

2024 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

金沢大学 設計製造技術研究所

助教(テニュアトラック)

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

本研究は、高分子溶液や界面活性剤溶液などの非ニュートン流体において、メソスケール構造に着目した高度な数理モデルを構築し、データ駆動型手法によりマクロな構成則を導出する方法の確立を目指している。2024 年度は、(A)粗視化分子動力学(CGMD)計算によるマイクロ構造解析、(B)メソスケールのレオロジー予測モデルの高度化、ならびに(C)レオロジーデータから構成則を導く方法の妥当性検証に取り組んだ。

課題(A)および(B)に関して、CGMD モデルを用いて直鎖／分岐高分子系の動的特性を計算し、メソスケールモデルとのスケール間比較を行った。鎖全体のスケールで両モデルの数値計算結果は良く一致したものの、小スケールでは逸脱が確認された。この逸脱に関して、小スケールにおけるモデル間の構造差に原因があるという仮説のもと考察を進めている。また、課題(B)として、希薄または低粘度の高分子溶液の伸長レオロジー予測の高度化に取り組んだ。これらの溶液の伸長特性を計測する実験である Capillary Breakup Extensional Rheometry (CaBER) の流動を予測するメソスケールモデルを構築／実装し、鎖長に依存したフィラメントの減衰挙動の定性的再現に成功した。今後はこの成果を界面活性剤系などへ展開する。

課題(C)では、スパース同定法を用いて非線形のレオロジーデータから構成則を導出する手法を検討した。まず、せん断レオロジーデータに対し、既知の構成則を復元できるか、解析解の存在しないメソスケールモデルから近似構成則を導出できるか、物質客観性を満足する構成則を構築するためにはどのような方法があるか、の 3 点を検討した¹⁾。さらに、速度勾配がマクロに不均一な流動問題に対して、データ駆動構成則が予測に適用可能であることを示した²⁾。今後は、せん断および伸長変形が混在するマクロ流動への展開を目指す。

【代表的な原著論文情報】

- 1) 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,” *Journal of Rheology*, **69**, 15–34 (2025).
- 2) T. Sato* and S. Miyamoto, “Multiscale simulations for viscoelastic fluids with approximate constitutive models derived by a sparse identification method,” *Rheologica Acta*, accepted. DOI: 10.1007/s00397-025-01491-1.