

ソフトマターのマルチスケールシミュレーション：現状と展望

(京大院・工、CREST-JST) 安田修悟、山本量一

【はじめに】

ソフトマターでは微視的構造と巨視的運動との間に強い相関があるため、流動や変形を伴う物理現象に対して有意義なシミュレーションを行うことは特に難しい。原理的には全てを微視的レベルでモデル化すればよいが、それを実行するためには途方もない計算時間が必要である。ソフトマターのように全くスケールの異なる自由度が混在し、かつ両者に強い相関がある場合には、何らかの工夫をしないことにはこの問題を克服出来ないのである。これを、マルチスケールモデリングによって解決することが我々の目的である。本研究では、分子動力学法 (Molecular Dynamics, MD) と計算流体力学法 (Computational Fluid Dynamics, CFD) の連結によって、高速で振動する平板間における高分子溶液の運動を解析した。

【シミュレーション方法】

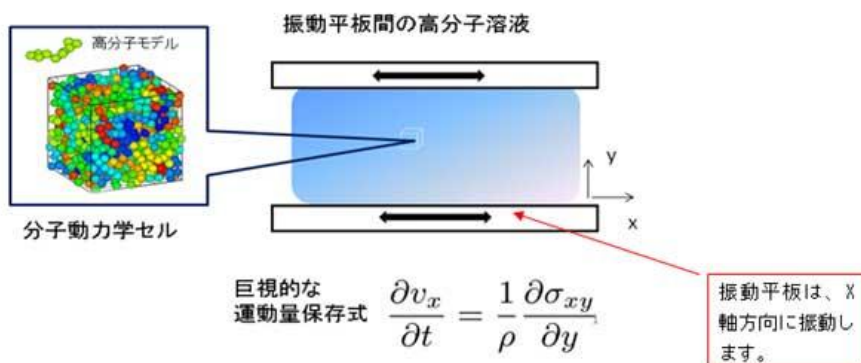


図 1: シミュレーションした系の概略図。上下平板はそれぞれ平行に位相が π だけずれて振動する。

図 1 に本研究でシミュレーションを行った系の略図を示す。平板間の距離 $2H$ は高分子を構成する一つの粒子の直径 σ の数千倍程度である。振動板は非常に高速に振動しており、粒子のサイズ σ をナノメートル程度と考えた場合、振動板の一周期はおおよそナノ秒程度に相当する。高分子溶液の巨視的な流れは 1 次元のナビエ-ストークス方程式で計算される。ここで、各計算点での x 方向の流速 v_x はその点での局所的なせん断応力 σ_{xy} の y 軸方向の勾配によって変化する。通常のニュートン流体では、応力と流速の空間勾配の間に比例関係、 $\sigma_{xy} = \mu \partial v_x / \partial y$ 、があることが知られているので、粘性係数 μ さえあらかじめ決めておけば、各点で求めた流速から各点での応力を求め、その瞬間の流速変化を計算することができる。しかし、高分子溶液にはそのような単純な構成関係を仮定できない。ある時刻での各計算点の応力は同じ時刻におけるその点での巨視的な流速や変位だけでは表せず、その流体要素が経験した過去の変形速度の履歴 (原子・分子レベルでの高分子の配置、形状) に依存する。

我々のマルチスケールモデリングでは、巨視的な流れを計算する各計算点に分子レベルでの高分子の運動を計算するための小さな MD セルを貼り付けておき、そこで局所的な流速場と過去の履歴に基づく局所的な応力を、直接分子動力学を用いて計算する。MD セルには流体計算で得られた局所的なひずみ速度の情報を与え、Leeds-Edwards の周期境界条件を用い

て MD セルにせん断流れを作り、その応力をサンプリングする。その際、MD 計算は流体計算で用いられる時間ステップに対応する時間だけ行われ、各 MD セルで得られる高分子の配置・構造は、そのまま次の流体計算の時間ステップにおける MD 計算の初期配置としてメモリーされる。この方法を用いることで、高分子溶液に特徴的な粘弾性や履歴効果を正確にシミュレーションすることができるようになる。また流体の計算に用いるメッシュ間隔に比べて小さな MD セルを用いることで、系の全領域を全て MD で計算した場合に比べて圧倒的に少ない計算量で巨視的な流れを計算することができる。以下で紹介する計算結果では、下の振動板から 2 平板の間 ($y = H$) を 32 分割し、その各分割区間の中間に一つの MD セルが貼り付けられている。各 MD セルにはビーズ 10 個からなる鎖状分子が 100 本入っており、MD セルの大きさは一辺の長さはビーズ粒子の直径の 10 倍である。計算方法の詳細については文献[1-3] を参照されたい。

【シミュレーション結果】

図 2 に振動平板上での高分子溶液の速度分布とナビエーストックス方程式によって計算されたニュートン流体との比較を示す。両者を比較すると、振動板からの位置 (y -軸方向の距離) による流速 v_x の挙動に明らかな違いがあることがわかる。すなわち、ニュートン流体とは異なり、高分子溶液では振動板から遠ざかると急激に流速が現象している。これは、振動板近傍の速度勾配の大きな領域でシアシンングが起り、振動板の運動が流体内部へ浸透せずに板近傍でスリップしているような状況を反映している。高分子溶液の局所的な力学特性の空間変化についても興味深い結果が得られているので、講演時に紹介したい。

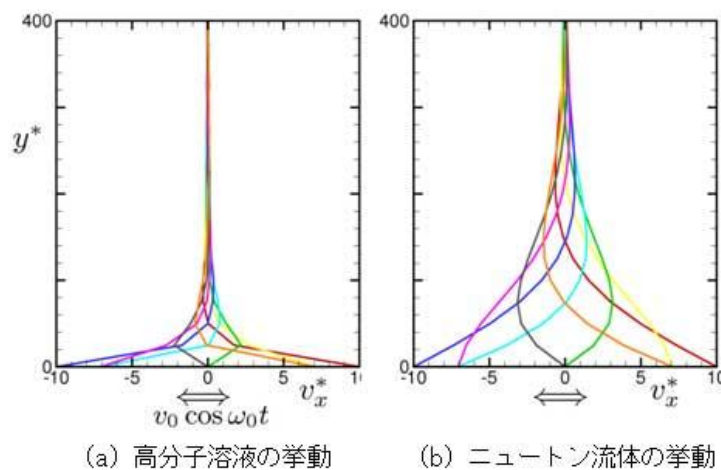


図 2: 高分子溶液(a) とニュートン流体(b) の流速分布の比較。

【参考文献】

- (1) S. Yasuda and R. Yamamoto, A Model for Hybrid Simulations of Molecular Dynamics and Computational Fluid Dynamics, *Phys. Fluids* 20, 113101 (2008).
- (2) S. Yasuda and R. Yamamoto, Rheological properties of polymer melt between rapidly oscillating plates: an application of multiscale modeling, *EPL* 86, 18002 (2009).
- (3) S. Yasuda and R. Yamamoto, Multiscale modeling and simulation for polymer melt flows between parallel plates, arxiv:0909.2466 (preprint).