

乱流と鎖状高分子集団の相互作用のハイブリッドシミュレーション

学籍番号 23413547 氏名 土屋 勝洋

指導教員名 渡邊 威 准教授

1 はじめに

高分子の最も簡単な粒子描像モデルとして、2個の小球がバネで繋がれたダンベルモデルがよく知られている。しかし、このモデルは高分子の緩和過程が単一の時間スケールのみで決まり、高分子が複雑に折れ曲がる様な力学過程を想定することが出来ない。そこで、本研究では、既存のFENE(Finitely Extensible Nonlinear Elastic)ダンベルモデルと呼ばれる、有限伸張性の非線形バネにより2個のブラウン粒子が連結したモデルを拡張し、鎖状構造を持つ高分子モデルを導入することで、高分子構造の変化が乱流に及ぼす影響について解析することを目的とする。また、現実の高分子溶液乱流では、乱流による引き伸ばしで高分子が劣化してしまう。この劣化過程の数値計算をする準備として、乱流場中に異なる鎖長の高分子モデルが分散している、混合状態の数値計算を行う。このとき、2種類の混合された高分子モデルが流体場にどの様な影響を及ぼすのか、これを2つ目の研究目的とする。そして、複数個の小球が繋がれた鎖状高分子モデルとダンベルモデルではそれぞれが想定する高分子の性質が大きく変化してしまうことが予想される。より現実に即した数値計算を行うという観点から見れば、小球が多い程良い結果が得られるはずだが、計算機の制限によりその数を増やすことには限界がある。そこで、モデルのパラメータを小球の数に依存させ、ダンベルモデルで鎖状高分子モデルを再現するパラメータマッピングを考える[1]。これを3つ目の研究目的とする。本研究では、3つの研究目的について解析したが、本稿では1つ目の研究目的の結果についてのみ述べる。

2 数値解析手法

2.1 一様定常乱流の数値計算

扱う乱流場は、一様等方性を持つ定常な乱流である。一辺が 2π の立方体中で周期的に広がる空間において、一様等方性を持つ初期速度場を作り、ポリマーストレステンソルによる項を加えた Navier-stokes 方程式を、非圧縮条件と共に解いて

いく。空間微分はスペクトル法で計算し、時間微分に関しては2次のRunge-Kutta法を用いる。外力は統計的に定常な流れを作るため、エネルギー注入率 ε_{in} が一定となる様に $\mathbf{a}(t)$ を設定し求める。

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0,$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho_f} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{\rho_f} \mathbf{f} + \nabla \cdot \mathbf{T}^P.$$

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = \begin{cases} \mathbf{a}(t) \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) & \text{for } k_l \leq |\mathbf{k}| \leq k_h, \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

$$\mathbf{T}_{ij}^P(\mathbf{x}, t)$$

$$= \frac{2(N_b - 1) \nu_f \eta}{N_b \tau_s} \sum_{l=1}^{N_t} \sum_{n=1}^{N_b} \left[f_s \left(\frac{R_n^{(l)}}{L_{max}} \right) \frac{R_{n,i}^{(l)} R_{n,j}^{(l)}}{r_{eq}} \right.$$

$$\left. - \delta_{ij} \right] \delta(\mathbf{x} - \mathbf{r}_g),$$

$$f_s(z) = (1 - z^2)^{-1}$$

ここで、 $\eta = 2(N_b - 1/N_b)(3r_{eq}/4a)^2 \Phi_V$,

$\Phi_V = N_b N_t (4\pi/3)(a/L_{box})^3$ である。また、 $\mathbf{r}_g^{(l)}$ は高分子モデルの重心ベクトル、 $\mathbf{R}_n^{(l)}$ はボンドベクトルである。

2.2 FENE 鎖モデル

高分子モデルの N_b 個の小球の運動はランジュバン方程式で表され、以下の運動方程式に従う。

$$\frac{d\mathbf{x}_n^{(l)}}{dt} = \mathbf{u}(\mathbf{x}_n^{(l)}(t), t) + \frac{1}{\zeta} \mathbf{F}_n^{(l)} + \frac{D}{\zeta} \mathbf{W}_n^{(l)}$$

ただし、 $\mathbf{F}_n^{(l)}$ はバネ弾性力を表す。この運動方程式を、

$$\mathbf{r}_g^{(l)} \equiv \frac{1}{N_b} \sum_{n=1}^{N_b} \mathbf{x}_n^{(l)},$$

$$\mathbf{R}_n^{(l)} \equiv \mathbf{x}_{n+1}^{(l)} - \mathbf{x}_n^{(l)}, (n = 1, \dots, N_b)$$

で定義される重心ベクトルとボンドベクトルに置き換えて解いていく。ここで、小球の質量が十分に小

さいとして慣性項を0と近似している. また, 希薄高分子溶液を想定しているため, 高分子間の相互作用を無視し, 高分子間の衝突は無いものとする. 時間発展は上記の運動方程式を2次のRunge-Kutta法を用いて解く.

