

高分子潤滑のマルチスケールシミュレーション

(兵庫県大・シミュレーション) 安田 修悟
(京大・工) 山本 量一

【はじめに】

複雑液体の非線形レオロジー特性を計算機シミュレーションによって調べる場合には、通常、非平衡分子動力学法 (Non-Equilibrium Molecular Dynamics, NEMD) が用いられる。この方法では、流体のバルクの状態を模擬した微小な MD セル (境界壁は周期境界条件が用いられる) において一様一定な速度勾配 $\dot{\gamma}$ と温度分布 T をもった理想的な環境における分子集団の運動状態を再現し、そこでの応力 σ_{xy} を計算することで応力と流動・温度の関係 $\sigma_{xy} = \sigma_{xy}(\dot{\gamma}, T)$ を明らかにする。物質の本質的な物性を明らかにする上では有効な手法であり、様々な速度勾配、温度、密度などを用いた多数のパラメータに対して NEMD を実行することで対象とする物質の構成方程式の基礎となるデータベースを作成することも可能である。しかし、複雑液体を材料流体とする多くのシステムでは、その流動状態や温度分布は境界条件とも結合し局所的に大きく変化するため、単純なシステムにおいてもシステム全体の挙動が材料固有の物性によって予測されるそれとは大きくかけ離れることがしばしば起こる。このような問題を解決するためには、境界条件も含めたシステム全体での熱流動を適切な分子モデルを基に解析することができるシミュレーション手法の開発が必要とされている。

一つの解決策としては、システム全体を分子レベルで構成してその振舞いをフル MD シミュレーションによって解析する方法が考えられる。この方法は原理的には可能であるが、MD シミュレーションは一般に計算量が膨大であるため、実際の製品・機器の時空間スケールでのフル MD シミュレーションは現実的には不可能である。そこで期待されるのが、マクロな挙動を計算する計算流体力学法 (Computational Fluid Dynamics, CFD) と物質固有の物性を求めることができるミクロな MD シミュレーションをうまく相補的に接続することで適切な分子モデルを基にマクロな熱流動までを計算することができるマルチスケールシミュレーション法の開発である。

本研究では、著者らがこれまでに開発した運動量輸送に対するマルチスケール法を拡張し、巨視的なエネルギー輸送をカップリングした高分子液体の熱流動を計算することができるマルチスケール法を開発する。そして、その手法を用いて、高分子液体の熱流体潤滑問題を解析し、レオロジー特性と内部構造と粘性発熱による温度上昇の関係を詳細に調べる。

【結果】

これまでのところ以下の3点が主な結果として明らかになった。

- (1) 高分子液体の発熱は、平板の速度が小さい場合にはあまり平板の速度には影響を受けないが、平板の速度がある閾値をこえると急激に温度上昇が起こる。
- (2) また、温度上昇と同時に粘性の低下 (シア・シニング) や高分子鎖の形態変化や運動状態の変化も起こる。
- (3) 平板速度が大きい場合、高分子液体の温度、応力、高分子鎖の形態変化は複雑な挙動を示すにもかかわらず、そのような非線形領域においても線形の応力光学則が良く満たされる。

【参考文献】

- (1) S. Yasuda and R. Yamamoto, Phys. Fluids 20, 113101 (2008).
- (2) S. Yasuda and R. Yamamoto, PRE 81, 036308 (2010).
- (3) T. Murashima, S. Yasuda, T. Taniguchi, and R. Yamamoto, JPSJ 82, 012001 (2013).