

# IRIS Information

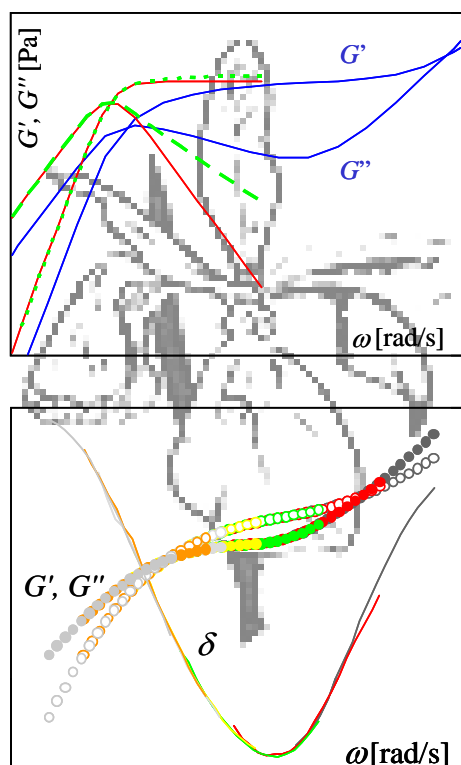
開発元：

IRIS DEVELOPMENT

14 Elm Street

Amherst, MA 01002-2007, USA

<http://rheology.tripod.com/>



IRIS は、レオロジーに変革をもたらします。日常的な繰り返し作業をIRIS にまかせれば、レオロジストは、以下のような本来の仕事に専念できます。

- レオメータを使った測定
- 理論予測
- 比較
- 新材料の調査
- 緩和パターンの発見
- 成形方法の決定
- 定量化、信頼性の実現
- 結果の判定や討論
- レオロジーの説明や授業

IRIS は、レオロジーに奉仕します。

- 対話形式のグラフィックを用いたデータ解析
- パラメータ値の決定
- 理論との比較
- どんなデータ形式でも読み込み可能
- 比較、保存、参照、作図をすばやく実施

## 1. IRIS ソフトウェアの概要

IRIS は、レオロジーに関する実験値と理論値との比較を行うためのプラットフォームです。最近になって、多量のレオロジー・データの利用が可能になりましたが、それらを知識や理解のレベルに変換するにはかなり時間がかかります。ポリマー物性の理論面では、Doi、Edwards、McLeish、Marrucci、Larson、Schieber、Oettinger、Rubinstein などによる研究成果によって、顕著な進歩がもたらされていますが、ポリマー物性の実験観察面においても同様の進歩が求められるようになってきました。実測値との比較を行うことによって、理論予測の適否（理論の適用範囲）の判定を行うことができます。理論予測値と実験データとを直接比較できるプラットフォーム（場所）が必要とされています。IRIS はこのようなプラットフォームとして適しています。

さらに、IRIS では、レオロジーにさまざまな関心を持つ人を幅広く集めています。IRIS はレオロジーに変革を与えます。IRIS は実用的でもあります。与えられた条件での樹脂の特性を理解できれば、成形プロセスを最適化することもできます。あるいは、樹脂の成形ウィンドウを決めることもできます。

樹脂が特定の用途に適しているかどうかは比較して見なければわかりません。ここでは、粘弾性特性の検討が必要とされることもありますが、IRIS では粘弾性特性を算出可能です。

実験技術者にとっては、レオメータや制御装置の改良のおかげで、線形粘弾性挙動の理解がもっとも進みました。十分に制御された状態での詳細な観察が可能になり、多量の実測データが利用可能になりました。しかしながら、データ解析は十分満足できるレベルにありません。その主な原因は、測定装置が異なるとデータに互換性がなくなるからです。また、解析するための時間がないこと（解析手順は決まっているが退屈な作業でもある）や、訓練された人がいないことが原因となることもしばしばです。解答はすばやく手に入らなければなりません。データ解析が有効なのは、広範な解答が短時間に提供される場合に限られます。

データ解析におけるこの様な不都合を全て解決するために、コンピュータを使った手順を開発しました。この手順を使えば、データ入力就容易になり（ここでは、アスキー・フォーマットを基本とした）、そのデータをグラフィックで表示できます。また、関心のある特定の材

料の詳細なレオロジー特性を探求する最適な場所ともなります。プロジェクト作業のどの段階にあっても、IRIS からデータを取り出すことも、新規データを IRIS に取り入れることも自由にできます。

