

京都大学	博士 (工学)	氏名	宮本 奏汰
論文題目	Machine-Learning-Based Surrogate Modeling for Multi-Scale Simulations of Polymer Melts (高分子溶融体のマルチスケールシミュレーションのための機械学習モデルの構築)		
<p>高分子溶融体はソフトマターおよび複雑流体の典型である。工業的に用いられる高分子溶融体は、長大な分子鎖がお互いにかみ合った構造を有し、その構造が動的に緩和する時間は長く、また、その緩和運動は溶融体を成形する工程に伴う流動変形によって強く影響を受ける。このような流動変形に対する高分子溶融体の力学的応答は一般に非線形性を持つため、その流動挙動は複雑な様相を呈す。工業的な応用では所望の製品形状を得るために、高分子溶融体の複雑な流動を予測し制御する技術を構築することが重要である。このような高分子溶融体の流動予測法として、ミクロな分子モデルとマクロな流動を結び付けたマルチスケールシミュレーション法(MSS法)が、近年注目を集めている。しかし、計算量が膨大となる問題やミクロ系のシステムサイズに由来する統計誤差の問題から工業的問題への応用が難しい。本論文では、これらの問題を解決するために、高分子シミュレータで生成した流動データに基づき構成方程式の機械学習回帰モデルを構築し、そのモデルを用いた新MSS計算手法を提案し、その有効性についての研究を行っている。</p> <p>第一章は序論であり、MSS法の現状とデータ駆動的な手法を用いた既往の研究について概観している。必要な要素技術である微視的な分子モデルと巨視的な流体ソルバーについての基礎を説明した後、スケール間を接続するデータ駆動的アプローチについて、注目する階層を整理した。また、原子モデルから粗視化モデルを構築する方法、粗視化モデルの統計的応力に対する構成関係を回帰モデルに還元する方法、構成関係モデルを前提とした流動予測への応用方法と、また逆に流動プロファイルから物質関数を推定する方法をまとめた。</p> <p>第二章では、「平行平板間で圧力に駆動される高分子流体の疑一次元流れの解析」を題材に、提案手法のプロトコルをまとめた。3つの技術要素：高分子ミクロモデル・構成関係の回帰モデル・流体ソルバーとして、土井・滝本らのスリッリンクモデル・ガウス過程回帰モデル・Smoothed Particle Hydrodynamics法を選定し、分子量が約100 kDa であるからみあった状態にある単分散直鎖ポリスチレンの系を対象とし、対応するミクロモデル系に単純せん断・振動せん断変形を印可することによって応答応力とひずみ速度の時系列データを生成し、ガウス過程回帰モデルの機械学習に用いた。構築した回帰モデルを「圧力差駆動の平行平板間の高分子流体の流れ」に応用し、特に、ワイゼンベルグ数をレイノルズ数で割った量で定義される弾性数が1以下の条件で、過渡状態でも10%、定常状態では3%以下の相対誤差に抑えた高精度の予測が可能であることを示し、従来のMSS法と同じ精度の結果を約10倍の速さで得られることを示した。</p> <p>第三章では、「構成関係の回帰モデルに対する物質客観性の要請の考慮と、急縮小急拡大流路への適用」に関する研究をまとめた。第二章の研究を踏襲し、構成関係の回帰モデルに対し、応力率の客観原理に基づく回転対称性を導入し、急縮小急拡大流路内流れに応用した。流体要素に印加される変形モードが複数ある場合を考慮し、前章の結果と同様の計算コストで提案手法が一般の二次元的流れに適用できることを示した。</p>			

第四章では、「スパース回帰の方法を用いてシンボリックな構成関係モデルを導出する方法論の構築」に関する研究をまとめた。第二章と第三章の研究で用いたガウス過程回帰手法は、推論段階において学習データを用いた多量の計算を要することから、大規模系の計算に対して適用が容易ではない。この問題を解決するために、スパース回帰の方法によって構成関係をシンボリックに定式化する方法論の構築に取り組んだ。この研究で、線形・非線形な構成方程式が解析的に得られているマイクロモデルであるフックダンベルモデルと FENE-P ダンベルモデルの構成方程式を再発見できることを示し、構成方程式が知られていない FENE ダンベルモデルの(近似的な)構成方程式を導出した。

