

研究成果報告書

(国立情報学研究所の民間助成研究成果概要データベース・登録原稿)

研究テーマ (和文) AB		複雑液体の潤滑挙動に対するマルチスケールシミュレーション			
研究テーマ (欧文) AZ		Multiscale simulation for complex liquids			
研究氏 代表名 者	カタカナ CC	姓)ヤスダ	名)シュウゴ	研究期間 B	2013 ~ 2015 年
	漢字 CB	安田	修悟	報告年度 YR	2015 年
	ローマ字 CZ	Yasuda	Shugo	研究機関名	兵庫県立大学
研究代表者 CD 所属機関・職名		兵庫県立大学大学院シミュレーション学研究科・准教授			
概要 EA (600 字~800 字程度にまとめてください。)					
<p>複雑液体（高分子、コロイド、液晶など）は液体を構成する分子の内部自由度の運動と液体の巨視的な流動や温度分布が互いに強く影響しあうことで複雑な移動現象を示す。このため連続体近似に基づく計算流体力学（CFD）ではその流動を精確に予測することはできない。特に、液体潤滑で問題となるナノ~マイクロスケールでは分子スケールでの運動が巨視的な流動に及ぼす影響が大きくなるため CFD の適用はより困難となる。一方、物質を構成する分子をモデル化し、すべての分子の運動を追跡する分子動力学法（MD）では原理的には複雑な物質に対しても適応可能である。しかし、流体潤滑で問題となるマイクロスケール程度のシステムをまるごと MD 法によってシミュレーションするには数兆個以上の粒子を相互作用させながら各粒子の運動を追跡する必要があり、現在の世界最速の計算機を活用したとしても現実的には困難である。</p> <p>この問題を解決する一つの方法として、本研究では、Synchronized Molecular-Dynamics 法を開発した。SMD 法では、多数の分子動力学（MD）セルを流体の要素に割り当て、各流体要素おける局所的な物理量を MD 法によって計算する。しかし、ある一定の時間間隔で、システム全体のマクロ物理量（エネルギーや運動量）の輸送方程式が満たされるように、隣接する MD セル間において運動量とエネルギーの交換を行う。これによって、任意の分子モデルを基に、巨視的な移動現象を解析することができるようになる。SMD 法による高分子潤滑の解析では、潤滑中に生じる粘性発熱が高分子液体のレオロジー特性と内部構造にどのように影響するのかを詳細に調べている。せん断流・発熱・内部構造が互いに複雑に関係し合った結果として、せん断流による変形が支配的となる領域と温度上昇による影響が支配的となる領域との間に、興味深い転移挙動があることなどを明らかにした。</p>					
キーワード FA	マルチスケールモデリング	複雑流体	潤滑	粘性発熱	

(以下は記入しないでください。)

助成財団コード TA					研究課題番号 AA								
研究機関番号 AC					シート番号								

発表文献（この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。）									
雑誌	論文標題 ^{GB}	Synchronized Molecular-Dynamics Simulation via Macroscopic Heat and Momentum Transfer: An Application to Polymer Lubrication							
	著者名 ^{GA}	Shugo Yasuda and Ryoichi Yamamoto	雑誌名 ^{GC}	Physical Review X					
	ページ ^{GF}	041011-1~10	発行年 ^{GE}	2	0	1	4	巻号 ^{GD}	4
雑誌	論文標題 ^{GB}	Synchronized Molecular Dynamics 法による高分子潤滑の解析							
	著者名 ^{GA}	安田修悟、山本量一	雑誌名 ^{GC}	分子シミュレーション研究会会誌アンサンブル					
	ページ ^{GF}	30~34	発行年 ^{GE}	2	0	1	5	巻号 ^{GD}	17
雑誌	論文標題 ^{GB}								
	著者名 ^{GA}		雑誌名 ^{GC}						
	ページ ^{GF}	~	発行年 ^{GE}					巻号 ^{GD}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	
図書	著者名 ^{HA}								
	書名 ^{HC}								
	出版者 ^{HB}		発行年 ^{HD}					総ページ ^{HE}	

欧文概要^{EZ}

To predict the transport phenomena of complex fluids (e.g. colloids, polymers, and liquid crystals) in the actual engineering and biological systems by computer simulation is challenging from both a scientific and an engineering point of view. The molecular dynamics (MD) simulation is often used to investigate the intrinsic materials properties for a tiny piece of the material. However, the application of the full MD simulation to the macroscopic behaviors in actual systems is not relevant since the enormous computational effort is required to solve the dynamics of all of the molecules. In this paper, we propose a new multiscale simulation scheme, termed the synchronized molecular dynamics (SMD) simulation, which enables us to treat the overall problem.

In this method, the MD simulations are assigned to small fluid elements to calculate the local stresses and temperatures and are synchronized at a certain time interval to satisfy the macroscopic heat and momentum transfer. The SMD simulation can drastically reduce the computational effort compared to the full MD simulation. The method is applied to the polymer lubrication with viscous heating. The simulation results also reveal an interesting behavior of conformation of polymer chains; i.e., the reentrant transition occurs in the linear stress-optical relation for large shear stresses due to the coupling of the heat and momentum transfer.

The SMD scheme can be expected to be useful in the various fields of scientific researches and the engineering developments of new functional materials.