私たちは、線形粘弾性の理解ばかりでなく、大ひずみの非線形挙動についても、もう少し進歩が必要であると認識しています。しかしながら、私たちは、先ず、線形応答に限定した活動をすべきと考えてきました。現在の IRIS は、主に、線形範囲でのポリマー力学を取り扱っています。線形粘弾性の現象論は十分に確立しています(Ferry, 1980)。また、ほとんどの分子力学理論は、その興味を中心は大ひずみ粘弾性にあるのですが、線形挙動しか予測できません。この様な認識の下で、様々なデータ解析の方法が、コンピュータ上の統一アルゴリズムとして採用されました。

以上の背景のベースに、材料の粘弾性特性を全面的に探求する活動を開始しました。私たちは、この活動を「粘弾性との対話」と称しています。対話とは、「粘弾性実験と動的理論との間の対話」あるいは「研究者と特定の興味ある材料の粘弾性との間の対話」です。メカニカル・スペクトロスコーピーで得られたデータは、この対話の出発点となります。この対話の言語は、対話形式のグラフィックです。対話形式のグラフィックスを設計する際に、2つのルールを設定しました。すなわち、(1)レオロジー・データをグラフ形式で視覚化すること(データ解析のどのステップでもこれを行えること)(2)オリジナル・データにも、計算された数値データにも容易にアクセスできること、です。私たちは、この2つのルールを厳格に守りました。その結果、どのデータ・ソースからでもデータを読み込めるし、他のメディア(たとえば、スプレッドシート)にもエクスポートできます。その結果、IRIS は、データ交換や比較をするためのオープンフォーラムになりえます。また、研究所間あるいは、研究グループ内でのデータの互換性のチェックに使うこともできますし、その結果、レオロジーをさらに興味深くかつ信頼のおけるものにしてくれます。

技術データを有効に使えるようにするためには、重要な要素が2つあります。すなわち、(1) ユニバーサルなデータフォーマットを採用すること、および、(2) データアクセスが容易なプログラムであること、です。IRIS ではこの2つの要素を満たしています。レオロジーのコミュニティでのデータの交換(古いデータファイルでも最新のデータでも可能です)や議論が容易

になります。データの交換は、レオロジーのコミュニティのみならず、企業にとっても重要です。たとえば、大きな会社での地方の事業所で IRIS を使えば、データのやり取りが非常に簡単になるので、会社資源の有効活用ができます。

IRIS は、レオロジストの仕事の効率向上に寄与できます。それは、IRIS が、研究所の結果をレオロジストでない人にもわかる形に変換してくれるからです。コピー・アンド・ペーストといった単純な作業で、IRIS のグラフィカルな結果をレポートやマルチメディア媒体に変換できます。たとえば、グラフを MS-Word や MS-PowerPoint に変換できます。これによって、大勢の人が理解しやすくなるし、レオロジー研究の価値を高めることもできます。

IRIS の主目的は、当然のことながら、レオロジー・データの解析です。2番目の目的は、粘弾性のモデル化(レオロジーモデルとの比較や、スタートアップ流れでの応力予測)です。IRIS プログラムは、利便性の提供とすばやい計算結果を提供します。私たちは、様々なデータ・ソース(種々のレオメータ、出版物に発表されたプロット図、e-mail で交換されているもの等)からの膨大な量のレオロジー・データを取り扱うことができるツールを特に探していました。このツールは、レオメータ装置より多機能で、しかも、パターンを見つけたり、スペクトルに関する有名な文献値と比較したり、結論を描画したり、測定範囲でのポリマーの挙動を予測したり、あるいは、結果を議論することができるものです。IRIS は、このような仕事の大部分をこなすことができます。IRIS の可能性は無限で、将来に向けての拡張性にもこのプログラムは優れています。

近年、ポリマー・ダイナミクス理論に関する新規モジュールを開発しています。ここでは、理論的な予測値を実測値と並べてプロットすることができます。

## 2. 適用分野

IRIS の主な適用分野は、「教育」分野と「専門家」分野の2つあります。IRIS は学校の教室や教育研究所で使われる対話形の教育用ツールとしても設計されていますし、また、材料科学者の専門的な仕事にもかなり適しています。:

(1) **教育用の IRIS** IRIS プログラムが動作する PC に標準のプロジェクターを取り付けて授業を行えば、インストラクターは、その教室内に対話形式のグラフィックスを導入できるので、授業の質を向上できます。たとえば、時間-温度換算則の計算をリアルタイムに IRIS プログラム