第五章では、「からみ合い高分子モデルの高速伸長に対する力学的応答を説明する分子論の拡張」に関する研究をまとめた。土井・滝本のスリップリンクモデルは、せん断変形・一軸伸長変形下でのからみ合い状態にある高分子溶融体のレオロジー的性質を定量的によく説明することが既に明らかにされている。一方で、近年の実験的検討から、極めて高速な伸長流動下ではモデルの予測に反してひずみ軟化を示すことが分かり、分子論的な共同的な配向・伸長が原因であると考えられている。この描像を基に提案されている補正モデルを、分子量が一樣でなく二峰分布をもつ系の非線形流動挙動も予測できるモデルに拡張し、従来のモデルでは説明できなかった実験結果を、本拡張モデルが正しく再現することを示した。

第六章では、第二章から第五章の内容を総括し、今後の展望について述べた。特に、重要な改良案として次の3つ、「ひずみ速度勾配テンソルの代数的分類に基づいたデータ生成の効率化」・「構成関係回帰モデルの物理的妥当性を確保するための平衡点周りの安定性および物質客観原理の導入」・「極度に弾性的な条件に対応するためのアクティブラーニング方式の導入」について述べ、計算機技術の発展に伴う、提案した流動予測技術の将来の改良方針を示した。

高分子溶融体の複雑な流動を予測する方法として、ミクロな高分子モデルとマクロな流動を結び付けたマルチスケールシミュレーション法(MSS法)が近年注目を集めている。しかし、計算量の問題や統計誤差の問題から工業的問題への応用が難しい。本論文は、これらの問題を解決するために、高分子シミュレータで生成した流動データに基づき歪み速度と応答応力の関係を表す構成方程式の機械学習回帰モデルを構築し、そのモデルを用いた新しいMSS法(機械学習加速MSS法:MLMSS法)を提案し、その有効性についての研究を行った。得られた主要な成果は以下の通りである。

- (1) 単分散直鎖ポリスチレンのミクロモデル系に対して印加した単純せん断および振動せん断変形によって発生する応力とひずみ速度の時系列データを用い、ガウス過程回帰法を用いて構成関係を機械学習した。構築した構成関係回帰モデルを「圧力差駆動による平行平板間高分子流体の流れ」の予測に応用し、従来のMSS法と同じ精度の結果を約10倍の速さで得られることを示した。
- (2) (1)で成功した構成関係回帰モデルを、複数の流動様式が含まれる流れの問題が扱えるように拡張した。この拡張モデルを用いて急縮小急拡大流路内流れを解析し、(1)の場合と同様の低計算コストで、提案手法が一般の二次元的流れに適用できることを示した。
- (3) (1)と(2)の研究で用いたガウス過程回帰手法は、推論段階において学習データを用いた大量の計算を要することから大規模系の計算に対して適用が容易ではない。この問題を解決するために、スパース回帰の方法によって構成関係をシンボリックに定式化する方法論を構築した。また、学習データを生成する絡み合い高分子モデルを、分子量が一様でなく二峰分布をもつ系の非線形流動挙動も正しく予測できるモデルに拡張した。

上述の研究成果は、高分子流体に対する流動予測の高精度化と低計算コスト化を実現する機械学習ベースの新MSS法の提案であり、また、この方法論は高分子溶融体のみならず様々な複雑流体の流動予測にも適応可能であり、工業的な実プロセスへの応用に道を開く基礎研究という観点でも、学術面だけでなく工学的応用の面においても意義が大きい。よって、本論文は博士(工学)の学位論文として価値あるものと認める。また、令和6年6月21日に論文内容とそれに関連した事項について試問を行って、申請者が博士後期課程学位取得基準を満たしていることを確認し、合格と認めた。