

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

2022 年度  
年次報告書

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

マイクロ・メソ・マクロの時空間的な階層構造を持つ複雑流体(非ニュートン流体)では、大きな内部構造に由来する遅いダイナミクスの存在によって、非平衡／非一様流動が顕在化する。非ニュートン流体の高度な流動予測を最終目標として、本年度は、典型的な非ニュートン流体系である界面活性剤系を対象とし、ミクロスケールとメソスケールモデルを繋ぐ高度な数理モデルである「擬似実験系」を構築することを目指した研究を進めた。

界面活性剤分子が形成する自己組織化構造のマイクロな描像を得るために、散逸粒子動力学法を用いた計算を行った。界面活性剤が形成する紐状の自己組織化構造は、動的に分裂と結合を繰り返す。平衡時およびせん断流動下における計算を行い、せん断流下においてミセルの分裂が加速する(すなわち時定数が小さくなる)ことを確認できた。

界面活性剤系が形成する典型的な自己組織化構造である紐状ミセルのメソスケールモデルは、類似のメソ構造である高分子系に対するメソスケールモデルを発展させることを想定する。本年度はまず、基礎となる高分子系のメソスケールモデルの予測能力を系統的に調べた。そのために、線状高分子と星型高分子に対する応力緩和と末端間ベクトルの緩和の数値予測を、実験結果と比較することによって検証した。結果から、用いたメソスケールモデルは、線状高分子の応力緩和と末端間ベクトルの緩和を精度良く予測する一方で、星型高分子の予測に関しては、特に末端間ベクトルの緩和について実験結果と逸脱することが分かった。これらの結果は、紐状ミセル系の「擬似実験系」の構築のためにも重要な結果であり、現在論文投稿中である。

さらに、実験データから構成則を導く準備として、データ科学的なモデル選択の方法の検討を行った。ベイズの定理を用いた手法により、レオロジーデータが与えられたとき、最もデータを表現するモデルを選択することができると確認した。