を用いて実行できますし、その後に緩和時間スペクトルの計算を即座に行えます。計算終了後は、全ての材料関数を図示できます。これらの作業は、すべて数分以内にすばやく完了するので、授業の進行速度はいつもと変わりません。解析式(Rouse, Doi-Edwards, BSW)を使って予測された結果は、比較のために、グラフ上で、測定データと隣接して表示できます。この様に、生徒は、データ処理に直接参加できますし、その後、付属参考書を読む宿題を課せられます。教師と生徒は、線形粘弾性の美しさと有効性を共同で探索できます。取り上げるトピックやクラスの進捗状況に応じて、様々な対応が可能となります。

IRIS プログラムは、生徒が、最小の努力で、実測データを自分自身で評価することができるように設計されています。このような実践的なアプローチを通して、生徒は、レオロジー・データやその解析、さらにその応用に対する感覚をも養うことができます。

**(2) 専門家のための IRIS** IRIS を使えば、様々なレオメータから得られたレオロジー・データの解析および綿密な調査を行うことができます。また、効果的な実験を計画したり、レオロジー・パラメータを決定したり、興味のある流れの予測にこれらのパラメータを使ったりできます。IRIS の計算結果は、流れ解析の出発点ともなります(たとえば、Polyflow のモデル化に使えます)。IRIS の対話形式のグラフィックスを用いれば、材料の共通的な特徴やそれらの差異を視覚的に表現したり、緩和パターンにおけるシステムチックな傾向を見つけたり(参考事例は、研究論文: Baumgärtel, Schausberger, and Winter, *Rheologica Acta* 29, 400, 1990 を参照ください)、あるいは、相変化をモニターしたり、特定の緩和モードを選択したりできます。また、不具合点がないかどうかレオロジー・データを徹底的に調べることもできます(Winter, 1997)。もし、不具合があることが判明したら、レオロジー測定方法の改良も可能となります。IRIS の機能の大部分は、時間-温度換算則、ダイナミックデータの緩和時間スペクトルへの変換、および線形粘弾性モデルに関するものです。最近 IRIS に追加された機能は、よく知られた材料に関して実験的に得られた知見と理論予測結果とを比較するものです。

### 3. ユーザ・サポート

IRIS プログラムは、ユーザーがマニュアルをたくさん読まなくても実行できるように作られています。ツールバーにあるヘルプ・ボタンを

押せば、IRIS を中断することなく、十分な説明を得ることができます。ヘルプ・テキストは、パソコン画面の下端に配置されたステータス・バーに、いつも現れています(もしヘルプ・テキストが現れていなければ‘view’において‘status bar’をアクティブにしてください)。このヘルプ・テキストは直接的なガイダンスとなります。IRIS プログラムをただ単に開くだけで、詳細な情報をたくさん得ることができます。若干の基本的な指示事項は、マニュアルに数ページ記載されています。また、マニュアルには、必要の都度、詳細な説明を手助けするためのチュートリアルも準備されています。また、マニュアルの最後には、よくある質問に対する回答も記載されています。CD には、スライド形式のツアー‘picture tour’もあります。このスライドでは、IRIS を使う際に表示される典型的なグラフが多数示されています。

IRIS プログラムの主要部分は、「メカニカル・スペクトロスコピー」に関するものです。この「メカニカル・スペクトロスコピー」は、Mours と Winter が執筆した本の、*Mechanical Spectroscopy* (2000)の章で説明されています。以下に示す参考文献を参照ください。この文献のコピーは IRIS 配布 CD 内にあります。IRIS プログラムとこの文献を組み合わせて使うと、効果的な教育ツールになりますし、同時に、レオロジーの研究所でも有益なツールになります。本参考文献では、多くの詳細事項が系統立って説明されているので、ここでは繰り返しません。ただし、IRIS の一部には、メカニカル・スペクトロスコピーを逸脱している部分、すなわち「粘弾性全般にかかわる話題」や「材料の全粘弾性特性の検討」も含まれています。メカニカル・スペクトロスコピーで得られたデータは、このような対話のスタート点になります。

**参考文献:** Mours M, Winter HH (2000) *Mechanical Spectroscopy*. Tanaka T, Ed, *Experimental Methods in Polymer Science: Modern Methods in Polymer Research and Technology*, Academic Press, San Diego CA. p. 495-546.

