

京都大学教育研究振興財団助成事業
成果報告書

2024年 9月 24日

公益財団法人京都大学教育研究振興財団

会長 藤 洋作 様

所属部局・研究科 工学研究科

職名・学年 博士3年

氏名 宮本 奏汰

助成の種類	令和6年度・在外研究助成			
研究課題名	高分子流体の流動予測のための機械学習による構成関係モデルの構築			
受入機関	アメリカ合衆国・マサチューセッツ州・ボストン市・ノースイースタン大学・ 准教授・Safa Jamali			
渡航期間	2024年 8月 25日 ~ 2024年 9月 20日			
成果の概要	タイトルは「成果の概要／報告者名」として、A4版2000字程度・和文で作成し、添付して下さい。「成果の概要」以外に添付する資料 <input checked="" type="checkbox"/> 無 <input type="checkbox"/> 有()			
会計報告	交付を受けた助成金額	435,000 円		
	使用した助成金額	435,000 円		
	返納すべき助成金額	0 円		
	助成金の使途内訳	費目	金額 (円)	
		宿泊費	435,000	
当財団の助成について	ご助成いただきありがとうございました。これ無くして今回の有意義な滞在は実現できませんでした。物価の高い地方都市内にある大学を希望する場合、特に最近では、大学近くに滞在先を探すのがとても難しい状況になっていると感じています。大学近隣(ボストン市内)で経済的に手の届く範囲の場所は治安の面で厳しかったものの、今回の助成金を基に、隣のニュートン市に在る片道1時間弱で安全な地域の滞在先を見つけることができました。			

背景と目的

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絡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、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阻害される。このとき、その流動挙動は複雑な様相を呈す。応用上、所望の製品形状を得るあたり、その複雑な流動を制御する技術が必要となる。従来では、流動予測の際に必要な流体の構成関係(応力-ひずみ関係)に、経験的な方程式モデルを主に用いているが、これらのモデルは流体内部の高分子の特徴をそのまま全て反映するものではないため、流動解析に際しては、各事例で重要となる特徴を見通したモデルの選択が必要とされる。そこで現在、ミクロな分子シミュレーションを用いて流動予測を行うマルチスケールシミュレーションを用いた流動予測手法が注目されている。これまでに溶融紡糸や押出成形の解析に適用されたが、ミクロスケールの膨大な自由度を扱うことに因る計算資源の制約から、対象流路の著しい単純化が避けられない。

この問題に対し申請者は、機械学習によって構築した構成関係モデルをミクロな分子シミュレータに代用する効率的な計算方法を提案し、その産業的な実用化を図ってきた。その取り組みでは、材料の力学的な動特性を効率的に回帰モデルに還元することが必要になる。そこで本研究では、レオロジー的構成関係の同定にかかる回帰手法を幅広く研究している Northeastern University の Safa Jamali 教授らのグループに滞在し、学習の効率化および予測精度の向上のため、機械学習回帰モデルに直接、理論的な物理的制約を実装することを目的とした。

在外研究の成果

滞在期間では、Safa Jamali 教授に加え、同研究室の Deepak mangal 博士と Donya Dabiri 氏と共に議論を行いながら研究を進めた。計画では、レオロジー的な構成方程式の回帰手法による記述に物理的に自然な制約を付すことを目的としたが、まず回帰手法自体に十分な表現力が備わることが重要であるとの指摘を受け、こちらを先に行うことにした。最初に、議論を通じて、シンボリック回帰手法の実践にかかる候補項ライブラリの自動構築手法を実装した。手法として、Deepak 博士に紹介いただいた遺伝アルゴリズムを用いた先行研究に基づき、これを拡張して構成関係モデルの同定に応用した。

既知の構成方程式から人工的に生成したデータに基づいて、ライブラリの選択に対する事前の仮定なくモデルを再現することに成功した。まず、一次元的な線形モデルの構成方程式から、人工的に生成したひずみ-応力のデータに提案手法を適用した。単純せん断下の変形から生成されたデータセットを用いて、方程式モデルの際同定に成功した。続いて、より実践的な例として、材料のチキソトロピー・粘性・弾性・塑性を考慮した構成関係モデルの半線形な方程式に対してこれを適用し、同様に、元の方程式を復元できることを確認した。

滞在後半では、テンソルで表された方程式に対して手法を拡張し、その応用を進めた。ただし、簡単のため、テンソルの各成分の時間発展は独立に取り扱った。結果として、3次元構成関係を表す線形モデルである（上対流）Maxwell モデルが示す、せん断流動化での方程式を正確に同定した。また、非線形構成関係をよく表す Giesekus モデルの構成関係に対しても同様の結果を確認した。ここではひずみ速度を一定値とする単純せん断のデータに加え、振動せん断のデータを用いることが重要であることを帰納的に確認して用いた。

本成果の特筆すべき点として、事前に方程式を記述する項の候補を具体的に列挙することなく自動的に生成される候補項によってモデルを復元したことが挙げられる。既往の研究において実践された例に対して、人為的な仮定を排し、より洗練された数理的手法を提案できた。

今後の議論を通じて、右辺の回帰式の表現に対して、「物質客観性の原理による応力率の回転対称性」や「平衡点周りの安定性」などを実装することで、物理的な性質の担保と学習効率の向上を図る。また、物質内部の構造を表す統計的な構造パラメータを隠れた時間発展の変数として導入し、コロイド系や高分子系のレオロジー実験データに応用することを計画している。

展望

今回の滞在を経て、上記の成果を挙げ、新たな研究プロジェクトを立ち上げることができた。未完の議論については、滞在終了後もオンラインで継続して協力をいただけることとなった。また、再度の訪問を歓迎していただけることを約束いただけた。今回の訪問を基にして、以降も積極的に同研究室と、その周囲の研究コミュニティと連携していく。

滞在期間中、Safa Jamali 教授はもちろん、同研の Deepak Mangal 博士と Donya Dabiri 氏には、最新の機械学習アプローチに基づく方法や、レオロジーのデータセットに適用する場合の注意点をご指導いただいた。ここに御礼申し上げます。