3 計算条件

高分子モデルの各パラメータは過去の杉本による研究[5]を参考にして求めた. 流体場の計算条件を表1に, 高分子モデルのパラメータを表2に示す.

格子点数: N^3	128^3
時間刻み幅: Δt	4.0×10^{-3}
動粘性: ν_f	1.0×10^{-2}
エネルギー散逸率: ε_{in}	0.5
エネルギー注入範囲	$1 \leq \mathbf{k} \leq 2$

表1 流体場の計算条件

緩和時間: τ_s	0.217
最大伸び切り長: L_{max}	0.651×10^{-2}
平衡長: r_{eq}	0.694×10^{-4}
小球半径: a	2.089×10^{-6}
高分子モデルの数: \tilde{N}_t	10^8
体積分率: Φ_V	5.0×10^{-6}

表2 高分子モデルのパラメータ

4 計算結果

表1, 2の計算条件において, 乱流場の運動エネルギー散逸率 $\varepsilon(t) = 2\nu\langle(\nabla\mathbf{u})^2\rangle$ 及び運動エネルギースペクトル $E(k)$ を, 高分子モデルの小球の数を $N_b = 2, 3, 4$ で比較した結果を図1, 2に示す. 図1より小球の数を多くするにつれエネルギー散逸率が減少する. これは, 流体場の粘性により散逸するエネルギーの一部が, 流れにより伸張した高分子モデルの弾性エネルギーとなるためである. また, 図2より, 低波数側において, N_b の増加に伴いエネルギースペクトルの値が減少している. よって, N_b が多い程, 大スケールの渦の抑制作用が大きくなることが分かる.

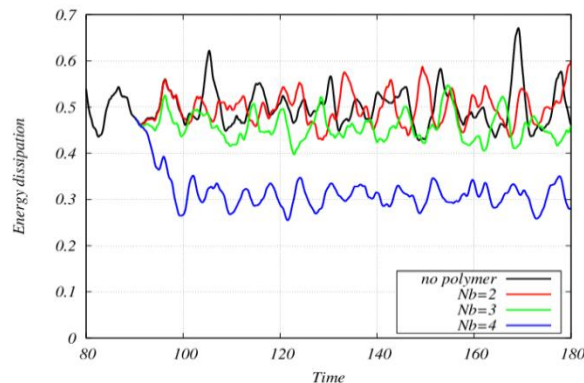


図1 乱流中に高分子を添加しない場合と, 小球の数を2, 3, 4としたときのエネルギー散逸率 $\varepsilon(t) = 2\nu\langle(\nabla\mathbf{u})^2\rangle$ の時間推移. $t = 90$ で計算領域に高分子モデルを分散する.

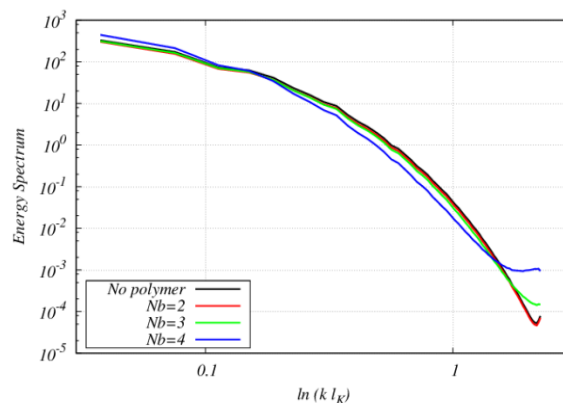


図2 エネルギースペクトル $E(k, t)$ の時間平均値(縦軸: $\langle\varepsilon(t)\rangle_t^{-2/3}\langle l_K(t)\rangle_t^{-5/3}$ 横軸: $\langle l_K(t)\rangle_t$ で無次元化). 高波数側はエイリアシング誤差除去のため, $2\sqrt{2}N/3k_{max} \leq k$ で $E(k, t) = 0$ である.

5 まとめ

本計算により, N_b が多い程乱流場のエネルギー散逸が促進され, またその減少量と N_b の関係は単純な正比例にはなく, N_b が多い程より大きくなることが分かった. 今後は, 鎖状構造の切断過程を導入し, 乱流場にどのような影響を及ぼすのか検討していく.

6 参考文献

- [1] T. Watanabe and T. Gotoh, Phys. Rev. E **81**, 066301 (2010)
- [2] T. Watanabe and T. Gotoh, J. Fluid Mech. Vol. 717. PP 535-575 (2013)
- [3] 杉本 大輝 “一様定常乱流の統計性における高分子の影響” 平成 23 年 名工大院 修士論文