### 4. IRIS の具体的な機能

- 実測データ( $\omega$ ,  $G'$ ,  $G''$ )のプロット。
- レポート作成やプレゼンテーションのための図の作成・修正、およびその保存。
- 以下のような多様なデータ・ソースからの  $\omega$ ,  $G'$ ,  $G''$  データのインポート。
  - \* IRIS データベース
  - \* 商用レオメータ(アスキー形式を採用)

- \* 文献データ
- \* スプレッド・シート
- \* e-mails 等
- $\omega$ ,  $G'$ ,  $G''$  データのシフトを以下の目的で行う。
  - \* 時間-温度の換算 (シフトファクターの算出)
  - \* パターンおよび材料時間スケールの比較
- スペクトル計算 (緩和と遅延)。
  - \* Rouse スペクトル
  - \* Doi-Edwards スペクトル
  - \* Maxwell (単一緩和モード)
  - \* Kohlrausch (伸長指数) (開発中)
  - \* BSW スペクトル
  - \* CW スペクトル
- 遷移データ ( $G(t)$ ,  $J(t)$ )のプロットおよびシフト。
- 粘土データのプロット、シフトおよびフィッティング。

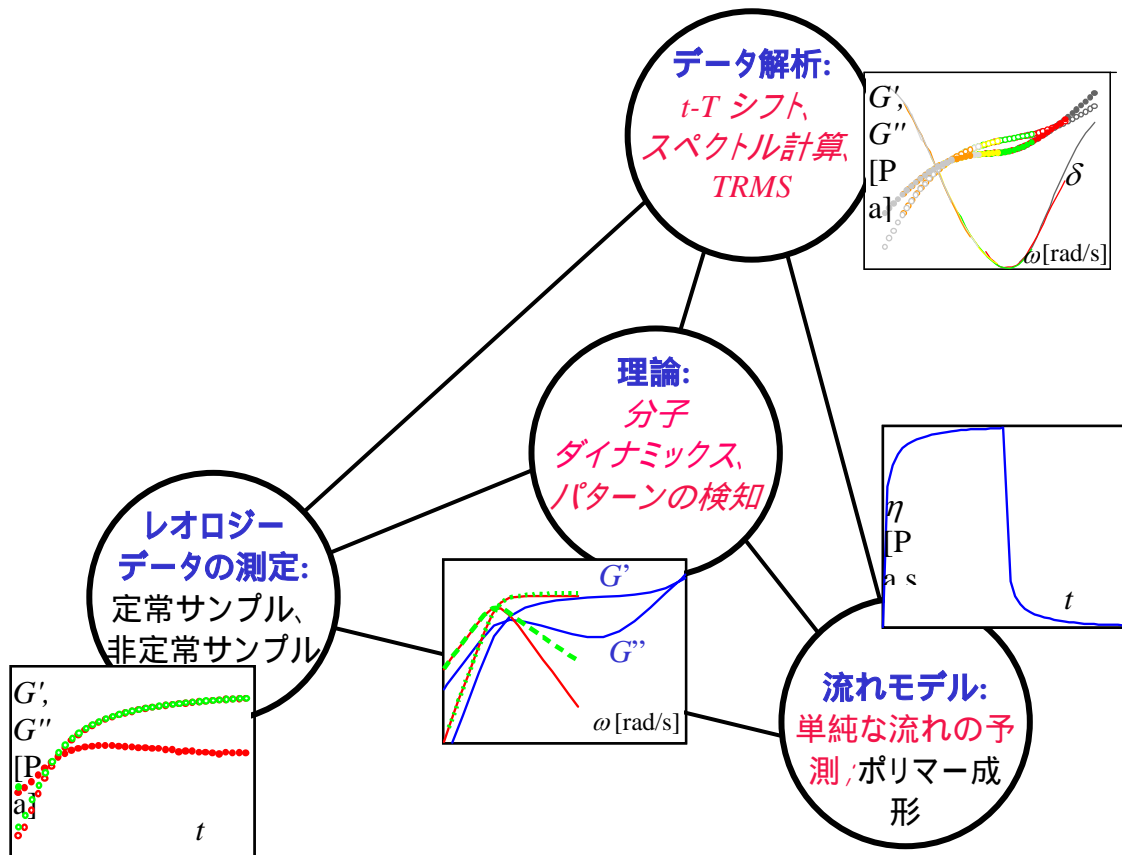


図1 粘弾性との対話は、実測データセット (左下)、あるいは、理論予測 (中央) からスタートします。対話の各ステップには、常にグラフが付随しています。もし必要なら、各グラフはスプレッド・シートに変換できます