

2023 年度年次報告書

複雑な流動・輸送現象の解明・予測・制御に向けた新しい流体科学

2022 年度採択研究代表者

佐藤 健

京都大学 化学研究所

助教

非ニュートン／非一様／非平衡系の新しい流体科学

## 研究成果の概要

本研究では、典型的な非ニュートン流体である界面活性剤溶液や高分子流体を対象とし、マイクロスケールとメソスケールを繋ぐレオロジー予測モデル「擬似実験系」を構築し、得られたデータから、データ駆動の手法を用いて流体の構成則を得る方法論を提案することを目指す。本年度は、マイクロレベルの計算手法である分子動力学 (MD) 法と、メソレベルのレオロジー予測モデルを接続する手法およびレオロジーデータから構成則を得る手法について、それぞれ基礎検討を行った。

レオロジー予測モデルの基礎検討として、線状鎖・星型鎖の応力緩和と末端間ベクトル緩和を実験データと比較し、星型鎖の末端間ベクトルの緩和に対して、モデルが実験データよりも遅い緩和を予測することを明らかにした。この結果を契機として、星型鎖における分岐点の運動を許すことでレオロジーを予測するモデルを発展させた<sup>1)</sup>。さらに、改良モデルと MD 法による動的な量の計算結果を比較し、マイクロおよびメソスケールのモデル間の予測精度の違いを明らかにした。

並行して、データ駆動で動的システムの支配方程式を発見する手法を用い、レオロジーデータから応力と歪み速度を関連付ける構成則を導く方法の検討を行った<sup>2)</sup>。応力の時間微分データが、応力と歪み速度から構成される関数を含む辞書行列と対応する係数行列によって表されると仮定し、スパース同定法によって応力の時間発展を表現する項を探索した。ここで、レオロジーの知識を用いて辞書行列を作成することで、物理的に妥当な構成則モデルを構築することを目指した。提案する手法の基礎検討として、粘弾性流体の数値計算によく用いられる構成則から訓練データを生成し、正しい構成則を発見することができるか調べた。その結果として、振動せん断レオロジー測定によって訓練データを生成し、最適化手法を適切に選ぶことで、提案手法が正しい構成則を発見することが分かった。

### 【代表的な原著論文情報】

- 1) T. Sato, Y. Gong, and R. G. Larson\*, “Testing the Ability of the Slip-Spring Model to Describe Constraint Release Effects Using Experimental Linear and Nonlinear Rheology”, *Macromolecules*, **56**, 8116-8132 (2023).
- 2) T. Sato\*, S. Miyamoto, and S. Kato, “Rheo-SINDy: Finding a constitutive model from rheological data for complex fluids using sparse identification for nonlinear dynamics”, under review (arXiv:2403.14980).