

G107

高分子液体の流動解析：マルチスケールシミュレーションの応用

(京大工・化工, JST/CREST) ○ (正) 安田修悟*, (京大工・化工, JST/CREST) (正) 山本量一

本研究では、二平板間にある高分子液体の流動挙動を、近年我々のグループで開発された分子動力学(MD)と計算流体力学(CFD)のハイブリット計算法を用いて解析した。解析を行った系の概略を図1に示す。平板間の距離は高分子を構成する1つの原子のサイズの数千倍程度もある。高分子液体の巨視的な流れは、連続体モデルの運動量保存式によって計算される。ここで、各計算点での流速はその点での局所的な応力によって変化する。通常の粘性流体(ニュートン流体)の場合、応力と流速の空間勾配の間に比例関係があるので、その比例定数、すなわち粘性係数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。ところが、本研究で扱う高分子液体にはそのような単純な比例関係は存在しない。各計算点での応力はその点での巨視的な流速や変位だけでは表すことができず、原子・分子レベルでの高分子の配置、形状に依存する。そこで我々のマルチスケールモデリングでは、各計算点での分子レベルでの高分子の運動を計算するための小さなセルを各計算点に貼り付けておき、そこで局所的な流速と分子レベルでの情報に基づく応力を求める。この方法を用いることで、高分子液体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。

本稿では、2平板が互いに逆位相で振動する振動平板間的高分子液体の解析によって明らかになった特に重要な2つの結果を紹介する。図2は、振動平板上での高分子液体の速度分布とナビエ・ストークス方程式によって計算されたニュートン流体の比較である。振動板からの位置(Y軸方向の距離)による流速(X軸方向の流速)に明らかな違いがあるの分かる。すなわち、通常の粘性流体溶液と異なり高分子液体では振動板から遠ざかるに従い、流速が急激に減少することが判明した。これは高分子液体では局所的な力学特性が局所的な流速場によって大きく変わるためである。高分子液体の粘性は、速度勾配が大きくなると小さくなる(シアシンング)。このため、平板近傍の激しく動いている速度勾配の大きな領域では粘性が小さくなり、平板の運動は流体内部へ浸透しにくくスリップしているような状況になっている。図3は、高分子液体の局所的な力学特性の空間変化を示している。高分子液体には固体的な応力応答を表す弾性力と、流体的な応力応答を表す粘性力が共存する。「弾性力」の強さは応力応答のうち「変形の大きさ」、「粘性力」の強さはその「変形の早さ」に寄与する部分をそれぞれ測ることにより求められる。図3では弾性を G_1 、粘性を G_2 と表わされている。また γ_0 は局所的な変形の大きさ(ひずみ)を表す。平板近傍($y=0$ 付近)で粘性 G_2 が小さくなっているの分かる(シアシンング)。平板から離れるとひずみ γ_0 は小さくなり、だいたい2%以下の値になると、対応する G_1 、 G_2 ともに一定の値になる。図3の右端にある矢印は2種類のデボラ数とよばれる無次元数の値が1になる場所を示している。1つは、高分子の鎖の形状の緩和時間(ラウス時間と呼ばれる)と振動平板の角振動数

の積で定義されるデボラ数 De^R 。もう1つは、高分子を構成する原子が構造を緩和する時間(α 緩和時間と呼ばれる)と角振動数の積で定義されるデボラ数 De^α 。 De^R が1より小さい領域では粘性 G_2 は弾性 G_1 に比べてずっと大きく、このためこの領域では高分子液体は粘性流体の挙動を示すことが分かる。 De^α が1より大きくなると弾性 G_1 も顕著になる。また De^α が1の場所では粘性 G_2 と弾性 G_1 の値がクロスオーバーしているの分かる。すなわち、高分子溶液は De^α が1より小さいところでは粘弾性流体、 De^α が1より大きいところでは粘弾性固体と、その力学特性を変えていることが分かる。つまり、高速振動する平板上での高分子溶液の流れにおいては、粘性流体、粘弾性液体、粘弾性固体の3つの異なる力学特性を持つ領域が現れることが、マルチスケールシミュレーションによって初めて明らかにされた

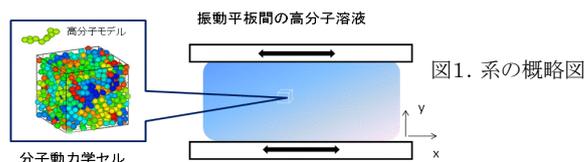


図1. 系の概略図

$$\text{巨視的な運動量保存式} \quad \frac{\partial v_x}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{xy}}{\partial y}$$

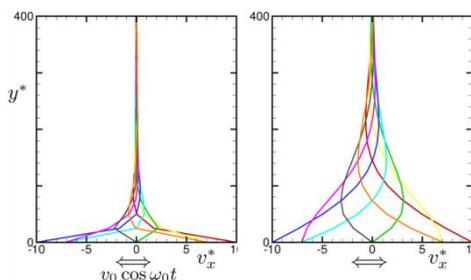


図2. 速度分布の比較。(左)高分子液体。(右)ニュートン流体。図の各線は異なる時間での流速分布を表す。

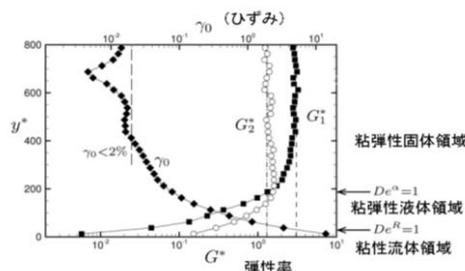


図3. 高分子溶液の局所力学特性の変化。 G_1 は弾性(貯蔵弾性率)、 G_2 は粘性(損失弾性率)を表します。 De はデボラ数を表す。

* Email: yasuda@cheme.kyoto-u.ac.jp

参考文献: S. Yasuda and R. Yamamoto, Phys. Fluids **20**, 113101 (2008); EPL **86**, 18002 (2009).