flows with Memory: from Micro-Scale Dynamics to Macro-Scale Flow
3. 学会等名 SIAM Conference on Computational Science and Engineering (CSE21) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Naoki Seryo Takeshi Sato Takashi Taniguchi and John J. Molina
2. 発表標題 Learning the constitutive relation of polymeric flows with memory
3. 学会等名 American Physical Society (APS) March Meeting (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮本奏汰, John Molina, 谷口貴志
2. 発表標題 Flow simulations of well-entangled polymer melt with machine-learned constitutive relations
3. 学会等名 プラスチック成形加工学会関西支部令和3年度若手セミナー
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮本奏汰, John Molina, 谷口貴志
2. 発表標題 機械学習モデルを構成関係に代用した高分子熔融体の流動シミュレーション
3. 学会等名 プラスチック成形加工学会第29回秋季大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takafumi Hiramatsu, Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Numerical investigations for rheology of a worm-like micelle solution
3. 学会等名 第69回レオロジー討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮本奏汰, John Molina, 谷口貴志
2. 発表標題 Well-entangled polymer melt flow simulations using a Machine-Learned constitutive relation
3. 学会等名 第69回レオロジー討論会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 宮本奏汰, John Molina, 谷口貴志
2. 発表標題 学習された構成関係を用いた高分子液体の流動シミュレーション
3. 学会等名 化学工学会 第52回秋季大会(2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 谷口貴志
2. 発表標題 粘弾性相分離
3. 学会等名 第25回高分子計算機科学研究会講座 理論・シミュレーションの基礎 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takafumi Hiramatsu Takashi Tangiuchi
2. 発表標題 Mesoscale simulation of aqueous solutions of entangled wormlike micelles
3. 学会等名 化学工学会 第51回秋季大会 (2020) SCEJ 51st Autumn Meeting
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Yuji Hamada Takeshi Sato Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Multiscale simulation of a polymer melt flow in between two coaxial cylinders under non-isothermal conditions II - Relaxation Dynamics after cessation of the applied pressure gradient ?
3. 学会等名 第68回レオロジー討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Takafumi Hiramatsu Takashi Tangiuchi
2. 発表標題 Mesoscale simulation of aqueous solutions of wormlike micelles
3. 学会等名 第68回レオロジー討論会
4. 発表年 2020年



1. 発表者名 Naoki Seryo Takeshi Sato John J. Molina Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Learning the constitutive relation of polymeric flows with memory
3. 学会等名 第68回レオロジー討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Souta Miyamoto Takeshi Sato Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Slip-linkモデルにおけるセグメントダイナミクスの影響と流動解析
3. 学会等名 第68回レオロジー討論会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Takashi Taniguchi
2. 発表標題 高分子成形プロセスにおける高分子溶融体流れのマルチスケールシミュレーション
3. 学会等名 京大テックフォーラム ソフトマター工学の流れ問題 ~シミュレーションの視点から~
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Takeshi Sato and Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Slip-link Simulations of Entangled Linear Polymer Melts under Fast Flows - Effect of the Stretch/Orientation-Induced Reduction of Friction -
3. 学会等名 Annual European Rheology Conference 2019 (AERC 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Hamada, Takeshi Sato and Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Multiscale simulation of polymer melt flows in between two coaxial cylinders under non-isothermal conditions
3. 学会等名 MRS-Thailand 2019 (The 2nd Materials Research Society of Thailand International Conference) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takeshi Sato and Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Slip-link Simulations of Well-Entangled Linear Polymer Melts under Fast Flows - Role of the Stretch/Orientation-Induced Reduction of Friction -
3. 学会等名 Polymers in Fast Flows (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuji Hamada, Takeshi Sato and Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Simulation of a polymer melt flow in a channel by using a hierarchical approach
3. 学会等名 APChE 2019 (The 18th Asian Pacific Confederation of Chemical Engineering Congress) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takafumi Hiramatsu and Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Rheological prediction of surfactant solution of entangled wormlike micelles with Slip-link model
3. 学会等名 The International Workshop for East Asian Young Rheologists (IWEAYR 15) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Naoki Seryo, John Jairo Molina and Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Learning constitutive relations from micro-scale dynamics with memory effects in non-Newtonian fluids
3. 学会等名 The International Workshop for East Asian Young Rheologists (IWEAYR 15) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takeshi Sato and Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Multi-Scale Simulation for Temperature Dependent Flows of Entangled Polymer Melts
3. 学会等名 The International Workshop for East Asian Young Rheologists (IWEAYR 15) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤健, 谷口貴志
2. 発表標題 高速流動下におけるからみあい高分子のダイナミクス - 摩擦低減効果の影響 -
3. 学会等名 日本レオロジー学会第46年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 平松崇文, 佐藤健, 谷口貴志
2. 発表標題 改良Slip-linkモデルを用いたひも状ミセル水溶液の流動解析
3. 学会等名 日本レオロジー学会第45年会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 濱田悠司 佐藤健 谷口貴志
2. 発表標題 同軸二重円筒間を流れる高分子溶融体の非等温マルチスケールシミュレーション
3. 学会等名 プラスチック成形加工学会第30回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 濱田悠司, 佐藤健, 谷口貴志
2. 発表標題 Multiscale simulation of a polymer melt flow in between two coaxial cylinders under non-isothermal conditions
3. 学会等名 日本レオロジー学会 第67回レオロジー討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 佐藤健 谷口貴志
2. 発表標題 微粒子を含む高分子流動の解析：マルチスケールシミュレーションによるアプローチ
3. 学会等名 第67回レオロジー討論会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 濱田悠司, 谷口貴志
2. 発表標題 伸長流動下における高分子溶融体の分子動力学シミュレーション
3. 学会等名 2019年度高分子基礎物性研究会・高分子計算科学研究会 合同討論会
4. 発表年 2019年



1. 発表者名 Naoki Seryo, John Molina and Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Learning the Constitutive Relations of non-Newtonian Fluids with Memory
3. 学会等名 第9回ソフトマター研究会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Naoki Seryo, John Molina and Takashi Taniguchi
2. 発表標題 Learning constitutive relations from micro-scale dynamics with memory effects in non-Newtonian fluids
3. 学会等名 Deep Learning And Pysics 2019 (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>Outreach (研究成果の紹介)  <a href="https://www-tph.cheme.kyoto-u.ac.jp/p/taniguch/Activity/Outreach.html">https://www-tph.cheme.kyoto-u.ac.jp/p/taniguch/Activity/Outreach.html</a>          京大テックフォーラム「ソフトマター理工学の流れ問題 ~シミュレーションの視点から~」  <a href="https://www.kyodai-original.co.jp/?p=9869">https://www.kyodai-original.co.jp/?p=9869</a>          ミクロの力学からポリマーの流動性を学ぶ  <a href="https://www.ai-japan.go.jp/technologies/knowledge-acquisitions-and-sharing/post-18/index.html">https://www.ai-japan.go.jp/technologies/knowledge-acquisitions-and-sharing/post-18/index.html</a>          Outreach (研究成果の紹介)  <a href="https://www-tph.cheme.kyoto-u.ac.jp/p/taniguch/Activity/Outreach.html">https://www-tph.cheme.kyoto-u.ac.jp/p/taniguch/Activity/Outreach.html</a></p>
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	山本 量一  (Yamamoto Ryoichi)  (10263401)	京都大学・大学院工学研究科・教授    (14301)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	モリーナ ジョン  (Molina John)  (20727581)	京都大学・大学院工学研究科・助教    (14301)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関